非自励ハミルトン力学系に対する
エネルギー関数の性質を満たす差分法

石森　勇次

(工学部一般教育等)

非自励系として，ハミルトン関数が時間を直接含むハミルトン力学系を考える。この系に対して，エネルギーと共役な正準変数および拡張されたエネルギー関数を導入し，拡張されたエネルギー関数の保存する差分法を構成する。

キーワード：差分法，エネルギー保存，非自励系，ハミルトン力学系，正準共役変数

1．はじめに

微分方程式で記述される力学系の数値計算法として，系のエネルギー関数の性質を満たすような差分法を考える。即ち，保存力学系に対しては，エネルギー関数が一定の値を取ることを保証するような差分法を，また，散逸力学系に対しては，エネルギー関数が時間の経過とともに減少することを保証するような差分法を考える。これまで自励系に対して，すでにそのような差分法を提案してきた [1-10]。本研究では，エネルギー関数の性質を満たす差分法を非励系に拡張することを試みる。対象として，非自励ハミルトン力学系を考える。余分な変数を追加し，拡張されたエネルギー関数を導入することによって，自励系と同じような差分法を構成できることを示す。

2．拡張されたエネルギー関数

2.1　一般の系

非自励系として，エネルギー関数（ハミルトン関数）H が時間 t を直接含むハミルトン力学系

$$H = H(p, q, t) \tag{1}$$

を考える。ハミルトン関数 (1) で記述されるハミルトン力学系に対する運動方程式は，

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \tag{2}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \tag{3}$$

である。このとき，H の時間微分は

$$\begin{aligned}\frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial H}{\partial t} \\ &= -\frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial t} \\ &= \frac{\partial H}{\partial t}\end{aligned} \tag{4}$$

となり，H は保存しない。

ここで，正準共役な変数 r（一般化運動量），s（一般化座標）を導入し，ハミルトン関数 H を次のように拡張する。

$$H_{\mathrm{ex}}(p, q, r, s) = r + H(p, q, s)。 \tag{5}$$

正準変数 p，q，r，s に対する運動方程式は

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial q} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \tag{6}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial p} = \frac{\partial H}{\partial p}, \tag{7}$$

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial s} = -\frac{\partial H}{\partial s}, \tag{8}$$

$$\frac{ds}{dt} = \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial r} = 1 \tag{9}$$

となる。拡張されたエネルギー関数 H_{ex} は正準変数だけを含むので保存量である。即ち

$$\begin{aligned}\frac{dH_{\mathrm{ex}}}{dt} &= \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial q}\frac{dq}{dt} \\ &\quad + \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial r}\frac{dr}{dt} + \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial s}\frac{ds}{dt} \\ &= -\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial p}\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial q} + \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial q}\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial p} \\ &\quad - \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial r}\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial s} + \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial s}\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial r} \\ &= 0。\end{aligned} \tag{10}$$

(9) より $s(t)=s(0)+t$ であるから，$s(0)=0$ とすれば

$$s(t)=t \tag{11}$$

となり，正準変数 s は時間 t と同じであることになる。したがって，(6)，(7) を満たす解 $p(t)$，$q(t)$ は (2)，(3) の解と同じである。また，(5)，(10) より

$$\frac{dr}{dt}=-\frac{dH}{dt}。 \tag{12}$$

したがって，$r(t)=r(0)-[H(t)-H(0)]$ である。よって，$r(0)=0$ とすれば

$$r(t)=H(0)-H(t) \tag{13}$$

となり，r はもとのハミルトン関数 H の値が初期の値からどれだけ減ったかを表している。このように，追加した変数 r，s はエネルギーと時間を代表する正準変数である。

2.2 外力のある系

非自励系の特別な場合として，ハミルトン関数 H が自励系のハミルトン関数 $H_{\rm auto}(p,q)$ と外力 $f(t)$ に起因する項 $-qf(t)$ からなる関数，即ち

$$H=H_{\rm auto}(p,q)-qf(t) \tag{14}$$

を考える。正準変数 p，q，r，s に対する運動方程式は (6)，(7)，(8)，(9) より

$$\frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H_{\rm auto}}{\partial q}+f(s), \tag{15}$$

$$\frac{dq}{dt}=\frac{\partial H_{\rm auto}}{\partial p}, \tag{16}$$

$$\frac{dr}{dt}=q\frac{df(s)}{ds}, \tag{17}$$

$$\frac{ds}{dt}=1。 \tag{18}$$

したがって，(12) より

$$\begin{aligned}\frac{dr}{dt}&=q\frac{df(s)}{ds}\\ =-\frac{dH}{dt}&=-\frac{dH_{\rm auto}}{dt}+\frac{dq}{dt}f(s)+q\frac{df(s)}{ds}\frac{ds}{dt}\end{aligned}$$

となるので

$$\frac{dH_{\rm auto}}{dt}=\frac{dq}{dt}f(s)。 \tag{19}$$

このように，拡張されたエネルギー関数に関する保存則 (10) は，外力 $f(t)$ による自励系のエネルギー $H_{\rm auto}$ の出し入れが (19) によって与えられることと同じである。

3．差分スキーム

3.1 一般の系

前節で述べた連続時間力学系で成り立ったエネルギー関数の性質が，離散時間力学系

$$t^k=k\Delta t,\ F^k=F(t^k) \tag{20}$$

でも成り立つように差分スキームを構成する。ただし，Δt は時間のきざみ幅である。

先ず，連続時間変数 p，q，r，s に対する運動方程式 (6)，(7)，(8)，(9) を次のような離散時間変数 p^k，q^k，r^k，s^k に対する差分方程式に差分化する[7]：

$$\frac{\Delta p^k}{\Delta t}=-\delta_q\mu_{p,r,s}H^k_{\rm ex}=-\delta_q\mu_{p,s}H^k, \tag{21}$$

$$\frac{\Delta q^k}{\Delta t}=\delta_p\mu_{q,r,s}H_{\rm ex}=\delta_p\mu_{q,s}H^k, \tag{22}$$

$$\frac{\Delta r^k}{\Delta t}=-\delta_s\mu_{p,q,r}H^k_{\rm ex}=-\delta_s\mu_{p,q}H^k, \tag{23}$$

$$\frac{\Delta s^k}{\Delta t}=\delta_r\mu_{p,q,s}H^k_{\rm ex}=1。 \tag{24}$$

ここで，Δ，δ および μ はそれぞれ次のように定義される全差分演算子，差分商演算子および平均化演算子である [7]：

$$\Delta F^k=F^{k+1}-F^k, \tag{25}$$

$$\begin{aligned}&\delta_x F(x^k,y^k,z^k,\cdots)\\ &=\frac{F(x^{k+1},y^k,\cdots)-F(x^k,y^k,\cdots)}{\Delta x^k},\end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned}&\mu_x F(x^k,y^k,z^k,\cdots)\\ &=\frac{1}{2}\left[F(x^{k+1},y^k,\cdots)+F(x^k,y^k,\cdots)\right],\end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned}&\mu_{x,y}F(x^k,y^k,z^k,\cdots)\\ &=\frac{1}{6}\left[2F(x^{k+1},y^{k+1},\cdots)+F(x^{k+1},y^k,\cdots)\right.\\ &\quad\left.+F(x^k,y^{k+1},\cdots)+2F(x^k,y^k,\cdots)\right],\end{aligned} \tag{28}$$

$$\begin{aligned}&\mu_{x,y,z}F(x^k,y^k,z^k,\cdots)\\ &=\frac{1}{24}\left[6F(x^{k+1},y^{k+1},z^{k+1},\cdots)\right.\\ &\quad+2F(x^{k+1},y^{k+1},z^k,\cdots)\\ &\quad+2F(x^{k+1},y^k,z^{k+1},\cdots)\\ &\quad+2F(x^k,y^{k+1},z^{k+1},\cdots)\\ &\quad+2F(x^{k+1},y^k,z^k,\cdots)\\ &\quad+2F(x^k,y^{k+1},z^k,\cdots)\\ &\quad+2F(x^k,y^k,z^{k+1},\cdots)\\ &\quad\left.+6F(x^k,y^k,z^k,\cdots)\right]。\end{aligned} \tag{29}$$

差分方程式 (21)，(22)，(23)，(24) に対して，

$$\frac{\Delta H_{\rm ex}^k}{\Delta t}$$
$$= \delta_p \mu_{q,r,s} H_{\rm ex}^k \frac{\Delta p^k}{\Delta t} + \delta_q \mu_{p,r,s} H_{\rm ex}^k \frac{\Delta q^k}{\Delta t}$$
$$+ \delta_r \mu_{p,q,s} H_{\rm ex}^k \frac{\Delta r^k}{\Delta t} + \delta_s \mu_{p,q,r} H_{\rm ex}^k \frac{\Delta s^k}{\Delta t}$$
$$= -\delta_p \mu_{q,r,s} H_{\rm ex}^k \delta_q \mu_{p,r,s} H_{\rm ex}^k$$
$$+\delta_q \mu_{p,r,s} H_{\rm ex}^k \delta_p \mu_{q,r,s} H_{\rm ex}^k$$
$$-\delta_r \mu_{p,q,s} H_{\rm ex}^k \delta_s \mu_{p,q,r} H_{\rm ex}^k$$
$$+\delta_s \mu_{p,q,r} H_{\rm ex}^k \delta_r \mu_{p,q,s} H_{\rm ex}^k$$
$$= 0。 \tag{30}$$

即ち，離散時間系における拡張されたエネルギー関数 $H_{\rm ex}^k$ は保存する。

(24) より $s^k = s^0 + t^k$ であるから，$s^0 = 0$ とすれば

$$s^k = t^k \tag{31}$$

となり，(11) がそのまま離散時間系でも成り立つ。また，保存則 (30) より

$$\frac{\Delta r^k}{\Delta t} = -\frac{\Delta H^k}{\Delta t} \tag{32}$$

となり，$r^k = r^0 - (H^k - H^0)$ である。よって，$r^0 = 0$ とすれば

$$r^k = H^0 - H^k \tag{33}$$

となり，(13) がそのまま離散時間系でも成り立つ。

3.2 外力のある系

H が (14) の形で与えられるとき，離散時間変数 p^k, q^k, r^k, s^k に対する差分方程式は，(21), (22), (23), (24) より

$$\frac{\Delta p^k}{\Delta t} = -\delta_q \mu_p H_{\rm auto}^k + \mu_s f^k, \tag{34}$$
$$\frac{\Delta q^k}{\Delta t} = \delta_p \mu_q H_{\rm auto}^k, \tag{35}$$
$$\frac{\Delta r^k}{\Delta t} = \mu_q q^k \delta_s f^k, \tag{36}$$
$$\frac{\Delta s^k}{\Delta t} = 1。 \tag{37}$$

したがって，(32) より

$$\frac{\Delta r^k}{\Delta t} = \mu_q q^k \delta_s f^k$$
$$= -\frac{\Delta H^k}{\Delta t}$$
$$= -\frac{\Delta H_{\rm auto}^k}{\Delta t} + \frac{\Delta q^k}{\Delta t}\mu_s f^k + \mu_q \frac{\Delta f^k}{\Delta t}$$
$$= -\frac{\Delta H_{\rm auto}^k}{\Delta t} + \frac{\Delta q^k}{\Delta t}\mu_s f^k + \mu_q \delta_s f^k \frac{\Delta s^k}{\Delta t}$$

となるので，自励系のエネルギーの出し入れを表す式は

$$\frac{\Delta H_{\rm auto}^k}{\Delta t} = \frac{\Delta q^k}{\Delta t}\mu_s f^k \tag{38}$$

で与えられる。

このように，非自励系 (14) の場合，拡張されたエネルギー関数 $H_{\rm ex}$ を保存させるような差分法は，外力による自励系のエネルギーの出し入れを，外力からくる式 (38) だけで評価することを保証する計算法である。

4．応用例

外力のある系を考える。自励系として調和振動子

$$H_{\rm auto} = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2\right) \tag{39}$$

を扱い，いくつかの外力に対する連続時間系および離散時間系の解を求める。差分スキーム (34), (35), (36), (37) を実際に応用するときは，追加された変数 r^k, s^k の時間発展は (31), (33) で与えられるので，(34), (35) のみを使う。すなわち，もとの変数 p^k, q^k だけの時間発展を考え，追加された変数は差分スキームを構成するときにのみ使う便宜的な変数とする。

4.1 例 1 $f(t) = at$ (a は定数)

運動方程式は

$$\frac{dp}{dt} = -q + at, \tag{40}$$
$$\frac{dq}{dt} = p。 \tag{41}$$

初期条件を

$$p(0) = q(0) = 0 \tag{42}$$

とすれば，運動方程式 (40), (41) の解は

$$p(t) = a(1 - \cos t), \tag{43}$$
$$q(t) = a(t - \sin t) \tag{44}$$

で与えられる。したがって，解軌道は (p, q) 平面上でサイクロイドを描く。なお，解 (43), (44) に対して

$$\frac{dH_{\rm auto}}{dt} = a^2 t(1 - \cos t) \geq 0 \quad (t \geq 0) \tag{45}$$

となるので，自励系のエネルギー $H_{\rm auto}$ は減少することはない。

一方，この系に対する差分方程式は

$$\frac{\Delta p^k}{\Delta t} = -\mu_q q^k + a\mu_t t^k, \tag{46}$$
$$\frac{\Delta q^k}{\Delta t} = \mu_p p^k。 \tag{47}$$

初期条件を

$$p^0 = q^0 = 0 \tag{48}$$

とすれば，差分方程式 (46)，(47) の解は

$$p^k = a(1-\cos\omega t^k), \tag{49}$$

$$q^k = a(t^k - \sin\omega t^k) \tag{50}$$

で与えられる。ただし，

$$\omega = \frac{\tan^{-1}\dfrac{\Delta t}{2}}{\dfrac{\Delta t}{2}} < 1。 \tag{51}$$

したがって，解軌道は (p,q) 平面上でトロコイドを描く。しかし，$\Delta t << 1$ であれば $\omega \approx 1$ となり，ほとんど軌道はサイクロイド (43)，(44) となる。また，長時間経っても振動の振幅に変動はない。なお，解 (49)，(50) に対して

$$\frac{\Delta H^k_{\mathrm{auto}}}{\Delta t} = a^2(\mu_t t^k)(1-\mu_t\cos\omega t^k) \geq 0 \quad (t^k \geq 0) \tag{52}$$

となるので，離散時間系においても連続時間系と同じように，自励系のエネルギー H^k_{auto} は減少することはない。

4.2　例 2　$f(t) = a\sin\Omega t$ (a，Ω は定数)

運動方程式は

$$\frac{dp}{dt} = -q + a\sin\Omega t, \tag{53}$$

$$\frac{dq}{dt} = p。 \tag{54}$$

初期条件を

$$p(0) = q(0) = 0 \tag{55}$$

とすれば，運動方程式 (53)，(54) の解は次のように与えられる。

$\Omega \neq 1$ のとき：

$$p(t) = -\frac{a\Omega}{1-\Omega^2}\cos t + \frac{a\Omega}{1-\Omega^2}\cos\Omega t, \tag{56}$$

$$q(t) = -\frac{a\Omega}{1-\Omega^2}\sin t + \frac{a}{1-\Omega^2}\sin\Omega t。 \tag{57}$$

$\Omega = 1$ のとき：

$$p(t) = \frac{1}{2}at\sin t, \tag{58}$$

$$q(t) = \frac{1}{2}a\sin t - \frac{1}{2}at\cos t。 \tag{59}$$

外力の周波数 Ω が自励系の周波数に等しい，すなわち共振条件を満たすとき，解 (58)，(59) からわかるように (p,q) 平面上の解軌道は螺旋を描きながら原点から遠ざかっていく。このとき，

$$\frac{dH_{\mathrm{auto}}}{dt} = \frac{1}{2}a^2 t\sin^2 t \geq 0 \quad (t \geq 0) \tag{60}$$

となり，自励系のエネルギー H_{auto} は減少することはない。

一方，この系に対する差分方程式は

$$\frac{\Delta p^k}{\Delta t} = -\mu_q q^k + a\mu_t\sin\Omega t^k, \tag{61}$$

$$\frac{\Delta q^k}{\Delta t} = \mu_p p^k。 \tag{62}$$

初期条件を

$$p^0 = q^0 = 0 \tag{63}$$

とすれば，差分方程式 (61)，(62) の解は

$$\widetilde{\Omega} = \frac{\tan\dfrac{\Omega\Delta t}{2}}{\dfrac{\Delta t}{2}} > \Omega, \tag{64}$$

$$\omega = \frac{\tan^{-1}\dfrac{\Delta t}{2}}{\dfrac{\Delta t}{2}} < 1 \tag{65}$$

として，次のように与えられる。

$\Omega \neq \omega$ ($\widetilde{\Omega} \neq 1$) のとき：

$$p^k = -\frac{a\widetilde{\Omega}}{1-\widetilde{\Omega}^2}\cos\omega t^k + \frac{a\widetilde{\Omega}}{1-\widetilde{\Omega}^2}\cos\Omega t^k, \tag{66}$$

$$q^k = -\frac{a\widetilde{\Omega}}{1-\widetilde{\Omega}^2}\sin\omega t^k + \frac{a}{1-\widetilde{\Omega}^2}\sin\Omega t^k。 \tag{67}$$

$\Omega = \omega$ ($\widetilde{\Omega} = 1$) のとき：

$$p^k = \frac{1}{2}\frac{1}{1+\dfrac{\Delta t^2}{4}}at^k\sin\omega t^k, \tag{68}$$

$$q^k = \frac{1}{2}a\sin\omega t^k - \frac{1}{2}\frac{1}{1+\dfrac{\Delta t^2}{4}}at^k\cos\omega t^k。 \tag{69}$$

このように，離散時間系の共振条件は連続時間系の条件と少し異なるが，解の特徴は保たれている。また，共振条件を満たすとき，

$$\frac{\Delta H^k_{\mathrm{auto}}}{\Delta t} = \frac{1}{2}\frac{1}{1+\dfrac{\Delta t^2}{4}}a^2 \times(\mu_t t^k\sin\omega t^k)(\mu_t\sin\omega t^k) \geq 0 \quad (\Delta t << 1) \tag{70}$$

となる。

4.3　2次のルンゲ・クッタ法

他の差分法との比較のために，本論文で提案した差分法と同じ精度をもつ2次のルンゲ・クッタ法[8]について述べる。例1の運動方程式 (40)，(41) に対する差分方程式は

$$\frac{\Delta p^k}{\Delta t} = -q^k - \frac{\Delta t}{2}p^k + \frac{a}{2}(t^{k+1} + t^k), \tag{71}$$

$$\frac{\Delta q^k}{\Delta t} = p^k - \frac{\Delta t}{2}q^k + \frac{\Delta t}{2}at^k。 \tag{72}$$

線形の外力のある系の運動は，自励系の運動と外力による運動を合わせたものである。差分方程式 (71), (72) の外力に起因する解（特殊解）は

$$p^k = a, \tag{73}$$

$$q^k = at^k \tag{74}$$

であり，本論文で提案した差分法の解と同じである。一方，自励系（$a = 0$）において

$$H^{k+1}_{\mathrm{auto}} = \left(1 + \frac{\Delta t^4}{4}\right) H^k_{\mathrm{auto}} > H^k_{\mathrm{auto}} \tag{75}$$

が成り立つので，差分方程式の (p, q) 平面上の解軌道は振動の振幅が次第に大きくなり，サイクロイドとはまったく異なる軌跡を描く。

5. おわりに

本研究では非自励ハミルトン力学系に対しても，時間とエネルギーに相当する正準共役な変数を追加することによって，エネルギーの保存する差分法を適用できることを示した。提案された差分法は，外力のある系に対しては，系と外部とのエネルギーの出し入れが外力に依存する項だけで評価できることを保証する差分法となっている。簡単な応用例によってこのことを確かめた。

ハミルトン力学系以外の非自励系については今後の研究課題である。特に，散逸力学系や確率微分方程式で表されるような系への応用は重要な問題として残されている。

参考文献

[1]石森勇次 (1991年)：いくつかの非線形波動方程式に対する陽的差分法，富山県立大学紀要，第1巻，pp.47-50.

[2]石森勇次 (1993年)：4次の非線形力学系に対するエネルギーの保存する陽的差分近似法，日本応用数理学会論文誌，Vol.3, No.3, pp.177-197.

[3]石森勇次 (1994年)：エネルギー保存則を満たす陽的差分法，京大数理解析研究所講究録，Vol.868, pp.39-51.

[4]Y.Ishimori (1994)：Explicit energy conservative difference schemes for nonlinear dynamical systems with at most quartic potentials, Phys. Lett. A, Vol.191, pp.373-378.

[5]石森勇次 (1994年)：エネルギー不等式を満たす陽的差分法，京大数理解析研究所講究録，Vol.889, pp.37-48.

[6]Y.Ishimori (1995)：Explicit Energy-Conserving Difference Methods for Hamiltonian Dynamics with Certain Types of Potential, Bull. Toyama Pref. Univ., Vol.5, 93-97.

[7]石森勇次 (1996年)：シフト演算子の対称式と差分法，富山県立大学紀要，第6巻，pp.8-14.

[8]石森勇次 (1997年)：勾配系に対するエネルギー不等式を満たす4次の差分法，富山県立大学紀要，第7巻，pp.26-33.

[9]石森勇次 (1998年)：多変数の勾配系に対するエネルギー不等式を満たす4次の差分法，富山県立大学紀要，第8巻，pp.10-16.

[10]石森勇次 (1999年)：Korteweg-de Vries 方程式に対するエネルギーの保存する4次の差分スキーム，富山県立大学紀要，第9巻，pp.15-20.

An Difference Scheme Preserving Extended Hamiltonian for Time-Dependent Systems

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

In this paper we treat time dependent Hamiltonian systems which do not preserve the enrgy. We show that the energy-conserving difference schemes can be applied to such systems by considering extented Hamiltonian systems.

Key Words: difference methods, energy conservation, time dependent Hamiltonian systems, canonical variables