確率ハミルトン力学系に対するエネルギー保存差分法

石森　勇次

(工学部教養教育)

ランダムな変数が介在した非自励ハミルトン力学系に対して，拡張されたエネルギー関数の保存を保証する差分法を構成する。ただし，保存されるのはエネルギー関数そのものではなく，平均化されたエネルギー関数である。

キーワード：差分法，確率微分方程式，エネルギー保存，ハミルトン力学系

1．はじめに

確率微分方程式で記述される力学系の数値計算法 [1] 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。確率力学系は，通常の力学系に何らかのランダムな変数が介在した非自励系と見なせる。非自励系においても，拡張されたエネルギー関数を考えることによって，自励系でしばしば見られるエネルギー保存や散逸といったエネルギー関数の性質を持っている [2]。ここでは，このようなエネルギー関数の性質としてエネルギー保存を保証するような差分法について考える。

2節では確率ハミルトン力学系の定義と拡張されたエネルギー関数の保存について述べる。3節ではエネルギー保存差分法の一般的な枠組みについて説明する。4節では，簡単な線形の力学系への応用を試みる。

2．確率ハミルトン力学系の拡張されたエネルギー関数

確率力学系として、2次元のハミルトン力学系：

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(p,q,\eta(t))}{\partial q} \tag{1}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H(p,q,\eta(t))}{\partial p} \tag{2}$$

を考える。p，q，H はそれぞれ運動量，座標，ハミルトン関数（エネルギー関数）である。$\eta(t)$ は何らかのランダムな変数（または力）で，

$$<\eta(t)>=0 \tag{3}$$

$$<\eta(t_1)\eta(t_2)>=\delta(t_1-t_2) \tag{4}$$

であるとする。$<\cdots>$ は平均（または期待値）を表す。$\eta(t)$ はウイナー過程 $W(t)$：

$$<W(t)>=0 \tag{5}$$

$$<W(t_1)W(t_2)>=\min(t_1,t_2) \tag{6}$$

に対して形式的に

$$\eta(t)=\frac{dW(t)}{dt} \tag{7}$$

である。

確率ハミルトン力学系 (1)，(2) の解 $p(t)$，$q(t)$ はウィナー過程 $W(t)$ または $\eta(t)$ の汎関数として求められる。ここでは，なめらかなノイズの理想化としてウィーナー過程を考え，確率微分方程式 (1)，(2) をストラトノビッチ流に解釈する [3]。

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，エネルギー関数 H を

$$H_{\rm ex}=r+H(p,q,\eta(s)) \tag{8}$$

のように拡張する [2]。このとき，運動方程式は

$$\frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial q}=-\frac{\partial H}{\partial q} \tag{9}$$

$$\frac{dq}{dt}=\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial p}=\frac{\partial H}{\partial p} \tag{10}$$

$$\frac{dr}{dt}=-\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial s}=-\frac{\partial H}{\partial s} \tag{11}$$

$$\frac{ds}{dt}=\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial r}=1 \tag{12}$$

となる。(12) より $s=t$ と選べるので，(9)，(10) の解 $p(t)$，$q(t)$ は (1)，(2) の解と同じである。ハミルトン力学系 (9)～(12) は自励系であるから，

$$\frac{dH_{\rm ex}}{dt}=\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial p}\frac{dp}{dt}+\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial q}\frac{dq}{dt}$$

$$+\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial r}\frac{dr}{dt}+\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial s}\frac{ds}{dt} = 0 \quad (13)$$

より，拡張されたエネルギー関数 H_{ex} は保存する。

3．エネルギー保存差分法

連続時間力学系で成り立つエネルギー保存則 (13) が離散時間力学系：

$$t^k = k\Delta t, \quad f^k = f(t^k) \quad (k=0,1,2,\cdots) \quad (14)$$

でも成り立つように差分法を構成する [4,5]。ここで，Δt は時間のきざみ幅である。

差分法構成の鍵は，微分におけるチェーンルール (chain rule) の差分化である。連続時間関数

$$F(x_1,x_2,\cdots,x_n) = G(y_1,y_2,\cdots,y_m) \quad (15)$$

$$y_i = y_i(x_1,x_2,\cdots,x_n) \quad (i=1,2,\cdots,m) \quad (16)$$

$$x_j = x_j(t) \quad (j=1,2,\cdots,n) \quad (17)$$

に対するチェーンルール

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^{m}\frac{\partial F}{\partial y_i}\frac{dy_i}{dt} \quad (18)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n}\frac{\partial y_i}{\partial x_j}\frac{dx_j}{dt} \quad (19)$$

の差分化を行う。いま離散時間関数 F^k を l 個の点

$$t^k, t^{k-1}, \cdots, t^{k-l+1} \quad (\text{一般に } l \geq m) \quad (20)$$

で変数 $y_1,y_2,\cdots,y_m$ について平均化した関数

$$\mu^{<l>}_{y_1,y_2,\cdots,y_m}F^k = \frac{1}{l!}\left[\mathrm{per}M\right]F^k \quad (21)$$

を考える。ここで，$\mu^{<l>}_{y_1,\cdots,y_m}$ は l 点平均化演算子である。M は $l\times l$ 行列

$$M \quad (22)$$
$$= \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ E^{-1}_{y_1} & E^{-1}_{y_2} & \cdots & E^{-1}_{y_m} & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ E^{-(l-1)}_{y_1} & E^{-(l-1)}_{y_2} & \cdots & E^{-(l-1)}_{y_m} & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

per は行列 M のパーマネント，$E^a_{y_j}$ はシフト演算子

$$E^a_{y_j}F(\cdots,y^k_j,\cdots) = F(\cdots,y^{k+a}_j,\cdots) \quad (23)$$

を表す。この平均化された離散時間関数 (21) に対して，連続時間関数に対するチェーンルール (18), (19) と類似のチェーンルール

$$\frac{\Delta[\mu^{<l>}_{y_1,y_2,\cdots,y_m}F^k]}{\Delta t} \quad (24)$$
$$= \sum_{i=1}^{m}[\delta^{1,-(l-1)}_{y_i}\mu^{<l-1>}_{y_1,\cdots,y_{i-1},y_{i+1},\cdots,y_m}F^k]\frac{\Delta^{1,-(l-1)}y^k_i}{l\Delta t}$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)}y^k_i}{l\Delta t} \quad (25)$$
$$= \sum_{j=1}^{n}[\delta^{1,-(l-1)}_{x_j}\mu^{1,-(l-1)}_{x_1,\cdots,x_{j-1},x_{j+1},\cdots,x_n}y^k_i]\frac{\Delta^{1,-(l-1)}x^k_j}{l\Delta t}$$

が成り立つ [4,5]（本論文と記号が異なっていることに注意）。ここで，Δ, $\Delta^{a,b}$ は差分演算子

$$\Delta^{a,b}f^k = f^{k+a} - f^{k+b}, \quad \Delta^{1,0} = \Delta \quad (26)$$

$\delta^{a,b}_{x_i}$ は差分商演算子

$$\delta^{a,b}_{x_i}F^k = \frac{(E^a_{x_i}-E^b_{x_i})F^k}{\Delta^{a,b}x^k_i}. \quad (27)$$

$\mu^{a,b}_{x_1,\cdots,x_n}$ は2点平均化演算子

$$\mu^{a,b}_{x_1,\cdots,x_{j-1},x_{j+1},\cdots,x_n} = \frac{1}{n!}\sum_{\nu=1}^{n}\mathrm{per} \quad (28)$$
$$\times\left(\begin{array}{ccccccc} E^a_{x_1} & \cdots & E^a_{x_{j-1}} & E^a_{x_{j+1}} & \cdots & E^a_{x_n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ E^a_{x_1} & \cdots & E^a_{x_{j-1}} & E^a_{x_{j+1}} & \cdots & E^a_{x_n} \\ E^b_{x_1} & \cdots & E^b_{x_{j-1}} & E^b_{x_{j+1}} & \cdots & E^b_{x_n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ E^b_{x_1} & \cdots & E^b_{x_{j-1}} & E^b_{x_{j+1}} & \cdots & E^b_{x_n} \end{array}\right)\begin{array}{l} \left.\vphantom{\begin{array}{c}E\\ \vdots\\ E\end{array}}\right\} n-\nu \\ \left.\vphantom{\begin{array}{c}E\\ \vdots\\ E\end{array}}\right\} \nu-1 \end{array}.$$

を表す。

特別な場合として

$$\left.\begin{array}{l} F = H_{\mathrm{ex}} \\ n = 4 \\ x_1 = p, x_2 = q, x_3 = r, x_4 = s \\ m = 4 \\ y_1 = p, y_2 = q, y_3 = r, y_4 = s \end{array}\right\} \quad (29)$$

とおく。このとき，連続時間エネルギー関数 H_{ex} に対するチェーンルールは

$$\frac{dH_{\mathrm{ex}}}{dt} = \frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial p}\frac{dp}{dt}+\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial q}\frac{dq}{dt} +\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial r}\frac{dr}{dt}+\frac{\partial H_{\mathrm{ex}}}{\partial s}\frac{ds}{dt} \quad (30)$$

$$\frac{dp}{dt} = \frac{dp}{dt}, \frac{dq}{dt} = \frac{dq}{dt}, \frac{dr}{dt} = \frac{dr}{dt}, \frac{ds}{dt} = \frac{ds}{dt} \quad (31)$$

となり，離散時間エネルギー関数 H_{ex}^k に対するチェーンルールは

$$
\begin{aligned}
&\frac{\Delta[\mu_{p,q,r,s}^{<l>} H_{\mathrm{ex}}^k]}{\Delta t}\\
&= [\delta_p^{1,-(l-1)} \mu_{q,r,s}^{<l-1>} H^k] \frac{\Delta^{1,-(l-1)} p^k}{l\Delta t}\\
&+ [\delta_q^{1,-(l-1)} \mu_{p,r,s}^{<l-1>} H^k] \frac{\Delta^{1,-(l-1)} q^k}{l\Delta t}\\
&+ [\delta_r^{1,-(l-1)} \mu_{p,q,s}^{<l-1>} H^k] \frac{\Delta^{1,-(l-1)} r^k}{l\Delta t}\\
&+ [\delta_s^{1,-(l-1)} \mu_{p,q,r}^{<l-1>} H^k] \frac{\Delta^{1,-(l-1)} s^k}{l\Delta t}
\end{aligned} \tag{32}
$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)} p^k}{l\Delta t} = \frac{\Delta^{1,-(l-1)} p^k}{l\Delta t} \tag{33}$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)} q^k}{l\Delta t} = \frac{\Delta^{1,-(l-1)} q^k}{l\Delta t} \tag{34}$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)} r^k}{l\Delta t} = \frac{\Delta^{1,-(l-1)} r^k}{l\Delta t} \tag{35}$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)} s^k}{l\Delta t} = \frac{\Delta^{1,-(l-1)} s^k}{l\Delta t} \tag{36}$$

となる。従って，運動方程式 (9)~(12) の差分化として

$$
\begin{aligned}
\frac{\Delta^{1,-(l-1)} p^k}{l\Delta t} &= -\delta_q^{1,-(l-1)} \mu_{p,r,s}^{<l-1>} H_{\mathrm{ex}}^k\\
&= -\delta_q^{1,-(l-1)} \mu_{p,s}^{<l-1>} H^k
\end{aligned} \tag{37}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\Delta^{1,-(l-1)} q^k}{l\Delta t} &= \delta_p^{1,-(l-1)} \mu_{q,r,s}^{<l-1>} H_{\mathrm{ex}}^k\\
&= \delta_p^{1,-(l-1)} \mu_{q,s}^{<l-1>} H^k
\end{aligned} \tag{38}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\Delta^{1,-(l-1)} r^k}{l\Delta t} &= -\delta_s^{1,-(l-1)} \mu_{p,q,r}^{<l-1>} H_{\mathrm{ex}}^k\\
&= -\delta_s^{1,-(l-1)} \mu_{p,q}^{<l-1>} H^k
\end{aligned} \tag{39}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\Delta^{1,-(l-1)} s^k}{l\Delta t} &= \delta_r^{1,-(l-1)} \mu_{p,q,s}^{<l-1>} H_{\mathrm{ex}}^k\\
&= 1
\end{aligned} \tag{40}
$$

を採用すれば，チェーンルール (32) より直ちに

$$\frac{\Delta[\mu_{p,q,r,s}^{<l>} H_{\mathrm{ex}}^k]}{\Delta t} = 0 \tag{41}$$

を得る。即ち，平均化されたエネルギー $\mu_{p,q,r,s}^{<l>} H_{\mathrm{ex}}^k$ は保存する。

s^k に対する差分方程式 (40) の解として $s^k = t^k$ を選べば，連続時間力学系と同様に s は時間と同じであると見なせる。このとき，差分方程式 (37), (38) は次のような l ステップの多段階スキームとして表される。

$$p^{k+1} = p^{k-l+1} - (l\Delta t)\delta_q^{1,-(l-1)} \mu_{p,\eta}^{<l-1>} H^k \tag{42}$$

$$q^{k+1} = q^{k-l+1} + (l\Delta t)\delta_p^{1,-(l-1)} \mu_{q,\eta}^{<l-1>} H^k \tag{43}$$

(8) の型から一般に $l \geq 3$ であるが，H の型によっては $l = 2$ もあり得る。

一般にどのような変数を $y_1, \cdots, y_m$ としてエネルギー関数を平均化すればよいのかを一意的に定めることはできない。従って (29) 以外の選択によりいろいろな差分スキームが構成できる。

4. 応用例

応用例として，加法的ノイズ (additive noise) と乗法的ノイズ (multiplicative noise) [1] の 2 例について議論する。

4.1 加法的ノイズの例

ハミルトン関数 $H(p, q, \eta(t))$ として

$$H = \frac{1}{2}p^2 - \alpha q \eta(t) \tag{44}$$

を考える。α は定数である。運動方程式は

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = \alpha \eta(t) \tag{45}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p \tag{46}$$

となる。これらの式を確率微分方程式の型に書き換えると次のようになる：

$$dp = \alpha \eta(t) dt = \alpha dW(t) \tag{47}$$

$$dq = p dt \tag{48}$$

(47) のように確率過程 $dW(t)$ は加法的ノイズとして方程式に入っている。$W(0) = 0$ とすれば，(47), (48) の厳密解は

$$p = p(0) + \alpha W(t) \tag{49}$$

$$q = q(0) + p(0)t + \alpha \int_0^t W(t)dt \tag{50}$$

で与えられる。

この系に対して差分スキーム (42), (43) を適用すると

$$p^{k+1} = p^{k-l+1} + (l\Delta t)\alpha \mu_\eta^{<l-1>} \eta^k \tag{51}$$

$$q^{k+1} = q^{k-l+1} + (l\Delta t)\frac{p^{k+1} + p^{k-l+1}}{2} \tag{52}$$

となる。(44) より，高々 2 変数関数の和で表されるエネルギー関数を平均化すればよいので $l \geq 2$ である。

$l = 2$ のとき，ウィーナー過程 W^k とランダムな力 η^k との関係を

$$\eta^k = \frac{W^{k+1} - W^{k-1}}{2\Delta t} \tag{53}$$

とすれば差分スキームは

$$p^{k+1} = p^{k-1} + \alpha(W^{k+1} - W^{k-1}) \tag{54}$$

$$q^{k+1} = q^{k-1} + \Delta t(p^{k+1} + p^{k-1}) \tag{55}$$

となる。$k=$ 偶数 と $k=$ 奇数 で完全に数列 (p^k, q^k) は分離してしまうので，偶数のみを採用すれば差分法 (54), (55) の厳密解は

$$p^k = p^0 + \alpha W^k \tag{56}$$

$$q^k = q^0 + p^0 t^k + \alpha \Delta t \sum_{j=0}^{\frac{k-2}{2}} (W^{2j+2} + W^{2j}) \tag{57}$$

となる。p^k の解 (56) は連続時間力学系の厳密解 (49) と同じであり，誤差はない。

一方 q^k の解 (57) は厳密解 (50) と同じではない。q^k の誤差の次数を強い意味において求める [1]。先ず連続関数 $W(t)$ に対して，積分に関する平均値の定理を区間 $[t^{2j}, t^{2j+2}]$ において適用すると

$$\begin{aligned}\int_{t^{2j}}^{t^{2j+2}} W(t)dt &= 2\Delta t W(t^{2j} + 2\theta^{2j}\Delta t) \\ &= 2\Delta t W^{2(j+\theta^{2j})} \quad (0 < \theta^{2j} < 1)\end{aligned} \tag{58}$$

が成り立つ。また，ある確率変数 x に対して

$$\langle x \rangle^2 \leq \langle x^2 \rangle \tag{59}$$

が成り立つ。(58), (59) に注意すると，

$$N = \frac{T}{2\Delta t} \tag{60}$$

として

$$\begin{aligned}&\left\langle \left| \sum_{j=0}^{N-1} (W^{2j+2} + W^{2j})\Delta t - \int_0^T W(t)dt \right| \right\rangle \\ &= \left\langle \left| \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ (W^{2j+2} + W^{2j})\Delta t - \int_{t^{2j}}^{t^{2j+2}} W(t)dt \right\} \right| \right\rangle \\ &\leq \sum_{j=0}^{N-1} \left\langle \left| (W^{2j+2} + W^{2j})\Delta t - \int_{t^{2j}}^{t^{2j+2}} W(t)dt \right| \right\rangle \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} \left\langle \left| (W^{2j+2} + W^{2j}) - 2W^{2(j+\theta^{2j})} \right| \right\rangle \Delta t \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} \sqrt{\left\langle \left| (W^{2j+2} + W^{2j}) - 2W^{2(j+\theta^{2j})} \right| \right\rangle^2} \Delta t \\ &\leq \sum_{j=0}^{N-1} \sqrt{\left\langle \left(W^{2j+2} + W^{2j} - 2W^{2(j+\theta^{2j})} \right)^2 \right\rangle} \Delta t\end{aligned}$$

を得る。

$$\begin{aligned}&\left\langle \left(W^{2j+2} + W^{2j} - 2W^{2(j+\theta^{2j})} \right)^2 \right\rangle \\ &= \Big\langle (W^{2j+2})^2 + (W^{2j})^2 + 4(W^{2(j+\theta^{2j})})^2 \\ &\quad +2W^{2j+2}W^{2j} - 4W^{2j+2}W^{2(j+\theta^{2j})} \\ &\quad -4W^{2j}W^{2(j+\theta^{2j})} \Big\rangle \\ &= t^{2j+2} + t^{2j} + 4t^{2(j+\theta^{2j})} \\ &\quad +2t^{2j} - 4t^{2(j+\theta^{2j})} - 4t^{2j} \\ &= 2\Delta t\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}&\left\langle \left| \sum_{j=0}^{N-1} (W^{2j+2} + W^{2j})\Delta t - \int_0^T W(t)dt \right| \right\rangle \\ &\leq \frac{T}{2}\sqrt{2\Delta t}\end{aligned} \tag{61}$$

が成り立つ。従って，

$$\langle |q^{2N} - q(T)| \rangle \leq \frac{|\alpha T|}{2}\sqrt{2\Delta t} \tag{62}$$

となり，強い意味における誤差の次数（strong order）は 0.5 である。

$l=3$ のとき，ウィーナー過程 W^k とランダムな力 η^k との関係を $l=2$ のときと同様に (53) のように選べば，差分スキームは

$$\begin{aligned}p^{k+1} &= p^{k-2} \\ &\quad + \frac{3\alpha}{4}\{(W^{k+1} + W^k) - (W^{k-1} + W^{k-2})\}\end{aligned} \tag{63}$$

$$q^{k+1} = q^{k-2} + \frac{3\Delta t}{2}(p^{k+1} + p^{k-2}) \tag{64}$$

となる。$k=3j$（3の倍数）とそれ以外で数列 (p^k, q^k) は完全に分離してしまうので，3の倍数のみを採用すれば (p^{3j+3}, q^{3j+3}) は (p^{3j}, q^{3j}) と $W^{3j+3}, W^{3j+2}, W^{3j+1}, W^{3j}$ によって決定され $l=2$ のときと同様に本質的には，1段階法となる。しかし，解は $l=2$ のときと違いより複雑になる。

4.2　乗法的ノイズの例

ハミルトン関数 $H(p, q, \eta(t))$ として久保振動子 [6]：

$$H = \omega(t)J(p, q) \tag{65}$$

$$\omega(t) = \alpha + \beta\eta(t) \tag{66}$$

$$J(p, q) = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) \tag{67}$$

を考える。α, β は定数である。一般の J に対して運動方程式は

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\omega(t)\frac{\partial J}{\partial q} \tag{68}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \omega(t)\frac{\partial J}{\partial p} \tag{69}$$

となる。J は

$$\begin{aligned}\frac{dJ}{dt} &= \frac{\partial J}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial J}{\partial q}\frac{dq}{dt} \\ &= \frac{\partial J}{\partial p}\left(-\omega\frac{\partial J}{\partial q}\right) + \frac{\partial J}{\partial q}\omega\frac{\partial J}{\partial p} \\ &= 0\end{aligned} \tag{70}$$

より保存量である。(68), (69) を確率微分方程式の型に書き換えると

$$dp = -\frac{\partial J}{\partial q}(\alpha dt + \beta dW(t)) \tag{71}$$

$$dq = \frac{\partial J}{\partial p}(\alpha dt + \beta dW(t)) \tag{72}$$

となり確率過程 $dW(t)$ は乗法的ノイズとして方程式に入っている。(67) の特別な J に対して

$$dp = -q(\alpha dt + \beta dW(t)) \tag{73}$$

$$dq = p(\alpha dt + \beta dW(t)) \tag{74}$$

となる。(73), (74) の厳密解は

$$p = p(0)\cos\phi(t) - q(0)\sin\phi(t) \tag{75}$$

$$q = p(0)\sin\phi(t) + q(0)\cos\phi(t) \tag{76}$$

$$\phi(t) = \alpha t + \beta W(t) \tag{77}$$

で与えられる。

加法的ノイズの場合とは異なる差分法を構成してみよう。そこで拡張されたエネルギー関数

$$H_{\rm ex} = r + \omega(s)J(p,q) \tag{78}$$

に対するチェーンルールを考える。

$$\left.\begin{aligned} &F = H_{\rm ex} \\ &n = 4 \\ &x_1 = p, x_2 = q, x_3 = r, x_4 = s \\ &m = 3 \\ &y_1 = r, y_2 = \omega, y_3 = J \end{aligned}\right\} \tag{79}$$

とおくと，チェーンルール (18), (19) は

$$\frac{dH_{\rm ex}}{dt} = \frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial r}\frac{dr}{dt} + \frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial \omega}\frac{d\omega}{dt} + \frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial J}\frac{dJ}{dt} \tag{80}$$

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{dt} \tag{81}$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{d\omega}{ds}\frac{ds}{dt} \tag{82}$$

$$\frac{dJ}{dt} = \frac{\partial J}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial J}{\partial q}\frac{dq}{dt} \tag{83}$$

となる。一方，運動方程式は

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial q} = -\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial J}\frac{\partial J}{\partial q} = -\omega\frac{\partial J}{\partial q} \tag{84}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial p} = \frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial J}\frac{\partial J}{\partial p} = \omega\frac{\partial J}{\partial p} \tag{85}$$

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial s} = -\frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial \omega}\frac{d\omega}{ds} = -J\frac{d\omega}{ds} \tag{86}$$

$$\frac{ds}{dt} = \frac{\partial H_{\rm ex}}{\partial r} = 1 \tag{87}$$

である。(84), (85) を (83) に代入すれば (70) となり J は保存する。(82), (86), (87) および (70) を (80) に代入すれば

$$\frac{dH_{\rm ex}}{dt} = 0$$

となり $H_{\rm ex}$ は保存する。

(79) のような選択の場合，変数 r, ω, J について平均化された離散時間エネルギー関数 $\mu^{<l>}_{r,\omega,J}H^k_{\rm ex}$ に対するチェーンルールは (24), (25) より

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta[\mu^{<l>}_{r,\omega,J}H^k_{\rm ex}]}{\Delta t} \\ &= [\delta_r^{1,-(l-1)}\mu^{<l-1>}_{\omega,J}H^k]\frac{\Delta^{1,-(l-1)}r^k}{l\Delta t} \\ &+ [\delta_\omega^{1,-(l-1)}\mu^{<l-1>}_{r,J}H^k]\frac{\Delta^{1,-(l-1)}\omega^k}{l\Delta t} \\ &+ [\delta_J^{1,-(l-1)}\mu^{<l-1>}_{r,\omega}H^k]\frac{\Delta^{1,-(l-1)}J^k}{l\Delta t}\end{aligned} \tag{88}$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)}r^k}{l\Delta t} = \frac{\Delta^{1,-(l-1)}r^k}{l\Delta t} \tag{89}$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)}\omega^k}{l\Delta t} = [\delta_s^{1,-(l-1)}\omega^k]\frac{\Delta^{1,-(l-1)}s^k}{l\Delta t} \tag{90}$$

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta^{1,-(l-1)}J^k}{l\Delta t} \\ &= [\delta_p^{1,-(l-1)}\mu_q^{1,-(l-1)}J^k]\frac{\Delta^{1,-(l-1)}p^k}{l\Delta t} \\ &+ [\delta_q^{1,-(l-1)}\mu_p^{1,-(l-1)}J^k]\frac{\Delta^{1,-(l-1)}q^k}{l\Delta t}\end{aligned} \tag{91}$$

となる。従って，運動方程式 (84)～(87) の差分化として

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta^{1,-(l-1)}p^k}{l\Delta t} \\ &= -[\delta_J^{1,-(l-1)}\mu^{<l-1>}_{r,\omega}H^k][\delta_q^{1,-(l-1)}\mu_p^{1,-(l-1)}J^k] \\ &= -[\mu^{<l-1>}_\omega\omega^k][\delta_q^{1,-(l-1)}\mu_p^{1,-(l-1)}J^k]\end{aligned} \tag{92}$$

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta^{1,-(l-1)}q^k}{l\Delta t} \\ &= [\delta_J^{1,-(l-1)}\mu^{<l-1>}_{r,\omega}H^k][\delta_p^{1,-(l-1)}\mu_q^{1,-(l-1)}J^k] \\ &= [\mu^{<l-1>}_\omega\omega^k][\delta_p^{1,-(l-1)}\mu_q^{1,-(l-1)}J^k]\end{aligned} \tag{93}$$

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta^{1,-(l-1)}r^k}{l\Delta t} \\ &= -[\delta_\omega^{1,-(l-1)}\mu^{<l-1>}_{r,J}H^k][\delta_s^{1,-(l-1)}\omega^k]\end{aligned}$$

$$= -[\mu_J^{<l-1>} J^k][\delta_s^{1,-(l-1)} \omega^k] \tag{94}$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)} s^k}{l\Delta t}$$

$$= \delta_r^{1,-(l-1)} \mu_{\omega,J}^{<l-1>} H^k = 1 \tag{95}$$

を採用すれば，チェーンルール (88)～(91) より

$$\frac{\Delta[\mu_{r,\omega,J}^{<l>} H_{\text{ex}}^k]}{\Delta t} = 0 \tag{96}$$

$$\frac{\Delta^{1,-(l-1)} J^k}{l\Delta t} = 0 \tag{97}$$

となり，平均化されたエネルギー関数 $\mu_{r,\omega,J}^{<l>} H_{\text{ex}}^k$ の保存則と J^k の保存則を得る。

s^k に対する差分方程式 (95) の解として $s^k = t^k$ を選べば，差分方程式 (92)，(93) は次のような l ステップの多段階スキームとして表される。

$$p^{k+1} \tag{98}$$

$$= p^{k-l+1} - (l\Delta t)[\mu_\omega^{<l-1>} \omega^k][\delta_q^{1,-(l-1)} \mu_p^{1,-(l-1)} J^k]$$

$$q^{k+1} \tag{99}$$

$$= q^{k-l+1} + (l\Delta t)[\mu_\omega^{<l-1>} \omega^k][\delta_p^{1,-(l-1)} \mu_q^{1,-(l-1)} J^k]$$

(65) より $l \geq 2$ である。

$l = 2$ のとき，ウィーナー過程 W^k とランダムな力 η^k との関係を (53) のように選べば，差分スキームは

$$p^{k+1} = p^{k-1} - (\Delta^{1,-1}\phi^k)\delta_q^{1,-1}\mu_p^{1,-1} J^k \tag{100}$$

$$q^{k+1} = q^{k-1} + (\Delta^{1,-1}\phi^k)\delta_p^{1,-1}\mu_q^{1,-1} J^k \tag{101}$$

$$\phi^k = \alpha t^k + \beta W^k \tag{102}$$

となる。$k=$ 偶数 と $k=$ 奇数 で完全に数列 (p^k, q^k) は分離してしまう。偶数のみを採用すれば上の差分スキームは三澤スキーム [7] と本質的に同じである。(67) の特別な J に対して

$$p^{k+1} = p^{k-1} - (\phi^{k+1} - \phi^{k-1})\frac{q^{k+1} + q^{k-1}}{2} \tag{103}$$

$$q^{k+1} = q^{k-1} + (\phi^{k+1} - \phi^{k-1})\frac{p^{k+1} + p^{k-1}}{2} \tag{104}$$

行列の形にすると

$$\begin{pmatrix} p^{k+1} \\ q^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1-(\gamma^k)^2}{1+(\gamma^k)^2} & -\frac{2\gamma^k}{1+(\gamma^k)^2} \\ \frac{2\gamma^k}{1+(\gamma^k)^2} & \frac{1-(\gamma^k)^2}{1+(\gamma^k)^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^{k-1} \\ q^{k-1} \end{pmatrix} \tag{105}$$

$$\gamma^k = \frac{\phi^{k+1} - \phi^{k-1}}{2} \tag{106}$$

である。ここで

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k-1}}{2} = \tan\frac{\psi^{k+1} - \psi^{k-1}}{2} \tag{107}$$

とおけば

$$\begin{pmatrix} p^{k+1} \\ q^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\psi^{k+1} - \psi^{k-1}) & -\sin(\psi^{k+1} - \psi^{k-1}) \\ \sin(\psi^{k+1} - \psi^{k-1}) & \cos(\psi^{k+1} - \psi^{k-1}) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p^{k-1} \\ q^{k-1} \end{pmatrix} \tag{108}$$

となるので差分方程式 (103)，(104) の厳密解は

$$p^k = p^0 \cos\psi^k - q^0 \sin\psi^k \tag{109}$$

$$q^k = p^0 \sin\psi^k + q^k \cos\psi^k \tag{110}$$

$$\psi^k = 2\sum_{j=0}^{\frac{k-2}{2}} \tan^{-1}\frac{\phi^{2j+2} - \phi^{2j}}{2} \tag{111}$$

となる。

(60) と同じように

$$N = \frac{T}{2\Delta t}$$

として誤差の次数を求める。先ず

$$\begin{aligned} &\langle |p^{2N} - p(T)| \rangle \\ &\leq \langle |\cos\psi^{2N} - \cos\phi^{2N}| \rangle |p^0| \\ &+ \langle |\sin\psi^{2N} - \sin\phi^{2N}| \rangle |q^0| \end{aligned} \tag{112}$$

に注意する。微分に関する平均値の定理より

$$\begin{aligned} &\cos\psi^{2N} - \cos\phi^{2N} \\ &= -(\psi^{2N} - \phi^{2N})\sin[\theta_C\psi^{2N} + (1-\theta_C)\phi^{2N}] \\ &(0 < \theta_C < 1) \end{aligned} \tag{113}$$

$$\begin{aligned} &\sin\psi^{2N} - \sin\phi^{2N} \\ &= (\psi^{2N} - \phi^{2N})\cos[\theta_S\psi^{2N} + (1-\theta_S)\phi^{2N}] \\ &(0 < \theta_S < 1) \end{aligned} \tag{114}$$

であるから

$$\begin{aligned} &\langle |p^{2N} - p(T)| \rangle \\ &\leq \langle |\psi^{2N} - \phi^{2N}| \rangle (|p^0| + |q^0|) \end{aligned} \tag{115}$$

となる。さらに

$$\begin{aligned} &\langle |\psi^{2N} - \phi^{2N}| \rangle \\ &= \left\langle \left| \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ (\psi^{2j+2} - \psi^{2j}) - (\phi^{2j+2} - \phi^{2j}) \right\} \right| \right\rangle \\ &\leq \sum_{j=0}^{N-1} \langle | \{ (\psi^{2j+2} - \psi^{2j}) - (\phi^{2j+2} - \phi^{2j}) \} | \rangle \end{aligned}$$

$$= \sum_{j=0}^{N-1} \left\langle \left| \left\{ 2\tan^{-1}\frac{\phi^{2j+2}-\phi^{2j}}{2} - \left(\phi^{2j+2}-\phi^{2j}\right) \right\} \right| \right\rangle$$
$$\le \frac{1}{12}\sum_{j=0}^{N-1} \left\langle \left|\phi^{2j+2}-\phi^{2j}\right|^3 \right\rangle$$
$$\le \frac{1}{12}\sum_{j=0}^{N-1} \sqrt{\left\langle \left|\phi^{2j+2}-\phi^{2j}\right|^6 \right\rangle} \qquad (116)$$

ここで不等式

$$\left|2\tan^{-1}\frac{x}{2} - x\right| \le \frac{|x|^3}{12} \qquad (117)$$

および (59) を用いた。従って

$$\left\langle \left|\phi^{2j+2}-\phi^{2j}\right|^6 \right\rangle$$
$$= \left\langle \left\{2\alpha\Delta t + \beta\left(W^{2j+2}-W^{2j}\right)\right\}^6 \right\rangle$$
$$= \Big\langle 64\alpha^6\Delta t^6 + 240\alpha^4\Delta t^4\beta^2\left(W^{2j+2}-W^{2j}\right)^2$$
$$+60\alpha^2\Delta t^2\beta^4\left(W^{2j+2}-W^{2j}\right)^4$$
$$+\beta^6\left(W^{2j+2}-W^{2j}\right)^6 \Big\rangle$$
$$= 64\alpha^6\Delta t^6 + 480\alpha^4\beta^2\Delta t^5$$
$$+720\alpha^2\beta^4\Delta t^4 + 120\beta^6\Delta t^3 \qquad (118)$$

より

$$\left\langle \left|p^{2N} - p(T)\right| \right\rangle$$
$$\le \frac{\left(\left|p^0\right| + \left|q^0\right|\right)T}{12}\sqrt{30\beta^6\Delta t + O\left(\Delta t^2\right)} \qquad (119)$$

となり，強い意味における誤差の次数は 0.5 である。これは q についても同様である。

5．おわりに

本研究では，2次元の確率ハミルトン力学系に対して拡張されたエネルギー関数 H_{ex} の値が保存するような差分スキームを提案した。そのような差分スキームを構成するには，連続時間系の微分に関するチェーンルールに対応する離散時間系の差分に関するチェーンルールが重要な鍵となる。差分に関するチェーンルールには関数そのものの差分と平均化された関数の差分の2種類のチェーンルールがある。本研究では，平均化された関数の差分に関するチェーンルール [4,5] を用いた。もし，論文 [2] で提案した関数そのものの差分に関するチェーンルールを用いた差分法を加法的ノイズの例 (44) に応用すると，差分スキームは

$$p^{k+1} = p^k - \frac{\alpha\Delta t}{2}\left(\eta^{k+1} + \eta^k\right) \qquad (120)$$

$$q^{k+1} = q^k + \frac{\Delta t}{2}\left(p^{k+1} + q^k\right) \qquad (121)$$

となる。しかし，このスキームではランダムな力 η^k とウィーナー過程 W^k を因果律に合うように結び付けられない。即ち区間 $t^k \le t \le t^{k+1}$ 内の $W(t)$ でどのように η^k を表しても $\eta^{k+1}+\eta^k$ は区間 $t^k \le t \le t^{k+1}$ 外の $W(t)$ を含んでしまう。従って，平均化された関数の差分に関するチェーンルールを用いることは，確率力学系では本質的に重要である。

応用例では，差分法の誤差が強い意味で 0.5 次であることを示したが，一般的な場合については示さなかった。また，他の計算法との比較もしなかった。さらに平均化する変数の他の選択についても議論しなかった。これらに加えて，散逸力学系や多変数の系に対する差分法の構成も今後の課題として残されている。

参考文献

[1] P.E.Kloeden and E.Platen (1992): Numerical Solution of Stochastic Differential Equations, Springer.
[2] 石森勇次（2000）：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，富山県立大学紀要，Vol.7，pp.15-20.
[3] 鈴木増夫（1994）：統計力学，岩波講座　現代の物理学第4巻，岩波書店.
[4] 石森勇次（1995）：シフト演算子の対称式と差分法，京大数理解析研究所講究録，Vol.933，pp.153-165.
[5] 石森勇次（1996）：シフト演算子の対称式と差分法，富山県立大学紀要，Vol.6，pp.8-14.
[6] R.Kubo, M.Toda and N.Hashitsume (1991): Statistical Physics II, Springer.
[7] T.Misawa (2000): Energy Conservative Stochastic Difference Scheme for Stochastic Hamilton Dynamical Systems, Japan J.Indust.Appl.Math., Vol.17, pp.119-128.

Energy-Conserving Difference Schemes for Stochastic Hamiltonian Systems

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

Difference Schems are proposed for the two-dimensional Hamiltonian system with stochastic noise. The numerical methods guarantee that the extented energy function is conserved.

Key Words: difference method, stochastic differential equations, energy conservation, Hamiltonian systems