

カロジェロ・モーザー模型の 全保存型差分法による数値計算の試み

Test of Numerical Calculation of Calogero-Moser Models by Totally Conservative Integrator

佐藤 哲†

Tetsu R. Satoh†

1. はじめに

全保存型差分法 [1] は、時間発展に対しハミルトン力学系の自由度の数だけの保存量を厳密に保存する数値解析法であり、保存量には必ずエネルギーを含む。そのためエネルギー保存則を含む物理的な原理に反しないことが保証され、離散化の刻み幅等の人為的なパラメータにそれほど依存せずに安定的な解を求めることが可能である。本発表では、超可積分系と呼ばれる古典的カロジェロ・モーザー模型に対し全保存型差分法を適用し、その定式化と計算結果について述べる。

2. 全保存型差分法 (TCI)

全保存型差分法 (以下、TCI: Totally Conservative Integrator) は、ハミルトニアンが次の形

$$H = \sum_{i=0}^{n-1} f_i(\mathbf{q})(p_i^2 + U_i(q_i)) \quad (1)$$

で表される Stäckel 系と呼ばれる可積分ハミルトン系に対し適用可能な手法である。ここで、 n は対象とする空間の次元、 q_i は空間の座標成分、 p_i は、座標成分に対応する運動量成分、 $U_i(q_i)$ はポテンシャルエネルギーである。また Stäckel 系は一定の条件を満たす Stäckel 行列と呼ばれる量 S を持つ。その条件は、以下で定義される：

$$\sum_{k=0}^{n-1} S_{ik}(q_k) f_k(\mathbf{q}) = \delta_{i0}, \quad i < n. \quad (2)$$

この Stäckel 系のハミルトンの正準方程式に対し、1 次の精度の TCI は以下のような差分スキームを用いる：

$$\begin{cases} p'_k = p_k - \tau f_k(\mathbf{q}) \frac{F_k(q'_k) - F_k(q_k)}{q'_k - q_k} \\ q'_k = q_k + \tau f_k(\mathbf{q})(p'_k + p_k) \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 τ は差分近似の刻み幅、関数 $F_k(q_k)$ 及びその中で用いられる保存量 I_l は次式で定義される：

$$F_k(q_k) = U_k(q_k) - \sum_{l=0}^{n-1} S_{lk} I_l, \\ I_l = \sum_{i=0}^{n-1} S^{-1T}_{il} (p_i^2 + U_i(q_i)).$$

$S_{<..>}$ は Stäckel 行列 S の成分を表す。

3. カロジェロ・モーザー模型

多体問題をモデル化したものと言えるカロジェロ・モーザー模型には多くの種類があるが、ここでは有理多項式のみで表される次のハミルトニアンを対象とする：

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{N-1} p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0, j \neq i}^{N-1} \frac{1}{(q_i - q_j)^2}. \quad (4)$$

ここで、 N は粒子の個数である。また、簡単のために各項に付随する係数は全て 1 とする。このハミルトニアンは、各粒子が互いに距離の 2 乗に反比例する斥力を及ぼしあう多粒子の 1 次元運動を表すものと考えることができる。

式 (1) によると TCI を適用するためには運動量成分の係数を 1 となるよう式を変形した時に、ポテンシャルエネルギーは運動量成分に対応した座標成分のみで構成されていなければならないが、カロジェロ・モーザー模型は式 (4) より座標成分が分離されていないため、適当な変換処理が必要となる。それが可能となれば、TCI には特異点を除去する機能があるため、式 (4) のような特異点 $q_i = q_j$ を持つ系には TCI が有効に働く可能性がある。

4. ハミルトニアン変換による TCI の適用

ここでは 2 粒子のカロジェロ・モーザー系を対象とする。従ってハミルトニアンは次のようになる：

$$H = \frac{1}{2} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{(q_x - q_y)^2}. \quad (5)$$

このハミルトニアンに TCI を適用するために、まず次のような線型正準変換を行う：

† 株式会社オプトリンクス, Optlynx Co.,Ltd.

$$\begin{cases} p_x = p_1 + p_2, & p_y = p_1 - p_2, \\ q_x = (q_1 + q_2)/2, & q_y = (q_1 - q_2)/2 \end{cases} \quad (6)$$

この変換により、ハミルトニアンは

$$H = p_1^2 + p_2^2 + q_2^{-2} \quad (7)$$

となる。そして文献[1]に従うと、拡張されたハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = p_1^2 + p_2^2 + q_2^{-2} - H_0 \equiv 0 \quad (8)$$

である。この系を式(1)と比べると、明らかに Stäckel 系であることが分かる。さらに、ハミルトニアン(8)は $q_2 = 0$ が特異点となるが、Stäckel 系の正準変換[2]を用いて特異点を除去することができる。ここでは次のような変換を採用する：

$$\tilde{\mathcal{H}} = q_2^2 \mathcal{H} = q_2^2 p_1^2 + q_2^2 p_2^2 + 1 - H_0 q_2^2. \quad (9)$$

このハミルトニアンを用いて TCI の差分スキームを構成すると次式を得る：

$$\begin{cases} p'_1 = p_1, \\ p'_2 = p_2 - \tilde{\tau}(1 - \tilde{\mathcal{H}}_0) \frac{q_2 + q'_2}{q_2^2}, \\ q'_1 = q_1 + \tilde{\tau}(p_1 + p'_1)q_2^2, \\ q'_2 = q_2 + \tilde{\tau}(p_2 + p'_2)q_2^2. \end{cases} \quad (10)$$

ここで $\tilde{\tau} = q_2^{-2}\tau$, (p'_1, p'_2, q'_1, q'_2) は (p_1, p_2, q_1, q_2) の次の時間ステップの値である。この差分スキームの打ち切り誤差に対する精度は1次である。これらの結果より、

- (I) (p_x, p_y, q_x, q_y) より式(6)を使い (p_1, p_2, q_1, q_2) を計算
- (II) スキーム(10)より次のステップの値を計算
- (III) 式(6)の逆変換により新たな (p_x, p_y, q_x, q_y) を得る

というループを実行することで2粒子カロジェロ・モーザー模型の粒子軌道を計算できる。

一方、ハミルトニアン(5)に、1次の陽的オイラー法を適用した場合の差分スキームは以下となる：

$$\begin{cases} p'_x = p_x + 2\tau(q_x - q_y)^{-3}, \\ p'_y = p_y - 2\tau(q_x - q_y)^{-3}, \\ q'_x = q_x + \tau p_x, \\ q'_y = q_y + \tau p_y. \end{cases} \quad (11)$$

図1に、TCIを用いて2粒子の軌道を計算した例を示す。横軸が位置座標、縦軸が時間軸を表す。このモデルは、2つの粒子が図の最下部から衝突するような運動量を持って発射され、衝突して運動量を交換し合って無限遠方に移動していく様子を表す。位置座標の差 $q_x - q_y$ が十分に大きい場合、ハミルトニアン(5)は近似的に $H = 1/2(p_x^2 + p_y^2)$ となるので、このモデルは等速直線運動に修正項が加わったものと言える。図では、実線が *Mathematica* を用いて精密に計算した座標で、円でプロットされている差分

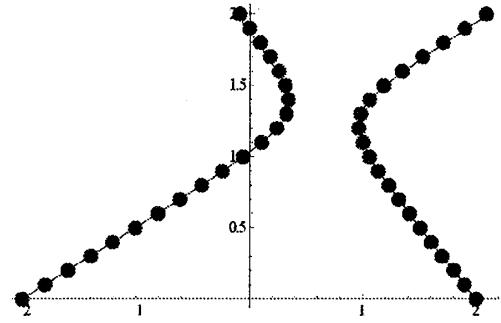


図1: 全保存型差分法による計算例

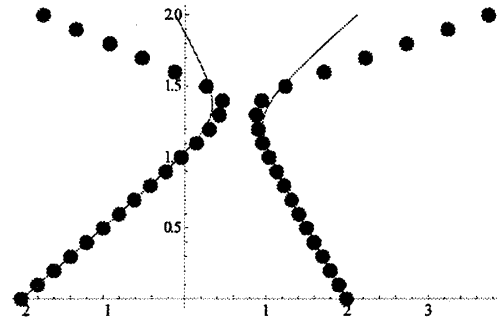


図2: 陽的オイラー法による計算例

スキームにより計算した座標が精密な計算結果を離散的に再現していることが分かる。図2は図1の計算に用いた初期値・パラメータと同じ値を使ってオイラー法により計算した例で、明らかに不正確な結果が得られている。用いたパラメータは、初期値が $(p_x, p_y, q_x, q_y) = (2, -1, -2, 2)$ で、刻み幅は $\tau = 0.1$ である。

実験に用いた計算機はCPUが Intel Core 2 Duo 1.8GHz で OS は Microsoft Windows XP、プログラムは *Mathematica* を用いた。計算時間は図1, 図2共に1秒未満であった。

5. おわりに

ハミルトニアンに変数変換を施すことで、カロジェロ・モーザー模型に全保存型差分法が適用可能であり、良好な数値計算結果が得られることを示した。より複雑なカロジェロ・モーザー模型に対し適用できるように、手法を拡張することが今後の課題である。

参考文献

- [1] Minesaki, Y. and Nakamura, Y.: New Numerical Integrator for the Stäckel System Conserving the Same Number of Constants of Motion as the Degree of Freedom, *J. Phys. A: Math. Gen.*, Vol. 39, pp. 9453-9476 (2006).
- [2] Tsiganov, A. V.: Canonical Transformations of the Extended Phase Space, Toda lattices and Stäckel Family of Integrable Systems, *J. Phys. A: Math. Gen.*, Vol. 33, No. 22, pp. 4169-4182 (2000).