§2　微小振動と基準座標

Lagrange の運動方程式の応用として，二つの質点が結合した振動系の連成振動問題を，振幅が小さく線形近似が可能な微小振動の問題として考える．多質点系微小振動の一般論も Lagrange の運動方程式の応用である．これは後半で述べる．固体結晶における原子の熱振動，連続体の振動問題などにつながる．

1）連成振動系の微小振動

質量 m の二つの質点が,下図のようにバネ定数 k のバネで結合されているとする．結合方向のみに変位が許されるとして，一次元の微小振動を考える．質点は床に接して運動するが，この床は滑らかで摩擦は無視できるとする．バネが自然長にある状態を各質点の座標原点（$x_1 = 0, x_2 = 0$）に取り，変位の正の方向は→で示した右方向とする．自由度２の微小振動である．

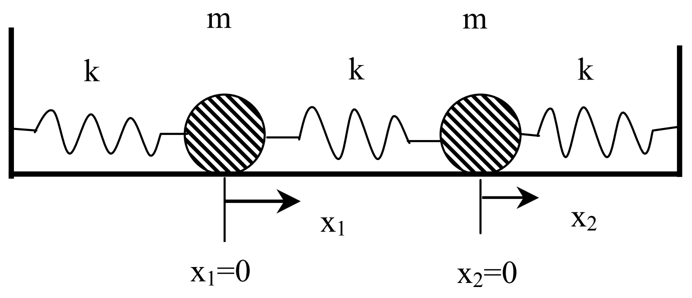

図３

上記の条件により，系のポテンシャルエネルギ−V は，各バネに蓄えられるポテンシャルエネルギ−の和になる．各バネが自然長の状態にある状態（伸縮量＝０）の状態で V_i をテーラー展開して，微小振動だから，２次までで近似する．

$$V_i = (V_i)_0 + \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_i}\right)_0 (x_i - x_{i0}) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V_i}{\partial x_i^2}\right)_0 (x_i - x_{i0})^2 \approx \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V_i}{\partial x_i^2}\right)_0 (x_i - x_{i0})^2$$

添字の０は自然長の状態を表し.この状態で V_i＝０であるから，$(V_i)_0 = 0$ である．また，自然長の状態での一次の微分係数は，結果的に外力が０の力学的平衡で

あるから，$\left(\dfrac{\partial V_i}{\partial x_i}\right)_0 = 0$　である．バネ定数 k は$\left(\dfrac{\partial^2 V_i}{\partial {x_i}^2}\right)_0$のことである．

$(x_i - x_{i0})$は各バネの自然長からの伸縮量だから，全部のバネでは，質点の変位x_iを用いて，V は

$$V = (1/2)k(x_1)^2 + (1/2)k(x_2 - x_1)^2 + (1/2)k(x_2)^2 \tag{1-1}$$

となる．Lagrangian，L を作ると，L＝T−V であるから

$$\begin{aligned} L &= (1/2)m(\dot{x}_1)^2 + (1/2)m(\dot{x}_2)^2 - V \\ &= (1/2)m(\dot{x}_1)^2 + (1/2)m(\dot{x}_2)^2 - (1/2)k(x_1)^2 - (1/2)k(x_2 - x_1)^2 - (1/2)k(x_2)^2 \end{aligned} \tag{1-2}$$

である．　Lagrange の運動方程式は,

$\dfrac{d}{dt}(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) = \dfrac{\partial L}{\partial q_i}$　であるから，$\dfrac{d}{dt}(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}_1}) = \dfrac{\partial L}{\partial x_1}$,　$\dfrac{d}{dt}(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}_2}) = \dfrac{\partial L}{\partial x_2}$　を作れば良い．

次のような連立微分方程式となる．

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_1 &= -kx_1 + k(x_2 - x_1) \\ m\ddot{x}_2 &= -k(x_2 - x_1) - kx_2 \end{aligned} \tag{1-3}$$

これを解く方法として，一つの変数を消去することが考えられる．(1-3)の第一式から，

$$x_2 = (\frac{m}{k})\ddot{x}_1 + 2x_1 \tag{1-4}$$

となるので，これを(1-3)の第二式に代入すると，

$$m^2 \frac{d^4 x_1}{dt^4} + 4mk \frac{d^2 x_1}{dt^2} + 3k^2 x_1 = 0 \tag{1-5}$$

となる．振動解であるから，$x_1 = e^{\lambda t}$と置けば,

$$\{m^2\lambda^4 + 4mk\lambda^2 + 3k^2\}x_1 = 0$$

これは,　$(m\lambda^2 + k)(m\lambda^2 + 3k) = 0$　であり,

$$\lambda = \pm i\sqrt{\frac{k}{m}} = \pm i\omega_1, \quad \pm i\sqrt{\frac{3k}{m}} = \pm i\omega_2 \tag{1-6}$$

$x_1 = e^{\lambda t}$ の解としては，$x_1 = \mathrm{Re}(e^{\pm i\omega}) = \mathrm{Re}(\cos\omega t \pm i sin\omega) = \cos\omega t$のように実部を取り，振幅と初期位相を$a,b,\alpha,\beta$ の任意定数として,

$$x_1 = a\cos(\omega_1 t + \alpha) + b\cos(\omega_2 t + \beta) \tag{1-7}$$

である．これを(1-4)に代入すればx_2の解が得られる．

$$x_2 = a\cos(\omega_1 t + \alpha) - b\cos(\omega_2 t + \beta) \tag{1-8}$$

以上で解が得られた．

２）座標変数の一次変換と基準振動

しかしながら，変数を消去する方法は，例えば　質点の数が増えた場合など，一般的な場合に応用するには便利な方法ではない．そこで，(1-7)と(1-8)を手掛りに，より一般的な解法を考える．次のような x_1 と x_2 の一次結合を考える．

$$q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \qquad q_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-x_1 + x_2) \tag{2-1}$$

これを逆に解いて書けば，

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 - q_2), \qquad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 + q_2) \tag{2-2}$$

である．(2-2)を(1-3)に代入して，q_1 と q_2 の微分方程式にすると，

$$\ddot{q}_1 = -\frac{k}{m}q_1, \qquad \ddot{q}_2 = -\frac{3k}{m}q_2 \tag{2-3}$$

となる．変数が分離した二つの単振動の方程式が得られる．

q_1 だけの振動がおこっている場合は，$q_2=0$ だから，(2-1)より $x_1 = x_2$ で，$q_1 = \sqrt{2}x_1$ である．故に，$x_1 = x_2 = q_1/\sqrt{2}$ となり，二つに質点は同じ変位をしていることになる．一方，$q_1 = 0$ で q_2 だけの振動が生じている場合は，$x_1 = -x_2 = -q_2/\sqrt{2}$ となり，二つの質点の変位は逆になっている．

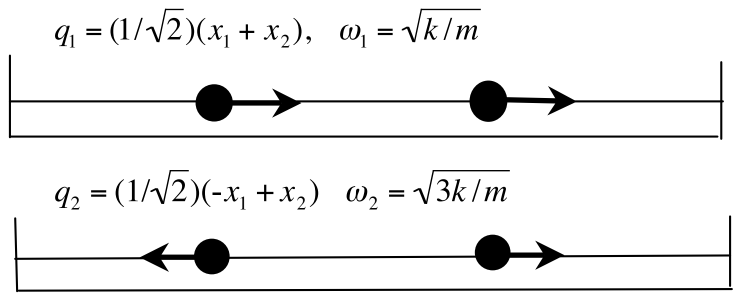

図４．二つの基準振動の変位パターンの相違

(2-1),(2-2)の変数変換の意味を，(1-2)の Lagrangian，L＝T−V に戻って考えてみる．

$$L = (1/2)m(\dot{x}_1)^2 + (1/2)m(\dot{x}_2)^2 - (1/2)k(x_1)^2 - (1/2)k(x_2 - x_1)^2 - (1/2)k(x_2)^2 \qquad (1\text{-}2)$$

この L で $x_1 \leftrightarrow x_2$ の交換をしても，L が不変であることがわかる．また，この状況は，(1-1)のポテンシャルエネルギ−V，

$$V = (1/2)k(x_1)^2 + (1/2)k(x_2 - x_1)^2 + (1/2)k(x_2)^2$$

でも同じであり，$x_1 \leftrightarrow x_2$ の交換で V は不変である．このように図３の力学系は $x_1 \leftrightarrow x_2$ の交換で，V，L が不変であるとの対称性をもっている．(2-1),(2-2)の変数変換はこの対称性に関係がある．(2-2)を V と L に代入し，変数を変えてみると，

$$V = (1/2)k(q_1)^2 + (3/2)k(q_2)^2 \qquad (1\text{-}1')$$

となり，(1-1)には，右辺第二項に由来する異なる変数の積 x_1x_2 が存在するが，(1-1')には，q_1q_2 のような交差項は存在していない．$(1/2)m(\dot{x}_1)^2 + (1/2)m(\dot{x}_2)^2$ の運動エネルギーでも，変数変換で一旦は，$\dot{q}_1\dot{q}_2$ の交差項が生じるものの，

$$\begin{aligned}&(1/2)m(\dot{x}_1)^2 + (1/2)m(\dot{x}_2)^2 \\ &\quad = (1/2)m\{(1/\sqrt{2})(\dot{q}_1 - \dot{q}_2)\}^2 + (1/2)m\{(1/\sqrt{2})(\dot{q}_1 + \dot{q}_2)\}^2 \\ &\quad = (1/2)m(\dot{q}_1)^2 + (1/2)m(\dot{q}_2)^2\end{aligned}$$

となり，二つの項の間で $\dot{q}_1\dot{q}_2$ の交差項が相殺される．従って変換後の L は,

$$\begin{aligned}L &= \frac{1}{2}m(\dot{q}_1)^2 + \frac{1}{2}m(\dot{q}_2)^2 - \frac{1}{2}k(q_1)^2 - \frac{1}{2}3k(q_2)^2 \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2} m\{(\dot{q}_i)^2 - (\omega_i)^2(q_i)^2\}\end{aligned} \qquad (1\text{-}2')$$

となり，Lagrange の運動方程式，$\dfrac{d}{dt}(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) = \dfrac{\partial L}{\partial q_i}$，から直ちに (2-3)の

$$\ddot{q}_1 = -(\omega_1)^2 q_1, \qquad \ddot{q}_2 = -(\omega_2)^2 q_2 \qquad (2\text{-}3')$$

得られる．図３の力学系に限らず，一般の多体力学系の微小振動問題は，力学系の対称性に基づく変数の一次結合を作り，L を $\dot{q}_1\dot{q}_2$ や q_1q_2 の交差項が存在しない形に書き換え，(1-11')が示すような単振動の単純集合とする形で解くことになる．(1-11')のような単振動に相当する運動を**基準振動**と呼び, 座標変数 q_1 と

q_2 は**基準座標**と呼ばれる．それぞれの基準振動に対応する角周波数は**基準振動数**と呼ばれる．ここでの例では，$\sqrt{k/m}=\omega_1$，　$\sqrt{3k/m}=\omega_2$　がそのような基準振動数である．図４のように，基準振動数が異なるとその時の質点の変位パターンも異なる．

３） 直交する基準振動の変位

図４にあるように，異なる基準座標の変位パターンは異っているだけではなく，”相互に直交”している．このことを考えてみる．図４の $\sqrt{k/m}=\omega_1$ の基準振動における二つの質点の変位を，基底ベクトルをそれぞれの変位０の場所を始点とする正の単位ベクトルとして，　$x_1(\omega_1),x_2(\omega_1)$ の振幅を集合的に $(a_1(\omega_1),a_2(\omega_1))$ と書き，それをこの基準振動の変位パターンと理解する（もちろん，列ベクトルで書いても良いが，ここでは行ベクトルを使う）．同様に，$\sqrt{3k/m}=\omega_2$ の基準振動での変位パターンを $(a_1(\omega_2),a_2(\omega_2))$ と表現する．（１，０）のベクトルは，左側の質点１が単位の正の変位し，右側の質点２の変位は０である状態．（１，１）は二つの質点が何れも単位の正の変位をした状態，(−１，１）は左の質点１が単位の負の変位を行い，かつ，右の質点２が正の単位の変位を行う状態を意味する．従って，$\sqrt{k/m}=\omega_1$ の基準振動では，

$$(a_1(\omega_1),a_2(\omega_1))=a_1(\omega_1)(1,\ 1)=a_2(\omega_1)(1,\ 1)$$

である．同様に，$\sqrt{3k/m}=\omega_2$ の基準振動での変位パターンは，

$$(a_1(\omega_2),a_2(\omega_2))=(-a_2(\omega_2),a_2(\omega_2))=a_2(\omega_2)(-1.\ 1)=-a_1(\omega_2)(-1.\ 1)$$

と表現できる．この二つの（集合的）変位ベクトルの内積を作ると，

$$(a_1(\omega_1),a_2(\omega_1))\bullet(a_1(\omega_2),a_2(\omega_2))=a_1(\omega_1)a_1(\omega_2)(-1+1)=0$$

だから，異なる基準振動の（集合的）変位ベクトルは”直交している”と言える．

基準振動の振幅係数は，(1-7),(1-8)式のように，積分定数であるので，基準振動の（集合的）変位ベクトルの大きさについては，常に大きさを１であるベクトルとして議論する．その場合，(±１，０）や（０，±１）はベクトルの大きさは１で問題はないが，(±１，±１）などの場合は，$(1/\sqrt{2})(\pm 1,\ \pm 1)$ のように規格化

係数$(1/\sqrt{2})$を付ける必要がある．(2-1)にある$(1/\sqrt{2})$はこのような意味を持つ．だから，(2-1)　の一次結合は，

$$q_1 = 1/\sqrt{2}(x_1 + x_2) \quad \to 1/\sqrt{2}(1,\ 1)$$

$$q_2 = 1/\sqrt{2}(-x_1 + x_2) \to 1/\sqrt{2}(-1,\ 1)$$

として考えれば良いので，この二つが直交することはすぐに判る．二質点系の一次元振動であるから 自由度は２である．$x_1 \leftrightarrow x_2$の交換をしても，L，V が不変であるから，$q_1 = 1/\sqrt{2}(x_1 + x_2)$ がこの対称性を満足することも直ぐに判るから，$q_1 = 1/\sqrt{2}(x_1 + x_2)$ に直交する変位ベクトルは$q_2 = 1/\sqrt{2}(-x_1 + x_2)$となる．あるいは，$q'_2 = 1/\sqrt{2}(x_1 - x_2) = -q_2$ でも良い．

４）座標変換の意味

(2-3)の意味を再度考えてみる． (2-1),(2-2)は，二次元の列ベクトルに書いてみると，

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \tag{2-1'}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \tag{2-2'}$$

である．一方，(1-3)の連立微分方程式は，

$$\begin{pmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2k/m & k/m \\ k/m & -2k/m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \tag{4-1}$$

ここに(2-3')を代入して，

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{q}_1 \\ \ddot{q}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2k/m & k/m \\ k/m & -2k/m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix}$$

となる．左辺側の係数行列を単位行列にするためには，この逆行列を両辺に掛ければ良い．逆行列は(2-1')の係数行列で，元の行列の転置行列になっている．

$$\begin{pmatrix} \ddot{q}_1 \\ \ddot{q}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -2k/m & k/m \\ k/m & -2k/m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \tag{4-2}$$

となる．この結果が(1-11)に対応しなければならないはずだ．

$$\begin{pmatrix}\ddot{q}_1\\ \ddot{q}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-k/m & 0\\ 0 & -3k/m\end{pmatrix}\begin{pmatrix}q_1\\ q_2\end{pmatrix} \quad (4\text{-}3)$$

(2-1'), (2-2') の２次元の変数列ベクトルを **x**, **q**, 変換行列を **U** と書くと，(2-1'), (1-10')は,

$$\mathbf{q}=\mathbf{U}^{-1}\mathbf{x},\quad \mathbf{x}=\mathbf{U}\mathbf{q} \quad (4\text{-}4)$$

であり，(4-3)は　k，m が要素に入る行列を **F** と記すと，運動方程式は,

$$\ddot{\mathbf{q}}=(\mathbf{U}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{U})\mathbf{q} \quad (4\text{-}5)$$

であり，(4-3)は，係数行列($\mathbf{U}^{-1}\mathbf{FU}$)が**対角行列**になることを意味している.

座標変数の変換(2-1),(2-2)の意味について考えよう．図５は，ベクトル OP(= r) はそのままにして，元の直交座標系 O-x_1-x_2　を反時計回りに角度 α だけ回転させた新座標系を O-q_1-q_2　を考えることを示している.

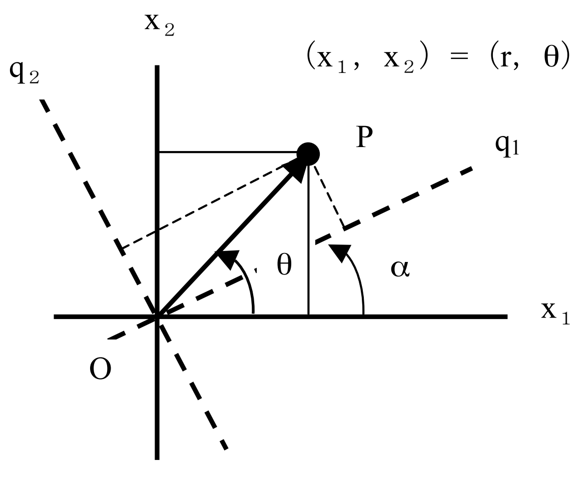

図５．座標系の回転による座標変数の変換

ベクトル OP はそのままであるが，旧座標系での x_1，x_2成分の値は，新座標系での q_1, q_2成分の値に変更される. 旧座標での成分は $x_1=r\cos\theta,\ x_2=r sin\theta$　であるが，新座標での成分は次の様になることが判る.

$$q_1=r\cos(\theta-\alpha)=r\cos\theta\cos\alpha+r sin\theta sin\alpha=(\cos\alpha)x_1+(sin\alpha)x_2$$
$$q_2=r sin(\theta-\alpha)=r sin\theta\cos\alpha-r\cos\theta sin\alpha=(-sin\alpha)x_1+(\cos\alpha)x_2$$

従って，新旧座標成分の間の関係は

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & sin\alpha \\ -sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \tag{4-6}$$

である．新座標の成分と旧座標の成分の変換は，角度αによる係数行列で決まる．この行列の逆行列は転置行列に等しく，行列式の値は 1 である．(2-1')の係数行列 U^{-1} は，$\alpha = \pi/4$ の場合，(2-2')の U は $\alpha = -\pi/4$ の場合相当している．角度αの係数行列は，ベクトルの大きさは不変のまま，一つの直交座標系からもう一つの直交座標系への変換を指定するから，直交変換行列と呼ばれる．

Lagrange の運動方程式は，座標変換に不変であるから，(2-1), (2-2) の**一次結合を作る行列 U** を用いた座標変換でも，また他の回転角αによる変換であっても， Lagrange の運動方程式は座標変換後も成立している．座標変換後の変数は一般化座標の資格がある．しかし，この問題の場合のように，$\alpha = -\pi/4$ の回転角で与えられる**直交変換 行列 U** を用いることで，(4-5)の($\mathbf{U}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{U}$)は対角行列になり，特別な一般化座標 q_1，q_2が得られる． q_1 は q_1 だけの単振動の方程式，q_2は q_2だけの単振動の方程式という最も単純な方程式の形にすることができる．どのような**直交変換行列 U** となるかは，２）で述べたように **F** の対称性による．

５）多質点系の微小振動問題

図４の２質点系一次元振動は最も簡単な多質点系の振動問題である．ここでのイメージを保持しながら，分子振動，結晶の格子振動の問題につながるより一般的な多質点系微小振動の問題を考える．

5.1 多質点系微小振動の Lagrangian とその運動方程式

全質点の数を N として，個々の質点の番号を a で区別する．番号 a の質点の質量は m_a，直交座標を(x_a, y_a, z_a)と記す．振動の自由度は最大で n=3N と考えても良いが，拘束条件あればその数だけ自由度は減ずる．また，分子振動の場合は，分子全体の並進，回転の自由度を分離した方が良いので，n=3N-6，又は n=3N-5（直線状分子）である．結晶では結晶全体の並進の自由度だけが振動の自由度から除かれるので，n=3N-3 となる．ここでは振動の自由度は n として考える．

この多質点系の運動状態が一般化座標$(q_1, q_2, ..., q_n)$で記述されると考えると，番号 a の質点の直交座標(x_a, y_a, z_a)は，一般化座標の関数となっている．即ち，

$$
\begin{aligned}
x_a &= f_a(q_1, q_2, ..., q_n), \quad \dot{x}_a = \sum_k \frac{\partial f_a}{\partial q_k}\dot{q}_k \\
y_a &= g_a(q_1, q_2, ..., q_n), \quad \dot{y}_a = \sum_k \frac{\partial g_a}{\partial q_k}\dot{q}_k \qquad (5\text{-}1) \\
z_a &= h_a(q_1, q_2, ..., q_n), \quad \dot{z}_a = \sum_k \frac{\partial h_a}{\partial q_k}\dot{q}_k
\end{aligned}
$$

である．この系の，全運動エネルギーT は，

$$
T = (1/2)\sum_a m_a\{(\dot{x}_a)^2 + (\dot{y}_a)^2 + (\dot{z}_a)^2\} \geq 0 \qquad (5\text{-}2)
$$

である．等号は全ての質点が静止している状態である．(5-1)の$(\dot{x}_a, \dot{y}_a, \dot{z}_a)$を(5-2)の各二乗の該当項に代入すれば，

$$
T = (1/2)\sum_i \sum_j a_{ij}(q)\dot{q}_i\dot{q}_j \geq 0 \qquad (5\text{-}3)
$$

と整理でき，速度に関して正値２次形式である．しかも，$a_{ij}(q) = a_{ji}(q)$で対称な係

数である．これは(5-1)を代入した結果を，n=2 の場合で考えてみれば了解できる．

一方，この系のポテンシャルエネルギ−は，$V = V(q_1, q_2, ..., q_n)$ のように，一般化座標で与えられているとする．しかも，その安定な力学的平衡状態は V の**極小値**であると考える．この平衡状態における質点系の座標を $(q_1^{\ 0}, q_2^{\ 0}, ..., q_n^{\ 0})$ とする．

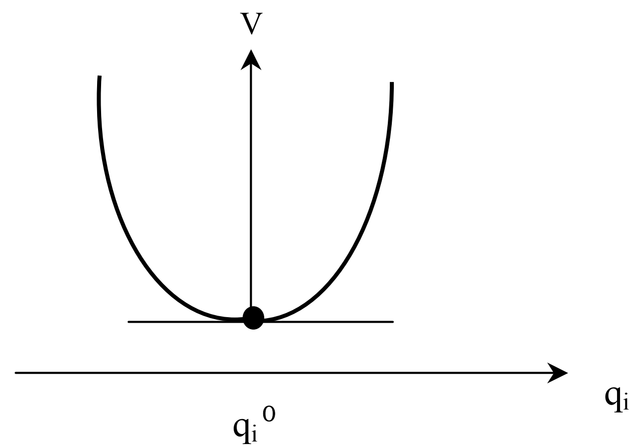

図６

平衡状態の位置座標ではＶは極小値

このような極小値を取る平衡点 $(q_1^{\ 0}, q_2^{\ 0}, ..., q_n^{\ 0})$ の廻りで V をテ−ラー展開して，２次までの項を残す．

$$V = V_0 + \sum_i \left(\frac{\partial V}{\partial q_i} \right)_0 (q_i - q_i^{\ 0}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 (q_i - q_i^{\ 0})(q_i - q_i^{\ 0}) \qquad (5\text{-}4)$$

偏微分係数の添字０は，平衡状態での質点の座標 $(q_1^{\ 0}, q_2^{\ 0}, ..., q_n^{\ 0})$ における値であることを意味する． V_0 は定数であるから，V の原点をずらす効果しか持たないので０と出来る．また，一階の偏微分係数は，平衡状態で極値をとるのだから $(\partial V / \partial q_i)_0 = 0$ である．従って，平衡状態での質点の座標 $(q_1^{\ 0}, q_2^{\ 0}, ..., q_n^{\ 0})$ を座標原点に取ることができる．これは,

$$x_i = q_i - q_i^{\,0} \tag{5-5}$$

として，平衡点からの変位を新たな座標にすることである．従って，

$$V = \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}\right)_0 x_i x_j \geq 0 \tag{5-6}$$

である. 最後の不等号･等号は, 平衡点が V の極小値であることに対応していおり.

等号は平衡状態である．ポテンシャルエネルギ−は変位の正値２次形式である．係数は,

$$K_{ij} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_j \partial x_i}\right)_0 = K_{ji} \tag{5-7}$$

であるから，対称な係数である．この対称な係数を用いて，V は

$$V = \frac{1}{2}\sum_i \sum_j K_{ij} x_i x_j \geq 0 \tag{5-8}$$

となる．

(5-5)→(5-6)の際に，偏微分変数がそそのまま入れ替わっているが，これは(5-5)から，$(\frac{\partial x_j}{\partial q_j}) = 1$ であることに依る．

$$\frac{\partial V}{\partial q_j} = (\frac{\partial V}{\partial x_j})(\frac{\partial x_j}{\partial q_j}) = \frac{\partial V}{\partial x_j} \quad , \qquad \frac{\partial}{\partial q_i}(\frac{\partial V}{\partial q_j}) = (\frac{\partial}{\partial x_i})(\frac{\partial V}{\partial x_j})(\frac{\partial x_i}{\partial q_i}) = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}$$

だからである．

(5-5)のように変数を変換したから，(5-3)の T の変数も変更する．(5-5)を時間で微分して，$\dot{x}_i = \dot{q}_i$　であるから，

$$T = (1/2)\sum_i \sum_j a_{ij}(q)\dot{q}_i \dot{q}_j = (1/2)\sum_i \sum_j a_{ij}(q)\dot{x}_i \dot{x}_j \geq 0$$

となる．$a_{ik}(q)$ は，平衡状態での質点の座標 $(q_1^{\,0}, q_2^{\,0}, ..., q_n^{\,0})$ での値として考える．(5-2),(5-3)から判るように，各質点の質量により決まるので，M_{ij} と記す.

$$T = (1/2)\sum_i \sum_j M_{ij} \dot{x}_i \dot{x}_j \geq 0 \tag{5-9}$$

この系の Lagrangian は L＝T−V であるから，(5-8),(5-9)から，

$$L=(1/2)\sum_i\sum_j(M_{ij}\dot{x}_i\dot{x}_j-K_{ij}x_ix_j) \tag{5-10}$$

となる．運動方程式は$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_k})=\frac{\partial L}{\partial q_k}$から得られるが，L が二重和であることに注意して，$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_k})=\frac{\partial L}{\partial x_k}$をつくる．

$$\frac{\partial}{\partial\dot{x}_k}\{(1/2)\sum_i\sum_j(M_{ij}\dot{x}_i\dot{x}_j)\}=(1/2)\sum_i M_{ik}\dot{x}_i+(1/2)\sum_j M_{kj}\dot{x}_j$$

$(i\neq k, j=k)$と$(i=k, j\neq k)$の二つの場合があるから，この二項が生じる，初めの項で和の変数 i を j と変更して，$M_{jk}=M_{kj}$と対称であることを使うと，

$$=(1/2)\sum_j M_{jk}\dot{x}_j+(1/2)\sum_j M_{kj}\dot{x}_j=\sum_j M_{kj}\dot{x}_j$$

故に，

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_k})=\sum_j M_{kj}\ddot{x}_j \tag{5-11}$$

となる．同様に，

$$\frac{\partial L}{\partial x_k}=-\sum_j K_{kj}x_j \tag{5-12}$$

Lagrange の運動方程式は，$\sum_j M_{kj}\ddot{x}_j+\sum_j K_{kj}x_j=0$となるが，添字変数 k を i と変更して，

$$\sum_{j=1}^{n}(M_{ij}\ddot{x}_j+K_{ij}x_j)=0 \qquad (i=1,2,........,n) \tag{5-13}$$

を運動方程式とする．この連立微分方程式を解けば良い．

5-2．運動方程式の解法：固有方程式の固有値と固有ベクトル

運動方程式(5-13)は，n 個の定数係数の線形同次微分方程式一組になっている．こ

の方程式は，図４の二質点系の場合と同じように， a_j,ϕ を実数定数として，

$$x_j = a_j \cos(\omega t + \phi) \tag{5-14}$$

の振動解を仮定して解くことができる．或は $x_j = A_j e^{i\omega t}$ を仮定しても良い．この実部が(5-14)に相当するので，ここでは，(5-14)の解を仮定して，(5-13)に代入する．(5-13)は，

$$\sum_{j=1}^{n}(K_{ij} - M_{ij}\omega^2)a_j \cos(\omega t + \phi) = 0 \qquad (i = 1,2,........,n)$$

$\cos(\omega t + \phi)$は共通であるから除して，

$$\sum_{j=1}^{n}(K_{ij} - M_{ij}\omega^2)a_j = 0 \qquad (i = 1,2,........,n) \tag{5-15}$$

(5-15)を行列の形に書くと，

$$\begin{pmatrix} K_{11} - \omega^2 M_{11} & K_{12} - \omega^2 M_{12} & \bullet & K_{1n} - \omega^2 M_{1n} \\ K_{21} - \omega^2 M_{21} & K_{22} - \omega^2 M_{22} & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ K_{n1} - \omega^2 M_{n1} & \bullet & \bullet & K_{nn} - \omega^2 M_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \bullet \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \bullet \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5-16}$$

これが自明の解（$a_j = 0$，$j = 1,2,....,n$)以外の解を持つ為には，a_jの係数が作る行列の行列式が０でなければならない．これは，

$$\det\left|K_{ij} - \omega^2 M_{ij}\right| = 0 \qquad (i = 1,2,........,n) \tag{5-17}$$

と書くことが出来る．$\omega^2 = \lambda$についての n 次方程式であり，n 個の根が存在する．(5-17)は**固有方程式**，**永年方程式**と呼ばれる．$\omega^2 = \lambda$は**固有値**で，n 個の$\omega^2 = \lambda$の根があり，これら n 個の根から，n 個の**固有振動数**ω $(\omega_1,\omega_2,.........,\omega_n)$が得られる．(5-16)を満足する一つの固有値，$\omega^2 = \lambda$の根，から，$a_j$を成分とする一つの**列ベクトル**が決まる．この列ベクトル$(a_1,a_2,.......,a_n)^T$は固有値に対応する**固有ベクトル**と呼ばれる．固有ベクトルの**大きさは定数倍の不定性**がある．それは，(5-16)からも判るが，$x_j = a_j \cos(\omega t + \phi)$が解であるなら，その定数倍したものもやはり解だからである．通常は，後に述べるように，固有ベクトル（列ベクトル）の大きさは１

として議論する．これを**固有ベクトルの規格化**と言う．

n 個の$\omega^2=\lambda$の根が全て異なる場合は，n 個の固有振動数$(\omega_1,\omega_2,\ldots\ldots,\omega_n)$も全て異なる．この場合は(5-15)から**規格化した固有ベクトル**が決まる．しかし，n 個の$\omega^2=\lambda$の根の中に等根が含まれる場合がある．その場合は，n 個の固有振動数$(\omega_1,\omega_2,\ldots\ldots,\omega_n)$の中に同一の固有振動数が含まれる．$\omega_1,\omega_2$が等しい場合は，$\omega_1$**と**$\omega_2$**は縮重（縮退）**していると言う．縮重がある場合の固有ベクトルは(5-15)だけからは一義的には決めることができない．この点は次節で議論する．

(5-15)を満足する固有値，$\omega^2=\lambda$に負の根が含まれていれば，固有振動数は虚根となってしまう．しかし，このようなことは起こらず，必ず，$\omega^2=\lambda\geq 0$であり，全ての固有振動数ω_jは正又は０の実数であることが保証されている．その根拠は以下の通りである．

(5-15)の　$\sum_{j=1}^{n}(K_{ij}-M_{ij}\omega^2)a_j=0 \qquad (i=1,2,\ldots\ldots,n)$　の両辺にa_iを掛けて i についての和を取ると，

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(K_{ij}-M_{ij}\omega^2)a_j a_i=0$$

である．ω^2は和の外に出せるから，

$$\omega^2\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}M_{ij}a_j a_i=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}K_{ij}a_j a_i$$

となる．従って，

$$\omega^2=\frac{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}K_{ij}a_j a_i}{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}M_{ij}a_j a_i}\geq 0$$

(5-9), (5-8)の正値２次形式が，それぞれ分子，分母に相当するので正又は０である．

5.3　固有ベクトルの直交性と規格化

固有振動数がω_αである時，これに対応する固有ベクトル，$(a_1^{(\alpha)}, a_2^{(\alpha)}, \ldots\ldots, a_n^{(\alpha)})^T$，は，(5-15), (5-16)を満足するから，

$$\sum_{j=1}^{n}(K_{ij} - M_{ij}\omega_\alpha^{\ 2})a_j^{\ (\alpha)} = 0 \qquad (i = 1,2,\ldots\ldots,n) \tag{5-18}$$

である．もう一つの固有振動数ω_βと，これに対応する固有ベクトル，$(a_1^{(\beta)}, a_2^{(\beta)}, \ldots\ldots, a_n^{(\beta)})^T$を考えれば，やはり，

$$\sum_{j=1}^{n}(K_{ij} - M_{ij}\omega_\beta^{\ 2})a_j^{\ (\beta)} = 0 \qquad (i = 1,2,\ldots\ldots,n) \tag{5-19}$$

が成立するはずである．(5-18)の両辺に$a_i^{(\beta)}$を掛けて i に関する和を取り，左右に分離すると，

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}K_{ij}a_j^{\ (\alpha)}a_i^{(\beta)} = \omega_\alpha^{\ 2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}M_{ij}a_j^{\ (\alpha)}a_i^{(\beta)} \tag{5-20}$$

となる．同様に，(5-19)の両辺に$a_i^{(\alpha)}$を掛けて i に関する和を取ると，

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}K_{ij}a_i^{(\alpha)}a_j^{\ (\beta)} = \omega_\beta^{\ 2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}M_{ij}a_i^{(\alpha)}a_j^{\ (\beta)} \tag{5-21}$$

(5-20)の両辺は i,j に関する和を取っているので，i,j を交換しても良いので，(5-20)の左辺と(5-21)の左辺は同一である．だから，(5-20)の右辺と(5-21)の右辺も等しい．(5-20)の右辺で i,j を交換すると，M_{ji}となるが，$M_{ji} = M_{ij}$であるから，

$$\omega_\alpha^{\ 2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}M_{ij}a_i^{(\alpha)}a_j^{\ (\beta)} = \omega_\beta^{\ 2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}M_{ij}a_i^{(\alpha)}a_j^{\ (\beta)}$$

となる．移行して，

$$(\omega_\alpha^{\ 2} - \omega_\beta^{\ 2})\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}M_{ij}a_i^{(\alpha)}a_j^{\ (\beta)} = 0 \tag{5-22}$$

と書くことが出来る．以下では，この結果を，固有値に縮重がない場合とある場合を区別して，考える．

１）縮重がない場合の固有ベクトルの直交性

固有振動数ω_α**と**ω_β**が縮重していない場合は**，(5-22)で$(\omega_\alpha{}^2 - \omega_\beta{}^2) \neq 0$であるから，

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} M_{ij} a_i{}^{(\alpha)} a_j{}^{(\beta)} = 0 \qquad (5\text{-}23)$$

を意味する．これを書き直すと，

$$\sum_{i=1}^{n} a_i{}^{(\alpha)} (\sum_{j=1}^{n} M_{ij} a_j{}^{(\beta)}) = 0 \qquad (5\text{-}23')$$

となるから，次のように行列の積の形に書ける：

$$\begin{pmatrix} a_1{}^{(\alpha)} & a_2{}^{(\alpha)} & \bullet & a_n{}^{(\alpha)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \bullet & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ M_{n1} & \bullet & \bullet & M_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1{}^{(\beta)} \\ a_2{}^{(\beta)} \\ \bullet \\ a_n{}^{(\beta)} \end{pmatrix} = 0 \qquad (5\text{-}24)$$

$\begin{pmatrix} a_1{}^{(\alpha)} & a_2{}^{(\alpha)} & \bullet & a_n{}^{(\alpha)} \end{pmatrix}$は，固有値$\omega_\alpha$に対応する固有ベクトル$\mathbf{a}^{(\alpha)}$（列ベクトル）を転置して行ベクトルとしたものである．固有値ω_αの固有ベクトル$\mathbf{a}^{(\alpha)}$（列ベクトル）と質量行列$\mathbf{M}(n,n)$ともう一つの固有振動数ω_βに対応する固有ベクトル$\mathbf{a}^{(\beta)}$（列ベクトル）との行列積$\mathbf{Ma}^{(\beta)}(n,1)$との**内積が 0 であること**，即ち，**直交している**ことを意味する．

ここでは，固有ベクトル$\mathbf{a}^{(\alpha)}$（列ベクトル）と固有ベクトル$\mathbf{a}^{(\beta)}$（列ベクトル）との**内積**を，質量行列 M を介在させた**(5-23)，(5-24)の左辺で定義する**．即ち，

$$(\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{a}^{(\beta)}) = \sum_{i=1}^{n} a_i{}^{(\alpha)} (\sum_{j=1}^{n} M_{ij} a_j{}^{(\beta)}) \qquad (5\text{-}25)$$

(5-23)のように，$(\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{a}^{(\beta)}) = 0$である場合，二つの固有ベクトルは**直交**していると言う．(5-25)は質量行列 M が絡んでいるから，通常にベクトルの内積のように成分の積の和ではないことに注意．さらに，同一ベクトルの内積はその大きさの二乗であるから，

$$(\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{a}^{(\alpha)}) = \sum_{i=1}^{n} a_i^{(\alpha)} (\sum_{j=1}^{n} M_{ij} a_j^{(\alpha)}) = 1 \qquad (5\text{-}26)$$

である固有ベクトルの大きさは 1 であると言うことが出来る．大きさ 1 の固有ベクトルは**規格化**されていると言う．既に指摘したように，固有ベクトルの大きさは不定であるから，以下の議論では規格化された固有ベクトルを使う．

２）縮重している場合の固有ベクトルの直交性

(5-22)で，固有振動数が縮重している場合を考える．ここでは，m 個の固有値が等根で，m 個の固有振動数がω_αで同一である場合を考える．即ち，

$$\mathbf{a}^{(\alpha,1)}, \mathbf{a}^{(\alpha,2)}, \ldots\ldots, \mathbf{a}^{(\alpha,m)}$$

の m 個の固有ベクトルを考えることが出来る．(5-15)についての

$$\sum_{j=1}^{n} (K_{ij} - M_{ij}\omega_\alpha{}^2) a_j^{(\alpha,k)} = 0 \qquad (k = 1,2,\ldots,m) \qquad (5\text{-}27)$$

は m 個の固有ベクトルで成立しているが一義的には決まらない．その理由は，**縮重した根の固有ベクトルの任意一次結合はやはり固有ベクトルである**ことによる．これを以下で確認する．

c_i を任意の定数として，

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^{m} c_i \mathbf{a}^{(\alpha,i)} \qquad (5\text{-}28)$$

任意の一次結合を考える．成分で書くと，

$$a_j = \sum_{i=1}^{m} c_i a_j^{(\alpha,i)} \qquad (5\text{-}28')$$

であるベクトルを考える．この任意の一次結合が，(5-15)を満足することは，(5-28'), (5-27)を用いて，次のように示すことが出来る．

$$\sum_{j=1}^{n} K_{ij} a_j = \sum_{j=1}^{n} K_{ij} (\sum_{k=}^{m} c_k a_j^{(\alpha,k)}) = \sum_{k=1}^{m} c_k \sum_{j}^{n} K_{ij} a_j^{(\alpha,k)} = \sum_{k=1}^{m} c_k \omega_\alpha{}^2 \sum_{j}^{n} M_{ij} a_j^{(\alpha,k)}$$

$$= \omega_\alpha{}^2 \sum_j^n M_{ij} \sum_{k=1}^m c_k a_j{}^{(\alpha,k)} = \omega_\alpha{}^2 \sum_j^n M_{ij} a_j \qquad (5\text{-}29)$$

となるので，**任意の一次結合** $a_j = \sum_{i=1}^m c_i a_j{}^{(\alpha,i)}$ **も(5-15)を満足し，固有振動数** ω_α**に対応する固有ベクトルである．**固有方程式の根が縮重している場合は，(5-15)を満足するものが幾つもあり，どれでもが固有ベクトルの資格がある．

そこで，$\omega_\alpha = \omega_\beta$ で，適当に選んだ両者の固有ベクトルを$\mathbf{a}^{(\alpha)}$と$\mathbf{a}^{(\beta)}$とする．この時，c を任意定数として，次のような一次結合を作ると，

$$\mathbf{b}^{(\beta)} = \mathbf{a}^{(\alpha)} + c \cdot \mathbf{a}^{(\beta)} \qquad (5\text{-}30)$$

これも$\omega_\alpha = \omega_\beta$の固有ベクトルである．そこで，$\mathbf{a}^{(\alpha)}$と $\mathbf{b}^{(\beta)}$が直交するように，任意定数 c を決めることが出来る．$\mathbf{a}^{(\alpha)}$と $\mathbf{b}^{(\beta)}$の内積が 0 となるように c を決めれば良い．

$$(\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{b}^{(\beta)}) = (\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{a}^{(\alpha)}) + c \cdot (\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{a}^{(\beta)}) = 0$$

故に，

$$c = -\frac{(\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{a}^{(\beta)})}{(\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{a}^{(\alpha)})} \qquad (5\text{-}31)$$

であるようにすれば良い．$\mathbf{a}^{(\beta)}$を初めからこのような$\mathbf{b}^{(\beta)}$と考えれば，$\mathbf{a}^{(\alpha)}$と $\mathbf{a}^{(\beta)}$は直交している．適当な$\mathbf{a}^{(\alpha)}$を一つ選び．これに直交するようにもう一つの$\mathbf{a}^{(\beta)}$を決めれば良い．このように，複数の根が縮重している場合は，順次，直交するように固有ベクトルと決めて行けば良い. 初めの$\mathbf{a}^{(\alpha)}$は任意だが, 残りはこの方法で決まる．Schmidt の直交化法と呼ばれる．

このように１），２）の議論から，根が縮重し，固有振動数が同一であっても，全ての固有ベクトルが直交するように選ぶことが出来るので，内積は

$$(\mathbf{a}^{(\alpha)}, \mathbf{a}^{(\beta)}) = \sum_{i=1}^n a_i{}^{(\alpha)} (\sum_{j=1}^n M_{ij} a_j{}^{(\beta)}) = \delta_{\alpha\beta} \qquad (5\text{-}32)$$

である．$\delta_{\alpha\beta}$はクロネッカーの δ で，$\delta_{\alpha\beta} = 1\ (\alpha = \beta)$，$\delta_{\alpha\beta} = 0\ (\alpha \neq \beta)$ を意味する．即ち，大きさが 1 で，相互に直交する固有ベクトルを n 個決めることができる．それ

それの固有ベクトルは列ベクトルで n 個の成分を持つ．

5.4　微小振動の独立解と一般解

初めに戻ると，a_j, ϕ を実数定数として，振動解

$$x_j = a_j \cos(\omega t + \phi) \tag{5-14}$$

を仮定し，n 組の固有振動数とこれに対応する固有ベクトル（列ベクトル）

$$\omega_\alpha,\ (\mathbf{a}^{(\alpha)})^T = (a_1^{(\alpha)}, a_2^{(\alpha)}, \ldots\ldots, a_n^{(\alpha)}) \qquad (\alpha = 1,2,\ldots\ldots,n)$$

が定まったことになる．ただし，固有ベクトルは，(5-32)に従い，規格化された相互に直交するベクトルである． (5-14)に戻って考えれば,

$$x_j^{(\alpha)} = a_j^{(\alpha)} \cos(\omega_\alpha t + \phi_\alpha)$$

であるから，$(\alpha = 1,2,\ldots\ldots,n)$として,

$$\mathbf{x}^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} a_1^{(\alpha)} \cos(\omega_\alpha t + \phi_\alpha) \\ a_2^{(\alpha)} \cos(\omega_\alpha t + \phi_\alpha) \\ \bullet \\ a_n^{(\alpha)} \cos(\omega_\alpha t + \phi_\alpha) \end{pmatrix} = \cos(\omega_\alpha t + \phi_\alpha) \begin{pmatrix} a_1^{(\alpha)} \\ a_2^{(\alpha)} \\ \bullet \\ a_n^{(\alpha)} \end{pmatrix} = [\cos(\omega_\alpha t + \phi_\alpha)] \cdot \mathbf{a}^{(\alpha)} \tag{5-33}$$

である．積分定数として，振幅係数と初期位相合わせて，２n 個が含まれるが，振幅係数に関しては，固有ベクトルの大きさを規格化した際に n 個の条件として既に用いている．これらは**微小振動の独立な解**である．

これら独立解の一次結合も，(5-13)の解となるので，**一般解**は,

$$\mathbf{x} = \sum_{\alpha=1}^{n} c_\alpha \mathbf{x}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha=1}^{n} c_\alpha \mathbf{a}^{(\alpha)} [\cos(\omega_\alpha t + \varphi_\alpha)] = \sum_{\alpha=1}^{n} q_\alpha(t) \cdot \mathbf{a}^{(\alpha)} \tag{5-34}$$

となる．c_αは微小振動の仮定と矛盾しない範囲の任意の定数である．一般解を求めるという意味では，固有ベクトルの大きさを規格化する必要はない．最後の等式では，$q_\alpha(t) = c_\alpha \cos(\omega_\alpha t + \varphi_\alpha)$と置いた．n 個の規格化された直交するベクトル$\mathbf{a}^{(\alpha)}$で展開した形になっている．その展開係数が$q_\alpha(t) = c_\alpha \cos(\omega_\alpha t + \varphi_\alpha)$である．

この系の Lagrangian は (5-10)であった．

$$L = (1/2)\sum_i \sum_j (M_{ij}\dot{x}_i\dot{x}_j - K_{ij}x_i x_j) \qquad (5\text{-}10)$$

この Lagrangian に，一般解の(5-34)　$\mathbf{x} = \sum_{\alpha=1}^{n} q_\alpha(t)\cdot\mathbf{a}^{(\alpha)}$ を代入する．$\dot{\mathbf{x}} = \sum_{\alpha=1}^{n}\dot{q}_\alpha(t)\cdot\mathbf{a}^{(\alpha)}$　であるから，

$$L = (1/2)\sum_i \sum_j M_{ij}[\sum_\alpha \dot{q}_\alpha(t)\cdot\mathbf{a}^{(\alpha)}]_i\cdot[\sum_\beta \dot{q}_\beta(t)\cdot\mathbf{a}^{(\beta)}]_j$$

$$-(1/2)\sum_i \sum_j K_{ij}[\sum_\alpha q_\alpha(t)\cdot\mathbf{a}^{(\alpha)}]_i\cdot[\sum_\beta q_\beta(t)\cdot\mathbf{a}^{(\beta)}]_j$$

である．第一項は，固有ベクトルの規格化直交性より，

$$(1/2)\sum_\alpha \sum_\beta (\sum_i \sum_j M_{ij}a_i^{(\alpha)}a_j^{(\beta)})\dot{q}_\alpha(t)\dot{q}_\beta(t) = (1/2)\sum_\alpha \sum_\beta \delta_{\alpha\beta}\cdot\dot{q}_\alpha(t)\dot{q}_\beta(t)$$

となる．また，第二項は，(5-21)と固有ベクトルの規格化直交性を使って，

$$(1/2)\sum_\alpha \sum_\beta (\sum_i \sum_j K_{ij}a_i^{(\alpha)}a_j^{(\beta)})q_\alpha(t)q_\beta(t) = (1/2)\sum_\alpha \sum_\beta (\omega_\alpha)^2(\sum_i \sum_j M_{ij}a_i^{(\alpha)}a_j^{(\beta)})q_\alpha(t)q_\beta(t)$$

$$= (1/2)\sum_\alpha \sum_\beta (\omega_\alpha)^2(\delta_{\alpha\beta})q_\alpha(t)q_\beta(t)$$

$$L = (1/2)\sum_\alpha \sum_\beta \delta_{\alpha\beta}\cdot\dot{q}_\alpha(t)\dot{q}_\beta(t) - ((1/2)\sum_\alpha \sum_\beta (\omega_\alpha)^2(\delta_{\alpha\beta})q_\alpha(t)q_\beta(t)$$

となる．従って，

$$L = (1/2)\sum_\alpha [\{\dot{q}_\alpha(t)\}^2 - (\omega_\alpha)^2\{q_\alpha(t)\}^2] \qquad (5\text{-}35)$$

である．これは単振動の単純和になっていることを示している．この L から運動方程式を再度作ると，$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}) = \ddot{q}_\alpha(t) = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = -(\omega_\alpha)^2 q_\alpha(t)$　となるから，

$$\ddot{q}_\alpha(t) + (\omega_\alpha)^2 q_\alpha(t) = 0 \qquad (5\text{-}36)$$

の単振動の運動方程式が得られる．$q_\alpha(t)$は**基準座標**であり，ω_α　がこれに対応する**基準振動数**である．

5.5　Lagrangian の行列表現

Lagrangian 自体を行列で表現しておくと，上記と同じ結論を比較的簡単に得ることが出来る．これについて記す．

この系の Lagrangian は (5-10)であった．

$$L = T - V = (1/2)\sum_i \sum_j (M_{ij}\dot{x}_i\dot{x}_j - K_{ij}x_i x_j) \tag{5-10}$$

T も V も二次形式になっているから，内積の形式を使って表現出来る．

(5-23)~(5-25)でやったように，

$$\sum_i \sum_j M_{ij}\dot{x}_i\dot{x}_j = \sum_{i=1}^{n}\dot{x}_i \sum_{j=1}^{n}(M_{ij}\dot{x}_j) = (\dot{\mathbf{x}},\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}}) = (\dot{\mathbf{x}})^T\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}} \tag{5-37}$$

$$\sum_i \sum_j K_{ij}x_i x_j = \sum_{i=1}^{n}x_i \sum_{j=1}^{n}(K_{ij}x_j) = (\mathbf{x},\mathbf{K}\mathbf{x}) = (\mathbf{x})^T\mathbf{K}\mathbf{x} \tag{5-38}$$

Lagrangian はこの形式を用いて，

$$L = \frac{1}{2}\{(\dot{\mathbf{x}},\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}}) - (\mathbf{x},\mathbf{K}\mathbf{x})\} = \frac{1}{2}\{(\dot{\mathbf{x}})^T\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}} - (\mathbf{x})^T\mathbf{K}\mathbf{x}\} \tag{5-39}$$

となる．ここでの $\mathbf{x}$ は，(5-34)の一般解が該当するので，これを代入する．

$\mathbf{x} = \sum_{\alpha=1}^{n} q_\alpha(t)\cdot\mathbf{a}^{(\alpha)}$　だから，$\dot{\mathbf{x}} = \sum_{\alpha=1}^{n} \dot{q}_\alpha(t)\cdot\mathbf{a}^{(\alpha)}$　であり，これは

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \bullet \\ \dot{x}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(1)} & \mathbf{a}^{(2)} & \bullet & \mathbf{a}^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \bullet \\ \dot{q}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1^{(1)} & a_1^{(2)} & \bullet & a_1^{(n)} \\ a_2^{(1)} & a_2^{(2)} & \bullet & a_2^{(n)} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ a_n^{(1)} & a_n^{(2)} & \bullet & a_n^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \bullet \\ \dot{q}_n \end{pmatrix} \tag{5-40}$$

となる．列ベクトルである固有ベクトルを(5-40)のように並べた行列は**固有ベクトル行列 U** と呼ばれる．これを使うと，(5-40)は，

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{U}\dot{\mathbf{q}} \tag{5-41}$$

である．一方，$\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}}$ は，この固有ベクトル行列 **U** を使うと，

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \bullet & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ M_{n1} & \bullet & \bullet & M_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^{(1)} & a_1^{(2)} & \bullet & a_1^{(n)} \\ a_2^{(1)} & a_2^{(2)} & \bullet & a_2^{(n)} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ a_n^{(1)} & a_n^{(2)} & \bullet & a_n^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \bullet \\ \dot{q}_n \end{pmatrix} = \mathbf{MU}\dot{\mathbf{q}} \qquad (5\text{-}42)$$

となる．行列の積の転置行列は順序を変えた転置行列の積であるから，

$$(\dot{\mathbf{x}},\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}}) = (\dot{\mathbf{x}})^T \mathbf{M}\dot{\mathbf{x}} = (\mathbf{U}\dot{\mathbf{q}})^T \mathbf{M}(\mathbf{U}\dot{\mathbf{q}}) = (\dot{\mathbf{q}})^T (\mathbf{U}^T\mathbf{MU})\dot{\mathbf{q}} \qquad (5\text{-}43)$$

となる．同様にして，$(\mathbf{x},\mathbf{Kx})$についても，

$$(\mathbf{x},\mathbf{Kx}) = (\mathbf{x})^T \mathbf{Kx} = (\mathbf{Uq})^T \mathbf{K}(\mathbf{Uq}) = (\mathbf{q})^T (\mathbf{U}^T\mathbf{KU})\mathbf{q} \qquad (5\text{-}44)$$

となる．(5-42)からすると，

$$\mathbf{U}^T\mathbf{MU} = \begin{pmatrix} a_1^{(1)} & a_2^{(1)} & \bullet & a_n^{(1)} \\ a_1^{(2)} & a_2^{(2)} & \bullet & a_1^{(2)} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ a_1^{(n)} & a_2^{(n)} & \bullet & a_n^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \bullet & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ M_{n1} & \bullet & \bullet & M_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^{(1)} & a_1^{(2)} & \bullet & a_1^{(n)} \\ a_2^{(1)} & a_2^{(2)} & \bullet & a_2^{(n)} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ a_n^{(1)} & a_n^{(2)} & \bullet & a_n^{(n)} \end{pmatrix} \qquad (5\text{-}45)$$

である．この一般要素は，行列の積に従って，

$$(\mathbf{U}^T\mathbf{MU})_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_k^{(i)} \cdot (\mathbf{MU})_{kj} = \sum_{k=1}^{n} a_k^{(i)} \cdot \sum_{l=1}^{n} (M_{kl} \cdot a_l^{(j)}) \qquad (5\text{-}46)$$

である．一方，固有ベクトルは規格化されており直交しているから，(5-32)より，

$$\begin{pmatrix} a_1^{(\alpha)} & a_2^{(\alpha)} & \bullet & a_n^{(\alpha)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \bullet & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ M_{n1} & \bullet & \bullet & M_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^{(\beta)} \\ a_2^{(\beta)} \\ \bullet \\ a_n^{(\beta)} \end{pmatrix} = \delta_{\alpha\beta}$$

であり．これを成分で書くと

$$\sum_{i=1}^{n} a_i^{(\alpha)} \sum_{j=1}^{n} M_{ij} a_j^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta} \qquad (5\text{-}47)$$

であった．(5-46)と(5-47)を比べると，$(\mathbf{U}^T\mathbf{MU})_{ij} = \delta_{ij}$であることがわかる．即ち，$(\mathbf{U}^T\mathbf{MU}) = \mathbf{E}$ で，対角要素は全て１，非対角要素は０である単位行列である．だから，(5-43)は，

$$(\dot{\mathbf{x}},\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}}) = (\dot{\mathbf{q}})^T (\mathbf{U}^T\mathbf{MU})\dot{\mathbf{q}} = (\dot{\mathbf{q}})^T \dot{\mathbf{q}} \qquad (5\text{-}48)$$

となる．

一方，(5-44)の $(\mathbf{x},\mathbf{Kx})$ の方はどうであろうか？　(5-46)と同様に，

$$(\mathbf{U}^T\mathbf{KU})_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_k^{(i)} \cdot (\mathbf{KU})_{kj} = \sum_{k=1}^{n} a_k^{(i)} \cdot \sum_{l=1}^{n} (K_{kl} \cdot a_l^{(j)}) = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} (K_{kl} \cdot a_k^{(i)} a_l^{(j)}) \qquad (5\text{-}49)$$

となる．(5-21)で

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} K_{ij} a_i^{(\alpha)} a_j^{(\beta)} = \omega_\beta{}^2 \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} M_{ij} a_i^{(\alpha)} a_j^{(\beta)} \qquad (5\text{-}21)$$

であったから，

$$(\mathbf{U}^T\mathbf{KU})_{ij} = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} (\mathbf{K}_{kl} \cdot a_k^{(i)} a_l^{(j)}) = (\omega_j)^2 \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} M_{kl} a_k^{(i)} a_l^{(j)} = (\omega_j)^2 \delta_{ij} \qquad (5\text{-}50)$$

即ち，対角要素に固有振動数の二乗（固有方程式の固有値 $\lambda_i = \omega_i{}^2$）が並び，非対角要素は全て 0 である行列である．**固有値行列**と呼ばれる

$$\mathbf{U}^T\mathbf{KU} = \begin{pmatrix} (\omega_1)^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\omega_2)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bullet & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\omega_n)^2 \end{pmatrix} = \Lambda \qquad (5\text{-}51)$$

従って，

$$(\mathbf{x},\mathbf{Kx}) = (\mathbf{q})^T (\mathbf{U}^T\mathbf{KU})\mathbf{q} = (\mathbf{q})^T \Lambda \mathbf{q} \qquad (5\text{-}52)$$

結局，(5-39)の Lagrangian は，

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}\{(\dot{\mathbf{x}},\mathbf{M}\dot{\mathbf{x}}) - (\mathbf{x},\mathbf{Kx})\} \\ &= \frac{1}{2}\{(\dot{\mathbf{x}})^T \mathbf{M}\dot{\mathbf{x}} - (\mathbf{x})^T \mathbf{Kx}\} = \frac{1}{2}\{(\dot{\mathbf{q}})^T \dot{\mathbf{q}} - (\mathbf{q})^T \Lambda \mathbf{q}\} \qquad (5\text{-}53) \end{aligned}$$

となる．この行列表現は，成分で書いた(5-35)

$$L = (1/2)\sum_{\alpha} [\{\dot{q}_\alpha(t)\}^2 - (\omega_\alpha)^2 \{q_\alpha(t)\}^2] \qquad (5\text{-}35)$$

と同じであり，前節と同じ結論となる．