§14　位相空間と Liouville の定理

単純な系を考えて，２f 個の正準変数$(q_{1,}q_2,.....,q_f;p_{1,}p_2,.....,p_f)$で指定される位相空間の重要性を，f 個の座標変数$(q_{1,}q_2,.....,q_f)$で指定する配位空間と対比させて，再度考える．正準変換の Jacobian（函数行列式）は１であることを述べる．

１）位相空間と配位空間での軌跡と位相空間体積の時間変化

f 個の座標変数$(q_{1,}q_2,.....,q_f)$で指定する配位空間と，２f 個の正準変数$(q_{1,}q_2,.....,q_f;p_{1,}p_2,.....,p_f)$で指定する位相空間の違いについては既に述べたが，ここでは位相空間の重要性を示す例をのべ，これに関連した Liouville（リュービル）の定理について補足する．$(q_{1,}q_2,.....,q_f;p_{1,}p_2,.....,p_f)$次元の位相空間の各点は，その力学系の運動状態に対応している，運動するにつれて系を表す点は位相空間内に線を描いてゆくが，この軌跡は位相軌跡と呼ばれる．位相空間での軌跡は，配位空間での軌跡に比べ，運動の全体の姿を的確に表現する．位相空間体積の形は時間変化するが，その体積は時間変化しないことも理解できる．簡単な例でこれを見てみる．

＜自由粒子＞

一次元における質量 m の自由粒子の運動では，Hamiltonian は，

$H=\dfrac{p^2}{2m}$ であるから，正準運動方程式から，$\dot{x}=\dfrac{\partial H}{\partial p}=\dfrac{p}{m}$，$\dot{p}=-\dfrac{\partial H}{\partial x}=0$ である．

p は一定で任意であるから，位相軌跡は x 軸に平行な直線となる．p＞０の時は右向きに進む．p＜０の場合は，左に進む．もし，座標変数で指定する配位空間上の軌跡を考えると，全てが x 軸上の軌跡となり，右向きと左向きは区別されるが，全ての軌跡が同じ軸上で重なってしまう．しかし，(x，p）の位相空間では p の違いが，平行線の違いとして表される．

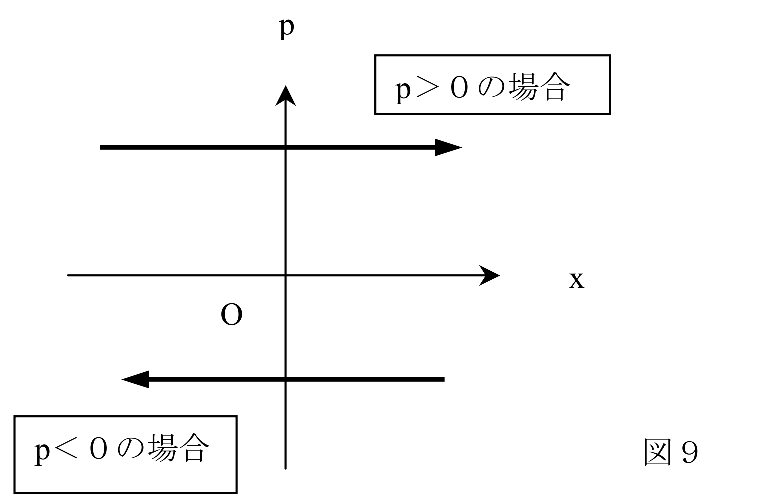

図９

次に，一粒子系の一次元自由粒子の　”位相空間体積”(実際は面積）について考えてみる．

$\dot{x}=\dfrac{\partial H}{\partial p}=\dfrac{p}{m}$，$\dot{p}=-\dfrac{\partial H}{\partial x}=0$　であるから，a,b を定数として　$p=a,\quad x=(p/m)t+b$

である．下図のように，$t=t_1=0$ で”位相空間体積（実際は面積)”O-ABC を

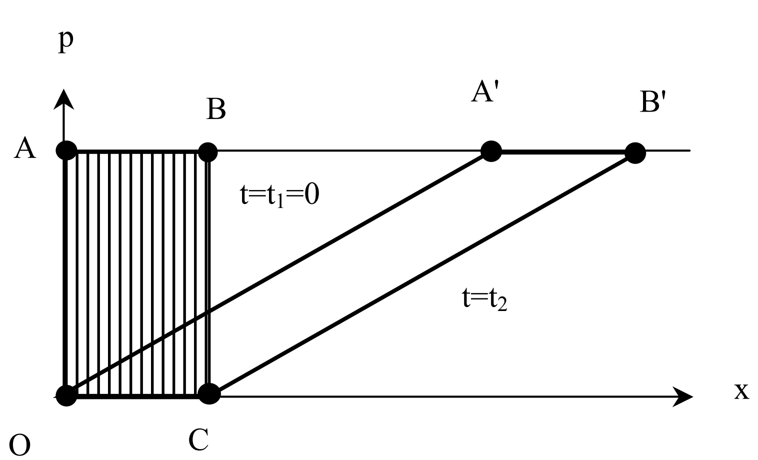

図１０

考えると，時間 $t=t_2$ でこの”位相空間体積（実際は面積)”は，　$p=a,\quad x=(p/m)t+b$

に従って形を変えて O-A'B'C となる．O,C は $t_1=0$ で $p=0$ であるから，x の値は t_2でも同じ値である．しかし，A,B は，$t_1=0$ で p が正定数であるので，x は時間とともに変化し， t_2で A', B'へと変化する．しかし，面積 O-ABC と面積 O-A'B'C は，平行四辺形の底辺と高さが等しいので，この“位相空間体積（実際は面積）”は，運動の過程で不変である．位相空間での形は変わるが，位相空間体積（実際は面積）は保存される．

＜調和振動子＞

質量 m，バネ定数 k の一次元調和振動子の Hamiltonian　は，既に述べたように，

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E$$

であり，全エネルギ−に等しく，時間に依らす一定である．正準方程式は,

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{1}{m}p, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx$$

である．　第一式を時間微分して第二式に代入して $\dot{p}$を消去すると, $\ddot{x} = -(k/m)x$　であり，この解は$x = A\cos(\omega t + \phi)$である．ただし，$\omega = \sqrt{k/m}$　であり、これは単振動の角振動数である．Aは振幅の定数、ϕ　は初期位相を表す定数である．

$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E$を書き換えると，$\frac{p^2}{(\sqrt{2mE})^2} + \frac{x^2}{(\sqrt{2E/k})^2} = 1$

となる．これは楕円の式であるから，位相軌跡は楕円で与えられる．x>0 の時，$\dot{p} < 0$　, x<0 の時，$\dot{p} > 0$ であるから，右回りに軌跡を描く．E が異なれば相似の楕円となるが，二つの楕円軌跡は交差しない．代表点がこの楕円を一周する時間 t は運動の周期 T である．これは，$2\pi = \omega t$を満足するから，$T = 2\pi/\omega = 2\pi/\sqrt{k/m}$.

振動数は，$\nu = 1/T = \sqrt{k/m}/(2\pi) = 1/\{2\pi\sqrt{m/k}\}$である．

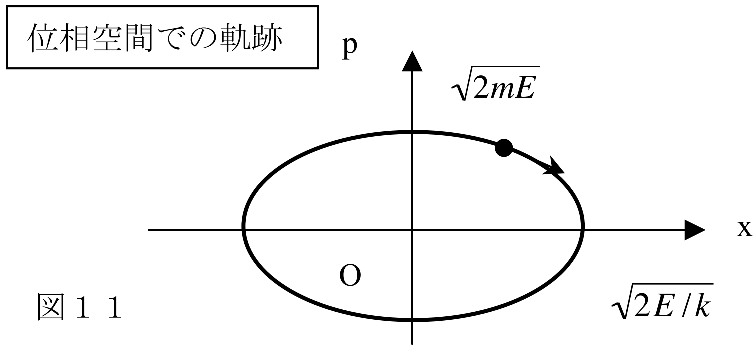

図１１

代表点の一周期の位相軌跡は楕円であるから，この閉曲線に沿った次の積分Jを考えると，

$$J = \oint p\delta q = \pi(\sqrt{2mE})(\sqrt{2E/k}) = 2\pi\sqrt{m/k}\cdot E = E/\nu$$

である．エネルギ−E，k，m が一定であるから，Jも一定となる．このJは，振動数は時間の逆数の次元を持つから，[J]=[energy]・[time]の次元となっている．

一方，配位空間での軌跡を考えると，次の図に示すように，x 軸上での往復振動になる．位相空間での運動軌跡の方が，はるかに運動の全体像を的確に表現していることが理解できる．

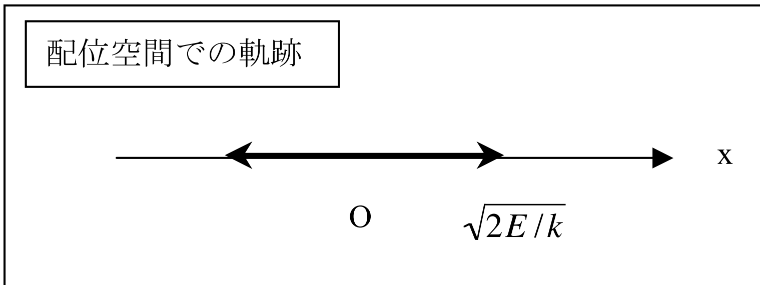

図１２

２）正準変換で不変な位相空間の体積積分

２f 個の全ての正準変数$(q_1,q_2,.....,q_f;p_1,p_2,.....,p_f)$の微分の積,

$$d\Gamma = dq_1 dq_2 .....dq_f dp_1 dp_2 .....dp_f \tag{1}$$

は，２f 次元位相空間の体積要素である．この位相空間の領域における体積積分

$$\int_v d\Gamma = \int .....\int\int dq_1 dq_2 .....dq_f dp_1 dp_2 .....dp_f \tag{2}$$

を考える．この体積積分が，$(q_1,q_2,..,q_f;p_1,p_2,..,p_f)\rightarrow(Q_1,Q_2,..,Q_f;P_1,P_2,..,P_f)$の変数変換が正準変換である時は，不変量であることは既に述べた．ここでは少し違う形で，**正準変換の Jacobian が１であること**に関連させて議論する．

体積積分が正準変換で不変であるとは，

$$\int_v d\Gamma = \int .....\int\int dq_1 dq_2 .....dq_f dp_1 dp_2 ....dp_f = \int .....\int\int dQ_1 dQ_2 .....dQ_f dP_1 dP_2 .....dP_f \tag{3}$$

が成立することである．しかし，既に述べたように，$(q_1,q_2,..,q_f;p_1,p_2,..,p_f)\rightarrow(Q_1,Q_2,..,Q_f;P_1,P_2,..,P_f)$と変数変換される場合は，旧変数の積分要素と新変数の積分要素の間には, Jacobian（函数行列式）を介して等号が成り立つ．この場合の Jacobian（函数行列式）を$|J|$と書いて，旧変数の積分要素を新変数の積分要素に変換する場合の Jacobian を使うと，一般的には，

$$dQ_1 dQ_2 .....dQ_f dP_1 dP_2 .....dP_f = |J|\cdot dq_1 dq_2 .....dq_f dp_1 dp_2 ....dp_f \tag{4}$$

である．もし，逆の形，即ち，旧変数の体積要素が新変数の体積要素で表せる場合は，(4)を逆に書いて，

$$dq_1 dq_2 .....dq_f dp_1 dp_2 ....dp_f = \frac{1}{|J|}\cdot dQ_1 dQ_2 .....dQ_f dP_1 dP_2 .....dP_f \tag{4'}$$

である．Jacobian（函数行列式）はただの数であるから逆数を取れば良い．従って，

”**体積積分が正準変換で不変**”

＝”**正準変換の Jacobian（函数行列式）が**$|J| = 1/|J| = 1$”

と言うことである．

以下でこれを確認するが，そのために，正準方程式を **行列形式** で書いておくと

便利であるので，まず，これについて述べる．

３）正準方程式の行列表示

自由度 f の力学的状態は，2f 個の正準変数$(q_{1,}, q_2, ...,q_f; p_{1,}, p_2, ..., p_f)$で指定される位相空間上の一点に相当している．正準方程式,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (i = 1,2,....,f) \tag{1}$$

を行列を用いてあらわすと，

$$\begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \cdot \\ \dot{q}_f \\ \dot{p}_1 \\ \cdot \\ \dot{p}_f \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial H}{\partial q_1} \\ \cdot \\ \dfrac{\partial H}{\partial q_f} \\ \dfrac{\partial H}{\partial p_1} \\ \cdot \\ \dfrac{\partial H}{\partial p_f} \end{pmatrix} \tag{2}$$

となる．**M**は（2fx2f）次元の係数行列であり，（fxf）次元の単位行列 I と（fxf）次元の零行列 O から作られる．次のようになる．

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{O} \end{pmatrix} \tag{3}$$

係数行列**M**が以下の性質をもつことは(3)から直ぐに判る．

$$\mathbf{M}^T = \mathbf{M}^{-1} = -\mathbf{M}, \qquad \det \mathbf{M} = 1 \tag{4}$$

2f 個の正準変数$(q_{1,}, q_2, ...,q_f; p_{1,}, p_2, ..., p_f)$を，$q_i, p_i$のように別の文字にして論ずると不便なことが多い．そこで，以下のように，q_i, p_iを一つの変数x_i $(i = 1,2,.....,2f)$で指定する．

$$x_r \equiv q_r \,, \qquad x_{f+r} = p_r \qquad (r = 1,2,.....,f) \tag{5}$$

同様に，これまでの正準変数Q_i, P_iの場合は，変数X_i $(i = 1,2,.....,2f)$を用いる．

$$X_r \equiv Q_r \,, \qquad X_{f+r} = P_r \qquad (r = 1,2,.....,f) \tag{6}$$

(2)の正準方程式および変数Q_i,P_iに関する正準方程式は,

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \cdot \\ \dot{x}_f \\ \dot{x}_{f+1} \\ \cdot \\ \dot{x}_{2f} \end{pmatrix} = \mathbf{M}\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial x_1} \\ \cdot \\ \frac{\partial H}{\partial x_f} \\ \frac{\partial H}{\partial x_{f+1}} \\ \cdot \\ \frac{\partial H}{\partial x_{2f}} \end{pmatrix} \quad (7\text{-}1), \qquad \begin{pmatrix} \dot{X}_1 \\ \cdot \\ \dot{X}_f \\ \dot{X}_{f+1} \\ \cdot \\ \dot{X}_{2f} \end{pmatrix} = \mathbf{M}\begin{pmatrix} \frac{\partial H'}{\partial X_1} \\ \cdot \\ \frac{\partial H'}{\partial X_f} \\ \frac{\partial H'}{\partial X_{f+1}} \\ \cdot \\ \frac{\partial H'}{\partial X_{2f}} \end{pmatrix} \quad (7\text{-}2)$$

となる.

$x_i \ \ (i=1,2,.....,2f) \rightarrow X_i \ \ (i=1,2,.....,2f)$の新旧正準変数の正準変換は,

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}(\mathbf{x}) \tag{8-1}$$

のことであるから，X 成分の時間微分を x 成分の時間微分で書くと,

$$\dot{X}_i = \sum_{j=1}^{2f} \frac{\partial X_i}{\partial x_j}\dot{x}_j \tag{8-2}$$

である．一方，(8-1)における X_i と x_j 間の Jacobian 行列で表現すると,

$$\mathbf{J} = \frac{\partial(X_1,...,X_{2f})}{\partial(x_1,...,x_{2f})} = \frac{\partial(X_\lambda)}{\partial(x_\mu)}, \qquad (\lambda,\mu = 1,2,.....,2f) \tag{9-1}$$

具体的に書けば,

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial X_1}{\partial x_1} & \frac{\partial X_1}{\partial x_2} & \bullet & \frac{\partial X_1}{\partial x_{2f}} \\ \frac{\partial X_2}{\partial x_1} & \frac{\partial X_2}{\partial x_2} & \bullet & \frac{\partial X_2}{\partial x_{2f}} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \frac{\partial X_{2f}}{\partial x_1} & \frac{\partial X_{2f}}{\partial x_2} & \bullet & \frac{\partial X_{2f}}{\partial x_{2f}} \end{pmatrix} \tag{9-2}$$

である．(8-2)の$\dfrac{\partial X_i}{\partial x_j}$を要素とする（2fx2f）次元の行列 Jacobian 行列であり，Jacobian 行列式を求める前の変数変換行列である.

(8-2)の変換が意味を持つためには，(9)の行列式が 0 でないこと ($\det J \neq 0$) が条件となっていることに注意．$\det J \neq 0$ であることから，逆行列 J^{-1} が存在していることを意味する．

(8-2)は，この Jacobian 行列を用いて次のように表現できる，

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{J}\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{JM}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \tag{10-1}$$

第二の等式には(7-1)を代入した．

一方，(8-1)を $\mathbf{x}$ について解いて，$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X})$ と考える．これは，

$$\dot{x}_i = \sum_{j=1}^{2f}\frac{\partial x_i}{\partial X_j}\dot{X}_j \quad \rightarrow \quad \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{J}'\dot{\mathbf{X}} \tag{10-2}$$

であるから，$\dfrac{\partial x_i}{\partial X_j}$ を要素とする行列 J’を考えることができる．この変数変換が意味を持つには $\det J' \neq 0$ でなければならないから，J'^{-1} が存在することも意味する．

(10-2)を(10-1)に代入すると，

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{J}(\mathbf{J}'\dot{\mathbf{X}}) = \mathbf{JJ}'\,\dot{\mathbf{X}} \quad \rightarrow \quad \mathbf{JJ}' = 1 \quad \rightarrow \quad \mathbf{J}' = \mathbf{J}^{-1} \tag{10-3}$$

である．

$H(\mathbf{x}) = H(\mathbf{x}(\mathbf{X}))$ を $\mathbf{X}$ の関数と見なすことにより，

$$\frac{\partial H}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{2f}\left(\frac{\partial H}{\partial X_j}\right)\left(\frac{\partial X_j}{\partial x_i}\right) \tag{11-1}$$

である．x_i を固定して，X_j に関する和を取るのであるから，(9)の $\mathbf{J}$ で列に関する和である，故に，(11-1)は $\mathbf{J}$ の転置行列，$\mathbf{J}^T$，を用いて次のように書ける．

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{J}^T\frac{\partial H}{\partial \mathbf{X}} \tag{11-2}$$

これを(10-1)に代入して，

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{J}\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{JMJ}^T\frac{\partial H}{\partial \mathbf{X}} \tag{12}$$

となる．これは(7-2)のことであるから，(12)の係数行列 $\mathbf{JMJ}^T$ は正準変換の係数行列 $\mathbf{M}$ でなければならない．　故に，

$$\mathbf{J}\mathbf{M}\mathbf{J}^T = \mathbf{M} \tag{13}$$

である．

一般に

$$\det(\mathbf{AB}) = \det\mathbf{A}\cdot\det\mathbf{B}, \qquad \det(\mathbf{A}^T) = \det\mathbf{A}$$

であること，さらに，$\det\mathbf{M} = 1$ であることに注意して，この両辺の行列式をとれば $(\det\mathbf{J})^2 = 1$ となる．これより

$$\det\mathbf{J} = 1 \tag{14}$$

であり．$\det\mathbf{J} = -1$ は採用できない解である．(14)は，前節に述べた$|J| = 1$のことである．

体積積分が正準変換で不変であるとは，前節で述べたように，

$$\int_v d\Gamma = \int .....\int\int dq_{1,} dq_2 .....dq_f dp_{1,} dp_2 ....dp_f = \int .....\int\int dQ_{1,} dQ_2 .....dQ_f dP_{1,} dP_2 .....dP_f$$

が成立することである． Jacobian（函数行列式）を$|J| = \det J$と書いて，旧変数の積分要素を新変数の積分要素に変換する場合の Jacobian を使うと，一般的には，

$$dQ_{1,} dQ_2 .....dQ_f dP_{1,} dP_2 .....dP_f = |J|\cdot dq_{1,} dq_2 .....dq_f dp_{1,} dp_2 ....dp_f$$

である． **”正準変換の Jacobian（函数行列式）は**$|J| = \det J = 1$**”**であるので**“体積積分は正準変換で不変”**となる． **Liouville の定理**である．

多粒子からなる力学系を考えた場合，系の全質量は当然保存されるので．位相空間における物質密度も保存される．もし，粒子数も保存されるのであれば，位相空間における粒子密度も保存されることとなる．

q_i, p_iのように別の文字にして 2f 個の正準変数$(q_{1,}, q_2, ...,q_f; p_{1,}, p_2, ...,p_f)$を論ずるのではなく， q_i, p_iを一つの変数x_i $(i = 1,2,.....,2f)$で指定することは，“q_i, p_iが混じり合った変数”と言う意味で，シンプレクテックな変数（symplectic variable）と呼ばれる．位相空間を統一的に記述する変数と言う意味である． 係数行列$\mathbf{M}$は，シンプレクテック行列と呼ばれる． (13)の$\mathbf{J}\mathbf{M}\mathbf{J}^T = \mathbf{M}$はシンプレクテック条件と呼ばれる．

４）無限小正準変換と力学系の時間発展

運動の時間変化を考えてみる．正準方程式に現れる全ての物理量は，その同一時刻に与えられるものである．ある時刻 t における $q_{i,}(t),p_{i,}(t)$ を正準変数，Hamiltonian を $H(q_i(t),p_i(t),t)$ とすると，正準方程式が成立する．同様に，時刻 t' で正準変数を $q_{i,}(t'),p_{i,}(t')$，Hamiltonian を $H(q_i(t'),p_i(t'),t')$ として，やはり正準方程式が成り立つ．従って，$q_{i,}(t),p_{i,}(t)\rightarrow q_{i,}(t'),p_{i,}(t')$ の変換は一種の正準変換である．

$$q_{i,}(t),p_{i,}(t)\equiv q_{i,},p_{i,}, \qquad q_{i,}(t'),p_{i,}(t')\equiv Q_i,P_i \tag{15}$$

として以後考える．

母関数として，$W=W_2(q_i,P_i,t)$ の場合，$p_i=\dfrac{\partial W}{\partial q_i},Q_i=\dfrac{\partial W}{\partial P_i},H'=H+\dfrac{\partial W}{\partial t}$ である場合を考える． 母関数を次のようにおいてみる．

$$W=\sum_{i=1}^{f}q_iP_i+\varepsilon\cdot S(q_i,P_i) \tag{16}$$

ただし，ε は無限小の量とする．

$$p_i=\frac{\partial W}{\partial q_i}=P_i+\varepsilon\frac{\partial}{\partial q_i}S(q_i,P_i) \tag{17-1}$$

$$Q_i=\frac{\partial W}{\partial P_i}=q_i+\varepsilon\frac{\partial}{\partial P_i}S(q_i,P_i) \tag{17-2}$$

$S(q_i,P_i)\rightarrow S(q_i,p_i)$ と近似する誤差は $O(\varepsilon^2)$ 程度であるとして，(17-1)，(17-2)を，

$$P_i=p_i-\varepsilon\frac{\partial}{\partial q_i}S(q_i,p_i) \tag{18-1}$$

$$Q_i=q_i+\varepsilon\frac{\partial}{\partial P_i}S(q_i,p_i) \tag{18-2}$$

としてしまう．この変換を**無限小正準変換**と言う．$S(q_i,P_i)\rightarrow S(q_i,p_i)$ と近似したことで，初めに導入した母関数 W との縁が切れてしまい，$S(q_i,p_i)$ が**無限小正準変換の母関数**となる．

(18-1)，(18-2)で，母関数 $S(q_i,p_i)$ として Hamiltonian をえらび，ε を**無限小の時間** τ とすると，

$$P_i = p_i - \tau \frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{19-1}$$

$$Q_i = q_i + \tau \frac{\partial H}{\partial P_i} \tag{19-2}$$

これら二式は正準方程式にそのまま対応しており，

$$P_i = p_i - \tau \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \rightarrow \quad \frac{P_i - p_i}{\tau} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}\ ,\ (\tau \to 0) \quad \rightarrow \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{20-1}$$

$$Q_i = q_i + \tau \frac{\partial H}{\partial P_i}, \quad \rightarrow \quad \frac{Q_i - q_i}{\tau} = \frac{\partial H}{\partial P_i},\ (\tau \to 0) \quad \rightarrow \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i} \tag{20-2}$$

正準方程式そのもの近似であることが判る．

(19-1)-(19-2)が意味するものは,

”正準方程式が与える力学パラメーターの時間発展は，初期条件を与える Hamiltonian を母関数とする無限小正準変換を繰り返しながら進行する”

と言うことである．

以上の Liouville の定理や正準方程式が与える力学パラメーターの時間発展の考え方は，統計力学の基礎となる．