

Stratified Reduction of Classical Many-body Systems with Symmetry

京都大学・情報学研究科 岩井 敏洋 (Toshihiro Iwai) ¹

山岡 英孝 (Hidetaka Yamaoka) ²

Department of Applied Mathematics and Physics,
Kyoto University

1 概要

多体力学系の回転対称性による簡約化を扱う。回転群 $SO(3)$ は、多体重心系へ自然に作用する。 $SO(3)$ -作用の軌道型に従って、多体重心系は3つの層へ層化される。主層は等方部分群が自明な非特異配位から成る。残りの2つの層は直線状配位からなる層と全衝突配位のみからなる層であり、各々の等方部分群はそれぞれ $SO(2)$ や $SO(3)$ に同型である。後者の2つの層に含まれる配位を特異配位と呼ぶ。古典系、量子系とも、力学は各々の層ごとに定式化され、 $SO(3)$ の対称性により各層ごとに簡約化される。実際、我々は各層で定義された力学を層ごとに簡約化することを、量子系に対して果たしている [1]。本稿では、古典系の層化簡約化をラグランジュ系、及びハミルトン系の両系で考える。また、最後に非特異配位から直線状配位への極限を考える。この際に、簡約化方程式から導かれる拘束条件を3体系において考察する。

2 多体重心系の層化

まず、多体重心系の幾何学的準備をする。 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ を $\mathbf{R}^3$ における質点の位置ベクトルとし、 $m_1, \dots, m_N$ を各質点の質量とする。このとき、質点系の配位は各質点の位置ベクトルの組 $x = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ で表され、配位の全体を配位空間と呼ぶ。ここから平行移動の自由度を取り除いた N 体重心系を M で表す：

$$M = \left\{ x = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \mid \mathbf{x}_j \in \mathbf{R}^3, \sum_{j=1}^N m_j \mathbf{x}_j = \mathbf{0} \right\}. \quad (2.1)$$

さらに、線形部分空間 F_x を

$$F_x = \text{span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \quad (2.2)$$

¹iwai@amp.i.kyoto-u.ac.jp

²yamaoka@amp.i.kyoto-u.ac.jp

で定めると, F_x の次元 $\dim F_x$ に従って, 重心系 M は4つの部分集合に分けられる:

$$M = \bigcup_{k=0}^3 M_k, \quad M_k := \{x \in M \mid \dim F_x = k\}. \quad (2.3)$$

また, 回転群 $SO(3)$ は各質点を一斉に回転させるというやり方で, 重心系 M に自然に作用する. $g \in SO(3)$ と $x \in M$ に対して,

$$\Phi_g(x) = gx = (gx_1, \dots, gx_N) \quad (2.4)$$

である. ある配位 $x \in M$ を通る $SO(3)$ の軌道 $\mathcal{O}_x = \{gx \in M \mid g \in SO(3)\}$ は, x における $SO(3)$ の等方部分群 $G_x = \{g \in SO(3) \mid gx = x\}$ の次元に従って, 3つの軌道型に分類される:

$$\mathcal{O}_x \cong SO(3)/G_x \cong \begin{cases} SO(3) & \text{for } x \in M_2 \cup M_3, \\ S^2 & \text{for } x \in M_1, \\ \{0\} & \text{for } x \in M_0. \end{cases} \quad (2.5)$$

これらの軌道型に従って, 多体重心系は

$$M = \dot{M} \cup M_1 \cup M_0, \quad \dot{M} := M_2 \cup M_3 \quad (2.6)$$

のように3つの層へ層化される. 主層 $\dot{M}$ は等方部分群が自明な非特異配位から成る. 残りの2つの層は直線状配位からなる層 M_1 と全衝突配位のみからなる層 M_0 であり, 各々の等方部分群はそれぞれ $SO(2)$ や $SO(3)$ に同型である. すると, 射影 $\pi: M \rightarrow M/SO(3)$ も層化され, 各層ごとにファイバー束の構造を持つ [1]:

$$\dot{M} \rightarrow \dot{M}/SO(3), \quad M_1 \rightarrow M_1/SO(3), \quad M_0 \rightarrow M_0/SO(3). \quad (2.7)$$

ラグランジアン系, ハミルトン系とも, 力学は各々の層ごとに定式化され, $SO(3)$ の対称性により簡約化される. また, 商空間 $M/SO(3)$ を形状空間と呼ぶ.

ここで, 重心系の配位を記述するのに便利なヤコビベクトル $\mathbf{r}_j$ を

$$\mathbf{r}_j = \left(\frac{1}{\mu_j} + \frac{1}{m_{j+1}} \right)^{-1/2} \left(\mathbf{x}_{j+1} - \frac{1}{\mu_j} \sum_{i=1}^j m_i \mathbf{x}_i \right), \quad j = 1, \dots, N-1 \quad (2.8)$$

のように導入する. 但し, $\mu_j = \sum_{i=1}^j m_i$ である. N 体重心系は $\mathbf{R}^{3(N-1)}$ に同相であり, 重心系の配位は $N-1$ 個のヤコビベクトルの組と同一視できる:

$$M \cong \{x = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N-1}) \mid \mathbf{r}_j \in \mathbf{R}^3, j = 1, \dots, N-1\}. \quad (2.9)$$

このヤコビベクトルを用いて, 慣性テンソル $A_x: \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{R}^3$ は

$$A_x(\mathbf{v}) = \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{r}_j \times (\mathbf{v} \times \mathbf{r}_j), \quad \mathbf{v} \in \mathbf{R}^3, \quad (2.10)$$

と表わすことができ, $x \in \dot{M}$ における接続形式 $\omega_x: T_x(\dot{M}) \rightarrow so(3)$ は

$$\omega_x = R \left(A_x^{-1} \left(\sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{r}_j \times d\mathbf{r}_j \right) \right) \quad (2.11)$$

で定められる. ここで, R は同型写像 $R: \mathbf{R}^3 \rightarrow so(3)$ である. この接続形式 ω_x は $\dot{M}$ の接空間 $T_x(\dot{M})$ の直和分解を与える:

$$T_x(\dot{M}) = V_x \oplus H_x. \quad (2.12)$$

ここで, $V_x := T_x(\mathcal{O}_x)$ であり, $H_x := \ker \omega_x$ である. また, V_x を垂直 (回転) 部分空間と呼び, H_x を水平 (振動) 部分空間と呼ぶ. さらに, 2つの部分空間 V_x と H_x は, 計量

$$ds^2 = \sum_{j=1}^{N-1} d\mathbf{r}_j \cdot d\mathbf{r}_j \quad (2.13)$$

に関して直交する.

今節の最後に, 接続形式と計量を $\dot{M}$ 上の局所座標で表わしておく. 開集合 U を $\dot{M}/SO(3)$ 内の部分集合とし, $\sigma: U \rightarrow \dot{M}$ を U 上で定義される局所切断とすると, $\pi^{-1}(U)$ 内の任意の点 x は

$$x = g\sigma(q) = (g\sigma_1, \dots, g\sigma_{N-1}), \quad q \in U, g \in SO(3) \quad (2.14)$$

と表わされる. $g \in SO(3)$ をオイラー角 (ϕ, θ, ψ) で表わし, $q = (q^1, \dots, q^{3N-6})$ とし, (q, g) を $\dot{M}$ の局所座標とする. このとき, 接続形式 ω_x は

$$\omega_{g\sigma(q)} = dg g^{-1} + g\omega_{\sigma(q)} g^{-1} = g(g^{-1}dg + \omega_{\sigma(q)})g^{-1} \quad (2.15)$$

と書ける. ここで,

$$\omega_{\sigma(q)} := R \left(A_{\sigma(q)}^{-1} \left(\sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j(q) \times d\sigma_j(q) \right) \right) \quad (2.16)$$

とおいた. さらに, $\Lambda_\alpha^a(q)$ を以下の式で定める:

$$\omega_{\sigma(q)} = \sum_{a=1}^3 \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \Lambda_\alpha^a(q) dq^\alpha R(e_a). \quad (2.17)$$

但し, e_a , $a = 1, 2, 3$ は $\mathbf{R}^3$ の標準基底である. また, 動標構 $u_a = g e_a$ 導入すると, 接続形式 ω_x は

$$\omega_{g\sigma(q)} = \sum_{a=1}^3 \Theta^a R(u_a), \quad \Theta^a := \Psi^a + \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \Lambda_\alpha^a(q) dq^\alpha \quad (2.18)$$

と表わすことができる。ここで、 Ψ^a は

$$g^{-1}dg = \sum_{a=1}^3 \Psi^a R(e_a) \quad (2.19)$$

で定められる $SO(3)$ の左不変 1-形式である。

開集合 U 上のベクトル場 $\frac{\partial}{\partial q^\alpha}$ の水平リフト $\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right)^*$ は,

$$\omega_{g\sigma(q)}\left(\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right)^*\right) = 0, \quad \pi_*\left(\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right)^*\right) = \frac{\partial}{\partial q^\alpha} \quad (2.20)$$

を満たすように定められる。 $SO(3)$ 上の左不変ベクトル場を K_a を用いて、水平リフト $\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right)^*$ の局所座標表示

$$\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right)^* = \frac{\partial}{\partial q^\alpha} - \sum_{a=1}^3 \Lambda_a^\alpha(q) K_a, \quad \alpha = 1, 2, \dots, 3N-6 \quad (2.21)$$

を得る。ここで、 $SO(3)$ 上の左不変ベクトル場 K_a は、 Ψ^a と双対関係にある：

$$\Psi^a(K_b) = \delta_b^a, \quad a, b = 1, 2, 3. \quad (2.22)$$

さらに、1-形式 dq^α 、 Θ^a とベクトル場 $\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right)^*$ 、 K_a は

$$\begin{aligned} dq^\alpha\left(\left(\frac{\partial}{\partial q^\beta}\right)^*\right) &= \delta_\beta^\alpha, \quad dq^\alpha(K_a) = 0, \\ \Theta^a\left(\left(\frac{\partial}{\partial q^\beta}\right)^*\right) &= 0, \quad \Theta^a(K_b) = \delta_b^a. \end{aligned} \quad (2.23)$$

を満たし、それぞれ、 $\pi^{-1}(U) \cong U \times SO(3)$ 上の 1-形式とベクトル場の基底をなす。この結果、接空間の直交分解 (2.12) に従って、計量は dq^α 、 Θ^a を用いて

$$ds^2 = \sum_{\alpha, \beta} a_{\alpha\beta} dq^\alpha dq^\beta + \sum_{a, b} A_{ab} \Theta^a \Theta^b \quad (2.24)$$

と表わすことができる。ここで、 $a_{\alpha\beta}$ と A_{ab} を

$$a_{\alpha\beta} := ds^2\left(\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right)^*, \left(\frac{\partial}{\partial q^\beta}\right)^*\right), \quad (2.25)$$

$$A_{ab} := ds^2(K_a, K_b) \quad (2.26)$$

によって導入する。

3 ラグランジュ系の層化簡約化

古典ラグランジュ系では、オイラー–ラグランジュ方程式が系の運動を記述する。このオイラー–ラグランジュ方程式は変分原理から得ることができる [2]。本節では、各層ごとのラグランジュ系に変分原理でオイラー–ラグランジュ方程式を導き、それを $SO(3)$ の対称性により各層ごとに簡約化する。

3.1 非特異配位のラグランジュ力学

前節で述べたように、 $(q, g) \in \pi^{-1}(U)$ は $\dot{M}$ の局所座標であり、 $(\dot{q}, \dot{g}) \in T_{\sigma(q)}(\pi^{-1}(U))$ である。そこで、 $(q, g, \dot{q}, \dot{g})$ が $T\dot{M}$ の局所座標となる。だが、(2.18) 式で与えられる接続形式 Θ^a から、 $so(3)$ -値変数 Π を

$$\Pi = \xi + \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha} \dot{q}^{\alpha} \quad (3.1)$$

を導入し、 $(q, g, \dot{q}, \Pi)$ を $T\dot{M}$ の局所座標とする。ここで、

$$\xi = g^{-1} \dot{g}, \quad \Lambda_{\alpha} = \sum_a \Lambda_{\alpha}^a(q) R(e_a) \quad (3.2)$$

とおいた。今、系にラグランジアン $L(q, g, \dot{q}, \Pi)$ が与えられていると仮定する。このとき、固定端条件

$$\delta q(t_i) = 0, \quad \delta g(t_i) = 0, \quad i = 1, 2 \quad (3.3)$$

の下での変分原理

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, g, \dot{q}, \Pi) dt = 0 \quad (3.4)$$

を適用し、オイラー–ラグランジュ方程式を導く。ラグランジアン L の変分は

$$\delta L = \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial q^{\alpha}} \delta q^{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^{\alpha}} \delta \dot{q}^{\alpha} + \left\langle \frac{\partial L}{\partial g}, \delta g \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial \Pi}, \delta \Pi \right\rangle \quad (3.5)$$

と表わされる。ここで、 $\langle A, B \rangle := \text{tr}(A^T B)$ とする。但し、 $so(3)$ -値変数 Π の変分は

$$\delta \Pi = [\xi, g^{-1} \delta g] + \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{\partial \Lambda_{\beta}}{\partial q^{\alpha}} - \frac{\partial \Lambda_{\alpha}}{\partial q^{\beta}} \right) \dot{q}^{\beta} \delta q^{\alpha} + \frac{d}{dt}(g^{-1} \delta g) + \frac{d}{dt} \left(\sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha} \delta q^{\alpha} \right) \quad (3.6)$$

であることに注意。すると、非特異配位のオイラー–ラグランジュ方程式は

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^{\alpha}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^{\alpha}}$$

$$= \left\langle \frac{\partial L}{\partial \Pi}, \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} \dot{q}^{\beta} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial L}{\partial \Pi}, [\Pi, \Lambda_{\alpha}] \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle g^{-1} \frac{\partial L}{\partial g} - \left(\frac{\partial L}{\partial g} \right)^T g, \Lambda_{\alpha} \right\rangle, \quad (3.7a)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \Pi} \right) = \left[\frac{\partial L}{\partial \Pi}, \Pi \right] - \sum_{\beta} \left[\frac{\partial L}{\partial \Pi}, \Lambda_{\beta} \right] \dot{q}^{\beta} + \frac{1}{2} \left(g^{-1} \frac{\partial L}{\partial g} - \left(\frac{\partial L}{\partial g} \right)^T g \right) \quad (3.7b)$$

となる。但し、 $K_{\alpha\beta}$ は曲率テンソルである：

$$K_{\alpha\beta} := \frac{\partial \Lambda_{\beta}}{\partial q^{\alpha}} - \frac{\partial \Lambda_{\alpha}}{\partial q^{\beta}} - [\Lambda_{\alpha}, \Lambda_{\beta}]. \quad (3.8)$$

ここで、オイラー–ラグランジュ方程式が、局所切断の選び方に依らないことを注意しておく。実際、 $U \cap U' \neq \emptyset$ を満たす開集合 $U' \subset \dot{M}/SO(3)$ に対して、局所切断 $\sigma' : U' \rightarrow \dot{M}$ をとる。すると、 $q \in U \cap U'$ に対して、 $\sigma'(q) = h(q)\sigma(q)$ を満たす $h(q) \in SO(3)$ が存在する。このとき、以下のようにテンソルの変換則を満たす量と、接続の変換則と同様の変換をする量が存在する：

$$\begin{aligned} A_{\sigma'(q)} &= h(q) A_{\sigma(q)} h^{-1}(q), \quad \Pi' = h(q) \Pi h^{-1}(q), \\ K'_{\alpha\beta} &= h(q) K_{\alpha\beta} h^{-1}(q), \quad \frac{\partial L'}{\partial \Pi'} = h(q) \frac{\partial L}{\partial \Pi} h^{-1}(q), \quad \dots \text{ etc.} \end{aligned}$$

$$\Lambda'_{\alpha}(q) = \frac{\partial h}{\partial q^{\alpha}}(q) h^{-1}(q) + h(q) \Lambda_{\alpha}(q) h^{-1}(q), \quad \dots \text{ etc.}$$

これらの変換則を用いることによって、オイラー–ラグランジュ方程式が局所切断の選び方に依らないことを示すことができる。

さて、ラグランジアン L が $SO(3)$ -作用の下で不変であると仮定しよう：

$$L(q, hg, \dot{q}, \Pi) = L(q, g, \dot{q}, \Pi), \quad \forall h \in SO(3). \quad (3.9)$$

ここで、 Π は左作用の下で不変であることに注意。 $h = e^{t\eta}$ において $t = 0$ でこの等式を微分すると、

$$\left. \frac{d}{dt} L(q, \dot{q}, e^{t\eta} g, \Pi) \right|_{t=0} = \left\langle \frac{\partial L}{\partial g}, \eta g \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial L}{\partial g} g^{-1} - g \left(\frac{\partial L}{\partial g} \right)^T, \eta \right\rangle = 0 \quad (3.10)$$

となる。さらに、 $\eta \in \mathfrak{so}(3)$ は任意であるから、ラグランジアンが $SO(3)$ -不変であるための条件として、

$$g^{-1} \frac{\partial L}{\partial g} - \left(\frac{\partial L}{\partial g} \right)^T g = 0 \quad (3.11)$$

を得る。このとき、ラグランジアン L は、商バンドル

$$T\dot{M}/SO(3) \cong T(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}} \quad (3.12)$$

上の関数 $L^*(q, \dot{q}, \Pi)$ に簡約化される。ここで、上式の右辺はホイットニー和であり、 $\tilde{\mathcal{G}}$ は $\mathcal{G} = so(3)$ 上の随伴束 $\tilde{\mathcal{G}} = \dot{M} \times_{SO(3)} \mathcal{G}$ である。このとき、(3.7) 式、(3.11) 式から、 $T(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}$ 上の簡約化運動方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \dot{q}^\alpha} \right) - \frac{\partial L^*}{\partial q^\alpha} = \left\langle \frac{\partial L^*}{\partial \Pi}, \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} \dot{q}^\beta \right\rangle - \left\langle \frac{\partial L^*}{\partial \Pi}, [\Pi, \Lambda_\alpha] \right\rangle, \quad (3.13a)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L^*}{\partial \Pi} = \left[\frac{\partial L^*}{\partial \Pi}, \Pi \right] - \sum_{\beta} \left[\frac{\partial L^*}{\partial \Pi}, \Lambda_\beta \right] \dot{q}^\beta \quad (3.13b)$$

を得る。また、(3.13b) 式は $\frac{d}{dt} \frac{\partial L^*}{\partial \Pi} = \left[\frac{\partial L^*}{\partial \Pi}, \xi \right]$ と変形でき、これより

$$\frac{d}{dt} \left(g \frac{\partial L^*}{\partial \Pi} g^{-1} \right) = 0 \quad (3.14)$$

を得る。即ち、 $g \frac{\partial L^*}{\partial \Pi} g^{-1}$ は保存量であることがわかる。

定理 1 非特異配位のオイラー–ラグランジュ方程式は (3.7) 式で与えられ、これは局所切断の選び方に依らない。さらに、ラグランジアンが $SO(3)$ -不変であるとき、オイラー–ラグランジュ方程式は $T(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}$ 上の運動方程式 (3.13) に簡約化される。また、 $g \frac{\partial L^*}{\partial \Pi} g^{-1}$ は保存量である。

計量の局所座標表示 (2.24) から、非特異配位の $SO(3)$ -不変なラグランジアンは

$$L^*(q, \dot{q}, \Pi) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} a_{\alpha\beta} \dot{q}^\alpha \dot{q}^\beta + \frac{1}{4} \langle \Pi, R A_{\sigma(q)} R^{-1} \Pi \rangle - V(q) \quad (3.15)$$

で与えられる。但し、ポテンシャルエネルギーは、形状空間の座標 q のみに依存する関数 $V(q)$ を選ぶ。すると、簡約化運動方程式は

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \dot{q}^\alpha + \sum_{\beta, \gamma} \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \dot{q}^\beta \dot{q}^\gamma + \sum_{\beta} a^{\alpha\beta} \frac{\partial V}{\partial q^\beta} \\ &= \sum_{\beta, \gamma} a^{\alpha\beta} \left(A\pi \cdot \kappa_{\beta\gamma} \dot{q}^\gamma + \frac{1}{2} \pi \cdot \left(\frac{\partial A}{\partial q^\beta} - [\Lambda_\beta, A] \right) \pi \right), \end{aligned} \quad (3.16a)$$

$$\frac{d}{dt} (A\pi) = A\pi \times \pi - \sum_{\alpha} A\pi \times \lambda_\alpha \dot{q}^\alpha \quad (3.16b)$$

と表わされる。但し、ベクトル π , λ_β , $\kappa_{\alpha\beta}$ は

$$\Pi = R(\pi), \quad \Lambda_\beta = R(\lambda_\beta), \quad K_{\alpha\beta} = R(\kappa_{\alpha\beta}) \quad (3.17)$$

で定められる. また, $\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha$ は計量テンソル $a_{\alpha\beta}$ から求まるクリストッフェル記号である:

$$\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha := \frac{1}{2} \sum_{\delta} a^{\alpha\delta} \left(\frac{\partial a_{\delta\gamma}}{\partial q^\beta} + \frac{\partial a_{\delta\beta}}{\partial q^\gamma} - \frac{\partial a_{\beta\gamma}}{\partial q^\delta} \right). \quad (3.18)$$

ここで, $(a^{\alpha\beta}) = (a_{\alpha\beta})^{-1}$ とした. また, 保存量 $g \frac{\partial L^*}{\partial \Pi} g^{-1}$ は全角運動量の $\frac{1}{2}$ であることが確かめられる:

$$g \frac{\partial L^*}{\partial \Pi} g^{-1} = \frac{1}{2} g R(A_{\sigma(q)} \pi) g^{-1} = \frac{1}{2} R(g A_{\sigma(q)} \pi) = \frac{1}{2} R(L). \quad (3.19)$$

ここで, L は全角運動量

$$L = \sum_j \mathbf{r}_j \times \dot{\mathbf{r}}_j = g A_{\sigma(q)} \pi \quad (3.20)$$

である.

今節の最後に, 共変微分について記しておく. $\frac{D}{\partial q^\alpha} = \frac{\partial}{\partial q^\alpha} - \Lambda_\alpha$ は, $\dot{M} \times_{SO(3)} \mathbf{R}^3 \cong \tilde{\mathcal{G}}$ の切断に対する共変微分として働く. そこで, 曲線 $q(t)$ に沿った共変微分を

$$\frac{D}{dt} := \frac{d}{dt} - \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha} \dot{q}^{\alpha} = \sum_{\alpha} \dot{q}^{\alpha} \frac{D}{\partial q^{\alpha}} \quad (3.21)$$

のように導入すると, (3.16b) 式は

$$\frac{D}{dt} (A_{\sigma(q)} \pi) = A_{\sigma(q)} \pi \times \pi \quad (3.22)$$

と表わすことができる.

3.2 直線状配位のラグランジュ力学

まず, $M_1/SO(3)$ の局所座標を導入しよう. $\tilde{U}$ を $M_1/SO(3)$ 内の開集合とし, $\tilde{\sigma}: \tilde{U} \rightarrow M_1$ を $\tilde{U}$ 上で定義される局所切断とする:

$$\tilde{\sigma}(\zeta) = (\zeta^1 \mathbf{e}_3, \dots, \zeta^{N-1} \mathbf{e}_3), \quad \zeta = (\zeta^\alpha) \in \tilde{U}. \quad (3.23)$$

すると, $\pi^{-1}(\tilde{U})$ 内の任意の点 x は

$$x = g \tilde{\sigma}(\zeta) = (\zeta^1 g \mathbf{e}_3, \dots, \zeta^{N-1} g \mathbf{e}_3), \quad g \in SO(3) \quad (3.24)$$

と表わされる. ここで, g をオイラー角 (ϕ, θ, ψ) を用いて $g = e^{\phi R(\mathbf{e}_3)} e^{\theta R(\mathbf{e}_2)} e^{\psi R(\mathbf{e}_3)}$ と表わすと, オイラー角の1つ ψ は無効となる. この結果, 配位 x は局所座標 $(\theta, \phi, \zeta^1, \dots, \zeta^{N-1})$ によって指定されることに注意. 以下では, $g = e^{\phi R(\mathbf{e}_3)} e^{\theta R(\mathbf{e}_3)}$ とする. ベクトル場

$$\tilde{K}_1 = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad \tilde{K}_2 = \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (3.25)$$

は $SO(3)$ の軌道に接し, これらが M_1 上の垂直ベクトル場の基底となる. また, M_1 上に誘導される計量 $\tilde{ds}^2$ は

$$\tilde{ds}^2 = \sum_{\alpha=1}^{N-1} (\zeta^\alpha)^2 (\sin^2 \theta d\phi^2 + d\theta^2) + \sum_{\alpha=1}^{N-1} (d\zeta^\alpha)^2 \quad (3.26)$$

と表わされる. このとき,

$$ds^2 \left(\tilde{K}_a, \tilde{K}_b \right) = \sum_{\alpha=1}^{N-1} (\zeta^\alpha)^2 \delta_{ab}, \quad a, b = 1, 2, \quad (3.27a)$$

$$ds^2 \left(\tilde{K}_a, \frac{\partial}{\partial \zeta^\alpha} \right) = 0, \quad a = 1, 2, \quad \alpha = 1, \dots, N-1, \quad (3.27b)$$

$$ds^2 \left(\frac{\partial}{\partial \zeta^\alpha}, \frac{\partial}{\partial \zeta^\beta} \right) = \delta^{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N-1 \quad (3.27c)$$

が確かめられ, $\frac{\partial}{\partial \zeta^\alpha}, \alpha = 1, \dots, N-1$ が水平ベクトル場の基底となる.

TM_1 の局所座標は $(\zeta, \mathbf{u}, \dot{\zeta}, \dot{\mathbf{u}})$ である. 但し, $\mathbf{u} := g\mathbf{e}_3$ とおいた. 関係式 $\tilde{\xi} = g^{-1}\dot{g} = R(\tilde{\Omega})$ より, $\dot{\mathbf{u}}$ は

$$\dot{\mathbf{u}} = g\tilde{\xi}\mathbf{e}_3 = gR(\tilde{\Omega})\mathbf{e}_3 = g(\tilde{\Omega} \times \mathbf{e}_3) \quad (3.28)$$

と表わせるから, $so(3)$ -値変数 $\tilde{\Pi}$ を

$$\tilde{\Pi} := R(\tilde{\Omega} \times \mathbf{e}_3) = [g^{-1}\dot{g}, R(\mathbf{e}_3)] \quad (3.29)$$

により導入する. 以下では, $(\zeta, \mathbf{u}, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi})$ を TM_1 の局所座標とする. 非特異配位の場合と同様に, 変分原理を用いることにより, 直線状配位のオイラー-ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\zeta}^\alpha} \right) - \frac{\partial L}{\partial \zeta^\alpha} = 0, \quad (3.30a)$$

$$\tilde{P} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \tilde{\Pi}} - \left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L}{\partial \tilde{\Pi}} \right), \tilde{\xi} \right] - \frac{1}{2} R \left(g^{-1} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} \right) \right) = 0, \quad (3.30b)$$

$$\left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L}{\partial \tilde{\Pi}} \right), \tilde{\Pi} \right] = 0 \quad (3.30c)$$

を得る. ここで, $P = I - \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3^T$ であり, $\tilde{P}$ は $\tilde{P}R = RP$ を満たす射影作用素である.

さて, ラグランジアン L が $SO(3)$ -作用の下で不変であると仮定しよう:

$$L(\zeta, e^{tR(\mathbf{a})}\mathbf{u}, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi}) = L(\zeta, \mathbf{u}, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi}) \quad \text{for all } R(\mathbf{a}) \in so(3). \quad (3.31)$$

ここで, $\tilde{\Pi}$ は左作用の下で不変であることに注意. $t=0$ でこの等式を微分すると,

$$\frac{d}{dt} L(\zeta, e^{tR(\mathbf{a})}\mathbf{u}, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi}) \Big|_{t=0} = R(\mathbf{a})\mathbf{u} \cdot \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{a} \cdot \left(\mathbf{u} \times \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} \right) = 0 \quad (3.32)$$

となり, $\mathbf{a} \in \mathbf{R}^3$ は任意であるから,

$$\mathbf{u} \times \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} = (g\mathbf{e}_3) \times \left(gg^{-1} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} \right) = g \left(\mathbf{e}_3 \times g^{-1} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} \right) = 0. \quad (3.33)$$

この結果, ラグランジアンが $SO(3)$ -不変であるための条件として,

$$\tilde{P} \left(R \left(g^{-1} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} \right) \right) = 0 \quad (3.34)$$

を得る. このとき, ラグランジアン L は, 商バンドル

$$TM_1/SO(3) \cong T(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1 \quad (3.35)$$

上の関数 $L^*(\zeta, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi})$ に簡約化される. ここで, $\tilde{\mathcal{G}}_1$ は $M_1/SO(3)$ 上のあるベクトル束である. このとき, (3.30) 式, (3.34) 式から, $T(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1$ 上の簡約化運動方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \dot{\zeta}^\alpha} \right) - \frac{\partial L^*}{\partial \zeta^\alpha} = 0, \quad (3.36a)$$

$$\tilde{P} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L^*}{\partial \tilde{\Pi}} - \left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \tilde{\Pi}} \right), \tilde{\xi} \right] \right) = 0, \quad (3.36b)$$

$$\left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \tilde{\Pi}} \right), \tilde{\Pi} \right] = 0 \quad (3.36c)$$

を得る. また, (3.36b) 式, (3.36c) 式から,

$$\frac{d}{dt} \left(g \left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \tilde{\Pi}} \right), R(\mathbf{e}_3) \right] g^{-1} \right) = 0 \quad (3.37)$$

を得る. 即ち, $g \left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \tilde{\Pi}} \right), R(\mathbf{e}_3) \right] g^{-1}$ は保存量であることがわかる.

定理 2 直線状配位のオイラー-ラグランジュ方程式は (3.30) 式で与えられ, これは局所切断の選び方に依らない. さらに, ラグランジアンが $SO(3)$ -不変であるとき, オイラー-ラグランジュ方程式は $T(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1$ 上の運動方程式 (3.36) に簡約化される. また, $g \left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \tilde{\Pi}} \right), R(\mathbf{e}_3) \right] g^{-1}$ は保存量である.

N 体系の直線状配位のラグランジアンは

$$L^*(\zeta, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\dot{\zeta}^\alpha)^2 + \frac{1}{4} \rho(\zeta) \langle \tilde{\Pi}, \tilde{\Pi} \rangle - V_1(\zeta) \quad (3.38)$$

で与えられる. 但し, $\rho(\zeta) = \sum_{\alpha} (\zeta^\alpha)^2$ とおいた. また, ポテンシャルエネルギーは, 形状空間の座標 ζ のみに依存する関数 $V_1(\zeta)$ を選ぶ. すると, 直線状配位の簡約化運動

方程式は

$$\frac{d}{dt}\dot{\zeta}^\alpha + \frac{\partial V_1}{\partial \zeta^\alpha} = \zeta^\alpha \left| \tilde{\Omega} \times e_3 \right|^2, \quad (3.39a)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\rho(\zeta) \tilde{\Omega} \times e_3 \right) = P \left(\left(\rho(\zeta) \tilde{\Omega} \times e_3 \right) \times \tilde{\Omega} \right) \quad (3.39b)$$

と表わされる。また、保存量 $g \left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \tilde{\Pi}} \right), R(e_3) \right] g^{-1}$ は

$$\begin{aligned} g \left[\tilde{P} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \tilde{\Pi}} \right), R(e_3) \right] g^{-1} &= \frac{1}{2} g \left[RP \left(\rho(\zeta) \tilde{\Omega} \times e_3 \right), R(e_3) \right] g^{-1} \\ &= -\frac{1}{2} R \left(g \tilde{M} \right) \end{aligned} \quad (3.40)$$

と計算される。ここで、

$$\tilde{M} := \rho(\zeta) P(\tilde{\Omega}) = \rho(\zeta) e_3 \times (\tilde{\Omega} \times e_3) \quad (3.41)$$

とおいた。これは body フレームでみた全角運動量である。この結果、全角運動量 $g \tilde{M}$ が保存されることが分かる。

4 ハミルトン系の層化簡約化

古典ハミルトン系でも同様に、ハミルトンの運動方程式が変分原理から各層で得ることができ、 $SO(3)$ の対称性により各層ごとに簡約化される。

4.1 非特異配位のハミルトン力学

$T\dot{M}$ の局所座標は $(q, g, \dot{q}, \Pi)$ で与えられた。この系にラグランジアン $L(q, g, \dot{q}, \Pi)$ が与えられていると仮定すると、 $(\dot{q}, \Pi)$ に共役な運動量 $(p, \mathcal{M})$ は

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha}, \quad \mathcal{M} = 2 \frac{\partial L}{\partial \Pi} \quad (4.1)$$

により定められる。そこで、 $(q, g, p, \mathcal{M})$ を $T^*\dot{M}$ の局所座標とする。このとき、ハミルトニアン H は

$$H(q, g, p, \mathcal{M}) = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}^\alpha + \frac{1}{2} \langle \mathcal{M}, \Pi \rangle - L(q, g, \dot{q}, \Pi) \quad (4.2)$$

で与えられる。

古典ハミルトン系でもラグランジュ系と同様に、変分原理からハミルトン方程式が導かれる。実際、境界条件

$$\delta q(t_i) = 0, \quad \delta g(t_i) = 0, \quad \delta p(t_i) = 0, \quad \delta \mathcal{M}(t_i) = 0, \quad i = 1, 2 \quad (4.3)$$

の下で変分原理

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{\alpha} p_{\alpha} \frac{dq^{\alpha}}{dt} + \frac{1}{2} \langle \mathcal{M}, \Pi \rangle - H(q, g, p, \mathcal{M}) \right) dt = 0 \quad (4.4)$$

を適用すると、非特異配位のハミルトン方程式

$$\dot{q}^{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}}, \quad \Pi = 2 \frac{\partial H}{\partial \mathcal{M}}, \quad (4.5a)$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_{\alpha} + \frac{\partial H}{\partial q^{\alpha}} &= \frac{1}{2} \left\langle \mathcal{M}, \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial p_{\beta}} \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle \mathcal{M}, \left[2 \frac{\partial H}{\partial \mathcal{M}}, \Lambda_{\alpha} \right] \right\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \left\langle g^{-1} \frac{\partial H}{\partial g} - \left(\frac{\partial H}{\partial g} \right)^T g, \Lambda_{\alpha} \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.5b)$$

$$\dot{\mathcal{M}} = \left[\mathcal{M}, 2 \frac{\partial H}{\partial \mathcal{M}} \right] - \sum_{\beta} [\mathcal{M}, \Lambda_{\beta}] \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} - \left(g^{-1} \frac{\partial H}{\partial g} - \left(\frac{\partial H}{\partial g} \right)^T g \right) \quad (4.5c)$$

を得る。

さて、ハミルトニアン H が $SO(3)$ -作用の下で不変であると仮定しよう：

$$H(q, hg, p, \mathcal{M}) = H(q, g, p, \mathcal{M}), \quad \forall h \in SO(3). \quad (4.6)$$

ここで、 Π は左作用の下で不変であるから、 $\mathcal{M}$ も左作用の下で不変であることに注意。 $h = e^{t\eta}$ において $t = 0$ でこの等式を微分すると、

$$\left. \frac{d}{dt} H(q, e^{t\eta} g, p, \mathcal{M}) \right|_{t=0} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial g}, \eta g \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial H}{\partial g} g^{-1} - g \left(\frac{\partial H}{\partial g} \right)^T, \eta \right\rangle = 0 \quad (4.7)$$

となる。さらに、 $\eta \in \mathfrak{so}(3)$ は任意であるから、ハミルトニアンが $SO(3)$ -不変であるための条件として、

$$g^{-1} \frac{\partial H}{\partial g} - \left(\frac{\partial H}{\partial g} \right)^T g = 0 \quad (4.8)$$

を得る。このとき、ハミルトニアン H は、商バンドル

$$T^* \dot{M} / SO(3) \cong T^*(\dot{M} / SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}^* \quad (4.9)$$

上の関数 $H^*(q, p, \mathcal{M})$ に簡約化される. ここで, 上式の右辺はホイットニー和であり, $\tilde{\mathcal{G}}^*$ は $\mathcal{G}^* \cong so(3)$ 上の余随伴束 $\tilde{\mathcal{G}}^* := \dot{M} \times_{SO(3)} \mathcal{G}^*$ である. このとき, (4.5) 式, (4.8) 式から, $T^*(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}^*$ 上の簡約化運動方程式

$$\dot{q}^\alpha = \frac{\partial H^*}{\partial p_\alpha}, \quad \Pi = 2 \frac{\partial H^*}{\partial \mathcal{M}}, \quad (4.10a)$$

$$\dot{p}_\alpha + \frac{\partial H^*}{\partial q^\alpha} = \frac{1}{2} \left\langle \mathcal{M}, \sum_\beta K_{\alpha\beta} \frac{\partial H^*}{\partial p_\beta} \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle \mathcal{M}, \left[2 \frac{\partial H^*}{\partial \mathcal{M}}, \Lambda_\alpha \right] \right\rangle, \quad (4.10b)$$

$$\dot{\mathcal{M}} = \left[\mathcal{M}, 2 \frac{\partial H^*}{\partial \mathcal{M}} \right] - \sum_\beta [\mathcal{M}, \Lambda_\beta] \frac{\partial H^*}{\partial p_\alpha} \quad (4.10c)$$

を得る. また, (4.10c) 式は $\dot{\mathcal{M}} = [\mathcal{M}, \xi]$ と変形でき, $g\mathcal{M}g^{-1}$ が保存量であることが分かる:

$$\frac{d}{dt} (g\mathcal{M}g^{-1}) = 0. \quad (4.11)$$

定理 3 非特異配位のハミルトン方程式は (4.5) 式で与えられ, これは局所切断の選び方に依らない. さらに, ハミルトニアンが $SO(3)$ -不変であるとき, ハミルトン方程式は $T^*(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}^*$ 上の運動方程式 (4.10) に簡約化される. また, $g\mathcal{M}g^{-1}$ は保存量である.

非特異配位の $SO(3)$ -不変なハミルトニアンは

$$H^*(q, p, \mathcal{M}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} a^{\alpha\beta} p_\alpha p_\beta + \frac{1}{4} \left\langle \mathcal{M}, \tilde{A}^{-1} \mathcal{M} \right\rangle + V(q) \quad (4.12)$$

で与えられる. 但し, $\tilde{A}^{-1} = RA^{-1}R^{-1}$ とおいた. ここで, ベクトル値変数 $\mathbf{M}$ を

$$\mathcal{M} = R(\mathbf{M}) \quad (4.13)$$

で定める. すると, 簡約化運動方程式は

$$\dot{q}^\alpha = \sum_\beta a^{\alpha\beta} p_\beta, \quad \pi = A^{-1} \mathbf{M}, \quad (4.14a)$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_\alpha &= \sum_{\beta, \gamma, \mu} a^{\beta\mu} \Gamma_{\mu\alpha}^\gamma p_\gamma p_\beta + \frac{\partial V}{\partial q^\alpha} \\ &= \sum_{\beta, \gamma} \mathbf{M} \cdot \kappa_{\alpha\beta} a^{\beta\gamma} p_\gamma - \frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot \left(\frac{\partial A^{-1}}{\partial q^\alpha} - [\Lambda_\alpha, A^{-1}] \right) \mathbf{M}, \end{aligned} \quad (4.14b)$$

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} - \sum_{\alpha, \beta} a^{\alpha\beta} p_\alpha \lambda_\beta \times \mathbf{M} = \mathbf{M} \times A^{-1} \mathbf{M} \quad (4.14c)$$

と表わされる. また, $g\mathcal{M}g^{-1} = R(g\mathbf{M})$ であるから, 全角運動量 $\mathbf{L} = g\mathbf{M}$ が保存されることが分かる.

4.2 直線状配位のハミルトン力学

TM_1 の局所座標は $(\zeta, \mathbf{u}, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi})$ で与えられた. この系にラグランジアン $L(\zeta, \mathbf{u}, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi})$ が与えられていると仮定すると, $(\dot{\zeta}, \tilde{\Pi})$ に共役な運動量 $(\varpi, \tilde{\mathcal{M}})$ は

$$\varpi_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{\zeta}^\alpha}, \quad \tilde{\mathcal{M}} = 2 \frac{\partial L}{\partial \tilde{\Pi}} \quad (4.15)$$

により定められる. そこで, $(\zeta, \mathbf{u}, \varpi, \tilde{\mathcal{M}})$ を T^*M_1 の局所座標とする. このとき, ハミルトニアン H は

$$H(\zeta, \mathbf{u}, \varpi, \tilde{\mathcal{M}}) = \sum_\alpha \varpi_\alpha \dot{\zeta}^\alpha + \frac{1}{2} \langle \tilde{\mathcal{M}}, \tilde{\Pi} \rangle - L(\zeta, \mathbf{u}, \dot{\zeta}, \tilde{\Pi}) \quad (4.16)$$

で与えられる. 非特異配位の場合と同様に, 変分原理を適用することにより, 直線状配位のハミルトン方程式

$$\dot{\zeta}^\alpha = \frac{\partial H}{\partial \varpi_\alpha}, \quad \tilde{\Pi} = 2 \frac{\partial H}{\partial \tilde{\mathcal{M}}}, \quad (4.17a)$$

$$\dot{\varpi}_\alpha = - \frac{\partial H}{\partial \zeta^\alpha}, \quad (4.17b)$$

$$\tilde{P} \left(\dot{\tilde{\mathcal{M}}} - [\tilde{P}(\tilde{\mathcal{M}}), \tilde{\xi}] + R \left(\tilde{g}^{-1} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \right) \right) = 0, \quad (4.17c)$$

$$\left[\tilde{P}(\tilde{\mathcal{M}}), 2 \frac{\partial H}{\partial \tilde{\mathcal{M}}} \right] = 0 \quad (4.17d)$$

を得る.

さて, ハミルトニアン H が $SO(3)$ -作用の下で不変であると仮定しよう:

$$H(\zeta, e^{tR(\mathbf{a})} \mathbf{u}, \varpi, \tilde{\mathcal{M}}) = H(\zeta, \mathbf{u}, \varpi, \tilde{\mathcal{M}}) \quad \text{for all } R(\mathbf{a}) \in so(3). \quad (4.18)$$

ここで, $\tilde{\Pi}$ は左作用の下で不変であるから, $\tilde{\mathcal{M}}$ も左作用の下で不変であることに注意. $t=0$ でこの等式を微分すると,

$$\left. \frac{d}{dt} H(\zeta, e^{tR(\mathbf{a})} \mathbf{u}, \varpi, \tilde{\mathcal{M}}) \right|_{t=0} = R(\mathbf{a}) \mathbf{u} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{a} \cdot \left(\mathbf{u} \times \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \right) = 0 \quad (4.19)$$

となり, $\mathbf{a} \in \mathbf{R}^3$ は任意であるから,

$$\mathbf{u} \times \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} = \tilde{g} \left(\mathbf{e}_3 \times \tilde{g}^{-1} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \right) = 0. \quad (4.20)$$

この結果, ハミルトニアンが $SO(3)$ -不変であるための条件として,

$$P \left(\tilde{g}^{-1} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \right) = 0 \quad (4.21)$$

を得る. このとき, ハミルトニアン H は, 商バンドル

$$T^*M_1/SO(3) \cong T^*(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1^* \quad (4.22)$$

上の関数 $H^*(\zeta, \varpi, \tilde{\Pi})$ に簡約化される. ここで, $\tilde{\mathcal{G}}_1^*$ は $M_1/SO(3)$ 上のある余ベクトル束である. このとき, (4.17) 式, (4.21) 式から, $T^*(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1^*$ 上の簡約化運動方程式

$$\dot{\zeta}^\alpha = \frac{\partial H^*}{\partial \varpi_\alpha}, \quad \tilde{\Pi} = 2 \frac{\partial H^*}{\partial \tilde{\mathcal{M}}}, \quad (4.23a)$$

$$\dot{\varpi}_\alpha = -\frac{\partial H^*}{\partial \zeta^\alpha}, \quad \tilde{P} \left(\dot{\tilde{\mathcal{M}}} - \left[\tilde{P}(\tilde{\mathcal{M}}), \tilde{\xi} \right] \right) = 0, \quad (4.23b)$$

$$\left[\tilde{P}(\tilde{\mathcal{M}}), 2 \frac{\partial H^*}{\partial \tilde{\mathcal{M}}} \right] = 0 \quad (4.23c)$$

を得る. また, これらの式から,

$$\frac{d}{dt} (g\tilde{\mathcal{M}}g^{-1}) = 0 \quad (4.24)$$

であることが確かめられる. 即ち, $g\tilde{\mathcal{M}}g^{-1}$ は保存量であることが分かる.

定理 4 直線状配位のハミルトン方程式は (4.17) 式で与えられ, これは局所切断の選び方に依らない. さらに, ハミルトニアンが $SO(3)$ -不変であるとき, ハミルトン方程式は $T^*(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1^*$ 上の運動方程式 (4.23) に簡約化される. また, $g\tilde{\mathcal{M}}g^{-1}$ は保存量である.

N 体系の直線状配位のハミルトニアンは

$$H^*(\zeta, \varpi, \mathcal{M}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \varpi_{\alpha}^2 + \frac{1}{4\rho(\zeta)} \langle \mathcal{M}, \mathcal{M} \rangle + V_1(\zeta) \quad (4.25)$$

で与えられる. すると, 直線状配位の簡約化運動方程式は

$$\dot{\zeta}^\alpha = \varpi_\alpha, \quad \tilde{\Omega} \times e_3 = \frac{1}{\rho(\zeta)} \tilde{\mathbf{M}}, \quad (4.26a)$$

$$\dot{\varpi}_\alpha = \frac{\zeta^\alpha}{\rho(\zeta)^2} |\tilde{\mathbf{M}}|^2 - \frac{\partial V_1}{\partial \zeta^\alpha}, \quad \frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{M}} = P(\tilde{\mathbf{M}} \times \tilde{\Omega}) \quad (4.26b)$$

と表わされる. また, $g\tilde{\mathcal{M}}g^{-1} = R(g\tilde{\mathbf{M}})$ であるから, 全角運動量 $g\tilde{\mathbf{M}}$ が保存されることが分かる.

5 3体系のラグランジュ力学

今節では、直線状配位付近でのオイラー-ラグランジュ方程式について考察する。簡単のため、3体系を扱う。形状空間 $M/SO(3)$ の内部座標 $q = (q_1, q_2, q_3)$ を

$$q_1 = r_1, \quad q_2 = r_2 \cos \varphi, \quad q_3 = r_2 \sin \varphi \quad (5.1)$$

で定める。但し、 r_1, r_2, φ は

$$r_1 = \|\mathbf{r}_1\|, \quad r_2 = \|\mathbf{r}_2\|, \quad \cos \varphi = \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2}{\|\mathbf{r}_1\| \cdot \|\mathbf{r}_2\|} \quad (5.2)$$

である。そして、局所切断 $\sigma(q) = (\sigma_1(q), \sigma_2(q))$ を

$$\sigma_1(q) = q_1 \mathbf{e}_3, \quad \sigma_2(q) = q_2 \mathbf{e}_3 + q_3 \mathbf{e}_1 \quad (5.3)$$

のように定める。ここで、

$$\{(q_1, q_2, q_3) \mid q_1 \geq 0, q_3 \geq 0\} \quad (5.4)$$

と取ることにより、 σ は $M/SO(3)$ 全体で定義することができる。 $q_1 = 0$ のときは2粒子の衝突による直線状配位を表わし、 $q_3 = 0$ のときは直線状配位となり、 $q_1 = q_2 = q_3 = 0$ のときは3重衝突配位を表わす。

任意の配位 $x \in M$ は、 $q \in M/SO(3)$, $g \in SO(3)$ を用いて、

$$x = g(q_1 \mathbf{e}_3, q_2 \mathbf{e}_3 + q_3 \mathbf{e}_1) \quad (5.5)$$

と表わされる。この局所座標表示を用いて、必要な幾何学的量(慣性テンソルや計量など)を計算することができる。例えば、接続形式に付随した一般化速度は

$$\pi = \Omega + \frac{q_2 \dot{q}_3 - q_3 \dot{q}_2}{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2} \mathbf{e}_2 \quad (5.6)$$

となる。これらの量を用いて、3体系の簡約化運動方程式を書き下すことができる。§3で述べたように、 $(q, g, \dot{q}, \pi)$ が TM の局所座標である。直線状配位への極限 $q_3 \rightarrow 0$ を考える。これに伴い、オイラー角のひとつ ψ が無効となることに注意する。すなわち、

$$x = e^{\phi R(\mathbf{e}_3)} e^{\theta R(\mathbf{e}_2)} (q_1 \mathbf{e}_3, q_2 \mathbf{e}_3 + q_3 \cos \psi \mathbf{e}_1 + q_3 \sin \psi \mathbf{e}_2) \quad (5.7)$$

において $q_3 \rightarrow 0$ とすると、 TM_1 の局所座標 $(\tilde{q}, \tilde{g}, \tilde{\dot{q}}, \tilde{\Omega})$ が得られる。但し、

$$\tilde{q} = (q_1, q_2), \quad \tilde{g} = e^{\phi R(\mathbf{e}_3)} e^{\theta R(\mathbf{e}_2)}, \quad \tilde{\Omega} = P(\Omega) \quad (5.8)$$

である。

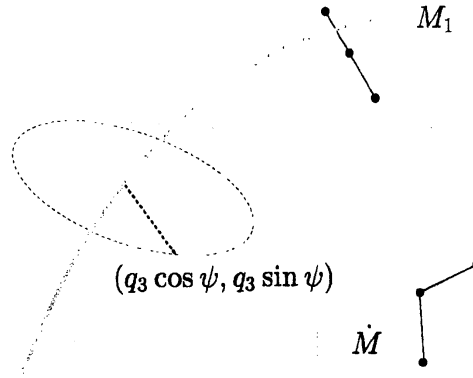


図 1: $\dim \dot{M} - \dim M_1 = 2$ と座標系

非特異配位の簡約化運動方程式が $q_3 \rightarrow 0$ の極限で、直線状配位の簡約化運動方程式に一致するかを考察する。(3.16a) 式から、3 体系の簡約化運動方程式の振動部分は

$$\frac{d}{dt} \dot{q}_1 - \frac{q_1(q_3\dot{q}_2 - q_2\dot{q}_3)^2}{(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2)^2} + \frac{\partial V}{\partial q_1} = q_1(\pi_1^2 + \pi_2^2) + \frac{2q_1(q_3\dot{q}_2 - q_2\dot{q}_3)}{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2} \pi_2, \quad (5.9a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \dot{q}_2 - \frac{q_2\dot{q}_3 - q_3\dot{q}_2}{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2} \left(\frac{2(q_3\dot{q}_1 - q_1\dot{q}_3)}{q_1} + \frac{q_2(q_2\dot{q}_3 - q_3\dot{q}_2)}{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2} \right) + \frac{q_1^2 + q_3^2}{q_1^2} \frac{\partial V}{\partial q_2} - \frac{q_2q_3}{q_1^2} \frac{\partial V}{\partial q_3} \\ = q_2(\pi_1^2 + \pi_2^2) + \frac{2q_3}{q_1^2} (q_2q_3(\pi_1^2 - \pi_3^2) + (q_2^2 - q_3^2)\pi_1\pi_3) \\ - 2\pi_2 \left(\frac{q_3\dot{q}_1 - q_1\dot{q}_3}{q_1} + \frac{q_2(q_2\dot{q}_3 - q_3\dot{q}_2)}{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2} \right), \end{aligned} \quad (5.9b)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \dot{q}_3 - \frac{q_2\dot{q}_3 - q_3\dot{q}_2}{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2} \left(\frac{2(q_1\dot{q}_2 - q_2\dot{q}_1)}{q_1} + \frac{q_3(q_2\dot{q}_3 - q_3\dot{q}_2)}{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2} \right) - \frac{q_2q_3}{q_1^2} \frac{\partial V}{\partial q_2} + \frac{q_1^2 + q_2^2}{q_1^2} \frac{\partial V}{\partial q_3} \\ = q_3(\pi_2^2 + \pi_3^2) - \frac{2q_2}{q_1^2} (q_2q_3(\pi_1^2 - \pi_3^2) + (q_1^2 + q_2^2 - q_3^2)\pi_1\pi_3) \\ - 2\pi_2 \left(\frac{q_1\dot{q}_2 - q_2\dot{q}_1}{q_1} + \frac{q_3(q_2\dot{q}_3 - q_3\dot{q}_2)}{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2} \right) \end{aligned} \quad (5.9c)$$

と書き下すことができる。また、回転部分(3.16b) 式は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left((q_1^2 + q_2^2) \begin{pmatrix} \Omega_1 \\ \Omega_2 \\ 0 \end{pmatrix} \right) + \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} -q_2q_3\Omega_3 \\ q_3^2\Omega_2 + q_2\dot{q}_3 - q_3\dot{q}_2 \\ -q_2q_3\Omega_1 + q_3^2\Omega_3 \end{pmatrix} \\ = (q_1^2 + q_2^2) \begin{pmatrix} \Omega_2\Omega_3 \\ -\Omega_1\Omega_3 \\ 0 \end{pmatrix} + q_3^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \Omega_1\Omega_3 \\ -\Omega_1\Omega_2 \end{pmatrix} + q_2q_3 \begin{pmatrix} \Omega_1\Omega_2 \\ \Omega_1^2 + \Omega_3^2 \\ -\Omega_2\Omega_3 \end{pmatrix} + (q_2\dot{q}_3 - q_3\dot{q}_2) \begin{pmatrix} \Omega_3 \\ 0 \\ -\Omega_1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.10)$$

となる。

今, $q_3 \rightarrow 0$ の極限を考えると, (5.10) 式は

$$\frac{d}{dt} \left((q_1^2 + q_2^2) \begin{pmatrix} \Omega_1 \\ \Omega_2 \\ 0 \end{pmatrix} \right) = (q_1^2 + q_2^2) \begin{pmatrix} \Omega_2 \Omega_3 \\ -\Omega_1 \Omega_3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

となり, これは直線状配位の簡約化運動方程式の回転部分 (3.39b)

$$\frac{d}{dt} \left((q_1^2 + q_2^2) \begin{pmatrix} \Omega_2 \\ -\Omega_1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) = (q_1^2 + q_2^2) \begin{pmatrix} -\Omega_1 \Omega_3 \\ -\Omega_2 \Omega_3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

と同値である。また, (5.9) 式は $q_3 \rightarrow 0$ の極限で

$$\left. \frac{d}{dt} \dot{q}_1 + \frac{\partial V}{\partial q_1} \right|_{q_3=0} = q_1(\Omega_1^2 + \Omega_2^2), \quad (5.13a)$$

$$\left. \frac{d}{dt} \dot{q}_2 + \frac{\partial V}{\partial q_2} \right|_{q_3=0} = q_2(\Omega_1^2 + \Omega_2^2), \quad (5.13b)$$

$$\left. \frac{q_1^2 + q_2^2}{q_1^2} \frac{\partial V}{\partial q_3} \right|_{q_3=0} = -\frac{2q_2(q_1^2 + q_2^2)}{q_1^2} \Omega_1 \Omega_3 - \frac{2(q_1 \dot{q}_2 - q_2 \dot{q}_1)}{q_1} \Omega_2 \quad (5.13c)$$

となる。(5.13a) 式, (5.13b) 式は, 直線状配位の簡約化運動方程式の振動部分 (3.39a) と一致する。残る (5.13c) 式からは, 拘束条件

$$\left. \frac{\partial V}{\partial q_3} \right|_{q_3=0} = 0, \quad \Omega_3 = 0, \quad q_1 \dot{q}_2 - q_2 \dot{q}_1 = 0 \quad (5.14)$$

が導かれる。この拘束条件の解釈は, $\left. \frac{\partial V}{\partial q_3} \right|_{q_3=0} = 0$ は直線分子が折れ曲る方向の力が 0, $\Omega_3 = 0$ は直線軸周りの角運動量が 0, $q_1 \dot{q}_2 - q_2 \dot{q}_1 = 0$ は $\dot{\mathbf{r}}_1 // \dot{\mathbf{r}}_2$ と同値であり, 重心の周りに回転しても直線を保つ条件であるといえる。この解釈は, 物理的に妥当な結果であると考えられる。

6 まとめ

古典ラグランジュ系では, オイラー-ラグランジュ方程式が系の運動を記述する。各層ごとのラグランジュ系に変分原理でオイラー-ラグランジュ方程式が導かれ, それは $SO(3)$ の対称性により各層ごとに簡約化された。このとき, 各層ごとに定義される接続形式に付随した接バンドル上の局所座標をとることにより, 方程式系の簡約化の見通しが良くなる。

- 非特異多体系に対するオイラー-ラグランジュ方程式は $T\dot{M}$ 上で定義される. 商バンドルの同相 $T\dot{M}/SO(3) \cong T(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}$ に従って, $T\dot{M}$ 上で定義されたオイラー-ラグランジュ方程式は, $T(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}$ 上の運動方程式へ簡約化された. ここで, $\tilde{\mathcal{G}} = \dot{M} \times_{SO(3)} \mathcal{G}$, $\mathcal{G} = so(3)$ である.
- 直線状多体系に対するオイラー-ラグランジュ方程式は TM_1 上で定義される. 商バンドルの同相 $TM_1/SO(3) \cong T(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1$ に従って, TM_1 上で定義されたオイラー-ラグランジュ方程式は, $T(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1$ 上の運動方程式へ簡約化された. ここで, $\tilde{\mathcal{G}}_1$ は $M_1/SO(3)$ 上のあるベクトル束である.

古典ハミルトン系でも同様に, ハミルトンの運動方程式が変分原理から各層で得ることができ, $SO(3)$ の対称性により各層ごとに簡約化された. また, 余接バンドル上の局所座標として古典ラグランジュ系で選択した局所座標とそれに対応する一般化運動量を用いると, 方程式系の簡約化の見通しが良くなる.

- 非特異多体系に対するハミルトンの運動方程式は $T^*\dot{M}$ 上で定義される. 商バンドルの同相 $T^*\dot{M}/SO(3) \cong T^*(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}^*$ に従って, $T^*\dot{M}$ 上で定義されたハミルトンの運動方程式は, $T^*(\dot{M}/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}^*$ 上の運動方程式へ簡約化された. ここで, $\tilde{\mathcal{G}}^* = \dot{M} \times_{SO(3)} \mathcal{G}^*$, $\mathcal{G}^* \cong so(3)$ である.
- 直線状多体系に対するハミルトンの運動方程式は, T^*M_1 上で定義される. 商バンドルの同相 $T^*M_1/SO(3) \cong T^*(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1^*$ に従って, T^*M_1 上で定義されたハミルトンの運動方程式は, $T^*(M_1/SO(3)) \oplus \tilde{\mathcal{G}}_1^*$ 上の運動方程式へ簡約化された. ここで, $\tilde{\mathcal{G}}_1^*$ は $M_1/SO(3)$ 上のある余ベクトル束である.

参考文献

- [1] T. Iwai and H. Yamaoka, Stratified reduction of many-body kinetic energy operators, *J. Math. Phys.*, **44** (2003), 4411-4435.
- [2] H. Cendra, J. E. Marsden, and T. Ratiu, *Lagrangian reduction by stages*, (Memoirs of A.M.S. **152** no 722, 2001).
- [3] S. Tanimura and T. Iwai, Reduction of quantum system on Riemannian manifolds with symmetry and application to molecular mechanics, *J. Math. Phys.*, **41**(2000), 1814-1842.
- [4] T. Iwai and A. Tachibana, The geometry and mechanics of multi-particle systems, *Ann. Inst. Henri Poincaré*, **70**(1999), 525-559.