# 保存系のシンプレクティック積分法における運動方程式の不変条件

invariant Condition of Motion Equation in symplectic Integration,applied for Conservation System

(株)砂子組　○正　員　田尻太郎 (Taro Tajiri)
(株)砂子組　　正　員　近藤里史 (Satoshi Kondo)
(株)砂子組　　正　員　佐藤昌志 (Masashi Sato)

## 1. はじめに

シンプレクティック時間積分法は特異性の強い非線形系の長時間積分においても数値誤差が蓄積せず、無条件安定な結果を与える数値的時間積分法であるとともに、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーが分離される典型的な保存系では陽解法的な計算手続きとなり、計算量は陽的オイラー法等と同じになる。このような理由から、1980 年代後半から理論的整備が進み、現在では保存系に対しては確立された方法となっている [1)]。

$(q_i(t),\ p_i(t))$を、ある時刻 t における系の一般化座標と一般化運動量とすると、数値的時間積分の時間更新手続きは$\tau$を時間ステップ幅として、変換 S : $(q_i(t)),\ p_i(t))\rightarrow(q_i(t+\tau)),\ p_i(t+\tau))$とみなせる。シンプレクティック法では変換 S が、その局所精度と同一オーダーでもとの系を大域的に近似する近似系に対する、厳密解を与える事が示される [1)]。その定式化は、時間推進演算子の指数展開に基いて、特定の S が厳密解を与えるハミルトニアンを構成するものであるが、時間推進演子がハミルトニアンによるポアソン括弧で定義されるため、保存系に特化した方法となっている。そのため同法の非保存系への適用を試みた場合、発見的方法としてあまり有効ではないと考えられる。

そこでここでは、特定の時間更新手続き S に対して、どのようなタイプの保存系が近似可能となるかを発見的に導く事を試み、結果がオーソライズされた定式化によるものと本質的に同等であることを確認して、非保存系に対するシンプレクティック時間積分法の定式化に向けた糸口にしたいと考えた。なお以下では、2 重に現れる添字に関して和をとる、テンソル記法を用いる。

## 2. 運動方程式の不変条件

保存系は自励系であるので、その位相空間の軌道は、特異点を除いて交差せず、時間積分のステップ更新手続きを表す変換 S : $(q_i(t)),\ p_i(t))\rightarrow(q_i(t+\tau)),\ p_i(t+\tau))$は、時間を陽に含まないと考えられる。

ここに $q_i$は系の一般化座標，$p_i$は一般化運動量，$\tau$は時間ステップ幅，i＝1～n の n 自由度系である。

少なくとも保存系では、変換 S が同一初期条件から出発した運動方程式に従った運動を表すためには、次のシンプレクティック条件を満たす必要がある事が知られている [2)]。

$$\begin{cases}\{Q_i\ ,Q_j\}=\{P_i\ ,P_j\}=0\\ \{Q_i\ ,P_j\}=\delta_{ij}\end{cases}\tag{1}$$

ここで$\delta_{ij}$はクロネッカーのデルタ。また$(Q_i, P_i)$は、

$$\begin{cases}Q_i\left(q_j(t)\ ,\ p_j(t)\right)=q_i(t+\tau)\\ P_i\left(q_j(t)\ ,\ p_j(t)\right)=p_i(t+\tau)\end{cases}\tag{2}$$

を表す。ポアソン括弧{,}は、

$$\{f\ ,g\}=\frac{\partial f}{\partial q_j}\frac{\partial g}{\partial p_j}-\frac{\partial f}{\partial p_j}\frac{\partial g}{\partial q_j}\tag{3}$$

で定義される。シンプレクティック条件を満たす変換は、シンプレクティック変換（または正準変換）と呼ばれる。

保存系の運動方程式は次の正準方程式で表される [2)]。

$$\begin{pmatrix}q_i'\\ p'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\partial H/\partial p_i\\ -\partial H/\partial q_i\end{pmatrix}\tag{4}$$

ここに’は時間微分を表し、ハミルトニアン H＝H($q_i$, $p_i$)は通常、力学的エネルギーの表式となる。正準変換で($q_i$, $p_i$)を($q_i(Q_j\ ,P_j)$, $p_i(Q_j\ ,P_j)$)に書きかえた時、正準方程式は不変に保たれる [2)]。

$$\begin{pmatrix}Q_i'\\ P_i'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\partial H/\partial P_i\\ -\partial H/\partial Q_i\end{pmatrix}\tag{5}$$

しかし運動方程式は、

$$\begin{cases}\dfrac{\partial H}{\partial P_i}\left(q_j(Q_k,P_k),\ p_j(Q_k,P_k)\right)=\dfrac{\partial H}{\partial q_j}\dfrac{\partial q_j}{\partial P_i}+\dfrac{\partial H}{\partial p_j}\dfrac{\partial p_j}{\partial P_i}\\ \dfrac{\partial H}{\partial Q_i}\left(q_j(Q_k,P_k),\ p_j(Q_k,P_k)\right)=\dfrac{\partial H}{\partial q_j}\dfrac{\partial q_j}{\partial Q_i}+\dfrac{\partial H}{\partial p_j}\dfrac{\partial p_j}{\partial Q_i}\end{cases}\tag{6}$$

なので一般には不変にならない。もし変換 S が何らかの保存系の厳密解を与えるならば、変換後の運動方程式も同じ形でなければならないので、

$$\begin{cases}\dfrac{\partial H}{\partial P_i}\left(Q_j,P_j\right)=\dfrac{\partial H}{\partial P_i}\left(q_j(Q_k,P_k),\ p_j(Q_k,P_k)\right)\\ \dfrac{\partial H}{\partial Q_i}\left(Q_j,P_j\right)=\dfrac{\partial H}{\partial Q_i}\left(q_j(Q_k,P_k),\ p_j(Q_k,P_k)\right)\end{cases}\tag{7}$$

が成り立つ。逆に(7)が成り立てば S はシンプレクティック変換で運動方程式を不変に保つので、指定した初期条件から運動方程式に従った運動を厳密に記述する事になる。保存系ではエネルギー保存則が成り立つので、

$$H\left(Q_j,P_j\right)=H\left(q_j(Q_k,P_k),\ p_j(Q_k,P_k)\right)\tag{8}$$

であるが、関数として(8)が成り立てば(7)の成立は当然なので、(8)を運動方程式の不変条件にとれる。

従って、時間ステップ更新手続きを表すシンプレクティック変換 S を一つ定め、それに対して(8)を要求すれば、S が厳密解を与える保存系を決定できるものと考えられる。

### 3. 1次の陽的シンプレクティック変換

次式の時間を含まぬ変換($q_i$, $p_i$)→($Q_j$ , $P_j$)は、シンプレクティック条件を満たす事が知られており [2]、これを用いた時間積分法は1次の陽的シンプレクティック法と呼ばれる [1]。ただし U＝U($Q_i$)でUは $P_i$ を含まない。

$$\begin{cases} Q_i = q_i + \tau p_i \\ P_i = p_i - \tau \dfrac{\partial U}{\partial Q_i} \end{cases} \tag{9}$$

(9)からただちに、

$$\begin{cases} q_i = Q_i - \tau P_i - \tau^2 \dfrac{\partial U}{\partial Q_i} \\ p_i = P_i + \tau \dfrac{\partial U}{\partial Q_i} \end{cases} \tag{10}$$

を得る。

### 4. ハミルトニアンのテーラー展開

(8)にシンプレクティック変換(10)を考慮すると、

$$H(Q_i, P_i, \tau) = H\left(q_i(Q_j, P_j, \tau), p_i(Q_j, P_j, \tau)\right) \tag{11}$$

となる。H の具体的形を定めるため、時間ステップ幅 τ が十分小さいとして、(11)右辺を τ でテーラー展開した形を考える。

$$H = g_0 + \tau g_1 + \frac{1}{2}\tau^2 g_2 + \frac{1}{3!}\tau^3 g_3 + \cdots \tag{12}$$

(12)右辺の $g_n$, 0≦n は、$g_n$＝$g_n$($q_i$ , $p_i$)である。(12)より(11)左辺は、

$$H = f_0 + \tau f_1 + \frac{1}{2}\tau^2 f_2 + \frac{1}{3!}\tau^3 f_3 + \cdots \tag{13}$$

と書ける事になり、$g_n$ と $f_n$＝$f_n$($Q_i$ , $P_i$)は(10)より、

$$\lim_{\tau \to 0} g_n = f_n \tag{14}$$

の関係にある。テーラー展開の一般的性質から、

$$f_n = \left.\frac{d^n H}{d\tau^n}(q_i, p_i, \tau)\right|_{\tau \to 0} \tag{15}$$

であり、(15)右辺の H は(12)である。関数 F($q_i$ , $p_i$ , τ )に対して、(10)を考慮すると、

$$\frac{dF}{d\tau} = \left(-P_i - 2\tau \frac{\partial U}{\partial Q_i}\right)\frac{\partial F}{\partial q_i} + \frac{\partial U}{\partial Q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i} + \frac{\partial F}{\partial \tau} \tag{16}$$

なので、微分演算子、

$$\begin{cases} D = D_0 + 2\tau D_2\ ,\ D_0 = D_1 + \partial/\partial\tau \\ D_1 = -P_i \dfrac{\partial}{\partial q_i} + \dfrac{\partial U}{\partial Q_i}\dfrac{\partial}{\partial p_i}\ ,\ D_2 = -\dfrac{\partial U}{\partial Q_i}\dfrac{\partial}{\partial q_i} \end{cases} \tag{17}$$

を定義する。d/dτ＝D である。

∂/∂τ と τ$D_2$ が非可換な事、$D_1$ と τ$D_2$ は可換な事に注意すると、直接計算する事により、

$$D_0(2\tau D_2) = 2\tau D_2 D_0 + 2D_2 \tag{18}$$

が得られる。1≦n に対して、

$$D_0^{\,n}(2\tau D_2) = 2\tau D_2 D_0^{\,n} + 2nD_2 D_0^{\,n-1} \tag{19}$$

を仮定すると、

$$\begin{aligned} D_0^{\,n+1}(2\tau D_2) &= D_0\left(2\tau D_2 D_0^{\,n} + 2nD_2 D_0^{\,n-1}\right) \\ &= (2\tau D_2 D_0 + 2D_2)D_0^{\,n} + 2nD_2 D_0^{\,n} \\ &= 2\tau D_2 D_0^{\,n+1} + 2(n+1)D_2 D_0^{\,n} \end{aligned}$$

なので、(18)から帰納的に任意の 1≦n で(19)が成り立つ。

次に、O( τ )を τ→0 で 0 に近づく項を表すとして、

$$\begin{aligned} D^2 &= (D_0 + 2\tau D_2)(D_0 + 2\tau D_2) \\ &= D_0^{\,2} + D_0(2\tau D_2) + O(\tau) \\ &= D_0^{\,2} + 2D_2 + O(\tau) \end{aligned} \tag{20}$$

となり、1≦n で、

$$D^n = D_0^{\,n} + n(n-1)D_2 D_0^{\,n-2} + O(\tau) \tag{21}$$

を仮定すると、(19)を使い、

$$\begin{aligned} D^{n+1} &= \left(D_0^{\,n} + n(n-1)D_2 D_0^{\,n-2} + O(\tau)\right)(D_0 + 2\tau D_2) \\ &= D_0^{\,n+1} + D_0^{\,n}(2\tau D_2) + n(n-1)D_2 D_0^{\,n-1} + O(\tau) \\ &= D_0^{\,n+1} + 2\tau D_2 D_0^{\,n} + 2nD_2 D_0^{\,n-1} \\ &\qquad\qquad + n(n-1)D_2 D_0^{\,n-1} + O(\tau) \\ &= D_0^{\,n+1} + n(n+1)D_2 D_0^{\,n-1} + O(\tau) \end{aligned}$$

なので、(20)から帰納的に任意の 1≦n で(21)が成り立つ。

d/dτ＝D から(21)を(15)に代入すれば、 τ→0 なので、0≦n で、

$$\begin{aligned} f_n = \Big(&(D_1 + \partial/\partial t)^n + n(n-1)(D_1 + \partial/\partial t)^{n-2}\Big) \\ &\left.\left(g_0 + \tau g_1 + \frac{1}{2}\tau^2 g_2 + \frac{1}{3!}\tau^3 g_3 + \cdots\right)\right|_{\tau \to 0} \end{aligned} \tag{22}$$

となる。$D_1$ と ∂/∂τ は可換なので 2 項展開を適用し、τ→0 で(22)の 2 段目の展開式の $\tau^m$ の項は、$\partial^k/\partial\tau^k$ がかかったものだけが残る事に注意すると、

$$\begin{aligned} f_n = \Big(&g_n + nD_1 g_{n-1} \\ &+ \sum_{k=0}^{n-2}\left({}_nC_k D_1^{\,n-k} + n(n-1)\,{}_{n-2}C_k D_1^{\,n-2-k} D_2\right)g_k\Big)\Big|_{\tau \to 0} \end{aligned} \tag{23}$$

が得られる。ここで 0≦n で、n－2＜0 の時はΣの項は 0 とする。

以後演算子 D に対し、$D|_{\tau\to 0}$ を $\overline{D}$ と書く記法を併用する。$D|_{\tau\to 0}$ は、D に含まれる($q_i$, $p_i$)を($Q_j$ , $P_j$)に置き替えた演算子である。(15)より(23)は、偏微分方程式の系列、

$$\overline{D_1} f_n = -\frac{1}{n+1}\sum_{k=0}^{n-1}\left({}_{n+1}C_k \overline{D_1^{\,n+1-k}} + n(n+1)\,{}_{n-1}C_k \overline{D_1^{\,n-1-k} D_2}\right)f_k \tag{24}$$

を与える。0≦n でΣに関する注意は(23)と同様である。

**5. 形式解**

偏微分方程式の系列(24)は、解 $f_n$ を $f_0$, $f_1$, $\cdots$, $f_{n-1}$ から計算する漸化式である。(24)の形式解の存在を示す。

n＝0 では、(17)を参照して成分で書き下せば、

$$\overline{D_1} f_0 = -P_i \frac{\partial f_0}{\partial Q_i} + \frac{\partial U}{\partial Q_i}\frac{\partial f_0}{\partial P_i} = 0 \tag{25}$$

(25)の特解として明らかに、

$$f_0 = \frac{1}{2} P_i P_i + U(Q_i) \tag{26}$$

を選べる。(26)は系の i 番目の自由度の物理座標を $x_i$, その質量を $m_i$ とした時、一般化座標を、

$$Q_i = \sqrt{m_i}\, x_i \tag{27}$$

にとった場合の典型的な保存系のハミルトニアンに一致する。(26)には(25)の基本解の不定性があるが、以後、不定性は 0 として計算する。n＝1 では、

$$\overline{D_1} f_1 = -\frac{1}{2}\left(\overline{D_1^{\ 2}} + 2\overline{D_2}\right) f_0 \tag{28}$$

定義より、

$$\overline{D_1^{\ n}} = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k {}_nC_k P^k \left.\frac{\partial U}{\partial Q}\right.^{n-k} \frac{\partial^k}{\partial Q}\frac{\partial^{n-k}}{\partial P}$$

$$\overline{D_1^{\ n} D_2} = \sum_{k=0}^{n} (-1)^{k+1} {}_nC_k P^k \left.\frac{\partial U}{\partial Q}\right.^{n+1-k} \frac{\partial^{k+1}}{\partial Q}\frac{\partial^{n-k}}{\partial P} \tag{29}$$

である。ただし $P^k$ などは、全て異なる k 個の添字 $\alpha$＝i, j, $\cdots$, m を持つ $P_\alpha$ の k 個の積、

$$P^k = P_i P_j \cdots P_m$$

を表すものとする。(28)に(26)を代入し直接計算すれば、

$$\overline{D_1} f_1 = -\frac{1}{2}\left( P_i P_j \frac{\partial^2 U}{\partial Q_i \partial Q_j} - \frac{\partial U}{\partial Q_i}\frac{\partial U}{\partial Q_i} \right)$$

$$= -\frac{1}{2}\left( -P_i \frac{\partial}{\partial Q_i}\left( -P_j \frac{\partial U}{\partial Q_j}\right) + \frac{\partial U}{\partial Q_i}\frac{\partial}{\partial P_i}\left( -P_j \frac{\partial U}{\partial Q_j}\right)\right)$$

$$= \frac{1}{2}\overline{D_1}\left( P_j \frac{\partial U}{\partial Q_j}\right)$$

より、

$$f_1 = \frac{1}{2} P_i \frac{\partial U}{\partial Q_i} \tag{30}$$

を解とできる。(26), (29), (30)より、

$$\overline{D_2} f_0 = -\overline{D_1} f_1 - \frac{1}{2}\overline{D_1^{\ 2}} f_0 \tag{31}$$

$$\overline{D_2} f_1 = -\frac{1}{2}\overline{D_1 D_2} f_0 \tag{32}$$

の成立を示せる。

n＝2 で、

$$\overline{D_1} f_2 = -\frac{1}{3}\left( 3\left(\overline{D_1^{\ 2}} + 2\overline{D_2}\right) f_1 + \left(\overline{D_1^{\ 3}} + 6\overline{D_1 D_2}\right) f_0 \right) \tag{33}$$

であるが、$\tau$＝0 の近傍では、(24)の導出過程から、

$$D_1 g_2 = -\frac{1}{3}\left( 3\left(D_1^{\ 2} + 2D_2\right) g_1 + \left(D_1^{\ 3} + 6 D_1 D_2\right) g_0 \right) \tag{34}$$

が成りたっていると考えられる。(34)に $\tau$＝0 近傍での(32)の関係を代入すると、

$$D_1 g_2 = -\frac{1}{3}\left( 3D_1^{\ 2} g_1 - 3 D_1 D_2 g_0 + \left(D_1^{\ 3} + 6 D_1 D_2\right) g_0 \right)$$

$$= -\frac{1}{3} D_1 \left( 3 D_1 g_1 + \left(D_1^{\ 2} + 3 D_2\right) g_0 \right)$$

なので、$\tau$＝0 の近傍で、

$$g_2 = -\frac{1}{3}\left( 3 D_1 g_1 + \left(D_1^{\ 2} + 3 D_2\right) g_0 \right)$$

が解となる。よって(28)も考慮し、$\tau \to 0$ で、

$$f_2 = -\frac{1}{3}\left( 3\overline{D_1} f_1 + \left(\overline{D_1^{\ 2}} + 3\overline{D_2}\right) f_0 \right) = \frac{1}{6}\overline{D_1^{\ 2}} f_0 \tag{35}$$

を得る。2≦n では、

$$f_n = \sum_{1 \le m+L \le n} \alpha_n(m, L) \overline{D_1^{\ m} D_2^{\ L}} f_0 \tag{36}$$

の形の解を持つと仮定する。ここでΣは 1≦m＋L≦n に関する和であり $\alpha$ (m , L)は($Q_j$ , $P_j$)によらない係数とする。

$\tau$＝0 近傍での(24)の関係は、

$$D_1 g_{n+1} = -\frac{1}{n+2}\sum_{k=0}^{n} D_1^{\ n-k}\left( {}_{n+2}C_k D_1^{\ 2} + (n+1)(n+2)\, {}_nC_k D_2 \right) g_k \tag{37}$$

と書ける。(36)を $\tau$＝0 の近傍で考え、

$$g_k = \sum_{1 \le m+L \le k} \alpha_k(m, L) D_1^{\ m} D_2^{\ L} g_0 \tag{38}$$

を(37)に代入すれば、$\tau \neq 0$ では $D_1$ と $D_2$ は可換なので、(37)の各項は、

$$D_1^{\ n-k}\left( {}_{n+2}C_k D_1^{\ 2} + (n+1)(n+2)\, {}_nC_k D_2 \right) g_k$$
$$= \sum_{1 \le m+L \le k} \alpha_k(m, L)\, {}_{n+2}C_k D_1^{\ n+2-k+m} D_2^{\ L} g_0$$
$$+ \sum_{1 \le m+L \le k} \alpha_k(m, L)(n+1)(n+2)\, {}_nC_k D_1^{\ n-k+m} D_2^{\ L+1} g_0 \tag{39}$$

の形になる。k＝0～n－1 では、1≦1＋m≦n－k＋m なので、$D_1$ の次数は 1 以上。また m＋L≦k なので、n＋2－k＋m＋L≦n＋2。従って(39)は k＝0～n－1 で k＝1 を除き、

$$D_1 \sum_{1 \le m+L \le n+1} \alpha_{n+1}(m, L) D_1^{\ m} D_2^{\ L} g_0 \tag{40}$$

の形に書ける。k＝n では、

$$\left( {}_{n+2}C_n D_1^{\ 2} + (n+1)(n+2) D_2 \right) g_n$$
$$= \sum_{m+L \le n} \alpha_k(m, L)\, {}_{n+2}C_n D_1^{\ m+2} D_2^{\ L} g_0$$
$$+ \sum_{m+L \le n} \alpha_k(m, L)(n+1)(n+2) D_1^{\ m} D_2^{\ L+1} g_0 \tag{41}$$

となり、右辺 1 段目は明らかに(40)の形に書ける。右辺 2 段目で m＝0 の項は(31)の関係を考慮し、

$$D_2^{\ L+1} g_0 = -\frac{1}{2} D_2^{\ L} D_1^{\ 2} g_0 - D_2^{\ L} D_1 g_1$$

であるが、(36)の和の条件 $1 \leqq m+L \leqq n$ より $m=0$ では、$1 \leqq L$ なので、(32)も考慮し、

$$D_2^{\,L+1} g_0 = -\frac{1}{2} D_2^{\,L} D_1^{\,2} g_0 + \frac{1}{2} D_2^{\,L} D_1^{\,2} g_0 = 0$$

従って(41)右辺の $D_1$ の次数は 1 以上であり、最高次の項の次数は $m+L+2 \leqq n+2$ なので、(41)の右辺も(40)の形に書ける。

$k=1$ では、$2 \leqq n$ と(28)から、

$$D_1^{\,n-1}\left(\left(n+2\right)D_1^{\,2} + n\left(n+1\right)\left(n+2\right)D_2\right)g_1$$
$$= -\frac{1}{2}\left(n+2\right)D_1^{\,n-2}\left(D_1^{\,2} + n\left(n+1\right)D_2\right)\left(D_1^{\,2} + 2D_2\right)g_0 \tag{42}$$

(42)の最高次の項の次数は $n-2+2+2=n+2$。$D_1$ を含まぬ項は $D_2^{\,2}g_0$ の形なので $k=n$ の時と同様に 0 となり、$D_1$ の次数は 1 以上となる。よって(40)の形に書ける。

以上より(37)の全ての項が(40)の形になるので、

$$D_1 g_{n+1} = D_1 \sum_{1 \leq m+L \leq n+1} \alpha_{n+1}\left(m,L\right) D_1^{\,m} D_2^{\,L} g_0$$

から、

$$f_{n+1} = \sum_{1 \leq m+L \leq n+1} \alpha_{n+1}\left(m,L\right) \overline{D_1^{\,m} D_2^{\,L}} f_0$$

を形式解とできる。従って(35)より(36)は、$2 \leqq n$ で帰納的に成立し、$0 \leqq n$ で偏微分方程式の系(24)の形式解が存在する。

## 6. まとめ

$0 \leqq n$ で(24)の形式解が存在するので(12)または(13)は、

$$H = \frac{1}{2} p_i p_i + U + \frac{\tau}{2} p_i \frac{\partial U}{\partial q_i} + O\left(\tau^2\right) \tag{43}$$

の形となり、1 次の陽的シンプレクティック法(9)は(43)をハミルトニアンとする保存系の厳密解を与える。ここで典型的な保存系のハミルトニアンが、

$$H = \frac{1}{2} p_i p_i + U \tag{44}$$

である事に注意すると、1 次の陽的シンプレクティック法は、(44)を局所的にも大域的にも 1 次精度で近似し、(44)の近似解法として理論的には数値誤差の蓄積はない事になる。これは、時間推進演算子の指数展開に基づく方法から得られる結論と本質的に同じである[1]。

時間推進演算子に基づく H の形は、

$$H = K + U$$
$$+ \frac{\tau}{2}\left\{K,U\right\} + \frac{\tau^2}{12}\left\{\left\{K,U\right\},U\right\} + \left\{\left\{U,K\right\},K\right\} + \cdots \tag{45}$$

となり[1]、$K=p_i p_i/2$ とおくと、どちらからも、

$$f_1 = \frac{1}{2} p_i \frac{\partial U}{\partial q_i},\ f_2 = \frac{1}{6}\left(p_i p_j \frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_j} + \frac{\partial U}{\partial q_i}\frac{\partial U}{\partial q_i}\right),$$
$$f_3 = \frac{1}{2} p_i \frac{\partial U}{\partial q_j}\frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_j}, \cdots \tag{46}$$

が得られる。

BCH 公式[3]に由来する(45)の一般項は非常に扱いづらく、偏微分方程式の系(24)と(45)を直接対応付けるにはいたっていないが、(45)は(9)が厳密解を与える保存系のハミルトニアンを構成した結果であるので[1]、同じ関数系$\{f_n\}$が得られるものと予想できる。

非保存系で特定の時間ステップ更新手続きが厳密解を与える系を決定し、それによって大域的に近似できる系を発見的に導くには、同一初期条件からの運動方程式に従った運動であるための条件、いわゆる保存系におけるシンプレクティック条件に相当するものを非保存系に対してまず導き、それに対して(7)に相当する運動方程式の不変条件を要求する事になると考えられる。そのような場合、本論で保存系に対して試みたのと同様な方法は、発見的方法として有効であろうと考えられる。

［参考文献］

1）臨時別冊・数理科学，計算物理入門，サイエンス社，2001 年 9 月．
2）古典力学，ゴールドスタイン，吉岡書店，1978 年 5 月．
3）群と物理，佐藤光，丸善出版，2017 年 4 月．