解析力学B

第11回: 正準変換

神戸大: 陰山 聡

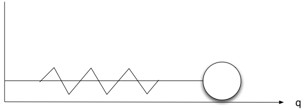
ホームページ(第6回から今回までの講義ノート)
http://tinyurl.com/kage2010

2011.01.27

正準変換

動機: 座標変換

バネ問題。



(あえて下手に座標をとった) ハミルトニアンを考える。

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}(q - \ell_0)^2$$

正準方程式は、

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -k(q - \ell_0) \end{cases}$$

もっと簡単な式がでてくるようにできないか？

正準変換

変数変換

$$\begin{cases} q_k = q_k(Q, P, t) \\ p_k = p_k(Q, P, t) \end{cases}$$

で、正準方程式の形が変わらないものを探す。
つまり変換後も、何か関数$K(Q, P, t)$が存在し、

$$\begin{cases} \dot{Q}_k = \frac{\partial K}{\partial P_k} \\ \dot{P}_k = -\frac{\partial K}{\partial Q_k} \end{cases}$$

となるもの。 ⇒ これを正準変換とよぶ。

正準変換

変分原理にもどると、分かりやすい。

$$\delta \int_{t_a}^{t_b} U(q,p)dt = 0$$

$$U(q,p) \to U'(Q,P) = U - \frac{dW}{dt}$$

とすると、

$$\delta \int_{t_a}^{t_b} U'(Q,P)dt = \delta \int_{t_a}^{t_b} U(q,p)dt - \delta \int_{t_a}^{t_b} \frac{dW}{dt} = 0$$

dW/dtの分だけ自由度がある。

$$U = p_k \dot{q}_k - H(q,p,t) = P_k \dot{Q}_k - K(Q,P,t) + \frac{dW}{dt}$$

正準変換

qとQの関数$W(q,Q,t)$を考える。

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\partial W}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial W}{\partial Q_k}\dot{Q}_k + \frac{\partial W}{\partial t}$$

これを、

$$p_k\dot{q}_k - H(q,p,t) = P_k\dot{Q}_k - K(Q,P,t) + \frac{dW}{dt}$$

に代入

$$
\begin{aligned}
&p_k\dot{q}_k - H(q,p,t)\\
&= P_k\dot{Q}_k - K(Q,P,t) + \frac{\partial W}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial W}{\partial Q_k}\dot{Q}_k + \frac{\partial W}{\partial t}\\
&= \frac{\partial W}{\partial q_k}\dot{q}_k + \left(P_k + \frac{\partial W}{\partial Q_k}\right)\dot{Q}_k - K + \frac{\partial W}{\partial t}
\end{aligned}
$$

両辺の$\dot{q}_k$と$\dot{Q}_k$に比例する項を比較して、

$$p_k = \frac{\partial W}{\partial q_k}$$

$$P_k = -\frac{\partial W}{\partial Q_k}$$

$$K = H + \frac{\partial W}{\partial t}$$

を得る。Wを母関数と呼ぶ。

正準変換

母関数$W(q,Q)$が分かっているときの正準変換

$$(q,p) \longrightarrow (Q,P)$$

のアルゴリズム

$$p_k = \frac{\partial W}{\partial q_k}$$

をQ_kについて解く:

$$Q_k = Q_k(q,p)$$

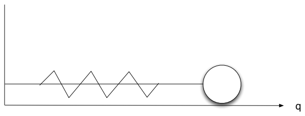
$$P_k = -\frac{\partial W}{\partial Q_k}(q,Q)$$

に代入。

$$P_k = P_k(q,p)$$

を得る。

例



ハミルトニアン

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}(q - \ell_0)^2$$

母関数

$$W(q, Q) = \frac{\sqrt{mk}}{2}(q - \ell_0)^2 \frac{\cos Q}{\sin Q}$$

例

$$p = \frac{\partial W}{\partial q} = \sqrt{mk}\,(q - \ell_0)\frac{\cos Q}{\sin Q}$$

$$P = -\frac{\partial W}{\partial Q} = +\frac{\sqrt{mk}}{2}(q - \ell_0)^2\frac{1}{\sin^2 Q}$$

これを解いて、

$$\begin{cases} q = \ell_0 + \sqrt{\dfrac{2P}{\sqrt{mk}}}\sin Q \\ p = \sqrt{2P\sqrt{mk}}\cos Q \end{cases}$$

$(q, p) \to (Q, P)$の正準変換。

例

ハミルトニアンの変換:

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}(q-\ell_0)^2 \\
&= \frac{1}{2m}\,2P\sqrt{mk}\,\cos^2 Q + \frac{k}{2}\,\frac{2P}{\sqrt{mk}}\,\sin^2 Q \\
&= \sqrt{\frac{k}{m}}\,P \to K
\end{aligned}
$$

例

ハミルトニアン

$$K(Q,P) = \sqrt{\frac{k}{m}}\,P$$

正準運動方程式

$$\begin{cases} \dot{Q} &= \dfrac{\partial K}{\partial P} &= \sqrt{\dfrac{k}{m}} \\ \dot{P} &= -\dfrac{\partial K}{\partial Q} &= 0 \end{cases}$$

簡単に解ける！

$\Rightarrow$ 正準変換をうまく使うと、運動方程式が簡単に解ける。

母関数の別の例

$W(q,Q)=qQ$としてみよう。

$$p=\frac{\partial W}{\partial q}=Q$$

$$P=-\frac{\partial W}{\partial Q}=-q$$

つまり

$$(q,p)\to(-P,Q)$$

Wは、一般化座標と一般化運動量を入れ替える母関数。
正準変数ではどれが「座標」でどれが「運動量」か、というのは意味がない。ごちゃごちゃに混ぜた変数変換が可能。

正準変換かどうかの判別

変数変換

$$\begin{cases} q_k = q_k(Q, P, t) \\ p_k = p_k(Q, P, t) \end{cases}$$

は、正準変換かどうか？

母関数があるならYES。
母関数が見つからないときには？ $\Rightarrow$ ポアッソン括弧という便利なものがある。

ポアッソン括弧

ポアッソン括弧(Poisson Blacket)

位相空間中のスカラー場(q_iとp_iの関数)を二つ考える。

$$A = A(q, p)$$

$$B = B(q, p)$$

AとBのポアッソン括弧を、次の式で定義する。

$$\{A, B\}_{q,p} = \frac{\partial A}{\partial q_k}\frac{\partial B}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k}\frac{\partial B}{\partial q_k}$$

添字の$_{q,p}$は、正準変数(q, p)がわかるように書いているが、実は不要である。なぜなら・・・

ポアッソン括弧

位相空間中の運動に沿って、ある関数$f(q,p)$の時間微分を計算する

$$\begin{aligned}\frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{dq_k}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{dp_k}{dt} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial q_k} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \{f,H\}_{q,p}\end{aligned}$$

左辺は別の正準変数(Q,P)をとっても計算しても同じはず。

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f,H\}_{Q,P}$$

つまり

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

ポアッソン括弧の不変性

ハミルトニアンHに対し、以下が示された。

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

もっと一般に、位相空間中の二つの関数f, gに対し、

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

を、証明することができる。
つまり、ポアッソン括弧は、正準変数に依らない。（添字不要。）

ポアッソン括弧による運動方程式

ポアッソン括弧を使うと、正準運動方程式はq, pについて対象な形に書ける。

$$\frac{dq_i}{dt} = \{q_i, H\}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = \{p_i, H\}$$

さまざまな運動方程式

ニュートンの運動方程式

$$\boldsymbol{F} = m\boldsymbol{a}$$

ラグランジュの運動方程式

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

ハミルトンの正準運動方程式

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

ポアッソン括弧による正準運動方程式

$$\frac{dq_i}{dt} = \{q_i, H\}, \quad \frac{dp_i}{dt} = \{p_i, H\}$$

基本ポアッソン括弧関係式

正準変数(q, p)に対して、

$$\{q_j, q_k\} = 0$$

$$\{p_j, p_k\} = 0$$

$$\{q_j, p_k\} = -\{p_j, q_k\} = \delta_{jk}$$

ポアッソン括弧の性質

$$
\begin{aligned}
&\{B, A\} = -\{A, B\} \\
&\{AB, C\} = A\,\{B, C\} + \{A, C\}\,B \\
&\frac{d}{dt}\{A, B\} = \left\{\frac{dA}{dt}, B\right\} + \left\{A, \frac{dB}{dt}\right\} \\
&\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0
\end{aligned}
$$

最後の式はJacobiの恒等式と呼ばれる。

正準変換とポアッソン括弧

ある量$A(q,p)$の時間変化を求める。

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{dq_j}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial p_j}{dt} = \frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j} = \{A, H\}$$

正準変換とポアッソン括弧

座標変換$(q,p) \longrightarrow (Q,P)$を考える。（正準変換とは限らない。）

$$
\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} = \{A, H\} &= \frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j} \\
&= \frac{\partial A}{\partial q_j}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_i}\frac{\partial Q_i}{\partial p_j} + \frac{\partial H}{\partial P_i}\frac{\partial P_i}{\partial p_j}\right) \\
&\quad -\frac{\partial A}{\partial p_j}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_i}\frac{\partial Q_i}{\partial q_j} + \frac{\partial H}{\partial P_i}\frac{\partial P_i}{\partial q_j}\right) \\
&= \left(\frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{\partial Q_i}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\right)\frac{\partial H}{\partial Q_i} \\
&\quad + \left(\frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{\partial P_i}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial P_i}{\partial q_j}\right)\frac{\partial H}{\partial P_i} \\
&= \{A, Q_i\}\frac{\partial H}{\partial Q_i} + \{A, P_i\}\frac{\partial H}{\partial P_i}
\end{aligned}
$$

正準変換とポアッソン括弧

再掲: 座標変換$(q,p) \longrightarrow (Q,P)$で、

$$\frac{dA}{dt} = \{A, Q_j\} \frac{\partial H}{\partial Q_j} + \{A, P_j\} \frac{\partial H}{\partial P_j}$$

いま、$A = Q_i$と、$A = P_i$とすると、

$$\frac{dQ_i}{dt} = \{Q_i, Q_j\} \frac{\partial H}{\partial Q_j} + \{Q_i, P_j\} \frac{\partial H}{\partial P_j}$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \{P_i, Q_j\} \frac{\partial H}{\partial Q_j} + \{P_i, P_j\} \frac{\partial H}{\partial P_j}$$

変換後の座標(Q,P)が、基本ポアッソン括弧関係式
$\{Q_i, Q_j\} = 0,\ \{P_i, P_j\} = 0,\ \{Q_i, P_j\} = -\{P_j, Q_i\} = \delta_{ij}$ を満たしていると・・・

正準変換とポアッソン括弧

変換後の(Q,P)は、正準運動方程式

$$\frac{dQ_i}{dt} = \{Q_i, H\},$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \{P_i, H\}$$

を満たす。つまり、(Q,P)は正準変数。
$(q,p) \to (Q,P)$は、正準変換になっている。

変数変換$(q,p) \to (Q,P)$が、正準変換かどうかは、(Q,P)が基本ポアッソン括弧関係式を満たすかどうか調べればよい。

運動= 正準変換

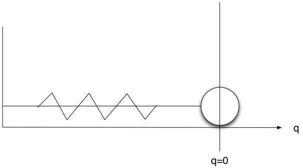
実は運動そのものも正準変換である。
位相空間中の$t=t_a$における位置(状態) $(q(t_a),p(t_a))\equiv(q,p)$
$t=t_b$における位置 $((t_b),p(t_b))\equiv(Q,P)$
とすると、$(q,p)\to(Q,P)$は正準変換である。
その母関数は？ $\cdots$

$$S(q,Q)=\int_{t_a}^{t_b}\left(p_j\dot{q}_j-H(q,p)\right)\,dt$$

実際の運動に沿って計算した作用。

シンプレクティック積分法

シンプレクティック積分法

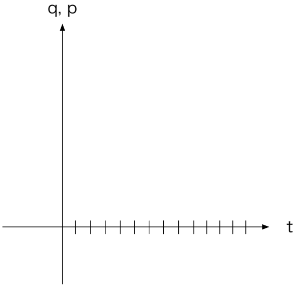


$m = k = 1$とすると、ハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2}$$

$$\begin{cases} \dfrac{dq}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial p} = p \\ \dfrac{dp}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial q} = -q \end{cases}$$

シンプレクティック積分法



時間の離散化と微分方程式の差分化

$$\begin{cases} \dfrac{\Delta q}{\Delta t} & = & p \\ \dfrac{\Delta p}{\Delta t} & = & -q \end{cases}$$

シンプレクティック積分法

n番目の時間ステップを上付き添字で表す (1次前進オイラー法)。

$$\begin{cases} \frac{\Delta q^n}{\Delta t} & = & \frac{q^{n+1}-q^n}{\Delta t} = p^n \\ \frac{\Delta p^n}{\Delta t} & = & \frac{p^{n+1}-p^n}{\Delta t} = -q^n \end{cases}$$

これを変形して、

$$\begin{cases} q^{n+1} = q^n + \Delta t\, p^n \\ p^{n+1} = p^n - \Delta t\, q^n \end{cases}$$

$(q^n, p^n) \to (q^{n+1}, p^{n+1})$という変数変換。

これは正準変換か？　(Remember: 運動は正準変換)

シンプレクティック積分法

$$\begin{cases} q^{n+1} = q^n + \Delta t\, p^n \\ p^{n+1} = p^n - \Delta t\, q^n \end{cases}$$

$(q^n, p^n) \to (q^{n+1}, p^{n+1})$が正準変換かどうかは ポアッソン括弧をとってみればわかる。

$$\begin{aligned} \{q^{n+1}, p^{n+1}\} &= \frac{\partial q^{n+1}}{\partial q^n}\frac{\partial p^{n+1}}{\partial p^n} - \frac{\partial q^{n+1}}{\partial p^n}\frac{\partial p^{n+1}}{\partial q^n} \\ &= 1 \cdot 1 - (\Delta t)(-\Delta t) \\ &= 1 \cdot 1 + \Delta t^2 \end{aligned}$$

基本ポアッソン括弧関係式を満たさない。

単純な1次前進オイラー法による数値積分法による運動方程式の数値解は正準変換になっていない。 $\Rightarrow$ 数値誤差のためにエネルギー保存則が破れてしまう。

シンプレクティック積分法

さっきの式を少しだけ変えて次の形にする。

$$\begin{cases} \dfrac{\Delta q^n}{\Delta t} = \dfrac{q^{n+1}-q^n}{\Delta t} = p^n \\ \dfrac{\Delta p^n}{\Delta t} = \dfrac{p^{n+1}-p^n}{\Delta t} = -q^{n+1} \end{cases}$$

$$\begin{cases} q^{n+1} = q^n + \Delta t\, p^n \\ p^{n+1} = p^n - \Delta t\, q^{n+1} = (1-\Delta t^2)p^n - \Delta t q^n \end{cases}$$

今度は、$(q^n, p^n) \to (q^{n+1}, p^{n+1})$が正準変換になっている。

$$\left\{q^{n+1}, p^{n+1}\right\} = 1 \cdot \left(1 - \Delta t^2\right) - (\Delta t)\,(-\Delta t) = 1$$

基本ポアッソン括弧関係式を満たす。

$\Rightarrow$ シンプレクティック積分法。エネルギー保存性がよい。

前回と今回のまとめ

- ハミルトンの正準方程式
- ポアッソン括弧
- シンプレクティック積分法

全体のまとめ

- 変分原理
- 様々な運動法則の表現(微分方程式)
- 数値計算と可視化
- 解析力学の威力

最後に

定期試験は2/10。(2/3は講義なし。)成績の基準:

- 小テスト p_a
- 参加姿勢 p_b
- レポート p_c
- 定期試験 p_d

if $p_d >$ (80 ∼ 90) / 100
　　成績 = 優
else
　　成績 = $f(w_a\, p_a + w_b\, p_b + w_c\, p_c + w_d\, p_d)$
end if

$$\text{ここで } w_d > w_a + w_b + w_c$$