

第8回 ポアソン括弧式

理学部 齊藤国靖*

2023年6月2日

古典力学におけるポアソン括弧式を導入し、物理量の時間発展や保存量がポアソン括弧式を使ってどのように表されるか説明する。特に、ハミルトニアンと保存量のポアソン括弧式は常にゼロであり、量子力学に登場する交換子と同じ役割を果たす点に注目して欲しい。また、ポアソン括弧式の値は正準変換によって不変であることも証明する。

1 ポアソン括弧式

一般座標, 一般運動量, 時間の関数 $u(q_i, p_i, t)$ と $v(q_i, p_i, t)$ に対して,

$$\{u, v\} \equiv \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i} \quad (1)$$

をポアソン括弧式という。但し, 式(1)の右辺の添え字 $i = 1, \dots, n$ に対してはアインシュタインの縮約記法を使っている点に注意しよう。式(1)の定義より,

$$\begin{aligned} \{u, u\} &= 0, \\ \{v, u\} &= -\{u, v\} \end{aligned}$$

であることが解る。さらに, 別の関数 $w(q_i, p_i, t)$ を加えて,

$$\{au + bv, w\} = a\{u, w\} + b\{v, w\}$$

であることも直ちに示せる。但し, a, b は定数である。また,

$$\{uv, w\} = v\{u, w\} + u\{v, w\}$$

も直接代入することで確かめることができる。これらポアソン括弧式の基本的な性質に加えて, ヤコビの恒等式

$$\{u, \{v, w\}\} + \{v, \{w, u\}\} + \{w, \{u, v\}\} = 0 \quad (2)$$

も便利な関係式である (証明略)。

* k.saitoh@cc.kyoto-su.ac.jp

1.1 例題 1

関数 $u(q_i, p_i, t)$ と $v(q_i, p_i, t)$ を具体的に決めて、ポアソン括弧式を計算してみよう。まず、

$$u = q_j, \quad v = q_k$$

の場合、ポアソン括弧式は

$$\{q_j, q_k\} = \frac{\partial q_j}{\partial q_i} \frac{\partial q_k}{\partial p_i} - \frac{\partial q_j}{\partial p_i} \frac{\partial q_k}{\partial q_i}$$

となる。ここで、一般座標と一般運動量は独立変数なので、

$$\frac{\partial q_k}{\partial p_i} = \frac{\partial q_j}{\partial p_i} = 0$$

である。よって、ポアソン括弧式の右辺第 1 項と第 2 項は共にゼロであり、

$$\{q_j, q_k\} = 0 \tag{3}$$

が成り立つ。

同様に、

$$u = p_j, \quad v = p_k$$

の場合、ポアソン括弧式は

$$\{p_j, p_k\} = \frac{\partial p_j}{\partial q_i} \frac{\partial p_k}{\partial p_i} - \frac{\partial p_j}{\partial p_i} \frac{\partial p_k}{\partial q_i}$$

となるが、やはり一般座標と一般運動量は独立変数なので、

$$\frac{\partial p_j}{\partial q_i} = \frac{\partial p_k}{\partial q_i} = 0$$

となり、結局

$$\{p_j, p_k\} = 0 \tag{4}$$

が成り立つ。

以上、式 (3) と (4) の様に、一般座標同士、一般運動量同士のポアソン括弧式はゼロである。

1.2 例題 2

次に、

$$u = q_j, \quad v = p_k$$

の場合を考える。ポアソン括弧式は

$$\{q_j, p_k\} = \frac{\partial q_j}{\partial q_i} \frac{\partial p_k}{\partial p_i} - \frac{\partial q_j}{\partial p_i} \frac{\partial p_k}{\partial q_i}$$

となる。先程と同様，一般座標と一般運動量は独立変数なので，

$$\frac{\partial q_j}{\partial p_i} = \frac{\partial p_k}{\partial q_i} = 0$$

であり，ポアソン括弧式の右辺第2項はゼロである。一方，ポアソン括弧式の右辺第1項のうち，一般座標同士の微分と一般運動量同士の微分はそれぞれ

$$\frac{\partial q_j}{\partial q_i} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}, \quad \frac{\partial p_k}{\partial p_i} = \begin{cases} 1 & (i = k) \\ 0 & (i \neq k) \end{cases}$$

である。よって， $i = 1, \dots, n$ のうち，上記の微分が共にゼロにならないのは $i = j = k$ のときだけである。従って，クロネッカーのデルタを使ってこれを表すと，ポアソン括弧式の右辺第1項は

$$\frac{\partial q_j}{\partial q_i} \frac{\partial p_k}{\partial p_i} = \delta_{jk}$$

となる（添え字 i に対しては和をとっているので， $1, \dots, n$ までのいずれの値もとれることに注意）。よって，

$$\{q_j, p_k\} = \delta_{jk} \quad (5)$$

が成り立つ。

同様に，

$$u = p_j, \quad v = q_k$$

の場合は

$$\{p_j, q_k\} = \frac{\partial p_j}{\partial q_i} \frac{\partial q_k}{\partial p_i} - \frac{\partial p_j}{\partial p_i} \frac{\partial q_k}{\partial q_i}$$

であるから，右辺第1項はゼロ，第2項は δ_{jk} となり，

$$\{p_j, q_k\} = -\delta_{jk} \quad (6)$$

が成り立つ。もちろん，ポアソン括弧式の性質を使って，

$$\{p_j, q_k\} = -\{q_k, p_j\} = -\delta_{kj}$$

と考えると同じである。

2 時間発展の表式

関数 $u(q_i, p_i, t)$ の時間に関する全微分

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial u}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial u}{\partial t}$$

を考える。右辺の時間微分 \dot{q}_i, \dot{p}_i に正準方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

をそれぞれ代入すると,

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial u}{\partial t}$$

となる. 右辺の第1項と第2項はポアソン括弧式を使って表すことができるので, 結局,

$$\frac{du}{dt} = \{u, H\} + \frac{\partial u}{\partial t} \quad (7)$$

と書くことができる.

関数 $u(q_i, p_i)$ が時間 t を陽に含まない場合,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0$$

なので, 式 (7) は

$$\frac{du}{dt} = \{u, H\} \quad (8)$$

となる. 例えば, $u(q_i, p_i) = q_i$ の場合,

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} \quad (9)$$

であり, $u(q_i, p_i) = p_i$ の場合,

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} \quad (10)$$

である. 式 (9) と (10) は正準方程式を書き直したもので, 実際にポアソン括弧式を計算しても確かめられる.

さらに, $u(q_i, p_i, t) = H$ を式 (7) に代入すると,

$$\{H, H\} = 0$$

なので,

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

となる. また, ハミルトニアンが時間 t を陽に含まない場合, 式 (8) より

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

となる. つまり, エネルギー保存則 $H = \text{const.}$ が得られる.

3 保存量との関係

関数 $u(q_i, p_i, t)$ が時間的に一定な保存量の場合,

$$\frac{du}{dt} = 0$$

であるから、式 (7) より、

$$0 = \{u, H\} + \frac{\partial u}{\partial t}, \quad \therefore \{H, u\} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (11)$$

が成り立つ。さらに、 $u(q_i, p_i)$ が時間を陽に含まなければ、

$$\{H, u\} = 0 \quad (12)$$

である。よって、ハミルトニアンと保存量のポアソン括弧式はゼロであることが解る。

ヤコビの恒等式 (2) を使うと、

$$\{H, \{u, v\}\} + \{u, \{v, H\}\} + \{v, \{H, u\}\} = 0 \quad (13)$$

が成り立つ。ここで、 $u(q_i, p_i)$ と $v(q_i, p_i)$ が共に時間を陽に含まない保存量であれば、式 (12) より、

$$\{H, u\} = \{H, v\} = 0$$

である。よって、式 (13) は

$$\{H, \{u, v\}\} = 0 \quad (14)$$

となり、これを保存量に対するポアソンの定理という。

4 正準変換との関係

正準変換によってポアソン括弧式の値はどの様に変化するであろうか。これを説明するため、位相空間内の点を次の $2n$ 次元ベクトル

$$\boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_n \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix} \quad (15)$$

で表す。また、ハミルトニアン H を一般座標および一般運動量で微分したものを

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial q_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial H}{\partial q_n} \\ \frac{\partial H}{\partial p_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial H}{\partial p_n} \end{pmatrix} \quad (16)$$

と表す。そこで、次の $2n \times 2n$ 行列

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} & & & 1 & & 0 \\ & & & & \ddots & \\ & \mathbf{0} & & & & \\ -1 & & & 0 & & 1 \\ & \ddots & & & & \\ 0 & & -1 & & \mathbf{0} & \end{pmatrix} \quad (17)$$

を導入すると、 q_i, p_i に対する $2n$ 個の正準方程式は

$$\dot{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}} \quad (18)$$

と表される。

式 (15) と同様に、 q_i, p_i を正準変換した新しい変数 Q_i, P_i についても

$$\boldsymbol{\zeta} = \begin{pmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_n \\ P_1 \\ \vdots \\ P_n \end{pmatrix} \quad (19)$$

を導入する。ここで、 Q_i, P_i が時間を陽に含まなければ、これらは元の変数 q_i, p_i の関数なので、 $\boldsymbol{\zeta}$ の各成分の時間微分は $\boldsymbol{\eta}$ の各成分を介して行われる。従って、 $\boldsymbol{\zeta}$ の i 番目の成分を ζ_i とすると、その時間微分は

$$\dot{\zeta}_i = \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j} \frac{d\eta_j}{dt} \equiv M_{ij} \dot{\eta}_j \quad (20)$$

と書ける。ここで、 M_{ij} は $2n \times 2n$ 行列の ij 成分を表しており、連続する添え字 $j = 1, \dots, 2n$ については和を取っていることに注意しよう（アインシュタインの縮約記法）。これをベクトルと行列の掛け算の形で書けば、

$$\dot{\boldsymbol{\zeta}} = \mathbf{M} \dot{\boldsymbol{\eta}} \quad (21)$$

となる。よって、右辺の $\dot{\boldsymbol{\eta}}$ に正準方程式 (18) を代入すれば、

$$\dot{\boldsymbol{\zeta}} = \mathbf{M} \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}} \quad (22)$$

となるのが解る。

次に、第 11 回の正準変換の例を思い出そう。正準変換の母関数が $F_1(q_i, Q_i, t)$ で与えられた場合、ハミルトニアン H は

$$K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

に変換される。もし母関数 $F_1(q_i, Q_i)$ が時間を陽に含まなければ

$$K = H$$

となり、変換によってハミルトニアンは不変である。一般に、母関数が時間を陽に含まなければ、変換後のハミルトニアンは不変である。この様な場合を考えると、変換後の変数 Q_i, P_i に対する正準方程式は式 (18) と同様に

$$\dot{\zeta} = \mathbf{J} \frac{\partial K}{\partial \zeta} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \zeta} \quad (23)$$

と表される。但し、変換によってハミルトニアンは不変 $K = H$ であることを用いた。一方、変換後のハミルトニアンは新しい変数 Q_i, P_i の関数であるはずだから、連鎖律により

$$\frac{\partial H}{\partial \eta_i} = \frac{\partial H}{\partial \zeta_j} \frac{\partial \zeta_j}{\partial \eta_i} = \frac{\partial H}{\partial \zeta_j} M_{ji}$$

となる。但し、最後の M_{ji} は式 (20) にある M_{ij} の添え字を入れ替えたものに等しい。従って、ベクトルと行列の掛け算の形で書けば、

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \mathbf{M}^T \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\zeta}} \quad (24)$$

となる。よって、これを式 (22) に代入すれば、

$$\dot{\boldsymbol{\zeta}} = \mathbf{M} \mathbf{J} \mathbf{M}^T \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\zeta}} \quad (25)$$

となる。この式を式 (23) と比較すれば、

$$\mathbf{J} = \mathbf{M} \mathbf{J} \mathbf{M}^T \quad (26)$$

であることが解る。

行列 \mathbf{J} を使うと、ポアソン括弧式の定義式 (1) は

$$\{u, v\}_{\boldsymbol{\eta}} = \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}} \right)^T \mathbf{J} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}} \quad (27)$$

と書ける。実際、

$$\mathbf{J} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v}{\partial p_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial v}{\partial p_n} \\ -\frac{\partial v}{\partial q_1} \\ \vdots \\ -\frac{\partial v}{\partial q_n} \end{pmatrix}$$

なので, 式 (27) の右辺は

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{J} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}} &= \left(\frac{\partial u}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial q_n}, \frac{\partial u}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial p_n}\right) \begin{pmatrix} \frac{\partial v}{\partial p_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial v}{\partial p_n} \\ -\frac{\partial v}{\partial q_1} \\ \vdots \\ -\frac{\partial v}{\partial q_n} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\partial u}{\partial q_1} \frac{\partial v}{\partial p_1} + \dots + \frac{\partial u}{\partial q_n} \frac{\partial v}{\partial p_n} - \frac{\partial u}{\partial p_1} \frac{\partial v}{\partial q_1} - \dots - \frac{\partial u}{\partial p_n} \frac{\partial v}{\partial q_n} \\
&= \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i} \tag{28}
\end{aligned}$$

となり, ポアソン括弧式に一致する. 但し, 最後にアインシュタインの縮約記法を用いた. 正準変換により, 関数 $u(q_i, p_i, t), v(q_i, p_i, t)$ が ζ の関数 $u(Q_i, P_i, t), v(Q_i, P_i, t)$ になるとすると, 連鎖律により

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial \eta_i} &= \frac{\partial u}{\partial \zeta_j} \frac{\partial \zeta_j}{\partial \eta_i} = \frac{\partial u}{\partial \zeta_j} M_{ji}, \quad \therefore \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \mathbf{M}^{\mathrm{T}} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\zeta}} \\
\frac{\partial v}{\partial \eta_i} &= \frac{\partial v}{\partial \zeta_j} \frac{\partial \zeta_j}{\partial \eta_i} = \frac{\partial v}{\partial \zeta_j} M_{ji}, \quad \therefore \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \mathbf{M}^{\mathrm{T}} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\zeta}}
\end{aligned}$$

であるから, これらを式 (27) に代入すると

$$\begin{aligned}
\{u, v\}_{\boldsymbol{\eta}} &= \left(\mathbf{M}^{\mathrm{T}} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\zeta}}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{J} \mathbf{M}^{\mathrm{T}} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\zeta}} \\
&= \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\zeta}}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{M} \mathbf{J} \mathbf{M}^{\mathrm{T}} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\zeta}} \\
&= \left(\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\zeta}}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{J} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\zeta}} \\
&= \{u, v\}_{\boldsymbol{\zeta}} \tag{29}
\end{aligned}$$

となる. 但し, 式 (26) により $\mathbf{M} \mathbf{J} \mathbf{M}^{\mathrm{T}} = \mathbf{J}$ を使い, 式 (27) と同様, 変換後の変数 ζ によるポアソン括弧式の定義式を用いた. 従って, 正準変換によってポアソン括弧式の値は不変であることが解った.