2P096

時間依存変分法における拘束条件

（室蘭工大）　○ 太田勝久

[1] **序：**我々は先に拘束条件付きの時間依存変分法の理論を展開し、古典力学拘束系と同様に運動自由度を第１類と第２類自由度に分類できることを示した[1] 。ここではさらにダイナミクスで凍結対象とする運動自由度が満たすべき必要条件として、TDVP における拘束自由度の正規性条件[2] の吟味とその応用例を報告する。

[2] **拘束条件の正規性とポアソン括弧：** ここではまず正規性条件が、凍結空間 Ω 内の自由度が構成するポアソン括弧行列の正則性 (第２類性) に同値となることを示す。流通座標 $\{\alpha_i\}_{i=1,2N}$ での一般化されたポアソン括弧 (Generalized Poisson Bracket: GPB) は次式で定義される。

$$\{r, s\} \;\; = \;\; \sum_{i=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} \frac{\partial r}{\partial \alpha_i} (\boldsymbol{B}^{-1})_{ij} \frac{\partial s}{\partial \alpha_j} \, . \tag{1}$$

ここで r, s は適当なスカラー量であり、B_{ij} 行列は歪エルミート (Skew-Hertmitian) 行列である。$2N$ 個の成分を持つベクトル $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s}$ の時は、$(\boldsymbol{R})_{ai} = \frac{\partial r_a}{\partial \alpha_i}$, $(\boldsymbol{S})_{bj} = \frac{\partial s_b}{\partial \alpha_j}$ として、$\boldsymbol{\{r, s\}} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{S}^{\dagger}$. また、流通座標 $\{\alpha_i\}_{i=1,2N}$ 自体のポアソン括弧は $\boldsymbol{\{\alpha, \alpha\}} = \boldsymbol{B}^{-1}$ と成る。今、$\boldsymbol{f}$ が正規拘束自由度であるとすると、正則な流通座標自由度 $\{\alpha_i\}_{i=1,2N}$ を用いて、ポアソン括弧の基本的性質より、

$$\boldsymbol{\{f, f\}} \;\; = \;\; \frac{\boldsymbol{\partial f}}{\boldsymbol{\partial \alpha}} \boldsymbol{\{\alpha, \alpha\}} \frac{\boldsymbol{\partial f}}{\boldsymbol{\partial \alpha}} \, . \tag{2}$$

が成立する。従って $\boldsymbol{f}$ が正規自由度であれば、

$$|\boldsymbol{\{f, f\}}|_{\Omega=0} \;\; = \;\; \left| \frac{\boldsymbol{\partial f}}{\boldsymbol{\partial \alpha}} \right|_{\Omega=0} |\boldsymbol{\{\alpha, \alpha\}}|_{\Omega=0} \left| \frac{\boldsymbol{\partial f}}{\boldsymbol{\partial \alpha}} \right|_{\Omega=0} \neq 0 \, . \tag{3}$$

となる。この逆も容易であるので、結局、自由度 $\boldsymbol{f}$ が正規自由度であることと、それらの成すポアソン括弧行列 $\boldsymbol{\{f, f\}}$ が正則となることとは同値となる。

[3] **追加設定される拘束条件の正規性：**次に、以上の応用例として、新たに追加設定される拘束自由度の正規性を、ポアソン括弧行列の正則性で判定する。今、既存で正規な拘束自由度を $\boldsymbol{f} : \{f_a\}_{a=1,2N}$ とし、これに新たに付加する拘束自由度を $\boldsymbol{g} : \{g_b\}_{b=1,2M}$ とする。そして、これら全体 $2(N+M)$ 次元の拘束自由度を集合的に $\boldsymbol{h} = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{g})$、拡大された凍結空間を $\left\{\tilde{\Omega} : \{f_a(\alpha)\}_{a=1,2N}, \{g_b(\alpha)\}_{b=1,2M}\right\}$ で記す。既存拘束自由度 $\boldsymbol{f}$ は正規ゆえ、ポアソン括弧行列 $\boldsymbol{\{f, f\}}$ は正則行列である。従って、

$$|\boldsymbol{\{h, h\}}|_{\tilde{\Omega}=0} \;\; = \;\; \left| \begin{array}{cc} \boldsymbol{\{f, f\}} & \boldsymbol{\{f, g\}} \\ \boldsymbol{\{g, f\}} & \boldsymbol{\{g, g\}} \end{array} \right|_{\tilde{\Omega}=0} = |\boldsymbol{\{f, f\}}|_{\tilde{\Omega}=0} \left| \boldsymbol{\{g, g\}} - \boldsymbol{\{g, f\}}\boldsymbol{\{f, f\}}^{-1}\boldsymbol{\{f, g\}} \right|_{\tilde{\Omega}=0} \tag{4}$$

これより、凍結空間全体の $\boldsymbol{\{h, h\}}$ が非正則行列となる場合を分類すると、まず、行列 $\boldsymbol{\{f, g\}}|_{\tilde{\Omega}=0} = \boldsymbol{0}$ すなわち $\boldsymbol{g}$ が $\boldsymbol{f}$ に対して局所的に第１類となり、かつそのゲージ固定条件が不備 $|\boldsymbol{\{g, g\}}|_{\tilde{\Omega}=0} = 0$ の場合か、あるいは、新たに付加した拘束自由度の変分 $\boldsymbol{\delta g}|_{\tilde{\Omega}=0}$ に、既存の拘束自由度の変分 $\boldsymbol{\delta f}|_{\tilde{\Omega}=0}$ に従属する成分しか含まれていなかった場合である事が判る。

[4] **TDVP-EOM 特異点と局所的非正規性：** ２つ目の応用例として、一般に非正準変数系となる TDVP-EOM での特異性の問題を、拘束条件付きの正準変数系に変換し、それら拘束条件の正準変数

[1] K. Ohta, Phys. Rev. **A70**, 022503 (2004).

[2] 拘束自由度の正規性条件とは、凍結空間内の自由度 $\{\Omega : \{f_a(\alpha)\}_{a=1,2N}\}$ の任意変分 $\{\delta\Omega : \{\delta f_a\}_{a=1,2N}\}$ が、凍結空間を構成する流通座標の独立変分 $\{\delta\alpha_i\}_{i=1,2N}$ を用いて、次式により表わされることである (cf. M. H. Henneaux, C. Teitelboim, *Quantization of Gauge Systems*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1992)；

$$\delta f_a \; = \; \sum_{i=1}^{2N} \left. \frac{\partial f_a}{\partial \alpha_i} \right|_{\Omega=0} \delta\alpha_i \, , \qquad \left| \frac{\boldsymbol{\partial f}}{\boldsymbol{\partial \alpha}} \right|_{\Omega=0} \neq 0 \, .$$

によるポアソン括弧の正則性で吟味できることを示す。まず通常の TDVP における Euler 方程式を整理すると、TDVP パラメータ $\{\alpha_i\}_{i=2N}$ を非正準変数とする EOM として

$$\sum_{j=1}^{2N} B_{ij}\,\dot{\alpha}_j \;=\; \frac{\partial <\Psi|\hat{H}|\Psi>}{\partial \alpha_i}\,. \tag{5}$$

が得られる。ここで $B_{ij} = i\left(<\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_j}> - <\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_j}|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}>\right)$. そこで、新たに "運動量" に相当する新変数 $\{\beta_i\}_{i=1,2N}$ を、第１次拘束条件 $\phi_i(\beta,\alpha) = \beta_i - i <\Psi|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}>= 0$、及び未定乗数 $\{\lambda_i\}_{i=1,2N}$ と供に導入する。すると、拘束自由度のポアソン括弧 $\{\phi_i,\,\phi_j\}$ は、正準変数 $\{\alpha_i,\beta_i\}_{i=1,2N}$ 表示で

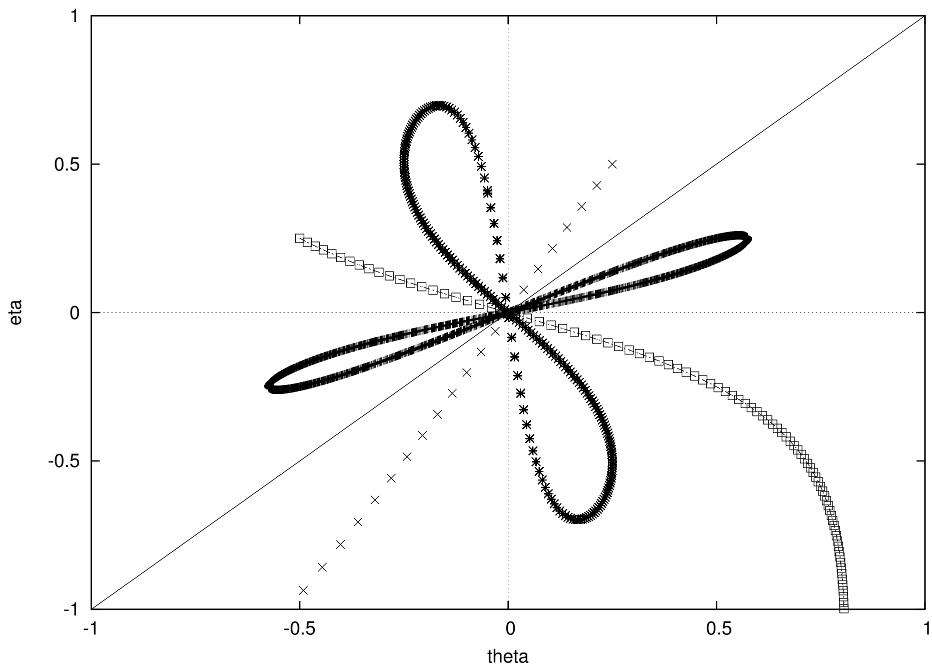
$$\{\phi_i,\,\phi_j\} \;=\; \sum_{k=1}^{2N}\left(\frac{\partial\phi_i}{\partial\alpha_k}\frac{\partial\phi_j}{\partial\beta_k} - \frac{\partial\phi_j}{\partial\alpha_k}\frac{\partial\phi_i}{\partial\beta_k}\right) = i\left(<\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_j}> - <\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_j}|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}>\right) = B_{ij}\,. \tag{6}$$

となる。また、拘束条件付き正準変数系での EOM が $\dot{\alpha}_i = \lambda_i,\ \dot{\beta}_i = \frac{d}{dt}\left[i <\Psi|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}>\right]$ であること、さらに $\{\phi_i, <\Psi|\hat{H}|\Psi>\} = -\frac{\partial<\Psi|\hat{H}|\Psi>}{\partial\alpha_i}$ であることにより、未定乗数 $\{\lambda_i\}_{i=1,2N}$ を決定する第２類拘束の整合性条件式[1]

$$\sum_{j=1}^{2N}\{\phi_i,\,\phi_j\}\,\lambda_j \;=\; -\{\phi_i, <\Psi|\hat{H}|\Psi>\}\,. \tag{7}$$

が EOM Eq.(5) に完全に一致することが判る。以上より、EOM Eq.(5) における B_{ij} の局所的非正則化 (特異点) は、拘束自由度の正準変数によるポアソン括弧行列 Eq.(6) の局所的非正則化 (非正規性) として解析できることになる。

計算例：今、実 TDVP パラメータ $\{\theta(t),\eta(t)\}$ と実の規格直交基底 $\{\chi_1,\chi_2\}$ で展開され、陽に規格化された TDVP 試行波動関数を $\Psi = \left(\theta^2+\eta^2\right)^{-\frac{1}{2}}\left(\eta e^{i\theta}\chi_1 + \theta e^{i\eta}\chi_2\right)$ とすると、
$B^{-1}_{\theta\eta} = \{\phi_\theta,\phi_\eta\}^{-1} = \theta\times\left[\frac{1}{2}\frac{\left[1+\left(\frac{\eta}{\theta}\right)^2\right]^2}{\left(\frac{\eta}{\theta}\right)\left[1-\left(\frac{\eta}{\theta}\right)\right]}\right]$.
トラジェクトリ：



$\eta=\theta,\ \eta=0,\ \theta=0$ 以外の方向から原点へ漸近する場合は、連続的なトラジェクトリが得られている。一方、$(\theta_0,\eta_0) = (0.25, 0.5)$ から始まるトラジェクトリは、やがて特異点領域 $\eta=\theta$ に漸近して発散して行く。[Hamiltonian parameters: $<\chi_1|\hat{H}|\chi_1> - <\chi_2|\hat{H}|\chi_2> = -2.0$, $<\chi_1|\hat{H}|\chi_2> = 1.0$. Initial conditions: $(\theta_0,\eta_0) = (\pm0.5,\pm0.25)$, および $(\theta_0,\eta_0) = (\pm0.25,\pm0.5)$.]