多様体上の構造保存型スキーム

竹田航太

2022 年 3 月 14 日

目次

1 概要

多様体上の微分方程式の離散化において，系の保存則や対称性などの構造を離散化後も保つスキームを整理する．最も基本的な構造は点が多様体上にあり続けることである．その次に対称性や Symplectic 性などの構造が考えられる．これらの構造をもつ方程式系を考え，離散化後も一部または全部の構造を保つスキームを順にまとめる．

本稿は主に [1] を参考にしている．また，多様体上の Hamiltonian Monte Carlo を考える際の必要性からこのようなスキームについて整理している．

多様体上のスキームについて以下を扱う．下に行くほど方程式系のより多くの構造を保つ．

(1) Standard Projection [1, IV.4]
(2) Local Coordinates Method [1, IV.5]
(3) Symmetric Projection [1, V.4]
(4) Symplectic Integration / RATTLE [1, VII.1]

2　多様体上の微分方程式系

2 つの自然数 $d > m \in \mathbb{N}$ について，滑らかな関数 $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^m$ の零点で表される多様体 $\mathcal{M}$ を考える．

$$\mathcal{M} = \{y \in \mathbb{R}^d \mid g(y) = 0\}$$

いま，$\mathbb{R}^d$ 上の微分方程式

$$\dot{y} = f(y) \tag{2.1}$$

について

$$y(0) \in \mathcal{M} \Rightarrow \forall t, y(t) \in \mathcal{M} \tag{2.2}$$

という条件を考える．いま，g のヤコビアンを g' とかくと (2.2) $\Leftrightarrow$ $g'(y)f(y) = 0, \forall y \in \mathcal{M}$ が成り立つ．この条件を満たす g を weak invariant という．より強い条件として invariant(first integral) がある．(2.1) に対して，任意の $y \in \mathbb{R}^d$ で

$$I'(y)f(y) = 0$$

が成り立つ $I : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ を (2.1) の first integral または invariant という．

以降，多様体上の微分方程式系について g が weak invariant となることを仮定する．

2.1　Constrainted Mechanical System

Lagrange 形式で多様体上の方程式系を書く．多様体の記号を変える．$Q = \{q \in \mathbb{R}^d \mid g(q) = 0\}$ $(q_1, \ldots, q_d) \in Q$ に対して，運動エネルギー $T(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}\dot{q}M(q)\dot{q}$，ポテンシャル $U(q)$ を考える．Lagrangian を次のようにおく．

$$L(q, \dot{q}) = T(q, \dot{q}) - U(q) - g(q)^\top \lambda. \tag{2.3}$$

ただし，$\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m$ は Lagrange 未定乗数である．多様体上という制約の下で Euler-Lagrange 方程式は次のように書ける．

$$\begin{cases} \dot{q} = v \\ M(q)\dot{v} = f(q, v) - G(q)^\top \lambda \\ 0 = g(q) \end{cases} \tag{2.4}$$

ただし，$f(q, v) = -\frac{\partial}{\partial q}(M(q)v)v + \nabla_q T(q, v) - \nabla_q U(q)$, $G(q) = \frac{\partial g}{\partial q}(q)$ とおいた．

(2.4) は，$\operatorname{rank} G(q) = m$ で $M(q)$ が $\ker G(q)$ 上で可逆であるときに λ を消去して，q, v についての ODE に帰着できる．解の構成の詳細については [1] の VII.1 を見よ．

次に多様体の接バンドル上の微分方程式として Euler-Lagrange 方程式 (2.4) を書き直す．$q \in Q$ に対して，接空間を $T_qQ = \{v \mid G(q)v = 0\}$ で定める．また，接バンドルを $TQ = \{(q, v) \mid q \in Q, v \in T_qQ\}$ で定める．(2.4) は初期値 $q_0, v_0 \in TQ$ に対して TQ 上の ODE として書ける．

2.2 Hamilton Formulation

(2.4) を Hamilton 形式で書き直す．速度 $v = \dot{q}$ の代わりに運動量 $p = \frac{\partial L}{\partial q} = M(q)\dot{q}$ を導入する．(2.4) は次のように書ける．

$$\begin{cases} \dot{q} = H_p(q, p) \\ \dot{p} = -H_q(q, p) + G(q)^\top \lambda \\ 0 = g(q) \end{cases} \tag{2.5}$$

ただし，Hamiltonian を $H(q, p) = \frac{1}{2}p^\top M(q)p + U(q)$ とおいた．第 3 式を時間で 2 回微分すると

$$0 = G(q)H_p(q, p) \tag{2.6}$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial q}(G(q)H_p(q, p))H_p(q, p) - G(q)H_{pp}(q, p)(H_q(q, p) + G(q)^\top \lambda) \tag{2.7}$$

となるので

$$G(q)H_{pp}(q, p)G(q)^\top \text{が可逆}. \tag{2.8}$$

を仮定すると λ は (q, p) を用いて表せる．この条件 (2.8) は前節での ODE への帰着条件が成り立てば成り立つ．

次に多様体上の Hamilton 形式を余接バンドル上の ODE として書き直す．まず，λ を消去すると (2.5) は次の $\mathcal{M}$ 上の ODE として書ける．

$$\mathcal{M} = \{(q, p) \mid g(q) = 0, G(q)H_p(q, p) = 0\} \tag{2.9}$$

$$\begin{cases} \dot{q} = H_p(q, p) \\ \dot{p} = -H_q(q, p) + G(q)^\top \lambda(q, p) \end{cases}$$

この多様体 $\mathcal{M}$ は実は Q の余接バンドルである．$q \in Q$ に対して，余接空間を $T_q^*Q = \{M(q)v \mid v \in T_qQ\}$ と定める．さらに，余接バンドルを $T^*Q = \{(q, p) \mid q \in Q, p \in T_q^*Q\}$ と定めると $\mathcal{M} = T^*Q$ であることが簡単な計算でわかる．

3 スキーム

3.1 Standard Projection

[1, IV.4] 単に $q(t) \in Q$ を保つ．

3.2 Symmetric Projection

[1, V.4]（時間反転）対称性を持つ微分方程式に対して，対称なスキームを応用して $q(t) \in Q$ と対称性を保つ．

3.3 Symplectic Integration / RATTLE

[1, VII.1] 多様体上の Hamilton 方程式に対して，$(q(t), p(t)) \in T^*Q$ を保ちかつ symplectic 性と対称性も保つ．$(q_n, p_n) \in \mathcal{M}$ に対して，次のように定義する．

$$\begin{cases} p_{n+\frac{1}{2}} & = p_n - \frac{h}{2}(H_q(q_n, p_{n+\frac{1}{2}}) + G(q_n)^\top \lambda_n) \\ q_{n+1} & = q_n + \frac{h}{2}(H_p(q_n, p_{n+\frac{1}{2}}) + H_p(q_{n+1}, p_{n+\frac{1}{2}})) \\ 0 & = g(q_{n+1}) \\ p_{n+1} & = p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2}(H_q(q_{n+1}, p_{n+\frac{1}{2}}) + G(q_{n+1})^\top \mu_n) \\ 0 & = G(q_{n+1})^\top H_p(q_{n+1}, p_{n+1}). \end{cases} \tag{3.1}$$

ここで，$(p_{n+\frac{1}{2}}, \lambda_n, \mu_n) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$ は中間変数である．

$M \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ を正定値として Hamiltonian が $H(q,p) = U(q) + \frac{1}{2}p^\top M^{-1} p$ という形であるとき，このスキームは次のように書け RATTLE と呼ばれる．

$$\begin{cases} p_{n+\frac{1}{2}} & = p_n - \frac{h}{2}(U_q(q_n) + G(q_n)^\top \lambda_n) \\ q_{n+1} & = q_n + hM^{-1} p_{n+\frac{1}{2}} \\ 0 & = g(q_{n+1}) \\ p_{n+1} & = p_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2}(U_q(q_{n+1}) + G(q_{n+1})^\top \mu_n) \\ 0 & = G(q_{n+1})^\top M^{-1} p_{n+1} \end{cases} \tag{3.2}$$

参考文献

[1] Ernst Hairer, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. *Geometric Numerical Integration*, volume 31 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2006.