

シミュレーション工学

分子動力学法(1)理論的背景と数値積分

慶應義塾大学大学院理工学研究科基礎理工学専攻物理情報専修

渡辺宙志

はじめに

分子動力学法とは

- 原子や分子にかかる「力」を計算し、位置を更新していく数値計算手法
- 背景にある理論は解析力学

本講義の目的

- 解析力学の復習
- 分子動力学法の時間発展アルゴリズム

ニュートンの運動方程式

$$ma = F$$

物体の加速度は力に比例する
物体の動きにくさは質量に比例する

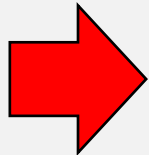
ニュートンの運動方程式

$$a = \frac{dv}{dt}$$

加速度とは速度の時間変化率

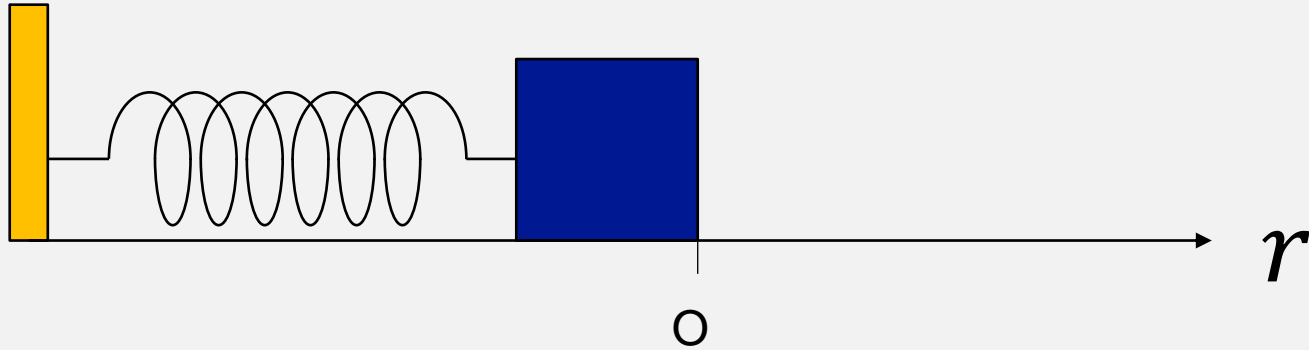
$$v = \frac{dr}{dt}$$

速度とは位置の時間変化率


$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{F}{m}$$

運動方程式は
位置の二階微分方程式

調和振動子



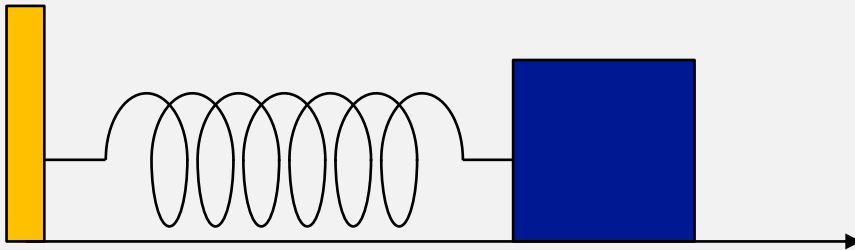
自然長の位置を原点にとる
質量とバネ定数は1とする

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -r$$

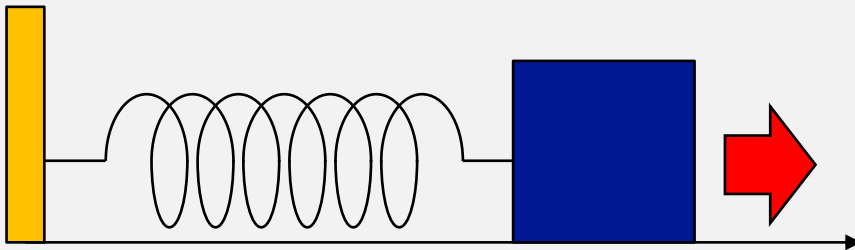
調和振動子

$r = 0$ 物体が原点にいる

これだけでは系の状態が定まらない



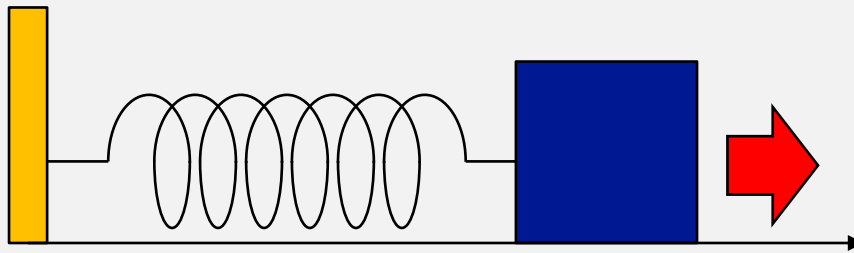
止まった状態かもしれない



運動中にちょうど原点を
通過したところかもしれない

調和振動子

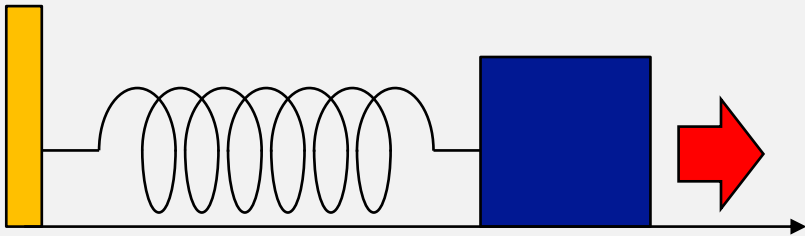
$r = 0, v = 1$ 物体が原点にいて、速度が1



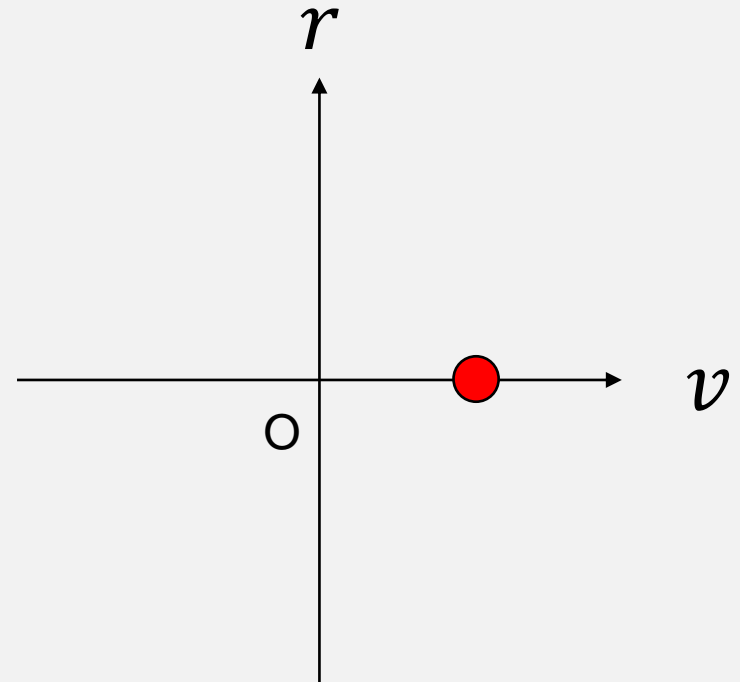
$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -r$$

二階の常微分方程式で初期条件を二つ与えたので、
この系の運動は完全に定まる

位相空間



$$(v, r) = (1, 0)$$



この系の状態は (v, r) 空間の点を指定することで一意に定まる
この空間を**位相空間**(Phase Space)と呼ぶ

位相空間

系の状態は (v, r) 空間で指定できるのでから
運動方程式も (v, r) で書きたい

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -r \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} \frac{dv}{dt} &= -r \\ \frac{dr}{dt} &= v \end{aligned}$$

二階の常微分方程式を一階の連立常微分方程式に

力学系

$$\frac{dv}{dt} = -r$$

変数の組 (v, r) の時間微分 (\dot{v}, \dot{r}) が
 (v, r) の関数として書けている

$$\frac{dr}{dt} = v$$

一般的に書くと

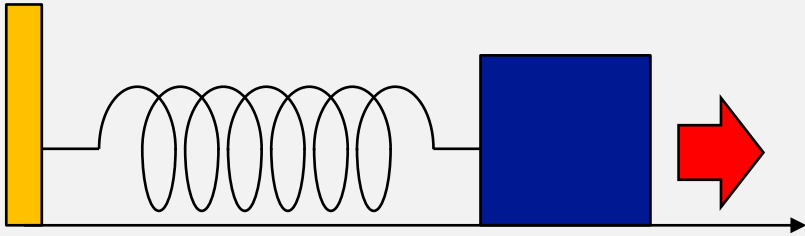
$$\begin{aligned}\frac{dv}{dt} &= f_v(r, v) & f_v(r, v) &= -r \\ \frac{dr}{dt} &= f_r(r, v) & f_r(r, v) &= v\end{aligned}$$

このような系を**力学系**(dynamical system)と呼ぶ

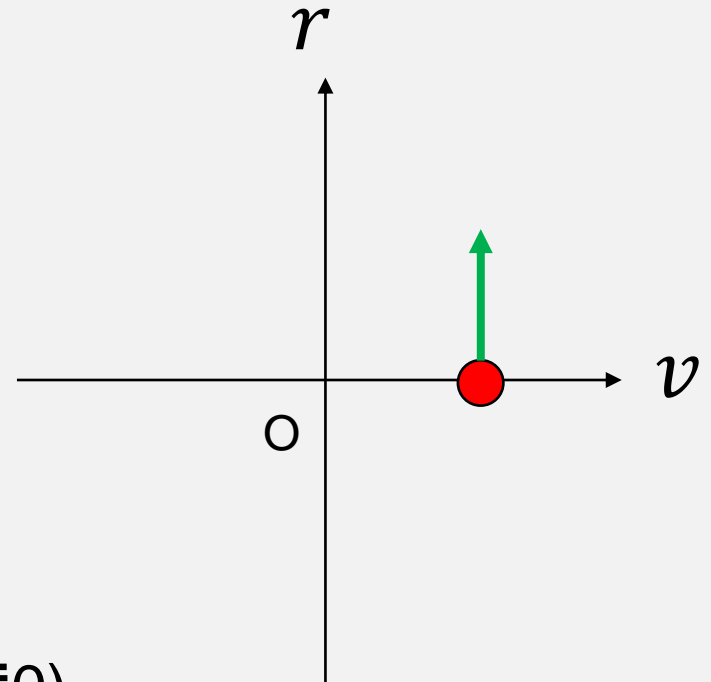
※運動方程式は力学系的一种

位相空間と流れ

現在の状態(原点で右向きに運動)



$$(v, r) = (1, 0)$$



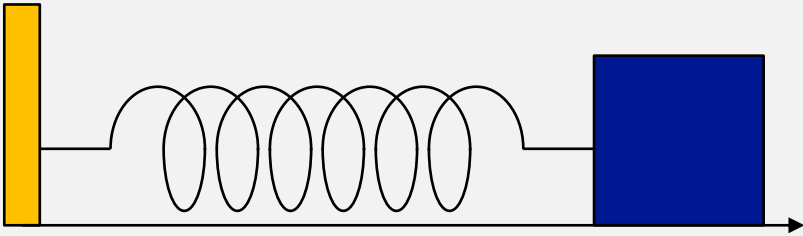
時間微分(右向きに運動し、加速度0)

$$(\dot{v}, \dot{r}) = (0, 1)$$

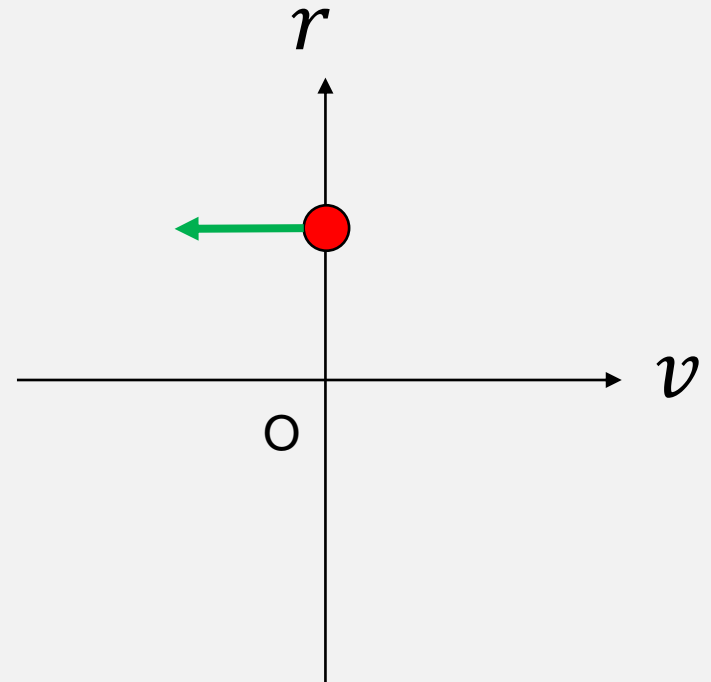
$$(\dot{v}, \dot{r}) = (-r, v)$$

位相空間と流れ

現在の状態(バネが伸び切って停止)



$$(v, r) = (0, 1)$$



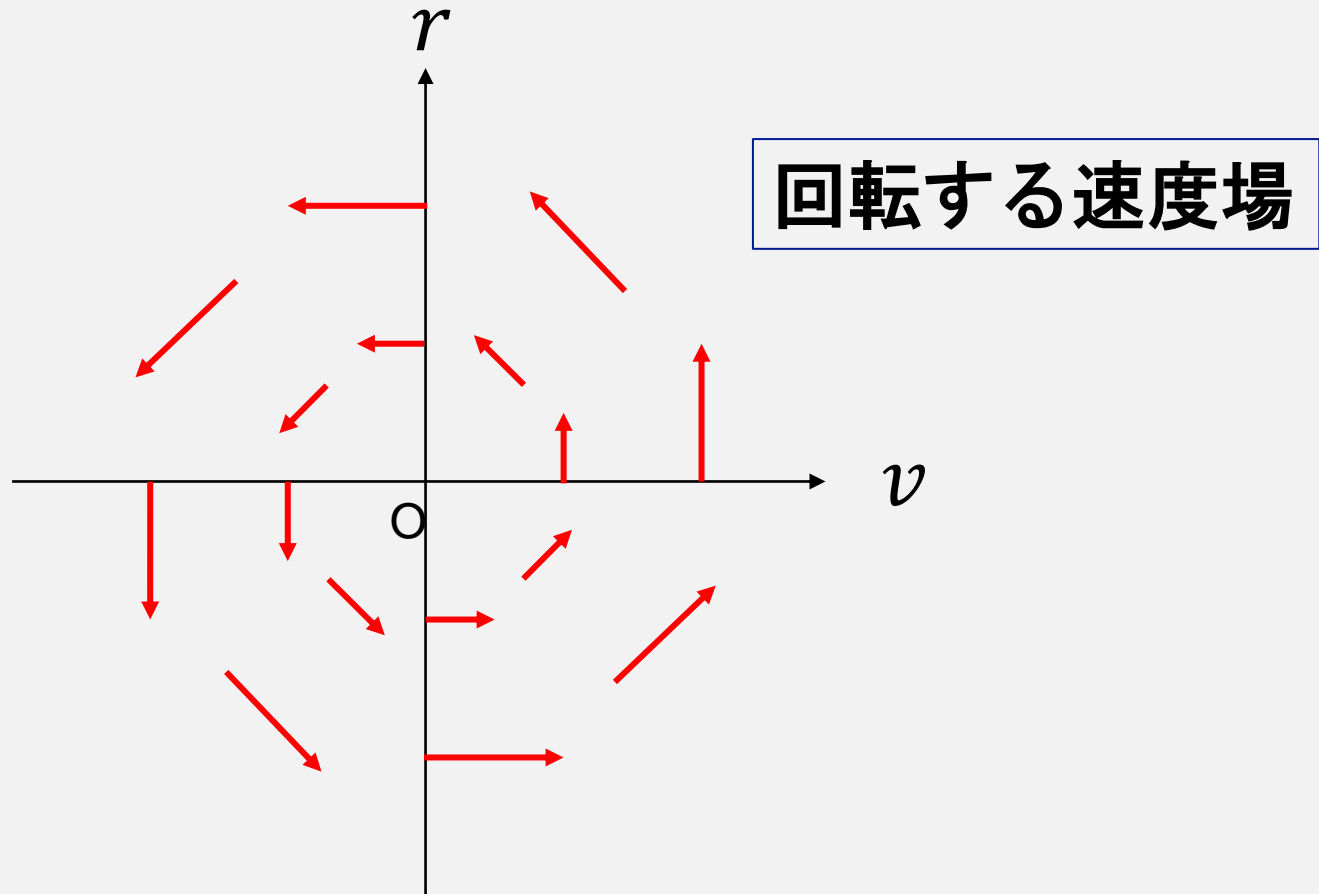
時間微分(左向きに加速し、速度0)

$$(\dot{v}, \dot{r}) = (-1, 0)$$

$$(\dot{v}, \dot{r}) = (-r, v)$$

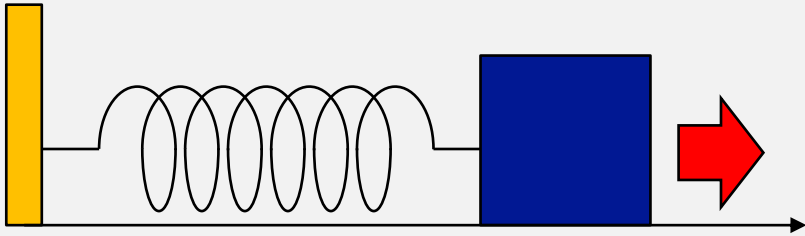
位相空間と流れ

今の手続きを様々な点で繰り返すと・・・

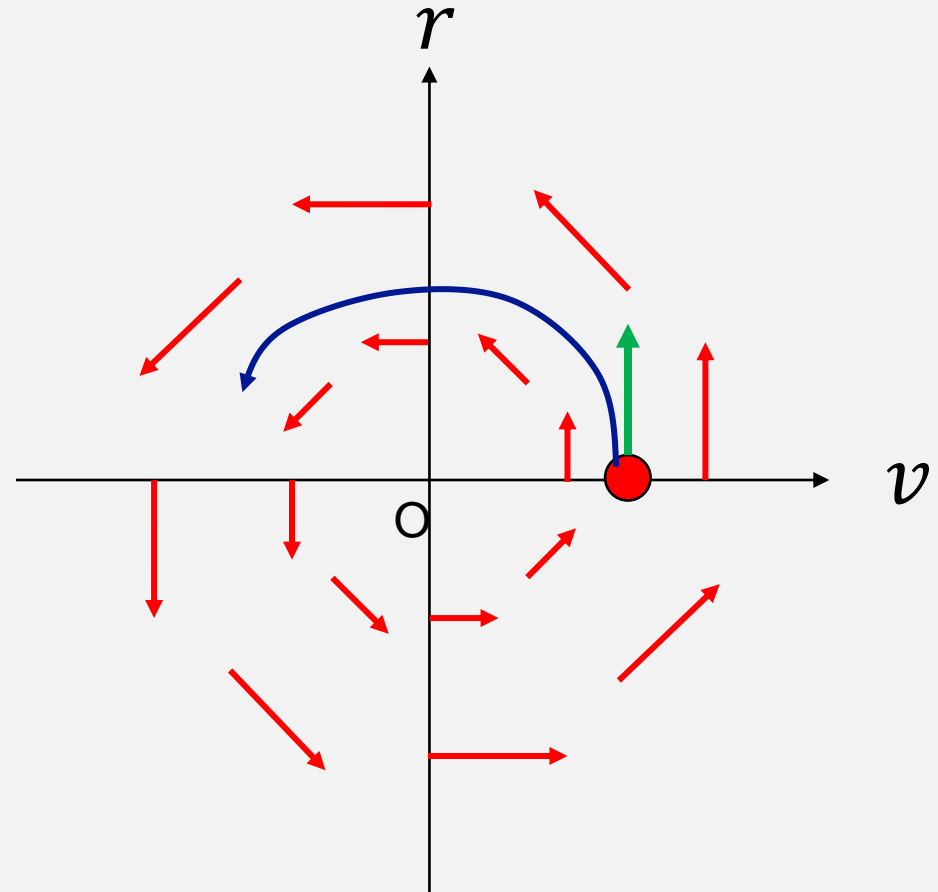


運動方程式は位相空間にベクトル場を定義する

位相空間と流れ



$$(v, r) = (1, 0)$$



初期条件：位相空間にトレーサーを置くこと
方程式の解：トレーサーの軌跡

位相空間のまとめ

- 運動方程式に従う系の状態を一意に決めることができる空間を**位相空間**と呼ぶ
- 運動方程式とは、位相空間に**ベクトル場 (速度場)**を定義するものである
- 系の状態は、位相空間上の一点で表現できる
- 系の運動は、位相空間上の軌跡で表現され、運動方程式が定義した速度場に従って動く点の軌跡である

変分原理

3次元空間に N 粒子がいる場合、その位相空間は $6N$ 次元
(位置が3成分、速度が3成分で粒子あたり6成分)

$$\underbrace{(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N)}_{6N}$$

$6N$ 次元の空間にベクトル場を定義するには、 $6N$ 本の関数が必要

$$\left. \begin{aligned} \frac{dr_x^1}{dt} &= f_1(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \\ &\vdots \\ \frac{dv_z^N}{dt} &= f_{6N}(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \end{aligned} \right\} 6N$$

変分原理

ラグランジアンというスカラー関数ひとつから、運動方程式に必要な $6N$ 本の方程式を生み出すことができる

$$\mathcal{L}(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N)$$



$$\left. \begin{aligned} \frac{dr_x^1}{dt} &= f_1(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \\ &\vdots \\ \frac{dv_z^N}{dt} &= f_{6N}(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \end{aligned} \right\} 6N$$

変分原理

運動はラグランジアン の 時間積分 を 最小 に する よう に 決まる (※)

$$I = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(\dot{r}, r) dt$$

$$\delta I = 0 \quad \rightarrow$$

$$\begin{aligned} \frac{dr_x^1}{dt} &= f_1(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\frac{dv_z^N}{dt} = f_{6N}(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N)$$

※ 「最小」ではなく「極小」の方が正確だが、以下では「最小」を使う

変分原理



✕ A

歩きやすい

✕ B

歩きにくい

A地点からB地点まで最短時間で到達したい

変分原理



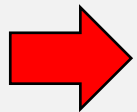
✕ A

歩きやすい

歩きにくい

✕ B

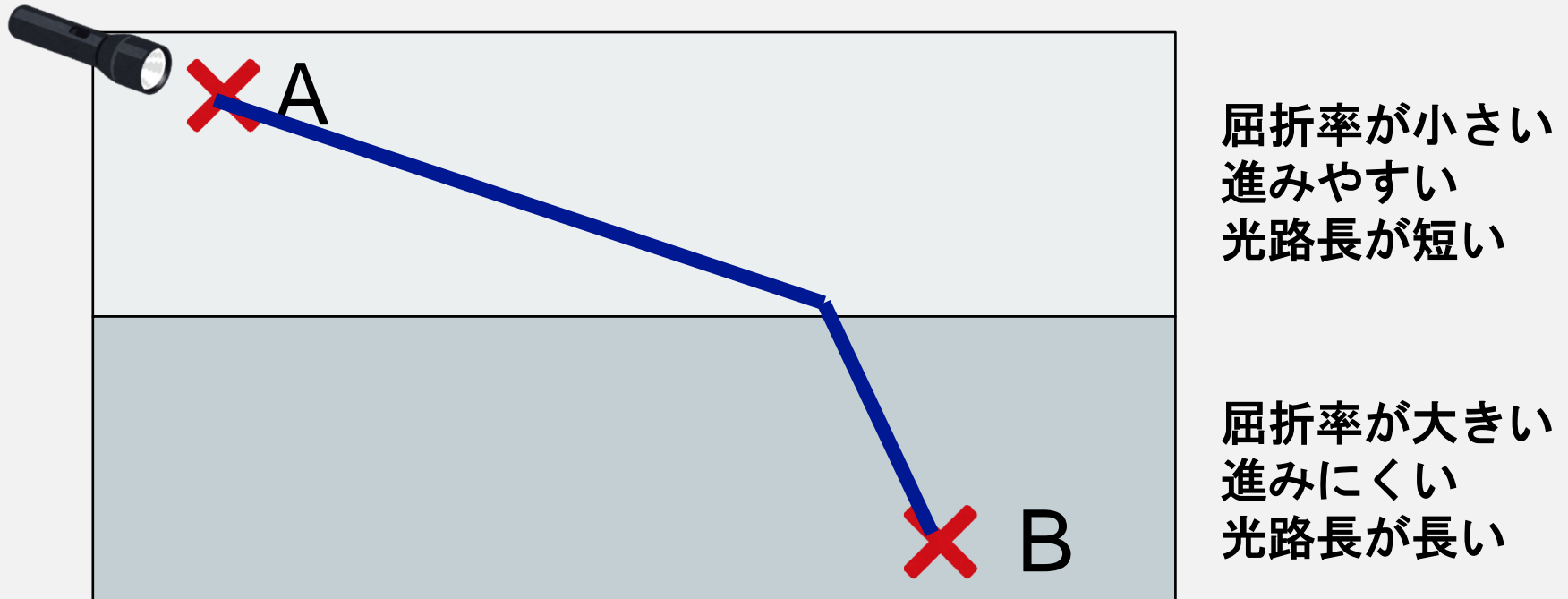
A地点からB地点まで最短時間で到達したい



歩きづらさの総和が最小になる経路を選ぶ

変分原理

光は空中から水中に入る際に屈折する



光の経路は、光学的距離を最小(極小)にするように決まる

変分原理

屈折率は、その場所における「光の進みづらさ」を表している
光は「進みづらさ」を最小にしたい

点 (x, y) における屈折率を $n(x, y)$ として、光の経路を C とすると
光路長を最小にするように経路が選ばれる(**フェルマーの原理**)

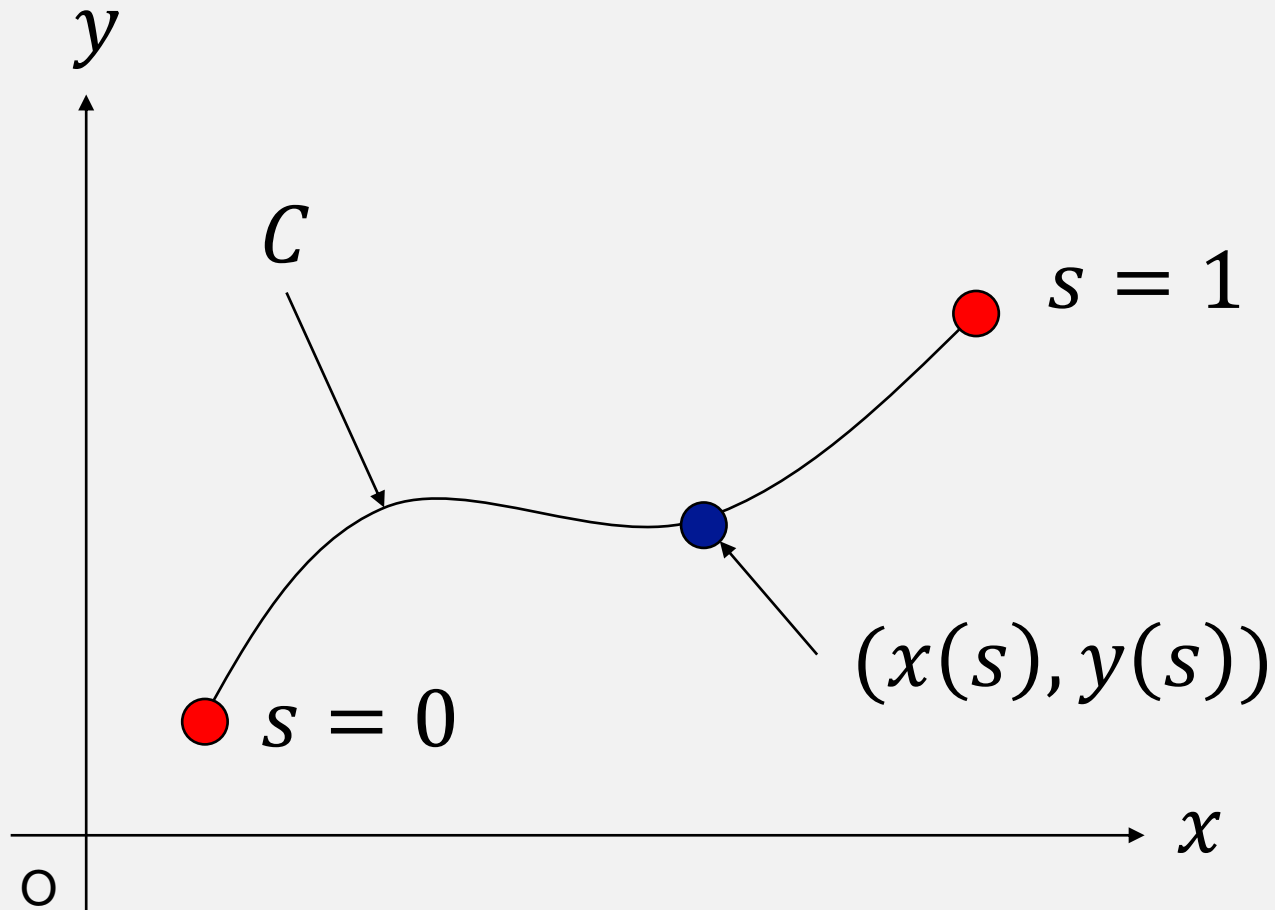
$$I = \int_C n(x, y) ds$$

この積分の意味は？

積分を最小にする経路とは？

変分原理

経路は一次元なので、一つのスカラーパラメータ s で指定できる



変分原理

屈折率 $n(x, y)$ は場所 (x, y) の関数

→ 場所(ベクトル)が入力、スカラーが出力

経路 C は、パラメータ s の関数

→ スカラーが入力、場所(ベクトル)が出力

作用積分 I は関数(経路)の汎関数

→ 経路が入力、スカラーが出力

ここを最小にするように

$$I = \int_C n(x, y) ds$$

ここを決めたい

➡ これを決める方法が汎関数微分

変分原理

$$I = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(\dot{r}, r) dt$$

汎関数微分

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \delta \dot{r} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} \delta r$$

部分積分

$$= - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) \delta r + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} \delta r$$

δr でまとめる

$$= \left(- \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} \right) \delta r$$

変分原理

$$I = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(\dot{r}, r) dt \quad \text{が最小} \quad \rightarrow \delta I = 0$$

$$\delta I = 0 \rightarrow \delta \mathcal{L} = \underbrace{\left(-\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} \right)}_{=0} \delta r$$

以上から、

$$-\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0$$

これをオイラー・ラグランジュ方程式とよぶ

多粒子系の変分原理

x,y,z方向を区別するのが面倒なので

$r_x^i = q_{3i}, r_y^i = q_{3i+1}, r_z^i = q_{3i+2}$ と通し番号をつける

$$\mathcal{L}(q_1, \dots, q_{3N}, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_{3N})$$

$$\delta I = 0 \quad \rightarrow \quad -\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_i} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r_i} = 0$$

ひとつの多変数スカラー関数の変分から
必要な数の微分方程式が全て得られる

変分原理のまとめ

- ラグランジアンは位相空間における「進みづらさ」を表す関数
- 作用積分とは軌道に沿ったラグランジアンの線積分であり、作用とは進みづらさの総和を意味する
- 多粒子系の運動方程式は連立微分方程式となるが、その全てが単一のスカラー関数であるラグランジアンの変分から得られる(オイラー・ラグランジュ方程式)

ルジャンドル変換

ラグランジアンの一引数をルジャンドル変換

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \quad \mathcal{H} = pq - \mathcal{L}$$

$$\mathcal{L}(\dot{q}, q) \xrightarrow{\hspace{1.5cm}} \mathcal{H}(p, q)$$

ラグランジアンから

ハミルトニアンへ

ルジャンドル変換とは

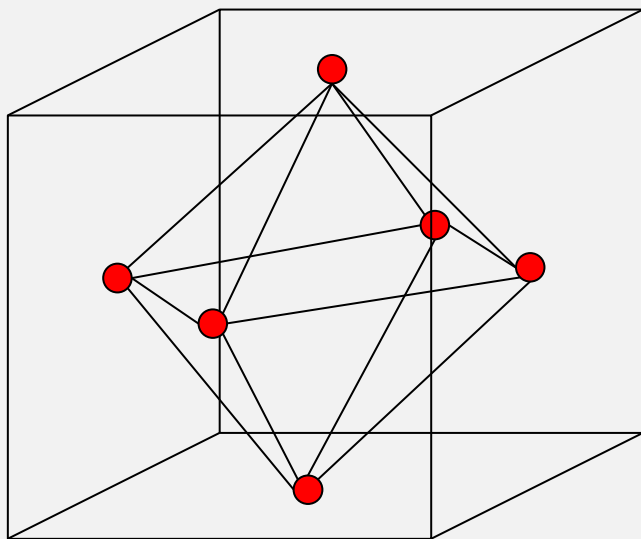
双対変換の一種

双対変換とは「何かを入れ替える」変換

二度行うとともに戻る

変換で情報は失われない

双対変換の例



正多面体の「点」と「面」の入れ替え

正四面体 \longleftrightarrow 正四面体

正六面体 \longleftrightarrow 正八面体

正四面体 \longleftrightarrow 正八面体

正十二面体 \longleftrightarrow 正二十面体

※フーリエ変換なども双対変換

ルジャンドル変換

ルジャンドル変換は (x, y) 空間から (X, Y) への双対変換
ルジャンドル変換には二つの表式がある

接線表式

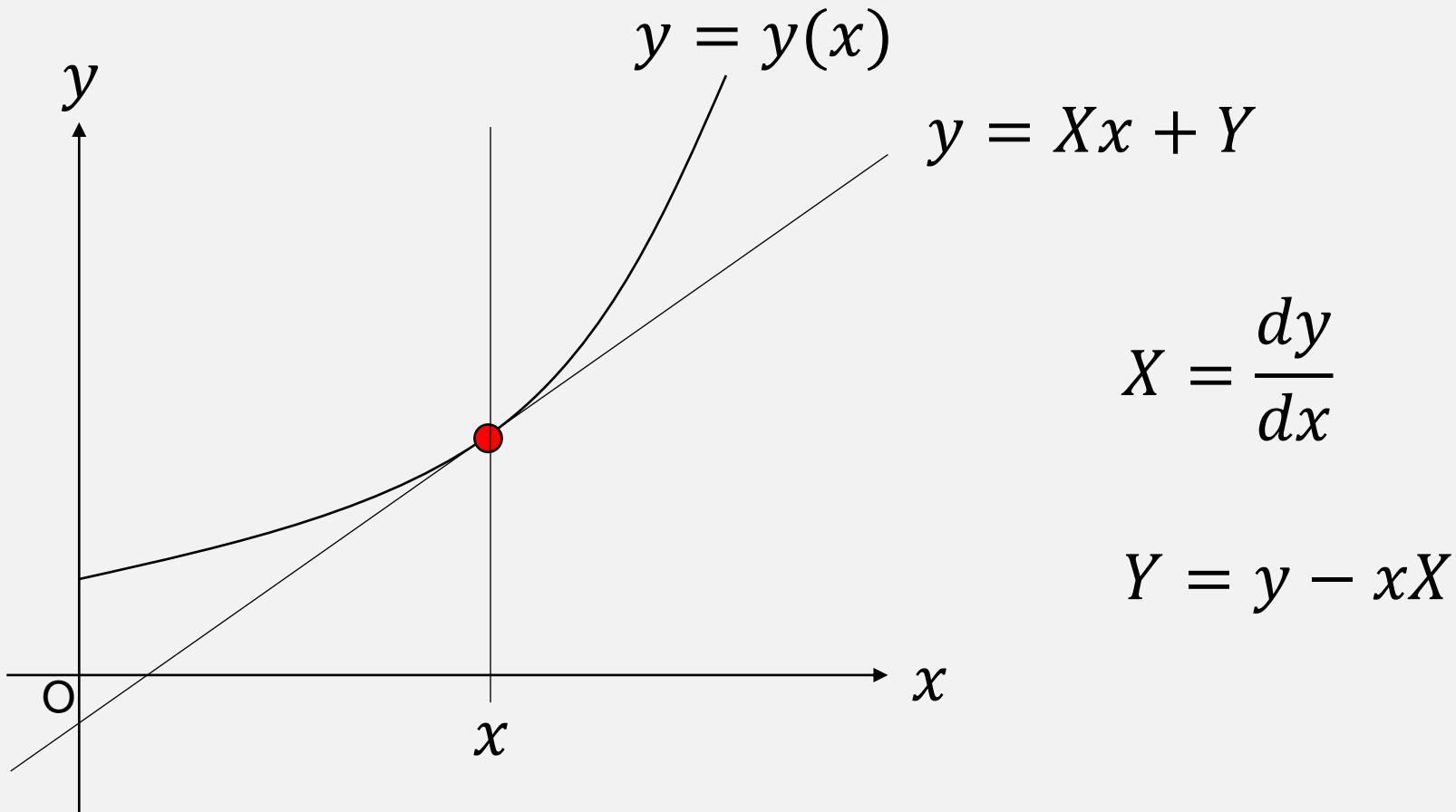
$$y = Xx + Y$$

面線表式

$$y + Y = xX$$

接線表式

関数 $y = y(x)$ の各点に接線をひく



接線の傾きを X 、 y 切片を Y とする

接線表式

逆変換を考えてやると

$$X = \frac{dy}{dx}$$

$$x = - \frac{dY}{dX}$$

$$Y = y - xX$$

$$y = Y - xX$$

ここに余計な負符号がつく

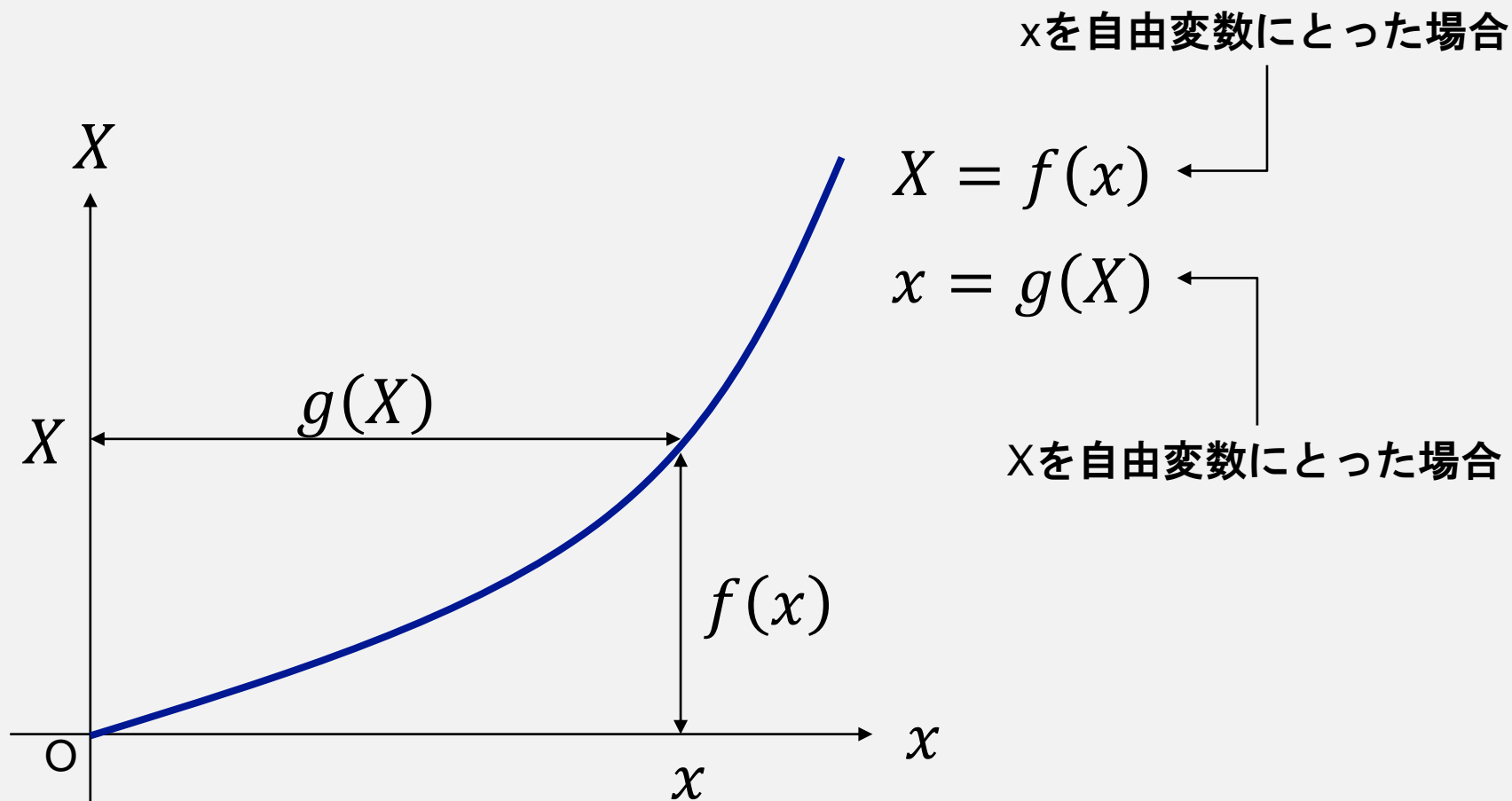
最終的に辻褄が合えばどうでも良いが、これを嫌って

$$Y = xX - y$$

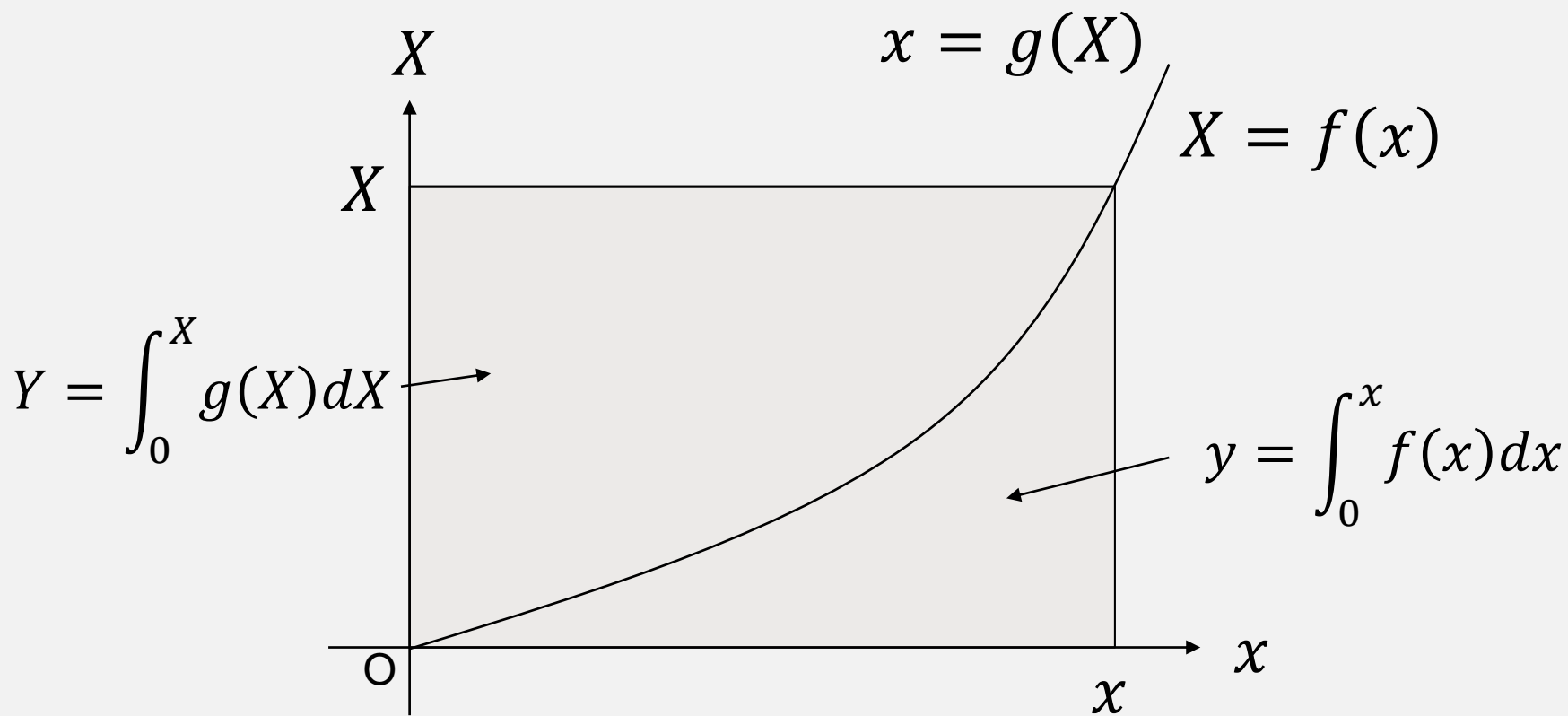
と定義すると、変換と逆変換が対称になる

面積表式

(x, X) 空間上の曲線を考える



面積表式



曲線の下側の面積

曲線の左側の面積

長方形の面積

面積表式

$$y + Y = xX$$

$$x = g(X) \quad Y = \int_0^X g(X) dX \quad \rightarrow \quad x = \frac{dY}{dX}$$

$$X = f(x) \quad y = \int_0^x f(x) dx \quad \rightarrow \quad X = \frac{dy}{dx}$$

変換公式が自然に対称になる

ハミルトニアンの幾何学的解釈

オイラー・ラグランジュ方程式

ハミルトンの運動方程式

$$-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}\right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0$$



$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$

ルジャンドル変換は双対変換

双対変換は情報を保存する

→ハミルトニアンへの変換で情報は増えない

なぜハミルトニアンを考えるか？

→ 見通しが良くなるから

ハミルトニアン of 幾何学的解釈

ハミルトンの運動方程式

$$\frac{dp}{dt} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \quad \frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$

\mathcal{H} の時間微分

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \dot{q} \\ &= - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = 0 \end{aligned}$$

エネルギーの時間微分がゼロ → エネルギーが保存する

➡ この事実の幾何学的な意味を考える

ハミルトニアンの幾何学的解釈

pとqをまとめて一つのベクトルで表現する

$$\vec{z} = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

ハミルトニアンの勾配(gradient)を求める

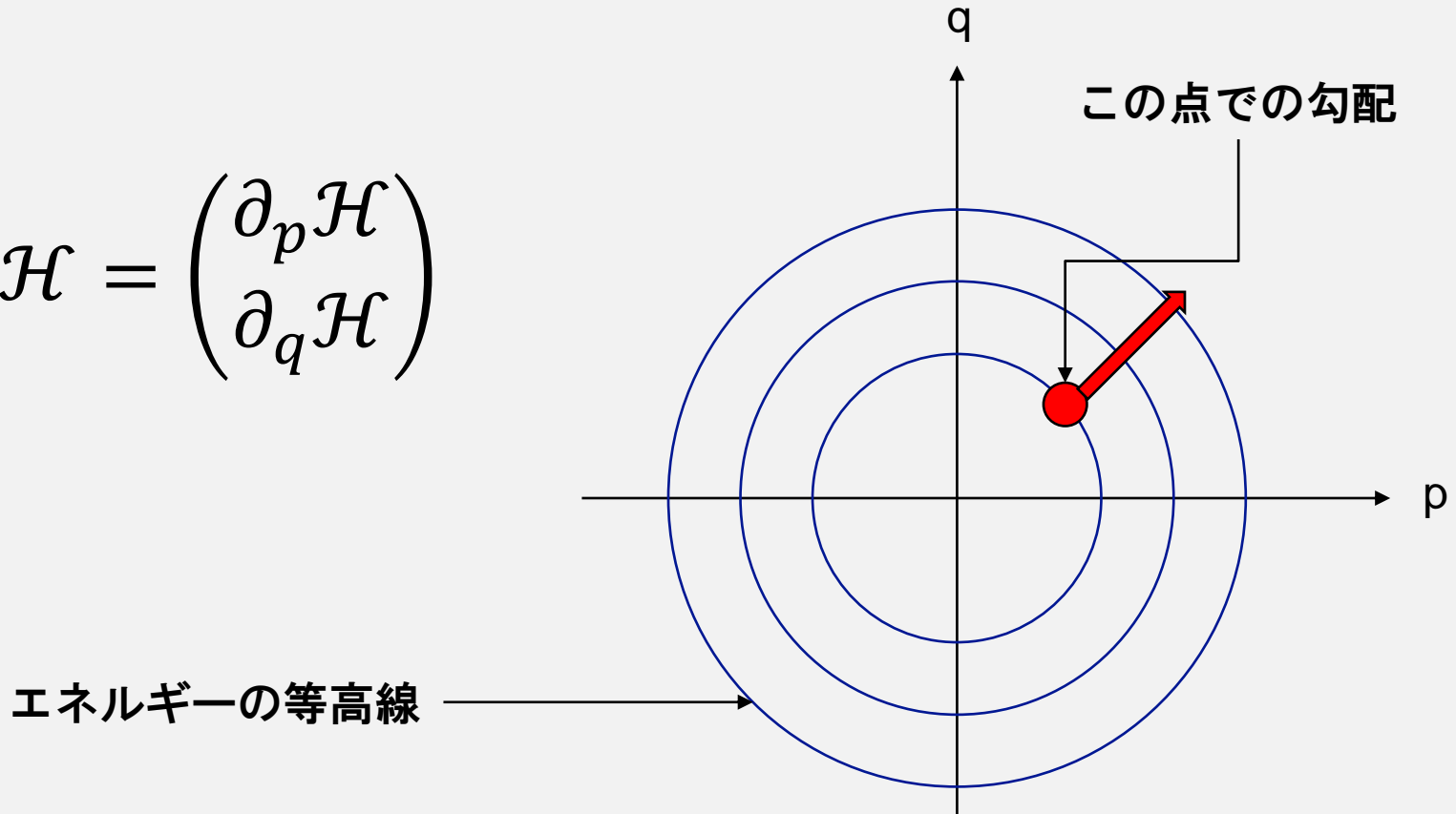
$$\nabla \mathcal{H} = \begin{pmatrix} \partial_p \mathcal{H} \\ \partial_q \mathcal{H} \end{pmatrix}$$

運動方程式がベクトルの式で表現できる

$$\frac{d\vec{z}}{dt} = \begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \nabla \mathcal{H}$$

ハミルトニアン幾何学的解釈

$$\nabla \mathcal{H} = \begin{pmatrix} \partial_p \mathcal{H} \\ \partial_q \mathcal{H} \end{pmatrix}$$



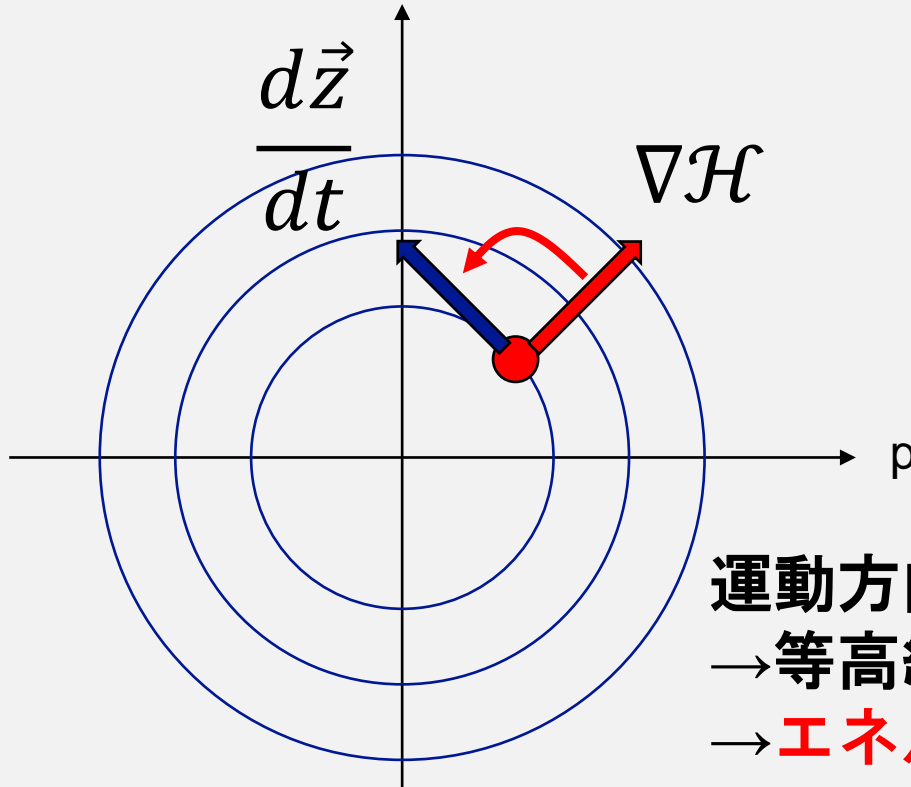
スカラー場の勾配は、最も変化が大きい方向へのベクトル
勾配ベクトルは等高線と直交する

ハミルトニアン幾何学的解釈

勾配ベクトルを

$$\frac{d\vec{z}}{dt} = \begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_q \mathcal{H} \\ \partial_p \mathcal{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \nabla \mathcal{H}$$

90度回している



運動方向は、勾配ベクトルと直交する
→ 等高線に沿って運動する
→ エネルギーが保存する

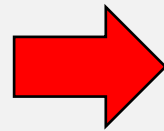
ハミルトニアンの幾何学的解釈

ハミルトンの運動方程式

速度場の発散(divergence)がゼロ

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$



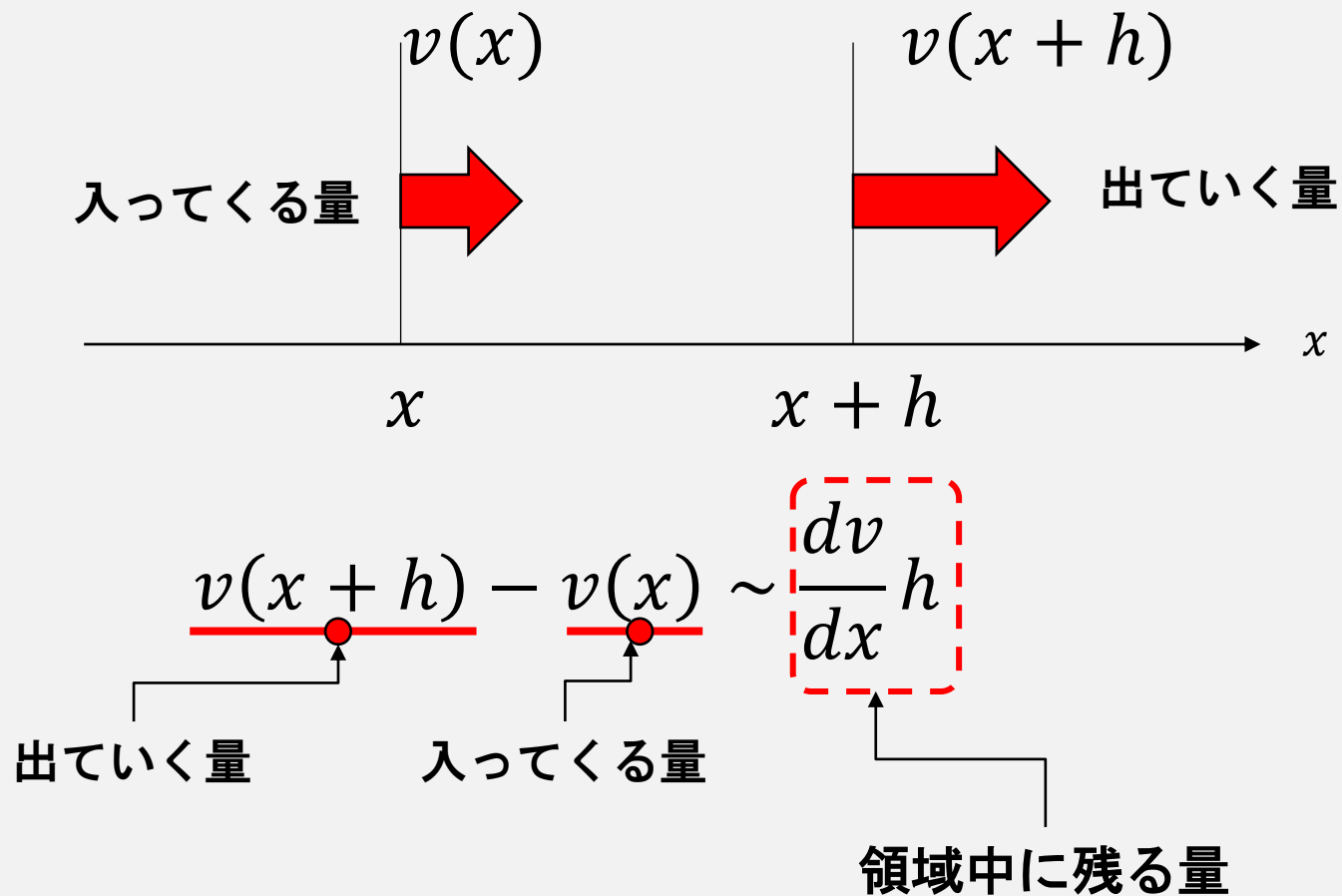
$$\nabla \frac{d\vec{z}}{dt} = \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} + \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = 0$$

$\frac{d\vec{z}}{dt}$ ハミルトニアンが作るベクトル場
→ ハミルトンベクトル場

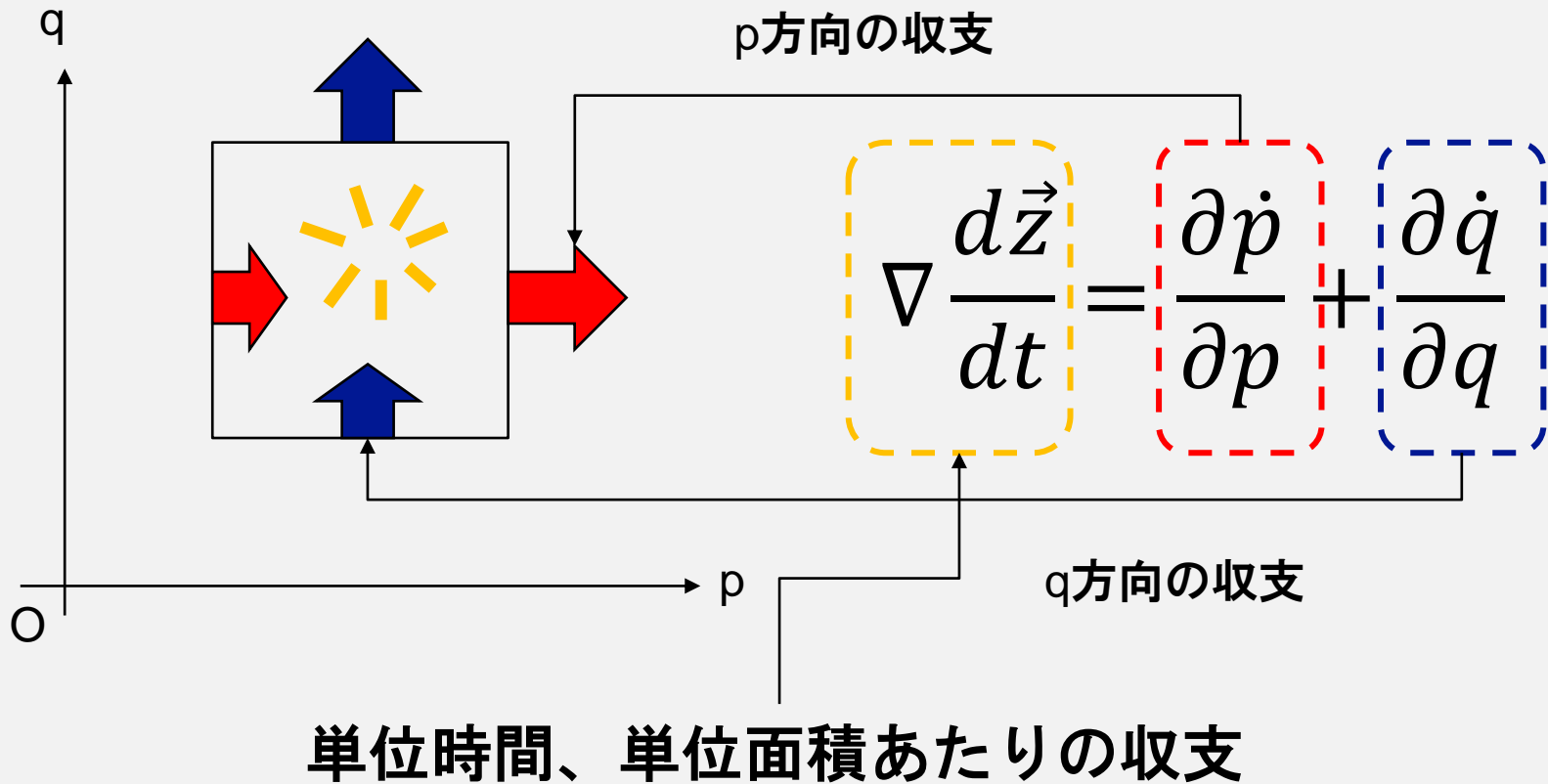
ハミルトンベクトル場の発散がゼロの意味とは？

発散(divergence)

速度場 $v(x)$ の発散



発散(divergence)



速度場の発散は、その点における量の非保存を意味する

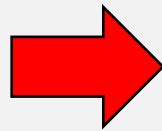
ハミルトニアンの幾何学的解釈

ハミルトンの運動方程式

速度場の発散(divergence)がゼロ

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$



$$\nabla \frac{d\vec{z}}{dt} = \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} + \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = 0$$

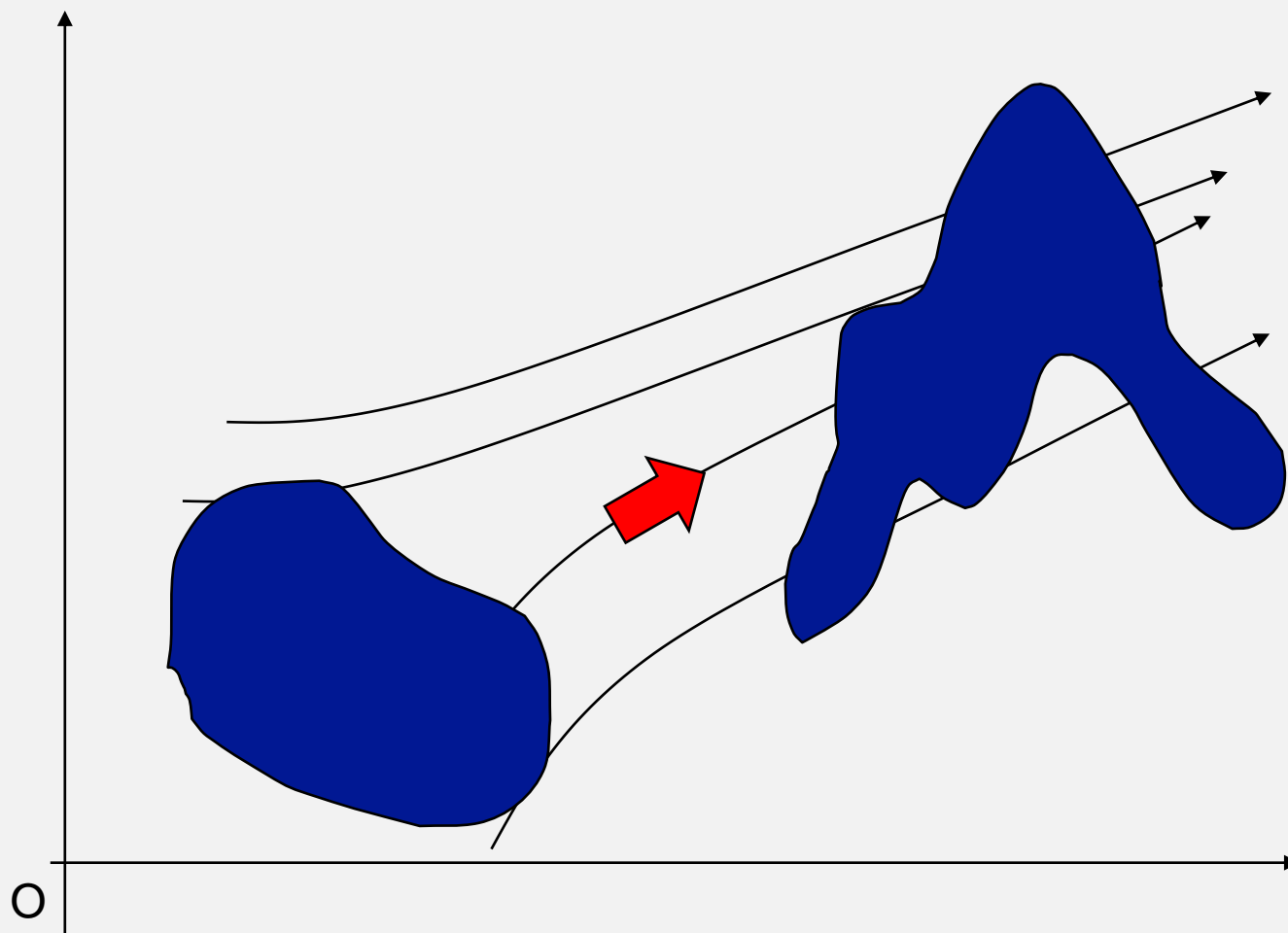
速度場の発散がゼロ

→各点で入ってくる量と出ていく量が等しい

→流れに沿って密度が変化しない

→ハミルトンベクトル場は非圧縮流

ハミルトニアンの幾何学的解釈



非圧縮流：流れに沿って位相空間体積が変化しない

ハミルトニアンの幾何学的解釈のまとめ

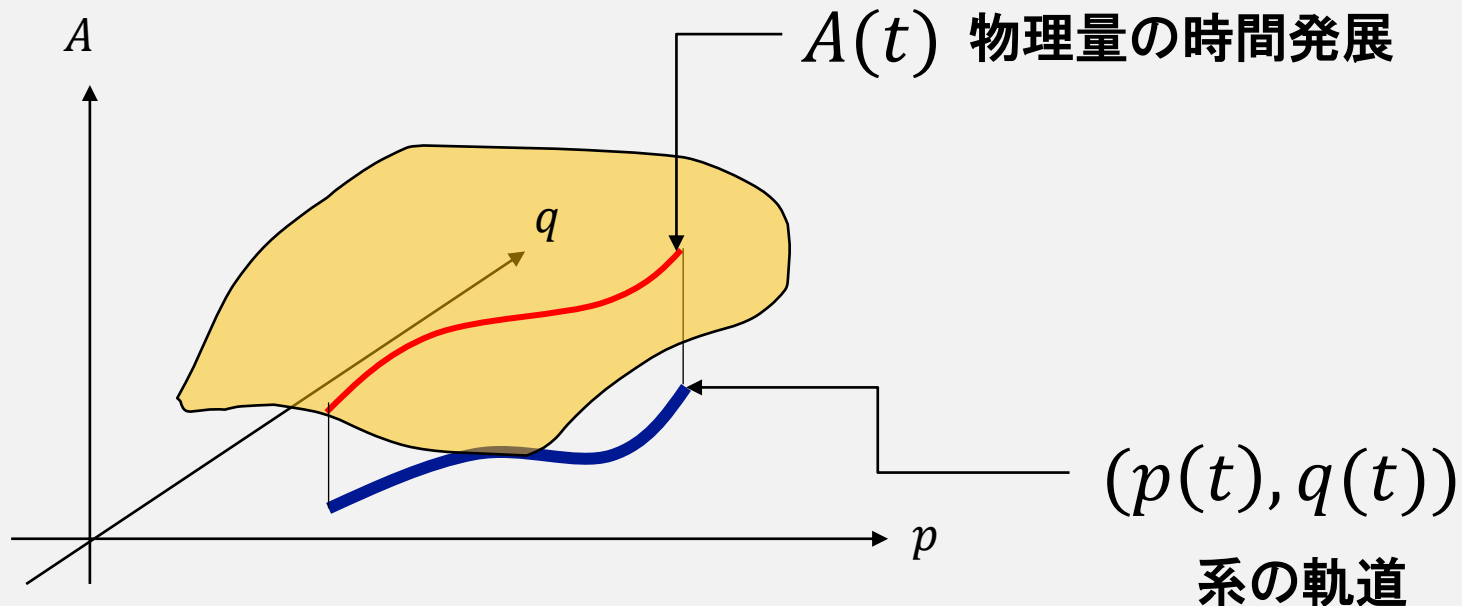
- ハミルトンの運動方程式は、位相空間に流れ場を作る(ハミルトンベクトル場)
- ハミルトンベクトル場は、回転する流れを表現している
- ハミルトンベクトル場は、非圧縮流になっている

時間発展とは、位相空間における回転

時間発展とリュービル演算子

一次元一自由度系 (p, q) における物理量 A を考える
点 $(p(t), q(t))$ は運動方程式に従って時間発展する
この世界の物理量は全て (p, q) の関数として表現できる
→ A は (p, q) の関数

$$A(p(t), q(t)) \rightarrow A(t) \text{ と略記}$$



時間発展とリュービル演算子

時刻 $t + h$ における値 $A(t + h)$ のテイラー展開を考える

$$A(t + h) = A(t) + h \frac{dA}{dt} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 A}{dt^2} + \dots$$

$$= \sum_{k=0} \frac{h^k}{k!} \frac{d^k}{dt^k} A(t)$$

$$= \exp \left(h \frac{d}{dt} \right) A(t)$$

$$\equiv U(h) A(t)$$

$U(h)$

時間発展とリュービル演算子

$$\underline{U(h)A(t)} = A(\underline{t+h})$$

$A(t)$ に $U(h)$ をかけると

時刻が h だけ進む

$$U(h) = \exp\left(h \frac{d}{dt}\right) \text{ は時間発展演算子}$$

時間発展とリュービル演算子

A の時間微分を考える

A は (p, q) の関数であったから

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial A}{\partial q} \dot{q}$$

$$= \left(\dot{p} \frac{\partial}{\partial p} + \dot{q} \frac{\partial}{\partial q} \right) A$$

$$\uparrow -iL$$

$$= -iLA$$

時間発展とリュービル演算子

$$\frac{-iLA}{\text{red dot}} = \frac{dA}{dt}$$

$A(t)$ に $-iL$ をかけると

時間微分が得られる

$$-iL = \left(\dot{p} \frac{\partial}{\partial p} + \dot{q} \frac{\partial}{\partial q} \right) \text{ は時間微分演算子}$$

これをリュービル演算子(Liouville operator)と呼ぶ

- ※ 虚数単位をつけるのは、演算子をエルミートにするため
- ※ 物理量にかける場合は負符号をつける

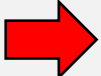
時間発展とリュービル演算子

形式的に積分する

$$-iLA = \frac{dA}{dt} \quad \text{微分して自分自身が出てくるので指数関数}$$

$$A(t+h) = \boxed{\exp(-ihL)} A(t)$$

$$A(t+h) = \boxed{U(h)} A(t) \quad \text{時間発展演算子の定義}$$

 $U(h) = \exp(-ihL)$

時間発展演算子はリュービル演算子を指数関数の肩に載せたもの

時間発展とリュービル演算子

任意の物理量 A について $\frac{dA}{dt} = -iLA$ なので

$$\boxed{\frac{d}{dt}} = -iL$$

$$U(h) = \exp \left(h \boxed{\frac{d}{dt}} \right)$$

微分演算子をリュービル演算子
で置き換えた

時間発展とリュービル演算子

一次元調和振動子の運動方程式

$$\dot{p} = -q$$

$$\dot{q} = p$$

$$\vec{z}(t) = \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} \quad \text{とベクトル表示すると}$$

$$\frac{d}{dt} \vec{z} = L \vec{z}$$

リュービル演算子の行列表示

$$L = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

※計算の煩雑さをさけるため、負符号と虚数単位は省いてある

時間発展とリュービル演算子

$$\frac{d}{dt}\vec{Z} = L\vec{Z} \quad \text{を形式的に解くと}$$

$$\vec{Z}(t+h) = \boxed{\exp(hL)}\vec{Z}(t)$$

↑
 $U(h)$

$$\exp(hL) = I + hL + \frac{h^2}{2}L^2 + \cdots + \frac{h^k}{k!}L^k + \cdots$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{などから厳密に計算できる}$$

時間発展とリュービル演算子

$$L = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{回転行列の生成子 (微小回転)}$$

$$\exp(hL) = \begin{pmatrix} \cos h & -\sin h \\ \sin h & \cos h \end{pmatrix} \quad \text{回転行列}$$

リュービル演算子は回転の「方向」を表現している
時間発展演算子は有限の回転を表現している

時間発展とリュービル演算子のまとめ

時間を進める演算子が時間発展演算子

$$U(h)A(t) = A(t + h)$$

時間で微分する演算子がリュービル演算子

$$-iLA(t) = \frac{dA}{dt}$$

リュービル演算子を指数関数の肩に載せたものが
時間発展演算子


$$U(h) = \exp(-ihL)$$

時間発展とは回転であり、有限の回転を表現するのが
時間発展演算子で、無限小の回転を表現するのが
リュービル演算子

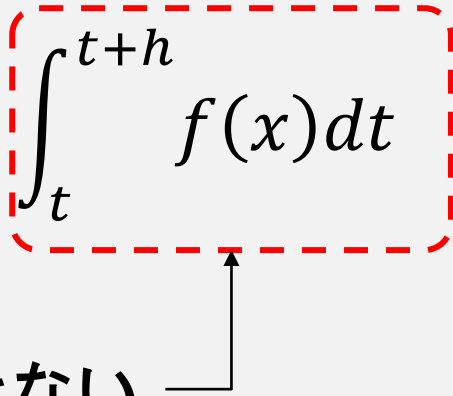
時間積分

微分方程式が与えられている時、現時点での値から将来を予測したい

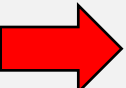
方程式 $\frac{dx}{dt} = f(x)$ 未来の値
初期値 $x(t)$ $x(t+h)$



厳密な表式

$$x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} f(x) dt$$


この積分が厳密評価できない

 $x(t+h)$ を $x(t)$ と $f(x)$ で近似する

時間積分

積分区間が短いと思って $f(x)$ を定数で近似する

$$x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} f(x) dt$$
$$\sim x(t) + f(x)h$$

知りたい量

知ってる量

$$x(t+h) = x(t) + f(x(t))h$$

未知の量 $x(t+h)$ を、既知の量 $x(t)$ と $f(x(t))$ だけで表現できた

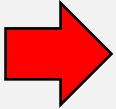
この数値積分法をオイラー法と呼ぶ

運動方程式の積分

運動方程式

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$

現在値 $p(t), q(t)$



未来値 $p(t+h), q(t+h)$

運動方程式を使って、未来の値を現在の値の関数として表現したい

オイラー法

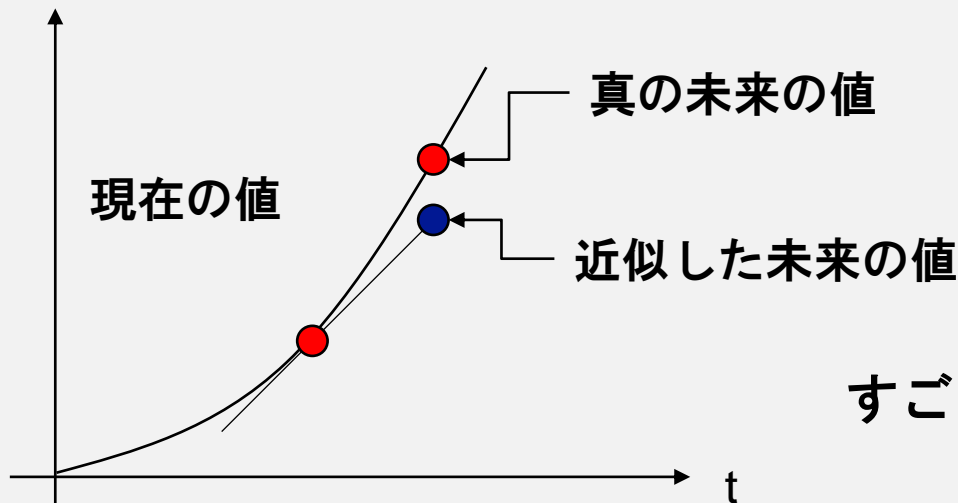
運動方程式にオイラー法を適用する

$$p(t+h) = p(t) + \dot{p}(t)h = \boxed{p(t)} - \boxed{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}} h$$

$$q(t+h) = q(t) + \dot{q}(t)h = \boxed{q(t)} + \boxed{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}} h$$

現在の値

現在の微分係数
(傾き)



すごくずれていきそうな気がする

オイラー法

調和振動子の運動方程式をオイラー法で解くコード

```
t = 0
h = 0.05
p = 1.0
q = 0.0
T = 1000

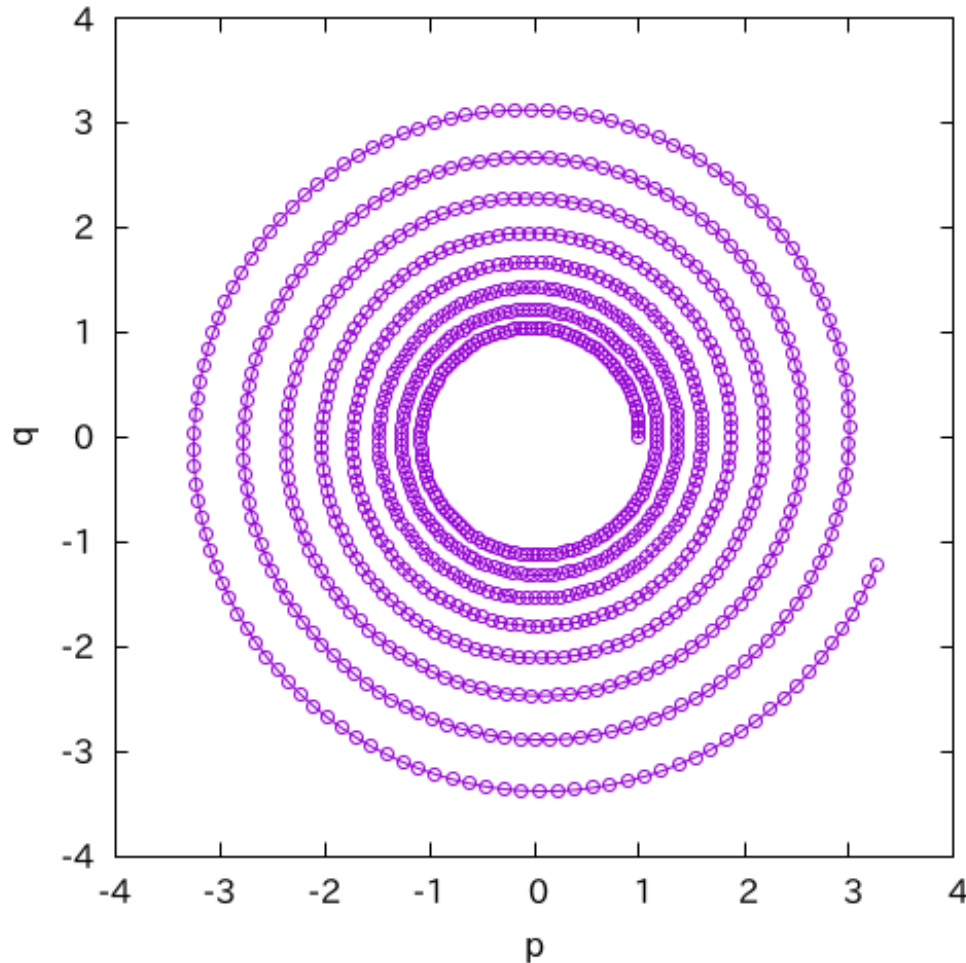
for _ in range(T):
    print(f"{t} {p} {q}")
    t = t + h
    dp = - q * h
    dq = p * h
    p += dp
    q += dq
```

$$p(t + h) = p(t) - q(t)h$$

$$q(t + h) = q(t) + p(t)h$$

オイラー法

オイラー法で計算した調和振動子の軌道



単位円を描くべき軌道が
徐々に広がっている
→エネルギーが増えている

オイラー法

調和振動子にオイラー法を適用

$$p(t+h) = p(t) - q(t)h$$

$$q(t+h) = q(t) + p(t)h$$

行列表示

$$\begin{pmatrix} p(t+h) \\ q(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}$$

行列式 = $1 + h^2 > 1$

厳密解

$$\begin{pmatrix} p(t+h) \\ q(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos h & -\sin h \\ \sin h & \cos h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}$$

行列式 = 1

位相空間の面積非保存がエネルギー非保存の原因

Velocity Verlet法

オイラー法は、テイラー展開の一次まで正しいコード
→高次の積分法を構築する

以下の運動方程式を考える

$$\dot{p} = \underline{f(q)}, \dot{q} = p$$

ポテンシャル力

位置を二次までテイラー展開

$$\begin{aligned} q(t+h) &= q(t) + \dot{q}(t)h + \frac{\ddot{q}(t)h^2}{2} \\ &= q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2} \end{aligned}$$

Velocity Verlet法

運動量も二次までテイラー展開

$$\begin{aligned} p(t+h) &= p(t) + \dot{p}(t)h + \frac{\ddot{p}(t)h^2}{2} \\ &= p(t) + f(t)h + \frac{\dot{f}(t)h^2}{2} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{df}{dt}} \sim \frac{f(t+h) - f(t)}{h} \quad \text{力の時間微分を差分近似して代入}$$

$$p(t+h) = p(t) + \frac{\boxed{f(t+h)} + f(t)}{2} h$$

先に $q(t+h)$ が求まっているので値がわかる

Velocity Verlet法

以下の運動方程式について

$$\dot{p} = -f(q), \dot{q} = p$$

以下の二次の数値積分法を得た

$$\left\{ \begin{array}{l} q(t+h) = q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2} \\ p(t+h) = p(t) + \frac{f(t+h) + f(t)}{2}h \end{array} \right.$$

これをVelocity Verlet法と呼ぶ

※ 速度ベルレ法や、ベレの方法などとも呼ばれる

Velocity Verlet法

調和振動子の運動方程式をVelocity Verlet法で解くコード

```
t = 0
h = 0.05
p = 1.0
q = 0.0
T = 1000

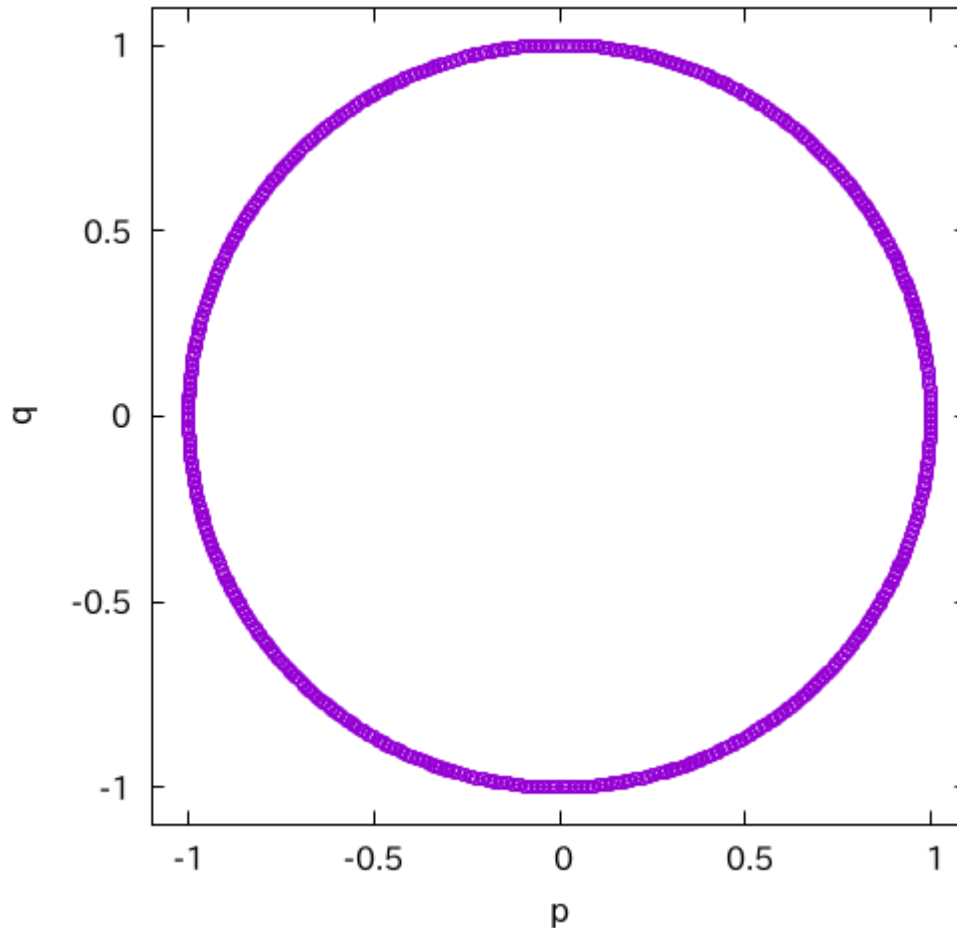
for _ in range(T):
    print(f"{t} {p} {q}")
    t = t + h
    ft = -q
    q += p * h - q * h**2 * 0.5
    ft2 = -q
    p += (ft2 + ft) * h * 0.5
```

$$q(t+h) = q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2}$$

$$p(t+h) = p(t) + \frac{f(t+h) + f(t)}{2}h$$

Velocity Verlet法

Velocity Verlet法で計算した調和振動子の軌道



軌道が完全な円を描いている

Velocity Verlet法

調和振動子にVelocity Verlet法を適用

$$q(t+h) = q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2} \quad p(t+h) = p(t) + \frac{f(t+h) + f(t)}{2}h$$

行列表示

$$\begin{pmatrix} p(t+h) \\ q(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - h^2/2 & -h \\ -h + h^3/4 & 1 - h^2/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}$$

行列式 = 1

厳密解

$$\begin{pmatrix} p(t+h) \\ q(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos h & -\sin h \\ \sin h & \cos h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}$$

行列式 = 1

Velocity Verlet法は時間発展演算子を近似しているが、
行列式は厳密に1

Velocity Verlet法

$$p(t+h) = P, q(t+h) = Q \text{ と書く}$$

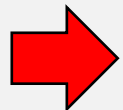
数値積分法とは (p, q) から (P, Q) への写像を作るもの

厳密な時間発展ではエネルギーが保存する

$$\frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2} = \frac{P^2}{2} + \frac{Q^2}{2}$$

Velocity Verletでは「ずれた」エネルギーが厳密に保存する

$$\frac{p^2}{2} + \left(1 - \frac{h^2}{4}\right) \frac{q^2}{2} = \frac{P^2}{2} + \left(1 - \frac{h^2}{4}\right) \frac{Q^2}{2}$$



エネルギーが真の値のまわりを揺らぎながらも保存する

シンプレクティック積分

リウービル演算子

$$\frac{d}{dt} = -iL = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q}$$

時間発展演算子

$$U(h) = \exp(-ihL)$$

一般に厳密に計算できない

リウービル演算子から近似した時間発展演算子を作りたい

シンプレクティック積分

ハミルトニアンが運動項とポテンシャル項に分離しているとする

$$\mathcal{H}(p, q) = K(p) + V(q)$$

リュービル演算子も二つに分解する

$$\begin{aligned} -iL &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \\ &= \underbrace{-\frac{\partial V}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}}_{-iL_V} + \underbrace{\frac{\partial K}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q}}_{-iL_K} \\ &= -iL_V + -iL_K \end{aligned}$$

シンプレクティック積分

ハミルトニアンが運動項とポテンシャル項に分かれている時

$$\mathcal{H}(p, q) = K(p) + V(q)$$

$-iL_V$ を q に演算すると消える

$$(-iL_V)q = \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \right) q = 0$$

$-iL_V$ を p に二回演算すると消える

$$(-iL_V)p = \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \right) p = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$(-iL_V)^2 p = \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \right) \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \right) = 0$$

※ $-iL_K$ も同様

p による偏微分

q だけの関数

シンプレクティック積分

$$U_K(h) = \exp(-ihL_K)$$

$$= 1 + (-ihL_K) + \frac{(-ihL_K)^2}{2} + \dots$$
$$= 1 + (-ihL_K)$$

ここがゼロなので

これ以降全部ゼロ

同様に $U_V(h) = \exp(-ihL_V) = 1 + (-ihL_V)$

$U(h) = \exp(-ihL)$ は厳密に求められないが

$\exp(-iL_K)$ や $\exp(-iL_V)$ は厳密に求めることができる

シンプレクティック積分

一般に演算子 A と B について

$$\exp(A + B) \neq \exp A \exp B$$

しかし、以下が成り立つ(Lie-Trotter公式)

$$\exp(A + B) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\exp(A/n) \exp(B/n))^n$$

有限の n で止めることで、以下の近似式を得る

一次の公式

$$\exp(h(A + B)) = \exp(hA) \exp(hB) + O(h^2)$$

二次の公式

$$\exp(h(A + B)) = \exp(hA/2) \exp(hB) \exp(hA/2) + O(h^3)$$

シンプレクティック積分

リュービル演算子を二つに分解する

$$-iL = -iL_V + -iL_K$$

求めたい時間発展演算子をLie-Trotter公式で分解する

$$U(h) = \exp(-ihL)$$

$$= \exp(-ih(L_V + L_K))$$

$$= \exp(-ihL_V) \exp(-ihL_K) + O(h^2)$$

$\tilde{U}_1(h)$ 一次近似された時間発展演算子

$$= \exp(-ihL_V/2) \exp(-ihL_K) \exp(-ihL_V/2) + O(h^3)$$

$\tilde{U}_2(h)$ 二次近似された時間発展演算子

シンプレクティック積分

厳密な時間発展

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = U(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \exp(-ihL) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

一次近似された時間発展

最初にこれを演算して

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = \tilde{U}_1(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \boxed{\exp(-ihL_K) \exp(-ihL_V)} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

次にこれを演算する

このように、指数分解公式で作られた時間発展演算子を使う
数値積分法を**シンプレクティック積分法**と呼ぶ

シンプレクティック積分

$U_V(h)$ を p に演算してみる

$U_K(h)$ を q に演算してみる

$$U_V(h)p = \exp(-ihL_V)p$$

$$U_K(h)q = \exp(-ihL_K)q$$

$$= (1 - ihL_V)p$$

$$= (1 - ihL_K)q$$

$$= \left(1 - h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}\right)p$$

$$= \left(1 + h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q}\right)q$$

$$= p - h \frac{\partial V}{\partial q}$$

$$= q + h \frac{\partial K}{\partial q}$$

p の時間を h だけ進める

q の時間を h だけ進める

それぞれ、お互いを無視して時間 h だけ運動

シンプレクティック積分

調和振動子の場合

p の時間を h だけ進める演算子

$$U_V(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p - hq \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -h \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

q の時間を h だけ進める演算子

$$U_K(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ q + hp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

二つともかけると

$$U_K(h)U_V(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \boxed{\begin{pmatrix} 1 & -h \\ h & 1 - h^2 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

行列式が1

シンプレクティック積分

(p, q) から (P, Q) への変換

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

において

$$dP dQ = dp dq$$

が満たされる時、この変換をシンプレクティック変換と呼ぶ

$$dP dQ = \begin{vmatrix} \partial_p P & \partial_q P \\ \partial_p Q & \partial_q Q \end{vmatrix} dp dq \quad \text{であるから}$$

シンプレクティック変換とは、変換のヤコビアンが1であること

※ 時間発展演算子を行列表示したときの行列式が1

シンプレクティック積分

二次の指数分解公式

$$\tilde{U}_2(h) = \underbrace{\exp(-ihL_V/2)}_{(3)} \underbrace{\exp(-ihL_K)}_{(2)} \underbrace{\exp(-ihL_V/2)}_{(1)}$$

- (1) 現在の力がそのまま続いたとして $h/2$ だけ時間を進める

$$p(t + h/2) = p(t) + \frac{f(t)}{2}$$

- (2) (1)で得た速度がそのまま続いたとして h だけ時間をすすめる

$$Q = q(t) + p(t + h/2)h$$

- (3) (2)の力がそのまま続いたとして $h/2$ だけ時間を進める

$$P = p(t + h/2) + f(t + h)h$$

シンプレクティック積分

$$\left\{ \begin{array}{l} p(t + h/2) = p(t) + \frac{f(t)}{2}h \\ Q = q(t) + p(t + h/2)h \\ P = p(t + h/2) + f(t + h)h \end{array} \right.$$

$p(t + h/2)$ を消去して整理するとVelocity Verlet公式を得る

$$\left\{ \begin{array}{l} Q = q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2} \\ P = p(t) + \frac{f(t + h) + f(t)}{2}h \end{array} \right.$$

Velocity Verlet法は、シンプレクティック積分

シンプレクティック積分のまとめ

- 数値積分とは、現在時刻 t の点 (p, q) から、時刻 $t + h$ の点 (P, Q) を得る写像である
- 写像を表す変換のヤコビアンが1であるとき、位相空間の体積が保存される。このような写像を**シンプレクティック写像**と呼ぶ
- 変換がシンプレクティック写像であるような数値積分法を**シンプレクティック積分**と呼ぶ
- シンプレクティック積分は、**Lie-Trotterの指数分解公式**から構築できる

$$dP dQ = dp dq$$

