

# 正準変換についてのメモ\*

陰山 聡

神戸大学システム情報学研究科 計算科学専攻

ver. 160122a

## 1 ラグランジュの運動方程式からハミルトンの正準方程式へ

ラグランジアンが

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) := L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N) \quad (1)$$

で与えられる  $N$  自由度系を考える。ラグランジュの運動方程式は、

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (2)$$

である。これは時間  $t$  に関する ( $N$  個の) 2 階微分方程式系なので、ルンゲ=クッタ法などの数値積分法を使ってこの微分方程式を解くためには、 $2N$  個の一階微分方程式系にする必要がある。

$q_i$  に共役な一般化運動量  $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$  を変数とすると、ラグランジュの運動方程式は

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N) \quad (3)$$

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N) \quad (4)$$

という  $2N$  個の一階微分方程式系に自然に分かれるが、式 (3) の左辺は何かの時間微分ではなく、また  $\dot{q}_i$  は式 (3) と (4) の右辺に散在しているので、この方程式系を数値積分プログラムにそのまま移すことはできない。つまり

$$\dot{q}_i = F_i(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N), \quad (5)$$

$$\dot{p}_i = G_i(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (6)$$

という形に (手で) 変形した上でようやく数値積分プログラムに渡すことが出来る。

そのような面倒な変形なしに、式 (5) と式 (6) の形の方程式系が自然に導出されるように基本方程式自体を変えてしまおう。ラグランジュ形式の解析力学では、

$$p_i = \frac{\partial L(\dots, \dot{q}_i, \dots)}{\partial \dot{q}_i}$$

という式が得られるが、これは数値計算上不便なので、最初から

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \text{何か}(\dots, p_i, \dots)}{\partial p_i}$$

という形が得られるようにしたいというわけである。こういう場合にはルジャンドル変換をすれば良い。ラグランジアン  $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$  を  $\dot{\mathbf{q}}$  に関してルジャンドル変換した

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \quad (7)$$

\*History: ver. 131220a (初版), ver. 160122a (表現の微少な改訂)

はハミルトニアンと呼ばれる。ハミルトニアンを使った運動方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (8)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (9)$$

は正準方程式と呼ばれる。

## 2 正準変換の必要性

正準方程式は（式変形なしに）このまま数値積分プログラムに渡すことができるので数値計算上大変便利である。とはいえ、正準方程式がいつでも数値積分によって計算可能とは限らない。

いま具体的な例としてハミルトニアンが

$$H(q, p) = \frac{q^4 p^2}{2} + \frac{1}{q} \quad (10)$$

で与えられる 1 自由度系を考えよう。正準方程式は次のようになる。

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = q^4 p \quad (11)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -2q^3 p^2 + \frac{1}{q^2} \quad (12)$$

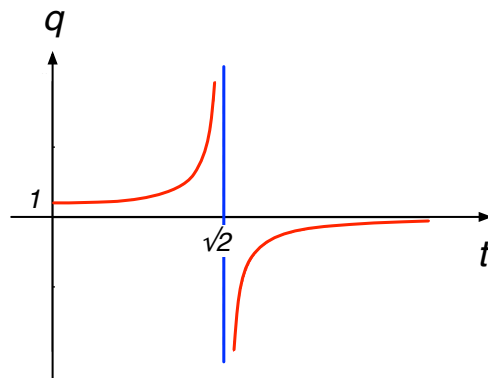
この方程式を  $q(t=0) = 1, p(t=0) = 0$  の初期条件の下で、数値積分プログラムに入れて計算すると … 計算が破綻する。（ $q$  がゼロになったせいではない。）何が起きたのであろうか？

この初期条件の下での方程式 (11) と (12) の解析解は

$$q(t) = \frac{2}{2-t^2} \quad (13)$$

$$p(t) = -t \left(1 - \frac{t^2}{2}\right)^2 \quad (14)$$

であることは代入すれば確認できる。 $q(t)$  は  $t = \sqrt{2}$  で発散する。通常の数値積分法ではこのような解を求めることはできない。



そこでこの問題が数値計算で解けるように、正準座標  $(q, p)$  を座標変換して別の座標  $(Q, P)$  にしよう。ただし、任意の座標変換ではなく、変換後も正準方程式が成り立つような変換に限定する。このような変換を正準

変換という。いま、正準変換の一例として

$$Q = q^2 p \quad (15)$$

$$P = 1/q \quad (16)$$

を考える。これが正準変換であることが後述する条件の一つを使えば確認することができる。この変換でハミルトニアンは

$$H(Q, P) = \frac{Q^2}{2} + P \quad (17)$$

となるので、正準方程式は

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= \frac{\partial H}{\partial P} = 1 \\ \dot{P} &= -\frac{\partial H}{\partial Q} = -Q \end{aligned}$$

である。この微分方程式は数値計算しても問題なく（実際には手で解いた方が早い）、 $t = \sqrt{2}$  で発散もしない。

実は式 (10) のハミルトニアンは、重力加速度 1 で自由落下する質点を、高さ  $z$  の逆数  $q = 1/z$  という一般化座標をとって作ったものである。このように単純な問題も座標の取り方がまずいと数値的に解けなくなるが、正準変換することで解決できるという一例である。

### 3 正準変換

正準座標

$$\mathbf{r} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N) \quad (18)$$

から別の座標

$$\mathbf{R} = (\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = (Q_1, Q_2, \dots, Q_N, P_1, P_2, \dots, P_N) \quad (19)$$

への変換によって方程式が

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i}(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) \quad (20)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial H}{\partial Q_i}(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) \quad (21)$$

という正準方程式の形式を保つ時、この変換を正準変換という。ある変換が正準変換であるための必要十分条件は以下のように複数ある。

#### 3.1 シンプレクティック表式による正準変換条件

行列  $J$  を

$$J = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (22)$$

と定義する。ここで  $\mathbf{0}$  と  $\mathbf{1}$  は  $N$  行  $N$  列のゼロ行列と単位行列である。行列  $J$  を使うと正準方程式は以下のように行で書ける。

$$\dot{r}_i = J_{ij} \frac{\partial H}{\partial r_j} \quad (23)$$

$r \Rightarrow R$  という正準変換を考える。座標  $R$  での正準方程式は

$$\dot{R}_i = J_{ij} \frac{\partial H}{\partial R_j} \quad (24)$$

である。この式の左辺を書き換えると

$$\dot{R}_i = \frac{\partial R_i}{\partial r_m} \dot{r}_m \quad (25)$$

$$= \frac{\partial R_i}{\partial r_m} J_{mk} \frac{\partial H}{\partial r_k} \quad [ (23) \text{ より } ] \quad (26)$$

$$= \frac{\partial R_i}{\partial r_m} J_{mk} \frac{\partial R_j}{\partial r_k} \frac{\partial H}{\partial R_j} \quad (27)$$

これと式 (24) の右辺を比較すれば

$$MJM^T = J \quad (28)$$

を得る。ここで行列  $M$  は

$$M_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial r_j} \quad (29)$$

$M$  はシンプレクティック行列と呼ばれる。式 (28) は正準変換であるための必要十分条件である。

### 3.2 直接条件

式 (26) と、式 (24) の右辺を変形した次の式

$$J_{ij} \frac{\partial H}{\partial R_j} = J_{ij} \frac{\partial r_k}{\partial R_j} \frac{\partial H}{\partial r_k} \quad (30)$$

を比較すれば以下を得る。

$$\frac{\partial R_i}{\partial r_m} J_{mk} = J_{ij} \frac{\partial r_k}{\partial R_j} \quad (31)$$

$J$  の定義から、これは以下を意味する。

$$\frac{\partial Q_i}{\partial q_j} = \frac{\partial p_j}{\partial P_i}, \quad \frac{\partial Q_i}{\partial p_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial P_i}, \quad \frac{\partial P_i}{\partial p_j} = \frac{\partial q_j}{\partial Q_i}, \quad \frac{\partial P_i}{\partial q_j} = -\frac{\partial p_j}{\partial Q_i} \quad (32)$$

これも正準変換であることの必要条件であり、直接条件と呼ばれる。

直接条件の対称性から明らかに正準変換の逆変換は正準変換である。

また、正準変換の合成変換が正準変換であることも以下のように証明できる。 $r$  が  $r'$  への変換と、 $r'$  から  $r''$  への変換の合成変換を考える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_i''}{\partial q_j} &= \frac{\partial q_i''}{\partial q_k'} \frac{\partial q_k'}{\partial q_j} + \frac{\partial q_i''}{\partial p_k'} \frac{\partial p_k'}{\partial q_j} \\ &= \left( \frac{\partial p_k'}{\partial p_i''} \right) \left( \frac{\partial p_j}{\partial p_k'} \right) + \left( -\frac{\partial q_k''}{\partial p_i'} \right) \left( -\frac{\partial p_j'}{\partial q_k} \right) \\ &= \frac{\partial p_j}{\partial p_i''} \end{aligned} \quad (33)$$

同様な計算で  $\partial q_i''/\partial q_j = \partial p_j/\partial p_i''$  等も確認できる。つまり  $r$  から  $r''$  への変換は正準変換である。

### 3.3 ポアソン括弧による正準変換条件

ポアソン括弧を

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial r_j} = \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial g}{\partial q_j} \frac{\partial f}{\partial p_j} \quad (34)$$

と定義する。ここで  $r$  と  $J$  の添字の和は  $2N$  まで、 $q$  と  $p$  の添字の和では  $N$  までとる。正準変換であることこの条件 (28) を行列の各要素に分けると、以下のようにポアソン括弧で書ける。

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \quad (35)$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \quad (36)$$

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \quad (37)$$

## 4 ポアソン括弧の正準不変性

ポアソン括弧 (34) は、正準変換後の座標を使って

$$\{f(Q, P), g(Q, P)\}_{Q, P} = \frac{\partial f}{\partial Q_j} \frac{\partial g}{\partial P_j} - \frac{\partial g}{\partial Q_j} \frac{\partial f}{\partial P_j}$$

と計算しても値は変わらない。なぜなら

$$\begin{aligned} \{f, g\}_{q, p} &= \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial r_j} \\ &= \left( \frac{\partial f}{\partial R_I} \frac{\partial R_I}{\partial r_i} \right) J_{ij} \left( \frac{\partial g}{\partial R_J} \frac{\partial R_J}{\partial r_j} \right) \\ &= \frac{\partial f}{\partial R_I} \left( \frac{\partial R_I}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial R_J}{\partial r_j} \right) \frac{\partial g}{\partial R_J} \\ &= \frac{\partial f}{\partial R_I} J_{IJ} \frac{\partial g}{\partial R_J} \quad [ \text{式 (28) より} ] \\ &= \{f, g\}_{Q, P} \end{aligned} \quad (38)$$

つまりポアソン括弧で書かれた量は正準変換に対して不変である。

## 5 正準変換としての運動

時刻  $t = 0$  における系の状態  $r = (q, p) = (q_1(0), q_2(0), \dots, p_N(0))$  と、 $t = T$  における状態  $R = (Q, P) = (q_1(T), q_2(T), \dots, p_N(T))$  との対応を座標変換と見なすと、これは正準変換である。このことは以下のようにして証明することができる。

ポアソン括弧による判定条件 (35)–(37) を使う。 $q_i(t)$  と  $p_j(t)$  のポアソン括弧  $\{q_i(t), p_j(t)\}$  は時間の関数なので、これをテーラー展開すると、

$$\{Q_i, P_j\} = \{q_i(T), p_j(T)\} = \sum_{n=0} \frac{T^n}{n!} \frac{d^n}{dt^n} \{q_i(0), p_j(0)\} \quad (39)$$

一般に、時間に陽には依存しない任意の物理量  $f$  に対して

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial f}{\partial p_j} \dot{p}_j = \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} = \{f, H\} \quad (40)$$

である。この式に  $f = \{q_i, p_j\}$  を代入すれば、式 (39) の  $n = 1$  の項に対して、

$$\frac{d}{dt} \{q_i(0), p_j(0)\} = \{ \{q_i(0), p_j(0)\}, H \} = \{ \{q_i, p_j\}, H \} = \{ \delta_{ij}, H \} = 0$$

同様にして

$$\frac{d^2}{dt^2} \{q_i, p_j\} = \{ \{ \{q_i, p_j\}, H \}, H \} = \{0, H\} = 0$$

$$\frac{d^3}{dt^3} \{q_i, p_j\} = \{\{\{\{q_i, p_j\}, H\}, H\}, H\} = 0$$

等が成り立つので、結局

$$\{Q_i, P_j\} = \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$$

である。同様に

$$\{Q_i, Q_j\} = 0$$

$$\{P_i, P_j\} = 0$$

が確認できる。従って  $r \Rightarrow R$  の変換は正準変換であることが示された。つまり運動は正準変換である。