第6回　正準方程式

理学部　齊藤国靖 [*]

2023年6月2日

これまで，ラグランジアンによる定式化を見てきたが，これからはハミルトニアンによる定式化を行う．ラグランジアンと違い，ハミルトニアンは一般座標，一般運動量，および時間の関数であり，系に働く力が保存力の場合は全エネルギーと同等である．ハミルトニアンによって，運動方程式は正準方程式というより対称性の高い連立微分方程式に書き直される．また，ハミルトニアンと循環座標の関係や，ラウシアン（ラウス関数）についても説明する．

1　はじめに

質量 m の質点に力 $F(q)$ が作用するとき，ニュートンの運動方程式

$$\ddot{q} = \frac{1}{m} F(q) \tag{1}$$

は座標 q に対する２階微分方程式である．ところで，質点の運動量 $p = m\dot{q}$ を用いれば，式 (1) を

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = F(q) \end{cases} \tag{2}$$

の様に書き換えることができる．式 (2) は q と p に対する連立１階微分方程式であり，意味としては式 (1) と同等である．一般に，微分方程式は階数の少ない方が解き易いから，式 (1) よりも (2) の方が数学的に扱い易い．その反面，変数の数が１つから２つに増えるので，解くべき微分方程式の数は２つに増える．これまでのラグランジュ方程式は一般座標に関する１つの微分方程式だったから，式 (1) の方に近い形である．これを式 (2) の様に一般座標と一般運動量に関する２つの微分方程式として書き直すのがこれからの目的である．

なお，今回から**アインシュタインの縮約記法**を使う．つまり，同じ添え字の和の記号は

$$\sum_{i=1}^{n} p_i q_i \equiv p_i q_i$$

の様に省略する（言い換えると，同じ添え字をもつ変数の掛け算は，添え字に対して自動的に和をとることにする）．

[*] k.saitoh@cc.kyoto-su.ac.jp

2　正準方程式

2.1　ラグランジアンの変分

一般運動量はラグランジアン L を用いて

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{3}$$

と定義される（第１回参照）．これをラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \tag{4}$$

に代入すると，

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \tag{5}$$

となる．ラグランジアン $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ は一般座標 q_i とその微分 $\dot{q}_i$ $(i = 1, \ldots, n)$ の関数だから，ラグランジアンの変分は

$$dL(q_i, \dot{q}_i, t) = \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \tag{6}$$

と書ける．但し，右辺ではアインシュタインの縮約記法が使われていることに注意しよう．式 (6) に (3) と (5) を代入すると

$$dL(q_i, \dot{q}_i, t) = \dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \tag{7}$$

となる．

2.2　ハミルトニアン

一般座標 q_i $(i = 1, \ldots, n)$ に関するラグランジュ方程式 (4) を，q_i と p_i に関する方程式に書き換える．そのために，**ハミルトニアン**

$$H(q_i, p_i, t) \equiv \dot{q}_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \tag{8}$$

を導入する．ここで，ラグランジアンは q_i, $\dot{q}_i$, t の関数であるのに対し，ハミルトニアンは q_i, p_i, t の関数である．式 (6) と同様に，ハミルトニアンの変分は

$$dH(q_i, p_i, t) = \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \tag{9}$$

と書ける．一方，式 (8) の両辺の変分を計算し，式 (7) を代入すると，

$$\begin{aligned} dH(q_i, p_i, t) &= p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i - dL(q_i, \dot{q}_i, t) \\ &= -\dot{p}_i dq_i + \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \tag{10}$$

となる．式 (9) と (10) の右辺のうち，変化量 dq_i, dp_i は任意なので，各係数を比較して

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{11}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{12}$$

となる．式 (11) と (12) はそれぞれ q_i と p_i の連立 1 階微分方程式であり，**正準方程式**と呼ばれる．この形は，先に述べた式 (2) と同様であることに注目しよう．さらに，式 (9) と (10) の右辺のうち，dt の係数を比較すると

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \tag{13}$$

となる．つまり，ハミルトニアンの時間微分はラグランジアンの時間微分の逆符号で与えられる．

2.3　エネルギーとの関係

デカルト座標系における運動エネルギーは，アインシュタインの縮約記法を用いて

$$T = \frac{m}{2}\left(\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2\right)$$

と書ける．一方，一般座標系における運動エネルギーは $\dot{q}_i$ の**2 次形式**

$$T = \frac{1}{2}T_{kl}\dot{q}_k\dot{q}_l \tag{14}$$

で与えられる．式 (14) は運動エネルギーの最も一般的な表式で，具体的な問題を考えれば，2 次形式の係数 T_{kl} にはゼロも含まれている．また，$\dot{q}_k$ と $\dot{q}_l$ を入れ替えても運動エネルギーは変わらないから，係数は添え字の入れ替えに対して不変であり，$T_{kl} = T_{lk}$ が成り立つ．なお，式 (14) の添え字にもアインシュタインの縮約記法が使われており，和の記号を省略せずに書けば

$$T = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\frac{1}{2}T_{kl}\dot{q}_k\dot{q}_l$$

となる．

質点系に作用する力が**保存力**の場合を考えると，ラグランジアンは時間 t に陽に依存せず，

$$L(q_i, \dot{q}_i) = T(\dot{q}_i) - U(q_i) \tag{15}$$

と表される．定義式 (3) を使って一般運動量を計算すると，式 (14) より

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \\ &= \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \\ &= \frac{1}{2}T_{il}\dot{q}_l + \frac{1}{2}T_{ki}\dot{q}_k \\ &= T_{ij}\dot{q}_j \end{aligned} \tag{16}$$

となる．但し，係数の対称性 $T_{ki} = T_{ik}$ を用いたこと，最後に添え字 l と k を j に統一したこと，添え字 i については（単独の添え字なので）和をとっていないことに注意.

式 (15) と (16) をハミルトニアンの定義式 (8) に代入すると

$$\begin{aligned} H(q_i, p_i, t) &= \dot{q}_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i) \\ &= T_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j - T(\dot{q}_i) + U(q_i) \\ &= \frac{1}{2}T_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j + U(q_i) \\ &= T(\dot{q}_i) + U(q_i) \end{aligned} \tag{17}$$

となる．但し，運動エネルギーの定義式 (14) を用いた．式 (17) の結果より，質点系に保存力だけが働く場合，ハミルトニアンは全エネルギーを表すことが解る．さらに，右辺は運動エネルギー $T(\dot{q}_i)$ とポテンシャルエネルギー $U(q_i)$ の和なので，ハミルトニアンも時間 t に陽に依存せず，$H(q_i, p_i)$ と書ける．従って，ハミルトニアンの時間に関する全微分は

$$\frac{d}{dt}H(q_i, p_i) = \frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i$$

である．右辺に正準方程式 (11), (12) を代入すると

$$\frac{d}{dt}H(q_i, p_i) = \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0$$

$$\therefore H(q_i, p_i) = \mathrm{const.}$$

となり，全エネルギーが一定であるのが解る（**エネルギー保存則**）.

2.4 循環座標とラウシアン

循環座標はラグランジアンに含まれない座標のことである（第１回参照）．質点系の一般座標

$$q_1, \ldots, q_s, q_{s+1}, \ldots, q_n$$

のうち，$q_{s+1}, \ldots, q_n$ までが循環座標であれば，ラグランジアンは

$$L(q_1, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n, t) = L(q_1, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_s, \dot{q}_{s+1}, \ldots, \dot{q}_n, t)$$

と表される．ハミルトニアンの定義式 (8) より，

$$H(q_i, p_i, t) = \dot{q}_i p_i - L(q_1, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n, t)$$

であるから，循環座標 $q_{s+1}, \ldots, q_n$ はハミルトニアンにも含まれない．従って，正準方程式 (12) を循環座標に共役な一般運動量に用いると

$$\dot{p}_n = -\frac{\partial H}{\partial q_n} = 0 \qquad \therefore p_n = \mathrm{const.}$$

となり，循環座標に共役な一般運動量は一定であることが解る.

循環座標の性質を利用した**ラウシアン**（ラウス関数）を

$$R \equiv \sum_{i=s+1}^{n} \dot{q}_i p_i - L(q_1, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n, t) \tag{18}$$

で定義する．ここで，右辺の第１項の和は $i = s+1, \ldots, n$ までであることに注意しよう．まず，循環座標ではない一般座標 $q_1, \ldots, q_s$ に対して

$$\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} = -\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ , \qquad \frac{\partial R}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i} \ , \qquad (i = 1, \ldots, s)$$

となる．第１式の両辺を t で微分して，ラグランジュ方程式を用いると

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} = -\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i}$$

である．よって，これに第２式を代入すると

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial R}{\partial q_i} \tag{19}$$

となり，ラウシアンはラグランジュ方程式と同じ形の方程式を満たす．次に，式 (18) の右辺の第１項の添え字は循環座標に関する和なので，アインシュタインの縮約記法を用いれば

$$R = \dot{q}_i p_i - L(q_1, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n, t)$$

と書ける．これはハミルトニアンの定義式 (8) と同じ形なので，正準方程式と同様に

$$\dot{q}_i = \frac{\partial R}{\partial p_i} \tag{20}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial R}{\partial q_i} \tag{21}$$

となる．但し，循環座標はラウシアンにも含まれないので，式 (21) の右辺はゼロであり，

$$\dot{p}_i = 0 \ , \qquad (i = s+1, \ldots, n)$$

が再び得られる．以上により，ラウシアンは循環座標ではない一般座標に対してはラグランジアンと同値であり，循環座標に対してはハミルトニアンと同値であるのが解る．