

講座

粒子運動論～惑星から荷電粒子まで

Particle Kinetics - from Planets to Charged Particles

1. はじめに

1. Introduction

古川 勝

FURUKAWA Masaru

鳥取大学大学院工学研究科

(原稿受付：2014年12月8日)

本講座「粒子運動論～惑星から荷電粒子まで」は、質点系の力学に関して、標準的な解析力学の教科書から先に進んだ理論およびその応用を、主に学部高学年から大学院修士課程の学生を対象として平易に解説するものである。

標準的な教科書から先の理論として、やはり V.I. Arnold による幾何学的アプローチ ("Mathematical Methods of Classical Mechanics", 日本語訳は「古典力学の数学的方法」, 訳: 安藤, 蟹江, 丹羽) を外すことはできない。ここでは、力学理論が多様体や微分形式の言葉で語られ、Hamilton 力学は相空間の幾何学と位置づけられている。幾何学は、ものの形の性質を座標系の取り方によらずに記述する学問であり、物理法則が座標変換に関して共変的であることを考えれば、この幾何学的アプローチは極めて理に適っている。そして、本講座でも取り上げる様々な分野で、この幾何学的アプローチに沿って洗練された研究が行われてきた。個々の分野におけるマイルストーン的な文献を挙げることは各章に譲るが、ともかく、最先端を切り拓く研究は、力学に関する題材であればやはりこのような幾何学的アプローチに基づいたものであろう。本講座でこれらの現代的な研究について学んでいただき、研究の最前線にいち早く辿り着き、また後世に残る研究をしていただければ幸いである。

本講座は、まず前半で基礎理論および必要な数学的知識を解説した上で、後半ではこのような洗練された力学理論を用いた応用研究を紹介し、読者がより具体的なイメージを湧かせることができるように構成した。この「はじめに」では、ごく簡単に解析力学の基礎を振り返った後、洗練された幾何学的アプローチが重要である問題提起を行い、2

章以降の簡単な紹介を行う。

先述のように、本講座は力学理論の幾何学的アプローチに関するものである。そこで、標準的な解析力学の教科書に載っている程度の事項について、ごく簡単におさらいしておく。解析力学では、まず質点の位置を一般化座標 $q(t)$ で表す。これは、時間 t をパラメータとして質点の位置を表す量であればよく、距離の次元をもった量でなくて構わない。一般化座標の時間変化率を $\dot{q}(t)$ と書く。Lagrangian $L(q, \dot{q}, t) = (\text{運動エネルギー}) - (\text{ポテンシャルエネルギー})$ を用いて作用積分 $I := \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}, t) dt$ を定義する。 $q(t_0)$ と $q(t_1)$ は固定して $q(t)$ を様々に変化させるときに I が停留値となる変分原理から、Lagrange 方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$$

を得る。これを満たす $q(t)$ が物理的に正しい運動を与える。Lagrangian が座標 q に依らなければ

$$\left(\frac{\partial L}{\partial q} = 0 \right), \text{ 対応する一般化運動量 } p := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \text{ が保存量となる。}$$

Lagrangian はスカラーなので、座標変換に関して不変であるから、適切な一般化座標を選んで保存量を見つける作業、つまり運動を積分する作業を楽に行える。

この Lagrange 力学では、 $\dot{q}(t)$ は $q(t)$ の時間変化率であるという関係があった。一般化運動量 $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ を \dot{q} について

解いて $\dot{q}(q, p)$ を求め、Hamiltonian $H(q, p, t) := p\dot{q}(q, p) - L(q, \dot{q}(q, p), t)$ を定義し、作用積分の停留条件を (q, p) の相空間で求めると Hamilton 方程式 (正準方程式)

$$\dot{q}(t) = \frac{\partial H}{\partial p} \text{ および } \dot{p}(t) = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

では q と p は正準変数と呼ばれ, Lagrange 力学と違って q と p の間に従属な関係がない形に一般化されている. そのため, Lagrange 力学では Lagrangian が q に依らなければ p が保存量になるだけだったのに対し, Hamilton 力学では Hamiltonian が q に依らなければ p が保存量となるのと同時に, Hamiltonian が p に依らなければ q が保存量となる. やはり, 運動を積分するには, どのような変数を用いるかが大変重要である. Lagrangian 同様, Hamiltonian もスカラーなので, 変数変換の作業を楽に行える. 正準方程式の形を変えない変数変換を正準変換といい, 運動を積分する方法となる. Hamilton 力学では q と p が対等な立場になっているので, 好ましい変数を見つける際に, 位置と運動量が入れ替わるような変数変換も可能となっている. つまり変数変換の自由度が上がっている. 正準変換には, 変換前と変換後の変数が入り交じった母関数を用いられる.

さらに, もし正準変換によって Hamiltonian が恒等的にゼロとなれば, 全ての q と p が一定ということになり, 問題が解決したことになる. このような正準変換の母関数を見つけようとするのが Hamilton-Jacobi の理論である. 正準変換による Hamiltonian の変換則が, この母関数が満たす偏微分方程式である Hamilton-Jacobi 方程式を与える. Hamilton-Jacobi 方程式を解いて母関数を求めれば, 直ちに変換後の正準変数, つまり運動の積分が求められる.

以上の力学理論は完成されたものだが, 実際に解析的に解ける問題は限られている. このとき, 我々には, 問題を近似的に解くために2つの方向があり得るだろう. その1つは摂動論である. 実際に解きたい問題が, 解析的に解ける問題と少ししか違わない場合に, 解析的に解ける問題を基準として摂動展開しようとするものである. 摂動論にも長い歴史があるが, 大きくは2つの考え方に分類できる. 1つは正準変換の母関数を摂動展開し, 逐次求めようとするもので, von Zeipel の方法が代表的なものである. しかし, 前述した通り, 母関数は変換前後の変数両方を含んでおり, 高次の摂動展開を行う手続きは実際には非常に煩雑となる. もう1つは Lie 変換摂動論であり, 変換前の変数のみによって摂動展開を行うことができ, 高次までの摂動展開を系統的に行うことができる. 本講座の第2章はこれに関する解説である.

もう1つの方向は, 数値計算によって近似解を求めようとするものである. 質点系の運動方程式, つまり常微分方程式を数値計算で解くといえば, Runge-Kutta 法はよく使われる方法の1つであろう. しかし, 標準的な4次の Runge-Kutta 法で, 例えば調和振動子の問題を解くと, 時間と共にエネルギーが減少していくことがわかる. もちろん, このことが許容されるかどうかは, 何をどの程度の精度で求めたいのかに依っている. しかし, 例えば天文分野で, 惑星の運動を非常に長時間に亘って正確に解きたいといった場合には, このような方法では問題がある. 近年では, 変数の時間発展を表す写像が, 元の力学の問題がもつ性質, 例えば時間反転対称性やシンプレクティック性を保持するように数値計算アルゴリズムを作る方向の研究が進んでいる. 第3章はこの部分の解説である.

本講座の章立てと執筆者は次のようになっている:

- 第1章 はじめに (古川勝)
- 第2章 Hamilton 力学系に対する Lie 変換摂動論と案内中心運動への応用 (洲鎌英雄)
- 第3章 離散シンプレクティック積分法の理論 (徳田伸二)
- 第4章 応用
 - 第4.1節 太陽系力学に於けるシンプレクティック数値積分 (伊藤孝士)
 - 第4.2節 ビーム物理学 (大見和史)
 - 第4.3節 分子動力学における能勢熱浴とシンプレクティック数値積分 (伊藤篤史)
 - 第4.4節 逃走電子のカオス (松山顕之)
 - 第4.5節 自由電子レーザー中の相対論的荷電粒子の運動 (岸本泰明, 今寺賢志)
- 第5章 おわりに (古川勝)

以下では, 各章の内容をごく簡単に紹介し, 講座の中で位置付けについて説明する. 第1章は本章であり, 講座全体の背景や意義, 内容に関する説明を行っている.

第2章「Hamilton 力学系に対する Lie 変換摂動論と案内中心運動への応用」では, 実際に問題を解く多くの場合に必要となる方法の1つである摂動論, 特に Lie 変換摂動論に関する解説である.

具体例として, 磁場閉じ込め核融合プラズマ中における荷電粒子の案内中心の運動が取り上げられる. ご存知の通り, 磁気モーメントの保存と案内中心の運動は核融合プラズマの物理を理解するにあたって大変重要である. Lie 変換摂動論によれば, 相空間体積の保存など, Hamilton 力学系の幾何学的性質を維持して案内中心の運動方程式を導くことができる. さらに時間的に変動する電磁場に拡張された理論 (ジャイロ運動論) による研究も盛んに行われており, 現代においては不可避の理論であるといえる.

また, 本章には, 多様体や微分形式といった数学的基礎の解説も含めていただいている. これらは, もちろん本章を読むために必要な事項を解説いただいたものであるが, より広く, 力学理論の幾何学的アプローチを正確に理解するために不可欠の知識であり, 本講座全体に役立つものである. ぜひ精読いただきたい.

第3章「離散シンプレクティック積分法の理論」では, 実際に問題を解く際に摂動論と並んで重要となる数値計算法に関するものである. 相空間における変分原理を離散化し, 連続変数における力学の問題の幾何学的性質, つまりシンプレクティック性を保つ数値積分法が導かれている. 調和振動子の例を含めて平易に解説いただいているので, 実際に数値プログラムを作って試してみることをお勧めしたい.

第4章「応用」は, 5つの節からなっている. 紙面の都合もあり, それぞれ短くまとめているが, 本来ならば, これらの各節が単独の章, あるいは解説記事となるべき内容のものである. 各章の分野は天文, ビーム, 物

性、核融合、自由電子レーザーということで、第2章、第3章で解説された基礎理論が、実際に研究の最前線で幅広く使われていることがわかっていただけだと思う。以下では極めて短く概要を述べるに止めるが、読まれた後はぜひ各節の参考文献を辿り、深く学んでいただきたいと考える。

第4.1節「太陽系力学に於けるシンプレクティック数値積分」は、太陽系天体の運動が Kepler 運動とそこからのずれと見做せることを利用して開発された、高精度な計算を可能とするシンプレクティック数値積分法について解説されている。

第4.2節「ビーム物理学」では、加速器におけるビーム粒子軌道、およびビーム同士の衝突効果を評価するために、シンプレクティック数値積分法が不可欠であることが、具体例と共に述べられている。

第4.3節「分子動力学における能勢熱浴とシンプレクティック数値積分」は、物性研究で分子動力学シミュレーションを行う際に、温度を一定に保つために導入される熱

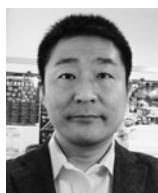
浴と、そのシミュレーションに用いられるシンプレクティック数値積分法に関する解説である。

第4.4節「逃走電子のカオス」では、トカマクプラズマの放電崩壊（ディスラプション）時に発生する逃走電子の運動に関する解説である。磁場摂動と相対論的粒子運動の共鳴と、粒子軌道のカオスについての数値的研究成果が解説される。

第4.5節「自由電子レーザー中の相対論的荷電粒子の運動」では、自由電子レーザー中での相対論的な荷電粒子の運動を、Lie 変換摂動論を用いて解析した研究について解説される。

第5章「おわりに」では、本講座全体を振り返りまとめると共に、将来展望について述べる予定である。

最後にもう一度、読者の皆さんには本講座で洗練された現代的な理論を学んでいただき、最前線で後世に残る研究をしていただければ幸いである。本講座を実現するにあたり、第2、3章および第4章1-5節を執筆くださった著者の皆様に感謝いたします。



ふるかわ まさる
古川 勝

鳥取大学 大学院工学研究科 准教授。京都大学で学位（エネルギー科学）取得後、日本原子力研究所、東京大学を経て現職。専門はプラズマ物理学で、特にその数理的あるいは方法論的な部分に興味をもっている。2児の父。風呂係。



講座 粒子運動論～惑星から荷電粒子まで

2. Hamilton 力学系に対する Lie 変換摂動論と案内中心運動への応用

2. Lie Transform Perturbation Theory for Hamiltonian Systems and its Application to Guiding Center Motion

洲鎌英雄

SUGAMA Hideo

核融合科学研究所

(原稿受付：2014年12月5日)

Hamilton 力学における運動方程式は、位相空間上の軌道に沿った作用積分が停留値を取るという変分原理によって導かれる。微分幾何学的手法により、作用積分は、基本1-形式とよばれる1次微分形式の積分として表され、Hamilton 力学は、正準変数でない場合を含むより一般的な位相空間変数を用いて定式化される。Lie 変換摂動法とよばれる手法によって、基本1-形式を変形することにより、位相空間変数の変換と運動方程式の単純化を系統的に行うことができる。強磁場下での荷電粒子の運動を表す基本1-形式に対して Lie 変換摂動法を応用することにより、位相空間体積の不変性等の Hamilton 力学の特性を維持したまま高精度の案内中心運動方程式が導出される。

Keywords:

Lie transform perturbation theory, Hamiltonian system, guiding center motion

2.1 はじめに

Lagrangian や Hamiltonian を用いた解析力学[1]は、古典力学をより数学的に洗練された体系へと進化させ、物理学、工学等の科学の広範な分野で用いられている。解析力学では、Lagrangian の時間積分として定義される作用積分が停留値を取るという変分原理から運動方程式が導かれる。このように座標変数の取り方に依らない幾何学的な原理に基づくため、解析力学は、多様体等の概念に基づく微分幾何学[2,3]により、エレガントに定式化され[4]、座標系や運動方程式の変換、対称性と保存則や摂動論等の取り扱いを、微分幾何学的手法を用いて系統的に行うことが可能となる。

本講座では、Lie 変換摂動法[5-7]とよばれる手法によって、Hamilton 系に対する基本1-形式とよばれる、位相空間変数と時間変数を座標変数とする $(2n+1)$ 次元空間上の1次微分形式を変形することにより、新たな位相空間座標変数と単純化された運動方程式を導出する手続きを解説し、その応用例として強磁場下での荷電粒子の案内中心に対する運動方程式の導出過程を示そう。

荷電粒子に対する Newton の運動方程式が6次元位相空間中の軌道を与えるのに対して、磁力線の回りの荷電粒子の速い旋回（ジャイロ）運動に関する平均化と磁気モーメントの保存により得られる案内中心運動方程式は4次元位相空間中の軌道を与える。磁気モーメントの保存から磁気

ミラーの概念が導かれることからわかるように、案内中心運動方程式は、磁場閉じ込めプラズマ研究分野において、重要な基礎方程式の一つであるが、その厳密な導出は、Lie 変換摂動法の格好の応用例にもなっている。後に述べるように、本講座で Lie 変換とよぶものは、微小パラメータを含み、ベクトル場により生成される写像[Appendix 2.A の式(A.18)-(A.19)参照]を指すが、正準変換摂動論では、Hamilton ベクトル場[式(41)参照]の場合に限定して、Lie 変換とよぶことが多い。本講座では、非正準変数の座標変換の取り扱いに便利るように、文献[5,6]に倣い、より一般のベクトル場の生成する写像を Lie 変換とよんでいることを断っておこう。ここで紹介する基本1-形式に対する Lie 変換摂動法と案内中心運動方程式は、Littlejohn [8,9]によって示されたものであり、これにより、位相空間体積の不変性 (Liouville の定理) 等の Hamilton 力学の特性を保ったまま、摂動展開の高次オーダーまで正確に、案内中心座標変数と運動方程式を与えることが可能となった。

以下、本講座は次のように構成されている。第2.2節では、Hamilton 力学について復習し、正準変数と座標の時間に関する導関数の関数として与えられる Lagrangian の時間積分として作用積分を定義し、その作用積分に対する変分原理から、Hamilton の運動方程式を導出する。第2.3節では、正準変数でない場合も含むより一般的な位相空間変数に基づいて Hamilton 力学を表現し、その例として、電磁

National Institute for Fusion Science, Toki, GIFU 509-5292, Japan

author's e-mail: sugama.hideo@LHD.nifs.ac.jp

場中の荷電粒子の運動を第2.4節において取り扱う。第2.5節および第2.6節では、Lie変換摂動法について説明する準備として、多様体、微分形式、ベクトル場等の微分幾何学の概念に基づき、Lagrangianの代わりに基本1-形式を用いて、第2.3節のHamilton力学を定式化しなおすとともに、多様体からそれ自身への写像に伴う座標系、ベクトル場や微分形式の変換について述べる。その後、第2.7節では、Lie変換摂動法による基本1-形式の変形についての一般論を展開し、その応用例として、第2.8節において、案内中心運動方程式の導出を行う。最後に第2.9節において、まとめと他の関連研究について述べる。Appendix 2.Aでは、多様体、ベクトル場や微分形式に関する数学的補遺を、またAppendix 2.Bでは、案内中心座標のジャイロゲージ変換についての説明を与える。

2.2 Hamiltonの正準運動方程式と変分原理

Hamilton力学[1,4]では、系の状態を表す正準変数として、それぞれ n 個の成分からなる一般化座標 $\mathbf{q}=(q^i)_{i=1,\dots,n}$ と正準運動量 $\mathbf{p}=(p_i)_{i=1,\dots,n}$ を用い、系の状態の時間発展を表すHamiltonの正準運動方程式は、

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{q}}, \quad (1)$$

のように書かれる。ここで、関数 $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ はHamiltonianとよばれる。Hamiltonの正準運動方程式は、以下で示すように、変分原理から導くことができる。Lagrangian L を

$$L(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad (2)$$

と与え、作用積分 I をLagrangian L の時間積分

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t) dt \quad (3)$$

として定義する。正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) を座標とする $2n$ 次元位相空間における軌道 $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ の仮想変位を考え、軌道の変分 $(\delta\mathbf{q}(t), \delta\mathbf{p}(t))$ に伴う作用積分 I の変分 δI は、

$$\begin{aligned} \delta I &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\delta\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} + \mathbf{p} \cdot \delta\dot{\mathbf{q}} - \delta\mathbf{q} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} - \delta\mathbf{p} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[-\delta\mathbf{q} \cdot \left(\dot{\mathbf{p}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right) + \delta\mathbf{p} \cdot \left(\dot{\mathbf{q}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right) \right] \end{aligned} \quad (4)$$

となる。ただし、ここでは、積分領域の両端において、 $\delta\mathbf{q}(t_1) = \delta\mathbf{q}(t_2) = 0$ と仮定し、 $\mathbf{p} \cdot \delta\dot{\mathbf{q}} = d(\mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{q})/dt - \dot{\mathbf{p}} \cdot \delta\mathbf{q}$ を用いた部分積分を行っており、また、 $(\delta\mathbf{q}, \delta\mathbf{p})$ に関して2次以上の微小量は無視している。式(4)からわかるように、Hamiltonの正準運動方程式は、位相空間上で系が取るべき軌道は作用積分 I が極値を取る、即ち、 $\delta I = 0$ を満足するものであるという変分原理から導かれる。

2.3 非正準変数によるHamilton力学の表現

位相空間の座標を表すために、正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) 以外の変数を用いる方が便利なこともある。このような非正準変数の場合を含む、より一般的な座標変数を $\mathbf{z}=(z^i)_{i=1,\dots,2n}$

で表そう。一般に、座標変数 \mathbf{z} は、正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) および時刻 t の関数 $\mathbf{z}=\mathbf{z}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ として表される。逆に、正準変数は、 \mathbf{z} および時刻 t の関数として、 $\mathbf{q}=\mathbf{q}(\mathbf{z}, t)$ 、 $\mathbf{p}=\mathbf{p}(\mathbf{z}, t)$ のように書かれる。これらを用いると、式(2)のLagrangianは、 $(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}, t)$ の関数として、

$$L(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}, t) = \boldsymbol{\gamma}(\mathbf{z}, t) \cdot \dot{\mathbf{z}} - h(\mathbf{z}, t) \quad (5)$$

のように表される[8]。ここで、 $\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{z}, t) = (\gamma_i(\mathbf{z}, t))_{i=1,\dots,2n}$ と $h(\mathbf{z}, t)$ は、

$$\begin{aligned} \gamma_i(\mathbf{z}, t) &= \mathbf{p}(\mathbf{z}, t) \cdot \frac{\partial \mathbf{q}(\mathbf{z}, t)}{\partial z^i}, \\ h(\mathbf{z}, t) &= h_{\text{can}}(\mathbf{q}(\mathbf{z}, t), \mathbf{p}(\mathbf{z}, t), t) - \mathbf{p}(\mathbf{z}, t) \cdot \frac{\partial \mathbf{q}(\mathbf{z}, t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (6)$$

により与えられる。ここで、 h_{can} は、第2.2節の正準変数に対するHamiltonian $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ を意味する。

さて、位相空間上の系の軌道が満足すべき運動方程式を変数 \mathbf{z} で表現するとどのようなものになるだろうか？変数 \mathbf{z} によって表現された運動方程式を導くため、 $2n$ 個の常微分方程式からなるHamiltonの正準運動方程式(1)に、変数変換の式 $\mathbf{q}=\mathbf{q}(\mathbf{z}, t)$ および $\mathbf{p}=\mathbf{p}(\mathbf{z}, t)$ を代入するのは一般に煩雑な手続きであり、それよりもずっとエレガントで便利な方法は、先に述べた変分原理を用いることである。系が位相空間上で取るべき経路は $\delta I = 0$ から決められるという変分原理は、座標変数の取り方に依存しない幾何学的な主張であり、座標変数 \mathbf{z} に対する運動方程式は、式(5)に示したLagrangianを用いて、 $\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{z}(t), \dot{\mathbf{z}}(t), t) dt = 0$ から導かれ、次のようなEuler-Lagrange方程式として与えられる。

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{z}} = 0 \quad (7)$$

ただし、上式の導出において、積分領域の両端において $\delta\mathbf{z}(t_1) = \delta\mathbf{z}(t_2) = 0$ であるという拘束条件が用いられている。式(5)および(7)より、 $L(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}, t)$ が k 番目の座標変数 z^k に依存しないとき(言い換えれば、 $\boldsymbol{\gamma}$ と h がともに z^k に依存しないとき)、 $\gamma_k = \partial L / \partial z^k$ が時間に依らない不変量となることがわかる。これは、Noetherの定理として知られているものである。

ところで、任意の関数 $S(\mathbf{z}, t)$ を用いてLagrangianを

$$L'(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}, t) = L(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}, t) + \frac{dS}{dt} \quad (8)$$

のように置き換えてみても、Euler-Lagrange方程式(7)は変化しない。ただし、上式において、 $dS/dt = \partial S(\mathbf{z}, t)/\partial t + \dot{\mathbf{z}} \cdot \partial S(\mathbf{z}, t)/\partial \mathbf{z}$ である。 $\delta\mathbf{z}(t_1) = \delta\mathbf{z}(t_2) = 0$ であることから、 $\delta \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{z}(t), \dot{\mathbf{z}}(t), t) dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} L'(\mathbf{z}(t), \dot{\mathbf{z}}(t), t) dt$ となるため、Lagrangian L と L' のどちらを用いても $\delta I = 0$ から導かれるEuler-Lagrange方程式(7)は同じものとなることがわかる。

Euler-Lagrange 方程式 (7) は,

$$\sum_{j=1}^{2n} \omega_{ij} \frac{dz^j}{dt} = \frac{\partial h}{\partial z^i} + \frac{\partial \gamma_i}{\partial t} \quad (9)$$

のように書き換えることができる。ここで,

$$\omega_{ij} = \frac{\partial \gamma_j}{\partial z^i} - \frac{\partial \gamma_i}{\partial z^j} \quad (i, j = 1, \dots, 2n) \quad (10)$$

とおいた。上式より, $\omega_{ij} = -\omega_{ji}$ および

$$\frac{\partial \omega_{jk}}{\partial z^i} + \frac{\partial \omega_{ki}}{\partial z^j} + \frac{\partial \omega_{ij}}{\partial z^k} = 0 \quad (11)$$

が導かれる。式(6)を(10)に代入すると,

$$\omega_{ij} = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial z^i} \cdot \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial z^j} - \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial z^j} \cdot \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial z^i} = [z^i, z^j]_L \quad (i, j = 1, \dots, 2n) \quad (12)$$

が得られ, $\omega_{ij} = [z^i, z^j]_L$ は, Lagrange 括弧とよばれる。

さて, 変数 z^i と z^j の Poisson 括弧は,

$$J^{ij} = \{z^i, z^j\} = \sum_{\alpha=1}^n \left(\frac{\partial z^i}{\partial q^\alpha} \frac{\partial z^j}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial z^i}{\partial p_\alpha} \frac{\partial z^j}{\partial q^\alpha} \right) \quad (13)$$

で表され, $J^{ij} = -J^{ji}$ が成り立つ。ここで, 式(12)と(13)を用いると,

$$\sum_{k=1}^{2n} J^{ik} \omega_{kj} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (14)$$

が得られ, 変数 $\mathbf{z} = (z^i)_{i=1, \dots, 2n}$ の Poisson 括弧の成分からなる $2n \times 2n$ 反対称行列 (J^{ij}) は, $2n \times 2n$ 反対称行列 (ω_{ij}) の逆行列であることがわかる。任意の関数 $F(\mathbf{z})$ と $G(\mathbf{z})$ に対する Poisson 括弧は,

$$\{F, G\} = \sum_{i,j} J^{ij} \frac{\partial F}{\partial z^i} \frac{\partial G}{\partial z^j} \quad (15)$$

により与えられ, $\{F, G\} = -\{G, F\}$ を満足する。任意の関数 $F(\mathbf{z})$, $G(\mathbf{z})$ および $H(\mathbf{z})$ に対して, 次の Jacobi の恒等式が成り立つ。

$$\{F, \{G, H\}\} + \{G, \{H, F\}\} + \{H, \{F, G\}\} = 0 \quad (16)$$

Jacobi の恒等式(16)を変数 z の成分に対して書き表すと,

$$\begin{aligned} & \{z^i, \{z^j, z^k\}\} + \{z^j, \{z^k, z^i\}\} + \{z^k, \{z^i, z^j\}\} \\ &= \sum_l \left(J^{il} \frac{\partial J^{jk}}{\partial z^l} + J^{jl} \frac{\partial J^{ki}}{\partial z^l} + J^{kl} \frac{\partial J^{ij}}{\partial z^l} \right) = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

のようになる。上式(17)は式(11)と(14)を使って導くことができる。特に正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) に対して, 式(2)より, $\gamma_{\mathbf{q}}^{(\text{can})} = (\gamma_{q^\alpha}^{(\text{can})})_{\alpha=1, \dots, n} = \mathbf{p}$ および $\gamma_{\mathbf{p}}^{(\text{can})} = (\gamma_{p_\alpha}^{(\text{can})})_{\alpha=1, \dots, n} = 0$ となり, したがって, 式(10)あるいは(12)より,

$$\begin{aligned} \omega_{q^\alpha p_\beta}^{(\text{can})} &= -\omega_{p_\alpha q^\beta}^{(\text{can})} = -\delta_{\alpha\beta} \\ \omega_{q^\alpha q^\beta}^{(\text{can})} &= \omega_{p_\alpha p_\beta}^{(\text{can})} = 0 \quad (\alpha, \beta = 1, \dots, n) \end{aligned} \quad (18)$$

であり, 式(14)より, 正準変数間の Poisson 括弧は,

$$\begin{aligned} \{q^\alpha, q^\beta\} &= \{p_\alpha, p_\beta\} = 0, \\ \{q^\alpha, p_\beta\} &= -\{p_\alpha, q^\beta\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (\alpha, \beta = 1, \dots, n) \end{aligned} \quad (19)$$

のようになる。ここで, $\delta_{\alpha\beta} = 1$ (for $\alpha = \beta$), 0 (for $\alpha \neq \beta$) である。

式(9), (14)および(15)を用いると, 変数 $\mathbf{z} = (z^i)_{i=1, \dots, 2n}$ に対する運動方程式は,

$$\frac{dz^i}{dt} = \sum_j J^{ij} \left(\frac{\partial h}{\partial z^j} + \frac{\partial \gamma_j}{\partial t} \right) = \{z^i, h\} + \sum_j \{z^i, z^j\} \frac{\partial \gamma_j}{\partial t} \quad (20)$$

のように表される。

$2n$ 次元位相空間における体積要素は, 正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) および \mathbf{z} を用いて,

$$dq^1 \cdots dq^n dp_1 \cdots dp_n = D dz^1 \cdots dz^{2n}, \quad (21)$$

と書かれ, Jacobian D は,

$$D = \det \left[\frac{\partial (q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n)}{\partial (z^1, \dots, z^{2n})} \right] \quad (22)$$

で定義される (\mathbf{z}, t) の関数であり, 式(12)から

$$\det(\omega_{ij}) = D^2 \quad (23)$$

となることが示される。また, 式(11), (14)および(20)を使うと, 上式(23)から

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \sum_{i=1}^{2n} \frac{\partial (D z^i)}{\partial z^i} = 0 \quad (24)$$

が導かれる。ここで, z^i は, 運動方程式(20)の右辺で定義される (\mathbf{z}, t) の関数であると見なす。上式(24)は, 式(21)で与えられる体積要素が式(20)に従う運動に沿って変化しないことを意味し, いわゆる Liouville の定理を表す。

2.4 電磁場中の荷電粒子の運動方程式

Hamilton 力学系の例として, 電磁場 (\mathbf{E}, \mathbf{B}) の下での質量 m , 電荷 e をもつ荷電粒子の運動を考えよう。電磁場 (\mathbf{E}, \mathbf{B}) は, 静電ポテンシャル Φ とベクトルポテンシャル \mathbf{A} により

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (25)$$

で定義される。正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) で表した Hamiltonian は,

$$h_{\text{can}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m} \left| \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{q}, t) \right|^2 + e\Phi(\mathbf{q}, t) \quad (26)$$

で与えられる。一方, よく用いられる位相空間変数 $\mathbf{z} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$ は, 荷電粒子の位置ベクトル・速度ベクトルを表すが, 非正準変数であり, 正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) とは,

$$\mathbf{q} = \mathbf{x}, \quad \mathbf{p} = m\mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \quad (27)$$

により, 関係づけられる。非正準変数 $\mathbf{z} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$ を用いて

Lagrangian L および Hamiltonian h を表すと,

$$L(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}, t) = \left(m \mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right) \cdot \dot{\mathbf{x}} - h(\mathbf{z}, t),$$

$$h(\mathbf{z}, t) = \frac{1}{2} m |\mathbf{v}|^2 + e\Phi(\mathbf{x}, t) \quad (28)$$

のようになる. 上式より, 式(5)中の γ の \mathbf{x} -および \mathbf{v} -成分は,

$$\gamma_{\mathbf{x}} = m \mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t), \quad \gamma_{\mathbf{v}} = 0 \quad (29)$$

で与えられる. この γ を用いると式(10)で定義された ω_{ij} は,

$$\omega_{x_\alpha x_\beta} = \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta} \right) = \frac{e}{c} \sum_{\gamma=1}^3 \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma,$$

$$\omega_{x_\alpha v_\beta} = -m \delta_{\alpha\beta}, \quad \omega_{v_\alpha v_\beta} = 0 \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3) \quad (30)$$

のように表される. ここで,

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 1 & ((\alpha, \beta, \gamma) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (31)$$

を用いた. また, 式(30)により与えられる成分を持つ行列 (ω_{ij}) の逆行列を取ることにより, 式(13)に示した各 Poisson 括弧の成分 $J^{ij} = \{z^i, z^j\}$ が, それぞれ,

$$\{x_\alpha, x_\beta\} = 0, \quad \{x_\alpha, v_\beta\} = \frac{1}{m} \delta_{\alpha\beta},$$

$$\{v_\alpha, v_\beta\} = \frac{e}{m^2 c} \sum_{\gamma=1}^3 \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3) \quad (32)$$

のように求められる. 上式(32)の Poisson 括弧と式(28)の Hamiltonian を用いると, 式(20)から非正準変数 $\mathbf{z} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$ に対する運動方程式が,

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v},$$

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e \left[\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \right] \quad (33)$$

のように導かれる.

2.5 基本1-形式による Hamilton 力学の定式化

本節では, 第2.3節で述べた Hamilton 力学を, 微分形式 (Appendix 2.A 参照) を用いて定式化しよう. 式(5)で定義された Lagrangian L に対応して, 位相空間と時間軸の直積として与えられる $(2n+1)$ 次元空間上の 1 次微分形式 (1-形式) が, 次のように与えられる [5, 6].

$$\gamma = \sum_{\mu=1}^{2n+1} \gamma_\mu(z) dz^\mu = \sum_{i=1}^{2n} \gamma_i(\mathbf{z}, t) dz^i - h(\mathbf{z}, t) dt \quad (34)$$

この γ は "基本1-形式 (fundamental 1-form)" あるいは "Poincaré-Cartan form" とよばれ, $z = (z^\mu)_{\mu=1, \dots, 2n+1} = (\mathbf{z}, t)$ は $(2n+1)$ 次元空間上の座標変数を表す. 時間 t は

$(2n+1)$ 次元空間中の $(2n+1)$ 番目の座標変数であり, 上式より γ の t -成分は $\gamma_t = -h$ である. また, 作用積分 I は, $(2n+1)$ 次元空間中の 2 点 (\mathbf{z}_1, t_1) と (\mathbf{z}_2, t_2) を結ぶ経路 I に沿った γ の積分として

$$I = \int_I \gamma \quad (35)$$

のように表される. 2 点 (\mathbf{z}_1, t_1) と (\mathbf{z}_2, t_2) を固定した経路に沿った作用積分の変分が $\delta I = 0$ となる時, そのような経路に対して運動方程式(20)が成り立つことを第2.3節で述べた. 式(8)のように Lagrangian を変換しても Euler-Lagrange 方程式(7)の形が変わらなかったことを思い起こそう. このことを基本1-形式 γ を用いて言い換えると, 任意の関数 $S(\mathbf{z}, t)$ により γ を

$$\gamma' = \gamma + dS \quad (36)$$

に置き換えても, $\delta I = 0$ から導かれる運動方程式は式(20)のまま変わらないということになる.

式(34)の γ の外微分として, $(2n+1)$ 次元空間上の 2 次微分形式 (2-形式) ω が

$$\omega = d\gamma = \sum_{i=1}^{2n} d\gamma_i \wedge dz^i - dh \wedge dt$$

$$= \sum_{i < j} \omega_{ij} dz^i \wedge dz^j - \sum_i \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial t} + \frac{\partial h}{\partial z^i} \right) dz^i \wedge dt \quad (37)$$

により与えられる [Appendix 2.A の式(A.32) 参照]. ここで, ω_{ij} は既に式(10)で定義されているものに等しい. 時間 t を固定して考えると上式の

$$\hat{\omega} = \sum_{i < j} \omega_{ij} dz^i \wedge dz^j \quad (38)$$

の部分は, $\mathbf{z} = (z^i)_{i=1, \dots, 2n}$ を座標とする $2n$ 次元位相空間上の 2-形式を与え, Lagrange テンソルとよばれる. Lagrange テンソル $\hat{\omega}$ の座標系 $\mathbf{z} = (z^i)_{i=1, \dots, 2n}$ に関する成分 ω_{ij} は, 第2.3節で見たように, 反対称性 $\omega_{ij} = -\omega_{ji}$ を持ち, 式(11)を満たす. 式(11)は, $2n$ 次元位相空間上の 2-形式である Lagrange テンソル $\hat{\omega}$ が閉じている, 即ち, $\hat{\omega}$ の外微分 $d\hat{\omega}$ が 0 となることを意味する [Appendix 2.A の式(A.32) 参照]. 正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) では, 式(18)から, $\hat{\omega} = \sum_{i=1}^n dp_i \wedge dq^i$ のように表される.

第2.3節で見たように, $2n \times 2n$ 行列 (ω_{ij}) は, 逆行列 (J^{ij}) をもち, それに対しても反対称性 $J^{ij} = -J^{ji}$ が成り立つ. 因みに, Lagrange テンソル $\hat{\omega}$ のように, その成分が反対称であり, かつ逆行列をもつ $2n \times 2n$ 行列により表されるような閉じた 2-形式を, シンプレクティック構造とよび, シンプレクティック構造をもつ $2n$ 次元多様体をシンプレクティック多様体とよぶ. また, シンプレクティック構造 $\hat{\omega}$ をもつ $2n$ 次元シンプレクティック多様体からそれ自身への写像 φ で,

$$\varphi^* \hat{\omega} = \hat{\omega} \quad (39)$$

を満足するものを正準変換 (canonical transformation) あ

るいはシンプレクティック変換 (symplectic transformation) とよぶ。ここで、 $\varphi^*\hat{\omega}$ は φ による $\hat{\omega}$ の引き戻し (pull back) を表す [Appendix 2.A の式 (A.34) 参照]。上式 (39) より、正準変換 φ は、 k 個 ($k=1, \dots, n$) の $\hat{\omega}$ の外積 $\hat{\omega} \wedge \dots \wedge \hat{\omega}$ を保つ、即ち、 $\varphi^*(\hat{\omega} \wedge \dots \wedge \hat{\omega}) = \hat{\omega} \wedge \dots \wedge \hat{\omega}$ が成り立つことがわかる。正準変数 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) を用いてシンプレクティック構造を $\hat{\omega} = \sum_{i=1}^n dp_i \wedge dq^i$ のように表すと、 n 個 ($k=1, \dots, n$) の $\hat{\omega}$ の外積は、 $\hat{\omega} \wedge \dots \wedge \hat{\omega} = (-1)^{\frac{n(n+1)}{2}} n! dq^1 \wedge \dots \wedge dq^n \wedge dp_1 \wedge \dots \wedge dp_n$ のように表され、上述のことから、正準変換は、 $2n$ 次元位相空間の体積要素 $dq^1 \wedge \dots \wedge dq^n \wedge dp_1 \wedge \dots \wedge dp_n$ を保つことがわかる。

Lagrange テンソル $\hat{\omega}$ に対して、次式で定義される $2n$ 次元位相空間上の 2 階の反対称な反変テンソル場

$$J = \sum_{ij} J^{ij} \frac{\partial}{\partial z^i} \otimes \frac{\partial}{\partial z^j} = \sum_{i < j} J^{ij} \frac{\partial}{\partial z^i} \wedge \frac{\partial}{\partial z^j} \quad (40)$$

を Poisson テンソルとよぶ。また、 $2n$ 次元位相空間上の実数値関数 (スカラー場) F の微分 dF と Poisson テンソル J から、

$$X_F = \mathcal{J} dF \equiv \sum_{ij} J^{ij} \frac{\partial F}{\partial z^j} \frac{\partial}{\partial z^i} \quad (41)$$

によって、 $2n$ 次元位相空間上の Hamilton ベクトル場 X_F が定義される。式 (15) で定義された Poisson 括弧は、上述の Poisson テンソルや Hamilton ベクトル場を用いて、

$$\{F, G\} = J(dF, dG) = X_G F = -X_F G \quad (42)$$

と表すことができる。Poisson 括弧を用いると、前述の正準変換 φ とは、 $2n$ 次元位相空間上の任意のスカラー場 F と G に対して、

$$\varphi^*\{F, G\} = \{\varphi^*F, \varphi^*G\} \quad (43)$$

を満足する写像であると言い換えることができる。ここで、写像 φ によるスカラー場 F の pull back φ^*F は、写像として F と φ を合成したものの $\varphi^*F = F \circ \varphi$ として定義される [Appendix 2.A の式 (A.14) 参照]。任意のスカラー場 F に対する Hamilton ベクトル場 X_F がつくる 1 パラメータ変換群 $\varphi_\epsilon = \text{Exp}(\epsilon X_F)$ [Appendix 2.A の式 (A.18) および (A.19) 参照] は Hamilton 相流とよばれ、各パラメータ ϵ に対して、 φ_ϵ は正準変換となる。

さて、 $2n$ 次元位相空間と時間軸の直積として与えられる $(2n+1)$ 次元空間上のベクトル場

$$X = \sum_{i=1}^{2n} X^i \frac{\partial}{\partial z^i} + X^t \frac{\partial}{\partial t} \quad (44)$$

を考えよう。ここで、このベクトル場 X は、 $2n$ 次元位相空間上の軌道 $\mathbf{z}(t) = (z^i(t))_{i=1, \dots, 2n}$ の時間に関する常微分方程式と、

$$\begin{aligned} \frac{dz^i}{dt} &= X^i(\mathbf{z}, t) \quad (i=1, \dots, 2n), \\ \frac{dt}{dt} &= 1 = X^t \end{aligned} \quad (45)$$

によって関係づけられているとしよう。このとき、ベクトル場 X と 2-形式 ω の内部積 [Appendix 2.A の式 (A.28) 参照] をとると、

$$\begin{aligned} i(X)\omega &= \sum_{\mu=1}^{2n+1} \sum_{\nu=1}^{2n+1} X^\mu \omega_{\mu\nu} dz^\nu \\ &= \sum_{j=1}^{2n} \left[\sum_{i=1}^{2n} X^i \omega_{ij} + X^t \left(\frac{\partial \gamma_j}{\partial t} + \frac{\partial h}{\partial z^j} \right) \right] dz^j \\ &\quad - \sum_{i=1}^{2n} X^i \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial t} + \frac{\partial h}{\partial z^i} \right) dt \end{aligned} \quad (46)$$

を得る。上式 (46) より、

$$i(X)\omega = 0 \Leftrightarrow X^i = \sum_{j=1}^{2n} J^{ij} \left(\frac{\partial \gamma_j}{\partial t} + \frac{\partial h}{\partial z^j} \right) \quad (i=1, \dots, 2n) \quad (47)$$

が導かれ、ベクトル場 X と 2-形式 ω の内部積が 0 となることと、ベクトル場 X が運動方程式 (20) を与えることが同値となることがわかる。基本 1-形式 γ 、その外微分 $\omega = d\gamma$ と流体力学における速度場 \mathbf{v} 、渦度 $\omega = \text{rot } \mathbf{v}$ (速度場の回転) との対応関係によるアナロジーから、 $i(X)\omega = i(X)d\gamma = 0$ を満足する $(2n+1)$ 次元空間上のベクトル場 X の積分曲線 [即ち式 (45) の解の軌道] は、1-形式 γ の「渦線」とよばれる。

運動方程式 (20) は、変分原理 $\delta I = \delta \int \gamma = 0$ から導かれるものであったが、それは基本 1-形式の渦線の方程式でもある。

2.6 多様体における写像に伴う座標系、ベクトル場および微分形式の変換

次節において Lie 変換摂動法について述べる前に、本節では、多様体における写像に伴う座標系、ベクトル場および微分形式の変換について解説し、これらの変換に関わる 2 つの解釈、即ち、passive な描像と active な描像を紹介しよう。直感的に言えば、passive な描像とは、多様体における与えられた写像によって座標系が変換されることであるのに対して、active な描像とはベクトル場や微分形式が変換されることである。筆者の感じるところでは、この 2 つの描像は非常に重要な基本的概念であるにもかかわらず、文献によっては、これらに対する適切な説明がないために、ベクトル場や微分形式の成分表示に対する解釈やそれらの表記法に、誤り (もしくは不明瞭さ) がしばしば見受けられる。これらの描像を正しく理解することにより、次節において、Lie 変換摂動法によって何が変換され、何が求まるのかを正しく解釈することができるようになるであろう。

M を m 次元の多様体とする。 T を M から M 自身への微分同型写像とする (T は M から M の上への 1 対 1 写像で、 T とその逆写像 T^{-1} はともに連続で微分可能である)。

$$T: M \ni a \longrightarrow T(a) \in M \quad (48)$$

多様体上の 2 つの座標系 z と \bar{z} を考えよう。

$$\begin{aligned} z : M \ni a &\rightarrow z(a) = (z^\mu(a))_{i=1, \dots, m} \in \mathbb{R}^m \\ \bar{z} : M \ni a &\rightarrow \bar{z}(a) = (\bar{z}^\mu(a))_{i=1, \dots, m} \in \mathbb{R}^m \end{aligned} \quad (49)$$

Appendix 2.A で述べるように、一般には、多様体の座標系は局所的に定義されるものであるが、ここでは、説明を簡単にするため、座標系 z と \bar{z} は、多様体の全領域上で定義されているものとする。さて、座標系 \bar{z} は、座標系 z の写像 T による pull back として定義しよう [Appendix 2.A の式 (A.14) 参照]。即ち、

$$\begin{aligned} \bar{z} &= T^*z \equiv z \circ T \\ \bar{z}(a) &= (T^*z)(a) \equiv z(T(a)) \\ \bar{z}^\mu(a) &= (T^*z^\mu)(a) \equiv z^\mu(T(a)) \quad (i = 1, \dots, m) \end{aligned} \quad (50)$$

が成り立つものとする。さて、多様体 M 上の任意の関数

$$f : M \ni a \rightarrow f(a) \in \mathbb{R} \quad (51)$$

を上記の2つの座標系 z および \bar{z} により、それぞれ、 m 変数の空間 \mathbb{R}^m 上の関数

$$F : \mathbb{R}^m \ni w = (w^\mu)_{\mu=1, \dots, m} \rightarrow F(w) \in \mathbb{R} \quad (52)$$

および

$$\bar{F} : \mathbb{R}^m \ni w = (w^\mu)_{\mu=1, \dots, m} \rightarrow \bar{F}(w) \in \mathbb{R} \quad (53)$$

を用いて表現してみよう。 M 上の関数 f の座標系 z , \bar{z} による表現 F , \bar{F} とは、

$$f(a) = F(z(a)) = \bar{F}(\bar{z}(a)) \quad (54)$$

を満足するものである。上式(54)において、 a を $T^{-1}(a)$ に置き換えると、

$$((T^{-1})^*f)(a) \equiv f(T^{-1}(a)) = \bar{F}(\bar{z}(a)) \quad (55)$$

を得る。式(54)と(55)より、 m 変数の空間 \mathbb{R}^m 上の関数 \bar{F} に対して2つの解釈が成り立つ。式(54)は、 \mathbb{R}^m 上の関数 \bar{F} が座標 $\bar{z} = T^*z$ で M 上の関数 f を表現していることを意味する。これは、写像 T による変換を受けたのは座標系の方であり (\bar{z} は z の T による pull back)、passive な描像とよばれる。passive な描像では、 $\bar{F}(w)$ の独立変数 w は、座標 \bar{z} の取る数値 $\bar{z}(a)$ である。一方、式(55)では、 \bar{F} は座標 z において関数 $(T^{-1})^*f$ (T^{-1} による f の pull back) を表現している。この場合、写像 T による変換を受けたのは関数の方であり、active な描像とよばれる。active な描像では、 $\bar{F}(w)$ の独立変数 w は、座標 z の取る数値 $z(a)$ である。

次に、多様体 M 上の任意のベクトル場 X を以下のように座標系 z と \bar{z} で表現してみよう。

$$X = \sum_{\mu} X^\mu(z) \frac{\partial}{\partial z^\mu} = \sum_{\nu} \bar{X}^\nu(\bar{z}) \frac{\partial}{\partial \bar{z}^\nu} \quad (56)$$

ここで、

$$\bar{X}^\nu(\bar{z}(a)) = X_a(\bar{z}^\nu) \quad (57)$$

は、多様体上の点 a において、座標系 \bar{z} で表したベクトル場 X の成分 $\bar{X}^\nu(\bar{z}(a))$ は、ベクトル場 X を微分作用素とし

て \bar{z}^ν に作用させて得られるものであることを意味し [Appendix 2.A の式 (A.7) 参照]、passive な描像による \bar{X}^ν の解釈であり、 $\bar{X}^\nu(w)$ の独立変数 w は、座標 \bar{z} の取る数値 $\bar{z}(a)$ であると見なされる。また式(56)におけるベクトル場 X の二つの表式より、

$$\begin{aligned} \bar{X}^\nu(\bar{z}(a)) &= \sum_{\mu} \left(\frac{\partial \bar{z}^\nu}{\partial z^\mu} \right)_a X^\mu(z(a)) \\ &= (T_*X)_{T(a)}(\bar{z}^\nu) \end{aligned} \quad (58)$$

という関係が得られる [Appendix 2.A の式 (A.16) 参照]。さらに、上式において、 a を $T^{-1}(a)$ に置き換えると、

$$\bar{X}^\nu(z(a)) = (T_*X)_a(\bar{z}^\nu) \quad (59)$$

となる。上式は、 $\bar{X}^\nu(z(a))$ は、多様体 M 上の点 a において、座標系 z によって表されたベクトル場 T_*X (写像 T による X の push forward) の成分であることを意味し、active な描像による \bar{X}^ν の解釈であり、 $\bar{X}^\nu(w)$ の独立変数 w は、座標 z の取る数値 $z(a)$ であると見なされる。

今度は、多様体 M 上の任意の s 次微分形式 (s -形式) θ を以下のように座標系 z と \bar{z} で表現してみよう。

$$\begin{aligned} \theta &= \sum_{\mu_1 < \dots < \mu_s} \theta_{\mu_1 \dots \mu_s}(z) dz^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dz^{\mu_s} \\ &= \sum_{\nu_1 < \dots < \nu_s} \bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}(\bar{z}) d\bar{z}^{\nu_1} \wedge \dots \wedge d\bar{z}^{\nu_s} \end{aligned} \quad (60)$$

ここで、

$$\bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}(\bar{z}(a)) = \theta_a \left(\left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}^{\nu_1}} \right)_a, \dots, \left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}^{\nu_s}} \right)_a \right) \quad (61)$$

であり [Appendix 2.A の式 (A.25) 参照]、 $\bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}(\bar{z}(a))$ が、多様体上の点 a における s -形式 θ の座標系 \bar{z} に関する成分であることを意味する。これは passive な描像による $\bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}$ の解釈を与え、 $\bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}(w)$ の独立変数 w は、座標 \bar{z} の取る数値 $\bar{z}(a)$ であると見なされる。また、式(60)の二つの表式より、

$$\begin{aligned} \bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}(\bar{z}(a)) &= \theta_a \left(\left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}^{\nu_1}} \right)_a, \dots, \left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}^{\nu_s}} \right)_a \right) \\ &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_s} \left(\frac{\partial z^{\mu_1}}{\partial \bar{z}^{\nu_1}} \right)_a \dots \left(\frac{\partial z^{\mu_s}}{\partial \bar{z}^{\nu_s}} \right)_a \theta_{\mu_1 \dots \mu_s}(z(a)) \\ &= ((T^{-1})^*\theta)_{T(a)} \left(\left(\frac{\partial}{\partial z^{\nu_1}} \right)_{T(a)}, \dots, \left(\frac{\partial}{\partial z^{\nu_s}} \right)_{T(a)} \right) \end{aligned} \quad (62)$$

が得られる [Appendix 2.A の式 (A.16) (A.27) および (A.34) 参照]。上式において、 a を $T^{-1}(a)$ に置き換えると、

$$\bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}(z(a)) = ((T^{-1})^*\theta)_a \left(\left(\frac{\partial}{\partial z^{\nu_1}} \right)_a, \dots, \left(\frac{\partial}{\partial z^{\nu_s}} \right)_a \right) \quad (63)$$

を得る。上式は、 $\bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}(z(a))$ が、多様体上の点 a における s -形式 $(T^{-1})^*\theta$ の座標系 z に関する成分であることを意味する。これは、active な描像による $\bar{\theta}_{\nu_1 \dots \nu_s}$ の解釈を与

え、 $\bar{\theta}_{\nu_1, \dots, \nu_n}(w)$ の独立変数 w は、座標 z の取る数値 $z(a)$ であると見なされる。

2.7 Lie 変換摂動法による基本1-形式の変形

本節では、Lie 変換摂動法による基本1-形式の変形[5, 6] について解説しよう。前節で説明した写像と座標変換の関係を踏まえて、第2.5節で述べた基本1-形式 γ を次式のように2つの座標系 z と \bar{z} で表してみよう。

$$\gamma = \sum_{\mu} \gamma_{\mu}(z) dz^{\mu} = \sum_{\nu} \bar{\gamma}_{\nu}(\bar{z}) d\bar{z}^{\nu} \quad (64)$$

座標系 z で表した基本1-形式 γ の成分は、

$$\gamma_{\mu}(z(a)) = \gamma_a \left(\left(\frac{\partial}{\partial z^{\mu}} \right)_a \right) \quad (65)$$

であり、座標系 \bar{z} で表した γ の成分は、

$$\bar{\gamma}_{\nu}(\bar{z}(a)) = \gamma_a \left(\left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}^{\nu}} \right)_a \right) \quad (66)$$

となる。上式は前節で述べた passive な描像を表し、関数 $\bar{\gamma}_{\nu}(w)$ は、座標 $\bar{z} = T^*z$ によって表現された基本1-形式 γ の (ν 番目の) 成分であると解釈され、この場合、 $\bar{\gamma}_{\nu}$ が依存する変数 w は座標 \bar{z} がとる数値 $\bar{z}(a)$ を表す。上式は、次のように書き換えることができる [式(62)参照]。

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_{\nu}(\bar{z}(a)) &= \sum_{\mu} \left(\frac{\partial z^{\mu}}{\partial \bar{z}^{\nu}} \right)_a \gamma_{\mu}(z(a)) \\ &= ((T^{-1})^* \gamma)_{T(a)} \left(\left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}^{\nu}} \right)_{T(a)} \right) \end{aligned} \quad (67)$$

ここで、 a を $T^{-1}(a)$ に置き換えると、ただちに、

$$\bar{\gamma}_{\nu}(z(a)) = ((T^{-1})^* \gamma)_a \left(\left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}^{\nu}} \right)_a \right) \quad (68)$$

を得る。上式は前節で述べた active な描像を表し、関数 $\bar{\gamma}_{\nu}(w)$ は、 T^{-1} による基本1-形式 γ の pull back $(T^{-1})^* \gamma$ を座標 z によって表現した場合の成分であると解釈される。この場合、 $\bar{\gamma}_{\nu}$ が依存する変数 w は座標 z がとる数値 $z(a)$ を表す。

以上に述べたことから、変換された座標系 $\bar{z} = T^*z$ による1-形式 γ の成分表示は、変換された1-形式 $\bar{\gamma} = (T^{-1})^* \gamma$ の座標系 z における成分表示に等しく、これらはともに $(\bar{\gamma}_{\mu}(w))_{\mu=1, \dots, 2n+1}$ で与えられる。基本1-形式が記述する系において、座標変数が満たす運動方程式は、式(20)でみたように、その座標系によって表現された基本1-形式の成分によって完全に決定されるから、1-形式 $\bar{\gamma} = (T^{-1})^* \gamma$ が記述する系における、座標系 z に対する運動方程式は、1-形式 γ が記述する系における、座標系 $\bar{z} = T^*z$ に対する運動方程式と同じ形になることが結論づけられる。さらに、式(36)で示した基本1-形式の変換によって、基本1-形式から導かれる運動方程式は変わらないことを思い起こそう。したがって、基本1-形式 γ を次のような1-形式

$$\bar{\gamma} = (T^{-1})^* \gamma + dS \quad (69)$$

に変換したとき、上式(69)で与えられた1-形式 $\bar{\gamma}$ から導かれる座標系 z に対する運動方程式は、もとの1-形式 γ から導かれる座標系 $\bar{z} = T^*z$ に対する運動方程式と同じ形であるということになる。もし、ある写像 T とスカラー関数 S により、式(69)のような変換から導かれた1-形式 $\bar{\gamma}$ の座標系 z に対する成分表現 $(\bar{\gamma}_{\mu}(w))_{\mu=1, \dots, 2n+1}$ が都合のよい単純な形をしていれば、その成分表現から導かれる運動方程式、即ち元の1-形式 γ における座標系 \bar{z} に対する運動方程式は、解くことが容易になる。例えば、 $(\bar{\gamma}_{\mu})_{\mu=1, \dots, 2n+1}$ が^s、ある座標 z^i に依存しないようになっていれば、Noether の定理より直ちに、 $\bar{\gamma}_i$ が運動の不変量となり、解くべき運動方程式の数を減らすことができる。その例が、第2.8節で述べる磁場中の荷電粒子の案内中心運動方程式である。以上に述べた基本1-形式と運動方程式の変換に対する解釈が、以下に述べる Lie 変換摂動法とそれに伴う運動方程式の簡約化の手続きの根底にあることを注意しておこう。

さて、写像 T が、

$$T = \dots T_3 T_2 T_1, \quad (70)$$

のように一連の写像 T_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) の合成として表される場合を考えよう。ここで、 T_n は、ベクトル場 G_n を用いて、以下のように Lie 変換として与えられるものとする [Appendix 2.A の式(A19)参照]。

$$T_n = \text{Exp}(\varepsilon^n G_n) \quad (71)$$

写像 T_n による push forward $(T_n)_*$ (写像 T_n の微分ともよばれる) および pull back $(T_n)^*$ は、それぞれ、

$$(T_n)_* = \exp(-\varepsilon^n L_n) = 1 - \varepsilon^n L_n + \frac{\varepsilon^2}{2} (L_n)^2 + \dots$$

$$(T_n)^* = \exp(\varepsilon^n L_n) = 1 + \varepsilon^n L_n + \frac{\varepsilon^2}{2} (L_n)^2 + \dots \quad (72)$$

のように表すことができる。上式において、 L_n はベクトル場 G_n に沿った Lie 微分を表し、push forward $(T_n)_*$ の表式の中に現れる L_n はベクトル場 X に対して作用し、

$$L_n X = [G_n, X] = G_n X - X G_n \quad (73)$$

のようにベクトル場 G_n と X の交換子 (Lie 括弧) により定義される [Appendix 2.A の式(A.11)参照]。一方、pull back $(T_n)^*$ の表式の中に現れる Lie 微分 L_n は、微分形式 θ に対して作用し、

$$L_n \theta = i(G_n) d\theta + di(G_n) \theta \quad (74)$$

のように、内部積 $i(G_n)$ と外微分 d により表される [Appendix 2.A の式(A.37)参照]。式(70)で与えられる写像 T の逆写像 T^{-1} 、push forward T_* 、その逆 $(T_*)^{-1} = (T^{-1})_* = T_*^{-1}$ 、pull back T^* およびその逆 $(T^*)^{-1} = (T^{-1})^* = T^{-1*}$ は、それぞれ、次のように表される。

$$T^{-1} = (T_1)^{-1} (T_2)^{-1} (T_3)^{-1} \dots,$$

$$\begin{aligned}
 T^* &= \cdots (T_3)_* (T_2)_* (T_1)_*, \\
 T_*^{-1} &= (T_1)_*^{-1} (T_2)_*^{-1} (T_3)_*^{-1} \cdots, \\
 T^* &= (T_1)^* (T_2)^* (T_3)^* \cdots, \\
 T^{-1*} &= \cdots (T_3)^{-1*} (T_2)^{-1*} (T_1)^{-1*}
 \end{aligned} \quad (75)$$

写像 T による座標変数 z の pull back として得られる座標変数 $\bar{z} = T^*z$ は、パラメータ ε によって、次式のように展開される。

$$\begin{aligned}
 \bar{z} &= T^*z = (T_1)^* (T_2)^* (T_3)^* \cdots z \\
 &= \bar{z}_0 + \varepsilon \bar{z}_1 + \varepsilon^2 \bar{z}_2 + \cdots
 \end{aligned} \quad (76)$$

ここで、 ε に関して 0 次、1 次および 2 次のオーダーの \bar{z} の成分は、微分作用素としてのベクトル場 G_n ($n=0,1,2$) を用いて、以下のように表される。

$$\begin{aligned}
 \bar{z}_0 &= z \\
 \bar{z}_1 &= G_1 z \\
 \bar{z}_2 &= \left(\frac{1}{2} (G_1)^2 + G_2 \right) z
 \end{aligned} \quad (77)$$

式 (69) における γ , $\bar{\gamma}$ および S を ε に関して以下のように展開しよう。

$$\begin{aligned}
 \gamma &= \gamma_0 + \varepsilon \gamma_1 + \varepsilon^2 \gamma_2 + \cdots, \\
 \bar{\gamma} &= \bar{\gamma}_0 + \varepsilon \bar{\gamma}_1 + \varepsilon^2 \bar{\gamma}_2 + \cdots, \\
 S &= S_0 + \varepsilon S_1 + \varepsilon^2 S_2 + \cdots
 \end{aligned} \quad (78)$$

すると、式 (69) は、 ε に関する各オーダーごとの式として、

$$\begin{aligned}
 \bar{\gamma}_0 &= \gamma_0 + dS_0 \\
 \bar{\gamma}_1 &= \gamma_1 - L_1 \gamma_0 + dS_1 \\
 \bar{\gamma}_2 &= \gamma_2 - L_1 \gamma_1 + \left(\frac{1}{2} (L_1)^2 - L_2 \right) \gamma_0 + dS_2
 \end{aligned} \quad (79)$$

のように書き換えられる。さて、Lie 微分 L_n に対する表式 (74) の第 2 項は、微分の形となっているため、上式 (79) における L_n のこの微分項の寄与は全て dS_n の中に押し込めることができる。したがって、今後は、微分形式に作用する L_n の定義として、

$$L_n \theta = i(G_n) d\theta \quad (80)$$

を採用することにする。上式 (80) に従って、式 (79) から $\bar{\gamma}_n$ を計算しても、それは、式 (79) 中の S_n を変化させたものを見なすことができ、 $\bar{\omega} = d\bar{\gamma}$ やそこから導かれる Poisson 括弧式や運動方程式には影響しない。式 (80) を用いると、例えば、1-形式 $\theta = \sum_\mu \theta_\mu dz^\mu$ に対して、

$$(L_n \theta)_\mu = (L_n \theta) \left(\frac{\partial}{\partial z^\mu} \right) = \sum_n (G_n)^\nu \left(\frac{\partial \theta_\nu}{\partial z^\mu} - \frac{\partial \theta_\mu}{\partial z^\nu} \right) \quad (81)$$

となる。上式には、 $\partial(G_n)^\nu / \partial z^\mu$ のような $(G_n)^\nu$ の偏微分項が現れず、式 (74) で定義される L_n に比べて計算量が軽減される。

2.8 磁場中の荷電粒子に対する案内中心変数と案内中心運動方程式

本節では、前節で示した Lie 変換摂動法に従って、磁場中の荷電粒子に対する案内中心変数と案内中心運動方程式の導出を行う [8, 9].

2.8.1 ドリフトオーダーリング

第 2.4 節で扱った電磁場中の荷電粒子の運動に対する Lagrangian と Hamiltonian の表式 (28) において、微小量を表す摂動展開パラメータ ε を導入し、

$$\begin{aligned}
 \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) &\rightarrow \varepsilon^{-1} \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, \varepsilon t) \\
 e\Phi(\mathbf{x}, t) &\rightarrow e\Phi(\mathbf{x}, \varepsilon t)
 \end{aligned} \quad (82)$$

のような置き換えを行おう。すると電磁場中の荷電粒子の運動を記述する基本 1-形式 γ は、

$$\begin{aligned}
 \gamma &= \left(\varepsilon^{-1} \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, \varepsilon t) + m \mathbf{v} \right) \cdot d\mathbf{x} - h dt, \\
 h &= \frac{1}{2} m |\mathbf{v}|^2 + e\Phi(\mathbf{x}, \varepsilon t)
 \end{aligned} \quad (83)$$

のように書かれる。この基本 1-形式から導かれる運動方程式は、式 (33) の中にパラメータ ε が入ったものとなり、

$$\begin{aligned}
 \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{v}, \\
 m \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= e \mathbf{E}(\mathbf{x}, \varepsilon t) + \varepsilon^{-1} \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, \varepsilon t)
 \end{aligned} \quad (84)$$

で与えられる。上式において、 $\mathbf{B}(\mathbf{x}, \varepsilon t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}, \varepsilon t)$ および

$$e \mathbf{E}(\mathbf{x}, \varepsilon t) = -e \nabla \Phi(\mathbf{x}, \varepsilon t) - \frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \tau}(\mathbf{x}, \varepsilon t) \quad (85)$$

である。上に示した電場の表式において、

$$\tau = \varepsilon t \quad (86)$$

により定義された時間変数 τ と $\partial/\partial t = \varepsilon \partial/\partial \tau$ という関係式を用いた。式 (83) の Hamiltonian h において、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの大きさは同程度のオーダーであると見なされる。

$$e\Phi \sim mv^2 \quad (87)$$

一方、式 (84) からわかるように、磁場による Lorentz 力の大きさは電場によるそれよりもずっと大きく、 ε は前者の大きさに対する後者の大きさの比のオーダーを表すと解釈され、

$$\varepsilon \sim \frac{cE}{vB} \sim \frac{c\Phi}{vBl} \sim \frac{mcv}{eBl} \sim \frac{\rho}{l} \quad (88)$$

を得る。ここで、 l は Φ や \mathbf{A} 等の背景場の空間変化のスケール長を表し、式 (88) の導出において、式 (87)、 $E \sim \Phi/l$ および $\rho \sim mcv/(eB)$ を用いた。 ρ は磁場中の荷電粒子の旋回 (ジャイロ) 運動の半径の大きさの程度を表す。式 (88) は、摂動展開パラメータとして用いられる ε が、ジャイロ半径

と背景場の空間変化スケール長の比のオーダーを表すことを意味し、式(82)による ε の導入が、いわゆるドリフトオーダーリング $\varepsilon \sim \rho/l \ll 1$ の近似を用いることに対応していることがわかる。また、式(85)では、電場に対する静電ポテンシャルの勾配とベクトルポテンシャルの時間微分それぞれの寄与の大きさは同程度であると見なされ、背景場の変化の時間スケールを t_c で表すと、式(85)、(87)と(88)から、

$$t_c \sim \frac{Al}{c\Phi} \sim \frac{eBl^2}{mcv^2} \sim \left(\frac{\rho}{l}\right)^{-1} \frac{l}{v} \sim \varepsilon^{-1} t_{tr} \quad (89)$$

となる。上式において、 $B = |\nabla \times \mathbf{A}| \sim Al/l$ を用いた。式(89)からわかるように、ここでは、粒子がスケール長 l を通過する時間(transit time) $t_{tr} \sim l/v$ に比べると、背景場の変化の時間スケール t_c は ε^{-1} 倍程度長いと見積もられている。因みに、磁場閉じ込め核融合プラズマの輸送理論では、背景場の変化の時間スケールはさらに長く、 $\varepsilon^{-2} t_{tr}$ と仮定され、これは輸送オーダーリング[10]と呼ばれるが、その場合、電場におけるベクトルポテンシャルの時間微分の寄与は、静電ポテンシャルの勾配に比べ、 ε 倍程度の微小量と見なされる。一方、プラズマ乱流を扱うジャイロ運動論等において、電磁場の乱流揺動成分の変化の時間スケールはtransit time t_{tr} 程度であると仮定される[11]。

2.8.2 座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$

ここで、式(83)で示した電磁場中の荷電粒子の運動を記述する基本1-形式が定義された7次元空間の座標系として、 $z = (z^{\mu})_{\mu=1,\dots,7} = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ を導入しよう。 \mathbf{x} は粒子の位置ベクトルであり、 τ は式(86)で定義された時間変数である。時刻 τ において、空間点 \mathbf{x} ごとに正規直交基底ベクトルの組 $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{b})$ を設ける。ただし、 \mathbf{b} は磁場方向の単位ベクトル $\mathbf{b} \equiv \mathbf{B}/B$ ($B \equiv |\mathbf{B}|$)である。磁場に平行な方向の速度成分を $v_{\parallel} \equiv \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}$ とおき、磁場に垂直な方向の速度ベクトル成分 $\mathbf{v}_{\perp} \equiv \mathbf{v} - v_{\parallel} \mathbf{b}$ の大きさを $v_{\perp} = |\mathbf{v}_{\perp}|$ で表す。 \mathbf{v}_{\perp} 方向の単位ベクトルを $\mathbf{c} \equiv \mathbf{v}_{\perp}/v_{\perp}$ とし、これを用いて、新たに正規直交基底ベクトルの組 $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ を設ける。このとき、 $\mathbf{a} = \mathbf{b} \times \mathbf{c}$ は荷電粒子のジャイロ半径ベクトル方向の単位ベクトルになる。ジャイロ位相 θ は、 \mathbf{a} と \mathbf{e}_1 がなす角として定義され、 (\mathbf{a}, \mathbf{c}) は $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ と以下の関係によって結びつけられる。

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= \cos \theta \mathbf{e}_1 - \sin \theta \mathbf{e}_2, \\ \mathbf{c} &= -\sin \theta \mathbf{e}_1 - \cos \theta \mathbf{e}_2 \end{aligned} \quad (90)$$

速度ベクトル \mathbf{v} は、座標変数 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ を用いると、

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= v_{\parallel} \mathbf{b}(\mathbf{x}, \tau) + v_{\perp} \mathbf{c}(\mathbf{x}, \tau, \theta) \\ &= v_{\parallel} \mathbf{b}(\mathbf{x}, \tau) - v_{\perp} [\sin \theta \mathbf{e}_1(\mathbf{x}, \tau) + \cos \theta \mathbf{e}_2(\mathbf{x}, \tau)] \end{aligned} \quad (91)$$

のように表される。座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ において、式(83)で示された基本1-形式 γ は次のように表される。

$$\begin{aligned} \gamma &= \sum_{\mu} \gamma_{\mu}(z) dz^{\mu} = \varepsilon^{-1} \gamma^{(0)} + \gamma^{(1)} \\ \gamma^{(0)} &= \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, \tau) \cdot d\mathbf{x} - \left(\frac{1}{2} m (v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2) + e\Phi(\mathbf{x}, \tau) \right) d\tau \end{aligned}$$

$$\gamma^{(1)} = m [v_{\parallel} \mathbf{b}(\mathbf{x}, \tau) + v_{\perp} \mathbf{c}(\mathbf{x}, \tau)] \cdot d\mathbf{x} \quad (92)$$

2.8.3 予備的な Lie 変換

前節で導入した座標変数 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ から次節以降で導かれる最終的な案内中心変数へ変換を行う途中段階として、次式で与えられる予備的な Lie 変換を行う。

$$T^{(p)} = \text{Exp}(\varepsilon G^{(p)}) \quad (93)$$

ここで、ベクトル場 $G^{(p)}$ は、

$$G^{(p)} = -\frac{cmv_{\perp}}{eB} \mathbf{a} \cdot \left(\nabla + \mathbf{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (94)$$

により定義され、座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ に関する $G^{(p)}$ の成分は、それぞれ、

$$\begin{aligned} (G^{(p)})^{\mathbf{x}} &= -\frac{cmv_{\perp}}{eB(\mathbf{x}, \tau)} \mathbf{a}(\mathbf{x}, \tau), \\ (G^{(p)})^{\theta} &= (G^{(p)})^{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{R}(\mathbf{x}, \tau), \\ (G^{(p)})^{v_{\parallel}} &= (G^{(p)})^{v_{\perp}} = (G^{(p)})^{\tau} = 0 \end{aligned} \quad (95)$$

で与えられる。ここで、 \mathbf{R} はジャイロゲージ変換[Appendix 2.B 参照]に関わるベクトルであり、Appendix 2.Bの式(B.2)で定義される。上式で定義された $G^{(p)}$ は、ジャイロゲージの選び方によらない形をしていることがわかる[Appendix 2.Bの式(B.6)参照]。写像 $T^{(p)}$ による座標変数 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ のpull backにより得られる座標変数 $z^{(p)} = (T^{(p)})^* z$ の各成分は、それぞれ、

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(p)} &= (T^{(p)})^* \mathbf{x} = \mathbf{x} - \varepsilon \frac{cmv_{\perp}}{eB(\mathbf{x}, \tau)} \mathbf{a}(\mathbf{x}, \tau) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \\ \theta^{(p)} &= (T^{(p)})^* \theta = \theta + \varepsilon (G^{(p)})^{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{R}(\mathbf{x}, \tau) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \\ v_{\parallel}^{(p)} &= (T^{(p)})^* v_{\parallel} = v_{\parallel}, \\ v_{\perp}^{(p)} &= (T^{(p)})^* v_{\perp} = v_{\perp}, \\ \tau^{(p)} &= (T^{(p)})^* \tau = \tau \end{aligned} \quad (96)$$

となり、 \mathbf{x} 成分と θ 成分以外はもとのままであり、 ε について1次のオーダーでは、 $\mathbf{x}^{(p)}$ と \mathbf{x} の差はよく知られたジャイロ半径ベクトル $(cmv_{\perp}/eB) \mathbf{a}$ で与えられており、 ε に関する2次以上の高次項を除けば、 $\mathbf{x}^{(p)}$ は従来よく用いられる案内中心の位置ベクトルを表していることがわかる。

さて、第2.7節で解説した手順に従い、 $(T^{(p)})^{-1}$ による1-形式 γ のpull backは、

$$\bar{\gamma} = \exp(-\varepsilon L_p) \gamma = \varepsilon^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \bar{\gamma}^{(n)} \quad (97)$$

のように表される。1-形式の変換式(69)の右辺にあったスカラーの微分項 dS に対応するものは $\bar{\omega} = d\bar{\gamma}$ やそこから導かれる運動方程式には影響せず、上式(97)では省略されている。また、式(80)で説明したように、上式(97)における微分演算子 L_p として、

$$L_p = i(G^{(p)}) d \quad (98)$$

を用いることとする。 ε による摂動展開の最低次では、1-形式は変わらず、

$$\bar{\gamma}^{(0)} = \gamma^{(0)} = \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, \tau) \cdot d\mathbf{x} - \left(\frac{1}{2} m (v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2) + e\Phi(\mathbf{x}, \tau) \right) d\tau - \left(\frac{1}{2} m (v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2) + e\Phi(\mathbf{x}, t) \right) dt \quad (99)$$

となる。次のオーダーでは、

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}^{(1)} &= \gamma^{(1)} - L_p \gamma^{(0)} \\ &= m v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot d\mathbf{x} + \frac{c m v_{\perp}}{B} \mathbf{a} \cdot \mathbf{E} d\tau \end{aligned} \quad (100)$$

であり、式(92)の $\gamma^{(1)}$ の中のジャイロ位相に依存する項 $m v_{\perp} \mathbf{c}$ が除去されたが、代わりに $\bar{\gamma}^{(1)}$ にはジャイロ位相依存性をもつ項 $(c m v_{\perp} / B) (\mathbf{a} \cdot \mathbf{E})$ が現れた。式(97)中の $\bar{\gamma}^{(2)}$ は、

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}^{(2)} &= -L_p \gamma^{(1)} + \frac{1}{2} L_p^2 \gamma^{(0)} = \sum_{\mu} \bar{\gamma}_{\mu}^{(2)} dz^{\mu}, \\ \bar{\gamma}_{\mathbf{x}}^{(2)} &= -\frac{m^2 c v_{\perp}^2}{2eB} [\mathbf{R} + (\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \mathbf{b}] \\ &\quad - \frac{m^2 c v_{\parallel} v_{\perp}}{eB} [(\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) \mathbf{b} + (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \mathbf{c}], \\ \bar{\gamma}_{\theta}^{(2)} &= \frac{m^2 c v_{\perp}^2}{2eB}, \\ \bar{\gamma}_{v_{\parallel}}^{(2)} &= \bar{\gamma}_{v_{\perp}}^{(2)} = 0 \end{aligned} \quad (101)$$

で与えられる。ここで、 $\bar{\gamma}_{\tau}^{(2)}$ の表式は以下では必要としないので省略した。 $\bar{\gamma}$ のさらに高次成分である $\bar{\gamma}^{(3)}$ は、

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}^{(3)} &= \frac{1}{2} L_p^2 \gamma^{(1)} - \frac{1}{6} L_p^3 \gamma^{(0)} = \sum_{\mu} \bar{\gamma}_{\mu}^{(3)} dz^{\mu}, \\ \bar{\gamma}_{\theta}^{(3)} &= -\frac{m^3 c^2 v_{\perp}^2}{e^2 B^2} \left[\frac{v_{\perp}}{3} (\mathbf{a} \cdot \nabla B) / B + \frac{v_{\parallel}}{2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \right], \\ \bar{\gamma}_{v_{\parallel}}^{(3)} &= \bar{\gamma}_{v_{\perp}}^{(3)} = 0 \end{aligned} \quad (102)$$

のように表される。ここで、 $\bar{\gamma}_{\mathbf{x}}^{(3)}$ 、 $\bar{\gamma}_{\tau}^{(3)}$ および $\bar{\gamma}^{(n)}$ ($n \geq 4$)の表式は省略する。

式(101)における θ -成分である $\bar{\gamma}_{\theta}^{(2)} = m^2 c v_{\perp}^2 / (2eB)$ は、よく知られた磁気モーメントの表式 $\mu = m v_{\perp}^2 / (2B)$ と定数 $m c l e$ の積となっていることに注目しよう。もし、 $\bar{\gamma}$ のすべての成分が、 θ に依存していなければ、第2.3節で述べたNoetherの定理より、 $\bar{\gamma}$ から導かれる運動方程式に対して、 $\mu = m v_{\perp}^2 / (2B)$ が不変量となる。ところが、式(100) - (102)に示された $\bar{\gamma}$ の成分の中には、ベクトル \mathbf{a} や \mathbf{c} を通して θ -依存性が残されており、写像 $T^{(p)}$ による変換だけでは、 $\mu = m v_{\perp}^2 / (2B)$ の保存する運動方程式が得られない。

因みに、これまでの段階で既に得られている $\bar{\gamma}_0$ [式(99)]、 $\bar{\gamma}_1$ [式(100)]および $\bar{\gamma}_2$ [式(101)]までを残し、さらにその中で $\bar{\gamma}_{\tau}^{(1)}$ 、 $\bar{\gamma}_{\tau}^{(2)}$ および $\bar{\gamma}_{\mathbf{x}}^{(2)}$ を無視するだけでも、 θ -依存性をもつ成分がなくなり、その結果、通常最もよく用いられている形のLittlejohnの案内中心運動方程式を与える基本1-形式

$$\left(\frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + m v_{\parallel} \mathbf{b} \right) \cdot d\mathbf{x} + \frac{m^2 c v_{\perp}^2}{2eB} d\theta$$

が得られる(上式では、 $\varepsilon = 1$ 、 $\tau = t$ と置かれている)。しかしながら、より高次の精度をもつ案内中心運動方程式を求めたり、また案内中心変数を粒子変数から、より正確に定義するためには、次節に示すように、Lie変換を用いて基本1-形式の各成分からジャイロ位相をさらに除去していく必要がある。

2.8.4 ジャイロ位相に対する依存性の除去

第2.8.3節で予備的なLie変換 $T^{(p)}$ により基本1-形式 γ から得られた1-形式 $\bar{\gamma}$ をさらに式(69)にならって以下のように変換しよう。

$$\Gamma = (T^{-1})^* \bar{\gamma} + dS \quad (104)$$

目標は、座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ に関する Γ の成分が θ -依存性をもたなくなるようにすることである。ここで、写像 T は以下のように一連のLie変換 T_n ($n = 1, 2, 3, \dots$)の合成として表されるものとする。

$$T = \dots T_3 T_2 T_1, \quad T_n = \text{Exp}(\varepsilon^n G_n) \quad (105)$$

ところで、ベクトル場 G_n ($n = 1, 2, \dots$)は、第2.8.3節の $G^{(p)}$ と同様に、 τ -成分をもたない($G_n^{\tau} = (G^{(p)})^{\tau} = 0$)とする。これは、写像 $T^{(p)}$ と $T = \dots T_3 T_2 T_1$ の合成による座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ のpull backとして最終的に定義される座標系 $Z = (TT^{(p)})^* z$ の時間成分が $(TT^{(p)})^* \tau = \tau$ のように、元の時間変数 τ のままで変わらないようにするためである。

式(104)の変換により得られる1-形式 Γ は、 ε によって次式のように展開される。

$$\Gamma = \varepsilon^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \Gamma^{(n)} \quad (106)$$

ε に関して最低次のオーダーでは、

$$\begin{aligned} \Gamma^{(0)} &= \bar{\gamma}^{(0)} = \gamma^{(0)} \\ &= \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, \tau) \cdot d\mathbf{x} - \left(\frac{1}{2} m (v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2) + e\Phi(\mathbf{x}, \tau) \right) d\tau \end{aligned} \quad (107)$$

のように、 $\Gamma^{(0)}$ 、 $\bar{\gamma}^{(0)}$ および $\gamma^{(0)}$ は一致する。 $\Gamma^{(0)}$ の座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ に関する各成分は、ジャイロ位相に依存しないことに注意しよう。次のオーダーでは、

$$\Gamma^{(1)} = \bar{\gamma}^{(1)} - L_1 \bar{\gamma}^{(0)} + dS^{(1)} = \sum_{\mu} \Gamma_{\mu}^{(1)} dz^{\mu} \quad (108)$$

となる。上式中の $L_1 = i(G_1) d$ を規定するベクトル場 G_1 や $S^{(1)}$ をどう選ぶかには任意性がある。ここで、簡単な選択は $S^{(1)} = 0$ および $G_1^{\mathbf{x}} = 0$ となるような G_1 を選ぶことである。すると、座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ に関する $\Gamma^{(1)}$ の各成分は、

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{x}}^{(1)} &= m v_{\parallel} \mathbf{b}, \\ \Gamma_{v_{\parallel}}^{(1)} &= \Gamma_{\theta}^{(1)} = \Gamma_{v_{\perp}}^{(1)} = 0, \\ \Gamma_{\tau}^{(1)} &= \frac{c m v_{\perp}}{B} \mathbf{a} \cdot \mathbf{E} + m v_{\parallel} G_1^{\parallel} + m v_{\perp} G_1^{\perp} \end{aligned} \quad (109)$$

で与えられる。上に示された $\Gamma^{(1)}$ の各成分の中で \mathbf{a} を含んでいる $\Gamma_\tau^{(1)}$ 以外の成分の表式には、ジャイロ位相 θ に対する依存性が含まれていない。 $\Gamma_\tau^{(1)}$ から θ -依存性がなくなるように、 $G_1^{v_\parallel}$ と $G_1^{v_\perp}$ を選ぶ必要がある。これらの選び方については、また後に述べよう。

2次のオーダーの1-形式 $\Gamma^{(2)}$ は、以下のように表される。

$$\begin{aligned}\Gamma^{(2)} &= \bar{\gamma}^{(2)} - L_1 \bar{\gamma}^{(1)} + \left(\frac{1}{2} L_1^2 - L_2 \right) \bar{\gamma}^{(0)} + dS^{(2)} \\ &= \sum_\mu \Gamma_\mu^{(2)} dz^\mu\end{aligned}\quad (110)$$

$S^{(2)} = 0$ とおくと、 $\Gamma_\tau^{(2)}$ を除く $\Gamma^{(2)}$ の各成分は、

$$\begin{aligned}\Gamma_{\mathbf{x}}^{(2)} &= -\frac{cm^2 v_\perp^2}{2eB} [\mathbf{R} + (\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \mathbf{b}] \\ &\quad - \frac{cm^2 v_\parallel v_\perp}{eB} [(\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) \mathbf{b} + (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \mathbf{c}] \\ &\quad - m G_1^{v_\parallel} \mathbf{b} - \frac{e}{c} \mathbf{B} \times G_2^{\mathbf{x}} \\ \Gamma_{v_\parallel}^{(2)} &= \Gamma_{v_\perp}^{(2)} = 0 \\ \Gamma_\theta^{(2)} &= \bar{\gamma}_\theta^{(2)} = \frac{m^2 c v_\perp^2}{2eB}\end{aligned}\quad (111)$$

となる。

さらに3次のオーダーの1-形式 $\Gamma^{(3)}$ は、

$$\begin{aligned}\Gamma^{(3)} &= \bar{\gamma}^{(3)} - L_1 \bar{\gamma}^{(2)} + \left(\frac{1}{2} L_1^2 - L_2 \right) \bar{\gamma}^{(1)} \\ &\quad + \left(-\frac{1}{6} L_1^3 + L_2 L_1 - L_3 \right) \bar{\gamma}^{(0)} + dS^{(3)} \\ &= \sum_\mu \Gamma_\mu^{(3)} dz^\mu\end{aligned}\quad (112)$$

で与えられる。ここで、 $\Gamma_{\mathbf{x}}^{(3)}$ と $\Gamma_\tau^{(3)}$ を除く $\Gamma^{(3)}$ の各成分は、

$$\begin{aligned}\Gamma_{v_\parallel}^{(3)} &= m \mathbf{b} \cdot G_2^{\mathbf{x}} + \frac{\partial S^{(3)}}{\partial v_\parallel} \\ \Gamma_\theta^{(3)} &= -\frac{c^2 m^3 v_\perp^3}{3e^2 B^3} (\mathbf{a} \cdot \nabla B) - \frac{c^2 m^3 v_\parallel v_\perp^2}{2e^2 B^2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \\ &\quad - \frac{cm^2 v_\perp}{eB} G_1^{v_\perp} + \frac{\partial S^{(3)}}{\partial \theta} \\ \Gamma_{v_\perp}^{(3)} &= \frac{cm^2 v_\perp}{eB} G_1^\theta + \frac{\partial S^{(3)}}{\partial v_\perp}\end{aligned}\quad (113)$$

となる。

以上の式(109)の最後の式、(111)の最初の式および(113)を用いて、 $\Gamma_\tau^{(1)}$ 、 $\Gamma_{\mathbf{x}}^{(2)}$ 、 $\Gamma_{v_\parallel}^{(3)}$ 、 $\Gamma_\theta^{(3)}$ 、 $\Gamma_{v_\perp}^{(3)}$ から θ -依存性がなくなるという条件を満たすよう、 $G_1^{v_\parallel}$ 、 G_1^θ 、 $G_1^{v_\perp}$ 、 $G_2^{\mathbf{x}}$ および $S^{(3)}$ を選ばなければならない。しかし、この条件だけでは、これら Γ 、 G の成分や $S^{(3)}$ を唯一通りに決定することはできない。ここでは、 Γ を最も単純な形にするため、

$$\Gamma_{v_\parallel}^{(3)} = \Gamma_\theta^{(3)} = \Gamma_{v_\perp}^{(3)} = 0\quad (114)$$

という条件を追加しよう。 Appendix 2.Bの式(B.8)で示されるように、ジャイロゲージ変換に伴い、1-形式の \mathbf{x} -成分は変化するため、ジャイロゲージの取り方によらず、 $\Gamma_{\mathbf{x}}^{(2)} = 0$ と要請することはできない。 Littlejohn が「標準案内中心変数 (standard guiding center variables)」と称する場合に選択した条件は、

$$\Gamma_{\mathbf{x}}^{(2)} = -\frac{m^2 c v_\perp^2}{2eB} \mathbf{R}\quad (115)$$

とおくことである。これは、ジャイロゲージの取り方によらない形になっている [式(B.9)参照]。式(109)、(111)、(113)-(115)を用いると、 $\Gamma_\tau^{(1)}$ の表式、

$$\Gamma_\tau^{(1)} = -\frac{cm^2 v_\parallel v_\perp^2}{4eB} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b})\quad (116)$$

および $G_1^{v_\parallel}$ 、 G_1^θ 、 $G_1^{v_\perp}$ 、 $G_2^{\mathbf{x}}$ 、 $S^{(3)}$ に対する表式、

$$\begin{aligned}G_1^{v_\parallel} &= -\frac{cmv_\perp^2}{2eB} (\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) - \frac{cmv_\parallel v_\perp}{eB} (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) \\ G_1^\theta &= +\frac{cmv_\perp}{eB^2} (\mathbf{c} \cdot \nabla B) - \frac{c}{v_\perp B} (\mathbf{c} \cdot \mathbf{E}) \\ &\quad - \frac{cmv_\parallel}{4eB} (\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} - \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) + \frac{cmv_\perp^2}{ev_\perp B} (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \\ G_1^{v_\perp} &= -\frac{c}{B} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{E}) + \frac{cmv_\parallel v_\perp}{4eB} (3\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} - \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) \\ &\quad + \frac{cmv_\perp^2}{eB} (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) \\ G_2^{\mathbf{x}} &= \left[-\frac{c^2 m^2 v_\perp^2}{8e^2 B^2} (\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} - \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2c^2 m^2 v_\parallel v_\perp}{e^2 B^2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \right] \mathbf{b} + \frac{c^2 m^2 v_\parallel v_\perp}{e^2 B^2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \mathbf{a} \\ S^{(3)} &= -\frac{c^2 m^3 v_\perp^3}{3e^2 B^3} (\mathbf{c} \cdot \nabla B) + \frac{c^2 m^2 v_\perp}{eB^2} (\mathbf{c} \cdot \mathbf{E}) + \frac{c^2 m^3 v_\parallel v_\perp^2}{8e^2 B^2} \\ &\quad \times (\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} - \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) - \frac{c^2 m^3 v_\parallel v_\perp^2}{e^2 B^2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c})\end{aligned}\quad (117)$$

が導かれる。 Littlejohn は、 ε に関するさらに高次のオーダーにおいて、

$$\begin{aligned}\Gamma_{\mathbf{x}}^{(n)} &= 0 \quad (n \geq 3) \\ \Gamma_{v_\parallel}^{(n)} &= \Gamma_\theta^{(n)} = \Gamma_{v_\perp}^{(n)} = 0 \quad (n \geq 4)\end{aligned}\quad (118)$$

を満足する $G_n^{v_\parallel}$ 、 G_n^θ 、 $G_n^{v_\perp}$ ($n \geq 2$)、 $G_n^{\mathbf{x}}$ ($n \geq 3$) および $S^{(n)}$ ($n \geq 4$) が存在し、それによって標準案内中心変数が定義できることを示した。標準案内中心変数を採用すると、 ε に関するこれらの高次オーダー解析の1-形式 Γ に対する影響は、 $\Gamma_\tau^{(n)}$ ($n \geq 2$) のみに (換言すれば Hamiltonian の高次の補正項として) 現れるだけであり、 Γ の他の成分およびそれから決まる座標変数間の Poisson 括弧はさらなる高次オーダー解析によっても変化しない。

2.8.5 標準案内中心座標で表された基本1-形式と運動方程式

第2.8.1節で与えられた電磁場中の荷電粒子に対する基

本1-形式 γ は、次式が示すように、第2.8.2および2.8.3節で述べた Lie 変換により、1-形式 Γ へと変換された。

$$\Gamma = (TT^{(p)})^{-1*} \gamma + dS = \sum_{\mu} \Gamma_{\mu}(z) dz^{\mu} \quad (119)$$

上式を書き換えると、

$$\begin{aligned} \gamma &= (TT^{(p)})^*(\Gamma - dS) \\ &= \sum_{\mu} \Gamma_{\mu}(Z) dZ^{\mu} + dS' \end{aligned} \quad (120)$$

となる。ここで、 $S' = -(TT^{(p)})^* S$ 、 $Z = T\bar{z} = TT^{(p)}z = (\mathbf{X}, \tau)$ および $\mathbf{Z} = (Z)_{i=1,\dots,6} = (\mathbf{X}, U, \theta, W)$ である。第2.6および2.7節で解説した active および passive な描像の観点からすると、式(119)は active な描像に従い、 $\Gamma_{\mu}(z)$ は、1-形式 Γ の座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ に関する成分を表すことを意味し、式(120)は、同形の関数である $\Gamma_{\mu}(Z)$ が、1-形式 γ の座標系 $Z = T\bar{z} = TT^{(p)}z = (\mathbf{X}, U, \theta, W, \tau)$ に関する成分であるという passive な描像を与える。以下では、後者の passive な描像に従うことにして、第2.8.4節の結果を用いると、 $\Gamma_{\mu}(Z)$ の成分が以下のように表される。

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{X}} &= \varepsilon^{-1} \frac{e}{c} \mathbf{A} + mU\mathbf{b} - \varepsilon \frac{m^2 c W^2}{2eB} \mathbf{R} \\ \Gamma_U &= \Gamma_W = 0 \\ \Gamma_{\theta} &= \varepsilon \frac{m^2 c W^2}{2eB} \\ \Gamma_{\tau} &= -\varepsilon^{-1} H(\mathbf{X}, U, W, \tau) \\ &= -\varepsilon^{-1} \left[\frac{1}{2} m(U^2 + W^2) + e\Phi(\mathbf{X}, \tau) \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon \frac{m^2 c U W^2}{4eB} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) + \mathcal{O}(\varepsilon) \right] \end{aligned} \quad (121)$$

上式において、 \mathbf{A} 、 \mathbf{b} 、 B および \mathbf{R} は、 (\mathbf{X}, τ) の関数と見なされる。

ここからは、座標変数 W の代わりに、磁気モーメント $\mu = mW^2/2B$ を用いることにし、最終的な標準案内中心座標系として $(\mathbf{X}, U, \theta, \mu, \tau)$ を採用することにしよう。式(76)-(77)を参考にして、第2.8.3および2.8.4節で導かれたベクトル $G^{(p)}$ および G_{μ} の各成分を用いると、標準案内中心変数 $(\mathbf{X}, U, \theta, \mu)$ は 粒子座標変数 $(\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp})$ によって以下のように表される。

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \mathbf{x} - \varepsilon \frac{m c v_{\perp}}{eB} \mathbf{a} \\ &\quad + \varepsilon^2 \frac{c^2 m^2}{e^2} \left(\left[-\frac{v_{\perp}^2}{2B^3} (\mathbf{a} \cdot \nabla B) + \frac{v_{\parallel} v_{\perp}}{B^2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \right] \mathbf{a} \right. \\ &\quad \left. + \left[-\frac{v_{\perp}^2}{8B^2} (5\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} - \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) + \frac{2v_{\parallel} v_{\perp}}{B^2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \right] \mathbf{b} \right) \\ &\quad + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ U &= v_{\parallel} + \varepsilon G_1^{\parallel} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ \theta &= \theta + \varepsilon \left[-\frac{c m v_{\perp}}{eB} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{R}) + G_1^{\theta} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{mW^2}{2B(\mathbf{X}, \tau)} \\ &= \frac{m v_{\perp}^2}{2B(\mathbf{x}, \tau)} + \varepsilon \frac{c m^2}{e} \left[-\frac{e v_{\perp}}{m B^2} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{E}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{v_{\parallel} v_{\perp}^2}{4B^2} (3\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} - \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{v_{\parallel}^2 v_{\perp}}{B^2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) + \frac{v_{\perp}^3}{2B^3} (\mathbf{a} \cdot \nabla B) \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (122)$$

上に示した \mathbf{X} 、 θ に対する表式の右辺および μ に対する表式の最右辺において、 B 、 \mathbf{b} および \mathbf{R} の値は (\mathbf{x}, τ) において評価され、また \mathbf{a} と \mathbf{c} は $(\mathbf{x}, \tau, \theta)$ の関数と見なされる。

標準案内中心座標系 $(\mathbf{X}, U, \theta, \mu, \tau)$ では、式(120)の基本1-形式は次のように書ける。

$$\gamma = \varepsilon^{-1} \frac{e}{c} \mathbf{A}^*(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) \cdot d\mathbf{X} + \varepsilon \frac{m c}{e} \mu d\theta - \varepsilon^{-1} H(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) d\tau \quad (123)$$

ここで、運動方程式に影響しない dS の部分は落としてある。また、

$$\mathbf{A}^*(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) = \mathbf{A}(\mathbf{X}, \tau) + \varepsilon \frac{m c}{e} U \mathbf{b}(\mathbf{X}, \tau) - \varepsilon^2 \frac{m c^2}{e^2} \mu \mathbf{R}(\mathbf{X}, \tau) \quad (124)$$

とおいた。式(123)から、案内中心座標系 $(\mathbf{X}, U, \theta, \mu, \tau)$ における Lagrangian および Hamiltonian は、それぞれ、

$$\begin{aligned} L &\left(\mathbf{X}, U, \mu, \frac{d\mathbf{X}}{d\tau}, \frac{d\theta}{d\tau}, \varepsilon \tau \right) \\ &= \varepsilon^{-1} \frac{e}{c} \mathbf{A}^*(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) \cdot \frac{d\mathbf{X}}{d\tau} + \varepsilon \frac{m c}{e} \mu \frac{d\theta}{d\tau} - \varepsilon^{-1} H(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) \end{aligned} \quad (125)$$

$$\begin{aligned} H(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) &= \frac{1}{2} m U^2 + \mu B(\mathbf{X}, \tau) + e\Phi(\mathbf{X}, \tau) \\ &\quad + \varepsilon \frac{m c \mu U}{2e} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (126)$$

のように与えられる。式(10)および(123)を用いると、案内中心座標系 $\mathbf{Z} = (\mathbf{X}, U, \theta, \mu)$ に関する Lagrange テンソルの各成分 ω_{ij} が求められ、その中で0でないものは、

$$\begin{aligned} \omega_{X_{\alpha} X_{\beta}} &= \varepsilon^{-1} \frac{e}{c} \sum_{\gamma=1}^3 \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B_{\gamma}^* \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3) \\ \omega_{\mathbf{X}U} &= -\omega_{U\mathbf{X}} = -m \mathbf{b} \\ \omega_{\mathbf{X}\mu} &= -\omega_{\mu\mathbf{X}} = \varepsilon \frac{m c}{e} \mathbf{R} \\ \omega_{\theta\mu} &= -\omega_{\mu\theta} = -\varepsilon \frac{m c}{e} \end{aligned} \quad (127)$$

となる。行列 (ω_{ij}) の逆行列を求めることにより、Poisson 括弧の各成分 $J^{ij} = \{Z^i, Z^j\}$ は計算され、その中で0でないものは、

$$\{X_{\alpha}, X_{\beta}\} = -\varepsilon \frac{c}{e B_{\parallel}^*} \sum_{\gamma=1}^3 \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} b_{\gamma} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3)$$

$$\begin{aligned}
\{\mathbf{X}, U\} &= -\{U, \mathbf{X}\} = \frac{\mathbf{B}^*}{mB_{\parallel}^*} \\
\{\mathbf{X}, \Theta\} &= -\{\Theta, \mathbf{X}\} = \varepsilon \frac{c}{eB_{\parallel}^*} \mathbf{b} \times \mathbf{R} \\
\{U, \Theta\} &= -\{\Theta, U\} = -\frac{\mathbf{B}^* \cdot \mathbf{R}}{mB_{\parallel}^*} \\
\{\Theta, \mu\} &= -\{\mu, \Theta\} = \varepsilon^{-1} \frac{e}{mc}
\end{aligned} \quad (128)$$

となる。ここで、 \mathbf{B}^* および B_{\parallel}^* は、

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}^*(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) &= \nabla \times \mathbf{A}^*(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) \\
B_{\parallel}^*(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) &= \mathbf{B}^*(\mathbf{X}, U, \mu, \tau) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{X}, \tau)
\end{aligned} \quad (129)$$

によって定義される。上式において、勾配作用素 ∇ は案内中心の位置ベクトル \mathbf{X} に関する微分 $\nabla = \partial/\partial \mathbf{X}$ として定義されるものとする。また、式(23)と(127)を用いると、位相空間変数 (\mathbf{x}, \mathbf{v}) から $(\mathbf{X}, U, \Theta, \mu)$ への変数変換に伴う Jacobian は、

$$D = \det \left[\frac{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})}{\partial(\mathbf{X}, U, \Theta, \mu)} \right] = \frac{B_{\parallel}^*}{m} \quad (130)$$

で与えられ、これは式(24)に示した Liouville の定理を満たすことが保証されている。

式(20)および(123)より、案内中心座標変数の運動方程式は、

$$\frac{dZ^i}{dt} = \varepsilon \frac{dZ^i}{d\tau} = \{Z^i, H\} + \{Z^i, \mathbf{X}\} \cdot \frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}^*}{\partial \tau} \quad (131)$$

から導かれ、式(126)および(128)を用いると、各変数に対して

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathbf{X}}{dt} &= \frac{1}{B_{\parallel}^*} \left[U^* \mathbf{B}^* + \varepsilon c \mathbf{b} \times \left(\frac{\mu}{e} \nabla B - \mathbf{E}^* \right) \right] \\
\frac{dU}{dt} &= -\frac{\mathbf{B}^*}{mB_{\parallel}^*} \cdot (\mu \nabla B - e \mathbf{E}^*) \\
\frac{d\Theta}{dt} &= \varepsilon^{-1} \frac{eB}{mc} + \frac{U}{2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) + \mathbf{R} \cdot \frac{d\mathbf{X}}{dt} \\
\frac{d\mu}{dt} &= 0
\end{aligned} \quad (132)$$

のように表される。上式に現れる U^* や \mathbf{E}^* は、

$$\begin{aligned}
U^* &= U + \varepsilon \frac{c}{2e} \mu (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \\
\mathbf{E}^* &= -\nabla \Phi^* - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}^*}{\partial \tau} \\
\Phi^* &= \Phi + \varepsilon \frac{mc}{2e^2} \mu U (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b})
\end{aligned} \quad (133)$$

によって定義される。上式(132)-(133)では、摂動展開パラメーター ε が陽に現れているが、実際に数値計算等を行うときは、 $\varepsilon = 1$ 、 $\tau = t$ と置けばよい。案内中心運動方程式(132)の右辺はジャイロ位相 θ に依存せず、 μ は定数パラメーターとして取り扱うことができ、結局、Lie変換による基本1-形式の摂動展開を行うことにより、電磁場中の荷電

粒子の6次元位相空間変数 (\mathbf{x}, \mathbf{v}) に対する運動論的方程式系(84)は、磁気モーメント μ をもつ案内中心の4次元変数 (\mathbf{X}, U) に対する常微分方程式系に置き換えられた。

ところで、第2.8.4節において説明したように本講座で用いた標準案内中心変数では、式(114)-(116)が成り立つように定義されているが、他によく用いられる案内中心変数では、式(115)-(116)の代わりに、

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\tau}^{(1)} &= 0 \\
\Gamma_{\mathbf{x}}^{(2)} &= -\frac{m^2 c v_{\perp}^2}{2eB} \mathbf{W} \\
&\equiv -\frac{m^2 c v_{\perp}^2}{2eB} \left[\mathbf{R} + \frac{1}{2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \mathbf{b} \right]
\end{aligned} \quad (134)$$

を要請することにより定義される[式(114)に示した条件はそのまま変わらず用いられる]。これに伴い、粒子座標変数から案内中心変数への変換公式は、若干修正される。このようにして新たに構成された案内中心変数を用いると、基本1-形式[式(123)参照]や Lagrangian [式(125)参照]に

現れる \mathbf{A}^* は、式(124)において、 \mathbf{R} を $\mathbf{W} \equiv \mathbf{R} + \frac{1}{2} (\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b}) \mathbf{b}$

に置き換えることにより定義される。また、Hamiltonian は、式(126)において、 $\mathcal{O}(\varepsilon)$ の項 $(mc\mu U/2e)(\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b})$ を消去したものに置き換わる。その結果、式(127)-(128)に示した Lagrange テンソルおよび Poisson 括弧の成分の表式や運動方程式(132)においても、 \mathbf{R} は \mathbf{W} に置き換わり、式(132)や(133)において、Hamiltonian の $\mathcal{O}(\varepsilon)$ の項に由来し、 $d\Theta/dt$ 、 U^* や Φ^* の表式に現れる $(\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b})$ に比例する項は消え去る。

2.9 おわりに

本講座では、Hamilton 力学の基礎となる基本1-形式に対する Lie 変換摂動法の適用法について述べ、プラズマ物理における重要な応用例として、強磁場下での荷電粒子に対する案内中心方程式の導出過程を示した。この方法の便利な点の一つは、Hamilton 力学に従う系に対して摂動法を適用するにあたって、正準変数でないものを含む、より一般的な位相空間変数を用いることができることにある。Lie 変換を用いることにより、原理的に摂動展開の任意のオーダーまで、基本1-形式からジャイロ位相依存性を系統的に除去し、磁気モーメントを含む案内中心座標変数を正確に定義し、高精度の案内中心運動方程式を導くことが可能となった。あるオーダーで打ち切っても基本1-形式に基づくので、Hamilton 力学に従い、位相空間体積不変性 (Liouville の定理) 等の性質を維持し、また、磁気モーメントの保存の例のように、Noether の定理に基づき対称性から直ちに保存則を導くことができる。他の保存量の例として、背景電磁場が時間に陽に依存しない場合に Hamiltonian が表す荷電粒子の運動エネルギーと静電ポテンシャルエネルギーの和や、トカマクのような軸対称磁場配位における正準トロイダル角運動量が挙げられる。

トラス磁場に閉じ込められた高温プラズマの荷電粒子

がクーロン衝突散乱することにより引き起こされる新古典輸送[12]は、大きな平均自由行程をもつ粒子の案内中心軌道の幾何学的形状に強く影響され、新古典輸送の理論シミュレーション研究に案内中心の運動方程式は欠かせない。トーラス磁場における荷電粒子に対するBoozerの案内中心方程式[13]は、Hamilton正準方程式の形をとるものとして知られているが、トーラス磁場に対するBoozer磁気面座標[14]を用いて、本講座で扱ったLittlejohnの基本1-形式を書き換えることにより、容易に導くことができる[15]。

上述の案内中心方程式やまた新古典輸送理論では、電磁場が時間的にも空間的にもゆっくり変化するものと仮定してきた。しかし、プラズマの背景密度や温度の勾配等により駆動される微視的な不安定性が乱流状態を生み出し、新古典輸送よりも大きなプラズマ乱流輸送を引き起こす。このような微視的不安定性や乱流輸送を扱うのがジャイロ運動論である[11, 16, 17]。プラズマの微視的な乱流揺動を取り扱うため、Littlejohnの基本1-形式に微視的な揺動電磁場を加えたものを出発点とし、Lie変換摂動法を用いて、乱流揺動の存在する場合においても保存するような磁気モーメントを含む位相空間変数（案内中心変数と区別してジャイロ中心変数とよばれることがある）およびそれらに対する運動方程式が導かれている。近年、磁場閉じ込めプラズマ乱流輸送の研究のため、大規模なジャイロ運動論的シミュレーションが精力的に行われている[18-20]。

以上の例では、荷電粒子の運動を記述する基本1-形式あるいはLagrangianと運動方程式を扱ってきたが、荷電粒子の運動が生み出す電磁場に対する方程式も変分原理により導くため、粒子と電磁場の系全体を記述するLagrangianに基づくジャイロ運動論的な場の理論が構築され、それに基づいて、系全体のエネルギーや運動量の保存則あるいは輸送方程式の導出がなされている[21-23]。また、本講座で解説した微分幾何的な手法は、基本方程式やその保存則の導出のみならず、シンプレクティック数値積分法や変分積分法等の高度な数値計算手法の開発にも応用されている[24]。

最後に、本講座の執筆にあたって貴重な助言をいただいた鳥取大学の古川勝氏に深く感謝いたします。

参考文献

[1] H. Goldstein, *et al.*, *Classical Mechanics*, 3rd ed. (Addison-Wesley, San Francisco, 2002). (邦訳, H. ゴールドスタイン, C. プール, J. サーフコ著, 矢野忠・江沢康生・瀧崎員弘訳: 古典力学 (上・下) 原著第3版 (吉岡書店, 2006, 2009).)

[2] 松島与三: 多様体入門 (裳華房, 1965).

[3] 大森英樹: 力学的な微分幾何 (日本評論社, 1980).

[4] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer, New York, 1978). (邦訳, V.I.アーノルド著, 安藤韶一・蟹江幸博・丹羽敏雄訳: 古典力学の数学的方法, 岩波書店, 1980).

[5] R.G. Littlejohn, *J. Math. Phys.* **23**, 742 (1982).

[6] J.R. Cary and R.G. Littlejohn, *Ann. Phys.* **151**, 1 (1983).

[7] R.G. Littlejohn, *Phys. Fluids* **24**, 1730 (1981).

[8] R.G. Littlejohn, *J. Plasma Phys.* **29**, 111 (1983).

[9] R.G. Littlejohn, *Variational Principles of Guiding Center Motion*, Report PPG-611, Center for Plasma Physics and Fusion Engineering, Univ. of California, Los Angeles 1982.

[10] R.D. Hazeltine and J.D. Meiss, *Plasma Confinement* (Addison-Wesley, Redwood City, California, 1992), Chap.8.1.

[11] 洲鎌英雄, 渡邊智彦: 日本物理学会誌 **68**, 296 (2013).

[12] P. Helander and D.J. Sigmar, *Collisional Transport in Magnetized Plasmas* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).

[13] A.H. Boozer, *Phys. Fluids* **23**, 904 (1980).

[14] A.H. Boozer, *Phys. Fluids* **24**, 1999 (1981).

[15] R.G. Littlejohn, *Phys. Fluids* **28**, 2015 (1985).

[16] 洲鎌英雄: プラズマ・核融合学会誌 **79**, 107 (2003).

[17] A.J. Brizard and T.S. Hahm, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 421 (2007).

[18] 渡邊智彦, 洲鎌英雄: プラズマ・核融合学会誌 **81**, 534 (2005).

[19] Y. Idomura *et al.*, *Comptes Rendus Physique* **7**, 650 (2006).

[20] X. Garbet *et al.*, *Nucl. Fusion* **50**, 043002 (2010).

[21] H. Sugama, *Phys. Plasmas* **7**, 466 (2000).

[22] H. Sugama *et al.*, *Phys. Plasmas* **21**, 012515 (2014).

[23] J.A. Krommes, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **44**, 175 (2012).

[24] E. Hairer *et al.*, *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, 2nd ed. (Springer-Verlag, Berlin, 2006).

Appendix

2. A : 多様体上のベクトル場と微分形式

ここでは、多様体、ベクトル場、微分形式等、本講座で用いられる微分幾何学の道具立てに関する補足説明を行う。

空間 (より厳密には位相空間) M が n 次元の多様体とよばれる場合、 M に対して座標近傍系 $\{(U_\alpha, \phi_\alpha)\}_{\alpha \in A}$ が存在する。ここで、 $M = \cup_{\alpha \in A} U_\alpha$ であり、 M の各点 a は必ずある近傍 U_α に属する。 ϕ_α は、 U から \mathbb{R}^n のある開集合 $E_\alpha = \phi_\alpha(U_\alpha)$ の上への1対1の連続な写像であり、その逆写像 ϕ_α^{-1} も連続であるとする。 $\phi_\alpha(a) = (x_\alpha^1(a), \dots, x_\alpha^n(a))$ は、座標近傍 (U_α, ϕ_α) に関する点 $a \in U_\alpha$ の局所座標を表す。 $a \in U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$ のとき、 a の二通りの座標 $\phi_\alpha(a) = (x_\alpha^1(a), \dots, x_\alpha^n(a))$ と $\phi_\beta(a) = (x_\beta^1(a), \dots, x_\beta^n(a))$ の間には、

$$x_\beta^i(a) = f_{\beta\alpha}^i(x_\alpha^1(a), \dots, x_\alpha^n(a)) \quad (i = 1, \dots, n) \quad (A.1)$$

なる関係式がある。ただし、上式において、 $f_{\beta\alpha}^i (i = 1, \dots, n)$ は、 $u = (u^1, \dots, u^n) \in \phi_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta)$ の関数として、

$$\begin{aligned} f_{\beta\alpha}(u) &= (f_{\beta\alpha}^1(u^1, \dots, u^n), \dots, f_{\beta\alpha}^n(u^1, \dots, u^n)) \\ &= \phi_\beta \circ \phi_\alpha^{-1}(u) \end{aligned} \quad (A.2)$$

により定義される。ここで、記号 \circ は写像の合成を意味する。 $f_{\beta\alpha}$ の逆写像は、 $f_{\alpha\beta} = (f_{\beta\alpha})^{-1} = \phi_\alpha \circ \phi_\beta^{-1} = (f_{\alpha\beta}^1, \dots, f_{\alpha\beta}^n)$ により表される。 M が可微分多様体であるとは、局所座標系 $\phi_\alpha = (x_\alpha^1, \dots, x_\alpha^n)$ と $\phi_\beta = (x_\beta^1, \dots, x_\beta^n)$ の間の変換を表す関数 $f_{\beta\alpha}^i$ および $f_{\alpha\beta}^i (i = 1, \dots, n)$ が微分可能な関数であることを

意味する。

多様体 M 上で定義される実数値関数 (スカラー場ともよばれる) f を考えよう。多様体 M 上の点 $a \in U_\alpha$ における関数 f の値は, $u = (u^1, \dots, u^n) \in \phi_\alpha(U_\alpha)$ の関数 $F_\alpha(u) = f \circ \phi_\alpha^{-1}(u) = F_\alpha(u^1, \dots, u^n)$ を使えば, 局所座標系 $\phi_\alpha = (x_\alpha^1, \dots, x_\alpha^n)$ に関して,

$$f(a) = F_\alpha(\phi_\alpha(a)) = F_\alpha(x_\alpha^1(a), \dots, x_\alpha^n(a)) \quad (\text{A.3})$$

のように表現される。 $a \in U_\beta$ のときも同様に局所座標系 $\phi_\beta = (x_\beta^1, \dots, x_\beta^n)$ に関する $f(a)$ の表現が, $\phi_\beta(U_\beta)$ 上の関数 $F_\beta = f \circ \phi_\beta^{-1}$ を使うことにより得られる。 $a \in U_\alpha \cap U_\beta (\neq \emptyset)$ の場合, 2つの局所座標系 $\phi_\alpha = (x_\alpha^1, \dots, x_\alpha^n)$ と $\phi_\beta = (x_\beta^1, \dots, x_\beta^n)$ に関して $f(a)$ を表現する関数 F_α と F_β は, 前述の $f_{\beta\alpha} = \phi_\beta \circ \phi_\alpha^{-1}$ を用いることによって, $F_\alpha = F_\beta \circ f_{\beta\alpha}$ 即ち

$$F_\alpha(u^1, \dots, u^n) = F_\beta(f_{\beta\alpha}^1(u^1, \dots, u^n), \dots, f_{\beta\alpha}^n(u^1, \dots, u^n)) \quad (\text{A.4})$$

のように関係づけられる。座標変換を表す関数 $f_{\beta\alpha}$ および $f_{\alpha\beta} = f_{\beta\alpha}^{-1}$ が可微分であることから, スカラー場 f の局所座標系 $\phi_\alpha = (x_\alpha^i)_{i=1, \dots, n}$ に関する表現 F_α が可微分であることと, $\phi_\beta = (x_\beta^i)_{i=1, \dots, n}$ に関する表現 F_β が可微分であることが同値であることが, 式(A.4)からわかる。したがって, スカラー場 f が可微分であるとは, 局所座標系に関して f を表現する関数 F_α が可微分であることと定義することが, 局所座標系の選び方によらずにできる。

多様体 M 上のベクトル場 X は, 局所座標系 $x = (x^i)_{i=1, \dots, n}$ を用いると,

$$X = \sum_{i=1}^n \xi^i \frac{\partial}{\partial x^i} \quad (\text{A.5})$$

のように, M 上の実数値関数 f に対する微分作用素として解釈される。 M 上の点 a におけるベクトル場 X による f の微分の値は,

$$X_a f = \sum_{i=1}^n \xi^i(a) \frac{\partial f}{\partial x^i}(a) \quad (\text{A.6})$$

のように表される。

点 a における微分作用 X_a は, 点 a における M の接ベクトルとよばれ, X_a がなす n 次元ベクトル空間 $T_a(M) = \left\{ \sum_{i=1}^n v^i (\partial/\partial x^i)_a \mid (v^i)_{i=1, \dots, n} \in \mathbb{R}^n \right\}$ は, 点 a における M の接ベクトル空間とよばれる。また, n 次元の多様体 M の各点の接ベクトル空間の合併 $T(M) = \cup_{a \in M} T_a(M)$ は, 接バンドルとよばれ, 局所座標系 $(x^i, v^i)_{i=1, \dots, n}$ を持つ $2n$ 次元の多様体となる。

式(A.5)からわかるように, 局所座標系 $x = (x^i)_{i=1, \dots, n}$ に関するベクトル場 X の成分 ξ^i は, 以下のように X を微分作用素として x^i に作用させたものである。

$$\xi^i = X x^i \quad (\text{A.7})$$

別の局所座標系 $\bar{x} = (\bar{x}^i)_{i=1, \dots, n}$ に関するベクトル場 X の成分 $\bar{\xi}^i$ は, X を微分作用素として \bar{x}^i に作用させることによ

り得られ, 式(A.5)と(A.7)よりわかるように, 2つの局所座標系 \bar{x} と x に関する X のそれぞれの成分は,

$$\bar{\xi}^i = \sum_{j=1}^n \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^j} \xi^j \quad (\text{A.8})$$

によって関係づけられる。ベクトル場 X によるスカラー場 f と g の積の微分に対して, Leibniz の規則とよばれる次の関係式が成り立つ。

$$X(fg) = Xf \cdot g + f \cdot Xg \quad (\text{A.9})$$

多様体 M 上のスカラー場 f の微分 df は, 次式で表されるように, ベクトル場 X に対してスカラー場 $df(X)$ を対応させるものとして定義される。

$$df(X) = Xf = \sum_{i=1}^n \xi^i \frac{\partial f}{\partial x^i} \quad (\text{A.10})$$

ベクトル場 X に対して Lie 微分 L_X という作用素が定められる。ベクトル場 Y の Lie 微分 $L_X Y$ はベクトル場であり, 以下のように $X = \sum_i \xi^i \partial/\partial x^i$ と $Y = \sum_i \eta^i \partial/\partial x^i$ の交換子積 $[X, Y]$ (Lie 括弧積ともよばれる) として定義される。

$$\begin{aligned} L_X Y &= [X, Y] = XY - YX \\ &= \sum_{ij} \left(\xi^i \frac{\partial \eta^j}{\partial x^i} - \eta^j \frac{\partial \xi^i}{\partial x^i} \right) \frac{\partial}{\partial x^j} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

交換子積は, 以下に示されるように, 線形性, 反対称性, Jacobi の恒等式を満足する。

$$\begin{aligned} [\lambda X + \mu Y, Z] &= \lambda[X, Z] + \mu[Y, Z] \\ [X, Y] &= -[Y, X] \\ [X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

上式において, λ, μ は実数定数である。

多様体 M から多様体 M' への写像 φ を考えよう。写像 φ の微分 (differential) あるいは push forward とよばれる φ_* は, 以下に示す定義に従い, M 上のベクトル場 X に多様体 M' 上のベクトル場 $\varphi_* X$ を対応させるものである。

$$(\varphi_* X)_{\varphi(a)} f = ((\varphi_*) X_a) f = X_a (\varphi^* f) = X_a (f \circ \varphi) \quad (\text{A.13})$$

上式(A.13)は, M 上の点 a の接ベクトル X_a に M' 上の点 $\varphi(a)$ の接ベクトル $(\varphi_* X)_{\varphi(a)} = (\varphi_*) X_a$ を対応させる規則を表す。上式において, 写像 φ による M 上の実数値関数 f の引き戻し (pull back) は,

$$\varphi^* f = f \circ \varphi \quad (\text{A.14})$$

のように f と φ の合成関数 $[(f \circ \varphi)(a) = f(\varphi(a))]$ として定義される。また, 次式のように, push forward と交換子積の順序を入れ換えることができることが示される。

$$\varphi_* [X, Y] = [\varphi_* X, \varphi_* Y] \quad (\text{A.15})$$

$(x^i)_{i=1, \dots, n}$ を n 次元多様体 M 上の点 a の近傍における局所座標系, $(y^i)_{i=1, \dots, m}$ を m 次元多様体 M' 上の点 $\varphi(a)$ の近傍における局所座標系としよう。すると, M' 上の点 $\varphi(a)$ における接ベクトル $(\varphi_* X)_{\varphi(a)}$ の局所座標系

$(y^i)_{i=1,\dots,m}$ に関する各成分 $(\varphi_*X)_{\varphi(a)}y^i$ と、 M 上の点 a における接ベクトル X_a の局所座標系 $(x^i)_{i=1,\dots,n}$ に関する各成分 $X_a x^i = \xi^i(a)$ は、

$$(\varphi_*X)_{\varphi(a)}y^i = X_a(\varphi^*y^i) = X_a(\varphi^i) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial \varphi^i}{\partial x^j}(a) \xi^j(a) \quad (\text{A.16})$$

で表されるように、 $(\partial \varphi^i / \partial x^j)(a)$ を (i, j) 成分とする $m \times n$ 行列によって関係づけられる。ただし、ここで、 $\varphi^*y^i = y^i \circ \varphi = \varphi^i$ とおいた。

さて、 φ_ε を、多様体 M からそれ自身への写像であり、微小パラメータ ε に依存し、

$$\varphi_{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} = \varphi_{\varepsilon_1} \circ \varphi_{\varepsilon_2} \quad (\text{A.17})$$

を満足するものとしよう。さらに多様体 M 上の任意の点 a に対して $\varphi_0(a) = a$ であり、 ε に関する微分方程式

$$\begin{aligned} \frac{dx^i(\varphi_\varepsilon(a))}{d\varepsilon} &= X_{\varphi_\varepsilon(a)}x^i \\ &= \xi^i(x^1(\varphi_\varepsilon(a)), \dots, x^n(\varphi_\varepsilon(a))) \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

が成り立つものとする。上式(A.18)は、 $\varphi_\varepsilon(a)$ がベクトル場 $X = \sum_i \xi^i \partial / \partial x^i$ の積分曲線を与えることを意味する。このようにして定義される φ_ε を

$$\varphi_\varepsilon = \text{Exp}(\varepsilon X) \quad (\text{A.19})$$

のように表記しよう。この $\varphi_\varepsilon = \text{Exp}(\varepsilon X)$ が本講座で Lie 変換とよばれるものであり、参考文献[6]における Lie 変換の定義に対応するものである。ただし、他の文献では、ベクトル場 X が Hamilton ベクトル場[式(41)参照]のときに、 $\varphi_\varepsilon = \text{Exp}(\varepsilon X)$ を Lie 変換とよぶことが多いことを断っておこう。また、文献[2]等では、 $\text{Exp}(tX)$ の表記は $-\infty < t < \infty$ で定義された 1 パラメータ変換群を表すためのものであり、上述の微小パラメータ ε に対して定義された Lie 変換 φ_ε は 1 パラメータ局所群とよばれるものに対応することを注意しておこう。

k 次微分形式 (k -形式あるいは k 次交代共変テンソル場) とよばれるものは、多様体上の k 個のベクトル場 (X_1, \dots, X_k) にスカラー場 $\omega(X_1, \dots, X_k)$ を対応させる写像 ω で、以下のような線形性、

$$\begin{aligned} \omega(X_1, \dots, fX_i + gY_i, \dots, X_k) \\ = f\omega(X_1, \dots, X_i, \dots, X_k) + g\omega(X_1, \dots, Y_i, \dots, X_k) \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$(f, g: \text{スカラー場})$

をもち、

$$\omega(X_{\sigma(1)}, \dots, X_{\sigma(k)}) = \text{sgn}(\sigma) \omega(X_1, \dots, X_k) \quad (\text{A.21})$$

を満足するものである。ここで、 σ は k 個の整数 $(1, \dots, k)$ の置換であり、 $\text{sgn}(\sigma)$ は σ の符号 [σ が偶 (奇) 置換のとき、 $\text{sgn}(\sigma) = 1(-1)$] を表す。 k -形式 ω と l -形式 ϕ の外積 $\omega \wedge \phi$ は、 $(k+l)$ -形式であり、

$$\begin{aligned} (\omega \wedge \phi)(X_1, \dots, X_{k+l}) \\ = \frac{1}{k!l!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{k+l}} \text{sgn}(\sigma) \omega(X_{\sigma(1)}, \dots, X_{\sigma(k)}) \\ \times \phi(X_{\sigma(k+1)}, \dots, X_{\sigma(k+l)}) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

により定義される。ここで、 \mathfrak{S}_{k+l} は、 $(k+l)$ 個の整数 $(1, \dots, k+l)$ の置換全体のなす群を表す。この定義に従うと、外積の順序の入れ換えに対して、

$$\omega \wedge \phi = (-1)^{kl} \phi \wedge \omega \quad (\text{A.23})$$

が成り立つ。局所座標系 $(x^i)_{i=1,\dots,n}$ に関して k -形式 ω は、

$$\begin{aligned} \omega &= \sum_{i_1 < \dots < i_k} \omega_{i_1 \dots i_k} dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_k} \\ &= \frac{1}{k!} \sum_{i_1, \dots, i_k} \omega_{i_1 \dots i_k} dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_k} \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

のように表現される。ここで、局所座標系 $(x^i)_{i=1,\dots,n}$ に関する k -形式 ω の各成分は、

$$\omega_{i_1 \dots i_k} = \omega \left(\frac{\partial}{\partial x^{i_1}}, \dots, \frac{\partial}{\partial x^{i_k}} \right) \quad (\text{A.25})$$

により与えられ、 $(1, \dots, k)$ の置換 σ に対して、

$$\omega_{i_{\sigma(1)} \dots i_{\sigma(k)}} = \text{sgn}(\sigma) \omega_{i_1 \dots i_k} \quad (\text{A.26})$$

が成り立つ。局所座標系を $(x^i)_{i=1,\dots,n}$ から $(\bar{x}^i)_{i=1,\dots,n}$ に移すと、 ω の成分は、

$$\begin{aligned} \omega \left(\frac{\partial}{\partial \bar{x}^{i_1}}, \dots, \frac{\partial}{\partial \bar{x}^{i_k}} \right) \\ = \sum_{j_1, \dots, j_k} \frac{\partial x^{j_1}}{\partial \bar{x}^{i_1}} \dots \frac{\partial x^{j_k}}{\partial \bar{x}^{i_k}} \omega \left(\frac{\partial}{\partial x^{j_1}}, \dots, \frac{\partial}{\partial x^{j_k}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

のように変換される。また、ベクトル場 X と k -形式 ω の内部積 $i(X)\omega$ は $(k-1)$ -形式であり、

$$(i(X)\omega)(X_1, \dots, X_{k-1}) = \omega(X, X_1, \dots, X_{k-1}) \quad (\text{A.28})$$

により定義される。

1-形式 $\theta = \sum_i \theta_i dx^i$ は、ベクトル場 $X = \sum_i X^i \partial / \partial x^i$ に対して、スカラー場 $\theta(X) = \sum_i \theta_i X^i$ を対応させる。式(A.10)で定義されたスカラー場 f の微分は、 $df = \sum_i (df / dx^i) dx^i$ のように表される1-形式の一つである。多様体 M 上の各点 a における $\theta(X)$ の値は、 $\theta_a(X_a) = \sum_i \theta_i(a) X^i(a)$ と表され、接ベクトル $X_a = \sum X^i(a) (\partial / \partial x^i)_a$ と余接ベクトル $\theta_a = \sum \theta_i(a) (dx^i)_a$ の内積と見なされる。接ベクトルが反変ベクトルともよばれるのに対して、余接ベクトルは共変ベクトルともよばれる。 n 次元多様体 M 上の点 a における接ベクトル空間 $T_a(M)$ の双対空間である余接ベクトル空間は、 $T_a^*(M) = \{ \sum_{i=1}^n p_i (dx^i)_a \mid (p_i)_{i=1,\dots,n} \in \mathbb{R}^n \}$ で表され、 M の各点の余接ベクトル空間の合併 $T^*(M) = \cup_{a \in M} T_a^*(M)$ は、余接バンドルとよばれ、局所座標系 $(x^i, p_i)_{i=1,\dots,n}$ をもつ $2n$ 次元の多様体となる。

ベクトル場 X の定める Lie 微分 L_X は、微分形式にも作用

する。0次の微分形式、即ち、スカラー場 f の Lie 微分 $L_X f$ は、

$$L_X f = Xf \quad (\text{A.29})$$

であり、ベクトル場 X に沿ったスカラー場 f の微分に過ぎない。一般の k -形式 ω の Lie 微分 $L_X \omega$ は、

$$\begin{aligned} & (L_X \omega)(X_1, \dots, X_k) \\ &= X(\omega(X_1, \dots, X_k)) - \sum_{j=1}^k \omega(X_1, \dots, [X, X_j], \dots, X_k) \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

によって定義される。

外微分演算子 d とは、 k -形式 ω に $(k+1)$ -形式 $d\omega$ を対応させるものであり、 $(k+1)$ -形式 $d\omega$ は、

$$\begin{aligned} & (d\omega)(X_1, \dots, X_{k+1}) \\ &= \sum_{i=1}^{k+1} (-1)^{i+1} X_i (\omega(X_1, \dots, \hat{X}_i, \dots, X_{k+1})) \\ & \quad + \sum_{i < j} (-1)^{i+j} \omega([X_i, X_j], X_1, \dots, \hat{X}_i, \dots, \hat{X}_j, \dots, X_{k+1}) \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

によって定義される。上式の右辺において、 $\hat{\cdot}$ の記号は、 \cdot が変数の中から取り除かれていることを表す。例えば、 $(X_1, \dots, \hat{X}_i, \dots, X_{k+1})$ は、 $(X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_{k+1})$ を意味する。式 (A.24) で表された k -形式 ω の外微分 $d\omega$ は、

$$\begin{aligned} d\omega &= \sum_{i_1 < \dots < i_k} d\omega_{i_1 \dots i_k} \wedge dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_k} \\ &= \frac{1}{(k+1)!} \sum_{i_1, \dots, i_{k+1}} \left(\sum_{j=1}^{k+1} (-1)^{j+1} \frac{\partial \omega_{i_1 \dots i_{j-1} i_{j+1} \dots i_{k+1}}}{\partial x^{i_j}} \right) dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_{k+1}} \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

のように表すことができる。外微分のさらに外微分をとると 0 になる。

$$d^2 = 0 \quad (\text{A.33})$$

多様体 M から多様体 M' への写像 φ による M' 上の k -形式 ω の引き戻し (pull back) $\varphi^* \omega$ とは、 M 上の k -形式であり、

$$\begin{aligned} & (\varphi^* \omega)_a ((X_1)_a, \dots, (X_k)_a) \\ &= \omega_{\varphi(a)} ((\varphi_* X_1)_{\varphi(a)}, \dots, (\varphi_* X_k)_{\varphi(a)}) \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

により定義される。局所座標系 $(x^i)_{i=1, \dots, n}$ に関して、式 (A.24) のように表された k -形式 ω に対して、pull back $\varphi^* \omega$ は、

$$\varphi^* \omega = \sum_{i_1 < \dots < i_k} \varphi^* \omega_{i_1 \dots i_k} d\varphi^* x^{i_1} \wedge \dots \wedge d\varphi^* x^{i_k} \quad (\text{A.35})$$

のように書ける。pull back と外微分の演算の順序は、次式のように入れ換えることができる。

$$\varphi^* d\omega = d\varphi^* \omega \quad (\text{A.36})$$

以上で定義されたベクトル場や微分形式に関する演算の間に成り立つ諸公式を以下に記しておく。

$$\begin{aligned} L_{[X, Y]} &= L_X L_Y - L_Y L_X, \\ i([X, Y]) &= L_X i(Y) - i(Y) L_X, \\ L_X &= di(X) + i(X)d, \\ dL_X &= L_X d, \\ L_X(\omega \wedge \phi) &= (L_X \omega) \wedge \phi + \omega \wedge (L_X \phi), \\ i(X)(\omega \wedge \phi) &= (i(X)\omega) \wedge \phi + (-1)^k \omega \wedge (i(X)\phi), \\ d(\omega \wedge \phi) &= (d\omega) \wedge \phi + (-1)^k \omega \wedge (d\phi) \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

上式において、 X と Y はベクトル場、 ω と ϕ は微分形式であり、 k は微分形式 ω の次数を表す。

2.B: ジャイロゲージ変換

第2.8.2節において、時刻 τ 、空間点 \mathbf{x} ごとに正規直交基底ベクトルの組 $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{b})$ を設けたが、この中で、 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ の取り方には任意性があり、これは、ジャイロ位相 θ を測るときの基準となる方向の取り方 (これをジャイロゲージとよぶ) に任意性があることを意味している [7-9]。例えば、以下の式に示すように、 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ の代わりに、新たに $\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2$ として、角度 ψ だけ方向をずらしたものを採用すれば、新たに定義されるジャイロ位相 θ' も角度 ψ だけずれる。

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_1 &= \cos \psi \mathbf{e}_1 + \sin \psi \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}'_2 &= -\sin \psi \mathbf{e}_1 + \cos \psi \mathbf{e}_2 \\ \theta' &= \theta + \psi \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

さて、 (\mathbf{x}, τ) に依存するベクトル $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ を用いて、次のようなベクトル \mathbf{R} とスカラー σ を定義しよう。

$$\mathbf{R} = \nabla \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2, \quad \sigma = \frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \tau} \cdot \mathbf{e}_1 \quad (\text{B.2})$$

式 (B.1) に示されたジャイロゲージ変換に伴い、上記のベクトル \mathbf{R} とスカラー σ は、ジャイロ位相角のシフト ψ を用いて、

$$\begin{aligned} \mathbf{R}' &= \nabla \mathbf{e}'_1 \cdot \mathbf{e}'_2 = \mathbf{R} + \nabla \psi \\ \sigma' &= \frac{\partial \mathbf{e}'_2}{\partial \tau} \cdot \mathbf{e}'_1 = \sigma - \frac{\partial \psi}{\partial \tau} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

のように変換される。上式で与えられた \mathbf{R} と σ のジャイロゲージ変換は、それぞれ、電磁場に対するベクトルポテンシャルと静電ポテンシャルのゲージ変換と同じ形をしていることがわかる。

次に、 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ を座標系とする 7次元空間におけるベクトル場 G を、以下のように、座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ に関して表現してみよう。

$$G = \mathbf{G}^{\mathbf{x}} \cdot \nabla + G^{v_{\parallel}} \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} + G^{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + G^{v_{\perp}} \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} + G^{\tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \quad (\text{B.4})$$

式 (B.1) に示したジャイロゲージ変換により、座標変数の中でジャイロ位相のみ変えた新しい座標系 $(\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta', v_{\perp}, \tau)$ に関するベクトル場 G の各成分を考えると、ジャイロ位相に関する成分だけが旧座標系に関する成分から、

$$G^{\theta'} = G^{\theta} + \mathbf{G}^x \cdot \nabla \psi + G^{\tau} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} \quad (\text{B.5})$$

のように変化する。ここで、

$$G^{\theta} = (G^{\theta})_0 + \mathbf{R} \cdot \mathbf{G}^x - \sigma G^{\tau} \quad (\text{B.6})$$

とおくと、式(B.3)と(B.5)より、ジャイロゲージ変換により G^{θ} が変化するの、上式(B.6)の右辺の \mathbf{R} と σ の部分のみであり、 $(G^{\theta})_0$ はジャイロゲージ不変な項であることがわかる。

こんどは、7次元空間上の1-形式 γ を座標系 $z = (\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta, v_{\perp}, \tau)$ に関して表現してみよう。

$$\gamma = \gamma_x \cdot d\mathbf{x} + \gamma_{v_{\parallel}} dv_{\parallel} + \gamma_{\theta} d\theta + \gamma_{v_{\perp}} dv_{\perp} + \gamma_{\tau} d\tau \quad (\text{B.7})$$

式(B.1)のジャイロゲージ変換を行った座標系

$(\mathbf{x}, v_{\parallel}, \theta', v_{\perp}, \tau)$ に関する1-形式 γ の各成分を考えると、 \mathbf{x} と τ に関する成分のみが変化し、

$$\begin{aligned} \gamma'_x &= \gamma_x - \gamma_{\theta} \nabla \psi, \\ \gamma'_{\tau} &= \gamma_{\tau} - \gamma_{\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \gamma_x &= (\gamma_x)_0 - \gamma_{\theta} \mathbf{R}, \\ \gamma_{\tau} &= (\gamma_{\tau})_0 + \gamma_{\theta} \sigma \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

とおくと、式(B.3)と(B.8)から、ジャイロゲージ変換により γ_x , γ_{τ} の変化する部分は、上式(B.9)の右辺の \mathbf{R} と σ の部分のみであり、 $(\gamma_x)_0$, $(\gamma_{\tau})_0$ はジャイロゲージ不変な項であることがわかる。



すがま ひで お
洲 鎌 英 雄

自然科学研究機構核融合科学研究所ヘリカル研究部核融合理論シミュレーション研究系 教授。専門は、磁場閉じ込め核融合プラズマの物理。特に、ジャイロ運動論に基づくプラズマの微視的不安定性、新古典・乱流輸送の理論研究を行っている。休日、家族で中央高速をドライブし、温泉に行くのが楽しみである。



3. 離散シンプレクティック積分法の理論

3. Discrete Symplectic Integrators

徳田 伸二

TOKUDA Shinji

高度情報科学技術研究機構

(原稿受付：2014年8月11日)

位相空間における離散変分原理により運動を離散的に決定する方法を解説する。位相空間における作用積分を厳密に停留にする連続的な経路—それはもちろん Hamilton の運動方程式を満たす—に対する作用積分は経路の端点だけの関数であり、その関数（生成関数と呼ばれる）は、端点間の関係を離散的な初期値問題の解として与える離散 Hamiltonian の役割を果たす。そして、離散 Hamiltonian から生成される離散経路は、連続的な経路の、対応する時刻における値に一致する（すなわち標本点となる）。それゆえ、Galerkin 法により作用積分を近似的に停留にすれば、それから作られる離散 Hamiltonian は厳密な離散経路を近似する運動を与える。さらに、このようにして作られる積分スキームはシンプレクティックである。離散変分原理と Galerkin 法は変分法的な積分スキームを作る系統的な方法となる。その一例として Symplectic Partitioned Runge-Kutta (SPRK) 法とその簡単な応用例を示す。

Keywords:

discrete Hamilton dynamics, Galerkin approximation, symplectic integrator, symplectic partitioned Runge-Kutta method

3.1 序論

古典力学のコースを一通り学んだ学生にとって古典力学の問題を解くレシピとは、Hamiltonian $H(q, p)$ の関数形を求めて、Hamilton の運動方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (1)$$

を立て、MATLAB（これは有料）あるいはOCTAVE（これは無料）に式を放り込んで数値解を得ることであるかもしれない。それ以上のことは、数学好きのための学術的な話か、量子力学を学ぶ際に Hamiltonian $H(q, p)$ が出てきても驚かないための「準備」でしかすぎない。しかしながら、このレシピでは「良い」解答を得るのは難しいと、少なくとも現代（21世紀のこと）ではみなされているようである。

運動方程式(1)は位相空間 (q, p) における変分原理から導かれる。運動方程式は位相空間において連続的な流れを生成し、その流れは位相空間の体積を保存するシンプレクティック変換になっている[1, 2]。運動方程式を考えもなしに離散化すると、生成される近似的な変換はシンプレクティックではなくなるので、少なくとも軌道の長時間追跡はできないというのが常識になっている。そして、もとの微分方程式のもつ幾何学的な構造を保存する数値計算法という宏大な分野が形成されつつある[3]。

本章では、運動方程式(1)の離散化という道筋ではなく、変分問題における作用積分そのものを数値的に停留にする

ことによって運動を決定する方法（離散変分原理）について解説する。変分原理には配位空間における変分原理（Lagrange 形式）と位相空間における変分原理（Hamilton 形式）とがあり、両者について離散変分原理が研究されている[4]。プラズマ物理学および核融合での重要なテーマである荷電粒子の案内中心軌道解析では Hamilton 形式が本質的であるので、本稿の議論も位相空間における変分問題に限定する。特に、文献[5]で取り上げられている変分原理は応用範囲が広いと思われるので、これを中心に解説する。

Hamilton の運動方程式(1)は、 (q_0, p_0) から (q_T, p_T) までの経路 $(q(t), p(t))$ が作用積分を停留にする条件から導かれる。一方、離散 Hamilton 力学では、停留にされた、有限時間にわたる作用積分 \mathcal{A} に着目する。この積分は、途中の経路に依存せず、端点 q_0, p_T だけの関数であり ($\mathcal{A} = \mathcal{A}(q_0, p_T)$)、他方の端点 q_T, p_0 は \mathcal{A} の偏微分係数で与えられる。それゆえ、作用積分を近似的に停留にする経路を Galerkin 法に従って作れば、それは厳密な経路に対する離散的な近似解を与える。この方法の特徴は、生成される離散的な流れがシンプレクティックであることである。この離散 Hamilton 力学のエッセンスを第2節で述べる。第3節で作用積分を離散的に停留にする Galerkin 時間積分法を議論する。経路を表現する基底関数をうまく選ぶことによって得られる Symplectic Partitioned Runge-Kutta (SPRK) 法を第4節で述べ、その簡単なバージョンである

Störmer-Verlet 法を調和振動子に適用した例を第 5 節に示す. 第 6 節でまとめと議論を行う. 解説にあたっては, 文献[1]で述べられている解析力学の知識だけを前提とし, できる限り平易に (つまり多様体とか微分形式の道具を使わずに) 述べることを心掛けた. ただ, シンプレクティック条件の証明には文献[2]で展開されている外微分法を用いた.

3.2 離散 Hamilton 力学

位相空間 (q, p) における作用積分

$$\mathcal{A}[q(\cdot), p(\cdot)] = q_T p_T - \int_0^T \left[p(t) \frac{dq}{dt} - H(q(t), p(t)) \right] dt \quad (2)$$

について, 経路を $q(t), p(t)$ から $q(t) + \delta q(t), p(t) + \delta p(t)$ に変化させたときの \mathcal{A} の変化は

$$\delta \mathcal{A} = q_T \delta p_T + p_0 \delta q_0 - \int_0^T \left[\left(\frac{dq}{dt} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p - \left(\frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q \right] dt \quad (3)$$

である. この表式から 2 つの定理を得る.

定理 1 作用積分 \mathcal{A} を停留にする経路 $q(t), p(t)$ は Hamilton の運動方程式(1)の解として与えられる. このとき, 境界条件

$$\delta q_0 = 0, \quad \delta p_T = 0 \quad (4)$$

を課すものとする.

また, 上式は次の解釈を許す.

定理 2 端点 q_0, p_T が固定された経路 $q(t), p(t)$ が作用積分(2)を停留にする場合, \mathcal{A} は q_0, p_T だけの関数であり (時間 T はパラメータである)

$$\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial q_0}(q_0, p_T) = p_0, \quad \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p_T}(q_0, p_T) = q_T \quad (5)$$

が成立する. したがって極値になっている作用積分 $\mathcal{A}(q_0, p_T; T)$ を用いて初期値問題を解くことができる. この関数 $\mathcal{A}(q_0, p_T; T)$ を Type II の **generating function** (生成関数あるいは母関数)とよぶ[5].

例 1

調和振動子 $H(q, p) = (q^2 + p^2)/2$ の場合, Hamilton の運動方程式(1)の解は

$$q(t) = a \sin(t + \alpha), \quad p(t) = a \cos(t + \alpha)$$

であり, 振幅 a および初期位相 α は定数である. これらを (2)式に使うと

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2} q_T p_T + \frac{1}{2} q_0 p_0 \quad (6)$$

を得る. \mathcal{A} を q_0 と p_T の関数として表したいので

$$p_0 = \frac{\sin T}{\cos T} q_0 + \frac{1}{\cos T} p_T \quad (7)$$

$$q_T = \frac{1}{\cos T} q_0 + \frac{\sin T}{\cos T} p_T \quad (8)$$

を(6)式に代入して

$$\mathcal{A}(q_0, p_T; T) = \frac{1}{2} \frac{\sin T}{\cos T} (q_0)^2 + \frac{1}{\cos T} q_0 p_T + \frac{1}{2} \frac{\sin T}{\cos T} (p_T)^2 \quad (9)$$

を得る. そして

$$p_0 = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial q_0} = \frac{\sin T}{\cos T} q_0 + \frac{1}{\cos T} p_T$$

および

$$q_T = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p_T} = \frac{1}{\cos T} q_0 + \frac{\sin T}{\cos T} p_T$$

より(7, 8)式を確認する.

位相空間において離散的な経路からなる集合 (経路の空間) を次のように作る¹.

時間間隔 $[0, T]$ を有限個の時刻

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$$

で分割し, 各時刻 t_k における経路の値を $q(t_k) = q_k, p(t_k) = p_k$ とする. そして, 時間間隔 $[t_k, t_{k+1}]$ における経路は q_k と q_{k+1} (および, p_k と p_{k+1}) を区分的に滑らかな (すなわち, t について連続的に微分可能な) 曲線で結ばれたものであるとする. 位相空間内の 2 点 (q_k, p_k) と (q_{k+1}, p_{k+1}) を結ぶ滑らかな曲線は任意であり得るが, その曲線のうち, q_k と p_{k+1} が固定された時, 時間 $[t_k, t_{k+1}]$ にわたる作用積分(2)を停留にする曲線を選ぶものとし, 極値である作用積分

$$H_d^+(q_k, p_{k+1}) = \text{ext} \left\{ p_{k+1} q_{k+1} - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left[p \frac{dq}{dt} - H(q, p) \right] dt \right\} \quad (10)$$

を **離散 Hamiltonian** と呼ぶことにする (極値であることが記号 ext で表されている). したがって, $H_d^+(q_k, p_{k+1})$ はそれが厳密 (exact) に計算されているとして²—Type II の生成関数であるので

$$p_k = \frac{\partial H_d^+}{\partial q_k}(q_k, p_{k+1}) \equiv \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1}), \quad (11)$$

1 経路の離散化と積分については文献[7]が参考になる
2 もちろん, この計算方法が次のテーマになる.

$$q_{k+1} = \frac{\partial H_d^+}{\partial p_{k+1}}(q_k, p_{k+1}) \equiv \mathcal{D}_2 H_d^+(q_k, p_{k+1}) \quad (12)$$

が成立する。つぎに、作用積分(2)

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[q(\cdot), p(\cdot)] &= p_N q_N \\ &\quad - \sum_{k=0}^{N-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left[p \frac{dq}{dt} - H(q(t), p(t)) \right] dt \quad (13) \end{aligned}$$

を

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_d(\{(q_k, p_k)\}_{k=1}^N) &= p_N q_N \\ &\quad - \sum_{k=0}^{N-1} [p_{k+1} q_{k+1} - H_d^+(q_k, p_{k+1})] \quad (14) \end{aligned}$$

に置き換える。この結果、 \mathcal{A}_d は $\{(q_k, p_k)\}_{k=1}^N$ を引数とする関数となる。その引数を変化させたときの \mathcal{A}_d の変化は

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}_d &= \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \delta q_0 + \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \delta p_N \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N-1} (q_k - \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{k-1}, p_k)) \delta p_k \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N-1} (p_k - \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1})) \delta q_k \quad (15) \end{aligned}$$

で与えられる。ところで、厳密に求められた H_d^+ については、(11, 12)式が成立するので

$$\delta \mathcal{A}_d = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \delta q_0 + \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \delta p_N \quad (16)$$

となる。それゆえ、境界条件 $\delta q_0 = 0, \delta p_N = 0$ のもとで作用積分 $\mathcal{A}_d(\{(q_k, p_k)\}_{k=1}^N)$ は一そして $\mathcal{A}[q(\cdot), p(\cdot)]$ も一停留値をとる(停留である条件のもとでは(13)式と(14)式とは同値である)。よって、次の基本的な結果を得る。

定理 3 (11, 12)式から生成される一連の離散的な軌道 $\{(q_k, p_k)\}_{k=0}^N$ は連続的なHamiltonian $H(q, p)$ に対するHamiltonの運動方程式の解 $(q(\cdot), p(\cdot))$ の標本点になっている、すなわち

$$q_k = q(t_k), \quad p_k = p(t_k) \quad (17)$$

が厳密に成立する。

例 2

再び調和振動子を取り上げる。例 1 から厳密な生成関数 $H_d^+(q_k, p_{k+1})$ は既知であり

$$\begin{aligned} H_d^+(q_k, p_{k+1}) &= \frac{1}{2} \frac{\sin T_k}{\cos T_k} ((q_k)^2 + (p_{k+1})^2) \\ &\quad + \frac{1}{\cos T_k} (q_k p_{k+1}) \quad (18) \end{aligned}$$

である($T_k = t_{k+1} - t_k$)。したがって

$$p_k = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1}) = \frac{\sin T_k}{\cos T_k} q_k + \frac{1}{\cos T_k} p_{k+1} \quad (19)$$

$$q_{k+1} = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_k, p_{k+1}) = \frac{1}{\cos T_k} q_k + \frac{\sin T_k}{\cos T_k} p_{k+1} \quad (20)$$

を得る。(19)式を p_{k+1} について解き、それを(20)式右辺に用いて、結局

$$q_{k+1} = q_k \cos T_k + p_k \sin T_k \quad (21)$$

$$p_{k+1} = -q_k \sin T_k + p_k \cos T_k \quad (22)$$

を得る。そして、これらは連続的な経路

$$q(t) = q_0 \cos t + p_0 \sin t$$

$$p(t) = -q_0 \sin t + p_0 \cos t$$

の $t = t_{k+1}$ での標本点になっている。

さて、次の命題を得ることができるが、これが離散的な近似計算法を研究する上での基本定理(変分法的な離散Hamilton力学)となると思われる。

定理 4 H_d^+ が(10)式で定義される「厳密な」離散Hamiltonianであるという条件を緩めて、それを近似する q_k, p_{k+1} の関数とする。このとき、離散的なHamiltonの運動方程式

$$q_k = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{k-1}, p_k), k = 1, \dots, N-1 \quad (23)$$

$$p_k = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1}), k = 1, \dots, N-1 \quad (24)$$

から決まる離散軌道は、境界条件 $\delta q_0 = 0, \delta p_N = 0$ のもとで離散的な作用積分(14)を停留にする。

もちろんこの場合、停留にされた作用積分(14)はもとの作用積分(13)の停留値に一致しないので、離散的な軌道 $\{(q_k, p_k)\}_{k=0}^N$ は標本点(17)にならないが、その近似値であることが期待される。さらに、方程式(23, 24)が、Hamiltonの運動方程式を数値的に解く従来の方法にくらべて勝っているのは、この方程式から決定される離散軌道がシンプレクティック幾何学(すなわち、シンプレクティック条件)に従うからである[2, 1]。次にこれを確認する。

停留にされた作用積分(14)は端点 q_0, p_N の関数であるので、それを $\mathcal{S}_d(q_0, p_N)$ と表記する：

$$\mathcal{S}_d(q_0, p_N) = \text{ext} \left\{ p_N q_N - \sum_{k=0}^{N-1} [p_{k+1} q_{k+1} - H_d^+(q_k, p_{k+1})] \right\} \quad (25)$$

そして、定理 2 の議論を踏襲して、 \mathcal{S}_d の q_0 に関する偏微分係数を求める。直接的な計算から

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial q_0} &= - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial p_k}{\partial q_0} (q_k - \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{k-1}, p_k)) \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial q_k}{\partial q_0} (p_k - \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1})) \\ &\quad + \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \quad (26) \end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial p_N} = & - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial p_k}{\partial p_N} (q_k - \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{k-1}, p_k)) \\ & - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial q_k}{\partial p_N} (p_k - \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1})) \\ & + \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \end{aligned} \quad (27)$$

したがって, $\{(q_k, p_k)\}_{k=1}^N$ が離散 Hamilton 運動方程式 (23, 24) を満たせば

$$\frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial q_0} = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \quad (28)$$

$$\frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial p_N} = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \quad (29)$$

を得る. さて, $k=1$ のときの (23) 式と $k=N-1$ のときの (24) 式は

$$\begin{aligned} q_1 &= \mathcal{D}_2 H_d^+(q_0, p_1) \\ p_{N-1} &= \mathcal{D}_1 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \end{aligned}$$

である. そこで, 我々は, これらの運動方程式に加えて, そのペアとなる運動方程式

$$p_0 = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \quad (30)$$

$$q_N = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \quad (31)$$

を課すことにする. そうすることにより, 離散 Hamilton 運動方程式の完全なペア

$$q_{k+1} = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_k, p_{k+1}), k=0, \dots, N-1 \quad (32)$$

$$p_k = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1}), k=0, \dots, N-1 \quad (33)$$

を得て, さらに

$$\frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial q_0} = p_0, \quad \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial p_N} = q_N \quad (34)$$

が成立する. (34) 式を外微分法の観点からみれば [2], 外微分 d をスカラー関数 $\mathcal{S}_d(q_0, p_N)$ に施して

$$d\mathcal{S}_d = \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial q_0} dq_0 + \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial p_N} dp_N = p_0 dq_0 + q_N dp_N \quad (35)$$

を得る. さらに, 外微分 d を施し, $dd=0$ および $dp_0 \wedge dq_0 = -dq_0 \wedge dp_0$ を使うと

$$0 = dq_N \wedge dp_N - dq_0 \wedge dp_0$$

を得る. これから次のことが成立する.

定理 5 離散 Hamilton 方程式 (32, 33) の解から作られる一連の離散的な写像

$$(q_0, p_0) \rightarrow (q_1, p_1) \rightarrow \dots \rightarrow (q_N, p_N)$$

はシンプレクティック条件

$$dq_0 \wedge dp_0 = dq_1 \wedge dp_1 = \dots = dq_N \wedge dp_N \quad (36)$$

を満たす.

ここで, これまでの議論の道筋をひっくり返そう.

位相空間において与えられた関数 $H_d^+(\cdot, \cdot)$ を基にして, 離散 Hamilton 運動方程式 (32, 33) を解いて, 初期値 (q_0, p_0) から順次, 離散軌道 $\{(q_k, p_k)\}_{k=0}^N$ を求めると, それは離散作用積分 (14) を停留にし, かつシンプレクティック条件を満たす.

さらに, 離散 Hamiltonian $H_d^+(\cdot, \cdot)$ が, 我々にとって関心のある連続的な Hamiltonian $H(q, p)$ から作られる生成関数 (10) であれば, H_d^+ が生成する離散軌道 $\{(q_k, p_k)\}_{k=0}^N$ は, $H(q, p)$ が生成する連続的な軌道 $(q(t), p(t))$ の標本点 (17) である.

したがって我々の課題は (10) 式にできるだけ近い離散 Hamiltonian H_d^+ を求めることに帰着する. (10) 式は変分問題であるので, いわゆる Galerkin 法が有力な方法となる.

3.3 Galerkin 時間積分法

以下では議論を簡単にするため, 位相空間は 2-次元, すなわち, 力学変数は q, p の二つとする. 多次元への拡張は容易と予想する.

$\psi_i(\tau)$ を時間区間 $\tau \in [0, 1]$ における経路の基底関数とする. すなわちこの区間における関数 $f(\tau)$ は

$$f(\tau) = \sum_{i=1}^s f_i \psi_i(\tau) \quad (37)$$

と近似的に表現される. ここで, 整数 s は基底関数の個数を表す. そして, 経路の積分の評価には数値積分公式

$$\int_0^1 f(\tau) d\tau = \sum_{j=1}^s b_j f(c_j) \quad (38)$$

を用いるものとする. ここで, c_j および b_j は, それぞれ, 積分公式の標本点および重みである. たとえば, $\psi_i(\tau)$ として Legendre 多項式を選ぶと, (38) 式はよく知られた Gauss-Legendre 公式になる [6]. なお, (37) 式の基底関数の個数と (38) 式の標本点の個数とを等しく取っている ((46) 式参照). 我々は, 積分

$$S = \int_0^h \left[p(t) \frac{dq}{dt} - H(q(t), p(t)) \right] dt \quad (39)$$

および

$$\begin{aligned} K &= p_1 q_1 - \int_0^h \left[p(t) \frac{dq}{dt} - H(q(t), p(t)) \right] dt \\ &= p_1 q_1 - S \end{aligned} \quad (40)$$

の Galerkin 近似を求めたい. これを以下の手順により実行する.

step 1

$[0, h]$ における dq/dt の経路を

$$\frac{dq_d}{dt}(\tau h) = \sum_{i=1}^s V^i \psi_i(\tau), \quad 0 \leq \tau \leq 1 \quad (41)$$

と近似的に表現する．ここで， V^i ($i = 1, s$) は未知数である．

step 2

(41)式を時間積分して

$$q_d(\tau h) = q_d(0) + h \sum_{i=1}^s V^i \int_0^\tau \phi_i(\rho) d\rho \quad (42)$$

および， $\tau = 1$ の場合について

$$\begin{aligned} q_1 = q_d(h) &= q_d(0) + h \sum_{i=1}^s V^i \int_0^1 \phi_i(\rho) d\rho \\ &= q_0 + h \sum_{i=1}^s B_i V^i \end{aligned} \quad (43)$$

ここで

$$B_i = \int_0^1 \phi_i(\tau) d\tau \quad (44)$$

である．また，我々は，時間間隔 $[0, h]$ に内部の点（それは，ちょうど数値積分の標本点に一致する） c_i を設定し，そこでの位置を

$$\begin{aligned} Q^i = q_d(c_i h) &= q_d(0) + h \sum_{j=1}^s V^j \int_0^{c_i} \phi_j(\tau) d\tau \\ &= q_0 + h \sum_{j=1}^s A_{ij} V^j \end{aligned} \quad (45)$$

とする．したがって

$$A_{ij} = \int_0^{c_i} \phi_j(\tau) d\tau, \quad i, j = 1, \dots, s \quad (46)$$

は $s \times s$ の行列である．そして，この行列が可逆となるように，基底関数族 $\{\phi_i(\tau)\}$ および点列 $\{c_i\}$ が選ばれるものとする．

step 3

$$P^i = p(c_i h) \quad (47)$$

と置く (P^i も未知数)．積分(39)式において

$$\begin{aligned} \int_0^h p(t) \frac{dq}{dt}(t) dt &= h \int_0^1 p(\tau h) \frac{dq_d}{dt}(\tau h) d\tau \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i p(c_i h) \frac{dq_d}{dt}(c_i h) \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i P^i \sum_{j=1}^s V^j \phi_j(c_i) \end{aligned} \quad (48)$$

2番目の等号では数値積分公式(38)を適用した．同様に

$$\begin{aligned} \int_0^h H(q(t), p(t)) dt &= h \int_0^1 H(q(\tau h), p(\tau h)) d\tau \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i H(q_d(c_i h), p(c_i h)) \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i H(Q^i, P^i) \end{aligned} \quad (49)$$

(48), (49)式を(40)式に用いると， V^i, P^i の関数として

$$\begin{aligned} K(q_0, p_1; V^i, P^i) &= p_1 \left(q_0 + h \sum_{i=1}^s B_i V^i \right) \\ &\quad - h \sum_{i=1}^s b_i \left[P^i \sum_{j=1}^s V^j \phi_j(c_i) - H(Q^i, P^i) \right] \end{aligned} \quad (50)$$

を得る．ただし，(45)式より Q^i は q_0 および $\{V^j\}$ の関数である．

前節の結果より，離散Hamiltonian $H_d^+(q_0, p_1)$ は K を V^i, P^i について停留にすることによって得られる：

$$H_d^+(q_0, p_1) = \text{ext}_{V^i, P^i} K(q_0, p_1; V^i, P^i) \quad (51)$$

そして，停留の条件は

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\partial K}{\partial V^j} &= h p_1 B_j - h \sum_{i=1}^s b_i \left[P^i \phi_j(c_i) \right. \\ &\quad \left. - h A_{ij} \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i) \right], \quad j = 1, \dots, s \end{aligned} \quad (52)$$

および

$$0 = \frac{\partial K}{\partial P^j} = -h b_j \left[\sum_{i=1}^s V^i \phi_i(c_j) - \frac{\partial H}{\partial p}(Q^i, P^i) \right], \quad j = 1, \dots, s \quad (53)$$

である．

step 4

連立方程式(52), (53)を， q_0, p_1 が与えられたものとして， V^i, P^i について解く，すなわち

$$V^i = V^i(q_0, p_1), \quad P^i = P^i(q_0, p_1)$$

これらを(50)右辺に代入すれば， $H_d^+(q_0, p_1)$ を得る：

$$H_d^+(q_0, p_1) = K(q_0, p_1; V^i(q_0, p_1), P^i(q_0, p_1)) \quad (54)$$

ここで必要なのは， $H_d^+(q_0, p_1)$ を陽に書き下すことではなく，その q_0 および p_1 についての偏微分係数である．それらは p_0, q_1 を与える：

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{\partial}{\partial q_0} H_d^+(q_0, p_1) \\ &= p_1 + h \sum_{i=1}^s b_i \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i) \end{aligned} \quad (55)$$

ここで，停留条件(52), (53)を用いた．同様にして

$$q_1 = \frac{\partial}{\partial p_1} H_d^+(q_0, p_1) = q_0 + h \sum_{i=1}^s B_i V^i \quad (56)$$

(55)式を p_1 について解けば，写像 $(q_0, p_0) \rightarrow (q_1, p_1)$ を求めたことになる．それは次のようにまとめられる．

$$q_1 = q_0 + h \sum_{i=1}^s B_i V^i \quad (57)$$

$$p_1 = p_0 - h \sum_{i=1}^s b_i \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i) \quad (58)$$

Q^i, V^i, P^i に対する方程式

$$Q^i = q_0 + h \sum_{j=1}^s A_{ij} V^j, \quad i = 1, \dots, s \quad (59)$$

$$0 = \sum_{i=1}^s \phi_i(c_j) V^i - \frac{\partial H}{\partial p}(Q^j, P^j), \quad j = 1, \dots, s \quad (60)$$

$$0 = \sum_{i=1}^s b_i P^i \phi_j(c_i) - p_0 B_j \\ + h \sum_{i=1}^s b_i (B_j - A_{ij}) \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i), \quad j = 1, \dots, s \quad (61)$$

(60), (61)式は H_d^+ が停留条件(51)を満たすことを表しており, (61)式は(58)式を使って(52)式に現れている p_1 を消去したものである.

3.4 Symplectic Partitioned Runge-Kutta (SPRK) 法

以上から明らかのように, 基底関数族 $\{\phi_j\}_{j=1}^s$ の関数形と個数 s , 数値積分公式(38)における標本点 $\{c_j\}$ および重み $\{b_j\}$ を与えれば, 公式(57)-(61)により, シンプレクティックな写像 $(q_0, p_0) \rightarrow (q_1, p_1)$ を生成する時間積分法 (symplectic integrator) を作るができる.

特に, 基底関数を

$$\phi_i(c_j) = \delta_{ij} \quad (62)$$

であるように選ぶと, 一連の公式は簡単化される. この場合, 数値積分公式(38)の重み b_i は(44)式で定義される B_i で与えられることがわかる (Appendix A). 次に, 方程式(60)は V^i について陽に解けて

$$V^i = \frac{\partial H}{\partial p}(Q^j, P^j) \quad (63)$$

を得る. これを(59), (61)式に用いて

$$Q^i = q_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \frac{\partial H}{\partial p}(Q^j, P^j) \quad (64)$$

$$P^i = p_0 - h \sum_{j=1}^s \tilde{a}_{ij} \frac{\partial H}{\partial q}(Q^j, P^j) \quad (65)$$

$$i = 1, \dots, s$$

および

$$q_1 = q_0 + h \sum_{i=1}^s b_i \frac{\partial H}{\partial p}(Q^i, P^i) \quad (66)$$

$$p_1 = p_0 - h \sum_{i=1}^s b_i \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i) \quad (67)$$

を得る. ここで

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \phi_j d\tau \quad (68)$$

$$\tilde{a}_{ij} = \frac{b_i b_j - b_j a_{ji}}{b_i} \quad (69)$$

である. 公式(64)-(67)は s -次 Symplectic Partitioned Runge-Kutta (SPRK) 法と呼ばれる [3, 5] (partitioned という用語は, 内部の点 Q^i の計算公式と P^i の計算公式とが異なることに由来するようである).

3.5 簡単な例: Störmer-Verlet 法

このスキームは $s = 2$ であり, 標本点として

$$c_1 = 0, \quad c_2 = 1 \quad (70)$$

基底関数として

$$\phi_1(\tau) = \frac{1}{2}(1 + \cos(\pi\tau))$$

$$\phi_2(\tau) = \frac{1}{2}(1 - \cos(\pi\tau)) \quad (71)$$

を選ぶ. これより

$$b_1 = b_2 = \frac{1}{2} \quad (72)$$

および

$$\tilde{a}_{1,1} = \tilde{a}_{2,1} = \frac{1}{2}, \quad \tilde{a}_{2,1} = \tilde{a}_{2,2} = 0 \quad (73)$$

を得る. したがって, Störmer-Verlet 法の時間積分スキームは次のようになる.

$$Q^1 = q_0 \quad (74)$$

$$P^1 = p_0 - \frac{h}{2} \frac{dV}{dq}(q_0) \quad (75)$$

$$P^2 = p_0 - \frac{h}{2} \frac{dV}{dq}(q_0) \quad (76)$$

$$Q^2 = q_0 + \frac{h}{2}(P^1 + P^2) \\ = q_0 - \frac{h^2}{2} \frac{dV}{dq}(q_0) + hp_0 \quad (77)$$

$$q_1 = q_0 + \frac{h}{2}(P^1 + P^2) = Q^2 \quad (78)$$

$$p_1 = p_0 - \frac{h}{2} \left(\frac{dV}{dq}(Q^1) + \frac{dV}{dq}(Q^2) \right) \quad (79)$$

すなわち, このスキームは陽解法である.

調和振動子 ($dV/dq = q$) の場合

$$Q^1 + Q^2 = 2 \left(1 - \frac{h^2}{4} \right) q_0 + hp_0$$

より

$$q_1 = \left(1 - \frac{h^2}{2} \right) q_0 + hp_0 \quad (80)$$

Two-stage Stormer-Verlet scheme ($h = 0.01$)

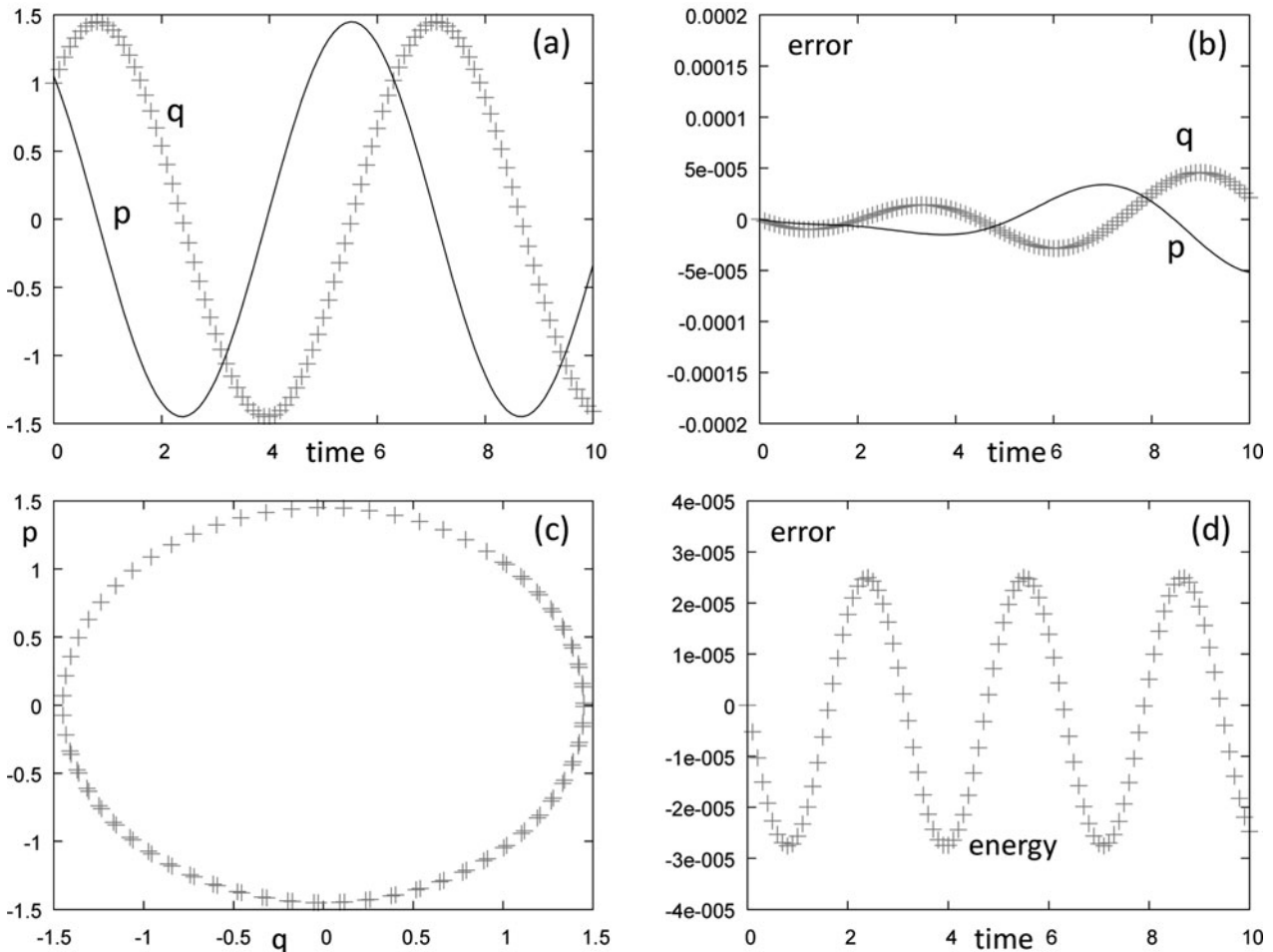


図1 Störmer-Verlet 法で求めた調和振動子の離散解 ($h = 0.01$) . (a) : $q(t)$, $p(t)$ の離散解. 初期値は $q(0) = p(0) = 1.0$ である. (b) : 離散解の厳密解からの誤差, (c) : 位相空間 (q, p) 上の軌跡, (d) : エネルギーの時間変化. エネルギーは保存されないが, 単調に増大あるいは減少することなく, 厳密値のまわりで振動する.

$$p_1 = -h \left(1 - \frac{h^2}{4} \right) q_0 + \left(1 - \frac{h^2}{2} \right) p_0 \tag{81}$$

この写像 $(q_0, p_0) \rightarrow (q_1, p_1)$ によるエネルギーの変化は次式で表される.

$$(q_1)^2 + (p_1)^2 = (q_0)^2 + (p_0)^2 + \left(\frac{h^3}{2} - \frac{h^5}{4} \right) (q_0 p_0) + \frac{h^4}{4} ((p_0)^2 - (q_0)^2) + \frac{h^6}{16} (q_0)^2 \tag{82}$$

図1に初期値 $q(t=0) = p(t=0) = 1.0$ および $h = 0.01$ の場合の(80,81)式から得られた(a) : $q(t)$, $p(t)$ の時間発展, (b) : それらの厳密解からの誤差, (c) : 位相空間 (q, p) 上の軌跡, そして(d) : エネルギーの時間変化を示す. 注目すべきことは, エネルギーは保存されないが, 単調に増大あるいは減少せずに, 厳密値の周りで振動することである. これはシンプレクティック写像の特徴であり, これが長時間にわたって軌道を追跡することを可能にすると思なされる.

3.6 まとめと議論

時間間隔 h を有限値に固定したまま基底関数族

$\{\psi_i(\tau)\}_{i=1,s}$ の個数および標本点 $\{c_i\}_{i=1,s}$ の個数 (次数) s を増大させたとき, 作用積分 K の極値(51)が連続な場合の作用積分の極値に収束すれば, Galerkin 時間積分法で作られる一連の離散的な経路 (q_k, p_k) は定理3より Hamilton の運動方程式の解の標本点になる. この意味で, 有限な h の場合の Galerkin 時間積分法の収束性が保証される. その次の数値解析学としての重要なテーマとして, 具体的な時間積分法の精度のオーダーおよびそれが生成する離散解の厳密解からの誤差の挙動があげられよう. これについては文献[3]およびそれに引用されている論文を参照されたい. 代わりにプラズマ物理学・核融合への応用の観点からコメントを二つほど述べたい. 本章で展開した離散 Hamilton 力学は作用積分(2)を起点にしている. これは (q, p) が正準変数であることを暗黙に仮定していることになる. それゆえ, 非正準形式を使う荷電粒子の案内中心軌道解析には, そのままでは適用できず, 非正準形式を正準形式に変換することが必要になる. 大域的な座標変換のできる場合が文献[8]で論じられているが, 非正準形式を正準形式に局所的に変換して (この場合のほうが応用範囲が広いと予想される) 離散 Hamilton 力学を適用することは, まだ研究されていないようである. また, 離散 Hamilton 力学を多体

系 (interacting system (相互作用系)) のシミュレーションに適用することは興味深いと思われる。もちろん、プラズマ物理学における典型的な分野は PIC シミュレーション [9] であろう。これについては今後の発展を期待するところである。

謝 辞

本章で述べた研究の機会と支援を賜りました、日本原子力研究開発機構の松山顕之博士および矢木雅敏理論シミュレーショングループリーダーに深く感謝します。また、古川勝博士には本講座での発表機会をいただきました。ここに感謝します。

Appendix

3. A : 数値積分公式の補足

基底関数 $\phi_i(\tau)$ が条件(62)を満たしているとする。関数 $f(\tau)$ の近似表現

$$\bar{f}(\tau) = \sum_{i=1}^s f(c_i) \phi_i(\tau) \tag{A.1}$$

は、その値が標本点 c_j においてもとの関数の値に等しいという条件を満たす：

$$\bar{f}(c_j) = f(c_j) \tag{A.2}$$

このとき

$$\begin{aligned} \int_0^1 \bar{f}(\tau) d\tau &= \sum_{i=1}^s f(c_i) \int_0^1 \phi_i(\tau) d\tau \\ &= \sum_{i=1}^s b_i f(c_i) \end{aligned} \tag{A.3}$$

であるので、関数 $f(\tau)$ の定積分を

$$\int_0^1 f(\tau) d\tau \approx \int_0^1 \bar{f}(\tau) d\tau = \sum_{i=1}^s b_i f(c_i) \tag{A.4}$$

で評価すると、これは積分公式(38)の重み b_i として

$$b_i = \int_0^1 \phi_i d\tau \tag{A.5}$$

を選んだことになる。(A.4)式が数値積分公式として意味のあるものにするために、 $f(\tau)$ が特定の関数 (たとえば、定数関数とか低次の多項式) の場合に、公式が厳密な積分値を与える条件を課するのが通常である。 $f(\tau) \equiv 1$ の場合、積分公式が

$$\int_0^1 f(\tau) d\tau = 1$$

を与えるためには、重み b_i が条件

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1 \tag{A.6}$$

を満たすことが必要である。これは、SPRK 法が少なくともオーダー h の時間積分法であることを保証する条件であり [5], SPRK 法の適合条件 (condition for consistency of SPRK method) と呼ばれる。

参考文献

- [1] 山内恭彦：一般力学 増訂第3版, (岩波書店, 2002年).
- [2] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (2nd edn. Graduate Texts in Mathematics, vol. 60, New York, USA, 1989), chap.9.
- [3] E. Hairer *et al.*, *Geometric Numerical Integration* (2nd edn, Springer Series in Computational Mechanics, vol. 31, Berlin, Germany, 2006).
- [4] J.E. Marsden and M. West, *Acta Numerica* 10, 1 (2001).
- [5] M. Leok and J. Zhang, *JMA J. Numerical Analysis* 31, 1497 (2011).
- [6] W.H. Press *et al.*, *Numerical Recipes* (Cambridge university Press, Ney York, 1992) Chap.4.
- [7] R.P. Feynman *et al.*, *Quantum Mechanics and Path Integrals: Emended Edition* (Dover, USA, 2010).
- [8] R. White and L. E. Zakharov, *Phys. Plasmas* 10, 573 (2003).
- [9] 内藤裕志, 佐竹真介：プラズマ・核融合学会誌 89, 245 (2013).



とく だ しん じ
徳 田 伸 二

(一財)高度情報科学技術研究機構 主任研究員。1978年大阪大学大学院工学系博士課程中退 工学博士。日本原子力研究所を経て2012年より現職。専門は磁場閉じ込めプラズマの磁気流体力学安定性理論。また、荷電粒子運動の現代的(幾何学的)な数値解法にも興味があります。街(それも裏道とか横丁とか)をブラブラするのが好きで、ときどき行き止まりにぶつかり、家内に叱られます。



4. 応 用

4.1 太陽系力学に於けるシンプレクティック数値積分

4.1 Symplectic Integrators in Solar System Dynamics

伊藤 孝士

ITO Takashi

大学共同利用機関法人自然科学研究機構国立天文台天文シミュレーションプロジェクト

(原稿受付：2015年1月13日)

惑星や小惑星・彗星といった太陽系天体の運動はケプラー運動でよく近似できる。これらの天体の多くはより重い中心天体を周回し、そこに働く摂動は一般に小さい。また現代に於いては天体同士の衝突も稀であり、力学的には太陽系を保存系と看做すことも妥当である。これらの性質により太陽系力学はシンプレクティック数値積分、特に微小摂動系向けの計算方法と親和性が高い。本節では太陽系力学の様々な局面で利用されるシンプレクティック数値積分法のいくつかを紹介し、その現状と課題・将来の展望について簡潔に述べる。

Keywords:

solar system dynamics, symplectic integrator, nearly integrable system

4.1.1 太陽系力学の特徴

太陽系には惑星をはじめ小惑星や彗星、各惑星の衛星など多様な天体が存在している。そうした天体の運動の特徴は基本的に中心天体の強い重力に支配されていること、つまり中心力場を運動していることにある。なおかつ多くの場合に中心力としての重力は相対論的効果を考えない古典的なもので十分であるから、結果的に太陽系天体の運動は重力二体問題、いわゆるケプラー運動でよく近似できる。周知のようにケプラー運動は可積分であり、解析解が知られている。よって太陽系天体の運動を知るには中心天体による中心力場でのケプラー運動を基本として考え、中心天体以外からの重力を微小な摂動として扱う方法が適している。太陽系天体の運動に関して古くから様々な摂動理論が発達してきたのはこのことが背景にある。また、微小天体の衝突合体が頻繁に発生していた太陽系初期の時代を除けば太陽系はほぼ保存系（無散逸系）であると看做し得る。即ち天体の運動が時間依存しないハミルトニアン系の力学でよく近似できるのである。こうした意味で太陽系天体の力学（太陽系力学）はシンプレクティック数値積分を応用するに好適な素材であり、そこでは積分可能な問題+微小摂動の力学系に特化した方法論が自然に発達してきた。

4.1.2 Wisdom-Holman map

シンプレクティック数値積分法が広く普及する以前、太陽系力学の現場では天体の運動方程式の数値積分のために多段型の予測子法やルンゲクッタ法、また高精度が要求される場合には補外法などが用いられていた。1989年に行われ

た調査[1]によると、当時は太陽系力学を含む天体力学の間で使われる数値積分の方法としてルンゲクッタ法と多段法が70%以上を占めていたとされる。無論こうした方法は特段に劣るわけでもなく、21世紀の現在でも使われる場合がある。特に、誤差の制御が容易であり必要であれば丸め誤差水準にまで容易に精度を上げられる補外法は現在でも需要が多く、後述するようにシンプレクティック数値積分と組み合わせた方法も提案されている。しかし当時とりわけ広く普及していた多段型の予測子法は精度は高いものの初期値の準備が面倒だったり数値的安定性の問題が潜在するなど、誰にでも使い勝手がよいものとはいえなかった。また従来の数値積分法はハミルトニアン系としての太陽系力学の特質を考慮したものではなく、一般の常微分方程式系に適用される方法を借用しているに過ぎなかった。

本小特集の他記事にもあるように、シンプレクティック数値積分法の適用時にはハミルトニアン分割の方法が重要になる。様々な特徴を持つ様々な力学系には、各系の性質に特化したハミルトニアン分割のやり方があるはずである。太陽系のような重力多体力学系で最も基本的なハミルトニアン分割は $H = T(p) + V(q)$ であろう。 T と V は運動エネルギーとポテンシャル、 q と p は座標とそれに共役な運動量であり、ニュートン力学の範囲のみを考えればポテンシャル V は運動量 p に依存しない。すると T は p のみの関数、 V は q のみの関数となり、個別には積分可能なのでシンプレクティック数値積分がうまく適用できる。しかしこの分割は太陽系天体の運動の特徴、即ちケプラー運動+微小摂動という性質を何ら取り込んでいない。

太陽系力学の分野でシンプレクティック数値積分法が本格的に使われ出したのは1990年代初頭である。その大きな契機となった一編の論文[2]は上述した太陽系力学の特徴を取り込んだハミルトニアン分割とそれを使った数値積分スキームを提案し、具体的な実装までを行ってその高い計算効率と実用性を示した。太陽系天体の運動の典型が二体問題に微小摂動を加えたものであるという事実は、ハミルトニアン H を中心天体周りのケプラー運動を司る可積分なハミルトニアン H_{kep} および中心天体以外との重力相互作用 (摂動) を表す部分 H_{int} に分割できることを意味する。

$$H = H_{\text{kep}} + H_{\text{int}} \quad (1)$$

という具合である。では、 $H = T(p) + V(q)$ という自明なハミルトニアン分割に比べて H を式(1)のように分割する利点は何か? それは太陽系天体の運動に於いてはケプラー運動に対する摂動が小さいという事実より、 H_{kep} と H_{int} の大きさに $H_{\text{int}}/H_{\text{kep}} \sim \epsilon \ll 1$ という関係があることである。一般にハミルトニアンを $H = T(p) + V(q)$ と分割できる系に n 次のシンプレクティック数値積分法を刻み幅 τ で適用すると、誤差を担うハミルトニアンの主要項は τ^n の大きさになる。けれども H が式(1)のように分割可能な場合にはその分割を適用すれば、誤差の主要項は $\epsilon \tau^n$ の大きさに留まる。摂動が小さい、つまり ϵ が微量の場合にはその分だけ誤差を軽減でき、より正確な計算が可能になるのである。これを逆に言えば、誤差を従来と同程度に保つならば式(1)の分割を施すことで計算の刻み幅を大きく取れることになる。新しい刻み幅を τ_{new} とすると二次の積分法であればこのことは $\epsilon \tau_{\text{new}}^2 \sim \tau^2$ 、つまり $\tau_{\text{new}} \sim \epsilon^{-1/2} \tau$ を意味する。典型的な太陽系天体の運動では $\epsilon = 10^{-3}$ 程度なので (これは最大の摂動天体である木星と太陽の質量比に相当する)、この場合には $\tau_{\text{new}} \sim 32\tau$ となる。即ち、ハミルトニアンの分割方法を変えるだけで誤差を増やさずに刻み幅を30倍以上に広げ、高速な数値積分が可能になるのである。ここで注目すべきは n 次の積分スキームでは τ_{new} と τ の関係が $\tau_{\text{new}} \sim \epsilon^{-1/n} \tau$ となり、積分法の次数が増すにつれて τ_{new} と τ の違いが減ることである。つまり低次のスキームの方が高速化の効率が低い。上記の事実より、式(1)の分割を実施する場合には大半の場合に低次、特に二次の方法が用いられる。

式(1)のハミルトニアン分割を元にしたシンプレクティック数値積分法の実装には、変数の選び方に関連する二つの課題がある。まずケプラー運動は二体問題の解であるとは言うものの、実際には中心天体を原点とする相対座標を使って系を形式的に「一体問題」化して得られる解である。よって通常その便宜上の原点である中心天体の運動は考慮されないが、現実には中心天体自身も系全体の重心を周回する。例えば太陽もわずかな動きではあるが太陽系全体の重心を周回している。これが原因し、単純に中心天体を原点とする相対座標系では式(1)の形式でのハミルトニアン分割が実現できず、中心天体の運動に関係する余計な項が発生してしまう。第二の課題はケプラー運動を表す正準変数の選び方にある。ハミルトニアン系の時間発展を表すポ

アソン括弧演算子を $e^F \equiv \exp\{\tau F\}$ で定義すると、式(1)の分割に於いてケプラー運動を表す H_{kep} は座標 q と運動量 p の両方に依存するため、正準変数として q, p を使う限りは $e^K \equiv \exp\{\tau H_{\text{kep}}\}$ による演算が閉じた形で表現されない (ポアソン括弧演算子を施すと無限級数が発生する)。ケプラー軌道要素の正準版ともいべき Delaunay 要素を使えば H_{kep} はその作用変数の一種 L のみに依存するから、変数を q, p から Delaunay 要素に変換しておけば e^K による演算結果は閉じた形になる (無限級数が発生しない)。しかし一般的な座標・運動量 q, p と Delaunay 要素を各刻み幅毎に変換する操作は大きな計算コストを産み、深刻な問題となる可能性がある。なお天体間の重力摂動を表す H_{int} は相対座標 q のみの関数であるから $e^I \equiv \exp\{\tau H_{\text{int}}\}$ による演算結果は閉じた形で表され、こちらに関して問題はない。

上記の二課題を克服するために文献[2]は以下の方策を示した。第一の課題については古典的な三体問題の理論でよく使われている Jacobi 座標 [3など] を持ち込み、ハミルトニアンをこれで表現した。Jacobi 座標は力学的には N 体系の階層的重心を原点とする正準直交座標というべきものだが、これを用いると中心天体の運動を陽に扱わなくても式(1)の形式のハミルトニアン分割が実現できる。 H_{kep} 部分が Delaunay 変数 L のみの関数で書けることや H_{int} 部分が天体の相対座標のみに依存するという条件も満たされる。第二の課題は直交座標 (Jacobi 座標) と Delaunay 要素 (ケプラー軌道要素) の変換をいかに効率よく実行するのだが、実際には六種類の Delaunay 要素を毎度全て求める必要はない。演算子 e^K による時間発展を知るのに必要なのは或る時刻のケプラー軌道上で或る時間が経った時の天体の位置変化のみであり、それを知るのに必要なケプラー軌道要素は三種類のみである。そして、天体軌道決定の分野でよく知られるガウスの f, g 関数 [4など] を使えば軌道上の天体位置変化は効率よく計算される。また、 f, g 関数による軌道上の天体位置変化の計算結果は直交座標として返されるため、ケプラー軌道要素から直交座標への逆変換は実施しなくてよい。筆者自身の経験でも、この方法を使って太陽系の惑星運動を数値積分した際に変数変換に要する計算コストは全計算量の数%に過ぎなかった。しかもそのコストは天体総数のみに比例し、一方で天体相互の重力を計算するコストは天体総数の二乗に比例するから、扱う天体数が増えれば変数変換の相対的な計算コストは益々低くなる。

言語的な説明が長くなったが、典型的な二次の積分操作を演算子 e^K, e^I を使って記せば一刻み分では $e^{K/2} e^I e^{K/2}$ となる。 e^K ではその瞬間の軌道上の天体位置変化を計算し (三種類のケプラー軌道要素を元にした f, g 関数の適用)、 e^I では直交座標 (Jacobi 座標) で表現される H_{int} を用いて各天体に与えられる運動量の変化を計算する。前記した変数変換は e^I から e^K へ移る段階毎に発生する。 $e^{K/2} e^I e^{K/2}$ という演算が真の系の時間変化を表す $e^H (= \exp\{\tau H\})$ を近似したものであることはいままでもない。この演算を連続実施すれば数値積分全体は $e^{K/2} e^I e^K e^I e^K e^I \dots e^{K/2}$ と表現

される。高次の方法も同様であり、適切な係数を用いた e^K と e^1 の連続演算により系の時間発展が表現される [5 など]。

文献[2]は上記の原理および実装方法を示し、なおかつそれを使って太陽系惑星の長期軌道進化を実際に計算してその有用性を実証した。そのために現在では原著者の名前を取ってこの積分スキームを Wisdom-Holman map (WH map) と呼ぶ人も多い。誤解を恐れずいえば、現在の太陽系力学に於いて使われるシンプレクティック数値積分法はほぼ一つ残らず WH map に基礎を置いている。筆者自身も太陽系天体や太陽系外惑星の軌道進化には基本的に WH map を利用し、計算精度を検証する際にのみ補外法を併用している。WH map が広く使われる理由には後述するように使いやすい公開ソースコードが流通していることもある。だが、文献[2]が基本原理の提示のみならず現実的な問題を例に取ってその有効性を精密に実証したことが何より大きいだろう。当然ながら文献[2]の被引用頻度は現在でも極めて高い。近年ではシンプレクティック数値積分の実装に有用なハミルトニアン分割方法として式(1)以外の方式も提唱されているが、その概念の基本は依然として式(1)である。

ところで、太陽系力学に於けるシンプレクティック数値積分の初期の発展には日本人の貢献も大きいことは記憶に値しよう [1, 5-8]。WH map 論文[2]で提案された概念についても日本の研究グループが同様なアイデアをほぼ同時期に発表している [9]。だが文献[9]では重力 N 体系への積分スキーム実装が行われず、論文内で例示された数値実験は摂動を受けた調和振動子と人工衛星の運動に限られていた。そのため、ほぼ同じ時期にほぼ同じ考えを提唱したにも関わらず文献[9]の被引用数は文献[2]に比べてだいぶ少ない。同じ日本人研究者として残念なところではある。

4.1.3 誤差の低減

本小特集の他記事でも述べられているようにシンプレクティック数値積分の特徴は系の時間発展がもつシンプレクティック性が保存され、その結果として幾つもの望ましい性質が導かれることである。だが周知のように、そこで得られる結果は真の系のハミルトニアン H が支配する系の時間発展ではなく、その近傍で短い周期の振動を繰り返す代理系のハミルトニアン (surrogate Hamiltonian) のものである。この振動現象を図示するため、太陽系力学の基本である二体問題をシンプレクティック数値積分で解いてみる。便宜上、ハミルトニアン分割は最も基本的な $H = T(p) + V(q)$ とする。この時の真の解はもちろんケプラー運動だが、数値積分法が内包する誤差により数値解は真の解とは少々異なる。その誤差を摂動と看做し、Lie変換に基づく正準摂動論 [10] を適用してシンプレクティック数値積分による誤差を解析的に定量化することが可能である。これはもちろん二体問題に限らず適用できる方法だが、真の解が既知である二体問題なら結果の検証がより容易になる。二次の積分法を適用した結果が図1であり、天体の平均角速度についての数値解と真の解の差異が軌道上の天体

の出発地点にどう依存し、かつそれが軌道の離心率にどう関係するのかを示した [11]。これを見ると天体の出発地点 (つまり数値積分の初期値) に依存して天体の平均的な角速度の誤差が大きく異なる。これが代理系の短周期振動を表す一側面である。

代理系の振動を回避または除去して真の系に近い解を得るために幾つかの提案が行われている。最も単純なのは誤差を最小とする初期値を探し出してそこから数値積分を出発する方法で、「逐次出発」と称される [11, 12]。図1の例では軌道の離心率がある程度より大きければ平均角速度の誤差が0になる出発点が存在するから、そこから出発すれば数値解は真の解にかなり近くなることが期待される。しかしこの方法ではそもそも誤差最小となる初期値を探す作業が面倒であり、実用性はあまり高くない。より簡便かつ機械的な方法として「暖機出発」も提案された [12]。これはハミルトニアンの変化が緩慢であれば作用変数は断熱不変量として保存される性質を利用したもので、数値積分の刻み幅を極めて小さな値から実用的に大きな値まで徐々に変化させることで作用変数の計算誤差を極小に保つ方法である。天体の運動に関する計算誤差の最たるものは天体の経度 (軌道上の位置) に関するもので、通常は時間に比例して増え、その発生率は天体の軌道半長径の誤差量に比例する。軌道半長径はケプラー運動に於ける作用変数に直結する変数だから、作用変数の誤差が減れば天体の経度誤差も減る。図2には太陽と木星の重力を受けて運動する小惑星 Ceres の運動を二次の WH map で 5 万年間追跡した結果を示す。通常の方法で出発した場合に比べて暖機出発させた場合にはこの小惑星の経度誤差が二桁も小さくなっている。

この方面での研究で最も画期的であり将来的に有望なのは、WH map の創始者である Jack Wisdom 自らが開発した「シンプレクティック修正子」を使う方法であろう [13, 14]。

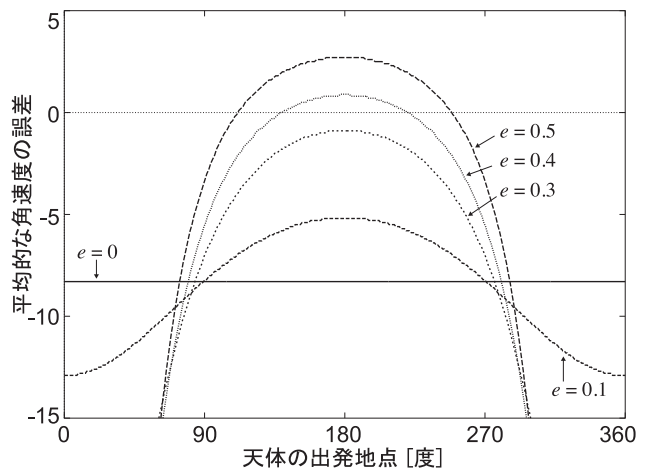


図1 重力二体問題を二次のシンプレクティック数値積分法で解いた際に発生する天体の平均角速度の誤差の、初期位置および離心率 e への依存性 [11]。縦軸の単位は公転周期 $^{-1} \times 100$ 。正確に言えば横軸は天体の初期平均近点離角、縦軸は平均運動の永年誤差である。各々の曲線が縦軸の値 = 0 の横点線と交差する出発地点が、その後の計算誤差を最小にするはずの初期値である。

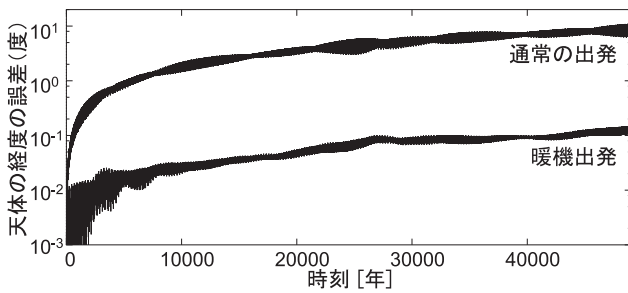


図2 木星と太陽の影響下にある小惑星 Ceres の運動を二次の WH map を用いて解き、通常の出発方法と暖機出発によるその経度誤差を比較したもの。刻み幅の極めて小さな高精度計算の結果を基準（擬似的な真の解）と看做した。

Wisdom は周期的 δ 関数を使った独自の定式化を用いて代理系ハミルトニアンがもつ短周期の振動成分を特定し、かつそれを除去するための正準変換の母関数を得る一般的な手続きを Lie 変換に基いて組み上げた。一旦この変換の母関数が得られればシンプレクティック数値積分のどの局面に於いてもそれを使って数値解を真の解に近づけられる。こうした手続きを取らない場合の WHmap に於ける代理系と真の系の差異は先述したように $\epsilon \tau^n$ の桁だが、この手続きによりそれを $\epsilon^2 \tau^n$ にまで低減できる (n 次のスキーム)。前述したように太陽系に於いては典型的に $\epsilon \sim 10^{-3}$ であるから、この違いは大きい。この研究は Lie 変換に基いた正準摂動論とシンプレクティック数値積分との深い関係を示すものとして理論的にも興味深いし、昨今ではシンプレクティック修正子を応用することでシンプレクティック数値積分法と相性の悪い可変刻み幅方式を実現する試みもある [15]。

4.1.4 課題と展望

前述のように太陽系力学では式(1)のハミルトニアン分割が有効だが、それだけで話が済まない場合もある。その一例はある天体が他の天体（与摂動天体）と接近遭遇し、先の ϵ が微小量ではなくなる状況である。この状況は太陽系初期に惑星の前駆天体が相互に散乱と衝突を繰り返していた時代には日常的に発生していたと想像されるし、小惑星や彗星は現在でも惑星との近接遭遇を頻りに起こしている。 ϵ が微小量でなくても式(1)の形式でシンプレクティック数値積分を行うことは可能だが、その場合には刻み幅をだいたい小さくしないと誤差の増大が深刻になる。しかし刻み幅を小さくし過ぎると今度は通常のケプラー的な軌道に関する数値積分の効率が落ちる。この状況を打開するために幾つかの工夫が考えられてきた。例えば与摂動天体との近接遭遇時には細かいことを考えずに接近距離に応じて刻み幅を適宜縮小する方法である [16]（その際に厳密な意味でのシンプレクティック性は失われるが、それには目を瞑る）。この方法は理論的に美しいとは到底いえないが太陽系力学に於ける実用としては悪くない精度の解を与えることが知られており、多くの研究者が使っている。理論的に厳密な方法としては与摂動天体が及ぼす力を幾つもの力の和に再帰的に分割し、それぞれの力を被摂動天体から異なる距離・異なる頻度で有効にする方法がある [17, 18]。この再帰分割は天体同士の接近遭遇時にのみ発生し、そこで

は数値積分の刻み幅も自動的に縮小されるが、その場合にもシンプレクティック性が損なわれない工夫が編み出された。その際に必要となる新しいハミルトニアン分割として式(1)の改良版も提案されている。更に直接的かつ実際的な方法としては、与摂動天体との接近遭遇が発生して相互作用ハミルトニアン H_{int} のどれかの項が極端に大きくなった場合にはそれを H_{kep} に滑らかに移動し、修正された H_{kep} 下での時間発展を補外法を使って精密に解く方式も提案されている [19]。この方法も厳密にはシンプレクティックではないが、補外法による数値積分は計算機精度の上限を達成し得るから、私達が手にする現実の範囲内で最高精度の“解析解”を求めることに相当する。

太陽系力学に於けるシンプレクティック数値積分が克服すべき課題は他にもある。小惑星や彗星の中には離心率が 1 に近い長楕円軌道を持つものもあるが、古典的な WH map はそうした軌道を扱うのが不得手である。その原因はいわゆる“刻み幅共鳴”にあるとされ [20]、この現象の回避は遠方から飛来する彗星などの数値積分に必須となる。その一対策として文献 [19] と同様に式(1)のハミルトニアン分割を改良し、中心天体への接近を取って中心天体による摂動であると看做す手法が考案された [21]。ある天体が中心天体に接近し過ぎる場合には分割されたハミルトニアン間で適切に項を移動し、計算誤差の増大を巧みに抑制するものである。しかし理論的により洗練された方法は座標と時間変数を正則化し、中心天体への接近（衝突）を非特異点化することであろう。実際に、天体力学の業界では広く知られる Kusutaanheimo-Stiefel 正則化 [22 など] を WH map に持ち込んで修正したスキーム [23 など] は超長楕円軌道の天体運動を扱う際にも著しく高精度であり、かつ高速である [20]。正則化を組み込んだシンプレクティック数値積分法は構造が複雑になるためか応用例がまだ少ない。しかし天体力学に於ける正則化の研究は長い歴史をもち、膨大な量の知見があるから、太陽系力学の問題への適用例は増えていくだろう。

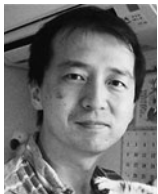
WH map の発表から 20 年以上を経た現在でも、太陽系力学に於けるシンプレクティック数値積分法の進歩は続いている。例えば昨今では太陽系以外の惑星系が夥しい数で発見される中、連星系を周回する惑星も確認され [24]、そうした天体の運動を効率良くシンプレクティック数値積分する方法も開発された [25]。また、天体の軌道運動よりも時定数が短いためにずっと高い精度を要求される天体の自転運動に関するシンプレクティック数値積分法も発表され、衛星-惑星系の潮汐進化計算などに応用されている [26, 27]。また、WH map とその発展型算法を実装したソースコード群が幾つか開発されて無償公開されており、多くの研究者に使われていることも注記に値しよう [16, 28]。今やそうした公開コードを GPU などの加速演算器上で動かす試みもある [29]。また式(1)の意味するハミルトニアン分割の概念は太陽系力学の枠組みを超え、今や恒星系力学や自己重力流体に於ける数値計算にも導入されている [30-32 など]。

太陽系や惑星の進化を探る学問に於いては何十億年も前に存在した天体の運動状況を検証することも多く、その場

合には数値積分の精度や効率よりも力学モデルや初期値の不定性の方がずっと深刻な場合もある。しかし個々の計算に於ける数値積分が信頼できるか否かは研究業界全体の信頼にも直結し、とても重要である。そうした意味で、より高精度・高効率のシンプレクティック数値積分法に対する太陽系力学からの需要が終息することはないだろう。

参考文献

- [1] H. Kinoshita and H. Nakai, *Cel. Mech.* **45**, 231 (1989).
 [2] J. Wisdom and M. Holman, *Astron. J.* **102**, 1528, (1991).
 [3] H.C. Plummer, *An Introductory Treatise on Dynamical Astronomy* (Dover, New York, 1960).
 [4] J.M.A. Danby, *Fundamentals of Celestial Mechanics* (2nd edition, Willmann-Bell, Richmond, Virginia, 1992).
 [5] H. Yoshida, *Phys. Lett. A* **150**, 262 (1990).
 [6] H. Yoshida, *Cel. Mech. Dyn. Astron.* **56**, 27 (1993).
 [7] T. Fukushima, *Astron. J.* **121**, 1768 (2001).
 [8] H. Yoshida, *Phys. Lett. A* **282**, 276 (2001).
 [9] H. Kinoshita *et al.*, *Cel. Mech. Dyn. Astron.* **50**, 59 (1991).
 [10] G. Hori, *Publ. Astron. Soc. Japan* **18**, 287 (1966).
 [11] T. Ito and K. Tanikawa, *Publ. Astron. Soc. Japan* **64**, 35 (2012).
 [12] P. Saha and S. Tremaine, *Astron. J.* **1633**, 104 (1992).
 [13] J. Wisdom *et al.*, *Fields Inst. Commun.* **10**, 217 (1996).
 [14] J. Wisdom, *Astron. J.* **131**, 2294 (2006).
 [15] N. Kaib *et al.*, *Astron. J.* **141**, 3 (2011).
 [16] H.F. Levison and M.J. Duncan, *Icarus* **108**, 18 (1994).
 [17] R.D. Skeel and J.J. Biesiadecki, *Ann. Numer. Math.* **1**, 191 (1994).
 [18] M.J. Duncan *et al.*, *Astron. J.* **116**, 2067 (1998).
 [19] J.E. Chambers, *Mon. Not. R. Ast. Soc.* **304**, 793 (1999).
 [20] K.P. Rauch and M. Holman, *Astron. J.* **117**, 1087 (1999).
 [21] H.F. Levison and M. J. Duncan, *Astron. J.* **120**, 2117 (2000).
 [22] V.A. Brumberg, *Analytical Techniques of Celestial Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1995).
 [23] S. Mikkola, *Cel. Mech. Dyn. Astron.* **67**, 145 (1997).
 [24] J.A. Orosz *et al.*, *Science* **337**, 1511 (2012).
 [25] J.E. Chambers *et al.*, *Astron. J.* **123**, 2884 (2002).
 [26] J. Touma and J. Wisdom, *Astron. J.* **107**, 1189 (1994).
 [27] J. Touma and J. Wisdom, *Astron. J.* **108**, 1943 (1994).
 [28] J.E. Chambers and F. Migliorini, *BAAS* **29**, 1024 (1997).
 [29] S. Hellmich *et al.*, abstract of ACM2014, 3-1-2.10 (2014).
 [30] M. Fujii *et al.*, *Publ. Astron. Soc. Japan* **59**, 1095 (2007).
 [31] T.R. Saitoh, J. Makino, *Publ. Astron. Soc. Japan* **62**, 301 (2010).
 [32] G. Gonçaves Ferrari *et al.*, *Mon. Not. R. Ast. Soc.* **440**, 719 (2014).



いとう たかし
伊藤 孝士

自然科学研究機構国立天文台天文シミュレーションプロジェクト助教・副プロジェクト長。1995年東京大学大学院理学系研究科地球惑星物理学専攻博士課程中途退学，博士（理学）。惑星科学，特に太陽系力学に理論的・数値的な側面から取り組んでいる。猫の扱いに長けており，関係者の間では熟練したキャット・シッターとして重宝されている。



4. 応用

4.2 ビーム物理学

4.2 Beam Physics

大見和史

OHMI Kazuhito

高エネルギー加速器研究機構 (KEK)

(原稿受付: 2014年 8月26日)

加速器におけるエミッタンスはビームを構成する粒子の位相空間内での分布を表現するパラメータである。具体的に粒子分布が位相空間内でガウス分布をしていた場合、その標準偏差で表される体積である。あるいは99%の粒子が含まれる位相空間体積を99%エミッタンスと表現したりする。リュービリの定理で保証される、位相空間体積の保存は運動がシンプレクティックであることが前提である。ビーム内散乱を無視すれば、エミッタンスの保存はリュービリの定理そのものである。実際には非線形力がある場合、位相空間構造が複雑になり、線形理論をもとに定義されたエミッタンスが変化する、一般には拡散的であるため増大する。加速器内では粒子は非線形振動をしているが、考慮すべき振動数は加速器の種類によるが非常に大きい ($10^5 - 10^{10}$)。よって加速器におけるシンプレクティック積分は空気、水のような存在で、なくてはならない。エミッタンスの増大は加速器の性能に直接的な影響を与える。ここでは加速器性能を左右する問題として、KEKB/LHCにおけるビームビーム相互作用を例に加速器におけるシンプレクティック性の重要さを論じる。

Keywords:

storage ring, e+e- collider, proton collider

4.2.1 はじめに

円形衝突加速器においては、どれだけ多くの衝突反応をとらえるかが性能指標になる。衝突断面積は反応によって決まっているので、断面積あたりのビーム粒子の衝突頻度、ルミノシティを稼ぐのが加速器の使命である。加速器中でのビームは、加速空洞に励起された高周波によって加速されているため、その周波数に対応した集団 (バンチ) で蓄えられている。KEKBでは509 MHz空洞に対し、2波長 (4 ns) ごとにバンチが蓄積されている。バンチごとの衝突繰り返し f_{rep} は250 MHzである。LHCは400 MHz空洞で、10-20波長ごとにバンチが蓄積されている ($f_{\text{rep}} = 40 - 20$ MHz)。バンチの中の粒子数はKEKBで電子バンチ $N_- = 5 \times 10^{10}$ 個、陽電子バンチ $N_+ = 9 \times 10^{10}$ 個、LHCでは両ビームとも陽子で 1.6×10^{11} 個である。

$$L = \frac{N_+ N_-}{4\pi\sigma_x\sigma_y} f_{\text{rep}} \quad (1)$$

ビームを衝突させる場所での x - y 面内のビームサイズ断面積 ($\pi\sigma_x\sigma_y$) が小さいほどルミノシティは大きい。ビームの粒子分布は位相空間内では楕円体をしている。ビームサイズは実空間への射影であり、エミッタンス ϵ と位相空間それぞれの軸への射影係数ベータ関数 β により $\sigma_i = (\beta_i \epsilon_i)^{1/2}$ で表される。 β は衝突点の光学設計とビームビーム衝突力

の線形成分による歪みで決まる。エミッタンスは線形理論 [1, 2]での不変量 J_i の平均値なので、陽子衝突器の場合初期条件で定まる。電子陽電子衝突機の場合は放射光放出による減衰とその量子的な励起により決まる [2, 3]。ビームビーム衝突力が強くなると、その非線形性ゆえ、 J_i が不変量でなくなり、拡散的振る舞いを示す。つまりエミッタンスが増大しルミノシティが期待値から劣化する。このエミッタンス増大は積分がシンプレクティックに行われてはじめて正しく予言できる。それゆえシンプレクティック性はビームの運動を調べる上できわめて重要である。

ここでは加速器におけるシンプレクティック性に関わる2つのことについて述べる。1つは加速器を構成する電磁石中の粒子を追跡するための一般的なシンプレクティック積分の手法について。2つ目はシンプレクティックとエミッタンス増大に関する典型的な問題として衝突加速器におけるビームビーム相互作用について述べる。

4.2.2 加速器におけるシンプレクティック積分

加速器の設計の手順は(1)線形力学をベースにしたビーム光学系、(2)その光学系の色 (エネルギー) 収差補正、(3)粒子が安定に周回しうる最大振幅 (力学口径) の評価となっている。これらはビーム強度ゼロでの加速器の設計を行うことであり、設計の第一歩である。これらの手順を行

うための計算機コードは世界中で開発されている。日本では KEK, 生田氏らによる SAD が使われている [4]。CERN では MAD, USA では研究所ごとに様々な計算機コードがある。

シンプレクティック積分による粒子トラッキングは手順 (3) で用いられる。加速器は小振幅で基準軌道の周りを線形振動するように設計されているが、大振幅で非線形が効いてきて周回しなくなる。力学口径は安定して粒子が周回する振幅で、加速器の入射設計、ビーム寿命の評価に必要である。シンプレクティックでない粒子は周回ごとに不変量である振幅がかわってしまうため正しい力学口径が得られない。

円形加速器におけるビーム粒子の運動を決めているのは、電磁石と空洞を使った高周波加速装置である。電磁石は x - y 方向のビーム軌道を規定する偏向電磁石とその軌道の周りに粒子を振動させるための収束用 4 極磁石、高次効果補正用の 6 極、8 極磁石が使われている。偏向磁石は一樣磁場をもつので、解がわかっている (円弧にそった運動)。あるいは対応する偏向曲率をもった曲線座標系を用いた運動方程式を解く。収束 4 極、高次 6 極、8 極磁石では直交座標を用いる。直交座標でのハミルトニアンは以下のように表される。加速器では時間変数は進行方向位置 s を使い、運動量は設計運動量で規格化されている ($p_{xy} = P_{xy}/P_0$)。第 3 の運動量は運動量偏差 $\delta = (P - P_0)/P_0$ であり、正準共役座標は進行方向中心からの距離 (前方が正、到着時刻進み) で $z = c(t_0 - t)$ である。

$$H = 1 + \delta - \sqrt{(1 + \delta)^2 - (p_x - \hat{A}_x)^2 - (p_y - \hat{A}_y)^2} - \hat{A}_s$$

$$\hat{A}_i = eA_i/P_0 \quad (2)$$

前述の電磁石は \hat{A}_s を多重極展開することで表される。

$$\hat{A}_s = \frac{k_{n-1}}{n!} Re(x + iy)^n \quad (3)$$

$$\hat{A}_x = \hat{A}_y = 0$$

積分は H を 2 次以下 H_2 と、3 次以上 $H_{\geq 3}$ にわけ、2 次以下に関して厳密解を求め、3 次以上を 2 次のシンプレクティック積分を行うのが、おおむね主流である。具体例として 4 極磁石について述べる。

$$H = 1 + \delta - \sqrt{(1 + \delta)^2 - p_x^2 - p_y^2} - \frac{k_1}{2}(x^2 - y^2) \quad (4)$$

$$H_2 = \frac{p_x^2}{2(1 + \delta)} + \frac{p_y^2}{2(1 + \delta)} - \frac{k_1}{2}(x^2 - y^2) \quad (5)$$

H_2 に関する運動方程式は x , p_x , y , p_y に関して線形であり解くことができる。

$$\begin{pmatrix} x \\ p_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(\sqrt{k_\delta} s) & \sinh(\sqrt{k_\delta} s)/\sqrt{k_\delta} \\ \sqrt{k_\delta} \sinh(\sqrt{k_\delta} s) & \cosh(\sqrt{k_\delta} s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p_x \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} y \\ p_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\sqrt{k_\delta} s) & \sin(\sqrt{k_\delta} s)/\sqrt{k_\delta} \\ -\sqrt{k_\delta} \sin(\sqrt{k_\delta} s) & \cos(\sqrt{k_\delta} s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ p_y \end{pmatrix} \quad (6)$$

ここで $K_\delta = K_1(1 + \delta)$ である。線形変換部分を除いたハミ

ルトニアン ($H_{\geq 3} = H - H_2$) に対して、シンプレクティック積分を行う。先ほどの線形変換を $\exp(-:H_2:s)$ で表すと、

$$M = e^{-:H_2:s/2} e^{-:H_{\geq 3}:s} e^{-:H_2:s/2} \quad (7)$$

により積分される。

6 極磁石では運動量のみ項と座標のみ項に分割し、 $H = H_D + H_S$

$$H_D = 1 + \delta - \sqrt{(1 + \delta)^2 - p_x^2 - p_y^2} \quad (8)$$

$$H_S = -\frac{k_2}{6}(x^3 - 3xy^2) \quad (9)$$

2 次のシンプレクティック積分を行う。

$$M = e^{-:H_D:s/2} e^{-:H_S:s} e^{-:H_D:s/2} \quad (10)$$

最近の磁石配置では 6 極成分を完全にキャンセルするような配置をするので、その場合の残余の評価のために 6 極磁石の厚みを考慮する必要がある。そのために 2 次の積分を s を複数に区切って繰り返したり、4 次の積分にしたりする。

磁石端部では複雑な磁場分布になるが、階段関数的に磁場が変化するなどとして、近似的にマクスウェル方程式を満たすハミルトニアンを求め運動量を積分している。実際は幅を持って磁場は変化しているが、積分として粒子が感じる磁場は階段的でも同じなので大きな差はないとしている。別の方法として、磁場測定結果を用い、端部に多極展開した磁石を実効的に並べる場合もある。マクスウェル方程式は近似してもシンプレクティック性は厳密に行うことが基本方針である。

その他に高エネルギー測定器に使用されているソレノイド磁石、放射光用加速器に使用されている単一波長の放射光を発生させるアンジュレータがある。それらのベクトルポテンシャルは以下のように表される。

$$A_x = b_s y, A_y = -b_s x, A_s = 0 \quad (11)$$

$$A_x = b_y \sin ks, A_y = 0, A_s = 0 \quad (12)$$

式 (5) のように H を p - A の 2 次で近似し、母関数を用いた正準変換から、陰関数関係を解く手法が行われている。

高周波加速装置は厚さゼロとし以下で表す。この積分は単純に行うことができる。

$$A_s = eV \sin kz \delta(s - s_{rf}) \quad (13)$$

このように加速器の要素毎にシンプレクティック積分を行うことで、加速器内でのビーム粒子の運動を求めることができる。

電子リングの場合、ビーム入射の際に大振幅のビーム粒子を受け入れるため、力学口径はビームサイズ (σ) に対し最低 30 倍 (30σ) くらいに非線形磁石を調整し設計している。LHC では磁石の非線形が顕著になる限界まで磁場を上げ、ビームエネルギーを上げるので 10σ くらいである。いずれにせよ、ビームが定常状態に達した状態で 5σ 以下の振

幅の粒子は線形領域で振動し、磁石の非線形でエミッタンス増大は起きない。ビーム強度が大きくなった際に、衝突加速器においてはビームビーム衝突力が、小強度陽子加速器においては空間電荷力が強くなる。それらの力はビーム粒子の運動振幅に対し非線形であるためエミッタンス増大を引き起こす。その増大を正しく評価するために基礎となる磁石、加速装置配列でのシンプレクティック積分は最低限保証されていなければならないし、ビームビーム衝突力、空間電荷力もシンプレクティックに扱われなければならない。

放射減衰、放射励起について触れておく。電子、陽電子が偏向磁石で曲げられる際、シンクロトロン放射光を放出して減衰すると同時に、放出される光子の不連続なエネルギー変化による励起であり、非シンプレクティックな現象である。減衰時間はKEKBでは $\tau=4000$ 周であり、主に水平方向の励起 ($\langle \Delta x^2 \rangle = 2\sigma_x^2/\tau$) により、ほぼ設計平衡エミッタンスをもつガウス分布に落ち着く。垂直エミッタンスは磁石のエラー補正で決まるが、だいたい水平の1%から0.2%である。そのため電子ビームは薄い楕円分布をしている。一方陽子は放射光とは無縁なので、生成されたビーム形状をそのまま引き次ぐ。途中で確率的な現象もあるので、円形のガウス分布に近い場合が多い。

4.2.3 円形衝突加速器におけるビームビーム効果

ビーム同士の衝突による長距離クーロン相互作用によるビームへの影響をビームビーム効果という[5]。衝突加速器のビームは超相対論的であり、電磁場は x - y 面内に誘起される。よって衝突ビームの誘起する電磁場は2次元スカラーポテンシャルで表すことができる。最近の衝突加速器はビームの収束(waist)領域に比べ、パンチ長が同じか長い、あるいは交差角衝突をする場合もあるので、パンチ長を考慮する必要がある。衝突ビーム(パンチ)は進行方向にそって分割する(z_i)。各スライスの x - y 分布

$$\Delta_{\perp}\phi(x, y; s) = \frac{2r_e \rho(x, y; s)}{\gamma p_0} \quad (14)$$

r_e は古典電子半径 2.81794×10^{-15} m, γ は電子の相対論的因子である。ポテンシャルは2次元(x - y) Particle In Cell法を用いて解く。境界条件は衝突加速器の場合ビームパイプに比べビームが小さいため、グリーン関数を用いて解く。運動はポテンシャルで表されているため微分を適切に行えば、 x - y の運動に関するシンプレクティック条件は満たされる。 z にある粒子がスライス(z_i)と衝突する場所は $s=(z-z_i)/2$ である。ポテンシャルはビームのウエストのため s によって変わっていく。 s は z の関数なので z 方向の運動量変化が生じる。こうして積分は3次元的にシンプレクティックになる。

$$\begin{aligned} \Delta p_{\perp} &= -\nabla_{\perp}\phi(x, y; s(z)) \\ \Delta p_z &= -\frac{\partial\phi(x, y; s(z))}{\partial z} \end{aligned} \quad (15)$$

粒子の衝突する s ごとにポテンシャルを計算するのは大変なのでスライス間での衝突で取りうる s とそこでのポテンシャルを求めておいて内挿する[6]。

両ビームは衝突相互作用が弱い場合、ガウス分布を保つ。電子は衝突点でガウス分布をした陽電子ビームと衝突する(逆も同様)。2次元ガウス分布による運動量変化は解析的に求めることができる。そこで片方のビームを固定したガウス分布としてシミュレーションすることもある(weak-strong model)。

リングの周回は前節のように加速器要素を個々に積分していくのが正確だが、計算の短縮のために($x, p_x, y, p_y, z, \delta$)に関する線形変換だけを使うことが多い。電子陽電子衝突器の場合エミッタンスに非線形が効く力学口径にくらべ非常に小さい($<1/30$)ため、エミッタンスを論じる領域では線形変換と考えられるからである。

$$M = \begin{pmatrix} M_x & 0 & 0 \\ 0 & M_y & 0 \\ 0 & 0 & M_z \end{pmatrix} \quad (16)$$

ここで M_i は 2×2 シンプレクティック行列で $|M_i|=1$, $\gamma_i = (1+\alpha_i^2)/\beta_i$ を満たす。

$$M_i = \begin{pmatrix} \cos \mu_i + \alpha_i \sin \mu_i & \beta_i \sin \mu_i \\ -\gamma_i \sin \mu_i & \cos \mu_i - \alpha_i \sin \mu_i \end{pmatrix} \quad (17)$$

ここで $\nu_i = \mu_i/2\pi$ をチューンという。 $\gamma_i = (1+\alpha_i^2)/\beta_i$ 衝突ビームを電荷 N , サイズ(σ_x, σ_y)の電荷分布と考えると、運動量変化の線形部分は以下のように書ける[5]。

$$(\Delta p_x, \Delta p_y) \approx -\frac{2Nr_e}{\gamma} \frac{1}{(\sigma_x + \sigma_y)} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix} \quad (18)$$

y 部分の行列で表すと以下である。

$$M_{BB} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -4\pi\Delta\nu_y/\beta_y & 1 \end{pmatrix} \quad (19)$$

この線形力は周回行列のチューンをずらす(チューンシフト)。チューンシフトは以下のようにあらわされる。

$$\Delta\nu_{xy} = -\frac{\Delta p_{xy}}{x \text{ or } y} \frac{\beta_{xy}}{4\pi} = \frac{Nr_e}{2\pi\gamma} \frac{\beta_{xy}}{(\sigma_x + \sigma_y)\sigma_{xy}} \quad (20)$$

実際のビームはガウス分布ないし衝突力によりガウス分布から多少ずれていることも考えられる。いずれにしても衝突力は振幅に対し非線形力である。十分距離が離れば力は $1/r$ で減衰するので、チューンシフトは遠方で0になる。つまり、チューンシフトはチューン広がりと同じである。このような非線形振動系ではチューンの整数倍の和ないし差が整数、いわゆる共鳴条件に近づくと、非線形力によりカオスが生じ、それぞれの方向の振幅が不変量でなくなり、エミッタンス増大が起こる。この現象は相手ビームのポテンシャルの中での単一粒子の運動として考えて定性的に正しいので、インコヒーレント効果といえる。電子、陽電子数を増やしていくと、このようなインコヒーレントなエミッタンス増大が起き、チューンシフトが飽和状態に

なってしまう。一般にエミッタンス増大はエミッタンスが最も小さな垂直 (y) 方向に現れる。チューンシフトは式 (1), (20) から

$$\Delta\nu_y = \frac{2r_e\beta_y}{N\gamma_{\text{frep}}}L \quad (21)$$

と書ける。ルミノシティは両ビームのバンチ内粒子数 (N) の積 (両ビーム同じなら N^2) で増えていくはずが、ある値以上では粒子数 (N) に比例してしか上がらなくなり、さらには増やしても上がらなくなる。前者の状態はチューンシフトが飽和した状態で、後者になると減少に転じることである。このチューンシフトの飽和現象は非線形振動系として一般的な問題である。加速器の世界ではチューンシフトが 0.1 を超えることは非常に難しい。放射光放出減衰が大きな CERN-LEP (振幅減衰時間100周) で 0.1 程度まで達したが、 $\tau=4000$ 周の減衰時間の KEKB では 0.09、さらに減衰が遅い加速器では 0.03-0.06 などである。

衝突加速器における長年のテーマはこのチューンシフト限界がどこにあるか、どうすれば高めることができるかである。加速器の周回行列が区分対角からずれるとチューンシフト限界は下がる。y 方向ビームサイズが小さいので、x-z からの回り込みがルミノシティに影響する。KEKB における日々の加速器チューニングの大半の時間はこの変換行列を区分対角化させることに費やされた。衝突点では $\alpha_{xy}=0$ とし、ビームサイズ、 β_{xy} のウェストにとる。周回の線形変換である、式 (17) (19) の積は β_i を含まない。つまり β_i は規格化のパラメータでチューンシフト限界に対して、重要なのは区分対角化されているかということと、チューンの選択ということになる。

電子、陽電子円形加速器では y 方向のエミッタンス ε_y は磁石エラーによるが、 ε_x の 1/100 以下は十分達成可能である。ビームの衝突点では位相空間のアスペクト比 β_y を 1/100 位に絞るよう設計する。ビームサイズは $\sigma_i = (\varepsilon_i\beta_i)^{1/2}$ でなので、y ビームサイズ σ_y が水平 σ_x に比べ 1/100 以下になっている。そのガウス分布によるビームビーム衝突力を図 1 に示す。(a) は x に対する Δp_x を $y/\sigma_y = 0, 1, 2, 5$ に関してプロットした。図上区別できないほど重なっている。一方 (b) は y に対する Δp_y を $x/\sigma_x = 0, 1, 2, 3$ に関してプロットした。x に関して著しく y に対する Δp_y が変わっている。x 方向の力は x のみに依存するが、y 方向の力は x, y 両方に依存することがわかる。このことは、表現はハミルトニアンではないが、x の運動は x だけで閉じている一方で、y の運動は x の運動に影響されやすいということである。また x, y それぞれ正負に関し

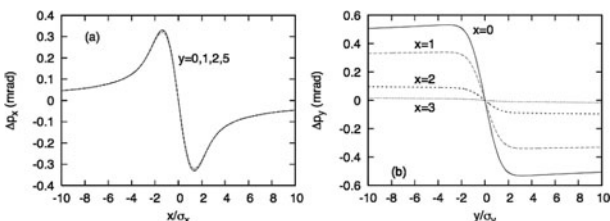


図 1 ガウス分布ビームによるビームビーム衝突力。 $\sigma_x/\sigma_y = 100$

て力は対称的である。

まず x の運動を見ていく。図 1 でわかるように x に対して非線形で、加速器の周長 C に対して周期的である。1 自由度時間依存系では $s = nC$ でのポアンカレプロットを描くのは常套である。パラメータはチューンだけである図 2 に $\nu_x = 0.503, 0.510, 0.530, 0.550$ におけるプロットを示す。チューンを上げるにしたがって、共鳴、カオスの振る舞いが見えてくる。半整数より上で対称的な力が共鳴を起こすチューンは $\nu_x = (n+1)/2n = 0.75, 0.667, 0.625, 0.6, 0.583, 0.57, 0.5625, 0.556, 0.55, 0.5454, \dots$ である。半整数に近づくほど共鳴は高次になる。非線形力でチューンが広がり、共鳴条件が満たされる振幅で、共鳴現象が起こる。位相空間でセパトリックスが見え、その周辺がカオス的になる。セパトリックス径方向の幅、共鳴幅は共鳴の強さ (ポテンシャルのフーリエ成分) とチューンのスロープ ($d\nu_x/dJ_x$) で決まる。図右下 $\nu_x = 0.55$ ではいくつかの共鳴が重なって、広い領域でカオス的になっている。

チューンシフト $\Delta\nu_{xy}$ は式 (20) で与えられるが、この式は $\Delta\nu_{xy}$ が小さいときの極限で、チューンが半整数に近づくと正しくない。 $M_{BB}M_{x,y}$ の固有値から $\nu_{x,y,BB}$ を計算し、実際のチューンシフトをプロットすると図 3 のようになる。チューンが半整数に近いとチューンシフトも小さくなる。

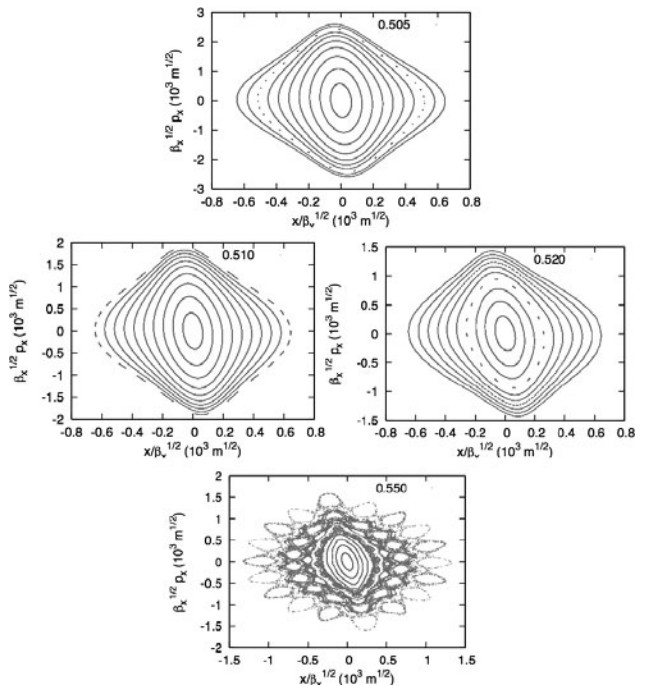


図 2 振幅 $0.5 - 5\sigma_x$ の粒子運動のポアンカレプロット。衝突ビーム条件 $\sigma_x \times \sigma_y = 104 \mu\text{m} \times 1.04 \mu\text{m}$, $\Delta\nu_{xy} = 0.2$

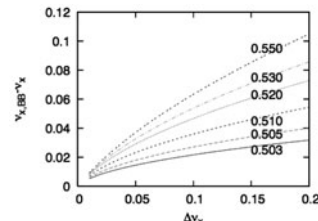


図 3 与えたチューンシフト値に対する実際のチューンシフト値。

半整数に近づくほど、共鳴は高次しか効かなくなるため、 x 方向の運動の可積分性が上がってくる。一方でチューンを上げてカオスが目立ってきて、1 自由度の運動のため、振幅は KAM 曲線に束縛される。そのため x 方向のエミッタンスは著しく悪化はしない。

次に y の運動について述べる。先に述べたように y 方向の力は x に大きく依存する。ビーム形状が y 方向にうすく衝突中のビーム粒子の振動が大きい (振動位相角 $\varphi = (4\pi\xi_i\sigma_z/\beta_i)^{1/2}$)。そのため半整数に近づけるとシンクロトロン振動と結合しお辞儀運動をしてしまう。そのため ν_y はシンクロトロンチューン 0.025 より大きくとる。 $x=0$ における $y=0.5-5\sigma_y$ の粒子に対する位相空間プロットを 図 4 に示す。半整数から離せば共鳴ははっきり見えてくる。共鳴の重なりは見えない。図 1 のように $x \neq 0$ では力が弱くなるため、さらに x が振動するため、共鳴位置が振動する。

ここでチューンを $(\nu_x, \nu_y) = (0.505, 0.54)$ に注目しよう。 x - y ともに 3σ 以内に共鳴が見られない。 x の変化に対して x を固定させ、 y の位相空間をいくつか描いても同様な図が得られる。 $y-p_y-x$ での 3 次元プロットは 2 自由度系での可積分性を直接見ることができる。図 5 に x - y ともに 3σ の初期値の粒子の運動を 3 次元位相空間で示す。概ね軌跡が厚さゼロの曲面を描いていることがわかる。これは可積

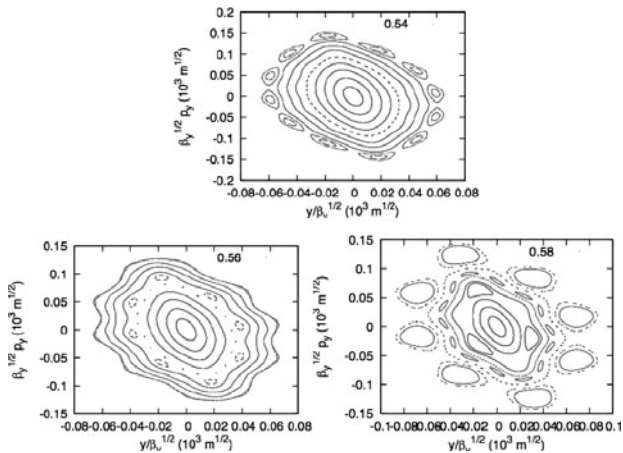


図 4 振幅 $0.5-5\sigma_y$ の粒子運動のポアンカレプロット。衝突ビーム条件 $\sigma_x \times \sigma_y = 104 \mu\text{m} \times 1.04 \mu\text{m}$, $\Delta\nu_{xy} = 0.2$

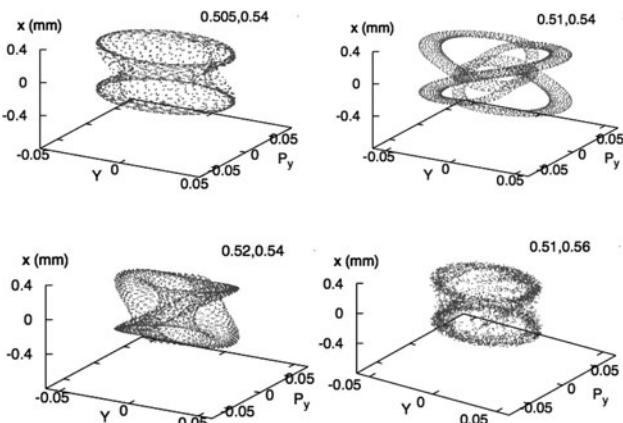


図 5 振幅 $3\sigma_x, 3\sigma_y$ の粒子の y - p_y - x 空間での運動。

分であることを意味する。(0.51, 0.56)では図右下のようになり、不可積分になっている。(0.51, 0.54)でも可積分であるが x - y の運動に相関が出ている。これは $\nu_x = \nu_y$ の共鳴に近いためである。図には $2\sigma_x$ の粒子の軌道も描いているが、 x に近くに重なりを持っている。このような場合、放射励起により x 方向にジャンプした際、 y 方向に大きな軌道に乗り移ることで y 方向エミッタンスが大きくなる。

次にマクロ粒子を設計エミッタンスに対応するガウス分布に発生させ、多周回トラッキングしエミッタンスの増大をシミュレーションする[7]。初期エミッタンスは $\epsilon_{x,y} = 1.8 \times 10^{-8}, 1.8 \times 10^{-10} \text{ m}$, $\beta_{x,y} = 600, 6 \text{ mm}$, ビームサイズは $\sigma_y = (\beta_y \epsilon_y)^{1/2} = 1.04 \mu\text{m}$ である。図 6 に周回ごとのエミッタンスの変化を示す。左図はシンプレクティック系、右図は放射減衰、放射励起を考慮した結果である。放射減衰は 4000 周である。(0.505-0.51, 0.54)は放射光効果の有無にかかわらずエミッタンス増大が小さい。これは図 5 で見られる可積分性から理解できる。(0.52, 0.54)は増大は少ないが、トラッキング開始直後のエミッタンスが大きい。図 5 左下に見られる、 X - y 結合ミスマッチによるものと考えられる。初期分布を設計エミッタンスの 6 次元楕円体ガウス分布としたが、位相空間が x - y に関して強く結合しているため、周回直後に x の振動が y に回り込んでしまう。可積分性は図 5 でみられるので、シンプレクティック系ではエミッタンス増大は少ない。一方シンプレクティックを破る乱数的な放射減衰励起を入れた場合、粒子の軌跡が可積分に近いとはいえ、 x - y 入り乱れた位相空間構造なので x 方向の励起が y に回ってしまい、エミッタンス増大が起こる。 $\nu_y = 0.57$ は放射減衰励起の有無にかかわらずエミッタンス増大が見られる。放射励起によるシンプレクティック性の破れはエミッタンス増大を増幅させる。この図は放射減衰励起がない方がいいということの意味しない。放射減衰がなければずっと長時間 (数時間, 10^8 周) のエミッタンス増大を論じなければならない。

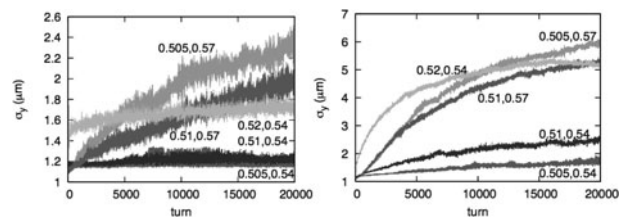


図 6 垂直エミッタンスの増大。左図はシンプレクティック系、右図は放射減衰、励起を考慮。

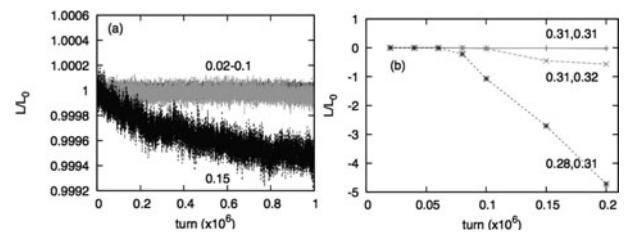


図 7 円形ビームでのエミッタンス増大によるルミノシティ低下 (LHC におけるシミュレーション例)。

LHCでもビームビーム限界は重要な問題である。LHCなどの陽子衝突器では放射光の効果が無視できるのでシンプレクティック系である。放射減衰がないので長時間のシミュレーションが必要である。KEKBでは扁平ビーム衝突であるが、LHCでは放射減衰励起がないので円形ビームで衝突させている。円形ビームでは $v_x = v_y$ とすることで角運動量が保存され、運動が r 方向だけになる。実際には $v_x \approx v_y$ で加速器を運転すると、水平、垂直のチューンがちよっとした変動で入れ替わったり、不安定になるので、0.01くらい離している。ちなみにLHCでは0.31, 0.32である(図7)。

4.2.4 まとめ

加速器における粒子運動のシンプレクティック積分の概略と、加速器の性能を左右するエミッタンス増大現象について述べた。運動の $10^4 - 10^9$ 周期の長時間安定性を要求するため、シンプレクティック積分は、加速器設計の場で常識的に使われている。

エミッタンス増大に対する理解と対策は加速器の高強度化にともない、ますます重要度を増している。ビームビーム相互作用以外にJ-PARCなどの高強度加速器における空

間電荷力はビームビーム衝突力と同型の力で、エミッタンス増大によりビームロスが起り、強度限界として性能を左右している。基本的には設計時にチューンシフトを小さく取ればいいが、概してハードウェアが大型化してしまう。与えられた条件でどこまでチューンシフトを大きくできるかがビーム物理の腕の見せ所である。

参考文献

- [1] E.D. Courant and H.S. Snyder, *Ann. Phys.* **3**, 1 (1958).
- [2] Y. Kamiya, OHO'84, 高エネルギー加速器セミナー (1984).
- [3] M. Sands, *The physics of electron storage rings*, SLAC-121 (1970).
- [4] <http://acc-physics.kek.jp/SAD/>
- [5] 多和田正文: OHO'04 高エネルギー加速器セミナー (2004).
- [6] K. Ohmi *et al.*, *Phys. Rev. ST-AB* **7**, 104401 (2004).
- [7] K. Ohmi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 214801 (2004).

全般的な教科書

- [8] OHO 高エネルギー加速器セミナー, テキストシリーズ, 高エネルギー加速器科学研究奨励会, 1984-2014.



おおみ かず ひと
大見 和 史

高エネルギー加速器研究機構, 加速器研究施設教授。筑波大学物理学研究科博士課程修了。計算機で加速器の挙動を理解して、改善策を言い当てるのが趣味と実益。当初

田舎といわれたつくばに36年も在住。自転車で通勤, 畑を耕したり, ハイキングを楽しんでいます。収穫物を料理しながら, ちびちび飲むのも至福の時。



4. 応用

4.3 分子動力学における能勢熱浴とシンプレクティック数値積分

4.3 The Nosé Thermostat and Symplectic Integrator in Molecular Dynamics

伊藤 篤史

ITO Atsushi M.

核融合科学研究所ヘリカル研究部

(原稿受付：2014年12月6日)

分子動力学法では温度や圧力などを制御して現実環境を模擬することが要求される。ここでは温度制御のための代表的な手法として能勢熱浴を紹介する。能勢熱浴は粒子の位置・運動量に加えて、熱浴変数を正準変数に加えた拡張 Hamiltonian を定義することで系の力学を記述する。粒子の全エネルギーは保存量ではなくなるが、粒子がカノニカル分布を取るように運動する。また、拡張 Hamiltonian に対応した symplectic 数値積分法が導出できる。拡張 Hamiltonian 系の応用は幅広く、プラズマ分野にとっても有用な方法となることを期待する。

Keywords:

symplectic integrator, Nosé thermostat, molecular dynamics, temperature control, simulation

4.3 分子動力学における能勢熱浴とシンプレクティック数値積分

原子・分子スケールの現象を取り扱うシミュレーション手法の一つに分子動力学法 (Molecular Dynamics: MD) がある。核融合研究においては材料研究等において用いられる。

MD では対象となる原子の移動や振動のタイムスケールが非常に短いため、タイムステップとして 10^{-18} s から 10^{-16} s という非常に小さな値を設定することになる。それと関連して、実際の時間発展では 10^8 ステップ以上の時間積分を行うことがざらである。そのため、長期に渡る数値安定性を数学的に担保できる symplectic 数値積分法は必要不可欠な技術であり、MD 分野においては大変普及が進んでいる。

MD の世界で symplectic 数値積分法が普及した理由はもう一つある。それは能勢熱浴 [1, 2] に代表される拡張 Hamiltonian 系の存在である。

材料物質を対象としたシミュレーションでは、実験との対応のためにも、温度や圧力といった環境の再現が重要である。そのような需要の中、symplectic 差分法より一足早い 1980 年代に、Andersen による圧力制御法 [3] や能勢による温度制御法 (能勢熱浴) が相次いで提案された。中でも能勢熱浴は、定温環境を実現するだけでなく、カノニカル分布を数学的に導出可能であることが大変興味深い点である。これらの手法により、MD の現実の系への適応力は飛躍的に向上し、様々な分野へ応用が進む礎となった。

Andersen の圧力制御法や能勢熱浴法は、Hamiltonian

National Institute for Fusion Science, Toki, GIFU 509-5292, Japan

をもつ保存系であったことから、拡張 Hamiltonian 系と呼ばれ、その後も数々の拡張 Hamiltonian が提案された。拡張 Hamiltonian 系における保存量は我々が住んでいる“現実”のエネルギーとは異なるが、シミュレーションをする上で保存量が存在するというのは数値安定性の確認の意味で大変有用である。

1990 年になり、吉田 [4] や鈴木 [5] によって symplectic 数値積分法が提案された。symplectic 数値積分法は Hamiltonian 系に対する時間発展差分方程式を導出するものであるが、それは上記の拡張 Hamiltonian 系であっても対象となる。そのため、拡張 Hamiltonian 系の圧力制御や温度制御の MD を行う際には、合わせて symplectic 数値積分法を用いるのが慣習となっている。

さて、ここからは具体的な拡張 Hamiltonian 系の例として、MD 分野で最も魅力的な手法である能勢熱浴とその symplectic 数値積分法を紹介しよう。

まず、能勢熱浴を実現する能勢の Hamiltonian は次で定義される：

$$H_N = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i s^2} + U(\mathbf{r}) + \frac{p_s^2}{2Q} + g k_B T \log s \quad (1)$$

ここで、粒子の位置 \mathbf{r}_i 、運動量 \mathbf{p}_i に加えて、熱浴自由度 s 、およびその共役運動量 p_s が正準変数である。加えて、粒子の質量 m_i 、熱浴質量 Q 、系の自由度 g 、ボルツマン定数 k_B 、設定温度 T がパラメータとなる。

ここで、能勢の Hamiltonian における \mathbf{r}_i 、 \mathbf{p}_i は“仮想系”の位置と運動量であり、我々の住む“現実系”の位置 \mathbf{r}'_i

author's e-mail: ito.atsushi@nifs.ac.jp

と運動量 \mathbf{p}'_i とは次の関係があるものとする：

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i \quad (2)$$

$$\mathbf{p}'_i = \frac{\mathbf{p}_i}{s} \quad (3)$$

ただし、仮想系と現実系でどちらにプライム記号を付けるかは、論文や書籍によってもバラつきがあるので注意されたし。

さて、位置座標はそのままだが、運動量は $1/s$ でスケールされている。これは、空間スケールは変えずに、時間スケールを変えたことに対応する。すなわち、仮想系の(正準変数の従う)時間間隔 dt と、現実系の時間間隔 dt' の間にも以下の変換を仮定する：

$$dt' = \frac{1}{s} dt \quad (4)$$

ここで、時間を $1/s$ 倍したにもかかわらず、[空間/時間]の次元をもつ運動量は何故 s 倍ではないのかと思う読者がいるかもしれない。しかし、[空間/時間]の次元をもつ量は速度であり、上記の変換により速度は $d\mathbf{r}'_i/dt' = s d\mathbf{r}_i/dt$ と確かに s 倍される。ここで、Lagrangian の運動エネルギー項が $K = \sum_i m_i (d\mathbf{r}'_i/dt')^2/2 = \sum_i m_i (s d\mathbf{r}_i/dt)^2/2$ であることを考えれば、仮想系の運動量は定義より

$$\mathbf{p}_i = \frac{\partial K}{\partial (d\mathbf{r}_i/dt)} = s^2 m_i (d\mathbf{r}_i/dt) \text{ となり、現実系の運動量 } \mathbf{p}'_i = m_i (d\mathbf{r}'_i/dt') \text{ との間に式(3)の変換が課されるのである。}$$

それでは、能勢の Hamiltonian においてどのように温度が制御されるのかをみるために、運動方程式を導出しよう。式(1)の Hamiltonian から正準変数 \mathbf{r}_i , \mathbf{p}_i , s , p_s に関する正準運動方程式を導くと

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i s^2} \quad (5)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (6)$$

$$\frac{ds}{dt} = \frac{p_s}{Q} \quad (7)$$

$$\frac{dp_s}{dt} = \frac{1}{s} \left[\sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i s^2} - g k_B T \right] \quad (8)$$

となる。式(8)において、運動エネルギーと設定温度の差に反応して、熱浴変数 p_s 、さらには s が変化することが見て取れる。ただし、 N 粒子系であれば、 $g = 3N$ と設定する。設定温度よりも運動エネルギーが大きい場合は、熱浴変数 s が大きくなることで運動量をスケールして運動エネルギーを減少させ、一方で設定温度よりも運動エネルギーが小さい場合は、熱浴変数 s が小さくなることで運動エネルギーを増加させるのである。

さらにわかりやすくするために、ここから現実系の変数 \mathbf{r}'_i , \mathbf{p}'_i , s' , $p'_s = p_s$ に対する運動方程式へ変換しよう。

式(4)から、 $\frac{d}{dt'} = \frac{dt}{dt'} \frac{d}{dt} = s' \frac{d}{dt}$ であることを用いれば、

$$\frac{d\mathbf{r}'_i}{dt'} = s' \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\mathbf{p}'_i}{m_i} \quad (9)$$

$$\frac{d\mathbf{p}'_i}{dt'} = s' \frac{d(\mathbf{p}_i/s)}{dt} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'_i} - \frac{p'_s}{Q} \mathbf{p}'_i \quad (10)$$

$$\frac{ds'}{dt'} = s' \frac{p'_s}{Q} \quad (11)$$

$$\frac{dp'_s}{dt'} = \left[\sum_i \frac{\mathbf{p}'_i{}^2}{m_i} - g k_B T \right] \quad (12)$$

が得られる。これらを熱浴のない通常の粒子の運動方程式と比較してみると、粒子の位置座標に関する運動方程式は全く変わらない。粒子の運動量に関する運動方程式は、ちょうど抵抗係数を p'_s/Q とした抵抗が掛かったものになっている。さらに、抵抗係数 p'_s/Q は、式(12)によって運動エネルギーと設定温度の差を反映して正負の値を取り、運動エネルギーが設定温度よりも高い場合は抵抗として働き、運動エネルギーが設定温度よりも低い場合は加速機構として働く。このようにして、能勢の Hamiltonian に従う粒子運動は、運動エネルギーが設定温度付近に留まるように熱浴変数によって制御されることがわかる。

ところで、現実系の変数の運動方程式だけを見るなら、変数 s' は式(11)によるそれ自身の発展を除いて必要ない。そこで、抵抗変数 $\xi = p'_s/Q$ とおいて、変数 \mathbf{r}'_i , \mathbf{p}'_i , ξ だけの運動方程式を用いて温度制御を行う Nosé-Hoover 熱浴[6]も有名である。

注意点を上げておくと、能勢熱浴の保存量は式(1)の Hamiltonian の“値”であって(仮想系のエネルギーといってもいいかもしれないが)、現実系の粒子の全エネルギー、すなわち、運動エネルギー K とポテンシャルエネルギー $U(\mathbf{r}')$ の和は保存しない。しかし、全エネルギーの保存を捨てても、温度を制御したい場合は応用研究においては多々ある。定温実験環境はそもそもエネルギー保存系ではないのだから。

それよりも、能勢熱浴の魅力的な点は、定温環境の実現に加えて、粒子のカノニカル分布を実現できる点にある。symplectic 数値積分法へ移る前に、このことをみておこう。

式(1)の能勢の Hamiltonian は $6N+2$ 次元位相空間の関数である。それを強調する意味で改めて $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s, p_s)$ と書くことにする。ここで、エルゴード仮定が成り立つとすれば、系の状態を示す位相点は $6N+2$ 次元位相空間上でエネルギー一定の曲面上を一様に塗りつぶすように運動することが期待される。すなわち、この位相点によるマイクロカノニカル集団の分配関数は次で与えられる：

$$Z = \frac{1}{N!} \int d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N ds dp_s \delta[H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s, p_s) - E] \quad (13)$$

ただし、位相空間のエネルギー一定値を E とした。続いて、積分変数を仮想系の変数 \mathbf{r}_i , \mathbf{p}_i , s , p_s から現実系の変数 \mathbf{r}'_i , \mathbf{p}'_i , s' , p'_s へと変換する。変数変換における Jacobian を考えれば、

$$Z = \frac{1}{N!} \int d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N ds' dp'_s \times s'^{3N} \delta[H(\mathbf{r}', s', \mathbf{p}', p'_s) - E] \quad (14)$$

となる。ここで、デルタ関数の公式

$$\delta[f(s')] = \frac{\delta(s' - s_0)}{|f'(s_0)|} \quad (15)$$

を用いる。ただし、 s_0 は $f(s_0) = 0$ の解である。式(14)のデルタ関数を変数 s' に関するものとみなせば、

$$s_0 = \exp \left\{ -\frac{1}{gk_B T} \left[\sum_i \frac{\mathbf{p}_i'^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}') + \frac{p_s'^2}{2Q} - E \right] \right\} \quad (16)$$

である。これを代入して、熱浴変数についての積分を実行すると、

$$Z = \frac{1}{gk_B TN!} \int d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N dp'_s \times \exp \left\{ -\frac{3N+1}{gk_B T} \left[\sum_i \frac{\mathbf{p}_i'^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}') + \frac{p_s'^2}{2Q} - E \right] \right\} = \frac{C}{N!} \int d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \left[\sum_i \frac{\mathbf{p}_i'^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}') \right] \right\} \quad (17)$$

が得られる。ただし、今度は $g = 3N+1$ とおき、

$$C = \frac{1}{g} \left(\frac{2\pi Q}{k_B T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{E}{k_B T} \right) \quad (18)$$

とした。こうして、現実系の変数だけの分配関数は式(17)の様にカノニカル分布を取ることができる。すなわち、能勢熱浴を用いて時間発展のシミュレーションを行い、物理量の粒子平均を取れば、それは NVT アンサンブル平均に等しいことが期待できる。

ここで、誤解をなくすために、いくつか注意事項を述べておく。まず、上述の変形によってカノニカル分布を満たすのはあくまで正準変数がエルゴード仮定を満たす場合である。これまでの熱浴の研究から、シミュレーション可能な計算時間の範囲では能勢熱浴は必ずしもエルゴード性を持たないことがわかっており、カノニカル分布を実現できない場合がある。それを解決する手段としては、Nosé-Hoover 熱浴形式としてから、熱浴の運動量にさらに別の熱浴を連続して連ねる Nosé-Hoover-chain 熱浴[7]等の方法がある。

次に、定数 g に関して、運動方程式において温度制御する際には、式(8)もしくは式(12)において、 $g = 3N$ とするのが理想であると述べた。しかし、カノニカル分布の実現においては、 $g = 3N+1$ とすることを必要とした。この矛盾は、仮想系と現実系間の時間のずれに起因するものである。しかし、能勢熱浴の発展形である、Nosé-Poincaré 熱浴[8,9]を用いれば、時間のずれは解消し、定数 g に関する矛盾も解消する。

さて、いよいよ symplectic 数値積分法に進もう。

能勢熱浴の symplectic 数値積分法では、式(1)の Hamiltonian を次の部分 Hamiltonian に分割する。

$$H_1 = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i s^2} + gk_B T \log s \quad (19)$$

$$H_2 = U(\mathbf{r}) + \frac{p_s^2}{2Q} \quad (20)$$

さらに、これらの部分 Hamiltonian に対応した部分 Liouvillian は

$$iL_1 = \sum_j \frac{\mathbf{p}_j}{m_j s^2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_j} + \left[\sum_j \frac{\mathbf{p}_j^2}{m_j s^3} - \frac{gk_B T}{s} \right] \frac{\partial}{\partial p_s} \quad (21)$$

$$iL_2 = -\sum_j \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} + \frac{p_s}{Q} \frac{\partial}{\partial s} \quad (22)$$

となる。

部分 Liouvillian を用いれば、実際の時間発展差分方程式を得ることができる。任意の物理量 A に関して微小時間 τ だけ時間を進める操作は Liouvillian iL を用いて

$$A(t+\tau) = \exp \left(\int_t^{t+\tau} iL dt' \right) A(t) \sim \exp(\tau iL_1 + \tau iL_2) A(t) \quad (23)$$

と近似できる。ここで Trotter の公式[10]を用いれば、 n 次精度の symplectic 差分式として、

$$A(t+\tau) = \left[\prod_k^n \exp(c_k \tau iL_1) \exp(d_k \tau iL_2) \right] A(t) + O(\tau^{n+1}) \quad (24)$$

が得られる。係数 c_k, d_k は次数 n に依存して決まる。例えば、よく使われる二次精度の symplectic 差分式では次のようになる。

$$A(t+\tau) = \exp \left(\frac{\tau}{2} iL_1 \right) \exp(\tau iL_2) \exp \left(\frac{\tau}{2} iL_1 \right) A(t) + O(\tau^3) \quad (25)$$

ここで、物理量 A として、正準変数 $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, s, p_s$ を選べば、それぞれに関する時間発展差分方程式が得られる。

ここでの本質は、本来は式(23)に示す一度の演算だったものを、式(24)によって部分 Liouvillian 毎の複数回の演算に分割できたことである。

実際に、式(21), (22)で定義した能勢熱浴の場合の部分 Liouvillian による時間発展差分方程式をみてみよう。部分 Liouvillian iL_1 による時間発展差分方程式は、

$$\exp(\tau iL_1) \mathbf{r}_j = \mathbf{r}_j + \tau \frac{\mathbf{p}_j}{m_j s^2} \quad (26)$$

$$\exp(\tau iL_1) \mathbf{p}_j = \mathbf{p}_j \quad (27)$$

$$\exp(\tau iL_1) s = s \quad (28)$$

$$\exp(\tau iL_1) p_s = p_s + \frac{\tau}{s} \left[\sum_j \frac{\mathbf{p}_j^2}{m_j s^2} - gk_B T \right] \quad (29)$$

となる。また、部分 Liouvillian iL_2 による時間発展差分方程式は

$$\exp(\tau iL_2) \mathbf{r}_j = \mathbf{r}_j \quad (30)$$

$$\exp(\tau iL_2)\mathbf{p}_j = \mathbf{p}_j - \tau \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_j} \quad (31)$$

$$\exp(\tau iL_2)s = s + \tau \frac{p_s}{Q} \quad (32)$$

$$\exp(\tau iL_2)p_s = p_s \quad (33)$$

となる。ここで得られた時間発展差分方程式は数値計算の際にそのままの形式でコード化することができる。例えば二次精度の symplectic 時間積分を行いたい場合には、式(26)・(29)の iL_1 の演算において、 $\tau \rightarrow \tau/2$ と置き換えてやればよい。

式(26)・(33)で行った部分 Liouvillian による演算では、近似することなく右辺が有限項までで取まっていることが重要な点である。これにより、微小時間 τ が非無限小であることによる誤差は、式(24)の Trotter 展開の部分で発生し、部分 Liouvillian の演算では誤差は発生していない。有限項までで収まる理由は、個々の部分 Liouvillian が一部の正準変数に対する偏微分演算子だけをもつためである。また、同じ理由により、部分 Liouvillian に偏微分演算子を持たない一部の正準変数は全く時間発展しないこともわかる。

言い換えれば、部分 Liouvillian による時間発展演算が全ての正準変数に対して有限項までの既知の関数で収まるように Hamiltonian を分割することが symplectic 数値積分法の胆である。通常の粒子系の Hamiltonian であれば、部分 Hamiltonian として、単純に運動エネルギー K とポテンシャルエネルギー U に分割すればよい。しかし、能勢熱浴の様な拡張 Hamiltonian 系においては、どのような部分 Hamiltonian で分割すればよいかは、試行錯誤が必要である。例えば、先に紹介した Nosé-Poincaré 熱浴では、部分 Hamiltonian として 3 つに分割しなければならない。

もう一つ注意点を述べておくと、必ず先に部分 Hamiltonian へ分割してから対応する部分 Liouvillian を作らなければならない。式(24)を見れば、Liouvillian さえ分割できていれば、部分 Hamiltonian は必要ないように感じるかもしれない。しかし、勝手に定義した部分 Liouvillian に対して、必ずしも対応する Hamiltonian が存在するとは限らない。

例えば、部分 Liouvillian として $iL_j = -\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j}$ を勝手に定義しても、対応する部分 Hamiltonian を作ることはできない。その時の問題は、対応する部分 Hamiltonian の存在しない部分 Liouvillian を用いて時間発展差分方程式を構築した場合に、それは symplectic 条件を満足しないということである。詳細は省くが、symplectic な時間発展差分方程式が欲しければ、必ず部分 Hamiltonian から定義しなければならない。

ところで、MD を用いた応用研究では、開いた境界条件などを課す場合も多く、非平衡条件下での温度制御が必要となる。その場合には、Hamiltonian を定義することはできないが、上記で導いた時間発展差分方程式を利用すれば、温度制御をすることが一応は可能である。例えば、プラズマ-壁相互作用のシミュレーションにおいては、プラズマ照射対象となる材料の底付近の原子は上記の差分法を用いて温度を一定に保ち、表面から流れてくる熱を吸収させた

りする。もちろん、その様な非平衡条件下の場合には、Hamiltonian が定義できないので、温度制御は可能であっても、symplectic 性は失われている。しかしながら、位相空間の体積を保存した (measure preserving) 時間発展差分方程式という点では意味がある。

さて、温度制御を行う能勢熱浴の Hamiltonian と、その symplectic 時間積分法を紹介した。分子動力学の研究分野には、これ以外にも拡張 Hamiltonian 系が多数存在する。圧力制御法としては先に紹介した Andersen の方法や、より適応性の高い Parrinello-Rahman の方法[11,12]がある。能勢熱浴では運動量をスケールリングすることで温度を制御したが、圧力制御法では位置座標をスケールリングすることで圧力や応力を制御する。また、これらの温度制御法や圧力制御法を組み合わせた Hamiltonian を定義することで、温度と圧力を同時に制御することが可能である。その場合にも、Hamiltonian が存在するので対応した symplectic 時間発展差分方程式を導出することが可能である。また、最近では複数の温度制御法と圧力制御法を組み合わせる手段として、より一般化した手法も提案されている[13]。一連の拡張 Hamiltonian 系に関するより詳細な議論は、上田顕先生による教科書[14]等、分子動力学シミュレーション向けの資料を参照されたし。

最後に、本年は能勢熱浴の発表からちょうど30周年にあたる年で、本稿執筆期間中には30周年記念国際シンポジウム NOSE30 が開催された。大変残念ながら能勢先生は若くしてお亡くなりになられていたため、チェアは能勢先生の最後の弟子であり現在の拡張 Hamiltonian 系の研究を牽引していらっしゃる森下徹也先生が務められた。海外からも Hoover 先生、Parrinello 先生など著名人が多数参加し、大変盛況な会となった。このように日本の MD 研究が注目されているのは、MD 分野で最も普及している計算手法である能勢熱浴と symplectic 差分法が共に日本発の手法であったためだと強く感じる。

このような記念の年に、本節を執筆する機会を与えてくださり、また、不慮の病気で執筆が大変遅れたにもかかわらず最後まで信じてお持ちいただいた古川勝先生はじめ、本小特集の著者の先生方、編集員の皆様に深く感謝申し上げます。材料シミュレーションのみならず、プラズマシミュレーションにおいても、拡張 Hamiltonian 系によって新しい展開がもたらされることを期待しています。

参考文献

- [1] S. Nosé, Mol. Phys. **52**, 255 (1984).
- [2] S. Nosé, J. Chem. Phys. **81**, 511 (1984).
- [3] H.C. Andersen, J. Chem. Phys. **72**, 2384 (1980).
- [4] H. Yoshida, Phys. Lett. A **150**, 262 (1990).
- [5] M. Suzuki, Phys. Lett. A **146**, 319 (1990).
- [6] W.G. Hoover, Phys. Rev. A **31**, 1695 (1985).
- [7] G.J. Martyna *et al.*, J. Chem. Phys. **97**, 2635 (1992).
- [8] S.D. Bond *et al.*, J. Comp. Phys. **151**, 114 (1999).
- [9] S. Nosé, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 75 (2001).
- [10] H.F. Trotter, Proc. Amer. Math. Soc. **10**, 545 (1956).
- [11] M. Parrinello and A. Rahman, Phys. Rev. Lett. **45**, 1196

(1980).

[12] M. Parrinello and A. Rahman, J. Appl. Phys. **52**, 289 (1981).

[13] T. Morishita, Mol. Phys. **108**, 1337 (2010).

[14] 上田 顕：分子シミュレーション－古典系から量子系手法まで－（裳華房，2003）。



いとう あつし
伊藤 篤史

核融合科学研究所ヘリカル研究部基礎物理シミュレーション研究系准教授。主な研究分野はプラズマ-壁相互作用の理論・シミュレーション研究。昨年は多くの皆様にご心配とご迷惑お掛けしましたが、おかげさまでだいぶ良くなりました。最近の楽しみは妻と2歳の息子とガンダムを見ることです。研究活動においても、元気でいられるからこそチャレンジできる、ということを実感しています。



4. 応用

4.4 逃走電子のカオス

4.4 Chaos in Runaway Electron Motion

松山 顕之

MATSUYAMA Akinobu

日本原子力研究開発機構核融合研究開発部門

(原稿受付：2014年8月29日)

逃走電子の回避および緩和がITERのディスラプション研究の重要課題となっている。逃走電子の輸送・再分配過程には摂動磁場が重要な役割を果たすと考えられており、現象の解析に3次元軌道追跡シミュレーションが用いられる。ここでは逃走電子閉じ込めに関する問題の切り口の一つとして、10 MeVを超える逃走電子について顕著となる逃走電子軌道のドリフト面の外向きシフトの影響を議論する。径方向にグローバルな固有関数をもつ摂動磁場が存在すると、隣接する有理面においてドリフト共鳴による2次のな島構造を形成し、低次の磁気島が重ならない状況においても、径方向に大域的な逃走電子のカオス軌道が発生することを示す。

Keywords:

runaway electron, disruption, magnetic perturbation, magnetic island, tokamak, ITER

4.4.1 研究背景

トカマク装置のディスラプション時に急激な電流減衰に伴ってプラズマ内部に過渡的な電場が誘起されることがあるが、この電場が電子密度 n_e に依存した閾値 $E_c(n_e)$ を超えると[1]、電子テールの加速が背景プラズマによる摩擦力に打ち勝って逃走電子となり、1–10 MeV オーダーのエネルギーをもつ相対論的電子ビームを形成する。逃走電子がプラズマ対向機器に衝突すると局所的・パルスの熱負荷を与え、損傷の原因となるため、逃走電子発生回避手法の開発や閉じ込め機構の理解は重要な研究課題である。ITERで逃走電子が特に問題とされるのは、2次電子増幅機構[2,3]の存在に由来する。Dreicer加速によって発生した逃走電子は、近接衝突によって熱電子を運動量空間で散乱し、2次逃走電子を発生する。このとき、逃走電子電流の増幅利得は $G_{RE} \sim \exp[2.5I_p(\text{MA})]$ と書くことができ[4]、 $I_p = 15 \text{ MA}$ の運転モードでは増幅利得は 1.9×10^{16} となり、原理的には $4 \times 10^{-10} \text{ A}$ の微小な種電流が存在するだけで 7.5 MA の逃走電子電流が発生するという評価になる[5]。既存のトカマクにおいては $I_p = 2 \text{ MA}$ のディスラプションでも増幅利得は高々150程度であることから、ITERとの間に極めて大きなギャップがあることがおわかりいただけるであろう。ディスラプションおよび逃走電子の制御に関する最近の研究事情については本学会誌[6]に解説があるので、そちらを参照されたい。

上述の逃走電子電流と増幅利得の見積もりで注意すべき点は、逃走電子の閉じ込め時間が電流減衰時間に比べて十

分長いことを前提としていることである。この仮定は、逃走電子が磁力線方向に光速に近い速度で運動し、有限軌道幅効果や有限ジャイロ半径効果によって微視的磁場揺動を感じにくいという特徴があるため[7,8]、閉じ込め領域内に有限個のロバストな磁気面が存在するだけで閉じ込めが顕著に改善し、それらは一種の輸送障壁[9]として働くことに由来する。一方、実験ではキラペレット入射や自発的な不安定性によって低次の磁場揺動が観測される場合[10,11]や外部からの共鳴摂動磁場印加を行った場合[12,13]において、逃走電子発生が抑制される現象が観測されている。Helanderらは磁場揺動による逃走電子の輸送を拡散的に近似し、2次電子増幅に有意な影響を与えるために必要となる磁場揺動振幅を $\delta B/B > 10^{-3}$ と評価した[14]。典型的なトカマクプラズマのパラメータに対し、 $\delta B/B \sim 10^{-3}$ という振幅レベルはちょうど低次の磁気島の重なりによってカオス磁場を形成するかどうかの閾値付近に相当する。(なお、磁力線追跡を行うと、磁場の乱れによる径方向変位 ($\Delta r \sim v_i \delta B/B \Delta t$) はプラズマ小半径に対して無視できない大きさもち拡散的描像が成り立たない領域に入り得ることに注意を払う必要がある。)カオス的磁場の形成が起こるとロバストな磁気面による輸送障壁が壊れ、逃走電子の輸送が増大する。このため、最近の研究では、低次の磁気島やカオス磁場を含む磁場トポロジーにおける逃走電子閉じ込めを調べるため、3次元軌道解析シミュレーションが用いられている[15-18]。この種の解析は本学会誌の講座[19]でも報告されており、例えば、テ

アリングモードの非線形計算[20]で議論される $(m, n) = (2, 1)$ および $(3, 2)$ の磁気島 (m および n はそれぞれポロイダルおよびトロイダルモード数) の幅が増大し、それらの重なりが生じると径方向に大域的なカオス磁場を生む。このとき、逃走電子軌道は案内中心方程式の最低次の近似の下で磁力線軌道に一致するため、カオス磁場の形成は径方向の輸送を劇的に増加させることになる。徳田らはモンテカルロ計算により、低次の磁気島の重なりで生じるカオス磁場は、逃走電子の増幅抑制に働くのに十分なレベルの損失率を与えることを示している[15]。

4.4.2 トカマクプラズマにおける逃走電子軌道解析

日本原子力研究開発機構では、摂動磁場が逃走電子の閉じ込めに与える影響評価するため、案内中心近似に基づく相対論的電子軌道解析コード ETC-Rel[15]を開発している。トロイダルプラズマにおける軌道解析は大きく分けて、円柱座標などの実座標系を用いるものと、磁力線を直線で表現することができる磁気座標系を用いるものに分けられ、前者は、ダイバータ配位における X 点および開いた磁力線領域を難なく表現できることに利点があり、真空容器壁への高エネルギー粒子の衝突を扱う際に便利である。一方、MHD モードなどプラズマ由来の摂動磁場を少ないフーリエモード数で表現できる点に磁気座標系の利点がある。本講座の視点では、系の対称性や Noether の定理による保存則を見通しよく解析することも後者の重要な利点といえる。ETC-Rel コードは用途に応じて、実座標および磁気座標を切り替えて使用することができる。ここでは文献[21]に沿って磁気座標 (Boozer 座標[22]) における解析手法を記述する。

物理量を主半径 R_0 、磁場強度 B_0 および装置周回時間 $\omega_i^{-1} = R_0/c$ で規格化すると、摂動ベクトルポテンシャル δA を含んだ相対論的電子の案内中心運動の Lagrangian は、

$$L dt = (\sigma/\epsilon) [\mathbf{A}_{\text{eq}} + \delta \mathbf{A} + \epsilon p_{\parallel} \mathbf{b}] \cdot d\mathbf{x} - H dt, \quad (1)$$

と与えられる[23]。ここで $\sigma = -1$ は電荷の符号、 $\epsilon = \omega_i/\omega_c \ll 1$ はドリフトオーダリングパラメータ ($\omega_c = |e|B_0/m_e$ はジャイロ旋回周波数)、 p_{\parallel} は相対論的運動量、 \mathbf{b} は磁力線方向の単位ベクトル、 $H = \gamma m_e c^2$ は相対論的電子のハミルトニアンである。ポロイダル磁束関数 ψ を磁気面ラベルとして、 θ および ζ を Boozer 座標のポロイダル角およびトロイダル角とすると、磁場は MHD 平衡およびアンペールの法則 $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}$ から、

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{\text{eq}} &= \nabla \psi_t \times \nabla \theta + \nabla \zeta \times \nabla \psi \\ &= g(\psi) \nabla \zeta + I(\psi) \nabla \theta + \beta_*(\psi, \theta) \nabla \psi, \end{aligned} \quad (2)$$

と書くことができる。ここで ψ_t はトロイダル磁束関数、 $g(\psi)$ および $I(\psi)$ はそれぞれ磁気面外のポロイダル電流、磁気面内のトロイダル電流である。径方向の共変成分 $\beta_*(\psi, \theta)$ は有限圧力効果による Pfirsch-Schlüter 電流に関係した項で、軸対称トカマク平衡に対しては近似なしに案内

中心方程式に取り込むことができる。ここでは簡単のため、摂動磁場として、低 β 近似に基づく静的な摂動 $\delta \mathbf{A}_{\text{eq}} = \alpha(\psi, \theta, \zeta) \mathbf{B}_{\text{eq}}$ [24] を考え、ポロイダル角およびトロイダル角に関してフーリエ展開した形で $\alpha(\psi, \theta, \zeta) = \sum_{m,n} \alpha_{mn}(\psi) \cos(m\theta - n\zeta + \phi_{mn})$ と与える。 ϕ_{mn} は磁気島の位相を表す。式(2)において平衡磁場を与えるベクトルポテンシャルは $\mathbf{A}_{\text{eq}} = \psi_t \nabla \theta - \psi \nabla \zeta$ と書けるので、Boozer 座標系における相対論的電子の案内中心運動の Lagrangian は、

$$L dt = (\sigma/\epsilon) (\psi_t + \epsilon \rho_c J_t) d\theta + (\sigma/\epsilon) (-\psi + \epsilon \rho_c J_p) d\zeta + \sigma \rho_c \beta_* d\psi - H dt, \quad (3)$$

と書き下すことができる。ここで、 $\rho_c = \rho_{\parallel} + \alpha$ 、 $\rho_{\parallel} = p_{\parallel}/(\sigma B)$ である。案内中心運動を表す変数として $Z_i = \{\psi, \theta, \zeta, \rho_{\parallel}\}$ を選び、式(3)から得られる Euler-Lagrange 方程式を経由すると、相対論的電子の案内中心方程式

$$\dot{Z}_i = \{Z_i, H\} = V_i(\mathbf{Z}), \quad (4)$$

を得ることができる。ポアソン括弧 $\omega_{ij} = \{Z_i, Z_j\}$ の具体的な表式は文献[21]に与えられている。

実用的な計算ではクーロン衝突や放射損失を考慮した散逸系の解析を行うため、式(4)を古典的な 4 次 Runge-Kutta 法で解く。一方、ETC-Rel では無衝突軌道の詳しい解析を行う場合や軌道計算精度の確認する目的で Symplectic かつ時間反転対称な陰的ガウス公式[25]を併用している。図 1 に 10 ms オーダーの長時間軌道計算に対するエネルギー保存誤差評価の例を示す。解析のターゲットとして高々、数 10–100 μs 程度の早い時間スケールの逃走電子閉じ込めを扱う場合には軌道のエネルギー保存の観点からみて 4 次 Runge-Kutta 法は十分な精度を与えることが確認できる。一方、電流拡散時間オーダーの逃走電子閉じ込めを評価する場合、4 次 Runge-Kutta 法は誤差の蓄積を生じ、数値散逸が問題になる可能性がある。但し、逃走電子は $p \sim p_{\parallel}$ の deeply passing particle として生じるため、位相空間の捕捉粒子 - 通過粒子境界から十分遠く、まだアルファ粒子などの高エネルギーイオンに比べて案内中心軌道

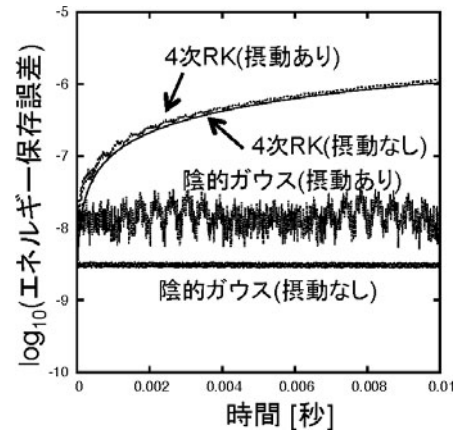


図 1 ETC-Rel コードを用いた 1 MeV 逃走電子軌道計算における 4 次 Runge-Kutta 法および 4 次陰的ガウス公式に関するエネルギー保存誤差の時間発展の比較。

の磁気面からのずれが小さいので、エネルギー保存誤差は逃走電子が装置を周回する周期運動の微妙な誤差の蓄積として現れるのにとどまり、実空間における軌道のトポロジーに与える影響は限定的であろう。しかし、短波長の波との共鳴などより複雑な現象を扱おうとする場合にはその限りでなく、解析すべき対象に応じて、許容される数値誤差を把握しておくことが重要である。高エネルギー粒子軌道追跡を目的とした高精度、もしくは保存性のよい計算スキームとしては、ここで示した陰解法を用いる方法の他、変分原理を直接離散化する方法[26]や保存量であるエネルギーやトロイダル正準運動量を直接時間発展させる方法[27]などが提案されている。

4.4.3 逃走電子軌道のカオス

逃走電子はディスラプションの複雑なエネルギー解放過程の中で発生するため、その閉じ込めに関しても様々な研究の切り口が考えられる。逃走電子の発生過程に対する摂動磁場の影響を考える場合、熱電子のテールが相対論的領域まで加速される途上の1 MeV以下の電子の閉じ込めが重要になるであろうし、逃走電子が発生し、十分なエネルギーを得たのちには1 MeVから最大100 MeV程度までの相対論的電子の閉じ込めを議論することとなる。

実験では逃走電子発生を伴うディスラプション放電において様々なタイプの磁場揺動が観測されている。電子テールや逃走電子ビームがMHDモードに与える影響[28, 29]は、未解明の研究課題として残されているが、本節では解析を簡単にするため、逃走電子がMHDモードに影響を与えない、いわゆるpassive tracerであるという仮定を置く。このとき、最外殻磁気面内部で起こる逃走電子の再分配のメカニズムとして、4.4.1で述べた低次の磁気島の重なりによるカオス磁場の発生を考えることができる。このとき、最低次のオーダーの逃走電子軌道が磁力線軌道に一致することから、磁気島の重なりを生じる摂動磁場振幅の値が、逃走電子輸送の増大を引き起こす閾値の指標となる。

MeVオーダーのエネルギーをもつ逃走電子、特に10 MeVを超える電子は相対論的效果によってジャイロ半径および軌道幅が大きくなり、電子軌道がつくるドリフト面と磁気面のずれが顕著となる。逃走電子は常にプラズマ電流を維持する方向に発生するため、ドリフト面は磁気面

に対して主半径方向外側にシフトする(図2)。通過粒子($p_{\parallel} \sim p$)を仮定すると、ドリフト面のシフトは $\delta_D \sim qp_{\parallel}/eB$ と与えられる[30]。このような軌道シフトがカオス的な逃走電子軌道の発生に与える影響は、逃走電子輸送のエネルギー依存性を解析する観点から興味深い。逃走電子が得ることのできる運動エネルギーはプラズマ電流がもつ磁気エネルギーが変換されたものであると考えれば、例えばJT-60U規模の2 MAのディスラプションを考えた場合の最大の逃走電子エネルギーは50 MeV程度と見積もることができる。このようなエネルギーをもつ逃走電子は、電流減衰の初期に発生する種電子(Dreicer電子)に対応しており、小半径1 mに対し、最大10%程度の軌道幅をもつことができる。

10 MeVを超える逃走電子の軌道幅の影響については、ハミルトニアン力学[31]や3次元粒子軌道計算[32]に基づく解析が与えられているが、ここでは、軌道のカオスという観点からドリフト共鳴の影響を取り上げる。このとき、摂動磁場と逃走電子軌道の関係の特徴づけるパラメータとして重要なのが、摂動磁場の径方向のモード幅である。仮に、逃走電子の軌道幅に比べてモード幅が十分小さければ、位相平均化効果によって磁場の乱れを感じにくくなる[7, 8]。一方、逆の極限として軌道幅に比べてモード幅が十分広く、与えられたトロイダルモード数 n に対して隣接する有理面($q = (m \pm 1)/n$)との距離よりもモード幅が広い場合、有限軌道幅効果によるモード結合($m \pm k, n$) ($k = 1, 2, \dots$)により、ドリフト共鳴が生じる。図3に径方向にグローバルな固有関数をもつ(m, n) = (2, 1)モードを与えた場合の逃走電子軌道のポアンカレ図を示す。1 MeVの逃走電子軌道は磁力線とほぼ同一の軌道を示すのに対し、20 MeVの高エネルギー電子軌道は、隣接する有理面 $q = (m \pm k)/n$ ($k = 1, 2, \dots$)の位置に磁力線軌道にはみられない島構造を生じる。ここで $k = 1$ のドリフト共鳴によって生じる島構造の幅は、

$$\Delta r/R_0 \sim \sqrt{2q\delta_D \partial_r b_{mn}/nR_0 q'} \quad (5)$$

と与えられ[33]、摂動磁場の径方向勾配および軌道幅 δ_D を通じて逃走電子エネルギーの1/2乗に比例した依存性を示す。このとき、主モード(m, n) = (2, 1)によるドリフト面の島構造の幅はほぼ摂動磁場振幅のみで決まり、逃走電子

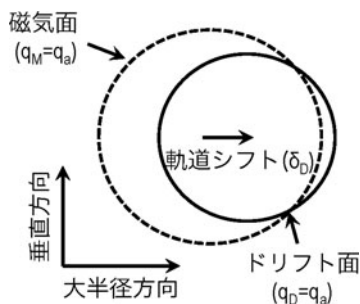


図2 逃走電子の径方向ドリフトによる軌道シフトの模式図。逃走電子はプラズマ電流を維持する方向に運動し、逃走電子軌道は磁気面からみて常に主半径方向外向きのドリフトを生じる。

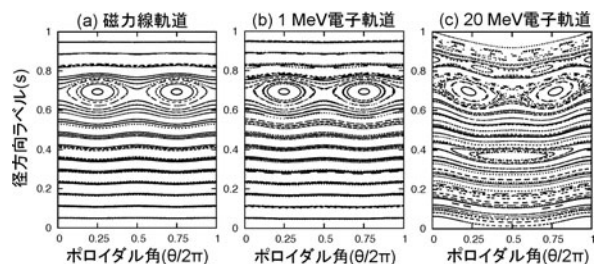


図3 (m, n) = (2, 1)モードを与えたときの逃走電子軌道のポアンカレ図。磁力線と1 MeV電子はほぼ同一の軌道を取るのに対し、10 MeVを超える逃走電子は(m, n) = (2, 1)の磁気島から離れた径方向位置に($m \pm k, n$) ($k = 1, 2, \dots$)のドリフト共鳴による2次的な島構造を形成する。

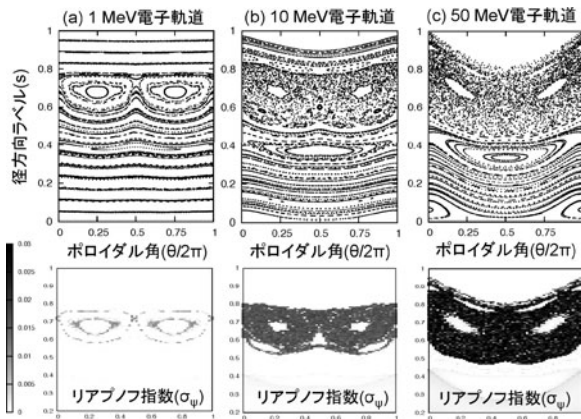


図4 有限軌道幅効果によるカオスの軌道の発生. $n = 1 - 4$ の摂動磁場を考慮した系において磁力線および低エネルギー (1 MeV) 逃走電子が正則な軌道をとるのに対し, 高エネルギー (10 MeV/50 MeV) ではドリフト共鳴によって生じる2次の島構造の重なりにより, 軌道のカオスが生じる.

のエネルギーにはほとんど依存しない.

サイドバンド共鳴によって生じた島構造は, 磁力線のカオスの理論で用いられるいわゆるChirikov条件[34]と同じく, 異なるヘリシティをもつドリフト面の島構造が重なることでカオス軌道を生じる. そのような例として, 図4に $(m, n) = (2, 1)$ ($n = 1 - 4$) のテアリング型の摂動磁場を印加した場合の軌道のポアンカレ図のエネルギー依存性を示す. ここではカオス軌道の発生を明確化するため, リアプノフ指数[35]の等高線を合わせて示した. 低エネルギー (1 MeV) の軌道に関しては軌道のX点を通る $n = 1$ の双曲軌道の周りに正のリアプノフ指数の領域が局在しているのに対し, 逃走電子のエネルギーを 10 MeV, 50 MeV と増加させると $n = 2 - 4$ の高調波に対するドリフト共鳴によって $(2, 1)$ 構造の周囲に微小な島構造が形成され, それらが重なることで高エネルギー逃走電子のトポロジーにのみ, 正のリアプノフ指数をもつ大域的なカオス軌道が生じる. 単一のヘリシティ ($m/n = \text{一定}$) の摂動磁場を考えた場合, 高調波を考えても磁力線は原理的にカオス的になり得ないが, ドリフト共鳴の効果を含めると逃走電子軌道には異なるヘリシティの島構造が現れ, 軌道のカオスをもたらす. 別の観点からみると, 図4のような機構は, 低次の磁気島の重なりに必要な摂動磁場の閾値を下回る領域でも, 逃走電子輸送の増大が起り得ることを示唆している. 現実的には低 (m, n) のテアリングモードはトロイダル結合により異なるヘリシティを含む固有関数をもって成長するが, そのような場合には, 摂動磁場が作る磁気島にドリフト共鳴が干渉し, 軌道からみた島構造の幅が摂動磁場間の位相差に依存するようになり, ドリフト面のカオス化の条件として磁気島間の位相差の影響が加わる[33]. 磁力線に対するChirikov条件は本来, 磁気島の径方向幅のみで特徴づけられ, 摂動磁場の位相は無関係であることと対比すると, 位相差の影響は物理的にも興味深く, また, 外部からの共鳴摂動磁場印加[16]における外部コイル電流のパターンを変えた場合の逃走電子閉じ込めの依存性を説明するのに役立つと考えられる.

4.4.4 まとめ

トカマクプラズマにおける逃走電子軌道の解析手法とともに, カオス的な逃走電子軌道が発生する条件としてドリフト共鳴の効果を議論した. 冒頭で述べたようにITERに向けた喫緊の研究課題として逃走電子がクローズアップされているが, 問題視される理由を改めてまとめると, (1) 逃走電子は閉じ込めがよく, 一旦発生すると雪崩的増倍を引き起こすのに十分長時間閉じ込められること, (2) 磁力線方向の運動が支配的であるため, 壁と衝突する逃走電子束の磁力線垂直方向の広がりが小さく, 局在化した熱負荷を及ぼすため, と表現できる. これらの現象に対し, 逃走電子の「長時間」の閉じ込めや熱負荷の「局在化」の詳細を明らかにするためには軌道計算が有効であり, 本講座で解説された摂動論や数値計算法がそのようなシミュレーションを構築する上で重要な基礎となっている.

謝辞

本節の執筆に際し, 日本原子力研究開発機構の矢木雅敏博士, 相羽信行博士, 核融合科学研究所の中島徳嘉教授, 高度情報科学技術研究機構の徳田伸二博士との議論に感謝します. また, 本研究は科学研究費補助金 (23246163, 26820404, 23561009) の支援を受けました.

参考文献

- [1] J.W. Connor and R.J. Hastie, Nucl. Fusion **15**, 415 (1975).
- [2] Yu.A. Sokolov, JETP Lett. **29**, 218 (1979)
- [3] R. Jayakumar *et al.*, Phys. Lett. A **172**, 447 (1993).
- [4] M.N. Rosenbluth and S.V. Putvinski, Nucl. Fusion **37**, 1355 (1997).
- [5] T.C. Hender *et al.*, Nucl. Fusion **47**, S128 (2007).
- [6] 河野康則他: プラズマ・核融合学会誌 **86**, 3 (2010).
- [7] H.E. Mynick and J.D. Strachan, Phys. Fluids **24**, 695 (1981).
- [8] J.R. Myra *et al.*, Phys. Fluids B5, 1160 (1993).
- [9] S.S. Abdullaev *et al.*, Phys. Plasmas **19**, 072502 (2012).
- [10] R. Yoshino *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **39**, 313 (1997).
- [11] R.J. Zhou *et al.*, Phys. Plasmas **20**, 032511 (2013).
- [12] R. Yoshino and S. Tokuda, Nucl. Fusion **40**, 1293 (2000).
- [13] M. Lehnen *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 255003 (2008).
- [14] P. Helander *et al.*, Phys. Plasmas **7**, 4106 (2000).
- [15] S. Tokuda and R. Yoshino, Nucl. Fusion **39**, 1123 (1999).
- [16] G. Papp *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **54**, 125008 (2012).
- [17] V.A. Izzo *et al.*, Nucl. Fusion **51**, 063032 (2011).
- [18] A. Matsuyama *et al.*, JPS Conf. Proc. **1**, 015037 (2014).
- [19] 徳田伸二他: プラズマ・核融合学会誌 **77**, 1205 (2001).
- [20] B.V. Waddell *et al.*, Phys. Rev. Lett. **41**, 1386 (1978).
- [21] A. Matsuyama and M. Yagi, Plasma Fusion Res. **8**, 1403170 (2013).
- [22] A.H. Boozer, Phys. Fluids **27**, 2441 (1984).
- [23] J.R. Cary and A.J. Brizard, Rev. Mod. Phys. **81**, 693 (2009).
- [24] R.B. White, Phys. Plasmas **20**, 022105 (2013).
- [25] E. Hairer *et al.*, *Geometric Numerical Integration, Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations* 2nd ed. (Springer-Verlag, New York, 2006).
- [26] H. Qin *et al.*, Phys. Plasmas **16**, 042510 (2009).

- [27] R.B. White *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **55**, 115002 (2013).
- [28] P. Helander *et al.*, Phys. Plasmas **14**, 122102 (2007).
- [29] P.V. Savrukhin, Plasma Phys. Control. Fusion **48**, B201 (2006).
- [30] X. Guan *et al.*, Phys. Plasmas **17**, 092502 (2010).
- [31] M. de Rover *et al.*, Phys. Plasmas **3**, 4478 (1996).
- [32] K.H. Finken *et al.*, Nucl. Fusion **46**, S139 (2006).
- [33] A. Matsuyama *et al.*, Nucl. Fusion **54**, 123007 (2014).
- [34] B.V. Chirikov, Phys. Rep. **52**, 263 (1979).
- [35] A.J. Lichtenberg and M.A. Liberman, *Regular and Chaotic Dynamics*, 2nd ed. (Springer-Verlag, New York, 1992).



まつ やま あきの のぶ
松山 顕之

日本原子力研究開発機構核融合研究開発部門プラズマ理論シミュレーショングループ・任期付研究員、京都大学博士（エネルギー科学）、核融合科学研究所 COE 研究員を経て2013年より現職。最近はディスラプションに関わるMHD現象や逃走電子発生が興味の対象です。趣味は学生時代から続けている尺八演奏。昨年、流派の全国大会で銀賞を受賞。次は金賞、といきたいところですが、なかなか道のは険しそうです。



4. 応 用

4.5 自由電子レーザー中の相対論的荷電粒子の運動

4.5 Dynamics of Relativistic Charged Particle in Free-Electron Laser

岸本 泰明, 今寺 賢志

KISHIMOTO Yasuaki and IMADERA Kenji

京都大学大学院エネルギー科学研究科

(原稿受付: 2015年1月6日)

ハミルトン構造を維持しつつ、正準座標の制限を取り去った非正準 Lie 摂動論は、ジャイロ運動論モデルを構築する数学的基礎として核融合プラズマ分野で発展してきた。この摂動論は、同様に多様な磁場や電場の中で運動する荷電粒子系である加速器や自由電子レーザー中の粒子ビームや高強度レーザーに照射されたプラズマ粒子の解析にも有力である可能性がある。ここでは、この手法を、収束型ウィグラー磁場とガイド磁場が共存した自由電子レーザー中での相対論的電子の軌道解析や共鳴近傍でのビーム安定性の解析、許容されるビーム電流限界の評価などに適用し、その有用性と意義について議論する。

Keywords:

Non-canonical Lie perturbation theory, free electron laser (FEL), relativistic electron beam, focusing wiggler, higher order secular perturbation, guiding field

4.5.1 はじめに

電場や磁場の中での荷電粒子運動は複雑なプラズマの挙動を理解する基礎過程として精力的に研究がなされてきた。磁場閉じ込めプラズマはその典型例であり、磁力線の周りを旋回運動する荷電粒子は、様々な時空間スケールで変化する場の中でドリフト運動を行い、それが起源となって輸送現象や MHD 現象などの様々な集団現象が引き起こされる。この変化する“場”は、外部から与えられる閉じ込め磁場やプラズマ中の力学均衡から決まる径電場などあれば、プラズマ中に発生する乱流場もある。このような様々なスケールで変化する場の中での軌道解析法として非正準 Lie 摂動法がある [1]。

この方法は正準ハミルトン理論を非正準座標系に対しても適用できるよう拡張した非正準ハミルトン理論に基づく摂動解析法であり、前者では座標系の取り方に制限（正準座標）があるのに対して、後者ではそれをより広いクラスの非正準座標に拡張することで解析に有利な任意の座標系を選択できる利点がある。さらに、新旧座標の関係を表す変換式が関数関係式で記述されるため、それらが混在した変換の母関数を求めることなく座標変換を行うことができる利点がある。さらに、運動方程式に対して直接摂動展開を行う平均化法とは異なり、非正準 Lie 摂動論では、運動方程式の基となる拡張された $2N+1$ 次元位相空間ラグランジアン (N は次元) を導入し、それに対して摂動展開を行うため、摂動の各次で系を記述するハミルトニアンが定義さ

れる。このように系のハミルトン構造が維持されることで、ハミルトン力学におけるネーターの定理やリュエビルの定理などの重要な定理が摂動の各次で成立する。これらの特徴を活かし、非正準 Lie 摂動論はこれまで核融合プラズマにおけるジャイロ運動論 [2-5] の基礎として発展してきた。

同様に、多様な電場や磁場の中で運動する荷電粒子系として加速器中の粒子ビームや高強度レーザーに照射されたプラズマがある。これらのビーム系やレーザー系と磁場閉じ込め装置との共通性は、共に外部から与えられる強い電場や磁場で荷電粒子の基本軌道がデザインされている点であり、したがって、それらをゼロ次の軌道解として高次の摂動論を展開することにより長時間（周期）の粒子ダイナミクスや安定性を解析することができる。これらの系に対しても、同様に非正準 Lie 摂動論を適用する意義は十分にあると考えられる。

ここでは、近年、X 線領域からテラヘルツ領域までの幅広い周波数領域において発振波長が原理的に可変である自由電子レーザー (Free Electron Laser: FEL) を例に、周期的に変化するウィグラー磁場中で運動する相対論的電子ビームの軌道解析に非正準 Lie 摂動論の導入を行う。どの波長領域の FEL でも、レーザーの発振出力を増大させるためには電子ビームの電流量を増大する必要があるが、そのためには、ウィグラー磁場自身に電子ビームの収束機能をもたせたり、外部から付加的な磁場（四重極や八重極磁場

など)を印加したりする必要がある。しかし、そのような付加的磁場によるビーム軌道の変化がレーザー発振に影響を及ぼしたり、場合によっては、高次摂動が永年のな発散をもたらしたりする可能性がある。そのような複雑な状況下での軌道解析を行い、非正準 Lie 摂動論の可能性や意義について広く議論する。

4.5.2 FEL と相対論的電子ビームのダイナミクス

自由電子レーザー (FEL) とは、相対論的エネルギー (相対論因子 γ) をもつ電子ビームが周期的 (波長 $\lambda_w = 2\pi/k_w$) に変化するウィグラー磁場 (強度 B_w) を通過する際に、電磁場との共鳴的な相互作用を引き起こし、コヒーレントな電磁波を発生させる系に対する総称である (図1参照)。発振波長は $\hat{K} = eB_w/mc^2k_w$ として、 $\lambda = \lambda_w(1 + \hat{K}^2/2)/2\gamma^2$ で与えられる。近年では、短波長側では X 線領域[7]、長波長側ではテラヘルツ領域[8]の自由電子レーザーが注目されている。

この系で高出力を得るためには、電流値 I_0 の高い相対論ビームを、ウィグラー磁場中を安定に伝播させる必要があり、その方法の一つとして、図2のようなウィグラー表面を湾曲させた(a)収束型ウィグラー磁場[9]や(b)軸方向ガイド磁場、あるいはその併用などが考えられる[10,11]。これらの収束磁場は、レーザー発振に直接関与する短周期のウィグラー振動とともに、異なった周期のベータトロン振動やサイクロトロン振動をもたらす、これらによって高電流ビームの伝播特性を高める一方、異なった磁場間で共鳴が発生することから、適用可能な磁場構造や強度について

十分な考察が必要となる。また、仮にビーム伝播が達成されたとしても、そのような横方向の振動が縦 (進行方向) のレーザーとの共鳴条件に影響を与えるとレーザー発振を阻害する可能性もある。このため本章では、自己収束型ウィグラー磁場とガイド磁場を併用した系に対して解析を行い、高次摂動まで取り入れた系統的な解析手法として非正準 Lie 摂動法の有用性を議論する[12-14]。

4.5.3 収束型ウィグラー中の相対論的電子軌道

今、対象とする系の拡張位相空間の座標を z^μ 、対応する共変ベクトルを γ_μ とすると、その系での運動方程式は基本

1形式の変分原理 $\delta \int \gamma_\mu dz^\mu = 0$ で与えられる[1]。 μ は、 $\mu = 0$ を独立変数として、 $\mu = 1-6$ を位相空間次元に割り当てている。時間 t を独立変数として正準座標 $z^\mu = (t, \mathbf{q}_c, \mathbf{p}_c)$ を選択すると、対応する共変ベクトルは $\gamma_\mu = (-h, \mathbf{p}_c, 0)$ となり、このときハミルトニアンは、 A をベクトルポテンシャル、 ϕ を静電ポテンシャルとして、

$$h = \sqrt{m^2c^4 + c^2(\mathbf{p}_c - e\mathbf{A}/c)^2} + q\phi, \quad (1)$$

となる。 q は荷電粒子の電荷であり、以下では、電子 ($q = -e$) を考える。基本1形式はスカラーであることから、解析に適した座標系を自在に選択できる利点がある。例えば、図1のビーム系では、ビームに付随する種々の物理量の変化をビームの伝播距離の関数として表現した方が便利であることから、時間 t の代わりに進行方向の座標 (例えば z) を独立変数に選択するケースが多い。その場合、座標の $\mu = 0$ と $\mu = 3$ 成分を入れ替えて $z_a^\mu = (z; \mathbf{q}_{c\perp}, t, \mathbf{p}_c)$ とすると対応する共変ベクトルは $\gamma_{a\mu} = \gamma_\nu \partial z^\nu / \partial z_a^\mu$ の関係より $\gamma_{a\mu} = (-K_c, \mathbf{p}_{c\perp}, p_{ct}, 0)$ で与えられる。但し、 $(\mathbf{q}_{c\perp}, \mathbf{p}_{c\perp})$ は $(\mathbf{q}_c, \mathbf{p}_c)$ の垂直成分であり、 $p_{ct} = -h$ は旧ハミルトニアンに対応する運動の恒量である (定常場の場合)。物理変数に運動の恒量を選択すると、その変数は定数パラメータとして取り扱うことができるため、ラグランジテンソルや運動方程式を単純化することができる。これはジャイロ運動論において磁気モーメントが運動の恒量であることに類似した利点であるといえる。このとき、新ハミルトニアンは

$$K_c = -\sqrt{a^2 - (\mathbf{p}_{c\perp} - e\mathbf{A}_\perp/c)^2} - eA_z/c, \quad (2)$$

となる。但し、 $a^2 \equiv (p_{ct} + e\phi)^2/c^2 - m^2c^2$ である。

ここまでは、正準変数を用いてきたが、先述のように、それに限定することなく任意の非正準変数に拡張することができる。例えば、正準運動量の代わりに非正準運動量 $\mathbf{p}_\perp = \mathbf{p}_{c\perp} - e\mathbf{A}_\perp/c$ や $p_t = p_{ct} + e\phi$ を導入すると、座標と対応する共変ベクトル、および新ハミルトニアンは以下で与えられる。

$$z_a^\mu = (z; \mathbf{x}_\perp, t, \mathbf{p}_\perp, p_t), \quad (3)$$

$$\gamma_{a\mu} = (-K; \mathbf{p}_\perp + e\mathbf{A}_\perp/c, p_t - e\phi, \mathbf{0}), \quad (4)$$

$$K = -\sqrt{a^2 - p_\perp^2} - eA_z/c. \quad (5)$$

但し、 $a^2 \equiv p_t^2/c^2 - m^2c^2$ となる。

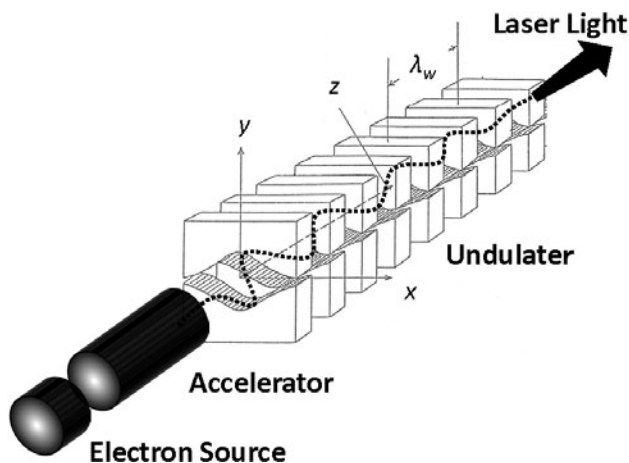


図1 自由電子レーザー (FEL) の概要[6].

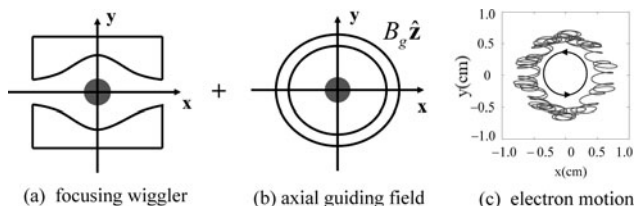


図2 電子ビーム収束のためのウィグラー設計。(a)自己収束ウィグラー、(b)一様ガイド磁場。(c)は(a)と(b)を併用した場合の電子運動の様子。

文献[12]では、(3)-(5)式を基礎に、 $\varepsilon \sim r_b/\lambda_w \sim p_w/\alpha$ を展開パラメータとして図 2 (a)の自己収束磁場を摂動展開し、 $O(\varepsilon^1)$ の理想的な平板ウィグラー磁場 $cA_x^{(1)}/c = p_w \sin k_w z$ に対する軌道解を最低次として、 $O(\varepsilon^3)$ の 4 重極磁場 $cA_x^{(3)}/c = (p_w/2)k_w^2 y^2 \sin k_w z$ 、および $O(\varepsilon^4)$ の 6 重極磁場 $cA_x^{(4)}/c = (p_w/12)k_w^3 (3xy^2 - x^3) \cos k_w z$ までを高次摂動と見なして Lie 摂動論を展開した。ここで、 r_b は典型的なビーム径、 $p_w = \sqrt{2}Kmc$ はウィグラー運動による横方向運動量、 $\alpha = \sqrt{\gamma^2 - 1}mc$ は電子の全運動量である。この展開は、ビーム系は装置サイズ (\sim ウィグラー周期) に比べて十分に小さく、また、ウィグラー運動による運動量変化は粒子の全運動量 (主に進行方向運動量) に比べて小さいとしたもので、高エネルギーの電子ビーム程 ($\gamma \gg 1$) 近似精度は高くなる。

ここでは、 $z_a^\mu \rightarrow Z^\mu$ および $\gamma_{a\mu} \rightarrow \Gamma^\mu$ によって $O(\varepsilon^1)$ のウィグラー中心軌道に移った後、さらに、 $Z^\mu \rightarrow \bar{Z}^\mu = z_a^\mu - \sum_n \varepsilon^n g_\mu^{(n)}$ によって $O(\varepsilon^4)$ までの高次振動項が Lie 変換によって除去された新ウィグラー中心軌道に移ることにより、 $O(\varepsilon^4)$ までを繰り込んだ基本 1 形式 ($\Gamma^\mu \rightarrow \bar{\Gamma}^\mu$) を導き、その運動方程式からビーム粒子が長周期で運動するベータトロン振動 $\bar{X} = \bar{X}_0 \sin(k_\beta z + \theta_x)$ 、 $\bar{Y} = \bar{Y}_0 \sin(k_\beta z + \theta_y)$ を導いている。ここで、 $k_\beta = p_w k_w / 2\alpha$ はベータトロン波数であり、電子のエネルギーの増大とともに長周期になることがわかる。また注目すべきは、求められたベータトロン運動の振幅は初期値に依存することから、エミッタンスの大きさなどによっては低次の振動と同程度の振幅になる点である。つまり、長時間の解析を行う上では、このような高次の項を繰り込んだ摂動解析が重要であることがこの結果からもわかる。

4.5.4 ガイド磁場を導入した相対論的電子軌道

ここでは、4.5.3で行った収束ウィグラーにさらにガイド磁場 $B_g \hat{z}$ を印加した二つの磁場構造が存在する場合の軌道解析を試みる。座標と共変ベクトルは(3)-(5)式からスタートする。ガイド磁場がある系では、電子は x 方向のウィグラー運動とガイド磁場とのローレンツ力によって y 方向にもウィグラー運動が発生するとともに、ガイド磁場によるジャイロ運動も発生する。 $\lambda_g \equiv 2\pi/k_g$ は粒子が 1 回ジャイロ運動する間に粒子が進行方向に進む距離を表わし、ウィグラー波数との間に

$$k_g = eB_g/c\alpha = (p_w/\alpha)(B_g/B_w)k_w \quad (6)$$

の関係がある。 $B_g \sim B_w$ 程度のガイド磁場では、 $k_g \ll k_w$ となる。また、 $k_w \sim \pm nk_g$ では、ウィグラー運動とジャイロ運動が共鳴を起こす領域が存在するため、4.5.4.2で議論するように、新たな座標変換を導入すると見通しがよくなる。本記事では文献[13]に沿って、共鳴から十分離れた領域 (4.5.4.1節) と共鳴領域 (4.5.4.2節) における軌道解析の結果について紹介する。

4.5.4.1 非共鳴領域の扱い

最初に、平板ウィグラー磁場 $\bar{A}_x^{(1)} = p_w \sin k_w z$ にガイド磁場 $\bar{A}_x^{(2)} = -ak_g y$ が加わった系において、共鳴領域

($k_w \sim \pm nk_g$) から十分に離れた領域での軌道解析を行い、座標変換の見通しを立てる。ここでは、 $k_g \ll k_w$ を想定してガイド磁場を $O(\varepsilon^2)$ としている。このとき軌道は、 $(\cos k_w z, \sin k_w z)$ に比例する最低次のウィグラー運動と、 $(\sin k_g z, \cos k_g z)$ に比例するジャイロ運動の線形結合で与えられることから、座標変換については幾つかの選択肢があるが、ここでは最低次のウィグラー運動を基本に、 $z^\mu = (z; x, y, t, p_x, p_y, p_t) \mapsto Z^\mu = (z; X, Y, t, U, V, p_t)$ の変換を考える。ここで、

$$X = x - C_w (p_w/ak_w) \cos k_w z, \quad (7)$$

$$Y = y + C_g (p_w/ak_w) \sin k_w z, \quad (8)$$

$$U = p_x + C_w p_w \sin k_w z, \quad (9)$$

$$V = p_y + C_g p_w \cos k_w z. \quad (10)$$

但し、 $C_w = k_w^2/(k_w^2 - k_g^2)$ 、 $C_g = k_w k_g/(k_w^2 - k_g^2)$ である。この座標 Z^μ と $\Gamma_\mu = \gamma_\nu \partial z^\nu / \partial Z^\mu$ から求められる共変ベクトルに対して、Lie 摂動論 ($Z^\mu \rightarrow \bar{Z}^\mu = Z^\mu - \sum_n \varepsilon^n g_\mu^{(n)}$) を用いて振動項を各次数で除去して永年項のみを残すことにより、最終的に以下の $O(\varepsilon^4)$ までの基本 1 形式が求められる。

$$\bar{\Gamma}_\mu^{(0)} d\bar{Z}^\mu = \bar{p}_t d\bar{t} + \alpha dz, \quad (11)$$

$$\bar{\Gamma}_\mu^{(2)} d\bar{Z}^\mu = (\bar{U} - ak_g \bar{Y}) d\bar{X} + \bar{V} d\bar{Y} - C_w^2 (p_w^2/4\alpha) dz, \quad (12)$$

$$\bar{\Gamma}_\mu^{(4)} d\bar{Z}^\mu = \left[-\frac{\bar{U}^2 + \bar{V}^2}{2\alpha} - C_w \frac{p_w^2}{8\alpha} k_w^2 (\bar{X}^2 + \bar{Y}^2) + \frac{GeI_b p_w^2}{c^2 (k_w r_b)^2} k_w^2 (\bar{X}^2 + \bar{Y}^2) + C_w^3 \frac{p_w^4}{32\alpha^3} - C_g^2 \frac{p_w^2}{4\alpha} \right] dz. \quad (13)$$

但し、 $\bar{\Gamma}_\mu^{(1)} d\bar{Z}^\mu = \bar{\Gamma}_\mu^{(3)} d\bar{Z}^\mu = 0$ である。ここで、(13)式の右辺 3 項の I_b は電子ビーム電流であり、有限電流による径方向電場 (発散力) と自己ピンチ磁場 (収束力) の効果を $O(\varepsilon^4)$ としてモデル的に導入している。

運動方程式は、共に長周期のベータトロン振動とサイクロトロン振動の結合系として表現され、その解は図 1 (c) で与えられる長周期のヘリカル運動となり、 $\bar{Z}^\mu = (z, \bar{X}, \bar{Y}, \bar{t}, \bar{U}, \bar{V}, \bar{p}_t)$ は以下の 4 波数 ($j=1-4$) を持った正弦波の線形結合として表現される。

$$k_\beta^{(j)} = \pm \sqrt{2k_{\beta*}^2 + k_g^2 \pm \sqrt{4k_{\beta*}^2 k_g^2 + k_g^4}/2}, \quad (14)$$

$$k_{\beta*} = \sqrt{\frac{C_w p_w^2}{4\alpha^2} - \frac{2eGI_b k_w}{c^2 (k_w r_b)^2 \alpha}}. \quad (15)$$

但し、 $G = (mc/\alpha)^2 [1 + C_w^2 (k_w^2 + k_g^2) \hat{K}/2k_w^2]$ である。

これら摂動論から得られた理論解とシミュレーションで得られた数値解を比較した結果を図 3 に示す。このケースでは展開パラメータを $\varepsilon = 5 \times 10^{-2}$ に設定しており、ウィグラー磁場のピッチが $\lambda_w = 5$ cm、磁場強度が $B_w = B_g = 1$ kG、初期の粒子位置が $x(z=0) = y(z=0) = 0.0398$ cm、ビームエネルギーが 4.29 MeV の場合に相当する。長周期のベータトロン振動を含め、理論解が数値解とよく一致していることがわかる。

さらに、電子ビームが伝播するためには(14)式の波数が実値である必要があることから、ウィグラー磁場中を通過できるビーム電流の最大値は文献[10]に従って以下で求め

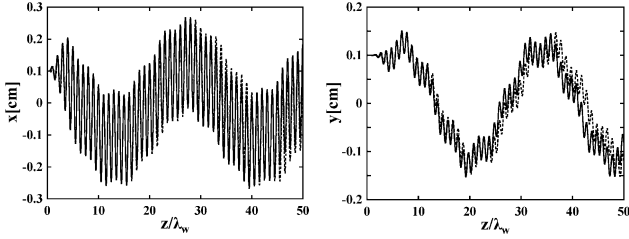


図3 収束ウィグラー磁場とガイド磁場を併用した場合の(左)x方向と(右)y方向の粒子軌道(実線:数値解,点線:式(7)-(15)で与えられる理論解).パラメータは, $l_w = 5$ cm, $B_w = B_g = 1$ kG, $x(z=0) = y(z=0) = 0.1$ cm, $E_b = 4.29$ MeV[文献[14]より].

られる.

$$I_{b,\max} = \frac{c^2 (k_w r_b)^2 p_w^2}{8G\epsilon a} \left[C_w + \frac{1}{2} \left(\frac{B_g}{B_w} \right)^2 \right]. \quad (16)$$

(16)式からわかるように,許容される最大電流値はガイド磁場の増大とともに増加する.一方,次節で議論するように, $k_w \sim \pm nk_g$ では共鳴が発生してビーム伝播が困難になることから, $k_g/k_w = (p_w/a)(B_g/B_w)$ が共鳴の条件から外れるようにガイド磁場強度とビームエネルギーの関係を調整する必要があることがわかる.

4.5.4.2 共鳴領域の扱い

一方,共鳴領域ではガイド磁場によるジャイロ運動がウィグラー運動と同等の寄与をすることから,ウィグラー運動を除去した(7)-(10)式で記述される $Z^\mu = (z; X, Y, t, U, V, p_t)$ から,作用・角変数で記述したジャイロ運動を除去する変換 $Z_R^\mu = (z; R_x, R_y, t, \mu, \theta, p_t)$ を施すと見通しが良くなる[12].ここで, t と p_t 以外の変数は以下で与える.

$$R_x = X - \sqrt{2\mu/ak_g} \cos \theta, \quad (17)$$

$$R_y = Y + \sqrt{2\mu/ak_g} \sin \theta, \quad (18)$$

$$\mu = (U^2 + V^2)/2ak_g, \quad (19)$$

$$\theta = \tan^{-1}(U/V). \quad (20)$$

今,最低次の共鳴 $k_w + k_g \sim 0$ は平板ウィグラー磁場とガイド磁場の系が発散((7)-(10)式で $C_w \rightarrow \infty, C_g \rightarrow \infty$)することから除外し,ここでは $k_w + 2k_g \sim 0$ の共鳴領域を考える.この座標 Z_R^μ と $\Gamma_{R\mu} = \Gamma_\nu \partial Z^\nu / \partial Z_R^\mu$ から求められる共変ベクトルに対して,Lie 摂動論($Z_R^\mu \rightarrow \bar{Z}_R^\mu = Z_R^\mu - \sum_n \epsilon^n g_{R\mu}^{(n)}$)を用いると,対応する $O(\epsilon^4)$ までの基本1形式は以下で与えられる.

$$\bar{\Gamma}_{R\mu}^{(1)} d\bar{Z}^\mu = -ak_g \bar{R}_y, \quad (21)$$

$$\bar{\Gamma}_{R\mu}^{(2)} d\bar{Z}^\mu = \bar{\mu} d\bar{\theta} - \left[k_g \bar{\mu} + (C_w^2 + C_g^2) \frac{p_w^2}{4a} \right] dz, \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}_{R\mu}^{(4)} d\bar{Z}^\mu = & - \left\{ \frac{p_w^4}{64a^3} (3C_w^4 - 2C_w^3 + C_w^2 C_g^2 + 10C_w C_g^2 + 3C_g^4) \right. \\ & + \frac{k_g^2 \bar{\mu}^2}{2a} + \frac{k_g^2 \bar{\mu}^2}{2a} + C_w \frac{p_w^2}{8a} k_w^2 (\bar{R}_x^2 + \bar{R}_y^2) \\ & \left. + \frac{p_w k_w^2 \bar{\mu}}{4ak_g} (\cos \hat{\theta} + \sin \hat{\theta}) \right\} dz. \end{aligned} \quad (23)$$

ここで, $\bar{\Gamma}_{R\mu}^{(3)} d\bar{Z}^\mu = 0, \bar{\theta} = (k_w + 2k_g)z$ である.この基本1形式から運動方程式を導出すると, (\bar{R}_x, \bar{R}_y) と $(\bar{\mu}, \bar{\theta})$ の運動は分離され,前者はジャイロ中心の運動を与え,後者は以下の関係式を満たす.

$$\frac{d\bar{\mu}}{d\bar{\theta}} = \frac{\frac{p_w}{\sqrt{2a}} \frac{k_w^2 \bar{\mu}}{k_g} \sin \bar{\theta}}{k_w + 2k_g + \frac{2k_g^2 \bar{\mu}}{a} + \frac{p_w}{\sqrt{2a}} \frac{k_w^2}{k_g} \cos \bar{\theta}}. \quad (24)$$

ここで,右辺分母第4項と分子は共鳴に伴う長周期摂動(非共鳴領域では振動成分のため除去される)によるもの,右辺分母第3項は永年摂動によるものであり,共に $\bar{\Gamma}_{R\mu}^{(4)} d\bar{Z}^\mu$ ((23)式)に由来している.これらは,平均化法では無視される項である. $f(\bar{\theta}) = -(k_w + 2k_g + p_w k_w^2 \cos \bar{\theta})/\sqrt{2a} k_g$, C を定数とすると,(24)式には以下の解析解が存在する.

$$\bar{\mu} = \frac{\alpha}{2k_g} \left[f(\bar{\theta}) \pm \sqrt{C + \left(\frac{\alpha f(\bar{\theta})}{2k_g} \right)^2} \right] \quad (25)$$

ここで, $\bar{\mu}$ は $\bar{\theta}$ に対して(発散しない)振動解であることから,共鳴が発生してデザイン軌道から離れたとしても,その結果共鳴条件が破れ,軌道は有界領域に留まることを意味している.また,粒子のエネルギーが十分に大きいと仮定して右辺分母第3項を無視すると,(24)式は

$$\bar{\mu} = \frac{C}{k_w + 2k_g + \frac{p_w}{\sqrt{2a}} \frac{k_w^2}{k_g} \cos \bar{\theta}} \quad (26)$$

となる.これから, $\delta k \equiv k_w + 2k_g$ を共鳴幅として定義すると,不安定条件は

$$\frac{|\delta k|}{k_w} < \frac{p_w}{\sqrt{2a}} \frac{k_w}{k_g} \quad (27)$$

と見積もられる.ウィグラー振動の運動量は粒子全体の運動量に比べて小さいことから($p_w/a \ll 1$),共鳴幅は二つの異なった共鳴層間の幅(k_g)より十分に小さく,共鳴層の重なりやそれによる軌道の彷徨運動は弱いことが期待される.

4.5.5 まとめと課題

本節では,ジャイロ運動論モデルの数学的基礎である非正準 Lie 摂動論を様々な電場・磁場で制御される加速器中の粒子ビームや高強度レーザーに照射されたプラズマのダイナミクスなどの幅広い研究に展開することを目的に,それをFELにおける相対論的電子ビームの軌道解析に適用し,その有用性や可能性を検討した.本手法の主な利点を以下にまとめる.

1) 一般的な摂動法では,運動方程式(あるいはブラソフ方程式などの運動論方程式)に対して摂動展開を行うのに対して,非正準 Lie 摂動論では,運動方程式の基となる拡張された $2N+1$ 次元位相空間ラグランジアンを導入し,それに対して摂動展開を行うため,摂動の各次で系を記述するハミルトニアンが定義される.本記

事では、そのような系で長周期のベータトロン振動を精度良く求めることに成功している。

- 2) 運動の恒量を拡張位相空間の変数の一つとすることで、ラグランジアンや運動方程式を簡単化することができる。この利点は一般的なオイラー・ラグランジアン方程式で循環座標を用いることで方程式系が簡単化されることと類似している。一般にそのような座標系はハミルトン・ヤコビ方程式を解いて決定する必要があるが、本記事で紹介した相対論的電子ビームの軌道解析では(定常場を仮定した場合)エネルギーが、高強度レーザー場中の相対論的電子の軌道解析に対して非正準 Lie 摂動論を適用したケース[15]では進行方向の運動量が恒量であるため、そのような変数を座標の一つとした系に非正準変換を用いて移ればよい。これは本手法が相対論的荷電粒子の運動に適していることを示唆している。
- 3) 共鳴近傍での軌道解析は、一般に(0となる分母の)摂動展開を行うことで行われる。一方、本手法では作用-角変数を導入し、共鳴近傍では位相が大きく変化しないことから関連した振動項を永年項と見なすことで、共鳴近傍での安定性解析を行い、不安定となる各々の共鳴幅は隣接する共鳴間の距離と比較して十分に狭いことを明らかにした。このように共鳴現象に対しても本手法は有用である。

粒子の運動エネルギーが増大してより相対論的になると展開パラメータは小さくなり、近似精度が高くなる。しかし、長時間の運動を記述する上では、なお高次の項は重要である。本文献がそのような相対論領域の粒子の軌道解析の一助となることを期待する。

参考文献

- [1] J.R. Cary and R.G. Littlejohn, *Ann. Phys.* **151**, 1 (1983).
 [2] R.G. Littlejohn, *J. Math. Phys.* **23**, 742 (1982).
 [3] R.G. Littlejohn, *J. Plasma Phys.* **29**, 111 (1983).
 [4] T.S. Hahm *et al.*, *Phys. Fluids* **31**, 1940 (1988).
 [5] A.J. Brizard and T.S. Harm, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 421 (2007).
 [6] 岸本泰明: NCC News 13 (1991).
 [7] T. Tanaka and T. Shintake eds., "SCSS X-FEL Conceptual Design Report", RIKEN Harima Institute/SPRING-8 (2005).
 [8] G.L. Carr *et al.*, *Nature*, **420**, 153 (2002).
 [9] E.T. Scharlemann, *J. Appl. Phys.* **58**, 2154 (1985).
 [10] K.R. Chu and A.T. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3235 (1991).
 [11] K. Sakamoto *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 441 (1993).
 [12] Y. Kishimoto *et al.*, *Phys. Plasmas* **2**, 1316 (1995).
 [13] K. Imadera and Y. Kishimoto, *Plasma Fusion Res.* **6**, 1201004 (2011).
 [14] K. Imadera, PhD Thesis, Kyoto University (2010).
 [15] N. Iwata *et al.*, *Plasma Fusion Res.* **5**, 028 (2010).



きし もと やす あき
岸本 泰明

京都大学大学院エネルギー科学研究科教授。1981年広島大学修士課程修了, 1984年大阪大学博士課程修了, 日本原子力研究所(現日本原子力研究開発機構)を経て、2004

年より現職。主な研究分野は、トカマクを中心としたプラズマ乱流輸送や高強度レーザーと物質との相互作用に関する理論・シミュレーション研究などのプラズマ物理。構造の起源を問う学術としてのプラズマ物理に興味を抱き、本小特集とも関係した物質の電離過程や放電・雷現象など、幅広いプラズマ現象に興味をもって研究を行っています。(HP:<http://www.center.iae.kyoto-u.ac.jp/kishi/index.html>)



いまだら けん じ
今寺 賢志

京都大学大学院エネルギー科学研究科助教。主な研究分野は、核融合プラズマのジャイロ運動論シミュレーション研究。

Lie 摂動論によるジャイロ運動論モデルの定式化から始まり、近年はトロイダル配位での乱流輸送シミュレーション研究に従事しています。その過程で行った研究をこのように特集で紹介できることを大変ありがたく思っております。家では、5歳の息子とのかくれんぼが毎日の日課。



5. おわりに

5. Concluding Remarks

古川 勝

FURUKAWA Masaru

鳥取大学大学院工学研究科

(原稿受付：2015年1月23日)

本講座「粒子運動論 ～惑星から荷電粒子まで」では、質点系の力学に関し、幾何学的な性質に則った現代的アプローチについて解説した。特に、実際に問題を解く際に必要となる方法として、Lie 変換摂動論とシンプレクティック数値積分法を取り上げ、その基礎理論と応用について解説した。まず、各章・節の内容を改めて簡単におさらいしたい。

第2章「Hamiltonian系に対するLie変換摂動論と案内中心運動への応用」では、まず非正準変数を用いてHamilton力学が一般化され、さらに微分形式を用いて定式化された。多様体における写像による座標系やベクトル場、微分形式の変換の一般論(数学的基礎を含む)に続き、Lie変換摂動法による基本1形式の変換則が調べられた後、電磁場中の荷電粒子の運動への応用、特に案内中心の運動(ドリフト運動論)が解説された。

第3章「離散シンプレクティック積分法の理論」では、運動方程式の離散化ではなく、離散変数で表された作用積分を停留にする変分積分法が解説された。一般的な理論に続き、基底関数の取り方による簡単化(symplectic partitioned Runge-Kutta法)と、特に2次精度のStörmer-Verlet法を用いた調和振動子の計算例も示された。

第4.1節「太陽系力学に於けるシンプレクティック数値積分」では、中心天体周りのケプラー運動に対応する可積分な部分とそれ以外というHamiltonian分割が、数値計算の高速化に有効で実用的であることが解説された(Wisdom-Holman map)。また、シンプレクティック数値積分におけるHamiltonianの振動に関する分析が述べられた。

第4.2節「ビーム物理学」では、まず、加速器設計における電磁場中の粒子軌道追跡について、Hamiltonianを厳密に解ける部分とそれ以外に分割し、後者にシンプレクティック数値積分法を通常用いることが解説された。次に、加速器の性能を制限するエミッタンス増大の原因として、ビームビーム効果が数値計算結果も用いて解説された。

第4.3節「分子動力学における能勢熱浴とシンプレク

ティック数値積分」では、分子動力学シミュレーションにおいて熱浴を実装するための拡張Hamiltonian系(能勢熱浴)が紹介された。次に、能勢熱浴におけるHamiltonian分割と、シンプレクティック数値積分法の構築法が解説された。

第4.4節「逃走電子のカオス」では、トカマクプラズマの放電崩壊(ディスラプション)時に発生する相対論的な電子(逃走電子)の運動について、シンプレクティックな陰的ガウス公式と、古典的な4次のRunge-Kutta公式の間でのエネルギー保存が比較された後、高エネルギー電子のドリフト共鳴によって粒子軌道がカオス的になることが示された。

第4.5節「自由電子レーザー中の相対論的荷電粒子の運動」では、収束型ウィグラー磁場中の相対論的電子軌道を正準・非正準変数に基づき解析する基礎理論が解説された。次に、ガイド磁場も印加した場合に、ウィグラー/ジャイロ運動の共鳴の有無に応じた変数が選ばれ、Lie変換摂動論が適用された。

いずれも物理学(力学)と数学(幾何学)の最新理論を取り入れて発展しており、それらを通じて分野間で相互に関連している。逆に、これらの最新研究が物理学と数学を進展させているとも確信している。本講座で扱ったような研究に今後関わる学生諸氏には、まず本講座の内容を理解した上で、これを足掛かりに他分野へも情報発信力のある研究を展開されることを期待している。

今後の展望として、本講座で触れられなかった二点を述べさせていただく。それは、常微分方程式で表されるMHD固有値問題へのLie変換摂動論の適用が考えられていること*1、シンプレクティック数値積分法の偏微分方程式系への応用が進みつつあることである*2。いずれも、理論面のみならず実用面からも今後の発展が大いに期待される。

最後にもう一度、本講座を実現するにあたり、貴重な時間を割いて議論、執筆くださった皆様に心から感謝いたします。

*1 徳田伸二氏、私信。

*2 例えば、T.J. Bridges, Math. Proc. Camb. Phil. Soc. 121, 147 (1997).