力学２演義アドヴァンスト 問題９ 2018/6/12

担当教員：富田 賢吾 （宇宙地球科学専攻 tomida@astro-osaka.jp 居室：F616）

TA：荒田 翔平（arata@astro-osaka.jp 居室：F624）

仲田 祐樹（nakata@astro-osaka.jp 居室：F617）

今日のテーマ：正準変換、ポアソン括弧

ポアソン括弧を以下で定義する（符号を逆にとる場合もある）：

$$\{f, g\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)$$

問１ [正準変換]

正準変換とは正準方程式を不変に保つ変換であった。正準方程式は変分原理によって求められた。

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) \right] dt, \qquad S' = \int_{t_0}^{t_1} \left[\sum_i P_i \dot{Q}_i - H'(Q, P, t) \right] dt$$

新しい変数でも正準方程式が成立するには S' と S の間に変分の結果消えるような項があってもよい。これは $S - S'$ の被積分関数が時間の全微分になっていれば良い：

$$S - S' = \int_{t_0}^{t_1} \frac{dF}{dt} dt = F(t_1) - F(t_0) \tag{1}$$

となっていれば、これは変分の結果端点条件から消える[*1]。

(1) F が q,Q,t の関数 $F(q_i, Q_i, t)$ の時を考える。上の式の被積分関数

$$\left[\sum_i (p_i \dot{q}_i - P_i \dot{Q}_i) - \{H(q, p, t) - H'(Q, P, t)\} \right] dt = dF$$

を計算し、dq_i, dQ_i, dt の係数を比較してそれらが満たすべき条件を求めよ。

(2) $F_2 = F_2(q, P, t)$ の時はどうか。$F = F_2 - \sum_i P_i Q_i$ を上式に代入すれば dQ が消えて q, P が独立変数となる（ルジャンドル変換）。$F_3 = F_3(p, Q, t)$, $F_4 = F_4(p, P, t)$ についても調べよ。[*2]

問２ [シンプレクティック条件]

自由度 N の系の座標と運動量を全て並べたベクトル $\mathbf{r} \equiv (q_1, ..., q_N, p_1, ..., p_N)$ を考える。

(1) これを用いて正準方程式を $\dot{r_i} = J_{ij} \frac{\partial H}{\partial r_j}$ と書いた時、行列 $\mathbb{J}$ を具体的に求めよ。また $\mathbb{J}$ が $\mathbb{J}^T = \mathbb{J}^{-1}$, $\mathbb{J}^2 = -\mathbb{I}$ を満たすことを確かめよ（$\mathbb{I}$ は単位行列）。

(2) $\mathbf{r}$ を位相空間での場と見なし、その「速度場」$\dot{\mathbf{r}}$ の位相空間での発散：$\nabla \cdot \dot{\mathbf{r}} \equiv \frac{\partial \dot{r_i}}{\partial r_i}$ を計算せよ。

(3) 正準変換によって得られた新しい正準変数を同様に $\mathbf{R}$ とする。正準方程式は $\dot{R}_i = J_{ij} \frac{\partial H}{\partial R_j}$ となる。$M_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial r_j}$ として、$\mathbb{M}\mathbb{J}\mathbb{M}^T = \mathbb{J}$ および $\mathbb{M}^T \mathbb{J} \mathbb{M} = \mathbb{J}$ が成立することを示せ。[*3] また $\det \mathbb{M}$ を求めよ（これは正準変換が位相空間での体積を変えないことを示している）。

(4) 上式を具体的に計算し、(q, p) でのポアソン括弧 $\{Q_i, Q_j\}, \{Q_i, P_j\}, \{P_i, Q_j\}, \{P_i, P_j\}$ を求めよ。この結果は正準変換の必要十分条件であり、ポアソン括弧だけで正準変換かどうかわかる。

(5) ポアソン括弧 $\{f, g\}$ を $\mathbf{r}$ と $\mathbb{J}$ を用いて表せ。

[*1] 時間を動かすような変換に対しても一般化できる。

[*2] これらの関数は、関数を与えると変換が決まるため正準変換の母関数と呼ばれる。この計算については次回以降に。

[*3] これらはシンプレクティック条件と呼ばれ、正準変換であることの必要十分条件になっている。

問３ [ポアソン括弧]

ポアソン括弧は量子力学における演算子の「交換関係」に対応しており、様々な性質がある。

(1) ある物理量 f の時間全微分が $\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}$ となることを示せ（H はハミルトニアン)。このことから、f が時間に陽に依らず $\left(\frac{\partial f}{\partial t} = 0\right)$、$\{f, H\} = 0$ ならば f は保存することがわかる。

(2) Jacobi の恒等式 $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$ が成立することを示せ。

(3) f,g が保存量の時 $\{f, g\}$ も保存することを示せ。 ヒント：$\frac{d}{dt}\{f, g\} = \{\frac{df}{dt}, g\} + \{f, \frac{dg}{dt}\}$ を示す。(1)(2) を使う。偏微分と全微分を混同しないこと。

(4) デカルト座標での質点の運動量・角運動量の各成分を p_i、$l_i (i = x, y, z)$ で表す。以下の量を計算せよ。(a) $\{l_i, p_j\}$ (b) $\{l_i, l_j\}$

(5) 中心力ポテンシャルで運動する 1 粒子のハミルトニアン $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{GMm}{r}$ を考える。Lenz ベクトル $\mathbf{A} = \frac{1}{Gm^2M}\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \frac{\mathbf{r}}{r}$ が保存することを示せ[*4]。

＊問４ [数値計算法]（時間内に扱わなかった場合はレポート課題）

ある時刻 t から $t + \Delta t$ への正準方程式に従った運動は、未来の時刻においてもその変数が正準方程式を満たすことから正準変換と考えることができる（次回以降また扱う)。

正準方程式を数値計算するには、最も単純にはテイラー展開の一次の項だけを考えればよいだろう。これを新しい変数と見なす：$Q_i = q_i(t + \Delta t) \simeq q_i + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $P_i = p_i(t + \Delta t) \simeq p_i - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q_i}$。

(1) $\{Q_i, P_j\}$ を計算せよ。その結果から数値計算誤差が時間刻み Δt にどう依存するか考察せよ。

(2) 簡単のため自由度 1 で時間に陽に依存しないハミルトニアン $H = T(p) + U(q)$ を考える。離散化を $Q = q + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p}(p)$, $P = p - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q}(\underline{Q})$ と修正したものは正準変換であることを示せ[*5]。

(3) [発表の対象とはしないが、出来に応じて加点する] 数値シミュレーションでは上記のような「座標変換（時間推進)」を繰り返し適用することで時間発展を計算する。調和振動子 $H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$ について実際に上記の単純なテイラー展開に基づくもの（前進オイラー法）と修正したもの（1 次シンプレクティック法）の数値計算プログラムを実装し、適当な（非自明な）初期条件を仮定して例えば 10 周期計算し、エネルギーの時間発展を調べよ。また時間刻みを変えてその影響を見よ。更に解析解との比較も行うこと。ただしプログラムは C,C++ や Fortran, Java, Python, Perl などのプログラミング言語で作成し、数値計算ライブラリ等を使用せず計算部分を全て自分で実装すること。また完全に動作するものであること（不完全なものは受け付けない)。プログラムとエネルギーの時間発展のグラフ及び考察を他の問題とは別の用紙で提出すること。余裕があれば更に高次精度のリープフロッグ法やルンゲクッタ法等の実装も試み、結果を比較せよ。

[*4] これは確かに保存量であるが、他の保存量と独立ではないので系の自由度を超える新しい保存量が見つかったというわけではない。例えば $\mathbf{A} \cdot \mathbf{L}$ を計算してみよ。

[*5] 下線部に注意。このような数値積分法をシンプレクティック法と呼び（離散化によって本来のハミルトニアンから少しずれた）ハミルトニアンを保存するという優れた性質がある。実際にはより高次精度化したものが用いられる。