ハミルトン力学系の数値計算について

ハミルトン力学系の数値計算について

片山登揚 *　森岡純也 **

On Numerical Calculation of Hamiltonian Dynamical Systems

Noriaki KATAYAMA and Junya MORIOKA

ABSTRACT

In this short article, we discuss some difference schemes, such as Euler scheme, Runge-Kutta scheme and symplectic integrator, from the viewpoints of dynamical systems. It is well known that for Hamiltonian dynamical systems enengy consevation law is valid. The other property for Hamiltonian dynamical systems is known as Liouville's theorem which means volume preservation in phase space. The third one is that the flow in phase space for our dynamical systems can be regarded as a canonical transformation, which means that symplectic structure is conserved. For the difference equations derived from Hamilton's equations are also expected to be satisfied with the properties mentioned above. For natural Hamiltonian dynamical systems with two-degree-of freedom, potential functions are determined so that each difference scheme may keep those properties.

Key Words: Hamiltonian dynamical systems, numerical calculation, Runge-Kutta method, symplectic integrator, energy consevation, symplectic structure

1．はじめに

力学系の解析においては，運動方程式が与えられたとき，その解が陽に求められることは一般に期待できない．そこで，計算機による数値計算法が適用されその数値計算結果により力学系を考察することになる．そこでは，与えられ微分方程式を差分方程式に書き換える差分化の手続きが必要になってくる．以下，本報告書では力学系の中でもハミルトン力学系を考察対象とする．従って，運動方程式は正準方程式で表され，連立常微分方程式の数値計算の問題となる．

さて，ハミルトン力学系においては，以下の４点の重要な性質が知られている．第１点は，ハミルトン関数が時間変数を陽に含まないときは，ハミルトン関数が保存量（第一積分，運動の恒量ともよぶ.）となっている点である．つまり，エネルギー保存の法則が成立している．次に，第２点は対応するラグランジュ関数の作用積分の極値を運動方程式は与えている点である．これは，変分原理またはハミルトンの原理と呼ばれている．さらに第３点は，Liouville　の定理として知られている相空間における体積保存の性質である．最後に，第４点は相空間における力学系の流れが，正準変換となっている点である．これは，流れに沿ってシンプレクティック構造が保存されるとも言い換えられる．

これらのハミルトン力学系の重要な性質を差分化の手続きによって得られた差分方程式が満たしているかどうかは重要な問題である．ただし，差分化によって得られた差分方程式は，ある離散力学系の運動方程式と見なされて，連続系のものとは異なる系であるとする立場も考えられるが，ここでは，連続系の性質が離散系にも継承されるべきだとする立場をとっている．

１９９９年４月１４日受理

＊システム制御工学科(Department of Systems and Control Eng.)

＊＊:平成１１年３月本校システム制御工学科卒業 (Graduation from Department of S. and C. Eng.)

さて，差分化の方法にはいろいろある．つまり，常微分方程式の独立変数である時間変数を，差分化することにより得られる差分方程式は，時間差分幅を０とする極限においてもとの常微分方程式に一致すればいいという要請からいろいろな差分化が考えられる．古典力学の性質に着目した研究は多く発表されている [1,2,3]．ここでは，オイラー法，２次のルンゲクッタ法，１次のシンプレクティック法（以下１次のＳＩ法とかく），２次のシンプレクティック法（以下２次のＳＩ法とかく）の４つの差分化の方法について，上述のような力学系の観点から考察する．ただし，ここで用いるＳＩ法は，吉田によって提案された差分スキームを用いる [4]．次に，考察対象とするハミルトン力学系は自由度２の自然ハミルトン系とし，各差分方法がハミルトン力学のそれぞれの性質を満たすための，ポテンシャル関数を決定する．

本小論では，総和の規約を用いることとする．また，本小論の構成は以下のようである．まず第２節でハミルトン力学系の性質について簡単に述べる．第３節では，４つの差分法をそれぞれ自由度２の自然ハミルトン系に対して，適用したときを考察し，同時にポテンシャル関数の満たすべき条件を明らかにする．第４節で結言を与える．

２．ハミルトン力学系

本節では，次節以降の差分化の持つべき性質と考える古典力学系の性質について簡単に説明する．

２．１　オイラー・ラグランジュの方程式

自由度nの力学系において，一般化座標を(q^i)，一般化速度を$(\dot{q}^i)$,　$(i=1,\cdots n)$とするとき，力学系のラグランジアンLは次式で定義される．

$$L(q,\dot{q})=T-V\ . \qquad (2.\ 1)$$

ここで，Tは運動エネルギーを表し，Vはポテンシャルエネルギー（位置エネルギー）を表す．このとき，力学系の運動方程式は，次のオイラー・ラグランジュの方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right)-\frac{\partial L}{\partial q^i}=0, \qquad (2.\ 2)$$

で与えられる．オイラー・ラグランジュの運動方程式は座標系の選び方によらず，（２．１）式の形をとるという特徴がある．すなわち，次のような変数変換（座標変換）によって，方程式を解きやすいような形に変換する事が考えられる．つまり，変換前の変数を(q^i)，変換後の変数を(Q^i)とするとき，次式のような

$$\begin{aligned} q^1 &= q^1(Q^1,\cdots,Q^n) \\ &\vdots \\ q^n &= q^n(Q^1,\cdots,Q^n) \end{aligned} \qquad (2.\ 3)$$

変換のもとでは，オイラー・ラグランジュの方程式は形を変えない．ここで，注意すべきことは，（２．３）式の右辺にはQ^iの時間微分が含まれていないということである．つまり，すでに述べたように物理的にいえば，位置をあらわす変数間の変換に限られる．この枠組みをさらに広げて，さらに一般の変数変換においても方程式の形を変えない力学の形式が次項に述べるハミルトン形式である．

２．２ ハミルトンの方程式（正準方程式）

まず，最初に一般化座標(q^i)と一般化速度$(\dot{q}^i)$から一般化運動量(p_i)を

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \qquad (2.\ 4)$$

で定義する．（２．４）を用いて，$(\dot{q}^i)$をqとpで表すことができるとし，ハミルトン関数Hは

$$H=\sum_{i=1}^{n} p_i\dot{q}^i-L \qquad (2.\ 5)$$

で定義されるqとpの関数である．ハミルトン関数より，ハミルトンの正準方程式は

$$\dot{q}^i=\frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q^i} \qquad (2.\ 6)$$

で与えられる．

２．３ ハミルトン力学系の性質

２．３．１　エネルギー保存の性質

ハミルトン関数は力学系の全エネルギーと見なすことができ，運動に沿って保存される性質がある．これをエネルギー保存の性質と呼ぶ．ここで，ハミルトン関数は時間変数tを陽に含まないものとする．このとき，

$$\frac{dH}{dt}=\frac{\partial H}{\partial q^i}\frac{dq^i}{dt}+\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}$$

より，正準方程式（２．６）を上式に代入すれば，

$$\frac{dH}{dt}=\frac{\partial H}{\partial q^i}\frac{\partial H}{\partial p_i}+\frac{\partial H}{\partial p_i}\left(-\frac{\partial H}{\partial q^i}\right)=0 \qquad (２．７)$$

となり，エネルギー保存の法則が導かれる．

２．３．２　ハミルトンの原理

ラグランジュの運動方程式は，ラグランジアンLが与えられたとき，次の積分

$$I\equiv\int_{t1}^{t2}L(q,\dot{q})dt \qquad (２．８)$$

で定義される作用積分Iの極値を与える．これを，ハミルトンの原理または変分原理とよぶ．

２．３．３　リュービルの定理

一般化座標(q^i)と一般化運動量(p_i)のなす$2n$次元の空間を位相空間または相空間と呼ぶ．このとき，運動方程式に伴う，一般化座標(q^i)と一般化運動量(p_i)の時間発展は位相空間内の曲線を表す．このとき， 位相空間内において，(q^i)と(p_i)によって作られる体積要素$\prod_{i=1}^{n}dq^idp_i$は時間発展に対して不変である．これを，リュービルの定理と呼ぶ．つまり，運動方程式に伴う相空間内の任意の時間発展Δt後の変数のうち，一般化座標を(Q^i)，一般化運動量を(P_i)とする．

$$Q^i=q^i(t+\Delta t),\qquad P_i=p_i(t+\Delta t) \qquad (２．９)$$

このとき，変数変換のヤコビアンをJとして，

$$\prod_{i=1}^{n}dQ^idP_i=J\prod_{i=1}^{n}dq^idp_i \qquad (２．１０)$$

となる．

つまり，

$$J=\left|\frac{\partial(Q^1,\cdots,P_n)}{\partial(q^1,\cdots,p_n)}\right|=\begin{vmatrix}\frac{\partial Q^1}{\partial q^1} & \cdots & \frac{\partial Q^1}{\partial p_n}\\ \vdots & \cdots & \vdots\\ \frac{\partial P_n}{\partial q^1} & \cdots & \frac{\partial P_n}{\partial p_n}\end{vmatrix} \qquad (２．１１)$$

とおくとき，リュービルの定理は

$$J=1 \qquad (２．１２)$$

と表される．

２．３．４　正準変換

ハミルトン系の運動方程式は，正準方程式（２．６）で表されるが，どのような変数変換のもとで正準方程式が形を変えないかを調べるのが正準変換の理論である．変数変換を

$$q^1=q^1(Q^1,\cdots,Q^n,P_1,\cdots,P_n)$$
$$\vdots$$
$$q^n=q^n(Q^1,\cdots,Q^n,P_1,\cdots,P_n)$$
$$p_1=p_1(Q^1,\cdots,Q^n,P_1,\cdots,P_n)$$
$$\vdots$$
$$p_n=p_n(Q^1,\cdots,Q^n,P_1,\cdots,P_n)$$

とかくとき，微分形式を用いると

$$\sum_{i=1}^{n}dp_i\wedge dq^i=\sum_{i=1}^{n}dP_i\wedge dQ^i \qquad (２．１３)$$

を満たす変換が正準変換となる．つまり，新しい変数(Q^i)と(P_i)を用いても運動方程式は（２．６）の正準方程式の形をとる．さて，リュービルの定理と同様に運動方程式に伴う一般化座標と一般化運動量の時間発展を変数変換と見なすとき，正準変換となり（２．１３）式が成立することが示される．つまり，運動方程式の解は正準変換となっているといえる．

３．力学系の性質と４つの差分法

この節では，第２節で述べたハミルトン力学系の４つの性質といくつかの差分化により得られた差分方程式との関係を調べる．考察対象としては，自由度２の自然ハミルトン系を考え，力学系の性質を満たすべきポテンシャル関数の形を決定する．自由度２の自然ハミルトン系

とは次の形のハミルトン関数をもつ力学系である．

$$H=\frac{1}{2}\left\{(p_1)^2+(p_2)^2\right\}+V(q^1,q^2) \quad (3.\ 1)$$

ここで，$V(q^1,q^2)$ はポテンシャル関数である．運動方程式は正準方程式から

$$\dot{q}^i=p_i, \qquad \dot{p}i=-\frac{\partial V}{\partial q^i} \qquad (i=1,2) \quad (3.\ 2)$$

となる．

以下，式（3．2）を4つの差分法で差分化して，力学系の性質をどの程度保存しているかを調べる．また，以下の議論では，特にことわらない限り添え字i,j,kは1または2をあらわす．

3．1　オイラー法

オイラー法は，微分方程式

$$\frac{dy}{dx}=f(x,y) \quad (3.\ 3)$$

が与えられたとき，

$$y(x+\Delta x)=y(x)+f(x,y(x))\Delta x \quad (3.\ 4)$$

の差分式で与えられる差分法である．ここで，Δx は独立変数 x の差分幅をあらわす．したがって，（3．2）は次の差分式となる．

$$\begin{aligned} q^i(t+\Delta t)&=q^i(t)+p_i(t)\Delta t \\ p_i(t+\Delta t)&=p_i(t)-\frac{\partial V}{\partial q^i}(q^1(t),q^2(t))\Delta t \end{aligned} \quad (3.\ 5)$$

まず，最初にエネルギー保存の性質を調べる．（3．5）とハミルトニアン（3．1）より，

$$\begin{aligned} &H(p_i(t+\Delta t),q^i(t+\Delta t)) \\ &=H(p_i(t),q^i(t))+\frac{(\Delta t)^2}{2}\left\{\left(\frac{\partial V}{\partial q^1}\right)^2+\left(\frac{\partial V}{\partial q^2}\right)^2\right\}+ \\ &\frac{(\Delta t)^2}{2}\left\{2\frac{\partial^2 V}{\partial q^1\partial q^2}p_1p_2+\frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2}{p_1}^2+\frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2}{p_2}^2\right\} \\ &+\mathrm{O}(\Delta t^3) \end{aligned} \quad (3.\ 6)$$

となる．ここで，$\mathrm{O}(\Delta t^3)$ は，Δt^3 以上のオーダーを表す．したがって，一般にエネルギーは保存されない．特にエネルギーが保存されるためには，必要条件として以下の微分方程式を満たさなければならない．

$$\begin{aligned} &\left\{\frac{\partial V}{\partial q^1}\right\}^2+\left\{\frac{\partial V}{\partial q^2}\right\}^2=0 \\ &\frac{\partial^2 V}{\partial q^1\partial q^2}=0 \\ &\frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2}=0 \\ &\frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2}=0 \end{aligned} \quad (3.\ 7)$$

これらの偏微分方程式を解くことにより，

$V=$ 定数

がえられる．逆にこのときは，エネルギーが保存されることが示される．つまり，力学的には，自由運動のときのみ，エネルギーが保存される．

次に，リュービルの定理を調べる．（2．11）式のヤコビアンは，（3．5）より次のようになる．

$$\begin{aligned} J=1&+\left(\frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2}+\frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2}\right)\Delta t^2 \\ &+\left(\frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2}\frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2}-\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q^1\partial q^2}\right)^2\right)\Delta t^4 \end{aligned} \quad (3.\ 8)$$

したがって，リュービルの定理も一般に成立しない．特にリュービルの定理が成り立つためには，以下の偏微分方程式が成立することが必要十分である．

$$\frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2}+\frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2}=0$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2}\frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2}-\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q^1\partial q^2}\right)^2=0$$

これらの連立偏微分方程式を解くことによって，次のポテンシャル関数が得られる．ただし，c_1,c_2,c_3 は定数である．

$$V=c_1q^1+c_2q^2+c_3 \quad (3.\ 9)$$

さらに，オイラー法が変分原理を満たすかどうかを調

べる．まず，$q^i{}_n = q^i(t+n\Delta t)$ とおき，離散ラグランジアン L_n を次のように定義する．

$$L_n = \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{q^1_{n+1}-q^1_n}{\Delta t}\right)^2 + \left(\frac{q^2_{n+1}-q^2_n}{\Delta t}\right)^2\right\} - V(q^1_n, q^2_n) \tag{3.10}$$

このとき作用積分 I は次のように与えられるとする．

$$I = \sum_n L_n \Delta t \tag{3.11}$$

したがって，$q^i{}_n$ が I の極値を与える条件

$$\frac{\partial I}{\partial q^i_n} = 0$$

から

$$\frac{\partial V(q^1_n, q^2_n)}{\partial q^i_n} = \frac{-q^i_{n+1} - q^i_{n-1} + 2q^i_n}{\Delta t^2} \tag{3.12}$$

が導かれる．他方，オイラー差分（３．５）より導かれる差分式は

$$\frac{\partial V(q^1_n, q^2_n)}{\partial q^i_n} = \frac{-q^i_{n+2} - q^i_n + 2q^i_{n+1}}{\Delta t^2} \tag{3.13}$$

となり，一般に変分原理は満たさない．特に，ポテンシャル関数が

$$V = c_1 q^1 + c_2 q^2 + c_3 \tag{3.14}$$

で与えられるときは，（３．１２）の左辺が n によらない定数となり，変分原理を満たすということが言える．

最後に，差分式の時間発展が正準変換となっているかを調べる．第 2 節で述べたように２次微分形式を調べると次のようになる．

$$\begin{aligned} d\tilde{p}_i \wedge d\tilde{q}^i &= dp_i \wedge dq^i \\ &+ (\Delta t)^2\left(\frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2} dp_1 \wedge dq^1 + \frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2} dp_2 \wedge dq^2\right) \\ &+ (\Delta t)^2\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q^1 \partial q^2}\right)\left(dp_1 \wedge dq^2 + dp_2 \wedge dq^1\right) \end{aligned} \tag{3.15}$$

ここで，$\tilde{p}_i$ と $\tilde{q}^i$ は

$$\tilde{p}_i = p_i(t+\Delta t), \qquad \tilde{q}^i = q^i(t+\Delta t) \tag{3.16}$$

とする．したがって，オイラー法では一般に時間発展は正準変換とはなっていない．とくに，（３．１５）から，ポテンシャル関数が（３．１４）で与えられることは，正準変換となるための必要十分条件であることが分かる．

３．２　２次のルンゲ・クッタ法

オイラー法と同様に２次のルンゲ・クッタ法についても力学系の観点から調べる．用いる記号はオイラー法の時と同じ意味である．

２次のルンゲ・クッタ法とは，微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \tag{3.17}$$

が与えられたとき，

$$\begin{aligned} y(x+\Delta x) &= y(x) + \\ & f\left(x + \frac{\Delta x}{2}, y(t) + \frac{1}{2}\Delta x f(x,y)\right)\Delta x \end{aligned} \tag{3.18}$$

の差分式で与えられる差分法である．したがって，方程式（３．２）から

$$\begin{aligned} q^i(t+\Delta t) &= q^i(t) + p_i(t)\Delta t \\ &\quad -\frac{1}{2}(\Delta t)^2\left(\frac{\partial V}{\partial q^i}(q^1(t), q^2(t))\right) \\ p_i(t+\Delta t) &= p_i(t) - \\ &\quad \frac{\partial V}{\partial q^i}(q^1(t) + \frac{\Delta t}{2}p_1(t), q^2(t) + \frac{\Delta t}{2}p_2(t))\Delta t \end{aligned} \tag{3.19}$$

が差分式となる．まず，エネルギー関数つまりハミルトン関数の時間変化をしらべると，長い計算から

$$\begin{aligned} &H(p_i(t+\Delta t), q^i(t+\Delta t)) = \\ &H(p_i(t), q^i(t)) + \frac{(\Delta t)^3}{24}\left\{\frac{\partial^3 V}{\partial (q^1)^3} p_1{}^3 + \frac{\partial^3 V}{\partial (q^2)^3} p_2{}^3\right\} \\ &+ \frac{(\Delta t)^3}{8}\left\{\frac{\partial^3 V}{\partial (q^1)^2 \partial q^2} p_1{}^2 p_2 + \frac{\partial^3 V}{\partial q^1 (\partial q^2)^2} p_1 p_2{}^2\right\} \\ &+ \mathrm{O}(\Delta t^4) \end{aligned} \tag{3.20}$$

を得るので，エネルギー保存の性質は一般には満たさな

い．オイラー法の時と同様に，エネルギー保存を満たすためには，一般化運動量 p_i の独立性から

$$\frac{\partial^3 V}{\partial (q^1)^3}=0,\quad \frac{\partial^3 V}{\partial (q^2)^3}=0,\quad \frac{\partial^3 V}{\partial (q^1)^2\partial q^2}=0,\quad \frac{\partial^3 V}{\partial q^1(\partial q^2)^2}=0, \qquad (3.21)$$

が必要条件であるが，これらの偏微分方程式を解くことにより

$$V=c_i q^i+c_3+d_{jk}q^j q^k$$

がポテンシャル関数の必要条件として得られる．ここで，$c_i, d_{jk}, (i=1,2,3, j,k=1,2)$ は定数である．このポテンシャル関数を（３．２０）の右辺に代入することから，エネルギー保存のための十分条件として（３．９）の１次式の形のポテンシャル関数をえる．つまりポテンシャルから導かれる力が一定の時にエネルギー保存は成立する．この結果は，オイラー法の時の結果 $V=$ 定数 に対して差分近似の次数が１次高くなったことに相当している．

次に，リュービルの定理に調べる．リュービルの定理に現れるヤコビアン（２．１１）式は差分式（３．１９）より得られる．しかし，計算結果が非常に長いのでここでは示さずに，$J=1$ となるためのポテンシャルの満たすべき必要十分を示しておく．やはり，一般にはリュービルの定理は成立せず，ポテンシャル関数が（３．９）の１次式であることが，リュービルの定理を成立させるための必要十分条件であることが示される．

さらに，オイラー法のときと同様に，変分原理と時間発展が正準変換となる２つの性質はともに，ポテンシャル関数が（３．９）の１次式であることがこれらの２つの性質を満たすための必要十分であることが示される．

３．３　１次のシンプレクティック法

１次のＳＩ法について，力学系の性質を保存しているかを以下調べる．まず，一般のハミルトニアンに対しては，１次のＳＩ法差分式は以下（３．２２）で示されるように，陰解法となっている．

$$\begin{aligned} q^i(t+\Delta t)&=q^i(t)+\Delta t\frac{\partial H}{\partial p_i}\left(q^i(t+\Delta t),p_i(t)\right)\\ p_i(t+\Delta t)&=p_i(t)-\Delta t\frac{\partial H}{\partial q^i}\left(q^i(t+\Delta t),p_i(t)\right)\end{aligned} \qquad (3.22)$$

ところが，我々の考察する自然ハミルトン系では，次のような差分式となり陽な解法となる．

$$\begin{aligned} q^i(t+\Delta t)&=q^i(t)+\Delta t p_i(t)\\ p_i(t+\Delta t)&=p_i(t)-\Delta t\left.\frac{\partial V}{\partial q^i}\right|_{q=q(t+\Delta t)}\end{aligned} \qquad (3.23)$$

この差分式に対して，オイラー法の時と全く同様にして４つの性質をしらべる．まず，エネルギー保存については，ハミルトン関数の時間発展が

$$\begin{aligned} &H(p_i(t+\Delta t),q^i(t+\Delta t))=\\ &H(p_i(t),q^i(t))+(\Delta t)^2\left\{\left(\frac{\partial V}{\partial q^1}\right)^2+\left(\frac{\partial V}{\partial q^2}\right)^2\right\}\\ &-\frac{(\Delta t)^2}{2}\left\{\frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2}{p_1}^2+\frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2}{p_2}^2+2\frac{\partial^2 V}{\partial q^1\partial q^2}p_1p_2\right\}\\ &+\mathrm{O}(\Delta t^3)\end{aligned} \qquad (3.24)$$

となる．従って，エネルギー保存のためには

$$\left(\frac{\partial V}{\partial q^1}\right)^2+\left(\frac{\partial V}{\partial q^2}\right)^2=0,\qquad \frac{\partial^2 V}{\partial (q^1)^2}=0,\qquad \frac{\partial^2 V}{\partial (q^2)^2}=0,\qquad \frac{\partial^2 V}{\partial q^1\partial q^2}=0 \qquad (3.25)$$

を満たすことが必要条件となり，連立の偏微分方程式から，$V=$ 定数の条件が得られる．逆に，$V=$ 定数はエネルギー保存のための十分条件でもあることは容易に示される．

また，変分原理ついては差分式が（３．１２）式を満たすかを確認すればよい．差分式（３．２３）から容易に(3.12)を導くことができ，１次のＳＩ法は離散型の変分原理を満たすことが示される．

同様に，時間発展が正準変換となる性質は，少しの計算で

$$\sum_{i=1}^{2}dq^i(t+\Delta t)\wedge dp_i(t+\Delta t)=\sum_{i=1}^{2}dq^i(t)\wedge dp_i(t)$$

（３．２６）

が成立することが示される．また，（２．１１）に対応するヤコビアンも

$$J = 1 \qquad (3.27)$$

となる．つまり，任意のポテンシャル関数について，リュービルの定理が成立し，また，差分の時間発展が正準変換となっていることがわかる．

３．４　２次のシンプレクティック法

２次のシンプレクティック法の差分式は，考察対象とする自然ハミルトン系においては，次の形をとる．ただし，$\hat{q}, \hat{p}$ は中間変数である．

$$\hat{q}^i = q^i(t) + \frac{\Delta t}{2} p_i(t),$$

$$\hat{p}_i = p_i(t) - \Delta t \left. \frac{\partial V}{\partial q^i} \right|_{q^i = \hat{q}^i}, \qquad (3.28)$$

$$q^i(t + \Delta t) = \hat{q}^i + \frac{\Delta t}{2} \hat{p}_i,$$

$$p_i(t + \Delta t) = \hat{p}_i.$$

吉田によって示された２次のＳＩ法で一般には，パラメーメタを含んでいるがここでは適当に数値を仮定した差分式を用いている．

１次のＳＩ法のときと同様に，エネルギー保存則から調べると，差分式（３．２８）より

$$H(p_i(t + \Delta t), q^i(t + \Delta t)) =$$

$$H(p_i(t), q^i(t)) + \frac{(\Delta t)^3}{24} \left\{ \frac{\partial^3 V}{\partial (q^1)^3} p_1{}^3 + \frac{\partial^3 V}{\partial (q^2)^3} p_2{}^3 \right\}$$

$$+ \frac{(\Delta t)^3}{8} \left\{ \frac{\partial^3 V}{\partial (q^1)^2 \partial (q^2)} p_1{}^2 p_2 + \frac{\partial^3 V}{\partial (q^1) \partial (q^2)^2} p_1 p_2{}^2 \right\}$$

$$+ \mathrm{O}(\Delta t^4)$$

（３．２９）

となる．従って，エネルギー保存則は成立しない．エネルギー保存が成立するためには，（３．２９）より次の条件が必要条件として得られる．

$$\frac{\partial^3 V}{\partial (q^1)^3} = 0, \qquad \frac{\partial^3 V}{\partial (q^2)^3} = 0,$$

（３．３０）

$$\frac{\partial^3 V}{\partial (q^1)^2 \partial (q^2)} = 0, \qquad \frac{\partial^3 V}{\partial (q^1) \partial (q^2)^2} = 0.$$

条件（３．３０）は２次のルンゲクッタの時のエネルギー保存が成立するための必要条件と同じであり，V は q^i の２次以下の多項式で表される．この必要条件として求まったポテンシャル関数から，再び（３．２９）式を計算して，エネルギー保存が成立するための必要十分条件として，（３．９）式の１次式を得る．

次に，変分原理については，差分式（３．２８）から p_i を消去して q^i の２階差分式を書き下すことで

$$\frac{-q^i_{n+1} - q^i_{n-1} + 2q^i_n}{\Delta t^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial V}{\partial q^i} \left(q^i_n + \frac{\Delta t}{2} p^i_n \right)$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\partial V}{\partial q^i} \left(q^i_{n-1} + \frac{\Delta t}{2} p^i_{n-1} \right),$$

（３．３１）

となり，（３．１２）とは一致しない．つまり，１次のSI法のときとは，対照的に変分原理は成立しない．ただし，（３．３１）より，エネルギー保存が成立するための必要条件と同様，V は q^i の１次式で表されるときは，離散型の変分原理が成立しているといえる．

最後にリュービルの定理とシンプレクティック形式の保存性であるが，ともに簡単な計算から

$$\sum_{i=1}^{2} dq^i(t + \Delta t) \wedge dp_i(t + \Delta t) = \sum_{i=1}^{2} dq^i(t) \wedge dp_i(t)$$

（３．３２）

$$J = 1 \qquad (3.33)$$

を示すことができ，両性質が満たされることが分かる．

４．結言

本研究では，ハミルトン力学系を数値計算するときの，差分化の方法について力学系の観点らか調べた．特にハミルトン系の中でも，自由度２の自然ハミルトン系にたいして，オイラー法，２次のルンゲクッタ法，１次のＳＩ法，２次のＳＩ法の４手法の差分化を，エネルギー保存，リュービルの定理，正準変換（シンプレクティック形式の保存），および変分原理の４点の立場から考察した．そして，ＳＩ法の方が連続力学系のもつ性質の多くを離散系でも保存していることがしめされた．ただし，変分原理については１次のＳＩ法では成立したが，２次のＳＩ法では成立しなかったのは，離散ラグランジアンを（３．１０）と定義したことによると考えられる．これらの結果は一般の自由度 n の自然ハミルトン系へ拡張される．

本小論の結果を表にまとめると、以下の表のようになる。

表１．　ハミルトン系の性質と自然ハミルトン系に対する差分化の性質

	エネルギー保存の性質	離散型の変分原理	リュービルの定理	正準変換（シンプレクティック形式の保存）
オイラー法	一般に成立せず V = 定数の時のみ成立	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立
２次のルンゲクッタ法	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立
１次のＳＩ法	一般に成立せず V = 定数の時のみ成立	成立する	成立する	成立する
２次のＳＩ法	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立	一般に成立せず V = １次式の時のみ成立	成立する	成立する

今回の報告では、数値計算の前処理であるの差分化についての議論のみを行った。これらの解析を踏まえた数値計算結果については、次回の機会に報告する予定である。

参考文献

[1] 吉田春夫、数理科学 6 (1995), 37-46.
[2] 前田茂、応用数理 8巻 3号 (1998),　30-39.
[3] 前田茂、数理解析研究所講究録 841(1994), 1-12.
[4] H. Yoshida,　Phys. Lett. A　150 (1991), 262-268.