平成 29 年度　解析力学　講義ノート [11]（担当：井元信之）

2017 年 7 月 27 日

前回の演習問題の答

[問 4.4] 調和振動子の座標と運動量を無次元化して円軌道を得るために施した変数変換

$$q \equiv \sqrt{m\omega}\, x\,, \quad p \equiv \sqrt{\frac{1}{m\omega}}\, p_x \tag{4.25}$$

は正準変換である。その母関数は何か? 正準変換 II と III のそれぞれについて求めよ。

解答：正準変換 II を用いる場合、母関数 W' は x と p の関数で、(4.48) 式（の後ろの 2 式）は $p_x = \frac{\partial W'}{\partial x}$ および $q = \frac{\partial W'}{\partial p}$ となる。(4.25) 式を使うとこれは $\frac{\partial W'}{\partial x} = \sqrt{m\omega}\, p$ および $\frac{\partial W'}{\partial p} = \sqrt{m\omega}\, x$ を意味するから、$W' = \sqrt{m\omega}\, xp$ となる。

正準変換 III を用いる場合、母関数 W'' は q と p_x の関数で、(4.50) 式（の後ろの 2 式）は $x = -\frac{\partial W''}{\partial p_x}$ および $p = -\frac{\partial W''}{\partial q}$ となる。(4.25) 式を使うとこれは $\frac{\partial W''}{\partial p_x} = -\frac{q}{\sqrt{m\omega}}$ および $\frac{\partial W''}{\partial p} = -\frac{p_x}{\sqrt{m\omega}}$ を意味するから、$W'' = -\frac{qp_x}{\sqrt{m\omega}}$ となる。

一般の場合

最も簡単な例である「1 次元ポテンシャル中を動く 1 個の質点」で行った計算を参考に一般化しよう。ハミルトン – ヤコビの方程式 (4.99) を導いたときは、$\tilde{H} = 0$ を使って (4.38) の第 2 式から $P_i = \text{const.} \equiv \alpha_i$ を導いた。これを正準変換 (4.48) の第二式 $p_j = \frac{\partial}{\partial q_j} W(q_1, \cdots, q_n, P_1, \cdots, P_n)$ に入れることにより、

$$p_j = \frac{\partial}{\partial q_j} W(q_1, \cdots, q_n, \alpha_1, \cdots, \alpha_n) \tag{4.108}$$

を得る。しかしこれだけではまだ式の数が n 個で、W を求めるのに必要な解くべき変数 $q_1, \cdots, q_n$ と $p_1, \cdots, p_n$ の $2n$ 個に足りない。

実は同様に $Q_i = \text{const.}$ も言える。それは (4.38) の第 1 式 $\frac{\mathrm{d}Q_j}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_j}$ において $\tilde{H} = 0$ とすればよい。そこで $Q_i = \text{const.} \equiv \beta_i$ と置こう。そうすると正準変換 (4.48) の第一式 $Q_j = \frac{\partial}{\partial P_j} W(q_1, \cdots, q_n, \alpha_1, \cdots, \alpha_n)$ は

$$\beta_j = \frac{\partial}{\partial \alpha_j} W(q_1, \cdots, q_n, \alpha_1, \cdots, \alpha_n) \tag{4.109}$$

ということになる。そこで最終的には (4.108) と (4.109) の $2n$ 個の連立微分方程式から $q_1, \cdots, q_n$ と $p_1, \cdots, p_n$ を求めればよい。その結果得られる W を主関数 S とすればよい。

次にハミルトニアンが時間 t に直接依存しない場合に限定しよう。この場合エネルギー保存則 $H = \text{const.} = E$ より、ハミルトン – ヤコビの方程式 (4.99) は

$$\frac{\partial}{\partial t} W(q_1, \cdots, q_n, \alpha_2, \cdots, \alpha_n) = -E \;\rightarrow\; W(q_1, \cdots, q_n, \alpha_2, \cdots, \alpha_n) = -Et + S(q_1, \cdots, q_n) \tag{4.110}$$

となる。これは前の例では (4.103) に相当する。ここで α_1 からでなく α_2 から始めているのは、定数の自由度一つをエネルギー E が担っているので、その分 α_1 を削ったのである。あるいは E が α_1 である。この W または $S(q_1,\cdots,q_n)$ を使って (4.108) および (4.110) より

$$p_j = \frac{\partial W}{\partial q_j} = \frac{\partial S}{\partial q_j} \quad (j=1,\cdots,n) \tag{4.111}$$

および

$$\beta_j = \frac{\partial W}{\partial \alpha_j} \quad (j=1,\cdots,n) \tag{4.112}$$

となる。この β_j を求める式は $j=1$ とそれ以外の場合にわかれ、$j=1$ の場合は特に $\alpha_1 = E$ だから、

$$\beta_1 = \frac{\partial S}{\partial E} - t \tag{4.113}$$

となる。これを積分すると軌道上の動きが時間の関数として得られるが、このときの任意の積分定数は時間の原点をずらす効果しかない。$j=2,\cdots,n$ の場合は

$$\beta_j = \frac{\partial S}{\partial \alpha_j} \quad (j=2,\cdots,n) \tag{4.114}$$

となる。(4.111)、(4.113) および (4.114) の $2n$ 個の方程式を解いて $q_1,\cdots,q_n$ と $p_1,\cdots,p_n$ を $\alpha_1(=E),\alpha_2\cdots,\alpha_n,\beta_1,\cdots,\beta_n$ で表せば運動はすべて解けたことになる。このとき $S(q_1,\cdots,q_n)$ を決めるにはエネルギー保存則

$$H\left(q_1,\cdots,q_n\,,\frac{\partial S}{\partial q_1}\,,\cdots\,,\frac{\partial S}{\partial q_n}\right) = E \tag{4.115}$$

を使う。これもハミルトン – ヤコビの偏微分方程式と呼ばれる。

中心力場を動く質点

以上の一般論の使い方を再び個別例で見て行く。3 次元であっても中心力場下で質点は一つの平面内で運動するから、2 次元極座標で扱うと、ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\theta^2\right) + U(r) \tag{4.116}$$

であるから、ハミルトン – ヤコビの方程式 (4.115) はただちに

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{2mr^2}\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2 + U(r) = E \tag{4.117}$$

となる。中心力場では角運動量が保存するから $p_\theta = \text{const.} \equiv \alpha$ とすると、(4.111) より

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right) = \alpha \quad \rightarrow \quad S = S(r) + \alpha\theta \tag{4.118}$$

となる[16]。したがって

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}S(r)}{\mathrm{d}r}\right)^2 + \frac{1}{2mr^2}\alpha^2 + U(r) = E \quad \rightarrow \quad \left(\frac{\mathrm{d}S(r)}{\mathrm{d}r}\right)^2 = 2m[E-U(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2} \tag{4.119}$$

となって

$$S(r) = \pm\int \mathrm{d}r\sqrt{2m[E-U(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2}} \quad \rightarrow \quad S(t,r) = \left(\pm\int \mathrm{d}r\sqrt{2m[E-U(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2}}\right) + \alpha\theta \tag{4.120}$$

[16] 主関数 $S(r,\theta)$ のうち θ に依存しない部分を $S(r)$ と書いている。

を得る。あとはこれを使って (4.111)、(4.113) および (4.114) の $2n$ 個（= 今の場合 $2\times 2=4$ 個）の式を計算して行くわけだが、このうち p_θ については既に角運動量の保存として (4.118) が求まっているから、残りは 3 個の式となる。まず (4.111) から p_r について

$$p_r=\frac{\partial S(t,r)}{\partial r}=\pm\sqrt{2m[E-U(r)]-\frac{\alpha^2}{r^2}} \tag{4.121}$$

を得る。

［問 4.8］ (4.121) 式の意味するところを説明せよ。

次に (4.114) より

$$\beta_\theta=\frac{\partial S(t,r)}{\partial \alpha}=\left(\mp\int \mathrm{d}r\frac{\alpha}{r^2}\frac{1}{\sqrt{2m[E-U(r)]-\frac{\alpha^2}{r^2}}}\right)+\theta \tag{4.122}$$

を得る。これは r と θ の関係すなわち質点の軌道 $r(\theta)$ を与える。このときの任意積分定数は、同一のエネルギー E が与える軌道には θ 全体を少しずつずらして回転したものも許される縮退があることを示し、そのときの回転角度を意味する。この縮退は今考えているのが中心力場であることに依る。そして (4.113) からは

$$\beta_r=\frac{\partial S(t,r)}{\partial E}-t=\left(\pm\int \mathrm{d}r\frac{m}{\sqrt{2m[E-U(r)]-\frac{\alpha^2}{r^2}}}\right)-t \tag{4.123}$$

を得る。これは r と t の関係すなわち軌道上での時間的動き $r(t)$ を表す。このときの積分定数は時間の原点をずらす効果しかない。この初期時刻の自由度は中心力場とは関係なく、(4.113) でも見たように一般的なものである。上記二つの式を連立させて r を消去すれば、軌跡上の動きを $\theta(t)$ として表すこともできる。

4.3.3 シンプレクティック変換

正準変換の条件として

[1] 変換後の変数とハミルトニアンが正準方程式を満たすこと［(4.38) 式］

[2] 適切な母関数によって表現されること

[3] ポアソンの括弧式を変えないこと

があることを見て来た。ここではさらに

[4] シンプレクティック変換

を紹介する。これは正準変換の条件を多面的に見るのみならず、次項のリウビルの定理の導入となる。

いま変換前の一般座標と一般運動量を並べた $2n$ 次元のベクトルを

$$\mathbf{w}\equiv(q_1,\cdots,q_n,p_1,\cdots,p_n) \tag{4.124}$$

とすると、ハミルトンの正準方程式は

$$\begin{pmatrix}\frac{\mathrm{d}q_1}{\mathrm{d}t}\\ \vdots\\ \frac{\mathrm{d}q_n}{\mathrm{d}t}\\ \frac{\mathrm{d}p_1}{\mathrm{d}t}\\ \vdots\\ \frac{\mathrm{d}p_n}{\mathrm{d}t}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&\cdots&0&1&\cdots&0\\ 0&\ddots&0&0&\ddots&0\\ 0&\cdots&0&0&\cdots&1\\ -1&\cdots&0&0&\cdots&0\\ 0&\ddots&0&0&\ddots&0\\ 0&\cdots&-1&0&\cdots&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\partial H}{\partial q_1}\\ \vdots\\ \frac{\partial H}{\partial q_n}\\ \frac{\partial H}{\partial p_1}\\ \vdots\\ \frac{\partial H}{\partial p_n}\end{pmatrix} \tag{4.125}$$

となる。真ん中の $2n \times 2n$ の行列を J と書くと、これは

$$\dot{\mathbf{w}} = J\ \nabla_{\mathbf{w}} H \qquad \text{または成分ごとに} \qquad \dot{w}_i = \sum_j J_{ij} \frac{\partial H}{\partial w_j} \tag{4.126}$$

と書かれる。J は n 次元のゼロ行列 $\mathbf{0}$ および単位行列 $\mathbf{1}$ を用いて

$$J = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \tag{4.127}$$

とも書かれる。同様に変換後の一般座標と一般運動量を並べた $2n$ 次元のベクトルを

$$\mathbf{W} \equiv (Q_1, \cdots, Q_n, P_1, \cdots, P_n) \tag{4.128}$$

とすると、変換後もハミルトンの正準方程式が成り立つとすれば

$$\dot{\mathbf{W}} = J\ \nabla_{\mathbf{W}} H \qquad \text{または} \qquad \dot{W}_i = \sum_j J_{ij} \frac{\partial H}{\partial W_j} \tag{4.129}$$

である。一方、

$$\frac{\mathrm{d}W_i}{\mathrm{d}t} = \sum_j \frac{\partial W_i}{\partial w_j} \frac{\mathrm{d}w_j}{\mathrm{d}t} = \sum_j \frac{\partial W_i}{\partial w_j} \sum_k J_{jk} \frac{\partial H}{\partial w_k} = \sum_j \frac{\partial W_i}{\partial w_j} \sum_k J_{jk} \sum_l \frac{\partial H}{\partial W_l} \frac{\partial W_l}{\partial w_k} \tag{4.130}$$

であるから、いま $\mathrm{d}\mathbf{w}$ から $\mathrm{d}\mathbf{W}$ への変換行列 M を成分で $M_{ij} \equiv \frac{\partial W_i}{\partial w_j}$ と定義すると

$$\sum_l J_{il} \frac{\partial H}{\partial W_l} = \sum_j \frac{\partial W_i}{\partial w_j} \sum_k J_{jk} \sum_l \frac{\partial W_l}{\partial w_k} \frac{\partial H}{\partial W_l} = \sum_{jkl} M_{ij} J_{jk} (M^{\mathrm{t}})_{kl} \frac{\partial H}{\partial W_l} \tag{4.131}$$

となる。ただし (M^{t}) は M の転置行列で、$(M^{\mathrm{t}})_{kl}$ はその kl 成分である。ベクトルと行列で書けば、

$$J\ \nabla_{\mathbf{W}} H = M J M^{\mathrm{t}}\ \nabla_{\mathbf{W}} H \tag{4.132}$$

を意味する。この式は $A\mathbf{x} = B\mathbf{x}$ の形をしている。ここで行列 $A = J$、$B = MJM^{\mathrm{t}}$、ベクトル $\mathbf{x} = \nabla_{\mathbf{W}} H$ である。もし A と B が先に与えられている問題ならばこれは $\mathbf{x}$ を決める固有方程式であるが、今の場合 $\mathbf{x}$ は変分 $\{\delta q_i, \delta p_i\}$ と $\{\delta Q_i, \delta P_i\}$ を関係づける量とみなせる（証略）ため、逆に、$\mathbf{x}$ が変化しても成り立つためには $A = B$ でなければならない、ということを主張する式となっている。すなわち

$$J = M J M^{\mathrm{t}} \tag{4.133}$$

でなければならない。このような変換 M を シンプレクティック変換（symplectic transform）という。

4.3.4 リウビルの定理とリウビル方程式

リウビルの定理

再び 4.1.3 節の 1 次元調和振動子を思い出そう。図 4.3 すなわち規格化する前の元の x と p_x の位相空間での軌跡を考える。ここで一点の軌跡を追うのでなく、点の確率分布を考え、その確率密度関数 $\rho(x, p_x)$ の動きを追う[17]。初期条件の情報が確率的にしかわからない状況は、統計力学ではよくあることである。

[17]一点の運動を追うということは確率密度関数が δ 関数すなわち $\rho(x, p_x) = \delta(x - x^0, p_x - p_x^0)$ となる場合であるが、その δ 関数の位置 (x^0, p_x^0) が時間とともにどう動くかを追うことである。

図 4.5 はその様子を概念的に描いたものである。初期時刻に x 軸上で負のところに示す濃淡のついた縦長の楕円は初期の $\rho(x, p_x)$ の分布を濃淡で表したものである。時間とともに $\rho(x, p_x)$ は動くので $\rho(t, x, p_x)$ と書いてもよい。調和振動子の場合それは p_x 軸上に来たときは横長の楕円になり、再び x 軸上の正の地点に来ると元と同じ縦長の楕円になる。図では確率分布を濃淡で表しているが、もしその分布が一様分布 — すなわち楕円の内側で一様確率で外側で確率が 0 — とすると、この楕円の形は横長になったり縦長になったりはするが、面積は変わらない。そのことは x と p_x を伸縮して規格化し円軌道にした位相空間では全ての点が等角速度 ω で回転することから明らかである。

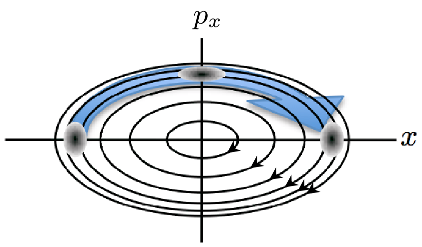

図 4.5: 1 次元調和振動子の位相空間上の確率密度分布の変化。

このことは一般的に言えるだろうか?　すなわち調和振動子に限らず一般に

- 位相空間上で初期の点が何らかの形状をした有限の領域で一様分布しているとして、正準方程式を満たしつつ時間とともに動くとき、その形状は変われど領域の体積は変わらない

と言えるだろうか? 系が散逸的でなければこれが言えるというのがリウビルの定理（Liouville's theorem）である[18]。これが言えれば、微小領域に分けて重みを付けた確率密度分布としても、それぞれの微小領域の体積は変わらない。あるいはもう少し確率論的表現をとるならば、位相空間上での測度（measure）は系の自然な運動に伴って変わることはない。それを示そう。

(4.133) の両辺は行列なので、その行列式をとる。行列 A の行列式を $|A|$ と書くと

$$|J| = |M| \cdot |J| \cdot |M^{\mathrm{t}}| = |M|^2 \cdot |J| \tag{4.134}$$

となるので、$|M| = \pm 1$ である。ところで M は $\mathrm{d}\mathbf{w}$ から $\mathrm{d}\mathbf{W}$ への変換行列であったから、その行列式は変換前の位相空間の体積素片 $\mathrm{d}q_1 \cdots \mathrm{d}q_n \mathrm{d}p_1 \cdots \mathrm{d}p_n$ から変換後の位相空間の体積素片 $\mathrm{d}Q_1 \cdots \mathrm{d}Q_n \mathrm{d}P_1 \cdots \mathrm{d}P_n$ への伸縮率であるヤコビアンそのものである。すなわち

$$\int \mathrm{d}Q_1 \cdots \mathrm{d}Q_n \mathrm{d}P_1 \cdots \mathrm{d}P_n = \int |M| \, \mathrm{d}q_1 \cdots \mathrm{d}q_n \mathrm{d}p_1 \cdots \mathrm{d}p_n \tag{4.135}$$

である。今の場合 $|M| = \pm 1$ であるが、単なる変数変換なら $|M|$ が -1 ということもあり得る。これは図形を裏返しにするような変換である。3 次元の場合右ネジを左ネジにするような変換であり、それを多次元に一般化したものである。しかし今は系の運動とともに $\rho(q, p)$ は時間に対し連続的に変化して行くので、どこかの時刻で急に裏返しの図形にするようなダイナミクス — 物理的運動 — は考えられない。したがって $|M| = 1$ である。したがって、初期時刻の領域を D とするとき D の形は変化して行くわけだが

$$\int_{\mathrm{D}} \mathrm{d}q_1 \cdots \mathrm{d}q_n \mathrm{d}p_1 \cdots \mathrm{d}p_n \tag{4.136}$$

は運動の恒量となる。これがリウビルの定理である。

[18] 系が散逸的である場合は (4.59) のような時間に依存するハミルトニアンを使うと、この面積は小さくなって行き、調和振動子の場合初期条件によらず最終的には $x = p_x = 0$ の原点に収まってしまう。なお量子力学の場合は x と p_x の間に不確定関係があるため、散逸があっても、時間が経っても最終的に面積は一定値となる。

リウビル方程式

「位相空間の領域 D は自然な運動によって形を変えても体積は変わらない」という様子は、流体力学において「3 次元空間内の流体の領域 D は流れと共に形を変えても体積は変わらない」のと同じである[19]。このことは $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t = 0$ と表現される[20]。したがって

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial\rho}{\partial q_j}\frac{\mathrm{d}q_j}{\mathrm{d}t} + \sum_j \frac{\partial\rho}{\partial p_j}\frac{\mathrm{d}p_j}{\mathrm{d}t} \quad = \quad 0 \tag{4.137}$$

この 2 番目の等式にハミルトンの運動方程式を適用すると、

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial\rho}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \sum_j \frac{\partial\rho}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j} = 0 \quad \text{すなわち} \quad \frac{\partial\rho}{\partial t} = \{H,\rho\} \tag{4.138}$$

が得られる。これをリウビル方程式（Liouville's equation）と呼ぶ。これは $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t = 0$ の別表現である。$\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t = 0$ の意味するとことは、初期時刻に密度関数 $\rho(q,p)$ を仮定したときに ρ が大きな値の点 q,p もあれば小さな値の点もあるだろうが、任意の点から出発して質点の動きに乗って見れば、ρ の大きさは時間とともに変わらないことを言っている。一方、リウビル方程式は、位相空間の点 q,p を固定して定点観測した場合、ρ の時間変化は（その時刻における）$\{H,\rho\}$ の値に一致することを言っている。

もう一つ、リウビル方程式と (4.83) 式 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F = \{F,H\}$ の類似性にも言及しておく。右辺の H の位置が (4.138) と逆になっている。(4.83) 式は質点（一つまたは複数）の運動に伴う物理量 F の時間変化を表す方程式である。ρ は密度関数であって物理量ではない[21]ので (4.83) 式を満たす必要はない。なお量子力学ではポアソンの括弧式を量子力学の交換子に換え、左辺に $\mathrm{i}\hbar$ を付ける。こうしてできる $\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F = [F,H]$ がハイゼンベルクの運動方程式であり、 $\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho = [H,\rho]$ がシュレーディンガー方程式である[22]。

---

[19] これは液体のように非圧縮性流体の場合で、気体のように圧縮性流体の場合は運動とともに体積も変わり得る。

[20] 圧縮性流体も含めた連続の式 $\frac{\partial}{\partial t}\rho + \mathrm{div}(\rho\mathbf{v}) = 0$（書き換えると $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho + \rho\ \mathrm{div}\ \mathbf{v} = 0$）において非圧縮性条件 $\mathrm{div}\ \mathbf{v} = 0$ を使うと得られる。

[21] どちらも q と p の関数の形をとるが、ρ はそのような q と p が実現される確率密度なので情報の曖昧さを分布で表したものだが、F は q と p が確定したとき計算される角運動量や運動エネルギーなどの力学変数である。

[22] (4.138) の $\partial/\partial t$ がシュレーディンガー方程式では $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ になっているが、量子力学では q と p を同時に精密に指定することはできないので、ρ を位相空間上の密度関数という形では表さず、考えられる全ての状態の重ね合わせあるいは確率的混合の係数の時間変化という形で表現する。したがってシュレーディンガー描像では位相空間上の定点で（あるいは軌跡上の動きに沿って）状態変化を見るという見方をせず、状態変化に含まれる情報の中に、古典的極限として軌跡上の動きが含まれているのである。