# シミュレーションのための解析力学

陰山 聡（神戸大学システム情報学研究科 計算科学専攻）

平成 27 年度 後期 『解析力学 B』
（工学部情報知能工学科 2 回生対象）
講義資料

これは神戸大学工学部情報知能工学科2回生向けの講義『解析力学B』（平成27年度後期）用の資料です。講義の進捗にあわせてこの資料も加筆・修正していきます。従って、この資料は今のところ荒削りであるだけでなく、内容にも誤りが含まれているかもしれません。わかりにくい記述や、不正確な表現、間違いに気がついたら講義の際、あるいはメールで指摘してください。

# はじめに

解析力学は、高校で習うニュートン力学を発展させたものです。この二つの力学の違いについてまず簡単に述べておきます。

ニュートン力学における基本的な概念は「力」でしたが、解析力学では「力」は中心的な概念ではありません。それに変わる基本的な存在がラグランジアンとハミルトニアンという関数です。この講義を通じてみなさんは、これらの関数の使い方を学びます。ラグランジアンやハミルトニアンは解析力学から生まれたものですが、力学の範疇を超えて、制御理論や経済学などにも登場する大変基礎的なものです。

ニュートン力学における基本方程式はニュートンの運動方程式という一つだけでした。解析力学には基本方程式がたくさん登場します。これらの式は見た目が驚くほど違うのですが、同じ力学問題に対しては当然のことながら同じ解を導きます。もちろんその解はニュートンの運動方程式を解いて得られるものと同じです。

どうせ同じ解になるのであれば、ニュートン運動方程式で十分ではないかと思うかもしれませんが、ニュートンの運動方程式はとても使いにくい方程式です。ニュートン力学に関しては、受験勉強の一つとして与えられた問題を解くだけの経験しかもっていない人は、ニュートン力学の使いにくさをそれほど実感したことがないかもしれません。でもそれは、問題を作る人が使いにくい問題をうまく避けてきたからです。

ニュートン力学の使いにくさの原因の一つは、問題を解くのに使える座標系が限定されているという点にあります。一方、解析力学の運動方程式は、座標系を大変自由にとることができます。その自由さ、おおらかさのおかげで解析力学はとても便利なものになっているのです。

解析力学で登場する運動方程式は、外見はかなり異なるとは言え、時間に関する微分方程式であるという点ではニュートンの運動方程式と同じです。微分方程式とは、「ある時刻におけるその系の状態が、その時刻における系の時間変化（時間微分）を規定する」という式ですから、その系と共に時間発展していく、つまり年をとっていく我々人間が、その系を記述するのには自然な記述の方法です。

ところが、解析力学には微分方程式とは全く異なる見方による運動の記述の仕方が出てきます。それは変分原理と呼ばれます。今、この瞬間の力学の系の状態がこれから来る未来を規定している、といった微分方程式的世界観とは全く異なる変分原理的な世界の見方、いわば時空を超越した視点からの世界の見方を是非味わっていただきたいと思います。変分原理で記述された運動の法則は極めて単純で、美しいとさえ表現できるようなものです。変分原理による力学の理解、その美しさを味わうためだけでも解析力学を学ぶ価値は十分にあると思います。

歴史的にも学問体系としてみても、解析力学は量子力学の基礎部分に位置づけられます。量子力学は現在の科学や技術の基盤ですから、解析力学の講義が、量子力学を学ぶための準備として位置づけられている理工系学部も多いようです。

神戸大学情報知能工学科においても、将来、量子コンピュータや量子化学計算などに関する研究や開発の道に進む諸君にとっては、量子力学の深い理解のために解析力学をしっかりと学ぶことは不可欠と言えるでしょう。しかしそれ以外の、むしろ多数の情報知能工学科の学生にとっては、そもそも量子力学を深く学ぶべき強い動機が少なくとも現在のところあまりないようです。解析力学はロボティクスなどで必要となる古典的な静力学や動力学の計算にも不可欠な知識なのですが、それでもやはり情報知能工学科の学生全体を考慮するとそこだけに重点を置いた講義をするのは問題があるようです。

このような状況の下、情報知能工学科の学生に解析力学をどのようにして教えるべきか、私は過去数年間試行錯誤を重ねてました。その結果、解析力学の数値計算や計算機シミュレーションへの応用に重点を置いた教え方こそが最適であると思うようになりました。たとえば最近、計算機シミュレーションを行う様々な分野ではシンプレクティック法と呼ばれる数値積分法が使われています。数値積分法はいうまでもなく情報知能工学科の諸君にとって不可欠と言えるものであり、実際、複数の講義においてルンゲ＝クッタ法に代表される様々な数値積分について基礎的なところから応用的なところまで学ぶことになっています。しかしながら、ルンゲ＝クッタ法などの数値積分法では不得意なある種の問題で威力を発揮するシンプレクティック法については、その簡単な紹介はあるにしても理論的な背景については詳しく学ぶ機会がありません。それは無理もない話で、シンプレクティック法の理論的背景というのはまさに解析力学そのものだからです。

そこでこの講義では、『量子力学ための解析力学』ではなく、『計算機シミュレーションための解析力学』を目指して講義を行うことにします。ただし、そのために学ぶべき事は実のところ伝統的・正統的な解析力学の講義とそれほど内容が異なるわけではありません。しかしながら講義の中でとりあげる様々な例や練習問題などには特徴が出ています。最終目標が計算機シミュレーションなので、最終的な答えを得るために計算機を用いることを避けることはせず、むしろ積極的に数値計算（あるいは計算機シミュレーション）を行うことを前提とできるからです。

普通、解析力学の教科書に出てくる例題や練習問題は、似通っているものが多く、あまりバリエーションがあるようには見えません。これは解析力学で解ける問題の種類が限定されているというわけでは決してありません。むしろ逆です。

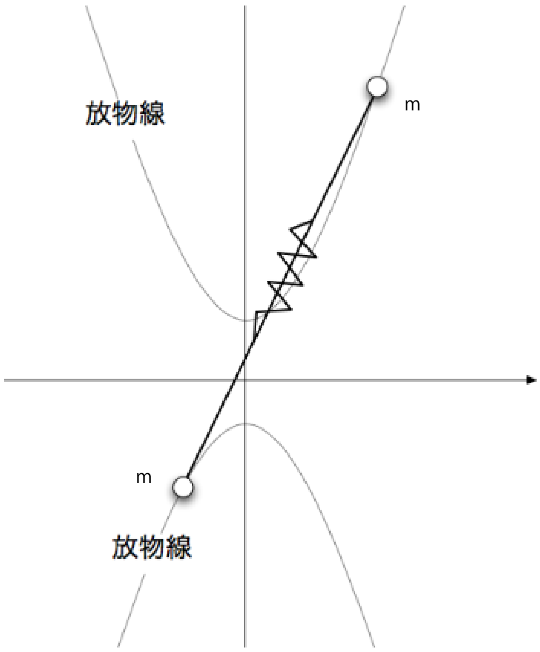
解析力学が提供するもの、つまりこの講義で学ぶことは、結局のところ方程式を立てるためのアルゴリズムです。与えられた特定の力学の問題に対して、適切な座標を設定すれば、解析力学の機械的な手続きに従って微分方程式（＝運動方程式）を立てることができます。ここまでが解析力学の仕事で、その微分方程式を解くことは別の問題です。

ところが、多くの力学問題に対しては、そうして立てた微分方程式を解析的[1]に解けるような場合はむしろ例外です。解析力学の教科書で採用される例題が似通っている理由はここにあります。「この力学の系を解くための方程式はこうだが、この方程式の解を紙とペンで計算することはできない。」という例題ばかりではまずいので、解析的に解ける形の微分方程式に定式化されるような力学の問

[1]ここでいう「解析的に」という意味は、計算機を使わず数学的に答えを求める、という意味です。

題が集められる傾向にあるわけです。もちろん、実際には方程式の一般解を解く必要はなく、ある種の近似の適用すると解析的に解ける微分方程式が導かれるような力学の例題は多数ありますし、実際、多くの教科書に載せられています。しかしながらそのような近似はほとんどの場合、「平衡状態からのずれが微小」という近似で、そのような近似から得られるのは後に述べる調和振動子系（バネと質点の系）に問題と等価なものばかりとなりがちです。従ってやはり似通った問題ばかりになってしまうわけです。

ところが、最初から計算機を使う覚悟でいれば、そのような遠慮はいりません。具体的な例を挙げてみましょう。二つの質点（質量 $m$）がバネ（自然長 $\ell_0$）でつながれ、それぞれ放物線 $y = x^2 + 1$（上側）と $y = -x^2 - 1$（下側）上に拘束されているとします。この二つの質点はどう運動するでしょうか？力学の問題設




定としては極めて単純です。高校生にも分かる内容ですし、時間をかければこの問題に対するニュートンの運動方程式を立てることができるかもしれません。でもその解を求めることはきっと難しいでしょう。

この講義で解析力学を学べば、実際にはこの程度の問題であれば、この講義の最初の数回を聞くだけで、この問題に答えるためのニュートンの運動方程式ではない別のもっと簡単な運動方程式の立て方、その機械的手続き、アルゴリズムを知ることができます。そのアルゴリズムに従って運動方程式を立てることは極めて自動的で、簡単な微分計算に慣れていれば、ほとんど頭を使わないほどです。ところができあがった方程式は解析的には解けそうもない微分方程式です。だからこそ、このような例題が解析力学の教科書にはあまり載っていないのでしょう。

しかし、いくら長くて複雑な微分方程式でも、それを計算機を使って積分すれば解けます。これを数値積分といいます。ですから遠慮する必要はありません。この講義ではこのような問題、「単純で興味深いが、解析的に解けそうもない運

動方程式になる力学の問題」を例題としてどんどん採用します。その一部は実際に数値積分を行って数値解を求めます。数値的に解いた解は映像にしてその振る舞いを直感的に分かりやすく表現することもします。これをデータ可視化といいます。問題の定式化、数値計算による求解、そして計算結果の可視化という一連のプロセスは、計算機シミュレーションそのものです。ですからこの講義は「計算機シミュレーションによる計算機シミュレーションのための解析力学入門」とも言えるかもしれません。

ただし、解析的に解くことを軽視するわけでは決してありません。紙とペンで解けることが明かな問題に対して、それと気付かずに数値計算して解こうとすることは情けないことです。計算機に頼らずに解けるはずの簡単な微分方程式を、きちんと自分の手で解けるようになることは理工系学生としては解析力学以前の教養と言えます。ですからこの講義はそのような簡単な微分方程式を解く訓練にもなるようにします。

# 0.1 はじめに

## 0.1.1 事務連絡

- 講師名： 陰山 聡（かげやま あきら）
- 所属：システム情報学研究科 計算科学専攻
- 質問歓迎。随時受け付け。ただし、メールで確認してから研究室にくること。
- メールアドレス：echo pj.ca.u-ebok.trop@egak | rev
- 研究室の場所：自然研究棟 4 号館 8 階
- この講義のウェブページ： `http://goo.gl/aeDEqY`
- 教科書： 上記ウェブページに毎週、資料を掲載する。
- 参考書： 『ゼロから学ぶ解析力学』西野友年著 講談社、『よくわかる解析力学』前野昌弘著 東京図書、『解析力学』江沢洋著 培風館、他。

## 0.1.2 成績について

出席はとらない。欠席の場合は、本講義のウェブページに掲載された資料を読んで自分で勉強すること。

成績 $s$ （$0 \le s \le 100$）は以下の $a$, $b$, $c$ の評価点から決める。$a$=定期試験、$b$=レポート（複数回）、$c$=その他。ここで $0 \le a \le 100$、$0 \le b \le 30$、$0 \le c \le 10$ である。

講義資料に間違いを見つけ、最初に私に指摘してくれた学生には $c$ の要素として加点する。

基本方針は以下の通り：

- 定期試験 $a \ge 90$ ならば「秀」。
- 定期試験 $a \ge 60$ ならば不可にはならない。
- レポート（$b$）＋その他（$c$）の満点は定期試験（$a$）の 40 点に相当。

具体的には、次の関数を使う 予定 である：

$$s = a + (1 - a/100) * (b + c)$$

## 0.1.3 レポートについて

- レポートは原則、次回の講義時に紙で提出。
- 明らかに友人・知人のレポートを写したとわかる場合は、写した方も写させた方も減点。
- 定期試験問題の大部分はレポート課題の応用問題とする 予定。従って定期試験期間直前に詰め込み的に勉強するよりも、レポート課題を毎回、自分できちんと考えて解いた方が効率的なのでおすすめ。

# Chapter 1

# 解析力学とは

## 1.1 調和振動子

解析力学の応用範囲は広く、剛体の力学や荷電粒子の運動、あるいは電磁場の時間発展などにまで適用できるが、この講義ではあえて題材として線形バネと質点からなる系（バネ＝質点系）を中心に扱う。

自然長がゼロのバネの一端を原点につなぎ、他方の端を質点につないだ系を調和振動子系という。質点には、原点の方向に向かってはたらき原点からの距離に比例した力が働く。調和振動子系は解析力学に限らず様々な物理理論の基本的

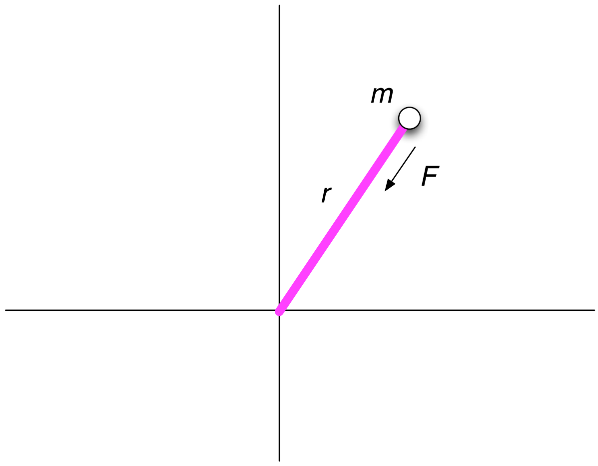



図 1.1: 調和振動子系。

なモデルとしてよく使われる。

いま質点が $z$ 軸に沿った方向に振動している場合を考える。質点の位置を $z$、質量を $m$、質点に働く（$z$ 方向の）力を $F$ とすると、

$$F = -kz$$

である。ニュートンの運動方程式

$$m\boldsymbol{a} = \boldsymbol{F}$$

を使ってこの運動を解いてみよう。運動方程式の $z$ 成分を書くと

$$m\frac{d^2z}{dt^2} = -kz$$

である。この微分方程式を解いてみよう。定数 $\omega$ を

$$\omega^2 := \frac{k}{m}$$

と定義すると、解くべき微分方程式は

$$\frac{d^2z}{dt^2} = -\omega^2 z$$

である。この微分方程式はすぐに解ける。つまり、$c_1, c_2$ を定数とすると

$$z(t) = c_1 \cos{(\omega t + c_2)},$$

あるいは

$$z(t) = c_1' \cos{(\omega t)} + c_2' \sin{(\omega t)}$$

が解である。質点は角振動数 $\omega$ で振動する。これを単振動という。

## 1.2 自然長がゼロでないバネ＝質点系

上と同じように質量 $m$ の質点が $z$ 軸方向に沿って運動しているとする。質点と原点はやはりバネ定数 $k$ のバネでつながれているが、今度はそのバネの自然長が $\ell_0$ とする。

### 1.2.1 例 1

$z$ 方向の力は $F = -k(z - \ell_0)$ である。運動方程式に代入して $z$ に対する微分方程式

$$m\frac{d^2z}{dt^2} = -k(z - \ell_0)$$

を得る。この微分方程式を解いてみよう。座標を変換し

$$q := z - \ell_0$$

とすると上の微分方程式は

$$m\frac{d^2q}{dt^2} = -kq$$

となる。定数 $\omega$ を

$$\omega^2 := \frac{k}{m}$$

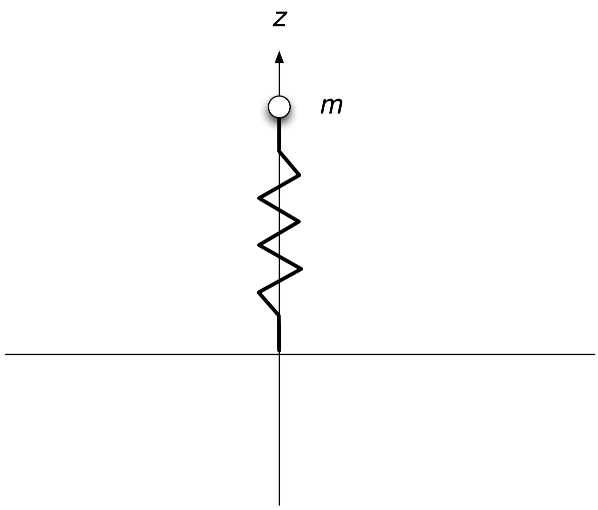



図 1.2: 直線（$z$ 軸）上の質点の運動。バネの一端は原点に、他端が質点に固定されている。

と定義すると解くべき微分方程式は

$$\frac{d^2q}{dt^2} = -\omega^2 q$$

である。これは上と同じ方程式なので、すぐに答えが求まって、

$$q(t) = c_1 \cos(\omega t + c_2),$$

あるいは

$$q(t) = c_1' \cos(\omega t) + c_2' \sin(\omega t)$$

である。つまり

$$z(t) = \ell_0 + c_1 \cos(\omega t + c_2).$$

が解である。

### 1.2.2 例 2

次に上の問題設定を少しだけ変えてみよう。

同じ質点とバネを今度は $z = \ell_0$（ちょうど自然長の位置）の直線上に置き、質点はこの直線上を滑らかに（摩擦なしで）動くとする。バネの一端は原点に固定されている。

運動方程式を書いてそれを解いてみよう。

質点の $x$ 座標を $x$、$x$ 方向の速度を $\frac{dx}{dt}$、加速度を $\frac{d^2x}{dt^2}$ とする。質点が原点方向に引かれる力を $F$ とすると

$$F = -k(\ell - \ell_0)$$

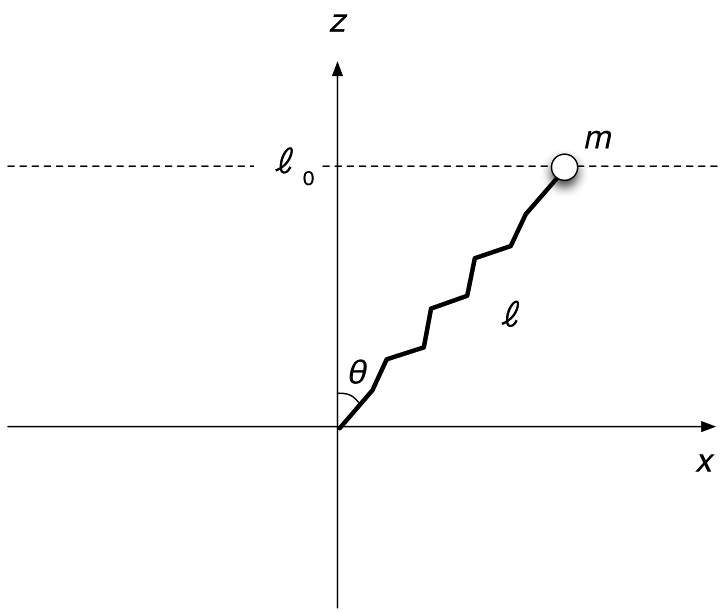



図 1.3: 質点は直線 $z = \ell_0$ 上を滑らかに動く。

$$\ell = \sqrt{\ell_0^2 + x^2}$$

である。したがって $x$ 方向の力 $F$ は

$$\begin{aligned} F_x &= F \sin\theta \\ &= F\frac{x}{\ell} \\ &= -k(\ell - \ell_0)\frac{x}{\ell} \\ &= -kx\left(1 - \frac{\ell_0}{\sqrt{\ell_0^2 + x^2}}\right) \end{aligned}$$

運動方程式

$$m\frac{d^2x}{dt} = F$$

に代入すると

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx\left(1 - \frac{\ell_0}{\sqrt{\ell_0^2 + x^2}}\right) \tag{1.1}$$

これを解けと言われても、今度は簡単には解けない。仕方がないので

$$|x| \ll \ell_0$$

という近似をしてみる。つまり $z$ 軸の近くで微小な振幅で振動するような解を探すわけである。するとこのときには

$$\frac{\ell_0}{\sqrt{\ell_0^2 + x^2}} \sim 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{x}{\ell_0}\right)^2$$

となるので [1]、運動方程式はこの近似の下で

$$m\frac{d^2x}{dt} = -kx\left\{1 - \left(1 - \frac{1}{2}\left(\frac{x}{\ell_0}\right)^2\right)\right\} = -\frac{kx^3}{2\ell_0^2}$$

となる。定数

$$\omega := \frac{k}{2m\ell_0^2}$$

を定義すると、この微分方程式は

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega x^3$$

という（見た目は）簡単な式になる。ちなみにこの微分方程式の解はワイエルシュトラスの楕円関数というもので書ける。

### 1.2.3 例 3

上の二つの例では、ニュートン力学を知ってさえいれば簡単に運動方程式を立てることができた。ところが、簡単なバネ＝質点系に限ったとしても、いつもこれほど簡単というわけではない。具体的に考えてみよう。図 1.4 で示すように、二つの放物線

$$y = x^2 + 1 \quad \text{（上側）}$$

と

$$y = -x^2 - 1 \quad \text{（下側）}$$

に二つの質点（質量 $m$）がそれぞれ放物線上に拘束されて動くとする。質点同士はバネ（バネ定数 $k$、自然長 $\ell_0$）で結ばれている。摩擦は無視する。この質点の運動を求めよ。

実際に解く前に解の様子をおおざっぱに予測してできるであろうか？二つの質点が自然長 $\ell_0$ よりも近い位置にあると反発力が働いて互いに遠ざかるように動く。逆に二つの質点が離れていたら互いに近づこうとする。だが、距離だけで運動が決まるわけでは無論ない。質点の慣性があることを忘れてはいけない。二つの放物線の間隔は 2 だから、自然長 $\ell_0$ が 2 よりも大きいか小さいかで、二つの質点の運動の仕方はかなり変わりそうである。いろいろ予測が付かない中で、一つ確かなことは、「全エネルギーは保存する」ということである。つまりバネの持つエネルギーと二つの質点が持つ運動エネルギーの和は常に一定である。

[1] この近似がどうして成り立つかは講義で説明する

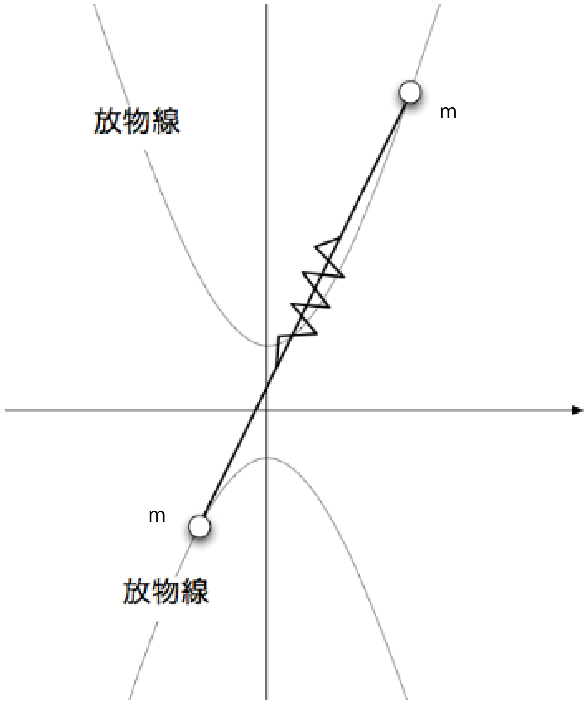



図 1.4: 放物線に拘束された二つの質点の運動。

### 1.2.4 数値解

これほど簡単な問題であるにもかかわらず解析的な解を得ることは難しい。だが、これは驚くべき事ではない。重力で互いに引き合うわずか 3 つの質点の運動（三体問題）でさえ解析的には解けないことが知られている。

ここで「解析的に解けない」というのは、解くべき方程式（この場合は微分方程式）が分かっているのに、任意の初期条件の下でその一般解を求めるための数学的手段がない、という意味である。計算機のない時代であれば、それであきらめるしかなかったが、今は計算機を使うことで、その微分方程式の解を得ることができる。それは一般解という意味ではなく、特定の初期条件に対する解をある精度のもとで近似的に得ることができるという意味であるが、実用的にはそれで十分である場合が多い。

ではその解くべき方程式を導くのは簡単かと言えば、そうではないことはこの問題をニュートン力学の範囲で解こうとがんばった諸君は身にしみて感じているのではないかと思う。不可能というわけでは無論ない。それぞれの質点にかかる力のベクトルを考え、そのベクトルを放物線の接線方向とそれに垂直な方向に分解し、云々といった複雑な手続きを経れば二つの質点に対するニュートンの運動方程式を立てることはできる。

だが解析力学を学べば、そのような複雑な手順が一切不要となる。あるアルゴリズム（ラグランジュの運動方程式）に従って自動的に次のような方程式が得られる。

$$(1+4x_0^2)\ddot{x}_0 = -4x_0\dot{x}_0^2 - \left(\frac{k}{m}\right)\left(\frac{s-l_0}{s}\right)(\Delta x + 2x_0\Delta y) \tag{1.2}$$

$$(1+4x_1^2)\ddot{x}_1 = -4x_1\dot{x}_1^2 - \left(\frac{k}{m}\right)\left(\frac{s-l_0}{s}\right)(-\Delta x + 2x_1\Delta y) \tag{1.3}$$

ここで $x_0$ と $x_1$ はそれぞれの質点の $x$ 座標である。また式を短くするために以下の変数を導入しているが、本質的ではない。

$$\Delta x = x_0 - x_1$$

$$\Delta y = x_0^2 + x_1^2 + 2$$

$$s = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$$

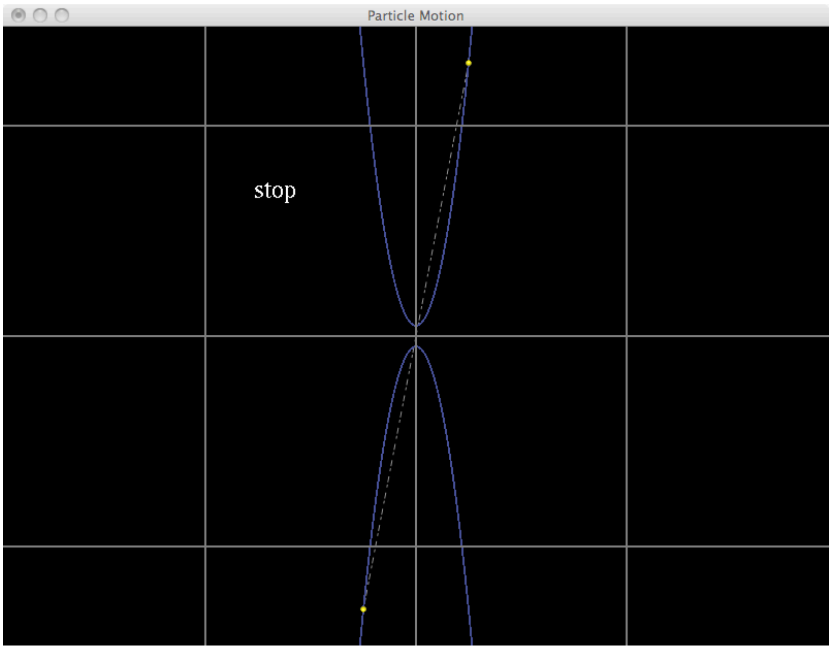
このラグランジュの運動方程式を導くアルゴリズムは極めて単純で、微分計算さえ間違わなければほとんど自動的に得られるものである。そのアルゴリズムがどのようなものであるかはこれからの講義のお楽しみとして、今はこの方程式をいかにして解くかという問題について考えてみよう。

上の二つの式 (1.2) と (1.3) は変数 $x_0$ と $x_1$ に対する微分方程式系である。これを解析的に解くことはとてもできそうにないので、数値解を求めよう。微分方程式を解く操作を積分というのと同様、微分方程式を四則演算の問題に変換して数値的に近似解を得る操作を数値積分という。通常我々は時間 $t$ は実数であると考えている。数値積分では、稠密に分布する全ての時刻 $t$ での解を得ることを諦めて、有限の時間間隔 $\Delta t$ ごとの「飛び飛びの」時刻、$t_0, t_0+\Delta t, t_0+2\Delta t, \cdots$ ごとの解を求める方法である。この飛び飛びの時刻での解も厳密解ではなく、近似解である。

数値積分にはさまざまな方法があり、それぞれ一長一短がある。どのような問題でもそうであるが、方程式の近似解を計算機を使って求める場合、ある程度の誤差は常に存在する。誤差が小さい方法が望ましいのはもちろんであるが、$\Delta t$ の時間刻み幅での数値積分をなんども繰り返しているうちに誤差が蓄積して「とんでもない」答えが得られるようでは困る。「とんでもない答え」とはたとえば今の場合、系の全エネルギー（バネのエネルギーと質点の運動エネルギーの和）が、数値積分を重ねているうちに大きく変わっていってしまうような答えである。従って、エネルギーが厳密に保存することはできないにせよ、長時間数値積分してもエネルギーの値が大きくずれていくことはない数値積分法が望ましい。そのような方法は実際にあって、それはシンプレクティック積分法と呼ばれる。

シンプレクティック積分法に基づいて上の式 (1.2) と (1.3) を「四則演算化」する方法は、この講義の最後の方で紹介する。この講義を最後まできけば、その理論的な根拠を理解することができるであろう。

数値積分の計算結果は数字なので、それを目に見えるようにすることも重要である。（可視化という。）講義では、コンピュータグラフィクスの標準ライブラリ OpenGL（ただし今となって古いバージョンの OpenGL）を使って可視化する機能も含めた C++コードを紹介し、実際にノートパソコンでそのプログラムを実行してみせる。このプログラムは演習室の Mac でも実行可能である。興味のある学生は自分で試してみるとよい。


Particle Motion
stop