Chapter 9

ハミルトン形式（1）

今回の内容

/// レポート回収（if any）

/// 前回の復習

§9 ハミルトン形式（1）

前回の復習

ラグランジアン

$$L(r,\phi) = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2\right) + \frac{eB_0}{2}r^2\dot{\phi} + \frac{eQ}{r}$$

から得られるラグランジュの運動方程式は時間に関する 2 階の微分方程式が 2 つ：

$$\ddot{r} = r\dot{\phi}^2 + \frac{eB_0}{m}r\dot{\phi} - \frac{eQ}{m}\frac{1}{r^2}$$
$$\ddot{\phi} = -2\frac{\dot{r}}{r}\dot{\phi} - \frac{eB_0}{m}\frac{\dot{r}}{r}$$

これを解くために

$$v_r = \dot{r}$$
$$v_\phi = \dot{\phi}$$

という新しい変数を定義すると、時間に関する一階の微分方程式が 4 つ：

$$\dot{r} = v_r \tag{9.1}$$
$$\dot{v}_r = rv_\phi^2 + \frac{eB_0}{m}rv_\phi - \frac{eQ}{m}\frac{1}{r^2} \tag{9.2}$$
$$\dot{\phi} = v_\phi \tag{9.3}$$
$$\dot{v}_\phi = -2\frac{v_r}{r}v_\phi - \frac{eB_0}{m}\frac{v_r}{r} \tag{9.4}$$

9.1 ラグランジュ形式の（数値計算上の（ちょっとした））不便さ

1 自由度系のラグランジュの運動方程式は

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

であった。これは、時間 t に関する 2 階の微分方程式である。

前回紹介したように、一階の微分方程式系を解くために開発された様々な数値積分法を使って 1 自由度系のラグランジアン $L(q, \dot{q})$ から得られるラグランジュの運動方程式を数値的に解くことはそれほど難しいことではない。その手続きは、まずはラグランジュの運動方程式を

$$\ddot{q} = F(q, \dot{q})$$

という形に変形し、

$$\dot{q} = v \tag{9.5}$$

$$\dot{v} = F(q, v) \tag{9.6}$$

という 2 つの一階微分方程式に分けるという簡単なものだからである。

だが、自由度が 2 以上となるとそう簡単ではない。N 自由度系のラグランジアン $L(q_1, \ldots, q_N, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_N)$ から得られるラグランジュの運動方程式を数値計算で解く場合を考えよう。

数値積分プログラムに渡すことを想定し、q_i に共役な一般化運動量 $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ を新たな変数として導入する。するとラグランジュの運動方程式は、

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(q_1, \ldots, q_N, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_N) \tag{9.7}$$

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}(q_1, \ldots, q_N, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_N) \tag{9.8}$$

という $2N$ 個の一階微分方程式系に自然に分けられる。

しかし、この式のままでは $\dot{q}_i$ が右辺に入っているので、数値積分プログラムにこの式をそのまま移すことはできない。そこで、この式を（手計算で）変形し、

$$\dot{q}_i = F_q(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N), \tag{9.9}$$

$$\dot{p}_i = F_p(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N) \tag{9.10}$$

という形に変換した上でようやく数値積分プログラムに渡すことが出来る。

面倒な式変形なしに、式 (9.9) と式 (9.10) の形で微分方程式系が自然に導出されるような力学理論があれば便利であろう。実は、そのような理論は存在する。ハミルトン形式の解析力学と呼ばれるものである。

これまで学んできたラグランジュ形式の解析力学ではラグランジアン L が中心的な役割を果たす関数であったが、ハミルトン形式の解析力学では、ラグラン

ジアンに代わって新しい関数が基本的な役割を果たす。それはハミルトニアンと呼ばれる。

ラグランジュ形式の解析力学では、

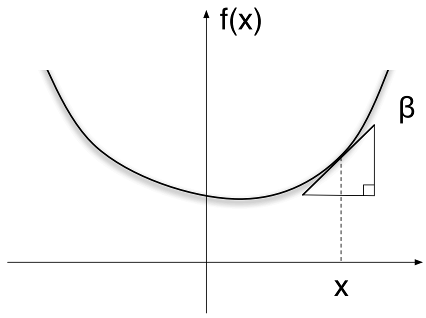
$$p_i = \frac{\partial L(\cdots, \dot{q}_i, \cdots)}{\partial \dot{q}_i}$$

という式が得られて、これは数値計算上不便なので、最初から

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(\cdots, p_i, \cdots)}{\partial p_i}$$

という形が得られる方法が欲しいというわけであるが、こういう場合にはルジャンドル変換を使うのが便利である。上の H がハミルトニアンである。

9.2 ルジャンドル変換



x の凸関数 $f(x)$ を考える。凸関数では、x に対して、接線の傾き β

$$\beta = \frac{df(x)}{dx}$$

が一意に決まる（二つの異なる x で同じ接線の傾きを持つことはない）。これを x から β への変数変換

$$x \quad \Leftrightarrow \quad \beta$$

ととらえることができる。ではこの新しい変数 β に対して、上に対応するような関係

$$x = \frac{dg(\beta)}{d\beta}$$

を導く関数 $g(\beta)$ は何であろうか？

それは

$$x\,\beta = f + g \tag{9.11}$$

を満たす関数、つまり

$$g(\beta) = x\,\beta - f(x) \tag{9.12}$$

である。なぜなら

$$g(\beta) = x(\beta)\,\beta - f(x(\beta))$$

に対して、

$$\frac{dg}{d\beta} = x + \beta\,\frac{dx}{d\beta} - \frac{df}{dx}\,\frac{dx}{d\beta} = x$$

であるからである。ここで $\frac{df}{dx} = \beta$ を使った。式 (9.12) を x に関する f から g へのルジャンドル (Legendre) 変換という。

g も凸関数である。また、式 (9.11) の対称性から明らかなように、ルジャンドル変換した関数から逆にルジャンドル変換すると元に戻る。

ルジャンドル変換の簡単な例をあげれば、

$$f_0(x) = x^2 \quad \Leftrightarrow \quad g_0(\beta) = \frac{\beta^2}{4}$$

である。この関数 $f_0(x)$ を x 方向に並行移動した関数のルジャンドル変換は

$$f_1(x) = (x-1)^2 \quad \Leftrightarrow \quad g_1(\beta) = \frac{\beta^2}{4} + \beta$$

である。また、$f_0(x)$ を定数倍した関数のルジャンドル変換は

$$f_2(x) = c\,x^2 \quad \Leftrightarrow \quad g_2(\beta) = \frac{\beta^2}{4c}$$

となる。

ラグランジュの運動方程式に戻ろう。ラグランジアン $L(q,\dot{q})$ の変数 q は省略して $L(\dot{q})$ と書くことにすると、

$$p = \frac{\partial L(\dot{q})}{\partial \dot{q}}$$

という式はこのままでは使いにくいので、

$$\dot{q} = \frac{\partial (?)}{\partial p}$$

という形に持って行きたいという話をしていた。そこで、$L(\dot{q})$ に $\dot{q}$ に関するルジャンドル変換を施した

$$H(p) = p\,\dot{q} - L(\dot{q})$$

に対して

$$\dot{q} = \frac{\partial H(p)}{\partial p}$$

となる。これで、望みどおりの形になった。念の為にもう一度確認してみると、

$$\frac{\partial H(p)}{\partial p} = \dot{q} + p\frac{\partial \dot{q}}{\partial p} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial p} = \dot{q} + p\frac{\partial \dot{q}}{\partial p} - p\frac{\partial \dot{q}}{\partial p} = \dot{q}$$

と確かに成り立っている。

9.3 ハミルトニアン

ラグランジアン $L(q,\dot{q})$ を $\dot{q}$ に関してルジャンドル変換した

$$H(q,p) = p\,\dot{q} - L(q,\dot{q})$$

をハミルトニアン（Hamiltonian）という。

ハミルトニアンでは q と p が独立変数である。p を q に共役な運動量ということは以前述べたが、p を正準運動量ともいう。q は正準座標という。q と p の組を正準変数という。

上で書いたように、

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

と書ける。では、$\frac{\partial H}{\partial q}$ がどうなるか、計算してみよう。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial q} &= \frac{\partial}{\partial q}\left\{p\dot{q} - L(q,\dot{q}(q,p)\right\} \\
&= p\frac{\partial \dot{q}(q,p)}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial q} \\
&\quad \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p \text{ より}\right) \\
&= -\frac{\partial L}{\partial q} \\
&= -\dot{p}
\end{aligned}$$

ここで、最後の変形では、ラグランジュの運動方程式の帰結

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = \frac{dp}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q} \tag{9.13}$$

を使った。

9.4 正準方程式

上では、ラグランジアンが与えられていて、ラグランジュの運動方程式が成り立つならば、即ち式 (9.13) を仮定すれば、

$$\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}$$

が成り立つことを示した。ここで、ラグランジアンのことは忘れて、ハミルトニアン $H(q,p)$ が基本的な存在であると考えてみよう。そうすると、運動方程式は、

$$\dot{q} = \frac{\partial H(q,p)}{\partial p} \tag{9.14}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q} \tag{9.15}$$

となる。これをハミルトン形式の運動方程式、あるいは正準運動方程式という。

ラグランジアン $L(q,\dot{q})$ が既知だけれどもハミルトニアン $H(q,p)$ が未知の場合は、ルジャンドル変換

$$H(q,p) = p\,\dot{q}(q,p) - L(q,\dot{q}(q,p)) \tag{9.16}$$

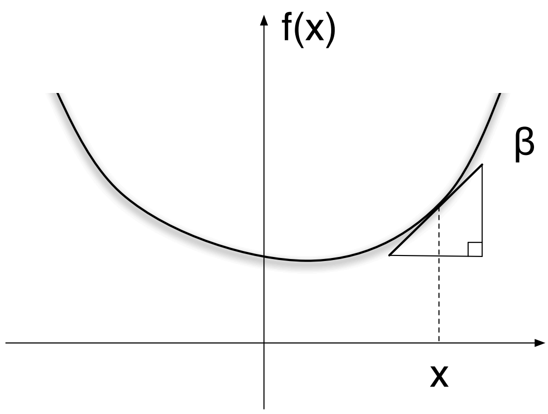
によってハミルトニアンを構成することができる。ここで、p は、q に共役な正準運動量、つまり

$$p = \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial \dot{q}}$$

である。

9.5 ルジャンドル変換としての L と H

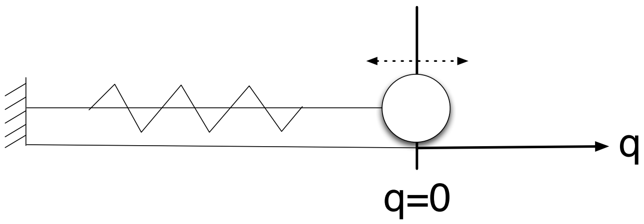
念のため、ルジャンドル変換としてのラグランジアンとハミルトニアンの関係をまとめておこう。



$$\begin{aligned} x &\Leftrightarrow \beta \\ f(x) &\Leftrightarrow g(\beta) \\ \frac{df}{dx} = \beta &\Leftrightarrow \frac{dg}{d\beta} = x \end{aligned}$$

—

$$\begin{aligned} \dot{q} &\Leftrightarrow p \\ L(\cdots,\dot{q}) &\Leftrightarrow H(\cdots,p) \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p &\Leftrightarrow \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q} \end{aligned}$$



9.6　例１

バネ（定数 k）と質点（質量 m）の１次元系を考えよう。自然長の位置を $q=0$ として正準座標 q をとると、この系のラグランジアン L は

$$L(q,\dot{q}) = K - U = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - \frac{k}{2}q^2$$

である。正準運動量 p は

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$$

だから、この系のハミルトニアンは、ルジャンドル変換より

$$H(q,p) = p\dot{q} - L = \frac{p^2}{m} - \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{k}{2}q^2\right) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2$$

ある。

改めて書くと、この系のハミルトニアンは、

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2 \tag{9.17}$$

で与えられる。正準方程式をたててみよう。

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \tag{9.18}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -kq \tag{9.19}$$

この正準方程式は式 (9.5) と (9.6) という形に自動的になっている。したがって、このまま数値積分プログラムに移すことができるので大変便利である。（この場合は解析的に解けるが。）

このハミルトニアン (9.17) を q と $\dot{q}$ で書いてみると、

$$H = \frac{m}{2}\dot{q}^2 + \frac{k}{2}q^2 = K + U$$

であることがわかる。つまりハミルトニアンは系の全エネルギーの関数形に等しい。

9.7 ハミルトニアンとエネルギー

上のハミルトニアンが全エネルギーの式に一致するのは偶然ではない。ポテンシャル $U(q)$ が速度に依存せず、運動エネルギー K が q の関数 $f(q)$ を使って

$$K(q) = f(q)\,\dot{q}^2$$

という形で書ける 1 自由度系の場合についてこのことを確認しよう。この場合、ラグランジアン L は

$$L = K - U = f(q)\,\dot{q}^2 - U(q)$$

である。正準運動量は

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 2f(q)\,\dot{q}$$

である。ルジャンドル変換によって

$$\begin{aligned} H &= p\dot{q} - L \\ &= 2f(q)\,\dot{q}\dot{q} - \bigl(f(q)\dot{q}^2 - U(q)\bigr) \\ &= f(q)\,\dot{q}^2 + U(q) \\ &= K + U \end{aligned}$$

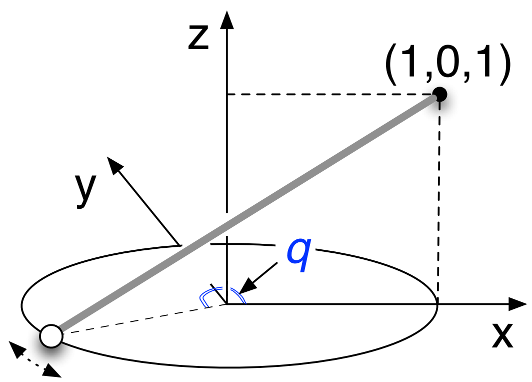
こうして、

$$H = (\text{運動エネルギー}) + (\text{ポテンシャル}) = (\text{全エネルギー})$$

確かめられた。

なお、これは関数の形が全エネルギーと等しいという意味である。ハミルトニアン H は q と p の「関数」(後に述べる相空間中の「場」)であり、「量」としての全エネルギーとは異なることに注意しよう。

9.8 例 2



質量 m の質点が、原点を中心とする半径 1 の円（$x^2+y^2=1$）の上を滑る。この質点が、点 $(x,y,z)=(1,0,1)$ とバネでつながれているときの運動を求める。重力はなく、摩擦は無視する。バネ定数は k、自然長は 0 とする。

(a) 図のように x 軸との角度 q を一般化座標として、この系のラグランジアン $L(q,\dot{q})$ を求めよ。

(b) q に共役な運動量 p を求めよ。

(c) q と p を正準変数としたハミルトニアン $H(q,p)$ を求めよ。

(d) ハミルトンの運動方程式を書け。

(e) $|q|\ll 1$ の時の解を求めよ。

解

(a) 運動エネルギーは

$$K=\frac{m}{2}\dot{q}^2$$

質点の座標は $(x,y,z)=(\cos q,\sin q,0)$ なので、バネの長さを ℓ とすると

$$\ell^2=(\cos q-1)^2+\sin^2 q+1=3-2\cos q$$

だからポテンシャルエネルギーは

$$U=\frac{k}{2}\ell^2=\frac{k}{2}(3-2\cos q)$$

従ってラグランジアンは

$$L(q,\dot{q})=\frac{m}{2}\dot{q}^2-\frac{k}{2}(3-2\cos q)$$

である。

(b)

$$p=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}=m\dot{q}$$

(c) ラグランジアンをルジャンドル変換して、

$$H=p\dot{q}-L=\frac{p^2}{m}-\frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}(3-2\cos q)$$

つまり、この系のハミルトニアン H は

$$H(q,p)=\frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}(3-2\cos q)$$

である。$H=K+U$ であることに注意しよう。

(d)

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \tag{9.20}$$

と

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -k \sin q \tag{9.21}$$

の 2 つが正準方程式である。

(d) $|q| \ll 1$ のとき $\sin q \sim q$ だから、(9.21) は

$$\dot{p} = -k\, q$$

となる。式 (9.20) を時間微分した式にこれを代入すると、

$$\ddot{q} = -\omega^2 q$$

を得る。ここで $\omega^2 = k/m$ である。従って解は

$$q(t) = c_1 \cos(\omega t + c_2)$$

c_1 と c_2 は定数。

9.9 多自由度系の場合

多自由度系の正準方程式は 1 次元系の自然な拡張である。N 自由度の系に対しては、N 個の正準座標 $q_1, \cdots, q_N$ と N 個の正準運動量 $p_1, \cdots, p_N$ がある。ハミルトニアンはこの $2N$ 個の正準変数の関数

$$H(q_1, q_2, \ldots, q_N, p_1, p_2, \ldots, p_N)$$

である。

この系のラグランジアン $L(q_1, \cdots, q_N, \dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_N)$ と上のハミルトニアンは、

$$H(q_1, \cdots, q_N, p_1, \cdots, p_N) = p_i \dot{q}_i - L(q_1, \cdots, q_N, \dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_N)$$

いうルジャンドル変換で結ばれている。

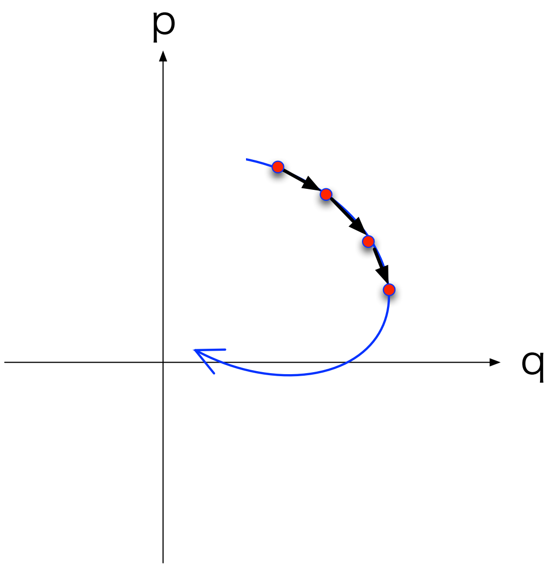
q_i と共役な正準運動量 p_i は

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

であり、系全体の時間発展を記述する正準方程式は $i = 1, \ldots, N$ に対して

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned}$$

である。



9.10　相空間

ラグランジュ形式の力学では、ラグランジアン

$$L(q_1, q_2, \ldots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \ldots, \dot{q}_N)$$

が基本的なものであった。力学の系として本質的な情報は全て L に書き込まれているといって良い。L が与えられれば、その系がどう振る舞うか（時間発展するか）を計算することができる。その方程式がラグランジュの運動方程式であった。ラグランジュの運動方程式は N 個の一般化座標 $(q_1(t), q_2(t), \ldots, q_N(t))$ の、t に関する 2 階の連立微分方程式系であり、式の数は N 個である。

ハミルトン形式の力学ではハミルトニアン H が基本である。その系の情報は全てハミルトニアンに書き込まれている。ハミルトニアンは合計 $2N$ 個の正準変数 $(q_1(t), q_2(t), \ldots, q_N(t), p_1(t), p_2(t), \ldots, p_N(t))$ の関数

$$H(q_1, q_2, \ldots, q_N, p_1, p_2, \ldots, p_N)$$

である。

ハミルトン力学では、系の状態を $(q_1, q_2, \ldots, q_N, p_1, p_2, \ldots, p_N)$ を座標として張られた $2N$ 次元の空間の一点で指定することができる。これを相空間（または位相空間）という。

ハミルトニアン H が与えられれば、その系がどう振る舞うか（時間発展するか）を計算することができる。その方程式がハミルトンの正準方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$
$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

である。正準方程式は正準変数の t に関する 1 階の連立微分方程式系であり、その式の数は $2N$ 個である。その系を状態を表す点 $(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N)$ が、相空間中をどう動くかを決めるのが、正準方程式である。