山梨医大紀要　第9巻，93—98（1992）

シンプレクティック アルゴリズムにおける保存量について

秋　山　真　治

ハミルトンの運動方程式の保存量を忠実に保存する数値積分アルゴリズムの構成法について考察する。ポテンシャルの対称性に由来する保存量に関しては，それを保存する任意次数のアルゴリズムを系統的に構成できることが判明する。

キーワード：シンプレクティック不変性，leap-frog 法，Noether の定理，Lie 代数，Lie 変換

§1．はじめに——ある"発見"——

2次元中心力ポテンシャル

$$u:=u(r),\qquad r:=(q_1{}^2+q_2{}^2)^{1/2} \tag{1-1}$$

の下での1質点の運動は，正準座標 q_1，q_2に共役な正準運動量をそれぞれ p_1，p_2とおき，ハミルトニアン

$$H=\frac{1}{2}(p_1{}^2+p_2{}^2)+u(r) \tag{1-2}$$

を用いて，ハミルトンの運動方程式

$$\begin{aligned}\frac{dq_i}{dt}&=\frac{\partial H}{\partial p_i}=p_i,\\ \frac{dP_i}{dt}&=-\frac{\partial H}{\partial q_i}=-\frac{du}{dr}\frac{q_i}{r}\end{aligned}\qquad (i=1,2.) \tag{1-3}$$

を解いて知ることができる。ただし，質点の質量は1とした。自由度2以上のハミルトンの運動方程式は，一般に解析的に解くことができない。しかし，運動方程式（1-3）は，角運動量

$$M_z:=q_1p_2-q_2p_1 \tag{1-4}$$

を保存するので，（求積法により）解析解を得ることができる。M_zは，ハミルトニアン(1-2)が原点の周りの回転という1径数変換群にたいして不変であることに由来する保存量である。ハミルトニアンの1径数変換群にたいする不変性がハミルトンの運動方程式の保存量を与えることは，E. Noether の定理の名で知られている。[1)]

ところで，運動方程式（1-3）を数値的に解くアルゴリズムで角運動量 M_zを保存するようなアルゴリズムを考案できるだろうか。もとの発展方程式と同じ量を保存する数値計算アルゴリズムの一般的構成法は知られていない。とりわけ有名なのは，ハミルトン系である。ハミルトニアンが時間に依らない場合，ハミルトニアン自身が保存量として常に存在するが，ハミルトニアンを保存する陽的差分スキームは見いだされていない。このような事情が知られているので，ここで問題とする M_zについても最初は発見法的手法に頼らざるを得ない。

そこで，シンプレクティック・アルゴリズムの中で最低次のアルゴリズムである leap-frog 法が，M_zを保存するか否かを試みに調べてみよう。N自由度ハミルトニアン

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{p}^2+U(\boldsymbol{q}) \tag{1-5}$$

に対応する leap-frog 法は

$$\boldsymbol{p}_{n+1}=\boldsymbol{p}_n-\Delta t\,\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{q}_n), \tag{1-6a}$$

$$\boldsymbol{q}_{n+1}=\boldsymbol{q}_n+\Delta t\;\boldsymbol{p}_{n+1} \tag{1-6b}$$

で与えられる。ここで，$\boldsymbol{p}:=(p_1,p_2,\cdots,p_N)$，$\boldsymbol{q}:=(q_1,q_2,\cdots,q_N)$，$\Delta t$ は時間差分の間隔，$n=0,1,2,\cdots$は時間ステップ数である。運動方程式(1-3)の leap-frog 法による数値計算アルゴリズムは

山梨県中巨摩郡玉穂町山梨医科大学医学部物理学
（受付：1992年9月8日）

$$p_{i,n+1}=p_{i,n}-\frac{du}{dr}(r_n)\ \frac{q_{i,n}}{r_n}\Delta t, \tag{1-7a}$$

$$q_{i,n+1}=q_{i,n}+p_{i,n+1}\ \Delta t \tag{1-7b}$$

$$(r_n=\ \sqrt{q_{1,n}^2+q_{2,n}^2},\ i=1,2.)$$

で与えられる。M_zの時間変化を計算すると,

$$\begin{aligned}M_{z,n+1}:=&\ q_{1,n+1}p_{2,n+1}-q_{2,n+1}p_{1,n+1}\\ =&(q_{1,n}+p_{1,n+1}\Delta t)p_{2,n+1}\\ &-(q_{2,n}+p_{2,n+1}\Delta t)p_{1,n+1}\\ =&\ q_{1,n}p_{2,n+1}-q_{2,n}p_{1,n+1}\\ =&\ q_{1,n}\left(p_{2,n}-\frac{du}{dr}(r_n)\frac{q_{2,n}}{r_n}\Delta t\right)\\ &-q_{2,n}\left(p_{1,n}-\frac{du}{dr}(r_n)\frac{q_{1,n}}{r_n}\Delta t\right)\\ =&\ q_{1,n}p_{2,n}-q_{2,n}p_{1,n}\\ =&\ M_{z,n}.\end{aligned}$$

すなわち，leap-frog 法は角運動量 M_zを保存するアルゴリズムであることが判明する。

leap-frog 法 (1-7) がもとのハミルトン系 (1-3) と同じ保存量を有する背後には，何か原理的な事柄があるのだろうか。もしそうならば，leap-frog 法以外のシンプレクティックアルゴリズムにもそれを拡張できるかも知れない。これらの点を解明することが本稿の目的である。

§2．シンプレクティック写像判 Noether の定理

$2N$次元相空間$M_{2N}=\{(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\mid \boldsymbol{p}\in\mathbf{R}^N,\ \boldsymbol{q}\in\mathbf{R}^N\}$から$M_{2N}$への写像 $T:(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\mapsto(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}),\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}))$が２次の外微分形式（シンプレクティック形式）

$$\sum_{i=1}^{N} dp_i\wedge dq_i \tag{2-1}$$

を保存するとき，すなわち，

$$\sum_{i=1}^{N} dP_i\wedge dQ_i=\sum_{i=1}^{N} dp_i\wedge dq_i \tag{2-2}$$

が成立するとき，Tをシンプレクティック写像と呼ぶ。leap-frog 法(1-6)式のように，シンプレクティック写像の条件 (2-2) を満たすアルゴリズムを，シンプレクティックアルゴリズムと呼ぶ。

ハミルトンの運動方程式をラグランジュの変分原理から得る方法と類似した方法でシンプレクティック写像を作る方法が知られている。[2] この方法においては，ラグランジュ関数として，$L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}')\ (\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'\in\mathbf{R}^N)$，を与えて，ラグランジアン$\mathscr{L}$を

$$\mathscr{L}:=\sum_{n\in\boldsymbol{Z}} L(\boldsymbol{q}_n,\boldsymbol{q}_{n+1}) \tag{2-3}$$

と定義する。$\mathscr{L}$の停留値を与える $\{\boldsymbol{q}_n\}_{n\in\mathbf{Z}}$は

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\boldsymbol{q}_n}=L_2(\boldsymbol{q}_{n-1},\boldsymbol{q}_n)+L_1(\boldsymbol{q}_n,\boldsymbol{q}_{n+1})=\boldsymbol{0}\qquad(n\in\mathbf{Z}) \tag{2-4}$$

の解として得られる。ただし,

$$L_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'):=\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}') \tag{2-5a}$$

$$L_2(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'):=\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{q}'}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}') \tag{2-5b}$$

と定義する。ここで，$\boldsymbol{q}_n$と正準共役な運動量$\boldsymbol{p}_n$を

$$\boldsymbol{p}_n:=L_2(\boldsymbol{q}_{n-1},\boldsymbol{q}_n)\quad n\in\mathbf{Z} \tag{2-6}$$

と定義すると，条件

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial\boldsymbol{q}\partial\boldsymbol{q}'}\right)\neq 0 \tag{2-7}$$

のもとで，(2-4) と (2-6) から得られる写像（アルゴリズム）

$$\boldsymbol{p}_{n+1}=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{p}_n,\boldsymbol{q}_n),\quad \boldsymbol{q}_{n+1}=\boldsymbol{G}(\boldsymbol{p}_n,\boldsymbol{q}_n) \tag{2-8}$$

は，シンプレクティック写像（アルゴリズム）になる。ラグランジアン$\mathscr{L}$を用いて，ここに述べた方法によりシンプレクティック写像を得る方法を，今後，Lagrangian formalism と呼ぶことにする。

すべてのシンプレクティック写像に Lagrangian formalism が適用できるとは限らないが，leap-frog 法は Lagrangian formalism を適用できる。実際，ラグランジュ関数として,

$$L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}')=\frac{1}{2\Delta t}(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}')^2-U(\boldsymbol{q})\Delta t \tag{2-9}$$

を採用すると，Lagrangian formalism により leap-frog 法（1-6）を得る。

ところで，ハミルトンの運動方程式においては，ラグランジアンの対称性が運動の保存則を与えることが知られている。[1] §1で触れたように，この保存量はNeotherの定理から得られるので，Noether invariantと総称される。ハミルトン系のラグランジアンを$\hat{L}(\boldsymbol{v},\boldsymbol{q})$とする。ここで$\boldsymbol{v}:=\dfrac{d\boldsymbol{q}}{dt}$は速度ベクトルである。$\hat{L}$が，配位空間$M:=\{\boldsymbol{q}\}$上の一径数変換群$h^s$：$M\to M$（$s\in\mathbf{R}$）で不変，すなわち，$h^s_*$を$h^s$が接空間$TM$に誘導する写像として，$\hat{L}$が

$$\hat{L}(h^s_*(\boldsymbol{v}),h^s(\boldsymbol{q}))=\hat{L}(\boldsymbol{v},\boldsymbol{q}) \qquad (2\text{-}10)$$

なる不変性を有するとき，この系はNoether invariant

$$\boldsymbol{p}\cdot\frac{dh^s}{ds}(\boldsymbol{q})\Big|_{s=0} \qquad (2\text{-}11)$$

を持つことが知られている。

Lagrangian formalismを用いたシンプレクティック写像の定式化（2-3）～（2-8）を利用すると，ハミルトン系での（2-10）→（2-11）と類似した次の定理が，Lagrangian formalism化可能なシンプレクティック写像において成立することが証明できる。この定理をその類似性に着目してシンプレクティック写像判Noetherの定理と呼ぶことにする。

定理1（シンプレクティック写像判Notherの定理）.

Lagrangian formalism（2-3）～（2-8）において，ラグランジアン$L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}')$が，配位空間$M$の微分同相写像の1径数変換群$h^s$：$M\to M(s\in\mathbf{R},h^0=$identity)に対して次の不変性を有するとしよう。すなわち，固定された任意の$\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'\in M$について，

$$L(h^s(\boldsymbol{q}),h^s(\boldsymbol{q}'))=L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}')\quad(s\in\mathbf{R}) \qquad (2\text{-}12)$$

とする。このとき，解軌道$\{(\boldsymbol{p}_n,\boldsymbol{q}_n)\}_{n\in\mathbf{Z}}$は，

$$\boldsymbol{p}_n\cdot\frac{dh^s}{ds}(\boldsymbol{q}_n)\Big|_{s=0} \qquad (2\text{-}13)$$

を保存する。

証明　h^sは微分同相写像であるから，$\{h^s(\boldsymbol{q}_n)\}_{n\in\mathbf{Z}}$（$s$：fixed）は，任意の$s$に対し配位空間$M$上の解軌道になる：

$$L_1(h^s(\boldsymbol{q}_{n-1}),h^s(\boldsymbol{q}_n))+L_2(h^s(\boldsymbol{q}_n),h^s(\boldsymbol{q}_{n+1}))=\mathbf{0}. \qquad (2\text{-}14)$$

これより，

$$\begin{aligned}
&L_2(h^s(\boldsymbol{q}_n),h^s(\boldsymbol{q}_{n+1}))\cdot\frac{dh^s}{ds}(h^s(\boldsymbol{q}_{n+1}))\\
&\quad-L_2(h^s(\boldsymbol{q}_{n-1}),h^s(\boldsymbol{q}_n))\cdot\frac{dh^s}{ds}(h^s(\boldsymbol{q}_n))\\
&\quad=L_2(h^s(\boldsymbol{q}_n),h^s(\boldsymbol{q}_{n+1}))\cdot\frac{dh^s}{ds}(h^s(\boldsymbol{q}_{n+1}))\\
&\qquad+L_1(h^s(\boldsymbol{q}_n),h^s(\boldsymbol{q}_{n+1}))\cdot\frac{dh^s}{ds}(h^s(\boldsymbol{q}_n))\\
&\quad=\frac{d}{ds}L(h^s(\boldsymbol{q}_n),h^s(\boldsymbol{q}_{n+1}))\\
&\quad=0.
\end{aligned} \qquad (2\text{-}15)$$

最初の等号は（2-14）を，次の等号では合成関数の微分公式を，そして最後の等号では（2-12）を，それぞれ用いている。（2-15）において$s=0$と置き，Lagrangian formalismにおける正準共役運動量の定義（2-6）を最初の辺に適用すると（$h^0=$identityに注意して）

$$\boldsymbol{p}_{n+1}\cdot\frac{dh^s}{ds}(\boldsymbol{q}_{n+1})\Big|_{s=0}-\boldsymbol{p}_n\cdot\frac{dh^s}{ds}(\boldsymbol{q}_n)\Big|_{s=0}=0 \qquad (2\text{-}16)$$

を得る。定理の主張は以上で証明された。

例1．$M=\mathbf{R}^2$，$U(\boldsymbol{q})=U(\sqrt{q_1{}^2+q_2{}^2})$ の場合

ハミルトン系のラグランジアンは，

$$\hat{L}(\boldsymbol{v},\boldsymbol{q})=\frac{1}{2}(v_1{}^2+v_2{}^2)-U(\sqrt{q_1{}^2+q_2{}^2}) \qquad (2\text{-}17)$$

一方，leap-frog法のLagrangian formalismのラグランジアン（2-9）は，

$$L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}')=\frac{1}{2\Delta t}\{(q_1-q_1')^2+(q_2-q_2')^2\}-U(\sqrt{q_1{}^2+q_2{}^2}). \qquad (2\text{-}18)$$

これらはともに，配位空間$M=\mathbf{R}^2$の原点の周りの回転を与える1径数変換群

$$h^s(q_1, q_2)=(q_1\cos s-q_2\sin s,\quad q_1\sin s+q_2\cos s) \tag{2-19}$$

で不変である。従って，前者は(2-11)で与えられる量

$$\boldsymbol{p}\cdot\frac{dh^s}{ds}(\boldsymbol{q})\bigg|_{s=0}=q_1p_2-q_2p_1 \tag{2-20}$$

を保存し，後者は(2-13)で与えられる量

$$\boldsymbol{p}_n\cdot\frac{dh^s}{ds}(\boldsymbol{q}_n)\bigg|_{s=0}=q_{1,n}p_{2,n}-q_{2,n}p_{1,n} \tag{2-21}$$

を保存する。(2-20)，(2-21)が相空間上の関数として同じ形になった事は（2-11）と（2-13）の比較から自明である。§1での“発見”は，同一の一径数変換群の下で，ラグランジアン$\hat{L}$とLがともに不変であるという事実にその根拠があったわけだ。

例2．並進対称性がある場合（$M=\mathbf{R}^N$）

ポテンシャル$U(\boldsymbol{q})$が，配位空間のk番目の座標軸方向への平行移動$h^s(\boldsymbol{q})=(q_1,\cdots,q_k+s,\cdots,q_N)$で不変な場合，ハミルトン系のラグランジアン$\hat{L}$，leap-frog法のラグランジアン$L$(2-9)はともに$h^s$の下で不変になる。従って，ハミルトン系だけでなくleap-frog法もk軸方向の運動量保存則

$$p_k=一定$$

を与える。

本節で得た結果は，Lagrangian formalismに沿って定式化可能なシンプレクティック写像に適用範囲が限定されるように思われる。物理学への応用の目的で研究されているシンプレクティック写像,[3] たとえば，標準写像やビリアード写像は大抵Lagrangian formalismにより得ることができる。一方，与えられたハミルトン系の解の挙動をできる限り高精度で長時間にわたり予測する必要がある天体力学や加速器物理学では，時間差分Δtの有限性に起因する数値計算誤差が小さければ小さい程良い。このような目的で，より高次の数値計算スキームとしてのシンプレクティックアルゴリズムが研究されている。[4] 次節では，本節で得た結果が高次シンプレクティックアルゴリズムにおいてどのように一般化できるかを考察する。

§3．高次シンプレクティックアルゴリズムへの一般化

ハミルトンの運動方程式の解は，時間をパラメーターとする相空間上の正準変換群とみなせる。$2N$次元相空間$M_{2N}:=\{(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})\}$の上の写像

$$T(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}):=(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}),\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}))\in \mathrm{M}_{2N} \tag{3-1}$$

が正準変換であるための条件は，ポアソンのカッコ式(Poisson's bracket)が

$$\{P_i, Q_j\}=\delta_{ij},\quad \{P_i, P_j\}=\{Q_i, Q_j\}=0, \tag{3-2}$$

なる関係式を満たすことである。ここで,

$$\{f,\ g\}:=\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k}-\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k}\right) \tag{3-3}$$

(f，gは相空間上の関数)はPoisson's bracketを表わし，δ_{ij}はクロネッカーのデルタである。写像Tにたいする条件(3-2)はシンプレクティック形式の不変性(2-2)と同値である。したがって，ハミルトンの運動方程式の数値解法アルゴリズムはシンプレクティックアルゴリズムであることが望ましい。

Neriは，ハミルトニアンが運動エネルギーの部分とポテンシャルエネルギーの部分とに分離しているとき，すなわち,

$$H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})=K(\boldsymbol{p})+U(\boldsymbol{q}) \tag{3-4}$$

と分離できるときに，シンプレクティックアルゴリズムを構成する一般的手法を与えた。[4] Neriの手法は，運動エネルギー$K(\boldsymbol{p})$に付随するLie演算子L_K；

$$L_K *:=\{K, *\},\ (*は\mathrm{M}_{2N}上任意関数) \tag{3-5}$$

および，ポテンシャルエネルギー$\mathrm{U}(\boldsymbol{q})$に付随するLie演算子$L_U$；

$$L_U *:=\{U, *\}, \tag{3-6}$$

の定数倍を無限小変換の生成演算子としてもつLie変換

$$T_K^{s\Delta t} := \exp(s\Delta t L_K) \tag{3-7}$$

$$T_U^{s\Delta t} := \exp(s\Delta t L_U) \tag{3-8}$$

（$s\in\mathbf{R}$, Δt は時間差分間隔）を適当に繰り返すことにより，(3-4)のハミルトニアンによる時間 Δt の時間発展

$$T_H^{-\Delta t} = \exp\{-\Delta t(L_K+L_U)\} \tag{3-9}$$

を近似するという手法である。一般に，Lie 演算子 L_f の指数 $\exp(\theta L_f)$（$\theta\in\mathbf{R}$, f は M_{2N}上任意関数）

$$\exp(\theta L_f) := \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\theta^n}{n!}(L_f)^n \tag{3-10}$$

は Lie 変換と呼ばれ，M_{2N}上の正準変換である。したがって，Neri の手法は常にシンプレクティックアルゴリズムを与える。leap-frog 法は Neri の手法によると，

$$(\boldsymbol{p}_{n+1}, \boldsymbol{q}_{n+1}) = T_U^{-\Delta t}\, T_K^{-\Delta t}(\boldsymbol{p}_n, \boldsymbol{q}_n) \tag{3-11}$$

と表すことができる。$T_U^{-\Delta t}\, T_K^{-\Delta t}$は(3-9)の Δt の1次までの近似になっている：

$$T_H^{\Delta t} = T_U^{-\Delta t}\, T_K^{-\Delta t} + O(\Delta t^2). \tag{3-12}$$

さらに良い近似スキームとして

$$T_H^{\Delta t} = T_K^{-\Delta t/2}\, T_U^{-\Delta t}\, T_K^{-\Delta t/2} + O(\Delta t^3) \tag{3-13}$$

などがあり，近似の次数を系統的に上げる方法も開発されている。[5)]

さて，ハミルトンの運動方程式が保存量 $F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})$を持つとしよう。そのための条件は$H$と$F$が包合的であること；

$$\{H, F\} = 0 \tag{3-14}$$

である。実際，Fが保存するという式

$$T_H^t\, F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) \qquad (t\in\mathbf{R}) \tag{3-15}$$

は，(3-14)から得ることができ，逆に，(3-15)を t で微分したのちに $t=0$ を代入すると(3-14)を得る。さらにここで，Hが(3-4)のように分離でき，FはK，Uのいずれとも包合的であるとしよう：

$$\{K, F\} = \{U, F\} = 0. \tag{3-16}$$

これは次式と同値である。

$$T_K^{s\Delta t}\, F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = T_U^{s\Delta t}\, F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = 0. \quad (s\in\mathbf{R}) \tag{3-17}$$

(3-17)は，Neri の手法で構成したアルゴリズムは常に F を保存することを保証する。まとめると，

<u>定理２.</u>

ハミルトニアン H が $H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = K(\boldsymbol{p}) + U(\boldsymbol{q})$ と分離可能とする。このハミルトニアンによる時間発展 T のもとでの保存量 $F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})$が，Neri の手法で得られる任意のアルゴリズムの保存量であるための条件は，

$$\{K, F\} = \{U, F\} = 0$$

で与えられる。

§1で考察したハミルトニアン(1-2)とその保存量 M_z(1-4)は，定理2における要請を満たしている。したがって，M_zは leap-frog 法(3-12)だけでなく(3-13)など Neri の手法による高次シンプレクティックアルゴリズムによっても保存される。並進対称ポテンシャル中の対称軸方向の運動量(§2，例2)も定理2の要請を満たしており，Neri の手法で保存可能な保存量である。

§4．議　　論

本稿での考察は，与えられたハミルトン系と同じ保存量を持つシンプレクティックアルゴリズムの構成方法について，限られた範囲ではあるがひとつの解決策を提供する。すなわち，保存量がポテンシャルの対称性に由来する場合，定理1（§2）とそれを一般化した定理2（§3）に適合するようにアルゴリズムを考案すればよい。しかしながら，ハミルトニアンそのものという自明な保存量は，これらのアルゴリズムでは保存されない。実際，定理2の条件の下でも，一般に，

$$\{K, H\} = \sum_{k=1}^{N}\frac{\partial K}{\partial p_k}\frac{\partial U}{\partial q_k} \neq 0$$

であるために，Neri の手法はHを保存できない。Hを

保存するためには，発想の転換が必要かも知れない。この点で，Symes[6]と Moser, Veselov[7]による行列の因子分解を利用した方法は注目は値する。この方法は，完全可積分系だけでなく一般のハミルトン系に拡張できるかも知れない。

数値計算においては，有限桁数の数値のみ原理的に利用可能なため，丸め誤差の影響を避けることができない。定理 1 と 2 の結果は丸め誤差をゼロとした場合正しい。丸め誤差によりアルゴリズムのシンプレクティック不変性が破られることが知られており，シンプレクティック不変性を回復するためにアルゴリズムを格子写像化することがある。[8] 定理 1 と 2 の結果が，格子写像化などのシンプレクティック不変性回復の手法と両立可能か否かを探ることは今後の課題として残されている。

引用文献

1) Arnol'd VI (1978) Mathematical Methods of Classical Mechanics. Springer, New York.
2) Percival IC (1979) Variational principles for invariant tori and cantori. In: Month M, Herrera JC, eds. Nonlinear Dynamics and Beam-Beam Interaction. Am Inst Phys, Conf Proc **57**, pp 302-310.
   Kook H-t, Meiss JD (1989) Periodic orbits for reversible, symplectic mappings. Physica **35D**, 65-86.
3) Mackay RS, Meiss JD, eds. (1987) Hamiltonian Dynamical Systems. Hilger, Bristol.
4) Neri F (1982) Lie algebras and canonical integration. Technical Report, Department of Physics, University of Maryland.
5) Yoshida H (1990) Construction of Higher Order Symplectic Integrators. Phys Lett **A150**, 262-268.
   Suzuki M (1992) General Theory of Higher-Order Decomposition of Exponential Operators and Symplectic Integrators. preprint (Submitted to Phys Lett A).
6) Symes W (1982) The QR algorithm and scattering for the finite nonperiodic Toda lattice. Physica **4D**, 275-280.
7) Moser J, Veselov AP (1991) Discrete Version of Some Classical Integrable Systems and Factorization of Matrix Polynomials. Commun Math Phys **139**, 217-243.
8) Earn DJD, Tremaine S (1992) Exact numerical studies of Hamiltonian Maps: Integrating without roundoff error. Physica **56D**, 1-22.

Abstract

Invariants of Symplectic Integrators

Shinji AKIYAMA

We consider possibility of constructing symplectic integrators with arbitrary degree of precision which share invariants of motion with original Hamiltonian flow. It is shown that those integrators obtainable by the method due to Neri can preserve the same Noether invariant as the original Hamiltonian flow when kinetic and potential parts of the Hamiltonian possess a symmetry in common.

Department of Physics