Chapter 11

正準変換

今回の内容

/// 前回までの復習

§11 正準変換

/// レポート課題

§12 シンプレクティック形式とポアッソン括弧

前回までの復習

- 一般化座標
- ラグランジュ形式の力学
- 相空間
- ハミルトン形式の力学

11.1 座標変換の必要性

ハミルトン形式の力学では、基本方程式である正準方程式が

$$
\begin{aligned}
\dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}(q_1,\ldots,q_N,p_1,\ldots,p_N)\\
\dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}(q_1,\ldots,q_N,p_1,\ldots,p_N)
\end{aligned}
$$

という形をしているので数値計算と相性が良く、この方程式をそのまま数値積分プログラムに移すことができて便利であるということを前回まで紹介した。これはラグランジュの運動方程式にはない利点である。

とはいえ、方程式が上の形をしていれば常に数値積分プログラムに渡せるとは限らない。たとえば、ハミルトニアンが以下で与えられる系を考える。

$$H(q,p) = \frac{q^4p^2}{2m} + \frac{mg}{q} \tag{11.1}$$

このハミルトニアンから正準方程式を作ると次のようになる。

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{q^4 p}{m} \tag{11.2}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{2q^3p^2}{m} + \frac{mg}{q^2} \tag{11.3}$$

この方程式を、これまでの例題で何度か使ってきた 4 次ルンゲ=クッタ法を使った数値積分プログラムに入れてみよう。

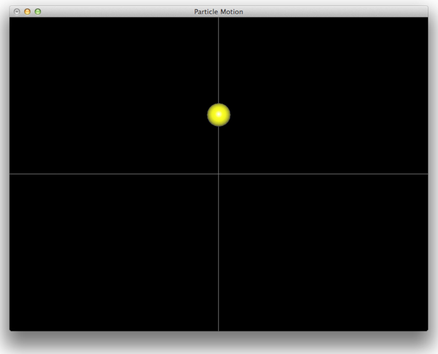
Listing 11.1: free_fall_ball_q

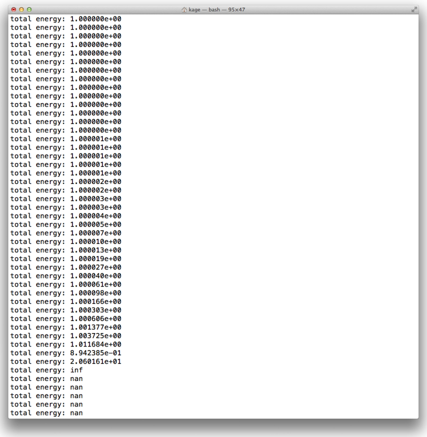
```
void equation_of_motion(double *pos, double *dpos, double dt)
{
  //      Hamiltonian
  //         H(q,p) = q^4*p^2/2 + 1/q
  //            dq/dt =  q^4*p
  //            dp/dt = -2q^3*p^2 + 1/q^2
  //
    double q = pos[0];
    double p = pos[1];

    double q02 = q*q;
    double q03 = q02*q;
    double q04 = q03*q;
    double p02 = p*p;

    dpos[0] = ( q04*p ) * dt;
    dpos[1] = ( -2*q03*p02 + 1/q02 ) * dt;
}
```

これを実行すると ⋯ 計算が破綻する！式 (11.3) の右辺第 2 項の分母の q がゼロになったせいかではないかと思うかもしれないが、そうではない。調べてみると q や p の値が途中で値が急に大きくなり始めて、最終的には数値的に発散してしまっている。なぜだろうか？

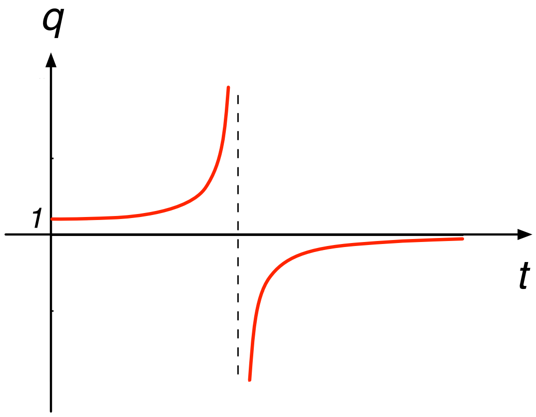




解がこのように発散するのは数値計算手法に問題があるためはなく、実は方程式を正しく解けているためである。上の正準方程式は正確に解くことができて、その解は

$$q(t) = \frac{1}{1 - \frac{gt^2}{2}}$$

なのである。この $q(t)$ は $t = \sqrt{2/g}$ で発散する。ルンゲ=クッタ法のような数値積分ルーチンがいくら汎用性が高いといっても、途中で発散するこのような解を求めることはさすがにできない。



この問題の場合、解こうとしている系に設定した正準座標 (q, p) の取り方がまずかったのである。 別の正準座標 (Q, P) で解いていれば問題は生じなかった。こ

の場合の適切な（数値的にもきちんと解ける）正準座標 (Q, P) の取り方の例は後で見ることにして、まずは正準座標の座標変換を一般的に考えてみよう。

一般に、N 自由度系のハミルトニアン

$$H(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N)$$

が与えられたとき、正準変数

$$(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N)$$

を座標変換

$$(Q_1, \ldots, Q_N, P_1, \ldots, P_N)$$

に変換することで、正準方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N) \tag{11.4}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N) \tag{11.5}$$

は、別の形に変換される。

ラグランジュ形式の力学では、一般化座標

$$(q_1, \ldots, q_N)$$

から別の一般化座標

$$(Q_1, \ldots, Q_N)$$

への点変換

$$Q_i = Q_i(q_1, \ldots, q_N)$$

を施してもラグランジュの運動方程式は変換前

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

と変換後

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial Q_i} = 0$$

で同じ形になることを前の章で確認した。

いま考えているのは、相空間全体での座標変換

$$Q_i = Q_i(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N) \tag{11.6}$$

$$P_i = P_i(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N) \tag{11.7}$$

である。一般化座標と一般化運動量を自由に混ぜてしまうわけであるから、ある特定の k に対する Q_k と P_k は、互いに共役な 2 つの座標の対としての意味はあるにせよ、どちらが座標で、どちらが運動量か、という区別は意味がなくなる。

この座標変換で方程式が正準方程式でなくなってしまっては不便である。つまり上の座標変換 (11.6) と (11.7) を施しても、変換前の正準方程式 (11.4) と (11.5) と同じ

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= \frac{\partial H}{\partial P_i}(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N)\\ \dot{P}_i &= -\frac{\partial H}{\partial Q_i}(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N)\end{aligned}$$

という正準方程式が成り立って欲しい。このように正準方程式を変えないような正準変数の座標変換を、正準変換という。

11.2 正準変換の直接条件

変換 (11.6) と (11.7) が正準変換であるための条件を求めよう。ハミルトニアン

$$H(q_1,\dots,q_N,p_1,\dots,p_N)$$

から構成した正準方程式 (11.4) と (11.5) が変換 (11.6) と (11.7) によって形を変えないようにしたい。この変換の逆

$$q_i = q_i(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N) \tag{11.8}$$

$$p_i = p_i(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N) \tag{11.9}$$

の表式も具体的に得られているものとする。いま変換後の正準変数 $(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N)$ に対して正準方程式

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i}(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N) \tag{11.10}$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial H}{\partial Q_i}(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N) \tag{11.11}$$

が成り立っているようにしたいわけである。

式 (11.10) の右辺を計算すると

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial P_i} &= \frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial q_j}{\partial P_i} + \frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial p_j}{\partial P_i}\\ &= -\dot{p}_j\frac{\partial q_j}{\partial P_i} + \dot{q}_j\frac{\partial p_j}{\partial P_i} \qquad \text{［式 (11.4) と (11.5) より］}\end{aligned}$$

一方、式 (11.10) の左辺は

$$\dot{Q}_i = \dot{p}_j\frac{\partial Q_i}{\partial p_j} + \dot{q}_j\frac{\partial Q_i}{\partial q_j}$$

であるから、この 2 つの式の比較から

$$\frac{\partial Q_i}{\partial q_j} = \frac{\partial p_j}{\partial P_i} \tag{11.12}$$

$$\frac{\partial Q_i}{\partial p_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial P_i} \tag{11.13}$$

を得る。同様に式 (11.11) から

$$\frac{\partial P_i}{\partial p_j} = \frac{\partial q_j}{\partial Q_i} \tag{11.14}$$

$$\frac{\partial P_i}{\partial q_j} = -\frac{\partial p_j}{\partial Q_i} \tag{11.15}$$

を得る。

変換 (11.6) と (11.7) が正準変換であるための必要十分条件は、上の条件 (11.12) から (11.15) が成り立っていることである。この条件は正準変換の直接条件と呼ばれる。

自由度が 1 の場合の直接条件は

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \frac{\partial p}{\partial P}, \tag{11.16}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial p} = -\frac{\partial q}{\partial P}, \tag{11.17}$$

$$\frac{\partial P}{\partial p} = \frac{\partial q}{\partial Q}, \tag{11.18}$$

$$\frac{\partial P}{\partial q} = -\frac{\partial p}{\partial Q} \tag{11.19}$$

である。

11.3 正準変換の合成

直接条件 (11.12)–(11.15) 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」ことがわかる。

また、これらの条件式から「正準変換の合成変換は正準変換である」ということも以下のように証明できる。q-p の座標から q'-p' への変換

$$(q_1, q_2, \ldots, p_N) \Rightarrow (q'_1, q'_2, \ldots, p'_N)$$

と、q'-p' 座標から q''-p'' 座標への変換

$$(q'_1, q'_2, \ldots, p'_N) \Rightarrow (q''_1, q''_2, \ldots, p''_N)$$

を合成した変換、即ち q-p の座標から q''-p'' への変換

$$(q_1, q_2, \ldots, p_N) \Rightarrow (q''_1, q''_2, \ldots, p''_N)$$

を考える。式 (11.12) に相当する偏微分を計算すると、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial q_i''}{\partial q_j} &= \frac{\partial q_i''}{\partial q_k'}\frac{\partial q_k'}{\partial q_j} + \frac{\partial q_i''}{\partial p_k'}\frac{\partial p_k'}{\partial q_j} \\
&= \left(\frac{\partial p_k'}{\partial p_i''}\right)\left(\frac{\partial p_j}{\partial p_k'}\right) + \left(-\frac{\partial q_k''}{\partial p_i'}\right)\left(-\frac{\partial p_j'}{\partial q_k}\right) \\
&= \frac{\partial p_j}{\partial p_i''}
\end{aligned}
\tag{11.20}
$$

である。同様な計算を行いまとめると、結局

$$
\frac{\partial q_i''}{\partial q_j} = \frac{\partial p_j}{\partial p_i''}, \quad \frac{\partial q_i''}{\partial p_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial p_i''}, \quad \frac{\partial p_i''}{\partial p_j} = \frac{\partial q_j}{\partial q_i''}, \quad \frac{\partial p_i''}{\partial q_j} = -\frac{\partial p_j}{\partial q_i''} \tag{11.21}
$$

が得られる。これは、q-p の座標から q''-p'' への変換が正準変換であることの直接条件である。

11.4　正準変換の例

自由落下問題の例に戻ろう。ハミルトニアン (11.1) をここに再掲する。

$$
H(q,p) = \frac{q^4 p^2}{2m} + \frac{mg}{q} \tag{11.22}
$$

このハミルトニアンの正準変数 (q,p) を別の座標に

$$
(q,p) \quad \Rightarrow \quad (Q,P)
$$

と変換しよう。ここでは具体的に

$$
Q = Q(q,p) = q^2\,p \tag{11.23}
$$

$$
P = P(q,p) = 1/q \tag{11.24}
$$

という変換を考える。まずはこの変換が正準変換かどうか、確認してみよう。

この変換の逆は

$$
q = q(Q,P) = 1/P \tag{11.25}
$$

$$
p = p(Q,P) = QP^2 \tag{11.26}
$$

であることはすぐにわかる。式 (11.23) から

$$
\frac{\partial Q}{\partial p} = q^2
$$

一方、式 (11.23) より

$$
\frac{\partial q}{\partial P} = -1/P^2 = -q^2
$$

つまり
$$\frac{\partial Q}{\partial p} = -\frac{\partial q}{\partial P}$$
である。同様な計算によって正準変換の直接条件 (11.16)–(11.17) が成り立っていることが確認できる。つまりこの変換 (11.23) と (11.24) は正準変換である。

(Q, P) への変換は正準変換なので、正準方程式が成り立つ。ハミルトニアンはこの新しい正準変数の下、
$$\begin{aligned} H(Q,P) &= \frac{q^4(Q,P)p^2(Q,P)}{2m} + \frac{mg}{q(Q,P)} \\ &= \frac{Q^2}{2m} + mgP \end{aligned} \tag{11.27}$$
なので、正準方程式は
$$\begin{aligned} \dot{Q} &= \frac{\partial H}{\partial P} = mg \\ \dot{P} &= -\frac{\partial H}{\partial Q} = -\frac{Q}{m} \end{aligned}$$
である。この微分方程式は数値計算しても全く問題ない。(実際には手で解けるが。)

11.5 母関数

11.5.1 $W(q, Q)$ 型の母関数

直接条件 (11.12) から (11.15) を満足するような変換を作るのは結構大変である。式 (11.23) と (11.24) のような変換をどうやって思いついたであろうか。実は直接条件を自動的に満足するような（つまり正準変換になるような）変換を系統的に構成する方法が開発されている。それは母関数を使う方法である。

q と Q の関数
$$W(q, Q) \tag{11.28}$$
を母関数として
$$P = -\frac{\partial W}{\partial Q}(q, Q) \tag{11.29}$$
$$p = \frac{\partial W}{\partial q} \tag{11.30}$$
という 2 つの式から
$$(q, p) \quad \Rightarrow \quad (Q, P)$$
という座標変換が定義できる。この変換は正準変換になっている。

母関数には式 (11.28) 以外にも
$$W(q, P)$$
$$W(p, Q)$$

$$W(p,P)$$

という型があり、それぞれ正準変換を定義する母関数の微分の仕方が異なるが、ここでは深入りしない。

式 (11.29) と (11.30) で定義される変換が正準変換であることは以下のようにして確認できる。

まず、独立変数を q と p としてこの 2 つの式を見ると、

$$\begin{aligned} P(q,p) &= -\frac{\partial W}{\partial Q}(q, Q(q,p)) \\ p &= \frac{\partial W}{\partial q}(q, Q(q,p)) \end{aligned}$$

となる。この 2 つの式を q と p で偏微分すると以下の 4 つの式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial q} &= -\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q} - \frac{\partial^2 W}{\partial \partial Q^2}\frac{\partial Q}{\partial q} \\ \frac{\partial P}{\partial p} &= -\frac{\partial^2 W}{\partial \partial Q^2}\frac{\partial Q}{\partial p} \\ 0 &= \frac{\partial^2 W}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} \\ 1 &= \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} \end{aligned}$$

この連立方程式を解くと、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial Q}{\partial q} & \frac{\partial Q}{\partial p} \\ \frac{\partial P}{\partial q} & \frac{\partial P}{\partial p} \end{pmatrix} = \frac{1}{\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}} \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 W}{\partial q^2} & 1 \\ \left(\frac{\partial^2 W}{\partial Q^2}\right)\left(\frac{\partial^2 W}{\partial q^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}\right)^2 & -\frac{\partial^2 W}{\partial Q^2} \end{pmatrix} \tag{11.31}$$

を得る。

次に独立変数を Q と P にとって式 (11.29) と (11.30) を見ると、

$$\begin{aligned} P &= -\frac{\partial W}{\partial Q}(q(Q,P), Q) \\ p(Q,P) &= \frac{\partial W}{\partial q}(q(Q,P), Q) \end{aligned}$$

である。この式を今度は Q と P で偏微分すれば同様に連立方程式が得られる。その解は

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial q}{\partial Q} & \frac{\partial q}{\partial P} \\ \frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial p}{\partial P} \end{pmatrix} = \frac{1}{\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}} \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 W}{\partial Q^2} & -1 \\ \left(\frac{\partial^2 W}{\partial Q^2}\right)\left(\frac{\partial^2 W}{\partial q^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}\right)^2 & -\frac{\partial^2 W}{\partial q^2} \end{pmatrix} \tag{11.32}$$

である。

式 (11.31) と (11.32) を比較すると、正準変換であるための直接条件 (11.16)–(11.19) が成り立っていることがわかる。

N 自由度の系に対しては母関数

$$W(q_1,\ldots,q_N,Q_1,\ldots,Q_N) \tag{11.33}$$

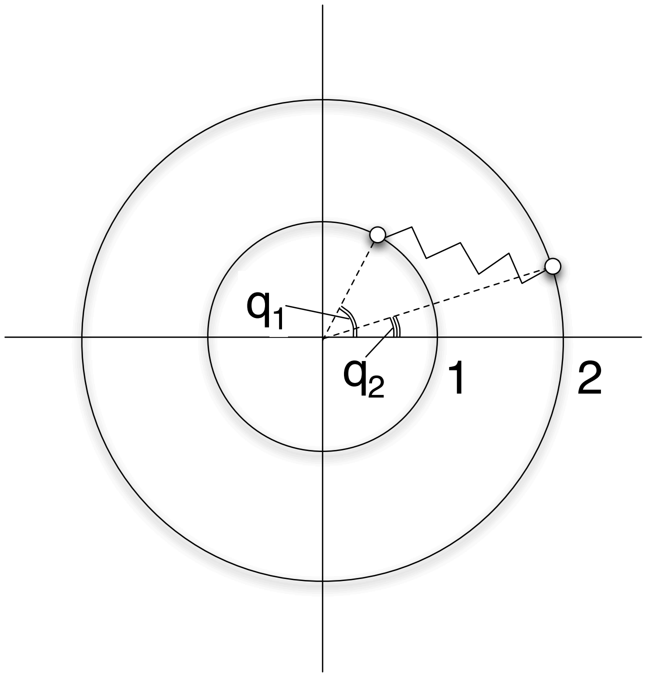
から

$$P_i = -\frac{\partial W}{\partial Q} \tag{11.34}$$

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q} \tag{11.35}$$

によって生成される変換は正準変換となる。

11.5.2 例題：同心円のバネ=質点系



第??章で考えた問題をもう一度取り上げよう。質量 m の質点が二つの同心円（半径 1 と半径 2）の上を滑らかに滑る。二つの質点の間がバネ（バネ定数は k、自然長は 0）でつながれているものとする。二つの円の中心を原点にとり、x 軸からの角度 q_1 と q_2 を正準座標、$p_1 = m\dot{q}_1$ と $p_2 = 4m\dot{q}_2$ を正準運動量とすると、この系のハミルトニアンは以前も書いたが再掲すると、

$$H(q_1,q_2,p_1,p_2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{8m} - 2k\cos{(q_1-q_2)} \tag{11.36}$$

である。この正準座標 (q_1, q_2, p_1, p_2) を、母関数

$$W(q_1, q_2, Q_1, Q_2) = (q_2 - q_1)Q_1 - (q_1 + q_2)Q_2$$

を使って正準変換してみよう。

$$\begin{aligned}
P_1 &= -\frac{\partial W}{\partial Q_1} = q_1 - q_2 \\
P_2 &= -\frac{\partial W}{\partial Q_2} = q_1 + q_2 \\
p_1 &= \frac{\partial W}{\partial p_1} = -(Q_1 + Q_2) \\
p_2 &= \frac{\partial W}{\partial p_2} = Q_1 - Q_2
\end{aligned}$$

から、これを整理すると

$$Q_1 = Q_1(q,p) = -\frac{1}{2}(p_1 - p_2) \tag{11.37}$$

$$Q_2 = Q_2(q,p) = -\frac{1}{2}(p_1 + p_2) \tag{11.38}$$

$$P_1 = P_1(q,p) = q_1 - q_2 \tag{11.39}$$

$$P_2 = P_2(q,p) = q_1 + q_2 \tag{11.40}$$

あるいは

$$q_1 = q_1(Q,P) = \frac{1}{2}(P_1 + P_2) \tag{11.41}$$

$$q_2 = q_2(Q,P) = -\frac{1}{2}(P_1 - P_2) \tag{11.42}$$

$$p_1 = p_1(Q,P) = -(Q_1 + Q_2) \tag{11.43}$$

$$p_2 = p_2(Q,P) = Q_1 - Q_2 \tag{11.44}$$

である。新しい正準座標 (Q_1, Q_2, P_1, P_2) で書いたハミルトニアンは式 (11.36) より

$$H(q(Q,P), p(Q,P)) = \cdots = \frac{5}{8m}(Q_1^2 + Q_2^2) + \frac{1}{2m}Q_1Q_2 - 2k\cos P_1$$

つまり

$$H(Q,P) = \frac{5}{8m}(Q_1^2 + Q_2^2) + \frac{1}{2m}Q_1Q_2 - 2k\cos P_1 \tag{11.45}$$

である。このハミルトニアンから正準方程式を作ると、

$$\dot{Q}_1 = 2k\sin P_1 \tag{11.46}$$

$$\dot{Q}_2 = 0 \tag{11.47}$$

$$\dot{P}_1 = -\frac{5}{4m}Q_1 - \frac{1}{2m}Q_2 \tag{11.48}$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{5}{4m}Q_2 - \frac{1}{2m}Q_1 \tag{11.49}$$

式 (11.47) から

$$Q_2 = c \quad (\text{定数}) \tag{11.50}$$

であることがわかるので、これを使えば解くべき正準方程式は、

$$\dot{Q}_1 = 2k \sin P_1 \tag{11.51}$$

$$\dot{P}_1 = -\frac{5}{4m} Q_1 - \frac{c}{2m} \tag{11.52}$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{5c}{4m} - \frac{1}{2m} Q_1 \tag{11.53}$$

と 1 つ減る。特に $c = 0$ という特別な場合には

$$\dot{Q}_1 = 2k \sin P_1 \tag{11.54}$$

$$\dot{P}_1 = -\frac{5}{4m} Q_1 \tag{11.55}$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{1}{2m} Q_1 \tag{11.56}$$

と簡単になる。

例によってこの常微分方程式系を数値積分プログラムに渡すことは簡単だが、数値的に解かなくてもわかること、あるいは数値的に解くだけでは分からないことがある。

11.6 数値計算の限界

上の式 (11.54) と (11.55) は、以前みた振り子（長さ ℓ、質点の質量 m、重力加速度 g）の運動を記述する方程式と似ている。

$$q \leftrightarrow P_1, \quad p \leftrightarrow -Q_1, \quad m\ell^2 \leftrightarrow 4m/5, \quad mg \leftrightarrow 2k$$

と置き換えれば全く同じ式になる。P_1（$= q_1 - q_2$）は同心円を滑る 2 つの質点の角度の差である。つまりばね定数 k でつながれた 2 つの質点角度の差 P_1 は、重力加速度 g が $\sqrt{2k}$ の時の長さ $\ell = 2/\sqrt{5}$ の振り子の角度 q と同じ運動をする。

我々は振り子の運動方程式の解は簡単な関数で書けないことは分かっているが、同時に我々は振り子のふれ角 $q(t)$ がどのような解をもつかは定性的にはかなりよく知っている。$q = 0$ が安定な平衡点であり、初期速度が小さければそこで微小振動（調和振動）をする。初期速度が大きければ振幅が大きな振動となり、ある値よりも大きな初期速度を与えると、同じ方向に回る回転運動が周期的に続く。

上の対応関係を考えれば、式 (11.54), (11.55) の解 $P_1(t)$ は、振り子の振れ角 $q(t)$ と同じように振る舞うはずである。$c = Q_2 = 0$ は、(11.38) より $p_1 + p_2 = 0$ を意味する。初期条件でこの和がちょうどゼロになるような初期速度 $\dot{q}_1$ と $\dot{q}_2$ を与えると、この $p_1 + p_2$ はゼロの値を保ち続ける。つまり保存する。（$p_1 + p_2$ は実は 2 つの質点の角運動量の和である。）そしてこのような場合、2 つの質点の角度の差 $P_1 = q_1 - q_2$ は振り子のように振動するということがわかった。つまり P_1 の振幅が小さい時は調和振動し、振幅が大きい場合は周期的振動または周回運動

をする。(それぞれの場合が、2 つの質点のどういう運動に対応するか容易に想像できるであろう。)

$Q_2 = 0$ という特殊な初期条件でなくても、この系では $Q_2 \propto p_1 + p_2$ は常に一定である［式 (11.50)］。ハミルトニアンが (11.36) として与えられたこの系に対して、我々は前の章で既にこの問題を数値的に解いていた。その解を可視化した映像をみても、$p_1 + p_2$ が厳密に保存することを見抜くのは難しかったであろう。一方、正準変換したハミルトニアン (11.45) には P_2 が含まれないことから、Q_2 が保存量であること（つまり $\dot{Q}_2 = 0$）が一目でわかる。その系に内在する力学的な構造が正準変換によって明らかになったのである。これが正準変換の威力である。数値積分は決して万能ではない。解析力学に限らず、理論と数値計算を巧く、相補的に組み合わせることが大事である。

Chapter 12

シンプレクティック形式とポアッソン括弧

12.1　シンプレクティック条件

N 自由度の力学の系のある時刻の状態を $2N$ 次元の相空間中の点 $\boldsymbol{r}$ で表す。

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_N \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_N \end{pmatrix}, \qquad \text{つまり} \qquad r_i = \begin{cases} q_i & (1 \le i \le N) \\ p_{i-N} & (N < i \le 2N) \end{cases}$$

すると正準方程式は以下のように一行で書ける。

シンプレクティック記法による正準方程式

$$\dot{r}_i = \sum_{j=1}^{2N} J_{ij} \frac{\partial H}{\partial r_j} \tag{12.1}$$

ここで行列 $\boldsymbol{J}$ は

$$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{0} & \boldsymbol{1} \\ -\boldsymbol{1} & \boldsymbol{0} \end{pmatrix} \tag{12.2}$$

と定義される。$\boldsymbol{0}$ と $\boldsymbol{1}$ は N 行 N 列のゼロ行列と単位行列である。方程式 (12.1) を正準方程式の シンプレクティック記法 と言う。

$\boldsymbol{J}$ が満たす基本的な関係をまとめておこう。以下 $\boldsymbol{J}^T$ は $\boldsymbol{J}$ の転置行列、$\boldsymbol{J}^{-1}$ は $\boldsymbol{J}$ の逆行列である。

$$\boldsymbol{J}^T = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \tag{12.3}$$

$$\boldsymbol{J}\boldsymbol{J}^T = \boldsymbol{J}^T\boldsymbol{J} = \mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \tag{12.4}$$

$$\boldsymbol{J}^T = -\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}^{-1} \tag{12.5}$$

$$\boldsymbol{J}^2 = -\mathbf{1} \tag{12.6}$$

$$|\boldsymbol{J}| = 1 \tag{12.7}$$

さて、$\boldsymbol{r}$ があらわす力学状態を正準変換した別の座標を使って $\boldsymbol{R}$ と書こう。もちろん

$$R_i = \begin{cases} Q_i & (1 \le i \le N) \\ P_{i-N} & (N < i \le 2N) \end{cases}$$

である。この座標系での正準方程式は

$$\dot{R}_i = \sum_{j=1}^{2N} J_{ij} \frac{\partial H}{\partial R_j} \tag{12.8}$$

と書ける。

式 (12.8) の左辺を書き換えると

$$\begin{aligned} \dot{R}_i &= \sum_{m=1}^{2N} \frac{\partial R_i}{\partial r_m} \dot{r}_m \\ &= \sum_{m=1}^{2N} \sum_{k=1}^{2N} \frac{\partial R_i}{\partial r_m} J_{mk} \frac{\partial H}{\partial r_k} \qquad [(12.1) \text{ より}] \\ &= \sum_{m=1}^{2N} \sum_{k=1}^{2N} \frac{\partial R_i}{\partial r_m} J_{mk} \frac{\partial R_j}{\partial r_k} \frac{\partial H}{\partial R_j} \end{aligned}$$

これと式 (12.8) の右辺を比較すれば

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{J}\boldsymbol{M}^T = \boldsymbol{J} \tag{12.9}$$

を得る。ここで行列 $\boldsymbol{M}$ は

$$M_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial r_j} \tag{12.10}$$

$\boldsymbol{M}^T$ はその転置行列

$$M^T_{ij} = \frac{\partial R_j}{\partial r_i} \tag{12.11}$$

である。$\boldsymbol{M}$ は シンプレクティック行列 と呼ばれる。

式 (12.6) を使うと式 (12.9) から

$$\boldsymbol{M}^T \boldsymbol{J} \boldsymbol{M} = \boldsymbol{J} \tag{12.12}$$

が証明できる。

式 (12.9) またはそれと同等な (12.12) は正準変換に対する必要十分条件であり、シンプレクティック条件 と呼ばれる。

12.2 ポアッソン括弧

式 (12.9) は $2N \times 2N$ 個の方程式を表し、その式の右辺は 0 または 1 または -1 の値を持つ。$\boldsymbol{M}$ と $\boldsymbol{J}$ の定義に従ってこの $4N^2$ 個の式を具体的に書くと、次のような 4 つのタイプに分けることが出来る。

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \tag{12.13}$$
$$\{P_i, P_j\} = 0 \tag{12.14}$$
$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \tag{12.15}$$
$$\{P_i, Q_j\} = -\delta_{ij} \tag{12.16}$$

ここで $\{f, g\}$ は ポアッソン括弧 と呼ばれ

$$\{f, g\} = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial g}{\partial q_j} \frac{\partial f}{\partial p_j} \right) \tag{12.17}$$

と定義される。

ポアッソン括弧を行列 $\boldsymbol{J}$ を使って表現すると

$$\{f, g\}_{q,p} = \sum_{i=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial r_j} \tag{12.18}$$

である。

定義 (12.17) から

$$\{g, f\} = -\{f, g\} \tag{12.19}$$

$$\{f, f\} = 0 \tag{12.20}$$

は自明である。

c_1 と c_2 を定数として

$$\{c_1 f_1 + c_2 f_2, g\} = c_1 \{f_1, g\} + c_2 \{f_2, g\} \tag{12.21}$$

$$\{f, c_1 g_1 + c_2 g_2\} = c_1 \{f, g_1\} + c_2 \{f, g_2\} \tag{12.22}$$

$$\{c_1, g\} = \{f, c_2\} = 0 \tag{12.23}$$

が成り立つ。

次の式は $\partial q_i/\partial q_j = \delta_{ij}$ 等の関係を使えば確認できる。

$$\{q_i, f\} = \frac{\partial f}{\partial p_i} \tag{12.24}$$

$$\{p_i, f\} = -\frac{\partial f}{\partial q_i} \tag{12.25}$$

上の二つの式から以下の式が成り立つ。

$$\left\{q_i, \frac{\partial f}{\partial q_j}\right\} + \left\{p_j, \frac{\partial f}{\partial p_i}\right\} = 0 \tag{12.26}$$

また、式 (12.24) と (12.25) の特別な場合として、

$$\{q_i, q_j\} = 0 \tag{12.27}$$

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \tag{12.28}$$

$$\{p_i, p_j\} = 0 \tag{12.29}$$

という関係が得られる。

相空間の 3 つの関数 f, g, h に対するポアッソン括弧にはヤコビ恒等式と呼ばれる以下の式が成り立つ。

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \tag{12.30}$$

この証明には以下のようにするのが最も簡潔であろう。

【以下ではアインシュタインの規約（繰り返された添え字は和をとる）を使う。】

式 (12.18) より

$$\begin{aligned}
\text{式 (12.30) の左辺} =& \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial g}{\partial r_\ell} J_{\ell m} \frac{\partial h}{\partial r_m} \right) \\
&+ \frac{\partial g}{\partial r_\ell} J_{\ell j} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial h}{\partial r_m} J_{mi} \frac{\partial f}{\partial r_i} \right) \\
&+ \frac{\partial h}{\partial r_m} J_{mj} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial f}{\partial r_i} J_{i\ell} \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \right) \\
=& \frac{\partial f}{\partial r_i} \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \underbrace{\frac{\partial^2 h}{\partial r_j \partial r_m} \left(J_{ij} J_{\ell m} + J_{\ell j} J_{mi} \right)}_{(a)} \\
&+ \frac{\partial f}{\partial r_i} \frac{\partial h}{\partial r_m} \frac{\partial^2 g}{\partial r_j \partial r_\ell} \left(J_{ij} J_{\ell m} + J_{mj} J_{i\ell} \right) \\
&+ \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \frac{\partial h}{\partial r_m} \frac{\partial^2 f}{\partial r_j \partial r_i} \left(J_{\ell j} J_{mi} + J_{mj} J_{i\ell} \right)
\end{aligned} \tag{12.31}$$

ここで

$$\begin{aligned}(a) &= \frac{\partial^2 h}{\partial r_j \partial r_m} J_{ij} J_{\ell m} + \frac{\partial^2 h}{\partial r_m \partial r_j} J_{\ell m} J_{ji} \quad \text{［第 2 項の } j \text{ と } m \text{ を交換］} \\ &= \frac{\partial^2 h}{\partial r_j \partial r_m} J_{ij} J_{\ell m} - \frac{\partial^2 h}{\partial r_m \partial r_j} J_{\ell m} J_{ij} \quad \text{［式 (12.5) より］} \\ &= 0\end{aligned}$$

式 (12.31) の他の 2 項も同様である。従って (12.30) が成り立つ。

式 (12.16) は (12.19) を考えると冗長なので、結局、座標変換 $(q_1,\dots,q_N,p_1,\dots,P_N)$ から $(Q_1,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N)$ への座標変換が正準変換かどうかは、

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \tag{12.32}$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \tag{12.33}$$

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \tag{12.34}$$

の 3 つが成り立っているかどうかを確認すれば良いことがわかる。

ポアッソン括弧を使って正準変換かどうかを判定をする際には

$$\begin{aligned}Q_i =& Q_i(q_1,q_2,\dots,q_N,p_1,\dots,p_N), \\ P_i =& P_i(q_1,q_2,\dots,q_N,p_1,\dots,p_N)\end{aligned}$$

という変換の関数形が分かっていれば、その逆

$$\begin{aligned}q_i =& q_i(Q_1,Q_2,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N), \\ p_i =& p_i(Q_1,Q_2,\dots,Q_N,P_1,\dots,P_N)\end{aligned}$$

がわかっていなくても判定できることに注意しよう。この点で正準変換の直接条件［(11.12) から (11.15)］よりも便利と言える。とはいえ、ハミルトニアンを変換する際にはいずれにせよ逆変換の表式が必要となる。

12.3 ポアッソン括弧を使った運動方程式

ポアッソン括弧を使うと様々な量が簡潔に表現される。たとえばある物理量 f が位相空間の関数として書かれていて、時間に陽には依存しないとき、

$$\begin{aligned}\frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial f}{\partial p_j}\dot{p}_j \\ &= \frac{\partial f}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j} \\ &= \{f, H\}\end{aligned} \tag{12.35}$$

である。f が時間に陽に依存する場合は

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} \tag{12.36}$$

となる。

式 (12.35) の f に（時間に陽に依存しない）ハミルトニアン H を代入すると、

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} = 0 \quad \text{［式 (12.20) より］} \tag{12.37}$$

これはエネルギー保存を意味する。

f と g がどちらも保存量であれば、ポアッソン括弧 $\{f, g\}$ も保存量である。なぜなら定義式 (12.17) より

$$\frac{d}{dt}\{f, g\} = \left\{\dot{f}, g\right\} + \{f, \dot{g}\} \tag{12.38}$$

なので、$\dot{f} = \dot{g} = 0$ の時

$$\frac{d}{dt}\{f, g\} = \{0, g\} + \{f, 0\} = 0 \tag{12.39}$$

だからである。この式はヤコビ恒等式 (12.30) を使っても証明できる。

式 (12.35) において $f = q_i$ と $f = p_i$ の場合には

ポアッソン括弧よる正準方程式

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} \tag{12.40}$$

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} \tag{12.41}$$

を得る。これはもとの正準方程式をわざわざポアッソン括弧で書き直したにすぎないが、こう書くと 2 つの式がどちらも同じ形式になる。このことが次回紹介するシンプレクティック積分法において重要になる。

12.4 ポアッソン括弧の正準不変性

式 (12.35) は f が $(q_1, \ldots p_N)$ の関数の場合である。この df/dt は、正準変換した別の座標 $(Q_1, \ldots P_N)$ でも同じはずである。つまり、

$$\{f(q,p), H(q,p)\}_{q,p} = \frac{\partial f}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial g}{\partial p_j}$$

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

は同じ値

$$\{f, H\}_{q,p} = \{f, H\}_{Q,P}$$

である。

上の関係は一方が H であるときに限らず、もっと一般に任意の関数 f と g に対して

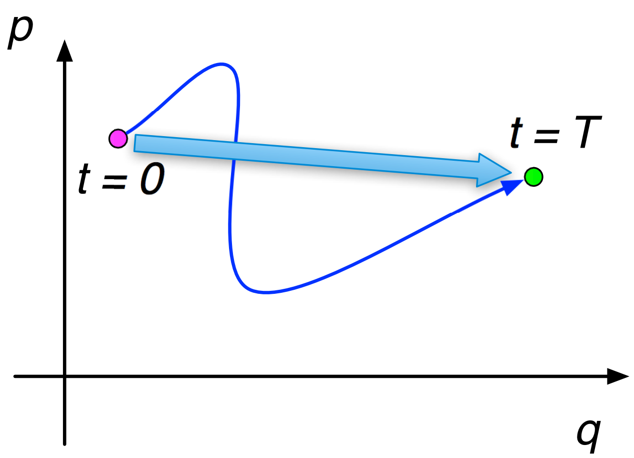
$$\{f,g\}_{q,p} = \{f,g\}_{Q,P} \tag{12.42}$$

であることが以下のようにして証明できる。式 (12.18) より

$$\begin{aligned}
\{f,g\}_{q,p} &= \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial r_j} \\
&= \left(\frac{\partial f}{\partial R_I}\frac{\partial R_I}{\partial r_i}\right) J_{ij} \left(\frac{\partial g}{\partial R_J}\frac{\partial R_J}{\partial r_j}\right) \\
&= \frac{\partial f}{\partial R_I}\left(\frac{\partial R_I}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial R_J}{\partial r_j}\right)\frac{\partial g}{\partial R_J} \\
&= \frac{\partial f}{\partial R_I} J_{IJ} \frac{\partial g}{\partial J} \quad \text{［式 (12.9) より］} \\
&= \{f,g\}_{Q,P}
\end{aligned} \tag{12.43}$$

つまりポアッソン括弧で書かれた全ての量は正準変換に対して不変である。だからポアッソン括弧に微分をとる座標を示す添字をいちいちつける必要はない。

12.5 正準変換としての運動



ある時刻 $t=0$ で系の状態が $\boldsymbol{r} = (q_1(0), q_2(0), \ldots, p_N(0))$ にあるとする。時間が経過して $t=T$ になったときの状態は相空間中の別の点 $\boldsymbol{R} = (q_1(T), q_2(T), \ldots, p_N(T))$ に移る。これを座標

$$\boldsymbol{r} = (q_1, q_2, \ldots, p_N) = (q_1(0), q_2(0), \ldots, p_N(0))$$

から座標

$$\boldsymbol{R} = (Q_1, Q_2, \ldots, Q_N) = (q_1(T), q_2(T), \ldots, p_N(T))$$

への座標変換 $\boldsymbol{r} \Rightarrow \boldsymbol{R}$ と考えてみよう。運動で結びついているので明らかに $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{R}$ は全単射である。この変換は正準変換であろうか？ポアッソン括弧による判定条件 (12.32)–(12.34) を使って正準変換であるかどうかを判定しよう。時間の関数 $\{q_i(t), p_j(t)\}$ をテーラー展開すると、

$$
\begin{aligned}
\{Q_i, P_j\} &= \{q_i(T), p(T)\} \\
&= \{q_i(0), p_j(0)\} + \frac{T}{1}\frac{d}{dt}\{q_i(0), p_j(0)\} + \frac{T^2}{2!}\frac{d^2}{dt^2}\{q_i(0), p_j(0)\} \\
&\quad + \frac{T^3}{3!}\frac{d^3}{dt^3}\{q_i(0), p_j(0)\} + \cdots
\end{aligned}
$$

式 (12.35) の $f = \{q_i, p_j\}$ の場合と考えれば、右辺第 2 項は、式 (12.28) を使って、

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

ここで最後の等式では式 (12.23) を使った。同様に

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

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

等が成り立つ。従って

$$
\{Q_i, P_j\} = \{q_i(0), p_j(0)\} = \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}
$$

である。同様に

$$
\begin{aligned}
\{Q_i, Q_j\} &= 0 \\
\{P_i, P_j\} &= 0
\end{aligned}
$$

が確認できる。従って $\boldsymbol{r} \Rightarrow \boldsymbol{R}$ の変換は正準変換であることが示された。運動は正準変換なのである。

12.6 数値積分と正準変換

数値積分法を使って力学の問題を解く場合を考える。陽的 1 次オイラー法正準方程式

$$
\begin{aligned}
\dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\
\dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}
\end{aligned}
$$

を解いたとしよう。

ある時刻 $t = t_n$ にこの系が $\boldsymbol{r} = (q_1, q_2, \ldots, p_N) = (q_1^n, q_2^n, \ldots, p_N^n)$ にいたとし、時間刻み Δt で 1 ステップだけ数値積分すると、

$$
\begin{aligned}
Q_i &:= q_i(t+\Delta t) = q_i^{n+1} = q_i^n + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p_i}(\boldsymbol{r}^n) \\
P_i &:= p_i(t+\Delta t) = p_i^{n+1} = p_i^n - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q_i}(\boldsymbol{r}^n)
\end{aligned}
$$

によって新しい時刻 $t = t^{n+1} = t^n + \Delta t$ における状態は $\boldsymbol{R} = (Q_1, Q_2, \ldots, P_N) = (q_1^{n+1}, q_2^{n+1}, \ldots, p_N^{n+1})$ となる。

数値積分によって相空間上の点 $\boldsymbol{r}$ が $\boldsymbol{R}$ に移されたわけであるが、これは正準変換になっているであろうか？ポアッソン括弧を使って確認してみよう。

$$
\begin{aligned}
\{Q_i, P_j\} &= \left\{ q_i + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p_i},\, p_j - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} \\
&= \{q_i, p_j\} - \Delta t \left\{ q_i, \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} + \Delta t \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_i}, p_j \right\} - \Delta t^2 \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_i}, \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\}
\end{aligned}
$$

ここで右辺第 2 項と第 3 項は式 (12.26) からキャンセルするので、結局

$$
\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} - \Delta t^2 \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_i}, \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} \tag{12.44}
$$

正準変換であればこの式の右辺は δ_{ij} のはずであるが、右辺第 2 項は一般にはゼロではない。

上の式は、一ステップで $O(\Delta t^2)$ の誤差が生じることを意味する。たとえば $t = 0$ から $t = T$ まで数値積分すると、全部で $T/\Delta t$ 回積分するので、誤差は最大 $O(\Delta t^2) \times (T/\Delta t) = O(\Delta t)$ だけ蓄積する。

ある力学の系を陽的 1 次オイラー法によって数値的に積分して得られた解は、本来の満たすべき「運動は正準変換である」という重要な性質を破ってしまっていることになる。