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

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

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

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。

$$H(q,p) = \frac{q^4 p^2}{2} + \frac{1}{q} \tag{11.1}$$

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。

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

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -2q^3 p^2 + \frac{1}{q^2} \tag{11.3}$$

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。

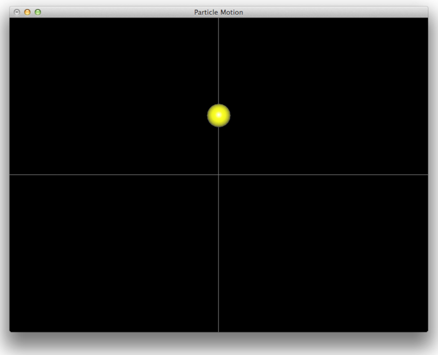
Listing 11.1: free_fall_ball_q

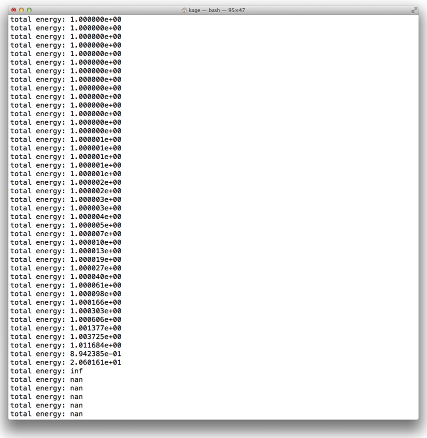
```
void equation_of_motion(double *pos, double *dpos, double dt)
{
  //     Hamiltonian
  //        H(q,p) = q^4*p^2/2 + 1/q
  //           dq/dt =  q^4*p
  //           dp/dt = -2q^3*p^2 + 1/q^2
  //
    double q = pos[0];
    double p = pos[1];

    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？



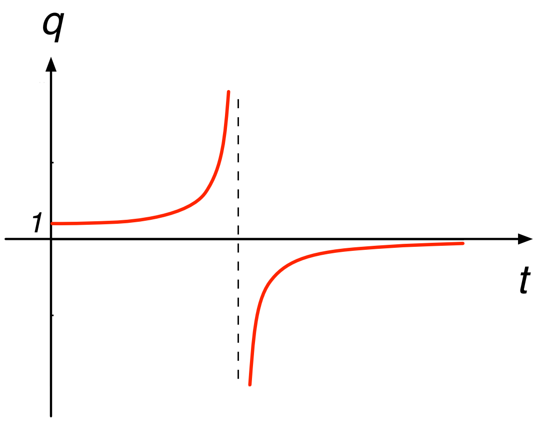


解がこのように発散するのは数値計算手法に問題があるためはなく、方程式を正しく解けているためである。上の正準方程式は正確に解くことができて、そ

の解は

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

ある。この $q(t)$ は $t = \sqrt{2}$ 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以前確認した。

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い。それほど一般的な変換を考えるわけである。

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

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

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

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、<u>正準変換</u> 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

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

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

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

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

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) の右辺を変形すると

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial P_i} &= \sum_{j=1}^{N}\frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial q_j}{\partial P_i} + \sum_{j=1}^{N}\frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial p_j}{\partial P_i} \\ &= -\sum_{j=1}^{N}\dot{p}_j\frac{\partial q_j}{\partial P_i} + \sum_{j=1}^{N}\dot{q}_j\frac{\partial p_j}{\partial P_i} \qquad \text{［式 (11.4) と (11.5) より］}\end{aligned}$$

一方、式 (11.10) の左辺は

$$\dot{Q}_i = \sum_{j=1}^{N}\dot{p}_j\frac{\partial Q_i}{\partial p_j} + \sum_{j=1}^{N}\dot{q}_j\frac{\partial Q_i}{\partial q_j}$$

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

最初の例に戻ろう。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。これは正準変換である。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、

$$\begin{aligned} H(Q,P) &= \frac{q^4(Q,P)p^2(Q,P)}{2} + \frac{1}{q(Q,P)} \\ &= \frac{Q^2}{2} + P \end{aligned} \tag{11.27}$$

なので、正準方程式は

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial P} = 1$$
$$\dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial Q} = -Q$$

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

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、

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

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。

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

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、

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

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

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

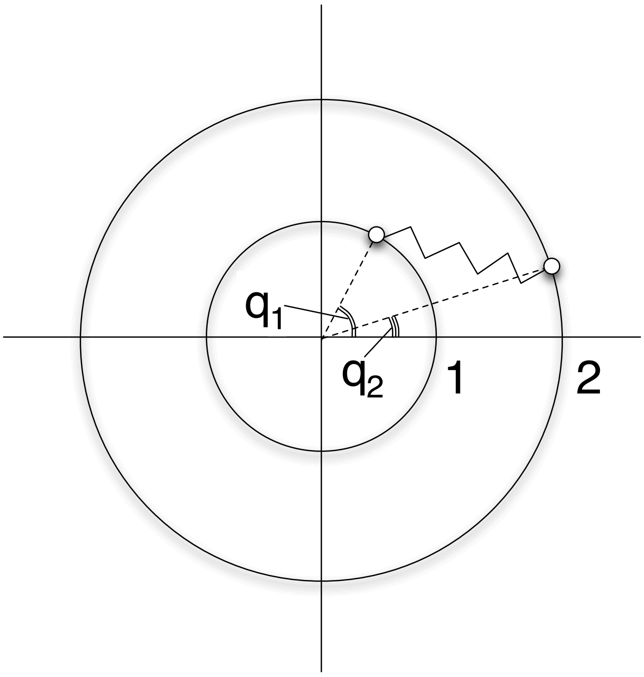
$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q} \tag{11.35}$$

によって生成される変換は正準変換となる。

11.6 例：同心円のバネ=質点系

以前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。

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

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。

11.7 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。