任意の Hamiltonian について１次の Symplectic 法を導く。ここでは

$$H(q,p) = T(p) + V(q) \tag{1}$$

と変数分離できる場合のみを考える。p と q をまとめて Γ と書くと、対応する Hamilton 方程式は Liouville 演算子 iL_H を用いて以下のようになる。

$$\frac{d\Gamma}{dt} = \{\Gamma, H\} = iL_H \Gamma \tag{2}$$

ここで

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q} \tag{3}$$

は Poisson 括弧である。微分方程式 (2) を形式的に解くと

$$\Gamma(t+\tau) = \exp(\tau i L_H)\Gamma(t) \tag{4}$$

を得る。Liouville 演算子は線形であるので $iL_H = iL_T + iL_V$ であり、微小量 τ について１次の精度で指数関数の演算子を以下のように分解することができる。

$$\exp(\tau i L_H) = \exp[\tau(iL_T + iL_V)] \simeq \exp(\tau i L_T)\exp(\tau i L_V) \tag{5}$$

この部分の近似を良くすればより次数の高い Symplectic 法を系統的に導くことができる。例えば２次精度のものは以下の通り。

$$\simeq \exp(\tau i L_T/2)\exp(\tau i L_V)\exp(\tau i L_T/2) \tag{6}$$

(5) 式を採用して τ の２次以上の誤差を無視すれば

$$\Gamma(t+\tau) \simeq \exp(\tau i L_T)\exp(\tau i L_V)\Gamma(t) \tag{7}$$

となるが、ここで登場する２つの演算子 $\exp(\tau i L_T)$ と $\exp(\tau i L_V)$ はそれぞれ Hamiltonian が $T(p)$ と $V(q)$ のみで表される系に対する τ だけの時間発展を意味する。それぞれが Symplectic 性を満たすことは明らかであり、その合成写像も Symplectic 性を満たす。またそれぞれの演算子による写像は位相空間での直線運動になり、その厳密な解は簡単に求まる。$\exp(\tau i L_T)$ と $\exp(\tau i L_V)$ を順番に作用させると最終的な合成変換は以下のようになる。

$$q(t+\tau) = q(t) + \tau \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p(t)}, \qquad p(t+\tau) = p(t) - \tau \left.\frac{\partial V}{\partial q}\right|_{q(t+\tau)} \tag{8}$$

これが１次の Symplectic 法を与える。Hamiltonian の変数分離ができる場合はこのまま使えるが、ない場合には第一式の右辺に $\left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p(t),q(t+\tau)}$ と $q(t+\tau)$ が現れるので陰的解法になることに注意する。

任意の Hamiltonian に対して作った１次の Symplectic 法の影の Hamiltonian を求める。そのような影の Hamiltonian を H' と書けば、明らかに

$$\exp(\tau i L_T)\exp(\tau i L_V) = \exp(\tau i L_{H'}) \tag{9}$$

を満たすはずであり

$$H' = T + V + \frac{\tau}{2}\{V,T\} + \frac{\tau^2}{12}(\{\{V,T\},T\} + \{\{V,T\},V\}) + \cdots \tag{10}$$

が求める影の Hamiltonian である。したがって
$H = \frac{1}{2}(q^2 + p^2)$ の場合

$$H' = H + \frac{\tau}{2}pq + \mathcal{O}(\tau^2) \tag{11}$$

$H = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4}p^4$ の場合

$$H' = H + \frac{\tau}{2}pq^3 + \mathcal{O}(\tau^2) \tag{12}$$

式 (10) を証明するには Baker-Campbell-Hausdorff の公式

$$\exp X \exp Y = \exp Z \tag{13}$$

$$Z = X + Y + \frac{1}{2}[X,Y] + \frac{1}{12}([X[X,Y]] + [Y[X,Y]]) + \cdots \tag{14}$$

$$[X,Y] \equiv XY - YX \tag{15}$$

を用いればよい。

参考文献

「シンプレクティック数値解法」吉田春夫, 数理科学 **384**, 37 (1995)
「連載：計算物理入門」上田顕, 数理科学 **434**, (1999)〜 **450**, (2000)