解析力学B

第11回

神戸大 システム情報学研究科 計算科学専攻: 陰山 聡

この講義のウェブページ: URL: http://tinyurl.com/kageyama2011

2012.01.19

今日の内容

- ハミルトニアンとエネルギー
- ポアッソン括弧
- シンプレクティック数値積分法
- 正準変換による運動方程式の簡単化

ハミルトニアンとエネルギー

ハミルトニアンとエネルギー

ポテンシャルが、速度に依存しないとき

$$L = (\text{運動エネルギー}) - (\text{ポテンシャル})$$

$$L = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - (\text{ポテンシャル})$$

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}, \quad \dot{q} = \frac{p}{m}$$

$$H = p\dot{q} - L = p\frac{p}{m} - \frac{m}{2}\left(\frac{p}{m}\right)^2 + (\text{ポテンシャル})$$

$$H = (\text{運動エネルギー}) + (\text{ポテンシャル}) = (\text{全エネルギー})$$

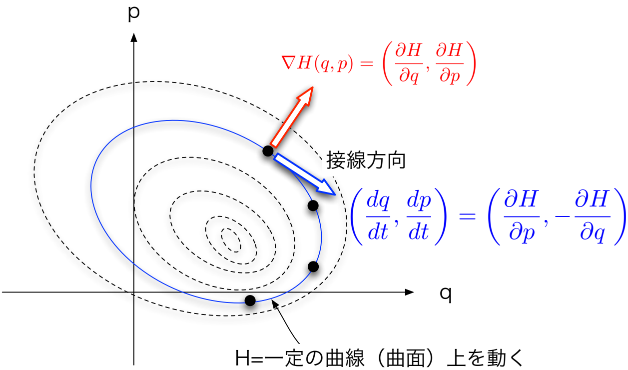
関数形がエネルギーと等しいという意味。ハミルトニアン(qとpの関数)と、エネルギー(ジュールで測る数値)は別物。

正準方程式のイメージ

ハミルトニアン $H(q,p)$ ･･･2N次元位相空間(q,p)の場。

位相空間中の点 (q_0, p_o) ･･･系の状態。

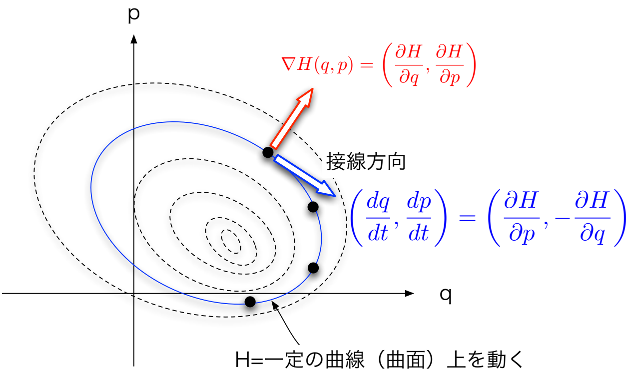
正準方程式 ･･･ 位相空間中の点(状態)の動き方を定める。



正準方程式の形からすぐにわかること 1

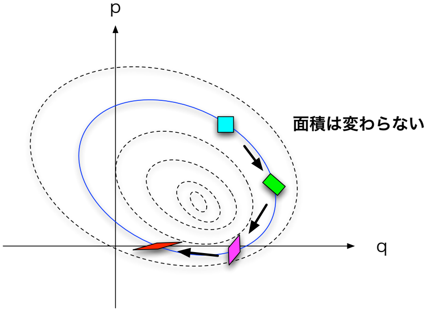
正準方程式 ・・・ 位相空間中の点(状態)の動き方を定める。

Hの値は、変わらない。 ⇒ エネルギー保存則



正準方程式の形からすぐにわかること 2

位相空間中に点がぎっしり無数に分布している様子を思い浮かべよう。・・・まるで水の分子のように。この「水」は流れは非圧縮。 ⇒ リウヴィルの定理。



$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = \frac{\partial u_q}{\partial q} + \frac{\partial u_p}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right) - \frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{\partial H}{\partial q}\right) = 0$$

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。

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

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

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

ポアッソン括弧による運動方程式

特別な場合：ポアッソン括弧を使うと、正準運動方程式はq, pについて同じ形で書ける。

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

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

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、

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

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

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

シンプレクティック数値積分法

1次元問題（位相空間2次元）(q,p)の場合を考える。
ある時刻に位相空間中のある位置(q,p)にあった点が、別の時刻に(Q,P)に移動（運動）したとする。

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

QもPも(q,p)の関数。これは一種の座標変換。

点(q,p)と点(Q,P)はどちらも当然、それぞれの時刻（瞬間）には正準運動方程式に従う。

$$\left\{\begin{array}{lcl} \dfrac{dq}{dt} & = & \dfrac{\partial H}{\partial p} \\ \dfrac{dp}{dt} & = & -\dfrac{\partial H}{\partial q} \end{array}\right. \qquad \left\{\begin{array}{lcl} \dfrac{dQ}{dt} & = & \dfrac{\partial H}{\partial P} \\ \dfrac{dP}{dt} & = & -\dfrac{\partial H}{\partial Q} \end{array}\right.$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial P} &= \frac{dQ}{dt} \quad (\text{右上の式}) \\
&= \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{dp}{dt} \\
&= \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} \\
&= \frac{\partial Q}{\partial q}\left(\frac{\partial H}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}\right) \\
&\quad -\frac{\partial Q}{\partial p}\left(\frac{\partial H}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}\right) \\
&= \{Q,Q\}\frac{\partial H}{\partial Q} + \{Q,P\}\frac{\partial H}{\partial P}
\end{aligned}
$$

つまり

$$
\{Q,Q\} = 0, \quad \{Q,P\} = 1
$$

一般に、位相空間中の運動
$(q_1, \cdots, q_N, p_1, \cdots, p_N) \to (Q_1, \cdots, Q_N, P_1, \cdots, P_N)$ に対して、

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

が成り立つ。

運動に限らず、この関係を満たす座標変換を「正準変換」という。

運動は正準変換の一つ。

数値計算

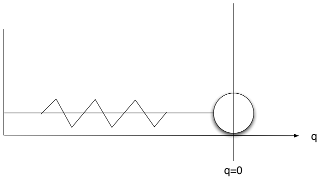
時刻t^nにおける位相空間中の位置$(q^n, p^n) \equiv (q(t^n), p(t^n))$ を既知とする
少し未来t^{n+1}における位置$(q^{n+1}, p^{n+1}) \equiv (q(t^{n+1}), p(t^{n+1}))$ を計算機で求める(数値計算)。

$$(q^n, p^n) \to (q^{n+1}, p^{n+1})$$

は正準変換のはず。

正準変換になっている数値積分法を「シンプレクティック積分法」という。

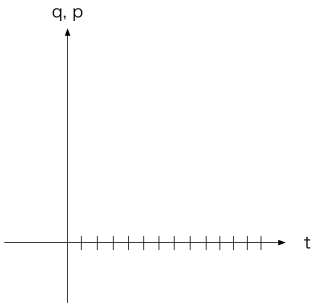
例



簡単のため、$m = k = 1$とすると、ハミルトニアンは

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

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



時間の離散化と微分方程式の差分化

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

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。

これは正準変換になっているだろうか？

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。

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

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。
（ハミルトニアンが変わってしまう → 数値誤差のためにエネルギーが保存しなくなる。）

さっきの式を少しだけ変えて次の形にする。

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

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

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。

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

⇒ これがシンプレクティック積分法の簡単な一例。（エネルギー保存性がよい。）

正準変換による運動方程式の簡単化

正準変換$(q,p) \to (Q,P)$

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

は運動以外にもある。

正準変換は運動方程式の形を変えない

$$
\begin{aligned}
\frac{dQ_i}{dt} &= \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\frac{dq_j}{dt} + \frac{\partial Q_i}{\partial p_j}\frac{dp_j}{dt} \\
&= \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j} \\
&= \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\ell}\frac{\partial Q_\ell}{\partial p_j} + \frac{\partial H}{\partial P_\ell}\frac{\partial P_\ell}{\partial p_j}\right) \\
&\quad - \frac{\partial Q_i}{\partial p_j}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\ell}\frac{\partial Q_\ell}{\partial q_j} + \frac{\partial H}{\partial P_\ell}\frac{\partial P_\ell}{\partial q_j}\right) \\
&= \{Q_i, Q_\ell\}\frac{\partial H}{\partial Q_\ell} + \{Q_i, P_\ell\}\frac{\partial H}{\partial P_\ell} \\
&= \delta_{i\ell}\frac{\partial H}{\partial P_\ell} = \frac{\partial H}{\partial P_i}
\end{aligned}
$$

結局、

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P_i}$$

であった。同様に、正準変換は

$$\frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial Q_i}$$

が示される。これは座標(Q, P)で表したハミルトンの正準運動方程式である。

正準変換は正準運動方程式の形を変えない。(逆は真ならず。)ハミルトニアンの形は変わる。(ハミルトニアンも変わらないのが運動。)

うまい正準変換が見つかれば正準運動方程式が簡単になる。

例

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

次の座標変換を考える:

$$\begin{cases} Q = \tan^{-1}(q/p) \\ P = \frac{1}{2}\left(q^2 + p^2\right) \end{cases}$$

逆変換は

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

これが正準変換であることはポアッソン括弧をとれば確認できる。

$$\{Q,Q\}=0,\quad \{P,P\}=0$$

は自明。次に、$\frac{d}{dx}(\tan^{-1}x)=1/(1+x^2)$に注意しながら計算すると、

$$\begin{aligned}\{Q,P\} &= \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}-\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} \\ &= \frac{1/p}{1+(q/p)^2}\times p - q\times\frac{-q/p^2}{1+(q/p)^2} \\ &= 1\end{aligned}$$

ハミルトニアン$H(q,p)$はこの正準変換で$H \to K$と変換される。

$$
\begin{aligned}
K(Q,P) &= H(q(Q,P),p(Q,p)) \\
&= \frac{q^2}{2} + \frac{p^2}{2} = P\sin^2 Q + P\cos^2 Q \\
&= P
\end{aligned}
$$

正準運動方程式は

$$
\begin{cases}
\dfrac{dQ}{dt} = \dfrac{\partial K}{\partial P} = 1 \\
\dfrac{dP}{dt} = -\dfrac{\partial K}{\partial Q} = 0
\end{cases}
$$

これを解くのは簡単！

$$Q(t) = t + c_1, \quad P(t) = c_2$$

うまい正準変換が見つかれば、正準運動方程式が簡単に解ける。
（いろいろなテクニックが開発されている。母関数など。）

極端な場合、変換後のハミルトニアンをゼロにするような正準変換が見つかればいい。→ ハミルトン・ヤコビの理論。