Chapter 12

シンプレクティック形式とポアッソン括弧

今回の内容

/// レポート回収

/// 事務連絡

- 1/14 講義
- 1/21 講義・レポート返却・正解解説 $\Leftarrow$ 出席勧奨
- 1/28 定期試験

/// 復習

§12 シンプレクティック形式とポアッソン括弧

前回の復習

- 相空間
- 正準運動方程式

12.1 シンプレクティック条件

N 自由度系の、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、ハミルトニアンを H とすれば、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。

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

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

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

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

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

さて、$\boldsymbol{r}$ があらわす力学状態を、正準変換した別の座標 $\boldsymbol{R}$ を使って書こう。つまり

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

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

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

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

$$M_{ij}^T = \frac{\partial R_j}{\partial r_i} \tag{12.11}$$

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

ここで ポアッソン括弧 とよばれる

$$\{f, g\} = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial g}{\partial q_j} \frac{\partial f}{\partial p_j} \right) \tag{12.13}$$

を定義しよう。ここで f と g は相空間の関数である。ポアッソン括弧を行列 $\boldsymbol{J}$ を使って表現すると

$$\{f, g\}_{q,p} = \sum_{i=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial r_j} \tag{12.14}$$

である。

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、ポアッソン括弧を使って次のような 4 つのグループに分けて書くことができる。

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \tag{12.15}$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \tag{12.16}$$

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \tag{12.17}$$

$$\{P_i, Q_j\} = -\delta_{ij} \tag{12.18}$$

ここでいくつかポアッソン括弧の性質を見てみよう。

定義 (12.13) から

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

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

は自明である。

c, c_1,c_2 を定数として

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

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

$$\{c, g\} = 0 \tag{12.23}$$

$$\{f, c\} = 0 \tag{12.24}$$

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。

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

$$\{p_i, f\} = -\frac{\partial f}{\partial q_i} \tag{12.26}$$

上の二つの式から以下の式が成り立つ。

$$\left\{q_i, \frac{\partial f}{\partial q_j}\right\} + \left\{p_j, \frac{\partial f}{\partial p_i}\right\} = 0 \tag{12.27}$$

また、式 (12.25) と (12.26) の特別な場合として、

$$\{q_i, q_j\} = 0 \tag{12.28}$$

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \tag{12.29}$$

$$\{p_i, p_j\} = 0 \tag{12.30}$$

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。

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \tag{12.31}$$

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 (12.14) より

$$\begin{aligned}
\text{式 (12.31) の左辺} =& \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial g}{\partial r_\ell} J_{\ell m} \frac{\partial h}{\partial r_m} \right) \\
&+ \frac{\partial g}{\partial r_\ell} J_{\ell j} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial h}{\partial r_m} J_{mi} \frac{\partial f}{\partial r_i} \right) \\
&+ \frac{\partial h}{\partial r_m} J_{mj} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial f}{\partial r_i} J_{i\ell} \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \right) \\
=& \frac{\partial f}{\partial r_i} \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \underbrace{\frac{\partial^2 h}{\partial r_j \partial r_m} (J_{ij} J_{\ell m} + J_{\ell j} J_{mi})}_{(a)} \\
&+ \frac{\partial f}{\partial r_i} \frac{\partial h}{\partial r_m} \frac{\partial^2 g}{\partial r_j \partial r_\ell} (J_{ij} J_{\ell m} + J_{mj} J_{i\ell}) \\
&+ \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \frac{\partial h}{\partial r_m} \frac{\partial^2 f}{\partial r_j \partial r_i} (J_{\ell j} J_{mi} + J_{mj} J_{i\ell})
\end{aligned} \tag{12.32}$$

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

式 (12.18) は (12.19) を考えると冗長なので、結局、座標変換 $(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, P_N)$ から $(Q_1, \ldots, Q_N, P_1, \ldots, P_N)$ への座標変換が正準変換かどうかは、

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \tag{12.33}$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \tag{12.34}$$

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \tag{12.35}$$

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

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

という変換の関数形が分かっていれば、その逆

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

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が。）

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 が位相空間の関数で、時間に陽には依存しないとき、

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial f}{\partial p_j}\dot{p}_j \\ &= \frac{\partial f}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j} \\ &= \{f, H\} \end{aligned} \tag{12.36}$$

である。f が時間に陽に依存する場合は

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} \tag{12.37}$$

となる。

式 (12.36) 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、

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} = 0 \quad \text{［式 (12.20) より］} \tag{12.38}$$

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 (12.13) より

$$\frac{d}{dt}\{f, g\} = \left\{\dot{f}, g\right\} + \{f, \dot{g}\} \tag{12.39}$$

なので、$\dot{f} = \dot{g} = 0$ の時

$$\frac{d}{dt}\{f, g\} = \{0, g\} + \{f, 0\} = 0 \tag{12.40}$$

だからである。この式はヤコビ恒等式 (12.31) を使っても証明できる。

式 (12.36) 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

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} \tag{12.41}$$

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} \tag{12.42}$$

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変換不変性

式 (12.36) は f が正準座標 $(q_1, \ldots p_N)$ の関数の場合の式であった。この量の時間微分 df/dt は、正準変換した別の座標 $(Q_1, \ldots P_N)$ でみても同じはずである。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

$$\{f, g\}_{q,p} = \{f, g\}_{Q,P} \tag{12.43}$$

であることが以下のようにして証明できる。式 (12.14) より

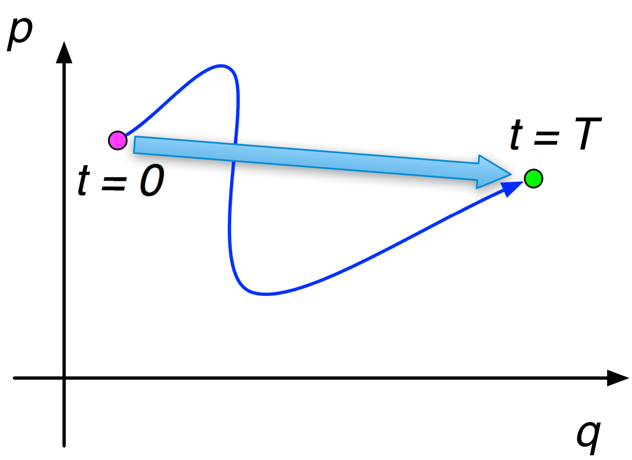
$$\begin{aligned}
\{f, g\}_{q,p} &= \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial r_j} \\
&= \left(\frac{\partial f}{\partial R_I}\frac{\partial R_I}{\partial r_i}\right) J_{ij} \left(\frac{\partial g}{\partial R_J}\frac{\partial R_J}{\partial r_j}\right) \\
&= \frac{\partial f}{\partial R_I}\left(\frac{\partial R_I}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial R_J}{\partial r_j}\right)\frac{\partial g}{\partial R_J} \\
&= \frac{\partial f}{\partial R_I} J_{IJ} \frac{\partial g}{\partial J} \quad \text{［式 (12.9) より］} \\
&= \{f, g\}_{Q,P}
\end{aligned} \tag{12.44}$$

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 (12.33)–(12.35) 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、

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

式 (12.36) の $f = \{q_i, p_j\}$ の場合と考えれば、右辺第 2 項は、式 (12.29) を使って、

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

ここで最後の等式では式 (12.24) を使った。同様に

$$\frac{d^2}{dt^2}\{q_i, p_j\}\bigg|_{t=0} = \{\{\{q_i, p_j\}, H\}, H\} = \{0, H\} = 0$$

$$\frac{d^3}{dt^3}\{q_i, p_j\}\bigg|_{t=0} = \{\{\{\{q_i, p_j\}, H\}, H\}, H\} = 0$$

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

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

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。正準方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$
$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

を陽的 1 次オイラー法で解いたとしよう。

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、

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

従って新しい時刻 $t = t^{n+1} = t^n + \Delta t$ 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 (12.27) からキャンセルするので、結局

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} - \Delta t^2 \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_i}, \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} \tag{12.45}$$

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。