数理解析研究所講究録 1260 巻 2002 年 188-192

シンプレクティック解法によって保存されない第一積分

国立天文台　吉田 春夫
Haruo Yoshida, National Astronomical Observatory

1　はじめに

太陽系天体の長時間数値積分などに必須の道具であるシンプレクティック数値解法はエネルギーをよく保存する．時間刻みを $\Delta t = \tau$ とするとき，一般に n 次のシンプレクティック数値解法によってエネルギーの誤差は指数関数的に長い時間 $O(\tau^n)$ のオーダーに留まる．これは与えられたハミルトニアン H に対して，シンプレクティック解法の形式的な保存量となる**変形されたハミルトニアン** (modified Hamiltonian) $\tilde{H}$ の存在が保証する．$\tilde{H}$ は 1 次の解法の場合

$$\tilde{H} = H_0 + \tau H_1 + \tau^2 H_2 + \ldots \tag{1}$$

の形の級数で与えられる．ここで H_j は H のある微分多項式である [2, 4, 1]．一方で系がハミルトニアン以外の第一積分を持つとき，それもシンプレクティック解法によってよく保存されることが観測されているが，常にではない．超可積分系と呼ばれる，有界軌道は常に周期軌道となる可積分系においては，3 番目の第一積分はシンプレクティック解法によっても良く保存されないことが具体例で確認できる．さらにこの第一積分に対して，変形されたハミルトニアンの保存量として定義される**変形された第一積分** (modified first integral)

$$\tilde{\Phi} = \Phi_0 + \tau\Phi_1 + \tau^2\Phi_2 + \ldots \tag{2}$$

が存在しないことが示される．

2　変形されたハミルトニアンと変形された第一積分

ハミルトニアン

$$H = T(p) + V(q) \tag{3}$$

に対して 1 次のシンプレクティック解法であるシンプレクティック・オイラー法

$$q' = q + \tau\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_{p=p}, \quad p' = p - \tau\left(\frac{\partial V}{\partial q}\right)_{q=q'}, \tag{4}$$

を適用したとき，変形されたハミルトニアンの低次の項は

$$H_1 = \frac{1}{2}H_pH_q, \quad H_2 = \frac{1}{12}(H_{qq}H_p^2 + H_{pp}H_q^2), \quad \ldots \tag{5}$$

で与えられる．ここで

$$H_pH_q := \sum_i H_{p_i}H_{q_i}, \quad H_{qq}H_p^2 := \sum_{i,j} H_{q_iq_j}H_{p_i}H_{p_j}, \quad \ldots \tag{6}$$

である．この表式は Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) の公式から機械的な書き換えによって得られる．[2] を参照せよ．より広いクラスのハミルトニアンに対してシンプレクティック解法を適用したときに得られる変形されたハミルトニアンについては [1] が詳しい．

一方，変形された第一積分 (2) は，変形されたハミルトニアンの保存量になるという要請から

$$\{\tilde{\Phi}, \tilde{H}\} = 0. \tag{7}$$

を満たすべきである．この表式に展開式 (1) および (2) を代入し，τの等しいベキの係数をゼロとおくことによって条件式の系列

$$\{\Phi_0, H_0\} = 0, \tag{8}$$

$$\{\Phi_1, H_0\} + \{\Phi_0, H_1\} = 0, \tag{9}$$

$$\{\Phi_2, H_0\} + \{\Phi_1, H_1\} + \{\Phi_0, H_2\} = 0, \tag{10}$$

が得られる．ゼロ次の項の解は明らかに$\Phi_0 = \Phi$で良く，1 次の項も

$$\Phi_1 = \frac{1}{2}\Phi_q H_p = \frac{1}{2}\Phi_p H_q. \tag{11}$$

で満たされることがわかる．問題は 2 次以上のΦ_nの存在の有無である．

3 調和振動子の場合

最も簡単な例として，振動数の比が 1 : 2 の 2 次元調和振動子

$$H = H_0 = T(p) + V(q) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}\left(q_1^2 + \frac{1}{4}q_2^2\right) \tag{12}$$

を考えよう．この系は明らかな第一積分（2 番目の第一積分）

$$\Psi = \Psi_0 = \frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}q_1^2 \tag{13}$$

に加えて，3 番目の第一積分

$$\Phi = \Phi_0 = p_1(4p_2^2 - q_2^2) + 4q_1p_2q_2 \tag{14}$$

を持つ超可積分系で，任意の初期条件に対して軌道は閉じて周期軌道となる．

この系にシンプレクティック・オイラー法 (4) を適用したとき，変形されたハミルトニアンの低次の項は

$$H_1 = \frac{1}{2}p_1q_1 + \frac{1}{8}p_2q_2, \tag{15}$$

$$H_2 = \frac{1}{12}(p_1^2 + q_1^2) + \frac{1}{48}\left(p_2^2 + \frac{1}{4}q_2^2\right) \tag{16}$$

等で与えられる．この系の 2 番目の第一積分 (13) に対する変形されたハミルトニアンは無限次まで存在するが，3 番目の第一積分 (14) に対する変形されたハミルトニアンは存在しないことが以下のようにして示される．

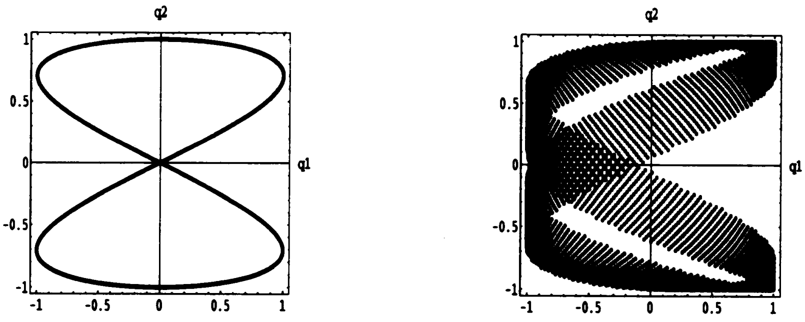

図 1: 振動数比 1:2 の調和振動子の厳密解 (左) と数値解 (右). ($\tau = 0.2$)

まず変形された第一積分の 1 次の項は (11) から直ちに

$$\Phi_1 = p_1 p_2 q_2 + 2p_2^2 q_1 \tag{17}$$

と与えられる. しかし 2 次の項 Φ_2 はもはや H と Φ の微分多項式では与えられない. つまり変形された第一積分は存在しない. この事実と対応して第一積分 Φ はシンプレクティック・オイラー法で良く保存されず, 有界な軌道が常に周期軌道になるという, 系の超可積分性が失われる (図 1).

Φ_2を決める方程式 (10) に既知の H_0, H_1, H_2およびΦ_0, Φ_1の表式を代入して整理すると

$$\{\Phi_2, H_0\} = -\frac{1}{8} q_1 q_2^2. \tag{18}$$

が得られる. 今 H_0系の一般解

$$q_1 = c_1 \sin(t+\delta_1),\ p_1 = c_1 \cos(t+\delta_1),\ q_2 = c_2 \sin\left(\frac{t}{2}+\delta_2\right),\ p_2 = \frac{c_2}{2}\cos\left(\frac{t}{2}+\delta_2\right), \tag{19}$$

を (18) に代入して, その左辺が $d\Phi_2/dt$ になることに注意すれば

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi_2}{dt} &= -\frac{1}{8} c_1 c_2^2 \sin(t+\delta_1) \sin^2\left(\frac{t}{2}+\delta_2\right) \\ &= \frac{1}{32} c_1 c_2^2 \left[\sin(\delta_1 - 2\delta_2) - 2\sin(t+\delta_1) + \sin(2t+\delta_1+2\delta_2)\right]. \end{aligned} \tag{20}$$

を得る. 今, Φ_2が HとΦの微分多項式, つまり qと pのある多項式で与えられるとすれば, それに一般解 (19) を代入すればt のある三角多項式が得られる. そして $d\Phi_2/dt$ は定数項の無い三角多項式となるべきである. 一方で (20) の右辺は一般に定数項のある三角多項式であり矛盾を生じる. このことはΦ_2が HとΦの微分多項式で与えられないことを意味する.

一方, 振動数比が 1 : 1 の調和振動子

$$H = H_0 = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}\left(q_1^2 + q_2^2\right) \tag{21}$$

では 3 番目の第一積分

$$\Phi = p_1 p_2 + q_1 q_2 \tag{22}$$

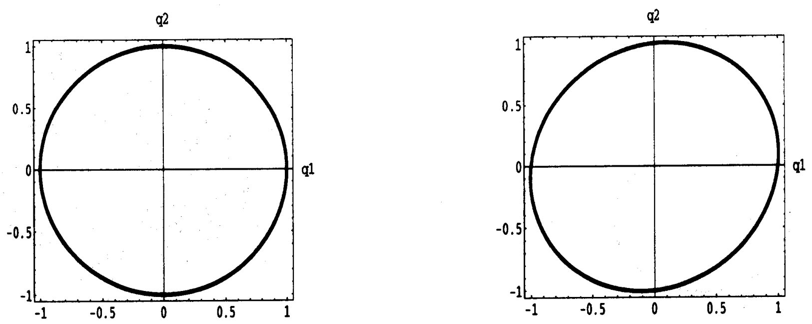

図 2: 振動数比 1:1 の調和振動子の厳密解 (左) と数値解 (右). ($\tau = 0.2$)

に対する変形された第一積分が実際に存在し，軌道の周期性は数値解法によって保存される（図 2）．この 3 番目の第一積分の特徴はそれがハミルトニアンと同じ

$$\Phi = F(p) + G(q) \tag{23}$$

という形をしていることにある．このような形の第一積分に対しては常に変形された第一積分が存在することが予想される．詳細は文献 [3] を参照せよ．

4　ケプラー問題の場合

シンプレクティック解法によって第一積分がよく保存されず，対応する変形された第一積分の非存在が証明できる他の重要な例としてケプラー問題がある．ケプラー問題

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{r}, \quad r = \sqrt{q_1^2 + q_2^2} \tag{24}$$

において保存されない第一積分はルンゲ・レンツベクトルであり，その x 成分は

$$\Phi = p_2(q_1 p_2 - q_2 p_1) - \frac{q_1}{r} \tag{25}$$

で与えられる．ルンゲ・レンツベクトルがよく保存されないため，厳密解では楕円軌道となるケプラー問題の数値解は軌道の近心点が移動し，軌道の周期性が失われる（図 3）．

シンプレクティック・オイラー法 (4) を適用したとき，ケプラー問題のハミルトニアン (24) に対する変形されたハミルトニアンの各項は

$$H_1 = \frac{q_1 p_1 + q_2 p_2}{2r^3}, \tag{26}$$

$$H_2 = \frac{p_1^2(-2q_1^2 + q_2^2) + p_2^2(q_1^2 - 2q_2^2) - 6p_1 p_2 q_1 q_2 + r}{12r^5} \tag{27}$$

等で与えられる．一方ルンゲ・レンツベクトルの x 成分 (25) に対する変形された第一積分の 1 次の項は (11) から

$$\Phi_1 = \frac{q_2(q_1 p_2 - q_2 p_1)}{2r^3} \tag{28}$$

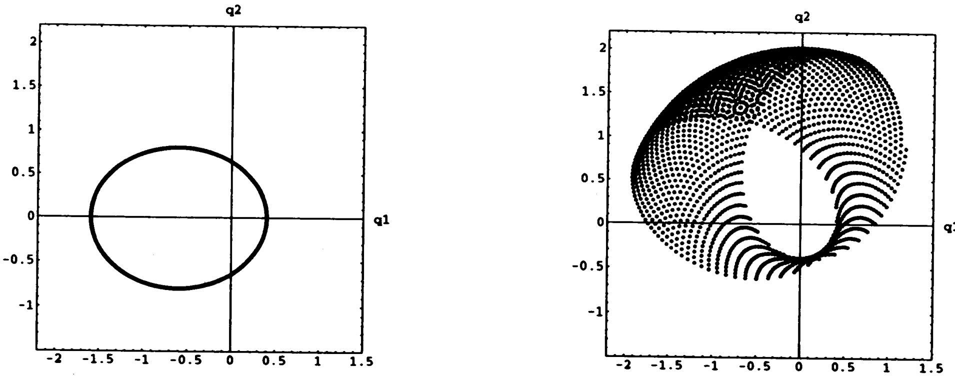

図 3: ケプラー問題の厳密解 (左) と数値解 (右). ($\tau = 0.1$)

で与えられるが，2次の項 Φ_2 はもはや H と Φ の微分多項式では与えられないことが以下のように示される．

まずΦ_2 を決める方程式 (18) は

$$\{\Phi_2, H_0\} = F(q,p) := -\frac{h}{4r^7}\left[p_1^2 q_2(-4q_1^2 + q_2^2) + p_2^2 q_2(3q_1^2 - 2q_2^2) + 2p_1 p_2 q_1(q_1^2 - 4q_2^2)\right] \tag{29}$$

となる．今，Φ_2が HとΦの微分多項式で与えられると仮定する．そして H_0系であるケプラー問題の一般解（それは時間 t のフーリエ級数で表現される）を代入すれば，左辺は $\{\Phi_2, H_0\} = d\Phi_2/dt$ より定数項の無いフーリエ級数となり，その時間による平均値はゼロとなる．一方で右辺はゼロでない平均値

$$\langle F(q,p)\rangle_t = -\frac{ne(4+e^2)}{16h^6}\sin\varpi. \tag{30}$$

を持つことが確認され，矛盾を生じる．ここで n, e, h, ϖ はケプラー問題の積分定数である．よってΦ_2 は H と Φ の微分多項式としては存在しない．

参考文献

[1] E. Hairer, Ch. Lubich and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration*, Springer Series in Computational Mathematics **31** (2002).
http://www.unige.ch/math/folks/hairer/books/gni_preface.ps

[2] H. Yoshida, Recent progress in the theory and application of symplectic integrators, *Celest. Mech. Dyn. Astron.*, **56** (1993), 27–43.

[3] H. Yoshida, Non-existence of the modified first integral by symplectic integration methods, *Phys. Lett. A*, **282** (2001), 276-283.

[4] 吉田春夫, シンプレクティック数値解法, 数理科学, **384** (1995), 37–46.