

非線形力学と数値計算*

水谷 正大**

非線形力学を例にとって計算機利用の実際を *Mathematica**** を使って示し、非線形科学の計算機利用の意義と研究における計算機とのインターフェイスの重要性を述べる。

1. はじめに

本論文では数理学研究の計算機利用におけるインターフェイスとして *Mathematica* による数値計算を主に紹介しその役割を考察する。*Mathematica* は数値計算、記号処理そしてグラフィックス、プログラミング言語を含む計算機によって数学を行うための環境である^[1]。*Mathematica* は現在 Macintosh や NeXT、Sun、MIPS、News などのワークステーション、CONVEX などのスーパーコンピュータ上で稼働し、*Mathematica* のフロントエンド部はリモート *Mathematica* カーネルにネットワーク上からアクセスできる分散性を備えている。本論文では数理科学のなかでも特に非線形科学における *Mathematica* の役割を考えよう。

数理科学における計算機の利用は、計算機の発達と共に各分野に浸透してきている。計算機を物理学に用いたものとしては Fermi-Pasta-Ulam^[2] による格子振動の研究が最初である。巨視的な系を構成する部分系間の僅かな非線形相互作用が、部分系間のエネルギー等分配をもたらし、その結果として熱平衡をもたらすと

というのが統計力学に対する当時の物理学者の信念であった。Fermi らは各種の非線形相互作用を持つ一次元格子振動の運動を計算機によって解くことでこの非線形性の問題を考えたのである。利用した計算機は Los Alamos の MANIAC であった。

非線形性問題の本格的研究は計算機の出現によって初めて可能となったことを注意しておく。非線形性は多様な形態として現れ、非線形性はたとえ僅かであっても線形的効果とは質的に異なり、後で見るように、極めて複雑な影響を与えるからである。従っていまだに、微分方程式や写像による軌道の大域的挙動についての一般理論はない。一方、数理科学における計算機の利用は単に研究対象の単なるシミュレーションに留まらず、モデルの背後に潜む論理の理論的探求のための重要な方法論となってきた。Korteweg de Vries 方程式の数値計算^[4]の結果が非線形偏微分方程式の新たな展望を開いたことは余りにも有名である^[5]。こうして計算機を使う研究は従来の物理学などの実験科学は勿論のこと数学など広範な分野における研究の新たな方法論となってきた^[6]。

* 本研究は東京情報大学共同研究「思考の道具としての計算機」の補助を受けて行われたものである。

** 東京情報大学講師

*** *Mathematica* は Wolfram Research, Inc. の登録商標である。

非線形科学において計算機利用の研究は、まず研究対象の特徴をうまく反映する具体的モデルを探して数値的にこれを解き、その結果をグラフィックスなどに表現しそのモデルの持つ性質を検討することから始まる。このような数値実験を繰り返しながら新たな発見を観測し、これを説明する理論を構築していくのである。このような過程の中で大きな役割を果たすのが研究対象と計算機とのインターフェイスの部分である。

従来の処理では、FORTRAN や C などの汎用のプログラミング言語を使って数値計算を実行したり、専用のシステムで記号処理を行った後に、得られる数値情報は再び適当なグラフィック処理を経て専用のグラフィックディスプレイに表示される。これらの処理の流れはマイコンからスーパーコンピュータまで計算規模の大小にかかわらず同じであった。このような処理の大部分は本来の研究には無関係であり、むしろ計算機自身の処理のために必要な作業であるといえよう。特にグラフィック処理は極めて大きな負担をユーザーに強いている。例えば、グラフィック処理の初期化をしたり、表示ウィンドウの大きさを設定し、等高線等の目盛りの書き込み作業や描画のクリップ・陰線処理、色彩・陰影などの処理などである。

従来のシステムではこうした計算部分と表現部分が別々に処理され両者をつなぐための技巧が要求されていた。また計算部分、表現部分それぞれにおいても機器やプログラミング上の都合から数多くの技巧が必要であった。計算機利用に当たってはこのような非本質的部分に常に注意を向けねばならず、従って本来計算機が果たすべき発見的で創造的利用を大きく疎外しがちであった。つまり、研究目的と研究手段である計算機環境の非連続性が計算機を一部のユーザーのものにしていたのである。

科学研究における計算機利用の有効性が広く認知されるに従い、計算機への対話的なインターフェイスを備えた総合的計算機環境の要求の高まりはこのような背景を持っている。1988年

に *Mathematica* が Macintosh 上で発表されて以来、数学教育はもとより広範な科学研究に与えた影響^[7]は当然のこと、科学研究におけるソフトウェアというもののあり方が大きく問われることになったのである。

以下に主に *Mathematica* を使って非線形問題の数値計算がどのように行われるかを考えていこう。

2. 3次元グラフ

1964年に Hénon-Heiles^[8]によって調べられた次の2自由度ハミルトン系

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + x^2 + y^2) + x^2 y - \frac{1}{3} y^3$$

は簡単な保存力学系が極めて複雑な挙動を示すモデルとして有名である。このモデルは円柱対称な重力銀河ポテンシャルのもとでの星の運動に対する簡単なモデルとして選ばれた。これは一次元上で非線形結合している2つの振動子の運動とも考えられるモデルである。自由度が2であるので相空間は4次元であるが、ハミルトニアンが保存するので運動は3次元エネルギー超曲面上で行なわれる。2自由度であるのでポテンシャル

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2 y - \frac{1}{3} y^3$$

の様子を見ることは大切である。そのために *Mathematica* を起動して次のように入力する。

```
v[x_, y_] := 1/2 (x^2 + y^2) + x^2 y - 1/3 y^3
Plot3D[v[x, y], {x, -3, 3}, {y, -3, 3},
  BoxRatios -> {1, 1, 2},
  AxesLabel -> {x, y, z}]
```

ここで $v[x, y] := \text{exper}$ はポテンシャル関数を定義しており、Plot3D [] は組み込みの3次元グラフィック関数で {x, -3, 3}, {y, -3, 3} でそれぞれ描画範囲を示している。BoxRatios -> {1, 1, 2} はオプションである。入力を終えて **enter** キーをおすと *Mathematica* のカーネルがコマンドを解釈し、計算しその結果を出力セルに返すのである。得られたグラフ

ィックスは図1³のようである。ここで注意すべきことは、 x 、 y 方向の変化に比べて z 方向の変化が急であること、及び原点(0, 0)近傍でポテンシャル面は鞍状面のようにになっているために、あるエスケープエネルギーが存在し、

あるエネルギー値以上で軌道は無限遠に去ってしまうことである。このエスケープエネルギーの値とそのときのポテンシャル境界を調べてみよう。

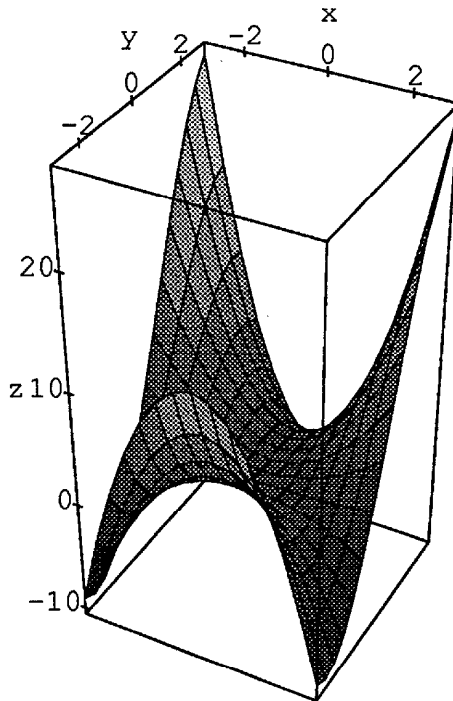


図1 Hénon-Heiles のポテンシャル関数の様子

この目的のために *Mathematica* に比べればプログラムが出来ないなど機能的に劣るが、使い勝手の優れたソフトウェアである *Theorist*⁴ をまず使ってみよう。平面 $z=E$ (定数) とポテンシャル $V(x, y)$ のグラフを重ねて描き、定数をさまざまに換えると $E=1/6$ で図2 a が得られる。一方、*Mathematica* では次のようにしてこの事実を表示することができる。

```
Plot3D[V[x, y], {x, -1.5, 1.5}, {y, -1.5, 1.5},
  PlotPoints -> {30, 30},
  PlotRange -> {-1, 1/6},
  ClipFill -> None,
  AxesLabel -> {x, y, z}]
```

このとき得られるグラフィックスは図2 b のようである。ここではプロットのサンプル点を xy 方向に30点ずつ取り、 z 方向の描画範囲を $\text{PlotRange} \rightarrow \{-1, 1/6\}$ で定めて $\text{ClipFill} \rightarrow \text{None}$ によって範囲以外の曲面をカットしている。精密な計算によるとエスケープエネルギー $E=1/6$ でポテンシャル境界は正三角形となる。このことは次のようにして等高線を描いてみると図2 c のようになることから確かめられる。

```
ContourPlot[V[x, y], {x, -1.5, 1.5}, {y, -1.5, 1.5},
  ContourLevels -> 20, PlotPoints -> 40,
  AxesLabel -> {x, y, z}]
```

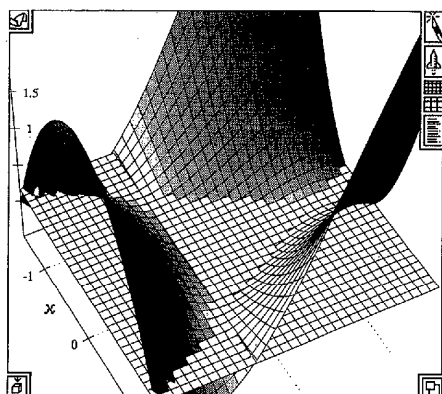


図2 a ポテンシャル曲面を $E=1/6$ で切断
: Theorist による描画

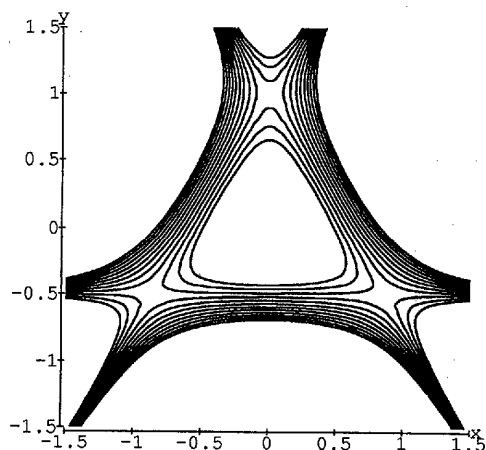


図2 c 等ポテンシャル線

それ以上のエネルギーではポテンシャル境界は有界でなくなり、無限遠への運動が可能になり、エネルギー曲面はコンパクトでなくなるので、計算はこのエスケープエネルギー以下で行うようにする。

3. 非線形微分方程式の数値差分法

Hénon-Heiles モデルの運動方程式を数値計算してみよう。このハミルトン系の運動方程式

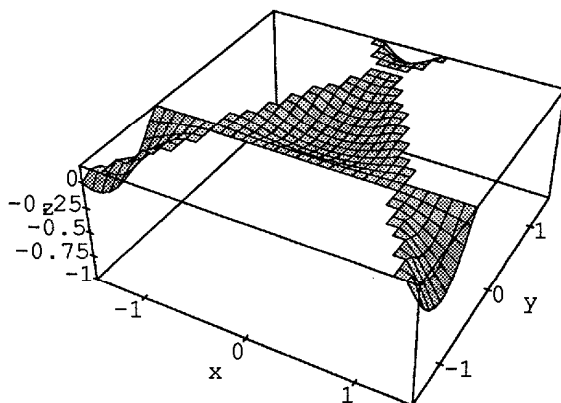


図2 b Mathematica による描画

は位置ベクトル $\vec{x}$ を、運動量ベクトル $\vec{p}$ とすると

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}}$$

より、

$$\frac{dx}{dt} = p_x, \quad \frac{dy}{dt} = p_y$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -(x + 2xy)$$

$$\frac{dp_y}{dt} = -(y + x^2 - y^2)$$

となる。ここで数値差分法として、この種のハミルトン系に適合する Moncrief の方法¹⁹⁾を採用しよう。この差分法は格子ゲージ理論の数値計算において各時間で正準関係を保つように考えられた方法で、比較的大きな差分きざみで安定な数値計算を行える利点がある。

Moncrief の差分法は時刻 t_0 の相空間の点 $(\vec{x}_0, \vec{p}_0)$ に対し Δt 後の時刻 $t_1 = t_0 + \Delta t$ の点 $(\vec{x}_1, \vec{p}_1)$ を

$$\vec{x}_1 = \vec{x}_0 + \Delta t(\vec{p}_0 + \frac{1}{2}\Delta t f(\vec{x}_0))$$

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_0 + \frac{1}{2}\Delta t(f(\vec{x}_0) + f(\vec{x}_1))$$

で与えるものである。ここで $f(\vec{x}) = -\partial H / \partial \vec{x}$ である。これを点 x_0, p_0 から時刻 Δt 後の点を返

す手続として *Mathematica* では次のようにプログラムする。なお、ここでは引数の型を明示していないことに注意しよう。*Mathematica* では型について厳格に定義することもできるが、このように柔軟に対応することも可能である。Block 内の局所変数を使って結果はリスト { , } の形で返される。/. は置き換え記法で組み込み関数 Thread [] を使って関数 f の全ての成分に規則 $x \rightarrow x_0$ を適用するように置き換えるのである。 $\rightarrow$ は規則を表し、N [] は数値を返す関数である。このような手続の場合には Block [] によって範囲を定める点は通常のプログラム言語とおなじである。

```
MCStep[f_, x_, p_, {x0_, p0_}, dt_] :=
  Block[{k1, k2, xx, pp},
    k1 = N[f /. Thread[x -> x0] ];
    xx = x0 + dt (p0 + 0.5 dt k1);
    k2 = N[f /. Thread[x -> xx] ];
    pp = p0 + 0.5 dt (k1 + k2);
    {xx, pp}
  ]
```

さてこの手続を使って、相空間内の初期条件 (x0, p0) から出発する軌道を時刻 0 から t1 まで時間きざみ dt で求めてみよう。そのために NestList 関数を用いる。これは関数 g に対し NestList[g, y0, n] が初期値 y0 を含めて n 回反復の結果のリスト、すなわち

$$\{y_0, g(y_0), g^2(y_0), \dots, g^{n-1}(y_0), g^n(y_0)\}$$

を返す組み込み関数である。次の手続き Moncrief では汎用の変数 # を導入して手続き MCStep を純粋関数にして NestList [] をつかっている。純粋関数が使われたことを示すために & を用いる。純粋関数は λ -計算の理論に関係している関数形態である。/. は後置きの条件文でそれ以降の条件が満たされているかどうかを判定している。ここでは引数であるリストの長さが等しいかどうかを調べている。従って、この手続きはハミルトンベクトル場の次元には無関係に利用できることに注意する。関数による集合の像 $\{g(x), x \in X\}$ を返す Map [] 関数が使われ、Map [g, set] のように用いる。組み込み関数 Flatten [] は入れ子になったリスト

を平坦化するもので、オプションでその入れ子の深さを表す。ここでは NestList [] によって得られたリストオブジェクトを Flatten [] を深さ 1 の純粋関数にしてから Map している。これによって返されるリストは、 $\{\{\dots\}, \{\dots\}, \dots, \{\dots\}, \{\dots\}\}$ の形であり、内側のリストの長さは与えた引数の長さに等しい。内側のリストの構造は {位置座標の組, 運動量座標の組} である。このように *Mathematica* は返された結果をオブジェクトとして扱えるようにオブジェクト指向プログラミングの考えに貫かれている。*Mathematica* のデータの扱い方は LISP に影響を受けており、それゆえにプログラミングに関しても強力な組み込み関数とあいまって柔軟で汎用性の高いプログラムが書けるのである。

```
Moncrief[f_List, x_List, p_List, x0_List,
  p0_List, {t1_, dt_}] :=
  Block[{mon},
    mon = NestList[ MCStep[ f, x, p, #, N[dt] ] &,
      N[{x0, p0}], Round[N[t1/dt]] ] //
      Length[f] == Length[x] == Length[p]
      == Length[x0] == Length[p0];
    Map[Flatten[#, 1] &, mon]
  ]
```

実際にはこれらの手続などは *Mathematica* の組み込み関数とおなじように使えるようにライブラリ化しておくほうが便利ことが多い。そのためには次のようにして、例えば、Moncrief. m と名前をつけてパッケージ化する。

```
BeginPackage["Moncrief`"]

Moncrief::usage = "Moncrief[{f1,f2,...},{x1,x2,...},
  {p1,p2,...}, {x10,x20,...}, {p10,p20,...}, {t1,dt}]
  numerically integrates, using Moncrief method,
  where fj's are forces as function of the
  configurations xj's, and pj's are momentums, with
  initial values {x10,x20,...} and {p10,p20,...}.
  The integration proceeds in step of dt from 0 to t0.
  Moncrief returns a list of coordinates
  {x1,x2,...,p1,p2,...}. So drawing graphics need
  some cares, as following sample

Sample: f1 = -x1, f2 = -2x2
  (2dim harmonic oscillator).
  Mon = Moncrief[{-x1, -2 x2}, {x1, x2}, {p1, p2},
    {2, 5}, {3, 4}, {9, 0.1}]
  position = Map[Flatten[#, 1] &, Mon]
  Show[Graphics[{PointSize[0.02],
    Point[Part[First[t], {1, 3}]],
    Line[Map[Part[#, {1, 3}] &,
      position]]}],
    Axes->Automatic],
```

```
where Point draws an initial point and {1, 3}
in Show[Graphics....] indicates a set of
components of phase point {x1,x2,...,p1,p2...},
```

where {x1,x2,...,p1,p2..} is identified with {1,2,...,2n}. "

```
Begin["Private`"]
```

```
MCStep[f_, x_, p_, {x0_, p0_}, dt_] :=
  Block[{k1, k2, xx, pp},
    k1 = N[f /. Thread[x -> x0] ];
    xx = x0 + dt (p0 + 0.5 dt k1);
    k2 = N[f /. Thread[x -> xx] ];
    pp = p0 + 0.5 dt (k1 + k2);
    {xx, pp}
```

```
]
```

```
Moncrief[f_List, x_List, p_List, x0_List, p0_List,
          {t1_, dt_}] :=
```

```
Block[{mon},
  mon = NestList[ MCStep[ f, x, p, #, N[dt] ] &,
    N[{x0, p0}], Round[N[t1/dt]] ] /;
  Length[f] == Length[x] == Length[p]
  == Length[x0] == Length[p0];
```

```
Map[Flatten[#, 1] &, mon]
```

```
]
```

```
End[]
```

```
EndPackage[]
```

このパッケージを *Mathematica* のメモリにロードするには *Mathematica* セッションで `<<Moncrief.m` と入力すればよい。このパッケージに書かれている :: usage の箇所に書かれた内容が、組み込み関数の場合も同じように、?? Moncrief でその意味や使用法を知ることができる。また簡単な使用法は? Moncrief を実行すれば分る。なお Macintosh や NeXT では *Mathematica* の記述的で比較的長い関数や引数の組に関して、組み込み関数やユーザー登録関数のどちらにも、コマンド完全化機構が働く。例えば、Plot の後で command-K を入力すると Plot で始まるコマンドの一覧が得られその中から選ぶことができる。また Plot の後で command-L を入力するとテンプレート機構が働き、Plot[f,{x,xmin,xmax}] のように引数情報が取得できる。

さて Henon-Heiles モデルの数値計算を次のように行ってみよう。

```
t = Moncrief[{- (x1 + 2 x1 x2), -(x2 + x1^2 - x2^2)},
  {x1, x2}, {p1, p2}, {0.5, 0}, {0.1, 0},
  {30, 0.1}]
```

```
tt = Moncrief[{- (x1 + 2 x1 x2), -(x2 + x1^2 - x2^2)},
  {x1, x2}, {p1, p2}, {0.51, 0}, {0, 0},
  {30, 0.1}]
```

```
Show[Graphics3D[ Line[Map[Part[#, {1,2, 3}] &, t]],
  PointSize[0.02],
  Point[Part[Last[t], {1, 2, 3}]],
```

```
Point[Part[Last[tt], {1, 2, 3}]],
  GrayLevel[0.6],
  Point[Part[First[t], {1, 2, 3}]],
  Point[Part[First[tt], {1, 2, 3}]],
  Line[Map[Part[#, {1,2, 3}] &, tt]]
]],
  AxesLabel -> {x1, x2, p1},
  Axes -> Automatic]
```

ここでは、おなじエネルギー曲面 $E=0.130$ にある 2 つの初期条件 $(0.5, 0.0, 0.1, 0.0)$ と $(0.51, 0.0, 0.0, 0.1)$ から時刻 30 までで手続き Moncrief から得られる 2 つのリストオブジェクト、それぞれ t と tt を使ってグラフィックスに表している。相空間の点 (x_1, x_2, p_1, p_2) からなるリストの集合 t および tt に対して `Map [ ]` によって組み込みの `Line [ ]` 関数によって各点を直線を結んで微分方程式の軌道としているのである。初期条件に応じて、前者を黒色に、後者を灰色 (GrayLevel [0.6]) で描いている。またそれぞれの軌道の出発点を灰丸、到達点を黒丸で示してある。Part [] はリストの要素の部分を取り出す組み込み関数であり、ここでは 4 次元の相空間点の中から (x_1, x_2, p_1) を取り出して 3 次元空間のグラフィックスとして表している。

図 3 から分かるように、初期条件のほんの僅かな差がその後の軌道の挙動を大きく変えている。このように力学系が初期条件に鋭敏に依存する性質をカオスという。カオス軌道は周期的でなく、非周期的挙動を示す。従って充分時刻が経過するとその軌道は極めて複雑であたかもランダムに運動しているかのように見えるのである。決定論的な力学系がこのような確率論的な挙動を呈することがカオスの特徴である。ハミルトン力学系において非線形性がカオスをもたらす可能性は既に Poincaré によって指摘されていた^[10]が、Hénon-Heiles によって初めて具体的に示されたのであった。但し、Kolmogorov-Arnold-Moser の定理^[11]が示しているように非線形性は常にカオスをもたらさないことを注意しておく。実際、Fermi-Pasta-Ulam の実験ではカオスは起こらず、その結果エネルギーの等配分は実現されなかったのである。

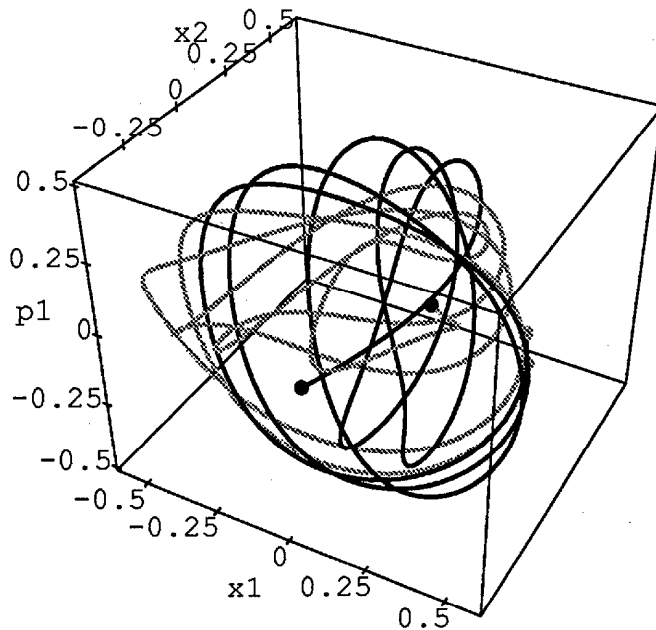


図3 初期条件 (0.5,0.0,0.1,0.0) (黒色) と (0.51, 0.0,0.0,0.0) (灰色) による軌道

Mathematica はこのように僅か数行のプログラムで微分方程式の数値計算を行い⁵⁾、その結果としてのオブジェクトを様々に加工を加えてグラフィックスに表示できる。

ここで、1963年に気象学者の Lorenz が対流の簡単なモデルとして導き数値計算した次の Lorenz 方程式^[12]を調べてみよう。ここで σ はプラントル数、 γ はレーリー数に関する数、 b は幾何学的因子に関する数であり、この方程式は散逸系のカオスの研究の出発点となったものである。

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x)$$

$$\frac{dy}{dt} = -xz + rx - y,$$

$$\frac{dz}{dt} = xy - bz.$$

このとき σ と b を固定して r を変化させてベクトル場の分岐の様子を調べるのである。 r をある臨界値以上に変化させると、3つの不動点がある

不安定となるが、このとき軌道は有界な領域に留まり、あらゆる軌道は、沈点や極限周期軌道でないアトラクタに引き寄せられる。この様子を通常のルンゲ-クッタ差分法を使って次のようにして調べてみる。ルンゲ-クッタのパッケージは既に *Mathematica* に用意されているが、ここでは^[13]に従ったものを用いよう。以下では $\sigma = s$ とする。

```
<<Runge.m
s=3; b=1; r=26.5;
t=Runge[{s(y-x), -x z + r x - y, x y - b z},
        {x, y, z}, {0, 1, 0}, {20, 0.04} 1

Show[Graphics3D[{PointSize[0.02], Point[Last[t]],
                  Line[t],
                  GrayLevel[0.6], Point[First[t]]
                }],
      AxesLabel->{"x", "y", "z"},
      Axes->Automatic]
```

図4 a から分かるように、灰丸の初期条件 (0,1,0) から出発した軌道は2つの不安定不動点 $(\pm\sqrt{b(r-1)}, \pm\sqrt{b(r-1)}, r-1)$ のまわりを交互にまわる。到達点を黒丸で示してある。こ

の軌道は時間とともに急速にシート状のアトラクタに引き寄せられる。このアトラクタが薄いシートであることは `Show [ ]` コマンドのオプションに `ViewPoint -> {0.1, -2.4, 2}` を加えて引き続き次のコマンドを入力して得られる図 4 b からも良く分かる。デフォルトの `ViewPoint` は $\{1.3, -2.4, 2\}$ である。このように得られたオブジェクトを何度も加工し直して求める

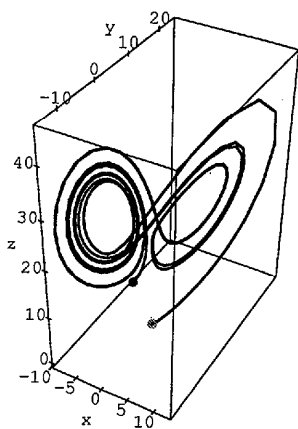


図 4 a デフォルトの Lorenz モデルの表示

結果を簡単に得ることができることは *Mathematica* の極めて大きな利点である。

```
Show[Graphics3D[{PointSize[0.02], Point[Last[t]],
Line[t],
GrayLevel[0.6], Point[First[t]]
}],
ViewPoint -> {0.1, -2.4, 2},
AxesLabel -> {"x", "y", "z"},
Axes->Automatic]
```

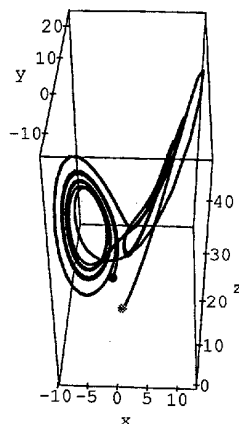


図 4 b ViewPoint を変更して表示

4. 離散力学系

カオスという言葉は区間 I 上の一次元写像力学系 $f: I \rightarrow I$ についての Li-Yorke^[14] の論文の論題から一般に使われるようになった。特に有名な一次元写像は May^[15] によって調べられた区間 $[0,1]$ 上の次の写像である。ここでパラメータ a は 1 から 4 まで変化できる。

$$f_a(x) = 4ax(1-x)$$

この写像のある初期条件から反復写像するときに得られる軌道 $(x, f_a(x), f_a^2(x), f_a^3(x), \dots)$ は決定論的な写像の反復にもかかわらず、ランダムに移動するように見える。次のようにして近接した初期条件から出発した軌道が反復回数と共にどのように変化するかを見てみよう。

```
f[x_] := r x (1 - x);
```

```
r = 4.0; n = 80;
tr0 = Transpose[{Range[0, n],
NestList[f, 0.1, n]}];
tr1 = Transpose[{Range[0, n],
NestList[f, 0.1+10^-10, n]}];
Show[ListPlot[tr0, PlotJoined->True,
PlotStyle->Thickness[.0005]],
ListPlot[tr1, PlotJoined->True,
PlotStyle->Thickness[.003]],
AxesLabel -> {"n", "x"}]
```

初期条件 0.1 から出発して関数 f により 80 回反復して得られるリストのオブジェクトと、僅かにずれた初期条件 $0.1+10^{-10}$ からのリストオブジェクトを線の太さを変えて重ねてプロットしたものが図 5 である。Range[0,n] は 0 から n までの $n+1$ 個のリストを返し、Transpose [] は行列を転置する組み込み関数である。

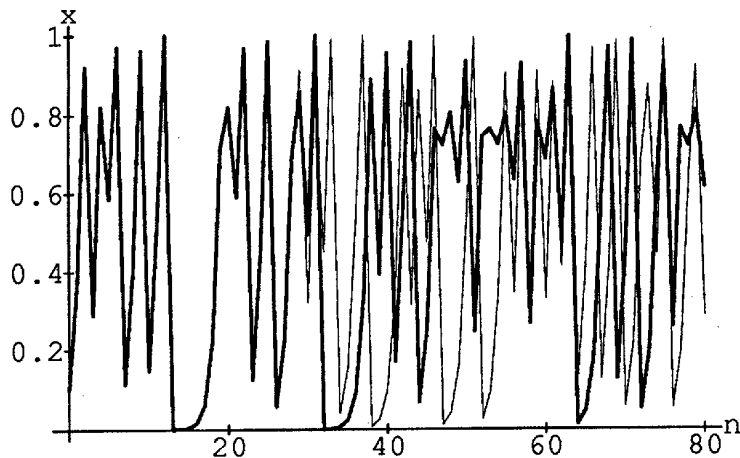


図5 May の写像による初期条件の僅かな差の拡大：2つの初期条件0.1（細線）と $0.1+10^{-10}$ （太線）は反復と共にその差が急速に拡大する。

ハミルトン力学系では2自由度の場合には2次元多様体上の面積保存写像を調べることと運動方程式を直接解くことが等価であることが知られている。そのような写像のなかで平面上の標準写像として次のものがしばしば研究されている^[16]。

$$p_{i+1} = p_i + \frac{k}{2\pi} \sin 2\pi q_i \pmod{1}$$

$$q_{i+1} = q_i + p_{i+1} \pmod{1}.$$

ここで k はパラメータである。この写像を f としてこの様子を次のようにして調べてみよう。

```
f[{p_, q_}] :=
  Block[{tmp},
    tmp = N[p + k Sin[2 Pi q] / (2 Pi)] ;
    {Mod[tmp, 1], Mod[q + tmp, 1]}
  ]
k = 1.3; n = 300;
pt0 = Map[Point, NestList[f, {0.4, 0.6}, n]]
pt1 = Map[Point, NestList[f, {0.2, 0.7}, n]]
pt2 = Map[Point, NestList[f, {0.5, 0.4}, n]]

pt3 = Map[Point, NestList[f, {0.7, 0.15}, n]]
Show[Graphics[{PointSize[0.006], pt0,
  PointSize[0.003], pt1,
  PointSize[0.001], pt2,
  PointSize[0.006], pt3
}],
PlotRange -> {{0, 1}, {0, 1}},
Axes -> Automatic, AspectRatio -> 1,
AxesLabel -> {"p", "q"}]
```

パラメータを $k=1.3$ とし、初期条件として $(0.4, 0.6)$ 、 $(0.2, 0.7)$ 、 $(0.5, 0.4)$ 、 $(0.7, 0.15)$ の4つをとり点の大きさを変えて100点プロットしたものが図6である。

図6では初期値 $(0.2, 0.7)$ から出発した軌道は不変円をなしているが、それ以外の初期条件を持つ軌道はカオスを呈している。このパラメータ値では規則的運動とランダムな運動が共存しているのが分かる。パラメータの値がある臨界値よりも大きくなると、全ての軌道はカオスとなることがわかっている^[17]。

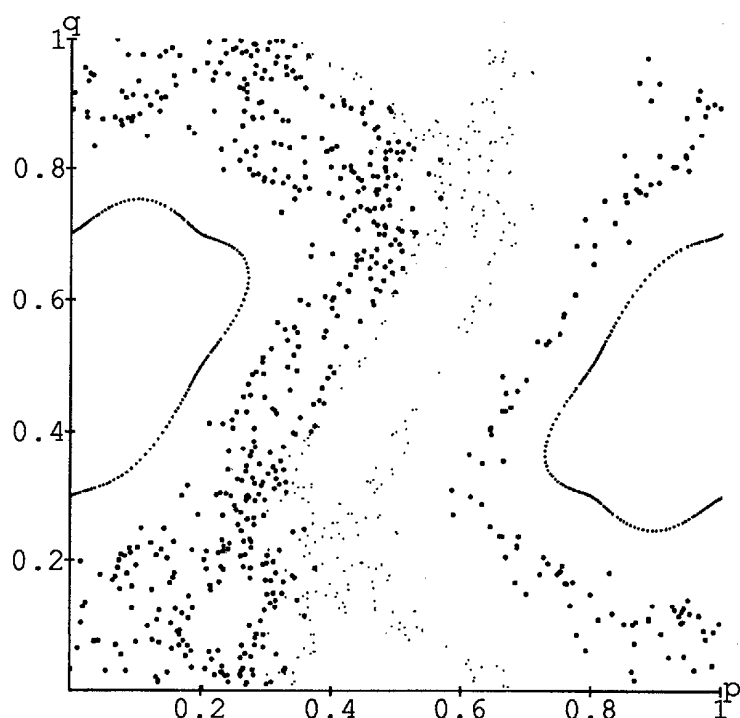


図6 $k=1.3$ 初期条件(0.4, 0.6)、(0.2, 0.7)、(0.5, 0.4)、(0.7, 0.15)としたときの軌道の様子.

5. おわりに

以上見てきたように非線形力学系の研究では、計算機を利用するにあたっては、研究したい対象を試行錯誤ともいえるようにパラメータを変化させたり、様々なグラフィック処理を通じてそのモデルのもつ本質的な性質を取り出すように試みるのがしばしばおこなわれる。逆にこのような作業を通してのみ適切な力学モデルが得られることが多い。このような作業を繰り返す際に、計算機環境とのインターフェイスの優劣は研究の創造性と発展に大きく影響を与える。*Mathematica* はこのような数理科学の研究においてはこうした高度な統合的計算機環境を提供していると見なされている。もちろん *Mathematica* によって妥当とされた適切なモデルや

計算結果は、さらに高速な専用コンピュータによって精密に計算され表現されることも必要であることも指摘しておく。

本稿では非線形力学の研究における *Mathematica* による数値処理に力点をおいて考察してきたが、*Mathematica* にはその白眉ともいえる高度な記号及び規則処理能力があり、これらの処理に加えてさらにアニメーションも含んだ強力なグラフィックス処理を数値及び記号処理の有機的統合の中で実現している。これらについては別場で論ずることにする。

注

3 本論文の図は Macintosh によって得られたものを OKI の MicroLine 801PS から出力したものを使用している。

4 *Theorist* は Prescience Corporation の登録商標である。

5 *Mathematica* Ver.2 では常微分方程式の数値解を与える関数 `NDSolve` [] が組込まれた。

参考文献

- [1] S. Wolfram, *Mathematica : A System for Doing Mathematics by Computer*, 2nd Edition, Addison Wesley, 1991.
- [2] E. Fermi, J. Pasta, and S. Ulam, 1955. **Studies of nonlinear problems**, Los Alamos Scientific Laboratory report LA-1940. Also in Stanislaw Ulam : Sets, Numbers, and Universe, edited by W. A. Beyer, J. Mycielski, and G.-C. Rota, The MIT Press, 1974.
- [3] S. Wiggins, **Istrodution to Applied Non-linear Dynamical Systems and Chaos**, Springer-Verlag, 1990.
- [4] N. J. Zabusky and M. D. Kruskal, **Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states**, *Phys. Rev. Lett.*, 15 (1965) 240.
- [5] 戸田盛和, 非線形格子力学, 岩波書店, 1978.
- [6] **From Cardinals to Chaos** : Reflections on the Life and Legacy of Stanislaw Ulam, edited by N. G. Cooper, Cambridge Univ. Press, 1989.
- [7] Mathematica 利用についての多くの成書の発行がなされ, 専門の定期研究誌である *The Mathematica Journal*, Addison Wesley も発行されている。
- [8] M. Hénon and C. Heiles, **The applicability of the third integral of motion : some numerical experiments**, *Astron. J.*, 69 (1974) 73.
- [9] Moncrief, **Finite difference approach to solving operator equations of motion in quantum theory**, *Phys. Rev. D*, 28 (1983) 2485.
- [10] H. Poincaré, **Les Methodes Nouvelles de la Mechanique Celeste**, Gauthier-Villars, Paris, 1892.
- [11] A. N. Kolmogorov, **On the preservation of quasi-periodic motion under a small variation of Hamilton's function**, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 98 (1954) 525.
- V. I. Arnol'd, **Mathematical Methods of Classical Mechanics**, Springer-Verlag, 1978. (アーノルド、古典力学の数学的方法、岩波書店、1980年)
- J. Moser, **Stable and Random Motions in Dynamical Systems**, Princeton Univ. Press, 1973.
- [12] C. Sparrow, **The Lorenz Equations**, Springer-Verlag, 1982.
- J. P. Eckman, Road to turbulence in dissipative dynamical systems, *Rev. Mod. Phys.*, 57 (1985) 617.
- [13] R. Maeder, **Programming in Mathematica**, Addison-Wesley, 1990.
- [14] T. Y. Li and J. A. Yorke, **Period three implies chaos**, *Am. Math. Monthly*, 82 (1975) 985.
- [15] R. May, **Simple Mathematical models with very complicated dynamics**, *Nature*, 261 (1976) 459.
- [16] J. M. Green, **A method for determining a stochastic transition**, *J. Math. Phys.*, 20 (1979) 1183.
- A. J. Lichtenberg and M. A. Leiberman, **Regular and Stochastic Motion**, Springer-Verlag, 1983.
- [17] M. S. Mackey, J. D. Meiss and I. C. Percival, **Transport in Hamiltonian systems**, *Physica*, 13D (1984) 55.