総合研究大学院大学数物科学研究科天文科学専攻平成16年度専攻講義

宇宙物理学・宇宙論II

—重力少体系シミュレーション—

平成16年11月9日, 16日

伊藤孝士 (天文学データ解析計算センター助手, tito@cc.nao.ac.jp)

0. 重力少体系

前回までに小久保英一郎先生により講義が行われた「重力多体系」という言葉に関してはそれまでにも耳にしたことのある人が多いと思う。しかし「重力少体系」という用語はあまり聞き馴れたものではない。「重力少体系」などではなく「重力少数体系」という用語を使えという人も居るようだが、それでは何故「重力多数体系」とは言わないのかという疑問もある。またある人は「重力少数多体系」という用語を使うべきだと主張するが、こちらはかなり意味不明である。

重力多体系の研究と重力少体系の研究には粒子の数N以外に本質的な違い無い。敢えて違いを述べるとすれば、個々の粒子の具体的な軌道がどのくらい問題にされるのかどうかという点にあると言えるかもしれない。典型的な重力多体系である恒星系力学や微惑星集積の問題に於いても各々の粒子の軌道が正確に決まることは大きな前提条件となるのだが、学術的な興味は個々の軌道ひとつひとつよりもそうした軌道群が全体として織り成す統計的性質であることが多い。それに対して重力少体系の問題、例えば太陽系惑星の軌道進化計算は、特定の惑星の軌道の長年変化を出来るだけ正確に知ろうとするものである。こういう場合には個々の惑星の軌道変動を精密かつ極めて高速に計算できる算法が必要とされる。またその定義により重力少体系に於ける粒子数は少ないので (太陽系惑星の例で言えばせいぜい$N = 9$)、重力多体系の際に役に立った専用計算機GRAPEシステムのお世話になることも効率的とは言えない。

このような重力少体系の力学計算 (「小Nを高速かつ精密に解く」) に於いて現在もっとも広く使われているのがシンプレクティク数値積分法である。ハミルトン系の時間発展が正準変換であるという事実に立脚するシンプレクティク数値積分法は、太陽系惑星のような微小摂動系に於いては比類無く高速かつ高精度で動作する。本講義ではシンプレクティク数値積分法の概要を駆け足で眺めつつ、惑星科学・天文学の領域に於いてシンプレクティク数値積分法が果たしている役割について簡単におさらいしてみたい。

惑星科学・天文学に於いてシンプレクティク数値積分法が使われるのは専ら微小摂動系である (例えばケプラー運動に近い惑星や小天体の運動、自由回転に近い剛体の運動など)。このような系に於けるシンプレクティク数値積分法利用の利点は以下のようなものがある。

1. 微小摂動系に於いては高速に求解が可能である
2. 系の時間発展の正準変換性 (シンプレクティク性) が保存される
3. 全エネルギーが永年誤差無しで保存される
4. 重力多体系を扱う際には角運動量が (丸目誤差の範囲内で) 厳密に保存される
5. 偶数次の方法は時間対称性を持つ
6. 解析力学および正準変換摂動論を用いて理論体系が明瞭に構築される

他の方法、例えば小久保英一郎先生が解説した対称型スキーム (symmetric scheme) などと比較して特に重要なのは1. であろう。2. はシンプレクティク数値積分法の定義のようなものであり、その作り方から必然的に導かれる性質が3. である。本講義で4., 5. を説明している時間はないかもしれない。6. は好みの問題であるが、天体力学の研究に必要となる解析力学および正準変換摂動論の知識があればとても素直にシンプレクティク数値積分法を理解できることは事実であろう。

1. 必要な知識の簡単復習

シンプレクティク数値積分法の基本原理の理解にはハミルトン力学の知識が必要とされる。とは言え惑星系力学への応用に使うくらいであればさほど深遠な知識は必要なく、学部2,3 年生が期末試験で単位を取れるくらいの物事を知っていれば良いだろう。

以下の内容は解析力学を扱った教科書であれば何にでも書いている事柄ばかりであるので、より詳細については末尾に挙げたような教科書で勉強して頂きたい。一部の内容は現在では古い天体力学の教科書や文献にしか記されていないかもしれないので、その場合には自力で調べるか、身近にいる天体力学の古豪達に尋ねて理解しよう。

1.1 ラグランジュ形式

質点 m の運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V が以下のように表されるとする。

$$T = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right), \quad V = V(x, y, z) \tag{1}$$

いわゆる運動方程式とはこの場合以下である。

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad m\ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y}, \quad m\ddot{z} = -\frac{\partial V}{\partial z} \tag{2}$$

このとき次の量がラグランジアン (Lagrangian) と呼ばれる。

$$L(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) \equiv T - V \tag{3}$$

ラグランジアン L を x, y, z で偏微分すると

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad \frac{\partial L}{\partial y} = -\frac{\partial V}{\partial y}, \quad \frac{\partial L}{\partial z} = -\frac{\partial V}{\partial z} \tag{4}$$

同様にしてラグランジアン L を $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ で偏微分すると

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = -\frac{\partial V}{\partial \dot{x}}, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = -\frac{\partial V}{\partial \dot{y}}, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = -\frac{\partial V}{\partial \dot{z}} \tag{5}$$

これより元の運動方程式 (2) は以下になる。

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\right) - \frac{\partial L}{\partial y} = 0, \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}}\right) - \frac{\partial L}{\partial z} = 0 \tag{6}$$

この (7) をラグランジュの方程式と呼ぶ。より高自由度の問題を考える場合には x, y, z の代わりに一般化された座標 q_j) を考えて

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0, \quad (j = 1, \ldots, N) \tag{7}$$

となる。N は系の自由度である。

1.2 ハミルトン形式

1.2.1 正準方程式

前節の末尾で考えた座標 q_j を今後は一般化座標と呼ぶことにする。これに対する一般化運動量 p_j を以下のように定義する。

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \quad (j = 1, \ldots, N) \tag{8}$$

ここで唐突であるが以下の関数 H を導入する。

$$\begin{aligned} H &\equiv \sum_{j=1}^{N} p_j \dot{q}_j - L(q_j, \dot{q}_j) \\ &= \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L(q_j, \dot{q}_j) \\ &= H(q_1, \ldots, q_N, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_N) \\ &= H(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N) \end{aligned} \tag{9}$$

式 (9) で定義される H がハミルトニアン (Hamiltonian) である。式 (9) の末尾では

$$\dot{q}_j = \dot{q}_j(q_1, \ldots, p_1, \ldots) \tag{10}$$

と書ける事実から $\dot{q}_j$ を消去し、その代わりに p_j を導入している。ちなみに、一般的にはハミルトニアン (9) は時刻 t に陽に依存しても良い。その場合には変数を一組増やしたりすることでまったく同様な定式化を進めて行くことが出来る。

式 (9) のハミルトニアンを一般化運動量 p_j で偏微分する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p_j} &= \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\sum_{k=1}^{N} p_k \dot{q}_k - L(q_1, \ldots, q_N, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_N) \right) \\ &= \dot{q}_j + \sum_{k=1}^{N} p_k \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial p_j} - \sum_{k=1}^{N} p_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial p_j} \\ &= \dot{q}_j + \sum_{k=1}^{N} \left(p_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial p_j} \\ &= \dot{q}_j \end{aligned} \tag{11}$$

今度は H を一般化座標 q_j で偏微分する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial q_j} &= \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\sum_{k=1}^{N} p_k \dot{q}_k - L(q_1, \ldots, q_N, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_N) \right) \\ &= \sum_{k=1}^{N} p_k \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_j} - \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_j} + \frac{\partial L}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial q_j} \right) \\ &= \sum_{k=1}^{N} \left(p_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} \\ &= -\frac{\partial L}{\partial q_j} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \quad (\because (7)) \\
&= -\dot{p}_j \qquad (12)
\end{aligned}
$$

以上より得られるのが以下のハミルトンの運動方程式である。

$$
\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (j = 1, \ldots, N) \tag{13}
$$

これをもともとの運動方程式 (2) と比較すると、N 本の二階微分方程式方程式が $2N$ 本の一階微分方程式になっていることがわかる。なお式 (13) 正準運動方程式とも呼ばれる。この時 $2N$ 個の変数セット $q_j, p_j (j = 1, \ldots, N)$ は正準変数と呼ばれ、q_j と p_j は正準共役であると言う。

1.2.2　ハミルトニアンの物理的意味

ラグランジアン L が時刻 t を陽に含まない場合には

$$
\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \tag{14}
$$

である。ここで T は $\dot{q}_j$ の二次の同次式

$$
\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2 + \dot{q}_3^2 + \ldots
$$

であるから以下が成り立つ。

$$
\sum_{j=1}^{N} \dot{q}_j \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} = 2T \tag{15}
$$

従って

$$
\begin{aligned}
H &= \sum_{j=1}^{N} p_j \dot{q}_j - L(q_j, \dot{q}_j) \\
&= \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L \\
&= 2T - (T - V) \\
&= T + V \qquad (16)
\end{aligned}
$$

と言うわけで、ハミルトニアン H は系の全エネルギーという意味合いを持つ。H が時刻 t を陽に含まない場合には

$$
\frac{\partial H}{\partial t} = 0
$$

なので

$$
\frac{dH}{dt} = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\partial H}{\partial p_j} \dot{p}_j + \frac{\partial H}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j \right) = 0 \tag{17}
$$

となり、ハミルトニアンは時刻に対して一定の保存量となる。つまりエネルギー積分である。

1.2.3　循環座標

ハミルトニアン $H(q_1,\dots,q_N,p_1,\dots,p_N)$ がこのうちひとつの座標、例えば q_j を含んでいない場合、q_j は循環座標と呼ばれる。循環座標に共役な正準変数は運動の積分 (定数) となる。

$$\frac{\partial H}{\partial q_j} = -\dot{p}_j = 0, \quad \therefore p_j = \text{一定} \tag{18}$$

1.3　正準変換

正準変換について記し出すとそれだけで分厚い書籍が何冊も書けてしまう。ここでは大概の詳細を一挙に踏み倒して必要な結論だけを述べる。正準運動方程式 (13) を再度書くと

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (j = 1,\dots,N) \tag{19}$$

であるが、ここで (q_j, p_j) から (Q_j, P_j) への変数変換を行ったとする。

$$\begin{cases} Q_j = Q_j(q_1,\dots,q_N,p_1,\dots,p_N) \\ P_j = P_j(q_1,\dots,q_N,p_1,\dots,p_N) \end{cases}$$

この時 (Q_j, P_j) に関して再び正準型の方程式

$$\dot{Q}_j = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_j}, \quad \dot{P}_j = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_j} \quad (j = 1,\dots,N) \tag{20}$$

$$\tilde{H} = \tilde{H}(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N) \tag{21}$$

が成立するならば、変数変換 $(q_j, p_j) \to (Q_j, P_j)$ は正準変換であると言う。$\tilde{H}$ は新しい系でのハミルトニアンである。

正準変換に関する定義や性質は星の数ほどあるので、詳細については末尾に掲載した参考文献を参照して勉強してほしい。

1.3.1　正準変換の合成

或る変数変換 $(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) \to (\boldsymbol{q}^*, \boldsymbol{p}^*)$ が正準変換であり、別の変数変換 $(\boldsymbol{q}^*, \boldsymbol{p}^*) \to (\boldsymbol{q}^{**}, \boldsymbol{p}^{**})$ も正準変換であるとき、変数変換 $(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) \to (\boldsymbol{q}^{**}, \boldsymbol{p}^{**})$ は正準変換となる。これについての証明はどの教科書にも載っているのでここには記さない。

1.3.2　シンプレクティク行列と正準変換

変数変換 $(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) \to (\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P})$ のヤコビ行列

$$M = \frac{\partial(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N)}{\partial(q_1,\dots,q_N,p_1,\dots,p_N)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_1}{\partial q_1} & \frac{\partial Q_2}{\partial q_1} & \cdots & \frac{\partial P_N}{\partial q_1} \\ \frac{\partial Q_1}{\partial q_2} & \frac{\partial Q_2}{\partial q_2} & \cdots & \frac{\partial P_N}{\partial q_2} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ \frac{\partial Q_1}{\partial p_N} & \frac{\partial Q_2}{\partial p_N} & \cdots & \frac{\partial P_N}{\partial p_N} \end{pmatrix} \tag{22}$$

および以下で定義されるシンプレクティク行列 J を考える。但し $\mathbf{0}$ は成分がすべて 0 の行列、$\mathbf{1}$ は単位行列を表す。

$$J = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{ccccc|ccccc} & & \text{\huge 0} & & & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ & & & & & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ & & & & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ & & & & & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & & & & & \\ 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 & & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & & & \text{\huge 0} & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & & & & & \end{array}\right). \tag{23}$$

このとき以下が成り立つ。

$$\text{変数変換}\,(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \to (\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P})\,\text{が正準変換} \iff M^T J M = J$$

1.4 Poisson 括弧

A, B を正準変数 $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ の任意関数とする。この時 Poisson 括弧 $\{A,B\}_{(q,p)}$ は以下で定義される。

$$\{A,B\}_{(q,p)} \equiv \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \tag{24}$$

通常は添字を省略して単に $\{A,B\}$ と書く場合が多い。また $\{,\}$ を利用する流儀は主流ではないようであり、物理学の教科書では Poisson 括弧が $[A,B]$ と記されていることが多いようである。しかし天体力学の分野ではほとんどの場合 $\{A,B\}$ と記す。

1.4.1 Poisson 括弧の性質

Poisson 括弧はシンプレクティク数値積分法の基礎理論に於いて致命的に重要な役割を果たす。証明は略すが特に以下の性質は重要である。

$$\text{変数変換}\,(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \to (\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P})\,\text{が正準変換である} \iff$$
$$\{Q_i,P_j\}_{(q,p)} = \delta_{ij}\ \text{かつ}\ \{Q_i,Q_j\}_{(q,p)} = \{P_i,P_j\}_{(q,p)} = 0 \quad (i,j = 1,\ldots,N)$$

Poisson 括弧については他にも重要な性質が多い。

- $\{A,B\} = -\{B,A\}$
- λ_1, λ_2 を定数とすると $\{A, \lambda_1 B + \lambda_2 C\} = \lambda_1 \{A,B\} + \lambda_2 \{A,C\}$
- $\{AB,C\} = A\{B,C\} + \{A,C\}B$
- $\{\{A,B\},C\} + \{\{B,C\},A\} + \{\{C,A\},B\} = 0 \quad$ (Jacobi 恒等式の一種)

1.4.2 Poisson 括弧と正準方程式

Poisson 括弧の定義により、ハミルトンの正準方程式 (13) は以下のように書き換えられる。負号が消えてむしろすっきりしたかもしれない。

$$\dot{q}_j = \{q_i, H\}, \quad \dot{p}_j = \{p_i, H\} \tag{25}$$

1.4.3 Poisson 括弧と正準不変量

Poisson 括弧の値は正準変換に対して不変である。即ち $(q,p) \to (Q,P)$ という正準変換を念頭に置く場合、

$$\{A, B\}_{(q,p)} = \{A, B\}_{(Q,P)} \tag{26}$$

が成立する。

Poisson 括弧を使うと任意関数 $F(q,p,t)$ の時間微分は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}F(q,p,t) &= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i\right) + \frac{\partial F}{\partial t} \\ &= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) + \frac{\partial F}{\partial t} \\ &= \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \end{aligned} \tag{27}$$

F が時刻 t を陽に含んでいなければ

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} \tag{28}$$

となるので、ここで $F = H$ の場合を考えると

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} = 0 \tag{29}$$

となり、ハミルトニアン H が定数である事実が得られる。また F が t を陽に含まず、且つ

$$\{F, H\} = \{H, F\} \tag{30}$$

が成立するならば、

$$\{F, H\} = -\{H, F\} = \{H, F\} \tag{31}$$

となるので結局 $\{F, H\} = \{H, F\} = 0$ となり、式 (28) の結果より F は定数となる。即ち時刻を陽に含まず且つハミルトニアンと交換可能な量は運動の積分になることがわかる。

1.5 ハミルトン系の時間発展と正準変換

ここの議論もかなりの経過を踏み倒したものであるが、本講義の目的にはとりあえず結論だけを覚えてもらえば良い。結論とは、正準方程式 (13) の解 (q,p) の時間発展

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} q(t+\tau) \\ p(t+\tau) \end{pmatrix}$$

は正準変換であるという事実である。この事実はシンプレクティク数値積分法が基く根本的な原理である。

正準方程式の解の時間発展が厳密に正準変換になっていることの雰囲気的な説明は様々な教科書になされているが、論理的に厳密なものはほとんどお目に書からない。以下では、変数変換 $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \to (\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P})$ が正準変換であるという事実と、シンプレクティク行列 J, 変数変換のヤコビ行列 $M \equiv \partial(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P})/\partial(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ が $MJM^T = J$ あるいは $M^T JM = J$ という関係を満たすことが同値であるという事実を利用している (証明略)。

$2n \times 2n$ のシンプレクティク行列 J は (23) で定義した。シンプレクティク行列 J はその成分から明らかなように

$$J^2 = -\mathbf{1}, \quad \det J = 1, \tag{32}$$

$$J^T J = \mathbf{1}, \quad \therefore J^T = -J = J^{-1}, \tag{33}$$

という性質がある。ここで $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ を $2n$ 個の正準変数セットとする。$S(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ を $\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}$ の任意関数とし、以下の方程式によりパラメータ τ を導入する。関数 S を用いて τ を定義すると言い換えても良い。

$$\frac{d\boldsymbol{q}}{d\tau} = \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{p}}, \quad \frac{d\boldsymbol{p}}{d\tau} = -\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{q}}. \tag{34}$$

ここで $\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ と置くと ($\boldsymbol{z}$ ひとつで $\boldsymbol{q}$ と $\boldsymbol{p}$ を代表させる)、式 (34) は一本に纏まり、以下のようになる。

$$\frac{d\boldsymbol{z}}{d\tau} = J\frac{\partial S(\boldsymbol{z})}{\partial \boldsymbol{z}}. \tag{35}$$

方程式 (35) の解は $2n$ 個の積分定数 $c_1, c_2, \ldots, c_{2n}$ を含む。ところで、式 (35) のような自励系の解が $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}(t)$ である時、c を定数として $\boldsymbol{z}(t+c)$ も解であることが一般的に言える。これより、$2n$ 個の積分定数のうちどれかはパラメータ τ に対する付加定数であるということになる。従って、積分定数 c_1 がこの付加定数に相当するとすると、方程式 (35) の解は以下のように書くことができる。

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}(\tau + c_1, c_2, \ldots, c_{2n}). \tag{36}$$

ここで初期値に相当する量、つまり $\tau = 0$ での $\boldsymbol{z}$ を $\boldsymbol{z}^{(0)}$ と書くことにする。即ち以下である。

$$\boldsymbol{z}^{(0)} = \boldsymbol{z}(c_1, c_2, \ldots, c_{2n}). \tag{37}$$

式 (37) を c_1 から c_{2n} に関する連立方程式と看做して各 c_j について解き、それを $\boldsymbol{z}$ の式 (36) に代入すると、形式的に以下の結果を得る。

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}(\boldsymbol{z}^{(0)}; \tau). \tag{38}$$

以下では、上記のようにして得られた変換 $\boldsymbol{z}^{(0)} \to \boldsymbol{z}$ が正準変換になっていることを示す。まず、形式解 (38) を方程式 (35) に代入する。

$$\frac{d}{d\tau}\boldsymbol{z}(\boldsymbol{z}^{(0)}; \tau) = J\frac{\partial S(\boldsymbol{z})}{\partial \boldsymbol{z}}. \tag{39}$$

次に、式 (39) の両辺を $\boldsymbol{z}^{(0)}$ で偏微分する。変数変換 $\boldsymbol{z}^{(0)} \to \boldsymbol{z}$ のヤコビ行列 M

$$M \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial z_1}{\partial z_1^{(0)}} & \frac{\partial z_2}{\partial z_1^{(0)}} & \cdots & \frac{\partial z_{2n}}{\partial z_1^{(0)}} \\ \frac{\partial z_1}{\partial z_2^{(0)}} & \frac{\partial z_2}{\partial z_2^{(0)}} & \cdots & \frac{\partial z_{2n}}{\partial z_2^{(0)}} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ \frac{\partial z_1}{\partial z_{2n}^{(0)}} & \frac{\partial z_2}{\partial z_{2n}^{(0)}} & \cdots & \frac{\partial z_{2n}}{\partial z_{2n}^{(0)}} \end{pmatrix}, \tag{40}$$

を考えると、式 (39) の左辺を $\boldsymbol{z}^{(0)}$ で偏微分した結果は行列 $dM/d\tau$ となる。

次に右辺だが、偏微分する前の式 (39) の右辺は列ベクトル

$$J \times \begin{pmatrix} \frac{\partial S}{\partial z_1} \\ \frac{\partial S}{\partial z_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial S}{\partial z_{2n}} \end{pmatrix} \tag{41}$$

になっている。ここで出て来るベクトル $\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{z}(\boldsymbol{z}^{(0)})}$ をベクトル $\boldsymbol{z}^{(0)}$ で偏微分して出来上がる $2n \times 2n$ の行列を考える。この行列の (i,j) 成分は以下のようになるはずである。

$$\frac{\partial}{\partial z_j^{(0)}} \left(\frac{\partial S(\boldsymbol{z}(\boldsymbol{z}^{(0)}))}{\partial z_i} \right) = \sum_{k=1}^{2n} \frac{\partial}{\partial z_k} \left(\frac{\partial S(\boldsymbol{z}(\boldsymbol{z}^{(0)}))}{\partial z_i} \right) \frac{\partial z_k}{\partial z_j^{(0)}}. \tag{42}$$

式 (42) は $\frac{\partial}{\partial z_k} \left(\frac{\partial S(\boldsymbol{z}(\boldsymbol{z}^{(0)}))}{\partial z_i} \right)$ を (i,k) 成分とする行列 (これを S_{zz} と書く) と $\frac{\partial z_k}{\partial z_j^{(0)}}$ を (j,k) 成分とする行列 (これは M そのもの) の積の (i,j) 要素を表している。従って、式 (39) の右辺を $\boldsymbol{z}^{(0)}$ で偏微分した結果は行列 $JS_{zz}M$ となる。ということで結局

$$\frac{d}{d\tau} M = JS_{zz}M \tag{43}$$

となるが、式 (43) の両辺を転置すると

$$\frac{d}{d\tau} M^T = -M^T S_{zz} J \tag{44}$$

となる。これは $J^T = -J$ という事実より明らかである。

ここで唐突だが、行列 M^TJM を τ で微分してみよう。J は定数行列なので

$$\frac{d}{d\tau} \left(M^T JM \right) = \left(\frac{d}{d\tau} M^T \right) JM + M^T J \left(\frac{d}{d\tau} M \right), \tag{45}$$

となる。この式 (45) の右辺に出て来る $\frac{dM}{d\tau}$ と $\frac{dM^T}{d\tau}$ に、上で得られた結果である (43) と (44) を代入する。シンプレクティク行列 J の性質 (32)(33) より、

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \left(M^T JM \right) &= -M^T S_{zz} J \cdot JM + M^T J \cdot JS_{zz} M \\ &= M^T S_{zz} M - M^T S_{zz} M \\ &= \mathbf{0}. \end{aligned} \tag{46}$$

τ による微分が 0 になるのであるから、式 (46) を τ で一回積分すると

$$M^T JM = (\text{定数行列}), \tag{47}$$

となる。式 (47) はヤコビ行列 M の中にパラメータ τ への依存性を含んでいる。定数行列が何であるかを求めるために $\tau = 0$ すなわち $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}^{(0)}$ と置くと、M の定義から

$$M_{\tau=0} = \mathbf{1}, \tag{48}$$

となるので、式 (47) の定数行列は

$$(\text{定数行列}) = \mathbf{1}^T J \mathbf{1} = J, \tag{49}$$

であることがわかる。故に結局

$$M^T J M = J, \tag{50}$$

となる。M は変数変換 $\boldsymbol{z}^{(0)} \to \boldsymbol{z}$ のヤコビ行列であるから、これとシンプレクティク行列 J の間に式 (50) という関係が成り立つということは、即ち変数変換 $\boldsymbol{z}^{(0)} \to \boldsymbol{z}$ が正準変換であることを意味している。もちろんその逆変換、$\boldsymbol{z} \to \boldsymbol{z}^{(0)}$ も正準変換となる。

ここまでは $S(\boldsymbol{z}(\boldsymbol{z}^{(0)}))$ を $\boldsymbol{z}$ の任意関数、τ を式 (34) で導入されるパラメータとして来た。ここに至って S をハミルトニアン $H(\boldsymbol{z}) = H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ と置けば、方程式 (34) は正準変数セット $(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ とハミルトニアン H が支配する系の正準方程式を表し、τ は時刻変数 t の意味を持つ。となれば、上述した $\boldsymbol{z}^{(0)} \to \boldsymbol{z}$ が正準変換であるとは、ハミルトニアン H が支配する系の時間発展 ($t = 0$ から $t = \tau$ まで) が正準変換であることを示しているに他ならない。上記の説明では τ の大きさに関しては何らの制約も与えておらず、無限小から有限の値までの τ について同等な議論が成立する。

2. シンプレクティク数値積分法の基礎

シンプレクティク数値積分法はここ 10 年ほどで天文学の世界に完全に浸透し、驚くべき速度で進歩を続けている。図 1 にはその発展系統樹の極く一部を示した。本講義で解説するのは図 1 の上部左側、シンプレクティク数値積分法の一般理論計算機専門委員会から $H = T(p) + V(q)$ 型の陽解法、二次の方法、混合変数型の方法、Jacobi 座標の辺りまでである。

2.1 ハミルトニアンの分割

ハミルトンの正準運動方程式を再び書き下すと

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{51}$$

であるが、便宜的な変数 z を使って上記二本をまとめて書いてみる。

$$\frac{dz}{dt} = \{z, H(z)\}, \tag{52}$$

z は「q または p」という意味である。ここで微分演算子 $\{\ , G\}$ を以下のように導入する[1]。

$$\{\ , G\} F \equiv \{F, G\}. \tag{53}$$

すると正準方程式 (52) は以下のように書ける。

$$\frac{dz}{dt} = \{\ , H\} z. \tag{54}$$

この方程式 (54) について、時刻 $t = 0$ から $t = \tau$ までの $z(t)$ の時間発展を表現する形式的な解は以下のように書ける。

$$z(\tau) = \left[e^{\tau \{\ , H\}} \right] z(0). \tag{55}$$

[1] 後々になるとこの $\{\ , G\}$ を便宜上 D_G などと表記することが出て来るかもしれない。勿論 $\{\ , G\} = D_G$ である。

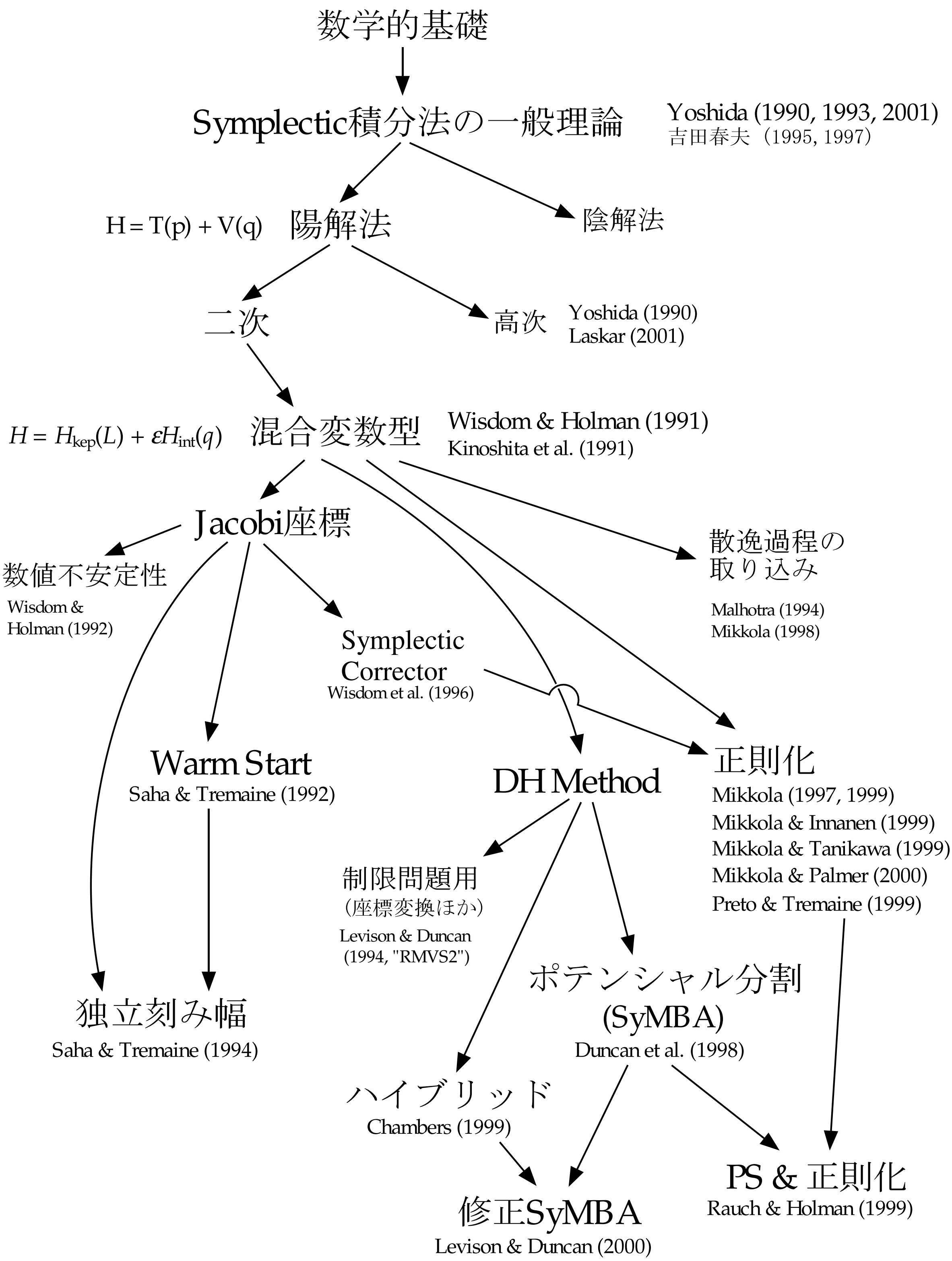

図 1. シンプレクティク数値積分法の発展系統樹の一部。

但し解 (55) は飽くまで形式的な解であることを強調しておく。私達が必要な形に「解けた」わけではない。ある種の特殊な系でなければ一般の問題について解 (55) を解析的に簡単な形で表現することは出来ない。シンプレクティク数値積分法とは、上手い工夫を行うことで解析的にではなく数値的に解 (55) を求めよう、しかも出来るだけ高速かつ精密に求解しようという目的を達成するための方法である。その依拠する所は唯一、ハミルトニアンを積分可能 (求積可能) な部分に分割するという点である。

ここでは以下のように自明に分割可能なハミルトニアンを考える。例えば $T(p)$ は運動エネルギー, $V(q)$ はポテンシャルエネルギーである。

$$H = T(p) + V(q). \tag{56}$$

すると形式的な解 (55) は

$$z(\tau) = e^{\tau(A+B)} z(0), \tag{57}$$

となる。但し

$$A \equiv \{\ , T\} \text{ または } D_T, \quad B \equiv \{\ , V\} \text{ または } D_V, \tag{58}$$

である。

このように分割可能なハミルトニアンの各成分 $T(p)$ と $V(q)$ に関する時間発展

$$z_A(\tau) = e^{\tau A} z_A(0), \tag{59}$$

$$z_B(\tau) = e^{\tau B} z_B(0). \tag{60}$$

は正準変換 (シンプレクティク変換) になっている。例えば (59) の場合について見てみる。この場合の $T(p)$ についての正準方程式を書き下すと

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial T(p)}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial T(p)}{\partial q}. \tag{61}$$

$T(p)$ は q を含まないので

$$\frac{dp}{dt} = 0, \tag{62}$$

従って p は定数、よって $T(p)$ も定数となる。だから

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial T(p)}{\partial p}, \tag{63}$$

は定数 p の関数であり、これまた定数である。従って定数 C を使って

$$q = Ct + q_0, \tag{64}$$

という感じに書け、式 (62)(64) は粒子が位相空間 (q, p) 内で q 方向に等速直線運動することを表す。まったく同様にして式 (60) に関する $V(q)$ についての正準方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial V(p)}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V(p)}{\partial q} \tag{65}$$

からは位相空間 (q, p) 内での p 方向の等速直線運動という解が得られる。シンプレクティク行列を書き下すまでもなくこうした位相空間内での等速直線運動は面積保存かつ正準変換になってい

る。正準変換の一般的性質より、正準変換を連続させた変換はやはり正準変換になるので、写像 $e^{\tau A}e^{\tau B}$ はやはり正準変換になる。というわけで分割可能なハミルトニアンについてはその時間発展を正準変換性を損わずに計算することが可能であることが示された。

z に対する時間発展 (57) の演算子 $e^{\tau(A+B)}$ を τ についてテイラー展開すると

$$\begin{aligned} e^{\tau(A+B)} &= 1+\tau(A+B)+\frac{\tau^2}{2}(A+B)^2+O(\tau^3) \\ &= 1+\tau(A+B)+\frac{\tau^2}{2}\left(A^2+2AB+BA+B^2\right)+O(\tau^3) \end{aligned} \tag{66}$$

ここでは演算子 A, B が一般には可換ではない $(AB \neq BA)$ であることに注意する。一方、ハミルトニアンが分割可能であることを意識した $e^{\tau A}e^{\tau B}$ のテイラー展開は

$$\begin{aligned} e^{\tau A}e^{\tau B} &= \left(1+\tau A+\frac{\tau^2}{2}A^2+O(\tau^3)\right)\left(1+\tau B+\frac{\tau^2}{2}B^2+O(\tau^3)\right) \\ &= 1+\tau(A+B)+\frac{\tau^2}{2}\left(A^2+2AB+B^2\right)+O(\tau^3) \end{aligned} \tag{67}$$

となり、真の解の展開 (66) とは $O(\tau)$ まで一致していることがわかる。即ち (67) のようにして z の時間発展を追う方法は一次の解法である。

2.2 BCH 公式と代理ハミルトニアン

非可換な演算子 (作用素) X, Y の指数関数の展開に関する Baker–Campbell–Hausdorff (BCH) 公式というものがある。e^Xe^Y が

$$e^Xe^Y = e^Z, \tag{68}$$

と書ける時、Z が以下の形をしているというものである。

$$Z = X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\frac{1}{12}\left([X,[X,Y]]+[Y,[Y,X]]\right)+\frac{1}{24}[X,[Y,[Y,X]]]+\cdots, \tag{69}$$

$$[X,Y] \equiv XY-YX \tag{70}$$

BCH 公式を適用すると、一次のシンプレクティク数値積分法については

$$e^{\tau\{\,,T\}}e^{\tau\{\,,V\}} = e^{\tau\left\{\,,\tilde{H}_{\rm 1st}\right\}}, \tag{71}$$

のように書け、

$$\tilde{H}_{\rm 1st} = T+V+\frac{\tau}{2}\{T,V\}+\frac{\tau^2}{12}\left(\{\{T,V\},V\}+\{\{V,T\},T\}\right)+\frac{\tau^3}{24}\{\{\{T,V\},V\},T\}+\cdots, \tag{72}$$

となる。二次の公式についても同様に

$$e^{\frac{\tau}{2}\{\,,T\}}e^{\tau\{\,,V\}}e^{\frac{\tau}{2}\{\,,T\}} = e^{\tau\left\{\,,\tilde{H}_{\rm 2nd}\right\}}, \tag{73}$$

$$\tilde{H}_{\rm 2nd} = T+V+\tau^2\left(\frac{1}{12}\{\{T,V\},V\}-\frac{1}{24}\{\{V,T\},T\}\right)+O(\tau^4), \tag{74}$$

である。同様にして n 次の公式と代理ハミルトニアン (surrogate Hamiltonian) $\tilde{H}_{n\rm th}$ は以下のようになる。$H_{\rm err}$ は誤差ハミルトニアン (error Hamiltonian) と呼ばれている。

$$\tilde{H}_{n\rm th} = H+H_{\rm err}+O(\tau^{n+1}), \tag{75}$$

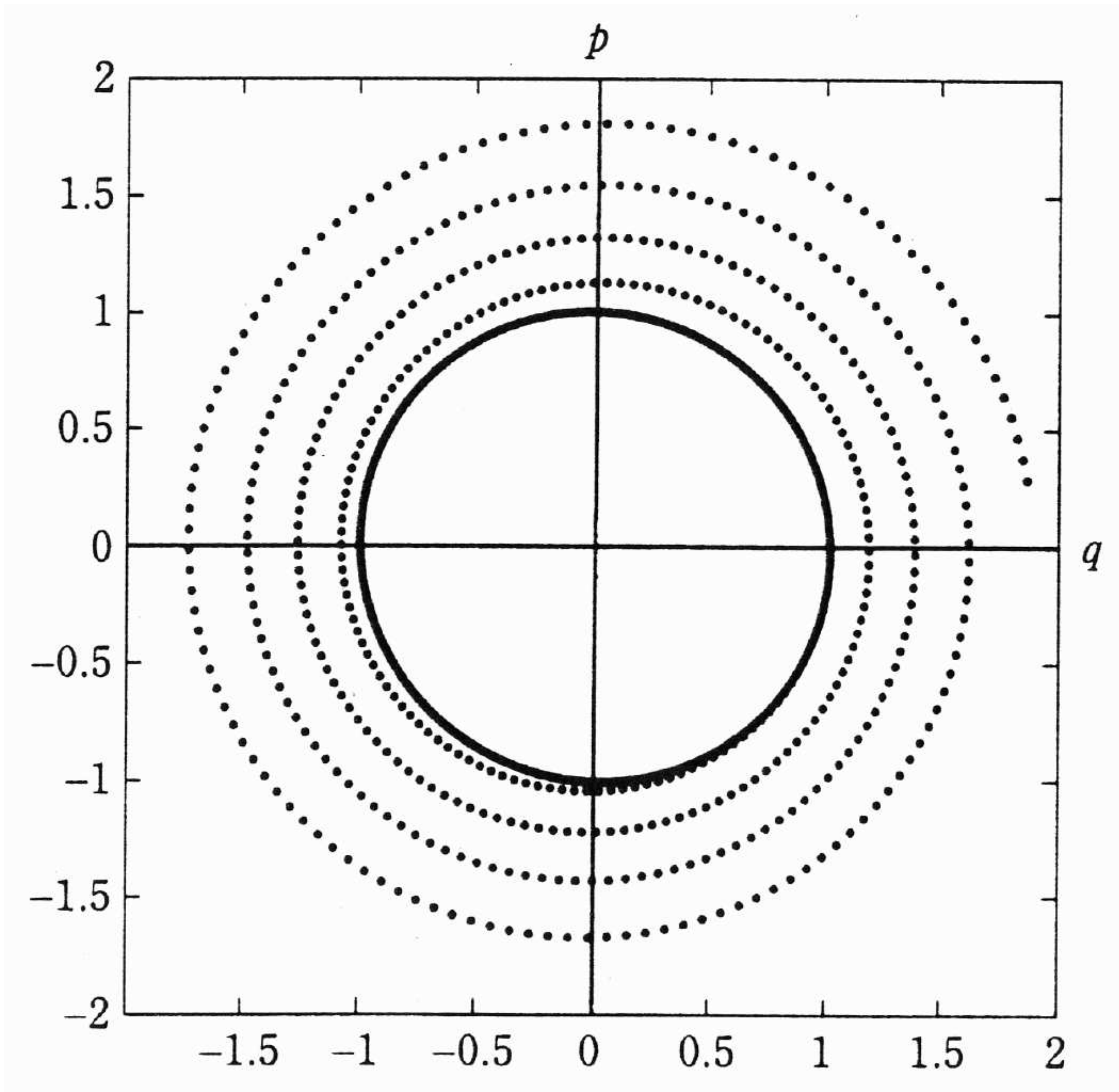

図 **2.** 一次元調和振動子の運動を一次シンプレクティク数値積分法とオイラー法で解いた場合の解 (q, p)。実線がシンプレクティク数値積分法による解、点線がオイラー法による解。吉田春夫 (1995) より引用。

3. 参考文献

シンプレクティク数値積分法そのものについての文献に加えて、シンプレクティク数値積分法の理解の手助けになる解析力学の教科書や正準変換摂動論に関する文献の一部を挙げておく。入手しやすい (少なくとも国立天文台三鷹の図書室に行けば閲覧可能な) ものに絞った。

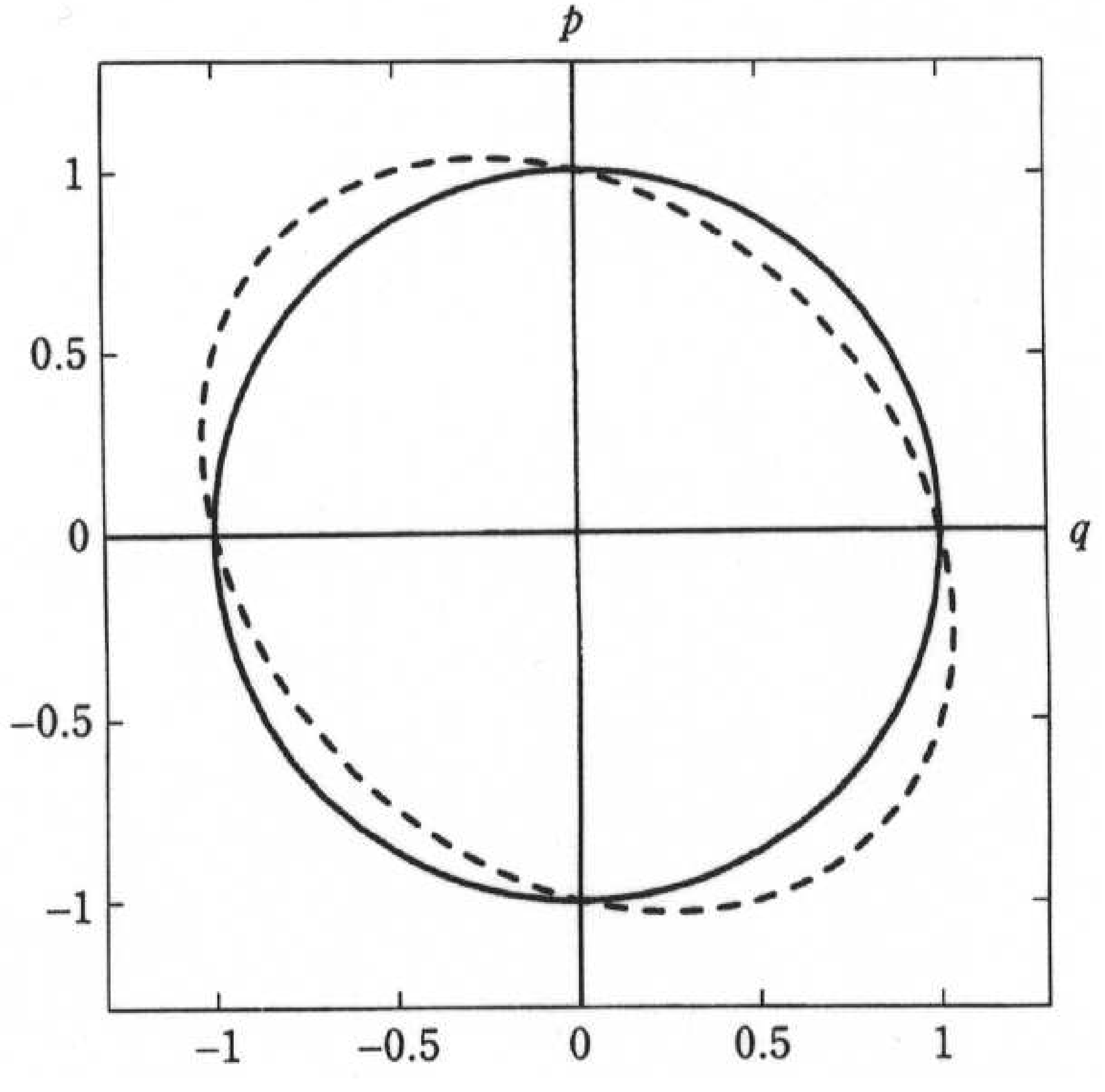

図 3. 一次元調和振動子の真の解 (q, p) と一次シンプレクティク数値積分法が与える不変式による曲線 (破線)。吉田春夫 (1995) より引用。

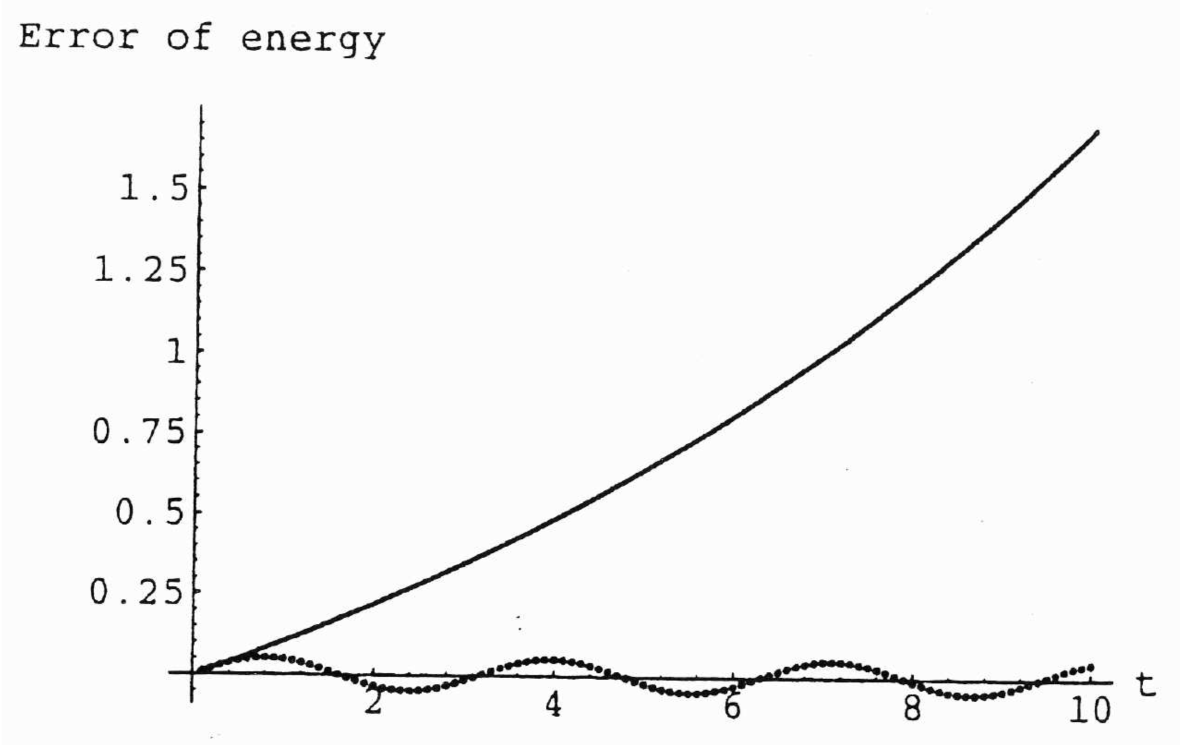

図 4. 一次元調和振動子の運動を一次シンプレクティク数値積分法 (点線) とオイラー法 (実線) で解いた場合の系の全エネルギーの保存状況。吉田春夫 (1997) より引用。

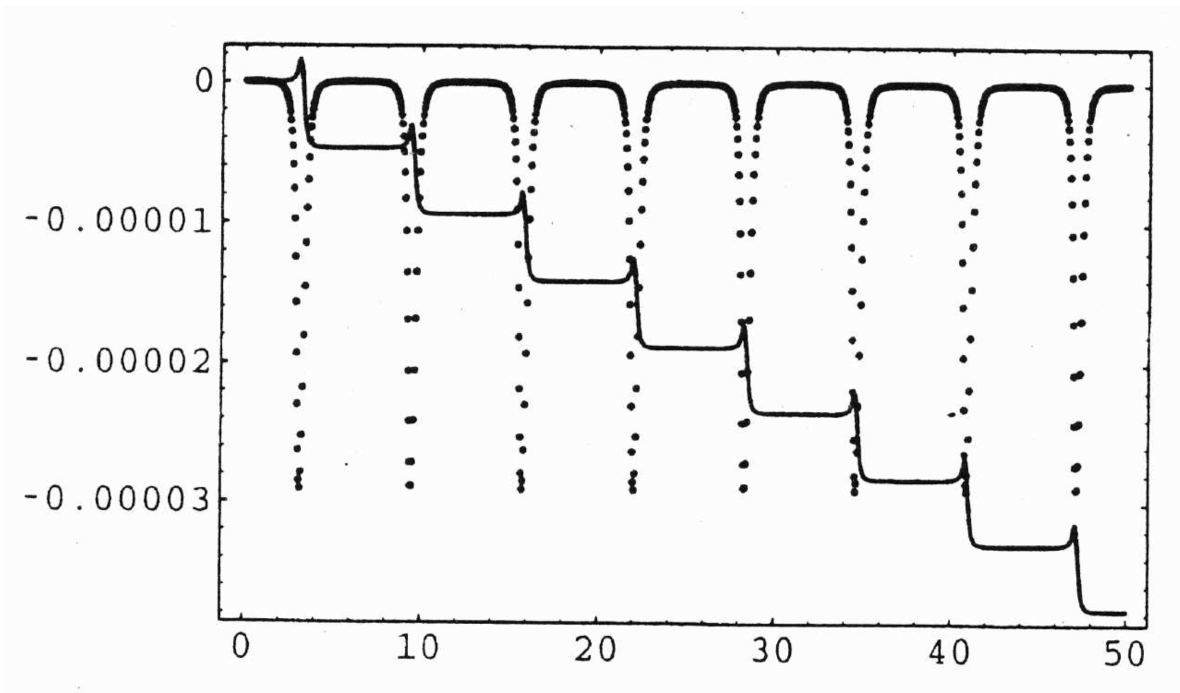

図 5. 離心率 0.5 のケプラー運動を四次ルンゲクッタ法 (実線) と四次シンプレクティク数値積分法 (点線) で解いた場合の全エネルギーの保存状況。吉田春夫 (1997) より引用。

解析力学に関する標準的な教科書

Plummer, P. *An Introductory Treatise on Dynamical Astronomy*, Cambridge University Press, 1918. (天体力学の古い教科書だが、Jacobi 座標など正準変換天体力学の基本に関する知識が多く記されている)

Goldstein, H. *Classical Mechanics* (second edition), Addison-Wesley, Massachusetts. 1980. (言わずと知れた名著。2002 年に第三版が出たが天文学を学ぶ上では第二版の方が役に立つか)

大貫義郎・吉田春夫 『力学』, 岩波講座 現代の物理学 No. 1, 岩波書店, 1994. (前半は形式的かつ抽象的だが後半は現代的なトピックに満ちて興味深い)

大貫義郎 『解析力学』, 物理テキストシリーズ No.2, 岩波書店, 1987. (学部生用の教科書と比較的参照されている模様)

山内恭彦 『一般力学』(増補 第三版), 岩波書店, 1959. (古典であるが未だに学ぶべき記載が多い)

戸田盛和 『一般力学30講』 物理学30講シリーズ (1), 朝倉書店. 1994. (解析力学に取り付く入門書としては好適)

山本義隆 『古典力学の形成』—ニュートンからラグランジュへ, 日本評論社, 1997. (「ニュートンの力学」から「ニュートン力学」への理論体系の整備についての大著)

原島鮮 『力学II —解析力学』, 裳華房, 1973. (古い本だが説明は丁寧であり、わかりやすい)

岡崎誠 『べんりな変分原理』, 共立出版, 1993. (変分原理から解析力学の基礎に至るわかりやすい解説書。ハンドブック的に使える)

木村利栄・菅野礼司 『微分形式による解析力学 (増補改訂版)』, 吉岡書店, 1996. (外積・外微分形式を用いて解析力学を書き下した数少ない教科書)

正準変換摂動論に関する文献

Lichtenberg, A.J. and Lieberman, M.A. *Regular and Chaotic Dynamics*, Springer-Verlag, New York, 1992. (古典的天体力学から最近のカオス的運動への繋ぎを果たす教科書。正準変換摂動論周辺の記載や数値実験の結果なども充実している)

von Zeipel, H., Recherches sur le mouvement des petites planetès, *Ark. Mat. Astron. Fysik,* Stockholm **11**, no. 1, 1–58; no. 7, 1–62 (1916); ibid. **12**, no. 9, 1–89; **13**, no. 3, 1–93 (1917). (いわゆる von Zeipel 法として知られている摂動理論の原論文)

Garfinkel, B. (1959) The orbit of a satellite of an oblate planet, *Astron. J.*, **64**, 353–367. (摂動の主要項を取り入れたものを中間軌道に採用した。摂動論は von Zeipel 法)

Kozai, Y. (1959) The motion of a close Earth satellite, *Astron. J.*, **64**, 367–377. (ラグランジュの惑星方程式を元にした人工衛星についての古典的摂動論)

Brouwer, D. (1959) Solution of the problem of artificial satellite theory without drag, *Astron. J.*, **64**, 378–397. (von Zeipel 法を採用した人工衛星の摂動理論。上記三論文は、短周期摂動と長周期摂動については一次、永年摂動については二次まで計算した)

Kozai, Y. (1962) Second-order solution of artificial satellite theory without air drag, *Astron. J.*, **67**, 446–461. (von Zeipel 法を採用。短周期項と長周期項は二次まで、永年摂動は三次まで計算した)

Hori, G. (1966) Theory of general perturbations with unspecified canonical variables, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **18**, 287–296. (Lie 変換を用いて von Zeipel による摂動論を再構成した。新旧変数が混じらない摂動理論を提供した歴史に残る名論文)

Hori, G. (1967) Non-linear coupling of two harmonic oscillations, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **19**, 229–241. (Hori (1966) の摂動理論を二個の調和振動子＋非線形項の問題に適用)

Deprit, A. (1969) Canonical transformations depending on a small parameter, *Celes. Mech.*, **1**, 12–30. (Lie 変換に基付く摂動論。一見すると Hori 摂動論と異なるが、その結果は Hori 理論から導かれるものと等価である)

Hori, G. (1970) Comparison of two perturbation theories based on the canonical transformation, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **22**, 191–198. (Hori 摂動論と von Zeipel 摂動論とが二次までは等価であることを示した)

Shniad, H. (1970) The equivalence of von Zeipel mapping and Lie transforms, *Celes. Mech.*, **2**, 114–120. (von Zeipel 理論と Deprit 理論の正準変換の母関数の関係式を与えた)

Yuasa, M. (1971) The comparison of Hori's perturbation theory and von Zeipel's theory, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **23**, 399–403. (Hori 摂動論と von Zeipel 摂動論とが三次までは等価であることを示した)

Hori, G. (1971) Theory of general perturbations for non-canonical systems, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **23**, 567–587. (Hori 摂動論を非ハミルトン系に適用できるように拡張した。但しこれを用いて実際の天体の運動を計算した例は未だ無い)

Henrard, J. and Roels, J. (1974) Equivalence for Lie transforms, *Celes. Mech.*, **10**, 497–512. (Hori 摂動理論と Deprit 摂動理論が等価であることの厳密な証明を与えた。両摂動理論での母関数の関係を具体的に書き下している。この論文以前の両摂動論の比較に関する論文では、微小パラメータに関する有限次数までの母関数の関係式を具体的に与えていたに過ぎない)

シンプレクティク数値積分法に関する文献

Yoshida, H. (1990) Construction of higher order symplectic integrators, *Phys. Lett. A*, **150**, 262–268. (高次のシンプレクティク数値積分法に構築に関する著名な論文)

Yoshida, H. (1993) Recent progress in the theory and application of symplectic integrators, *Celes. Mech. Dyn. Astron.*, **56**, 27–43. (シンプレクティク数値積分法のわかりやすいレビュー)

Kinoshita, H., Yoshida, H., and Nakai, H. (1991) Symplectic integrators and their application to dynamical astronomy, *Celes. Mech. Dyn. Astron.*, **50**, 59–71. (天体力学にシンプレクティク数値積分法が持ち込まれた黎明期の論文)

Wisdom, J. and Holman, M. (1991) Symplectic maps for the N-body problem, *Astron. J.*, **102**, 1528–1538. (ハミルトニアンをケプラー運動部分と摂動部分に分割して高速化する、いわゆる Wisdom-Holman map として名高く、極めて高い引用頻度を誇る有名論文)

吉田春夫 (1995) シンプレクティク数値解法, 数理科学, **384**, 37–46. (シンプレクティク数値積分法のわかりやすいレビュー。本講義の前半部分はほぼこの記事の内容に沿っている)

吉田春夫 (1997) ハミルトン力学系のためのシンプレクティク数値積分, 共同研究「非線型現象の数理科学」・湘南レクチャー「非線型現象の数理」 論文集, 68–83, 総合研究大学院大学. (シンプレクティク数値積分法のわかりやすいレビュー)

伊藤孝士 (2001) シンプレクティク数値積分法の天体力学的応用, 天体力学 N 体力学研究会集録, 国立天文台, 小久保英一郎・編, 19–90, 平成 13 年 3 月 16 日–18 日, 草津セミナーハウス. (天体力学的応用に関するシンプレクティク数値積分法のレビュー)

Sanz-Serna, J.M. and Calvo, M.P. (1994) *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman & Hall, London. (ハミルトン系の数値解法に関する数少ないまとまった教科書)

上田顯, 計算物理入門, 臨時別冊 数理科学 SGC ライブラリ 10, サイエンス社, 2001. (第九章には分子動力学計算の立場から見たシンプレクティク数値積分法の理論が詳述されている)

鈴木増雄, 統計力学, 岩波講座 現代の物理学 4, 岩波書店, 1994. (第二章には Lie 代数の立場から見たシンプレクティク数値積分法、BCH 公式の詳細に関する記載がある)

この文書には平成 16 年 12 月 7 日までの修正を取り込んであります。