１位相空間

Hを習う前：系の運動を調べるとは、

座標$q(t)$の時間依存性(時間発展)を求めることでした

Hを習った後：運動量と座標が独立変数なので、

二つの独立変数間の関係から何か新しいことがわからないでしょうか？

実は、$E=H(q,p)$がどのような曲線(曲面)になるかを調べると、いろいろなご利益があることがすぐにわかります。

この(q,p)の座標系のことを「位相空間」と言います。

・1つの質点が1次元運動、二次元(x,p)

・n質点のD次元運動、$2\times n\times D$次元、「超空間」

多次元空間でのエネルギー保存の方程式$E=H(x,y,p_x,p_y)$は

「超曲面」を表します。

２ 位相空間を考えるご利益

〔その一〕

$E=H(x,y,\cdots p_x,p_y\cdots)$は、運動方程式を解くこと無しに、直ちに系の運動の軌跡がどのような面を通るかという情報を与えてくれます。軌跡そのものは正準方程式を解かないと得られませんが、軌跡がどのような面を通っているかはわか

るのです。

〔その二〕

一旦、初期条件$\left(q(t_0), p(t_0)\right)$を与えてしまえば、それ以後の運動は正準方程式から一意的に完全に決まります。超空間で１つの点を指定するだけで、１つの運動が決まってしまうのです。

$\begin{cases} \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \\ \dot{q} = +\frac{\partial H}{\partial p} \end{cases}$ より、$\begin{cases} p(t+\Delta t) \approx p(t) - \frac{\partial H}{\partial q}\Delta t \\ q(t+\Delta t) \approx q(t) + \frac{\partial H}{\partial p}\Delta t \end{cases}$ のように次々と求まるわけです。

〔その三〕

ですから、曲線$\left(p(t), q(t)\right)$は通常、特異点を除いて交わることがない、ということが直ちにわかります。交点があるということは、交わった所以降の運動は一意的に決まらないということになってしまうからです。

⇒これは後で使います。

（特異点とは、たとえば質点が山の頂上に静止した状態があてはまります。どちらに転げ出すかわからないのです。）

３具体例

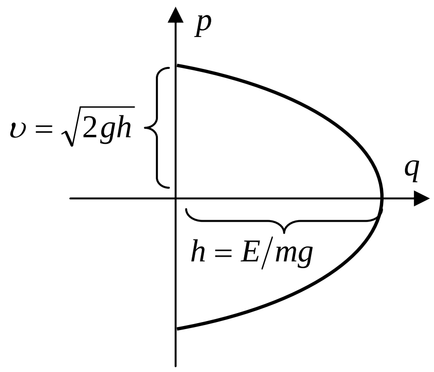
この$\left(q(t), p(t)\right)$の空間は位相空間と呼ばれます。具体的な運動の例を示します

絵に描けるのは二次元なので「一粒子の一次元運動」です。

３-１-(A) 静止している質点 —— $(q,0)$の点です。

３-１-(B) 自由な質点 —— $(\upsilon t, p) = (pt/m, p)$ の水平な直線です。

３-１-(C) 一様重力場の一次元運動は、$H = \dfrac{p^2}{2m} + mgq$ ですから(座標は上向きを正にとっています)、軌跡は $\left(q, \sqrt{2m(E - mgq)}\right)$ で、横向き(⊃)の放物線です。



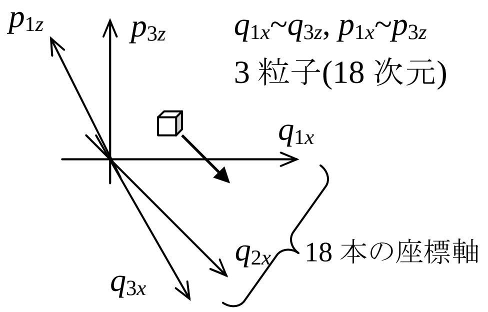
３-１-(D) 調和振動子 $H = \dfrac{p^2 + q^2}{2}$ では、明らかに軌跡は楕円(又は円)です。

３-１-(E) 非調和振動である $H = \dfrac{p^2 + q^{2n}}{2}$ でも、単純な三角関数ではないにしろ、なにか振動していることがわかります。$n \to \infty$ では、二つの壁に挟まれた質点が反射を繰り返すことに対応し、軌跡は四角形です。

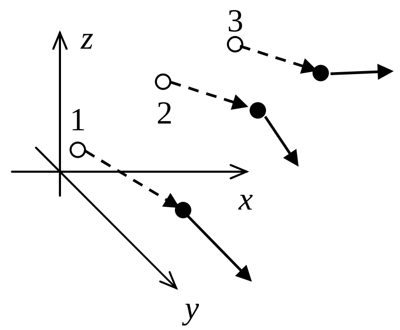
４　二次元以上の位相空間—超空間

４-１ ‘「ひとつの点」の示す意味

多体系では、超空間の中のひとつの点の位置 $(q_1, q_2, \cdots, p_1, p_2, \cdots)$ が、全粒子の座標と運動量を指定しています。その点が動くということは、全粒子が座標と運動量を変えるということです。



三つの粒子の運動を表す位相空間（18 次元）における一つの点の移動



3 つの粒子がそれぞれ、座標と運動量を変えて行く

４-２統計力学

統計力学で「膨大な粒子数の系」がどのように振舞うかを調べるのに、位相空間を使って議論することがあります。3 体問題が解けないのは知っている通りですが、多数の粒子が集まった系では、それぞれの 1 粒子の運動はわからなくとも、全体として何か判ることがあるのです。それを考えて行きます。

５リウビルの定理

位相空間で微小矩形を考えます。点$\left(q_1, q_2, \cdots, p_1, p_2, \cdots\right)$と、そこからわずかにずれた点$\left(q_1 + dq_1, q_2 + dq_2, \cdots, p_1 + dp_1, p_2 + dp_2, \cdots\right)$を対角とする「四角形」です。

1 次元運動であれば、$(q, p) \sim (q + dq, p + dp)$のホントの四角形です。2 次元運動で、既に 4 次元空間の超立方体(頂点は 2^4 =16 個)になってしまい、図には描けません。

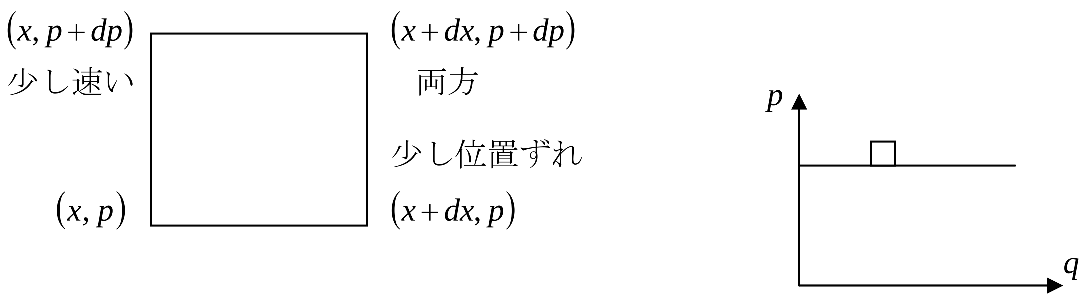
この超四角形の意味はいったいなんでしょうか。

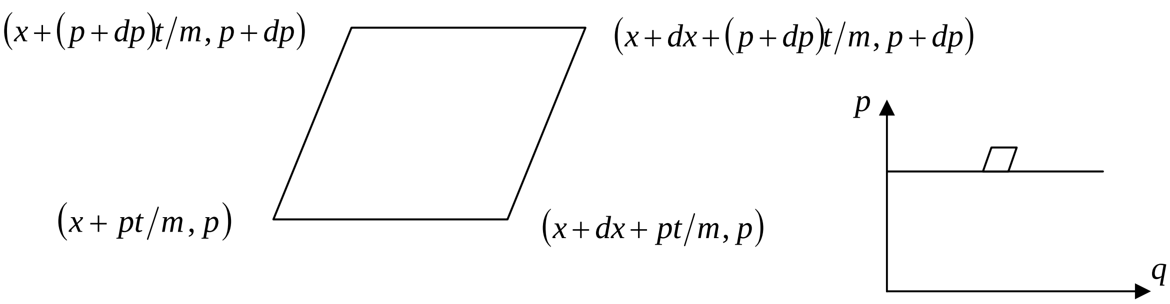
それは、その領域の中の状態は、$\left(q_1, q_2, \cdots, p_1, p_2, \cdots\right)$という状態と比較して、座

標と運動量がほんの少しずれている状態の集合と考えられます。このずれ幅は、運動と共に変化するでしょうか。等速直線運動であれば、初期状態

は、t 時間後には、$x \to x + pt/m$ などより、

と、平行四辺形にずれて行きます。しかし、底辺(x 軸)の長さは dx で、高さは、dp です。ですから面積は変わらないのです。座標と運動量のずれの積はいつまでたっても保存されるのです。運動によっては、平行四辺形などではなく、ぐにゃぐにゃした図形や、フラクタル図形になるかもしれません。それでもその面積は不変ということです。これを「*Liouville* の定理」と云います。





等速直線運動だけではちっとも定理の証明になっていませんので、正準方程式を使って証明してみることにしましょう。

６一般的な運動についての証明

四角形(q,p)，$(q,p+\Delta p)$，$(q+\Delta q,p)$，$(q,p+\Delta p)$の頂点が、短い時間δt後にどのような点に移るかを考えればよいのです。

６-１まず、(q,p)の変化は、

$$q \to q+\dot{q}\cdot\delta t = q+\frac{\partial H}{\partial p}(p,q)\cdot\delta t$$

$$p \to p+\dot{p}\cdot\delta t = p-\frac{\partial H}{\partial q}(p,q)\cdot\delta t$$

と簡単に表せ、$(q,p)\to\left(q+H_p\delta t,\ p-H_q\delta t\right)$と移動します。

６-２次に$(q+\Delta q,p+\Delta p)$の点はどうかと云うと、

$$\begin{aligned} p+\Delta p \to &= p+\Delta p-\frac{\partial H}{\partial q}(p+\Delta p,q+\Delta q)\cdot\delta t \\ &= p+\Delta p-\frac{\partial}{\partial q}\left(H(p,q)+\frac{\partial H}{\partial p}(p,q)dp+\frac{\partial H}{\partial q}(p,q)\Delta q\right)\cdot\delta t \\ &= p-H_q\cdot\delta t+\Delta p-H_{qp}\cdot\Delta p\cdot\delta t-H_{qq}\cdot\Delta q\cdot\delta t \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q+\Delta q \to q+\Delta q+\dot{q}\cdot\delta t &= q+\Delta q+\frac{\partial H}{\partial p}(p+\Delta p,\ q+\Delta q)\cdot\delta t \\ &= q+H_p\cdot\delta t+\Delta q+H_{pp}\cdot\Delta p\cdot\delta t+H_{pq}\cdot\Delta q\cdot\delta t \end{aligned}$$

となります。注）ΔpやΔqはハミルトニアンの引数の「ずれ」として効きます。

６-３片方だけずれた$(q+\Delta q,p)$は、ハミルトニアンの引数が違うので、上式とは少しだけ違って、

$$(q+\Delta q,p)\to\left(q+H_p\cdot\delta t+\Delta q+H_{pq}\cdot\Delta q\cdot\delta t,\ p-H_q\cdot\delta t-H_{qq}\cdot\Delta q\cdot\delta t\right)$$

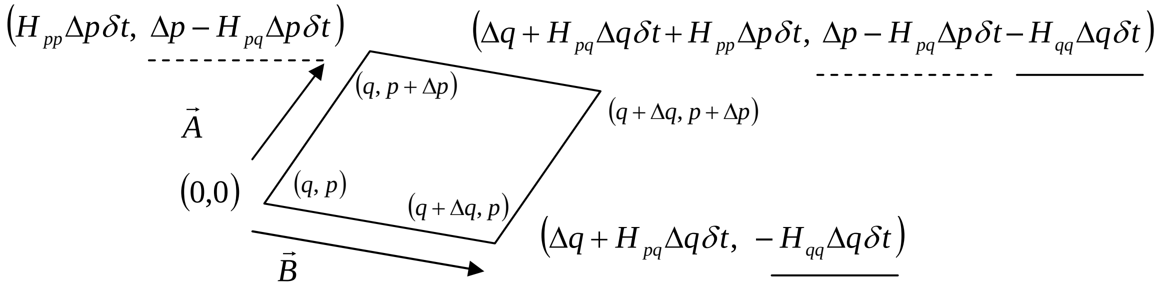
６-４最後は、$(q,p+\Delta p)$で、

$$(q,\, p+\Delta p) \rightarrow \left(q + H_p \cdot \delta t + H_{pp} \cdot \Delta p \cdot \delta t,\quad p - H_q \cdot \delta t + \Delta p - H_{pq} \cdot dp \cdot \delta t\right)$$

となります。

６-５以上の四つの座標をまとめると、

$(q,\, p)$の移動先$\left(q + H_p \delta t,\ \ p - H_q \delta t\right)$を原点とした相対位置は、



となってベクトル和を考えれば平行四辺形ということがわかります。

よって面積は$(0,0)$を挟む二辺のベクトルの外積ですから、

$$S = \left|\vec{A} \times \vec{B}\right| = \left(H_{pp}\Delta p\,\delta t,\ \ \Delta p - H_{pq}\Delta p\,\delta t\right) \times \left(\Delta q + H_{pq}\Delta q\,\delta t,\ \ -H_{qq}\Delta q\delta t\right)$$

$$= \left|\left(H_{pp}\Delta p\,\delta t\right)\cdot\left(-H_{qq}\Delta q\delta t\right) - \left(\Delta p - H_{pq}\Delta p\,\delta t\right)\cdot\left(\Delta q + H_{pq}\Delta q\,\delta t\right)\right|$$

ここでδtは微小量ですから、一次まで取ると、

$$\approx \left| O\left(\delta t^2\right) - \Delta p\Delta q + H_{pq}\Delta p\,\delta t \cdot \Delta q - \Delta p \cdot H_{pq}\Delta q\,\delta t - O\left(\delta t^2\right)\right|$$

$$= \Delta p\Delta q + O\left(\Delta t^2\right)$$

となって、元の面積と確かに一致します。

7　多次元の場合

念のため、「時間経過」を正準変換と見た時のヤコビアンも調べてみましょう。

ヤコビアンは微分体積要素の変換係数　$dq_1 \cdots dp_n = J \cdot dQ_1 \cdots dP_n$

ですから、J=1 であれば体積不変です。

多変数に一般化した形で書くと、$Q_i = q_i + \dot{q}_i \cdot \delta t,\ P_i = p_i + \dot{p}_i \cdot \delta t$ ですから、δt のオーダーの近似では、対角成分のみが残って、

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial Q_1}{\partial q_1} & \frac{\partial Q_1}{\partial q_2} & \cdots & \frac{\partial Q_1}{\partial p_n} \\ \frac{\partial Q_2}{\partial q_1} & \vdots & \cdots & \frac{\partial Q_2}{\partial p_n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{\partial P_n}{\partial q_1} & \frac{\partial P_n}{\partial q_2} & \cdots & \frac{\partial P_n}{\partial p_n} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1+\frac{\partial \dot{q}_1}{\partial q_1}\delta t & \frac{\partial \dot{q}_1}{\partial q_2}\delta t & \cdots & \frac{\partial \dot{q}_1}{\partial p_n}\delta t \\ \frac{\partial \dot{q}_2}{\partial q_1}\delta t & \vdots & \cdots & \frac{\partial \dot{q}_2}{\partial p_n}\delta t \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{\partial \dot{p}_n}{\partial q_1}\delta t & \frac{\partial \dot{p}_n}{\partial q_2}\delta t & \cdots & 1+\frac{\partial \dot{p}_n}{\partial p_n}\delta t \end{vmatrix} = 1 + \delta t \sum \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} + O\left(\delta t^2\right)$$

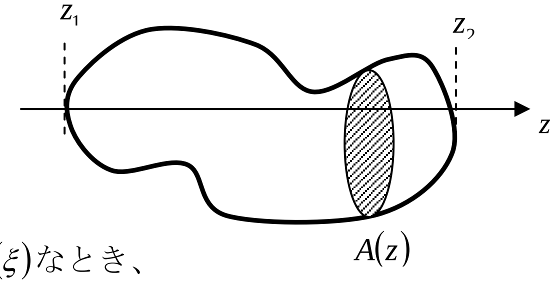
となります。Σ=0 はすぐにわかります。

∵正準方程式より、$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$ と $\dot{p} = \frac{\partial H}{\partial q}$ だからです。

よって、位相空間中の微小体積は時間変化しない―「リウビルの定理」

8【復習】N 次元空間の超体積

通常の体積は$V = \int_{z_1}^{z_2} dz A(z)$



N 次元空間での超体積が、

N+1 次元座標 $\xi = \xi_1 \sim \xi_2$ の間で有限 $\upsilon(\xi)$ なとき、

N+1 次元での超体積は、$V = \int_{\xi_1}^{\xi_2} d\xi\, \upsilon(\xi)$ です。

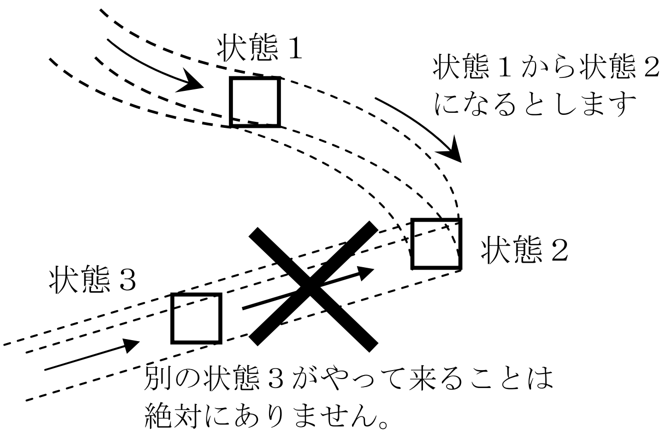
９ 位相空間中の微小体積の時間発展

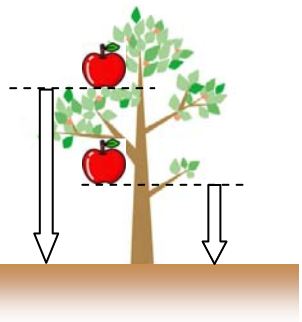
体積は厳密に一定である、ということがわかったのですが、箱の中に入れられた無数の分子が衝突を繰り返している場合などを考えると、ほんの少し時間経過しただけで、図形の形は原型をとどめていないでしょう。ここから、何か、感心するような結論が得られないでしょうか。実はありまして、

「初期条件が異なる状態から出発して、十分長い時間たつと、同じ状態になる、ということは通常あり得ない」

理由は初期条件のずれの面積が保存されるからです。

最初にずれがあれば、最後までずれが残るというわけです。



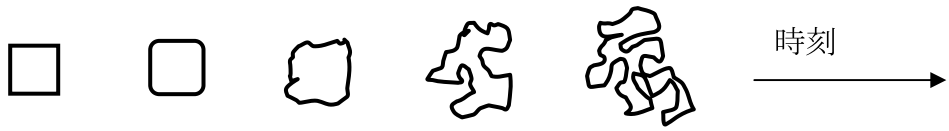


異なる高さから落ちたりんごは、地面で同じ状態になる？（答え：No）

異なる高さから地面に落下したりんごはどうなるんだ、同じ地面に落ちているではないか？、と言いたくなるかも知れませんが、それは、衝突の仕方によって、土とりんごの分子の熱エネルギーが少しずつ違っているのです。

１０カオス

保存されるのは面積で、形はいろいろ変化します。特に、最初の微小なずれが、くもの巣のように広がってしまう場合は、「カオス」と呼ばれています。

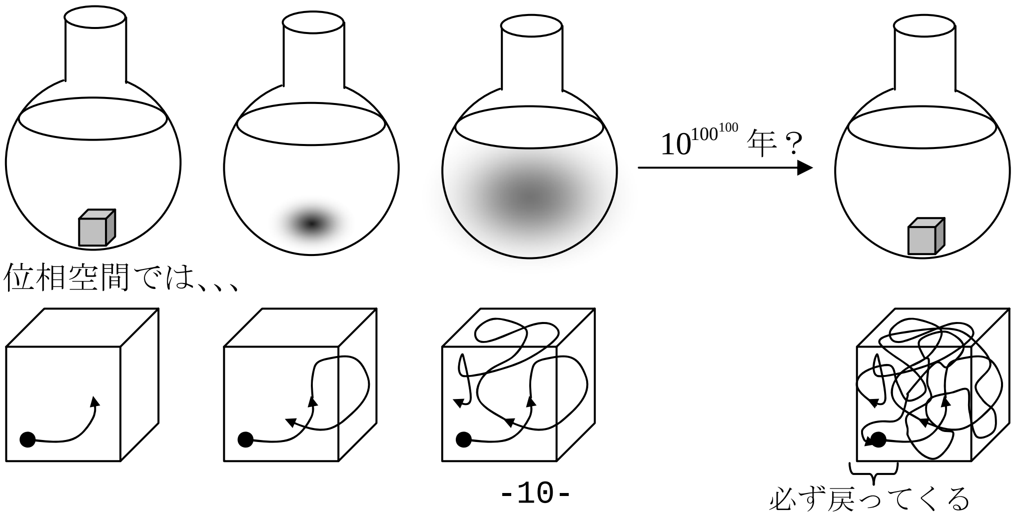


どんな形になっても面積は同じ

１１ポワンカレの再帰定理

有限の位相空間で運動している系(箱の中に閉じ込められた分子など、q も p も有限な場合)は、十分時間がたつと、必ず、最初の状態に戻る。

位相空間での軌跡は交わらないし、軌跡の幅(横幅ではなく、前後幅・横幅の積)は保存されるのですから、いつかはループ(複雑に絡まったループ)になります。これは「ポワンカレの再帰定理」と呼ばれます。気体を容器の上から注入すると、すぐに一様に広がりますが、しばらく待っていると、また上のほうに固まってしまう、ということです。もちろん、この「しばらく」が曲者で、宇宙の年齢よりもずっと長いのです、、、。



１２ 位相空間内の速度

時間経過とともに、位相空間内を軌跡が進んで行くスピードは必ずしも一定ではありません(等速直線運動のように、一定になる場合もあります)。調和振動子の場合だと、

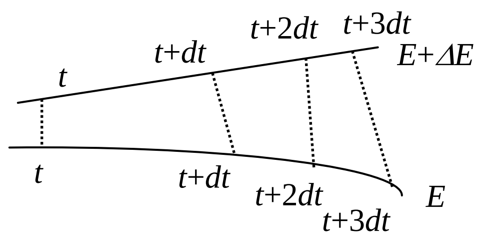
$$ds=\sqrt{(dx)^2+(dp)^2}=\sqrt{\dot{x}^2+\dot{p}^2}\,dt=\sqrt{H_p^2+H_x^2}\,dt=dt\sqrt{\left(\frac{p}{m}\right)^2+\left(m\omega_0^2 x\right)^2}$$

$$=dt\sqrt{\omega^2\sin^2\omega t+m^2\omega_0^4\cos^2\omega t}$$

ですから、曲線を進む速度$\dfrac{ds}{dt}$は明らかに一定ではありません。

それでは何が一定になるかというと、エネルギーが僅かに異なる運動の軌跡と、微小時間内に囲む面積が一定になります。

つまり、$E=H(p,q)$と$E+\Delta E=H(p,q)$の二本の曲線で囲まれた状態のうち、どの状態にその系が居るかは、どこでも一定です。



ちょうど、ケプラー問題（惑星の運動）に出て来る「面積速度一定の法則」と良く似ています。

これは統計力学で最も基本的な原理で「等重律の原理」と呼ばれます。

これを使うと、多粒子系で解けない(＝個々の粒子の運動が不明)問題であっても、

系全体を位相空間で積分してしまえばいろいろな量の平均値がわかるという結論が導かれます。A という物理量の平均値を計算しようとする場合、

本当は、$\langle A \rangle = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(t) dt$ を計算しなければいけませんが、これには、全ての粒子の座標と運動量の時間依存性を全て解いて、$A(t)$ を計算する必要があります。これは粒子数が多い場合は不可能なので、代わりに、位相空間 $\langle A \rangle = \frac{1}{h^{3N}} \int A\, dq_1 \cdots dq_{3N} dp_1 \cdots dp_{3N}$ で積分しても同じになるだろうと信じて、統計力学は成り立っています。頭のプランク定数は積分変数を微小量にする際に、$\Delta p \Delta q$ の積は無限に小さくは出来ないというハイゼンベルグの不確定性原理から出て来る量です。

〔補遺〕

１３　さて、次に、正準変換を行うと位相空間での軌跡はどのように変わるのでしょうか。正準変換ではポワッソンの括弧式が不変に保たれましたが、位相空間でも何かが不変に保たれるのでしょうか。実は、この位相空間の微小体積が保存されるのです。

それを、復習も兼ねて調和振動子に対するポワンカレ変換で見てみましょう。前にやった時は$m=\omega_0=1$でしたが、今回は一般的に$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega_0^2q^2}{2}$とします。ポワンカレ変換を行う前に、まず、軌跡が円になるようにします。まず、$q=\beta Q$と座標変換してみましょう。これが正準変換となるためには、すなおにポワッソンの括弧式を使って、

$$[P,Q]=\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p}-\frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial Q}{\partial q}=0\cdot 0-\frac{\partial P}{\partial p}\frac{1}{\beta}=-1$$

とならねばなりません。よって、$P=\beta p$と変換すればよいことがわかります(この、$q=\beta Q$と$p=Q/\beta$は、尺度変換とか、スケール変換と呼ばれます。この正準変換も明らかに体積保存しています)。これを代入すると、

$$H=\frac{P^2}{2m\beta^2}+\frac{m\omega_0^2\beta^2Q^2}{2}$$

ですから、「円」になるためには、$\frac{1}{m\beta^2}=m\omega_0^2\beta^2$でなければなりません。よって$\beta=\sqrt{m\omega_0}$と求まります。これもハミルトニアンに代入すると、無事に

$H=\frac{\omega_0}{2}\left(P^2+Q^2\right)$という形になります。

ちなみに今の正準変換の母関数は、$W' = W'(P,q) = \beta Pq\ (= W + PQ)$です。確かに、

$p = \dfrac{\partial W'}{\partial q} = \beta P$ と $Q = \dfrac{\partial W'}{\partial P} = \beta q$ が出てきます。

さて、ポワンカレ変換ですが、新変数を(E,θ)と書くと、

$P = \sqrt{2E}\sin\theta$ 、 $Q = \sqrt{2E}\cos\theta$

となります。母関数は$W = \dfrac{1}{2}Q^2\cot\theta$ です。前回やった時は、変数名を

$(p,q)\to(P,Q)$としましたが、今回は$(P,Q)\to(E,\theta)$です。単に名前が異なるだ

けですが、混乱しないようにしてください。

変換式を代入すると、 $H = \omega_0 E$ となり、正準方程式は、

$\dot{\theta} = \dfrac{\partial H}{\partial E} = \omega_0$　　です。

元のハミルトニアンでの位相空間での体積要素は$dpdq$で、正準変換後は$dEd\theta$

ですから、微分体積要素の変換は一般的にヤコビアンを使って、

$dqdp = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial q}{\partial E} & \dfrac{\partial q}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial p}{\partial E} & \dfrac{\partial p}{\partial \theta} \end{vmatrix} dEd\theta$ と書けます。$|\ |$の中身は行列式です。

ヤコビアンは、1 変数の変換$dx = \dfrac{dx}{dy}dy$を多次元にしたものです。極座標なら、

$$dxdy = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial r} & \dfrac{\partial x}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial y}{\partial r} & \dfrac{\partial y}{\partial \theta} \end{vmatrix} drd\theta = \begin{vmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{vmatrix} drd\theta = rdrd\theta$$

というわけです。

話を戻して、ポワンカレ変換$P = \sqrt{2E}\sin\theta$ 、 $Q = \sqrt{2E}\cos\theta$ の場合も、

$$dQdP = \begin{vmatrix} \frac{\partial Q}{\partial E} & \frac{\partial Q}{\partial \theta} \\ \frac{\partial P}{\partial E} & \frac{\partial P}{\partial \theta} \end{vmatrix} dEd\theta = \begin{vmatrix} \frac{\cos\theta}{\sqrt{2E}} & -\sqrt{2E}\sin\theta \\ \frac{\sin\theta}{\sqrt{2E}} & \sqrt{2E}\cos\theta \end{vmatrix} dEd\theta = \left(\cos^2\theta + \sin^2\theta\right) dEd\theta$$

と、確かに等しくなります。多次元の一般の正準変換の場合についても、直接証明できるのですが、面倒なので省略します。

１４ div =0

$$J=1+\left(\frac{\partial}{\partial q_1},\frac{\partial}{\partial q_2},\frac{\partial}{\partial q_3}\cdots\frac{\partial}{\partial q_n},\frac{\partial}{\partial p_1}\cdots\frac{\partial}{\partial p_n}\right)\bullet\left(\dot{q}_1,\dot{q}_2\cdots\dot{q}_n,\dot{p}_1,\cdots\dot{p}_n\right)$$

ということですから、これは、ベクトル$\left(\dot{q}_1\cdots\dot{p}_n\right)$の div です。但し、微分演算子は、$\left(q_1\cdots p_n\right)$の超空間のものです。div がゼロということは、「わきだし」や「吸い込み」が全く無い、ということで、リウビルの定理と一致します。もし、湧き出しがあったら、その周囲の体積は押しのけられて縮んでしまうからです。ですから、$\left(q_1\cdots p_n\right)$の点を、座標も運動量もすべて位相空間内の座標だと思ってそれがどういう速度$\left(\dot{q}_1\cdots\dot{p}_n\right)$で動いて行くか、という流体力学的な問題と考えると、この流体は圧縮できない、という結論が得られます。

１５「時間経過」は一種の正準変換

実際、$Q = q(t+\delta t)$、$P = p(t+\delta t)$という変換を考えると、

$$Q = q + \dot{q} \cdot \delta t = q + \frac{\partial H}{\partial p}\delta t$$

$$P = p + \dot{p} \cdot \delta t = p - \frac{\partial H}{\partial q}\delta t$$

ですから、ポワッソンの括弧式を計算してみると、

$$[P,Q] = \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial Q}{\partial q} = -\frac{\partial^2 H}{\partial q^2}\delta t\frac{\partial^2 H}{\partial p^2}\delta t - \left(1 - \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}\delta t\right)\left(1 + \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}\delta t\right) = -1 + O\left(\delta t^2\right)$$

と、確かに正準変換です。

注）この変換の母関数はハミルトニアンなのですが、変数が p,q なので、あれっと思うかも知れません。実は経過時間が微小であるとして、変数を p,q としても P,q としても同じであることを使うと、W' であるとして良いことがわかります。証明略。