シンプレクティック積分法について*

陰山 聡

神戸大学 システム情報学研究科 計算科学専攻

ver. 140110a

1 正準方程式の厳密解

1 自由度系の相空間 (q, p) 中の点を

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \tag{1}$$

と書く。関数 $f(\boldsymbol{r})$ に作用する演算子をハットをつけて $\hat{A}$ などと書くことにする。

関数 $h(\boldsymbol{r})$ をパラメータとし、$f(\boldsymbol{r})$ に作用する演算子 $\hat{D}(h)$ をポアッソン括弧を使い

$$\hat{D}(h)f = \{f, h\} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial h}{\partial p} - \frac{\partial h}{\partial q}\frac{\partial f}{\partial p} \tag{2}$$

と定義すると、ハミルトニアンが H で与えられる系の正準方程式は

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \hat{D}(H)\,\boldsymbol{r} \tag{3}$$

である。

時刻 t の状態を $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t)$、そこから τ だけ時間が経った状態を $\boldsymbol{r}(t+\tau)$ とする。テーラー展開と式 (3) より

$$\boldsymbol{r}(t+\tau) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!}\frac{d^n}{dt^n}\right)\boldsymbol{r} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!}\hat{D}(H)\right)\boldsymbol{r}$$

演算子 $\hat{A}$ の指数関数を $\mathrm{Exp}(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{A}^n/n!$ と定義すると、正準方程式の形式的な厳密解は

$$\boldsymbol{r}(t+\tau) = \mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H))\,\boldsymbol{r}(t) \tag{4}$$

と書ける。つまり $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H))$ は状態を時間 τ だけ進める時間推進の演算子である。

一般のハミルトニアン $H(\boldsymbol{r})$ に対する時間推進演算子 $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H))$ を具体的に計算することができないが、H が p だけに依存する関数 $K(p)$ の時は $\hat{D}(K)^n\,\boldsymbol{r} = 0 \quad (n \geq 2)$ なので

$$\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K)\boldsymbol{r} = \left(1 + \tau\hat{D}(K)\right)\boldsymbol{r} = \left(1 + \tau\frac{dK}{dp}\frac{\partial}{\partial q}\right)\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} q + \tau\frac{dK(p)}{dp} \\ p \end{pmatrix} \tag{5}$$

と厳密に書ける。任意の τ について成り立つこの式は等速直線運動の演算子である。同様に $H = U(q)$ の時にも時間推進演算子の厳密な形を具体的に求めることができ、

$$\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U)\boldsymbol{r} = \left(1 + \tau\hat{D}(U)\right)\boldsymbol{r} = \left(1 - \tau\frac{dU}{dq}\frac{\partial}{\partial p}\right)\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} q \\ p - \tau\frac{dU(q)}{dq} \end{pmatrix} \tag{6}$$

* このノートは神戸大学工学部の講義「解析力学 B」(2013 年度後期) の講義資料から一部を抜き出したものである。

である。

以下に見るように、シンプレクティック積分法は上の $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K)\boldsymbol{r}$ や $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U)\boldsymbol{r}$ のような厳密に解ける時間推進演算子を組み合わせて（合成変換して）本来の時間推進演算子 $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H)\boldsymbol{r}$ を近似する手法である。

なお、任意の運動は正準変換なので、式 (4) から、ある関数 $f(\boldsymbol{r})$ から構成される演算子 $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(f))$ はシンプレクティック性をもつ演算子であることがわかる。また、$\boldsymbol{r}(t)$ から $\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}(t+\tau)$ への変換が式 (4) の形で書けるのであればこれは（H をハミルトニアンとする）運動と解釈することができる。

2　シンプレクティック積分法

ハミルトニアンが

$$H(q,p)=K(p)+U(q) \tag{7}$$

のときの 1 次精度シンプレクティック積分法の一つとして以下の公式がある。

$$q'=q+\tau\frac{dK}{dp}(p) \tag{8}$$

$$p'=p-\tau\frac{dU}{dq}(q') \tag{9}$$

ここで $\tau<1$ である。これは

$$q^*=q+\tau\frac{dK}{dp}(p) \tag{10}$$

$$p^*=p-\tau\frac{dK}{dq}(q) \tag{11}$$

$$q'=q^*+\tau\frac{dU}{dp}(p^*) \tag{12}$$

$$p'=p^*-\tau\frac{dU}{dq}(q^*) \tag{13}$$

という二つの変換に分けられる。式 (10) と (11) は、ハミルトニアン K による厳密な時間推進 (5) であり、式 (12) と (13) は、ハミルトニアン U による（新しい正準座標 $\boldsymbol{r}^*$ の下で計算した）厳密な時間推進 (6) である。つまりこの積分法は演算子を使って

$$\boldsymbol{r}'=\hat{S}\,\boldsymbol{r} \tag{14}$$

$$\hat{S}=\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K))\,\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U)) \tag{15}$$

と書ける。先に作用させる K の演算子が左にくることに注意する[1]。

式 (15) は次のようにしても確認できる。式 (9) を書き換えると

$$\begin{aligned}
p' &= p-\tau\frac{dU}{dq}(p+\tau\frac{dK}{dp}) \\
&= p-\tau\left(\frac{dU}{dq}+\tau\frac{dK}{dp}\frac{d^2U}{dq^2}+\frac{\tau^2}{2!}\left(\frac{dK}{dp}\right)^2\frac{d^3U}{dq^3}+\frac{\tau^3}{3!}\left(\frac{dK}{dp}\right)^3\frac{d^4U}{dq^4}+\cdots\right) \\
&= p-\tau\left\{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\tau^n}{n!}\left(\frac{dK}{dp}\frac{d}{dq}\right)^n\right\}\frac{dU}{dq} \\
&= \left\{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\tau^n}{n!}\hat{D}(K)^n\right\}\left(p-\tau\frac{dU}{dq}\right) \\
&= \mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K))\left(1+\tau\hat{D}(U)\right)p \\
&= \mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K))\,\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U))\,p
\end{aligned} \tag{16}$$

[1] たとえば、3 次元カーテシアン座標 (x,y,z) の z 軸周りの回転 $\hat{R}$ と x 軸方向の平行移動 $\hat{T}$ は非可換である。局所座標を回転（$\hat{R}$）してから変換後の x 軸方向に平行移動（$\hat{T}$）するという操作は $\boldsymbol{r}'=\hat{R}\hat{T}\,\boldsymbol{r}$ である。

また、式 (8) も同じ形に書けることがわかるので、式 (15) が成り立つ。

このシンプレクティック積分法はハミルトニアン H による（未知の）時間推進演算子を、二つの（既知の）時間推進演算子の合成で

$$\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H)) = \mathrm{Exp}(\hat{D}(K+U)) \sim \mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K))\,\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U)) = \hat{S} \tag{17}$$

と近似した方法と言える。

変換 $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K))$ と変換 $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U))$ はどちらも正準変換であり、正準変換の合成変換は正準変換なので、この演算子 $\hat{S}$ はシンプレクティック性を持つことがわかる。

3　計算精度

近似式 (17) の誤差を見積もってみよう。$\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H)) = \hat{S} + \hat{E}rr$ とすると、二つの演算子の展開

$$\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H)) = 1 + \left(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U)\right) + \frac{\tau^2}{2!}\left(\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U)\right)^2 + \cdots$$

$$\hat{S} = \left(1 + \tau\hat{D}(K) + \frac{\tau^2}{2!}\hat{D}(K)^2 + \cdots\right)\left(1 + \tau\hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2!}\hat{D}(U)^2 + \cdots\right)$$

を比較して

$$\hat{E}rr(\tau) = \frac{\tau^2}{2}\left(\hat{D}(K)\hat{D}(U) - \hat{D}(U)\hat{D}(K)\right) + \cdots \tag{18}$$

つまり 1 ステップの誤差は $O(\tau^2)$ である。これは 1 次オイラー法と同じである。

4　エネルギーの計算精度

1 ステップあたりの精度は同じなのに、1 次オイラー法とは異なり、シンプレクティック法は長時間積分しても全エネルギーが本来の値から大きくずれることはない。その理由は以下の通りである。

シンプレクティック積分法の演算子 $\hat{S}$ は正準変換なので、それに対応する（仮想的な）運動があると期待できる。実際

$$\hat{S} = \mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K))\,\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U)) = \mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(\tilde{H})) \tag{19}$$

と書けることが以下のように確認できる。

一般に非可換演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対して以下の公式（Baker-Campbell-Hausdorff 公式）が成り立つ。

$$\mathrm{Exp}(\hat{A})\,\mathrm{Exp}(\hat{B}) = \mathrm{Exp}(\hat{C}) \tag{20}$$

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{12}[\hat{A}-\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]] - \frac{1}{24}[\hat{B},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]] + \cdots \tag{21}$$

ここで

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{22}$$

等である。定義から、任意の f, g に対して

$$[\hat{D}(f),\hat{D}(g)] = \hat{D}(\{g,f\}) \tag{23}$$

が成り立つ。これはヤコビ恒等式

$$\{f,\{g,h\}\} + \{g,\{h,f\}\} + \{h,\{f,g\}\} = 0 \tag{24}$$

を使えば証明できる。

$$\hat{S} = \mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K))\,\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U)) = \mathrm{Exp}(\hat{C}) \tag{25}$$

$$\alpha = \{U,K\} \tag{26}$$

とすると

$$\begin{aligned}
\hat{C} &= \tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2}\hat{D}(\alpha) + \frac{\tau^3}{12}[\hat{D}(K-U), \hat{D}(\alpha)] - \frac{\tau^4}{24}[\hat{D}(U), [\hat{D}(K), \hat{D}(\alpha)]] + \cdots \\
&= \tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2}\hat{D}(\alpha) + \frac{\tau^3}{12}\hat{D}(\{\alpha, K-U\}) - \frac{\tau^4}{24}\hat{D}(\{\{\alpha, K\}, U\}) + \cdots \\
&= \tau\hat{D}(K + U + \frac{\tau}{2}\alpha + \frac{\tau^2}{12}\{\alpha, K-U\} - \frac{\tau^3}{24}\{\{\alpha, K\}, U\} + \cdots)
\end{aligned} \tag{27}$$

従って

$$\tilde{H} = K + U + \frac{\tau}{2}\alpha + \frac{\tau^2}{12}\{\alpha, K-U\} - \frac{\tau^3}{24}\{\{\alpha, K\}, U\} + \cdots \tag{28}$$

を得る。シンプレクティック積分法は演算子 $\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(\tilde{H}))$ による推進を厳密に実装したものなので、どれだけ積分しても、常に $\tilde{H}$ を一定に保つ。上の式は、その $\tilde{H}$ が本来の系のエネルギー H とは $O(\tau)$ だけしかずれていないことを意味する。つまりシンプレクティック積分法ではエネルギーの誤差は蓄積しない。

5　その他

式 (15) において K による推進と H による推進の順番を入れ替えて

$$\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H)) \sim \mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U))\,\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(K)) \tag{29}$$

とすれば別の 1 次精度のシンプレクティック法ができる。具体的なアルゴリズムは

$$p' = p - \tau\frac{dU}{dq}(q) \tag{30}$$

$$q' = q + \tau\frac{dK}{dp}(p') \tag{31}$$

である。

これらのシンプレクティック法は 1 次精度である。精度を上げるためには次のようにすればよい。一般に演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ に対して

$$\mathrm{Exp}(\tau\hat{A} + \tau\hat{B}) = \mathrm{Exp}(\frac{\tau}{2}\hat{A})\,\mathrm{Exp}(\tau\hat{B})\,\mathrm{Exp}(\frac{\tau}{2}\hat{A}) + O(\tau^3) \tag{32}$$

なので、そこで、ハミルトニアン $H = K(p) + U(q)$ に対する時間推進演算子を

$$\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(H)) \sim \mathrm{Exp}(\frac{\tau}{2}\hat{D}(K))\,\mathrm{Exp}(\tau\hat{D}(U))\,\mathrm{Exp}(\frac{\tau}{2}\hat{D}(K)) \tag{33}$$

と近似すれば、2 次精度の数値積分法になっている。右辺は正準変換の合成変換なので、これは明らかにシンプレクティックな積分法である。より高次のシンプレクティック法を構成方法については [2] を参照のこと。

References

[1] 吉田 春男. ハミルトニアン力学系のためのシンプレクティック数値積分法. 共同研究 「非線形現象の数理科学」湘南レクチャー論文集, p. 68–83, 1997.

[2] H. Yoshida. Construction of Higher Order Symplectic Integrators. *Phys. Lett.*, Vol. 102, pp. 262–268., 1990