Chapter 13

ハミルトンの原理

今回の内容

/// 先週の復習

- ポアッソン括弧
- 運動方程式
- シンプレクティック条件
- 運動＝正準変換

§13 ハミルトンの原理

この講義の出発点は、ラグランジアンが

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

で記述される系の運動方程式が

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, N)$$

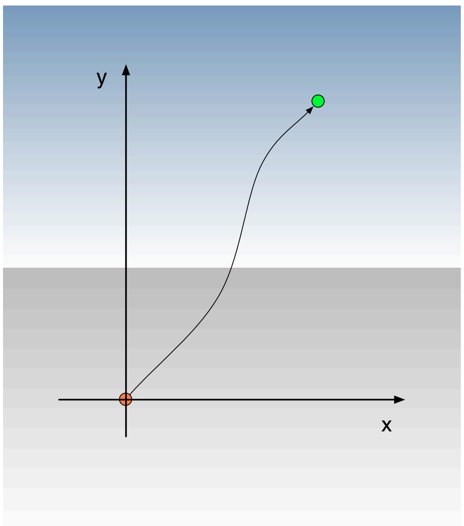
で与えられるという事実であった。今回はこのラグランジュの運動方程式の起源を説明する。そのためにまずは汎関数と変分法について説明しよう。

13.1 汎関数と変分

実関数は「実数に実数が対応する」系であるのに対して、「関数に実数が対応する」系が汎関数である。いくつか例を見てみよう。

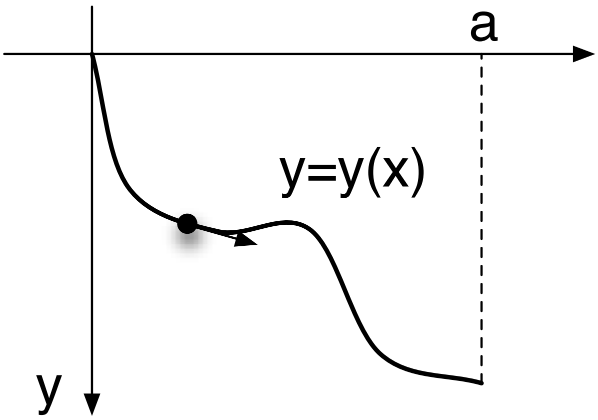
13.1.1 例１：ライフガード問題

海岸から離れたところに立っているあなたが、斜め前方の海におぼれている人を見つけた。どうすればもっとも早くたどり着けるであろうか？陸の上を走る速さ V_1 海の中を泳ぐ速さ v_2 がそれぞれ一定とし、図のように座標をとるとおぼれている人のところまでたどり着くのにかかる時間 T はあなたが描く軌跡 $y = y(x)$ の汎関数である。$v_1 = v_2$（つまり走る速さ＝泳ぐ速さ）の場合、T を最小にする $y(x)$ は直線であることは自明であろう。では $v_1 \neq v_2$ のの場合はどうであろうか？



13.1.2 例 2：最速降下線

下図のように座標 x, y をとり、原点 $(0,0)$ と座標 (a, A) を通る曲線 $y = y(x)$ を考える。下向き（$+y$ 方向）の重力（重力加速度 g）を考え、原点から初速ゼロで出発して、この曲線を坂道 $y(x)$ のように滑りおりる質点（質量 m）が終点 (a, A) まで滑りきるのにかかる時間を T とする。T も汎関数の例である。



原点を出発点にとり、曲線 $y = y(x)$ に沿って長さを s とすると、エネルギーの保存から

$$\frac{m}{2}\dot{s}^2 - mgy(s) = 0$$

である。従って

$$\dot{s} = \sqrt{2gy(s)}$$

微少な距離 Δs を通過するのにかかる微少時間を Δt とすると、

$$\begin{aligned}\Delta t &= \frac{\Delta s}{\dot{s}} \\ &= \frac{\Delta s}{\sqrt{2gy}} \\ &= \frac{\sqrt{1+(y')^2}}{\sqrt{2gy}}\,\Delta x\end{aligned}$$

従って、

$$T = \frac{1}{\sqrt{2g}}\int_0^a \frac{1}{\sqrt{y}}\sqrt{1+(y')^2}\,dx$$

となる。T を最小にする関数形 $y(x)$ を最速降下線と言う。ただし、$y(0)$ と $y(a)$ は固定する。定数倍は関係ないから、最速降下線とは汎関数

$$T(y, y') = \int_0^a \frac{1}{\sqrt{y}}\sqrt{1+(y')^2}\,dx \tag{13.1}$$

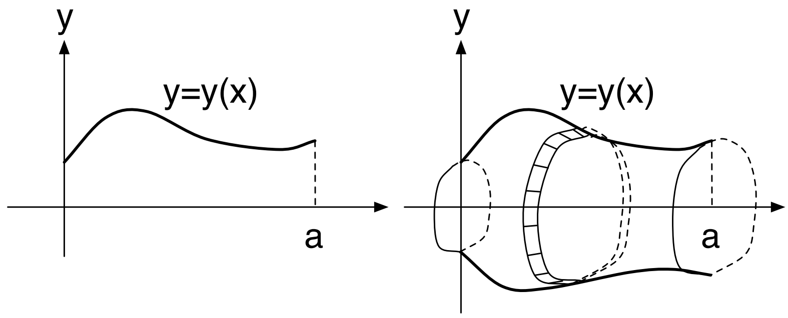
を最小にする曲線 $y(x)$ である。

摩擦のない世界では、エネルギーを全く使わずに水平移動することができる。2 地点を地下で結ぶ曲線状のトンネルを掘れば良い。急いでいる人たちのためには、その曲線の形が最速降下線にするのが良い。

後で述べる変分法を使えば、最速降下線を具体的に求めることができる。その答えはサイクロイドである。

13.1.3 例 3：極小曲面

曲線 $y = y(x)$ $(0 \le x \le a)$ を x 軸のまわりに回転してできる曲面の面積 $S[y]$ を考えよう。



x 軸方向の幅 Δx の細くて円形のリボンの面積は $\Delta S = 2\pi y \times \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2} = 2\pi y \times \sqrt{1 + (y')^2}\,\Delta x$ だから

$$S = 2\pi \int_0^a y(x)\sqrt{1 + (y'(x))^2}\,dx$$

である。$y(0)$ と $y(a)$ は固定するという条件の下、$S(y, y')$ を極小にする関数形 $y(x)$ 何だろうか？ これを極小曲面という。定数倍 2π は関係ないので、極小曲面を求めるためには、汎関数

$$S(y, y') = \int_0^a y(x)\sqrt{1 + (y'(x))^2}\,dx \tag{13.2}$$

を極小にする関数 $y = y(x)$ を求めれば良い。

シャボン玉のように、石けん水でできる膜の面は面積が最小である。向かい合った二つの円を石けん水につけてできる膜が上の極小曲面である。（ただし細かいことをいえば、極小曲面が必ずしも面積最小ではない。二つの円が離れ過ぎていると、石けん水で膜を張ることはできない。）

13.1.4 変分法

汎関数の極値を求める問題を解く方法は変分法と呼ばれる。関数 $y(x)$ が極値をとる x の値を求める方法が微分法であるのに対し、汎関数 $I(y)$ が極値をとる関

数 $y(x)$ を求める方法が変分法と言える。変分法を使えば汎関数 (13.1) や (13.2) を最小にする関数形 $y = y(x)$ を求めることができる。

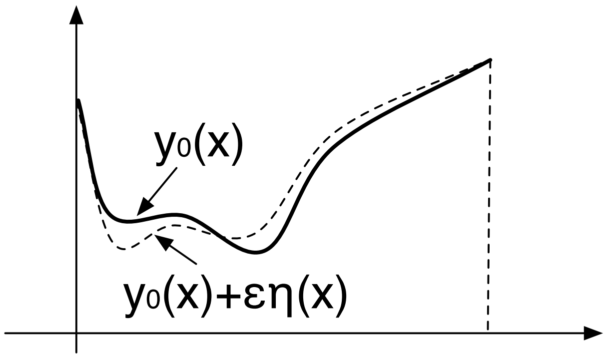
まず微分法の復習をしよう。関数 $y = y(x)$ について $x = x_0$ でテーラー展開すると

$$y(x_0 + \epsilon) = y(x_0) + \epsilon\, \Delta y(x_0) + O(\epsilon^2)$$

ここで

$$\Delta y(x_0) = y'(x_0)$$

は微分である。関数 $y(x)$ が x_0 で極値をとるとは、x_0 での y の微分 Δy がゼロということである。



同じように汎関数の極値について考えてみよう。汎関数 $I(y, y')$ が関数 $y_0(x)$ で極値をとるということは、関数 $y_0(x)$ を、その関数の形から少しだけ変化させても汎関数 I の値は変わらないということである。少しだけ形を変化させた関数を $y(x) = y_0(x) + \epsilon\eta(x)$ とする。ここで ϵ は小さい実数、$\eta(x)$ は任意の関数とする。当然 $y'(x) = y_0'(x) + \epsilon\eta'(x)$ である。するとテーラー展開から

$$I(y_0 + \epsilon\eta, y_0' + \epsilon\eta') = I(y_0, y_0') + \epsilon\, \delta I(y_0, y_0') + O(\epsilon^2)$$

右辺の δI を汎関数 I の変分という。汎関数 I が $y_0(x)$ で極値をとるということは、$y_0(x)$ で変分 δI がゼロということである。

13.2 ハミルトンの原理

ラグランジアンが $L(q, \dot{q})$ で与えられる 1 自由度系について、作用と呼ばれる量を

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q})\, dt \tag{13.3}$$

と定義する。無限に考えられる $q = q(t)$ のうち、ただ一つだけが実際に実現する軌跡（＝運動）である。その運動について、次の法則が成り立つ。これを最小作用の原理（あるいはハミルトンの原理）という。

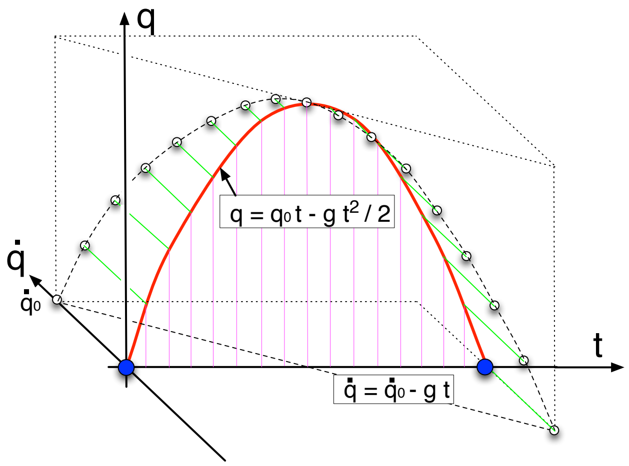
ハミルトンの原理（最小作用の原理）

運動は作用の極値をとる。

N 自由度系の場合も同様で、実際の運動 $q_i = q_i(t)$ に対して作用

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(q_1, \cdots, q_N, \dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_N, t)\, dt \tag{13.4}$$

は極値をとる。



13.2.1 例（質点の投げ上げ）

鉛直上向きを q 軸とする。質点を $q = 0$ の位置から真上に投げ上げたところ、t_1 秒後に再び $q = 0$ の高さまで落ちてきたとき。その間にボールが取り得る軌跡は（仮想的に考えるだけなら）無数にある。そのあらゆる仮想的な運動に対して、それぞれ作用を計算すると様々な値（実数）が具体的に決まるが、不思議なことに、この自然界で本当に起きる運動はちょうど極値をとるようになっている、というのがハミルトンの原理である。その意味で（自然界でおきる）運動というのは特別なのである。

上の図に時間 t の関数としての $q(t)$ を赤い実線で描いた。この $q(t)$ のグラフを仮想的にいろいろと変えてみると、実際の質点がとる運動（つまり放物線）の場合には、この赤い実線を t-q 面内で、わずかだけ変形しても作用が変化しない、即ち

$$\delta \int_0^{t_1} \left(\frac{m}{2}\dot{q}^2 - mgq \right) dt = 0$$

というのがハミルトンの原理である。

自由に変えることのできるのは $q(t)$ だけであることに注意しよう。$\dot{q}(t)$ の曲線（上の図で t-$\dot{q}$ 平面に描かれた黒の点線）は自由に変えることはできない。上

図の赤い実線 $q(t)$ を

$$\delta q(t) = \epsilon \eta(t)$$

だけ、つまり

$$q(t) \to q'(t) = q(t) + \epsilon \eta(t)$$

と変形させると、それに応じて $\dot{q}(t)$ の形も変わる。その変わり方は

$$\delta \dot{q}(t) = \epsilon \dot{\eta}(t)$$

である。

13.3 ラグランジュの運動方程式

ハミルトンの原理からラグランジュの運動方程式が自然に導かれる。

以下では表記を短くするために

$$q^k = q(t_k), \quad t_k = t_a + k\,\Delta t \tag{13.5}$$

などとする。時刻 t_a から t_b の時間を K 等分して $\Delta t = (t_b - t_a)/K$ とし、作用を以下のように離散化する

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q})\,dt = \sum_{k=0}^{K-1} S_k \tag{13.6}$$

$$S_k = \int_{t_k}^{t_{k+1}} L(q, \dot{q})\,dt \tag{13.7}$$

ここで

$$\dot{q}_k = \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t} \tag{13.8}$$

と近似すれば

$$S_k = L(q^k, \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t})\Delta t + O(\Delta t^2) \tag{13.9}$$

である。

ハミルトンの原理から、運動 $q = q(t)$ では作用が極値をとるので、ある一つの整数 k についての q^k だけを正しい（実際に実現する）運動から少しだけ変化させても S の値は変わらない。

$$\frac{\partial S}{\partial q^k} = 0 \tag{13.10}$$

である。

定義から q^k に依存するのは S_k と S_{k-1} だけである。

$$\frac{\partial S_k}{\partial q^k} = \frac{\partial L}{\partial q}(q^k, \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t})\Delta t - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q^k, \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t}) \tag{13.11}$$

$$\frac{\partial S_{k-1}}{\partial q^k} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q^{k-1}, \frac{q^k - q^{k-1}}{\Delta t}) \tag{13.12}$$

なので、式 (13.10) は

$$\frac{\partial L}{\partial q}(q^k, \frac{q^{k+1}-q^k}{\Delta t}) - \frac{1}{\Delta t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q^k, \frac{q^{k+1}-q^k}{\Delta t}) - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q^{k-1}, \frac{q^k-q^{k-1}}{\Delta t})\right) = 0 \tag{13.13}$$

と書ける。$\Delta t = 0$ の極限ではこの式はラグランジュの運動方程式

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = 0 \tag{13.14}$$

となる。

一般に、汎関数がある関数で極値をとる（つまり変分がゼロになる）という原理を変分原理という。作用汎関数の変分がゼロという変分原理からラグランジュの運動方程式が得られたわけである。

13.4 ハミルトンの原理の「解釈」

ハミルトンの原理をどう「解釈」すればいいのだろう？ラグランジュの運動方程式や正準方程式は、各時刻について厳密に成立するべき運動の法則を微分方程式として与えられている。これは我々人間のように、対象の物理系と共に時間を経過していくような存在にはごく自然な法則の記述である。

一方、ハミルトンの作用の原理はいわば時空（時間と空間）を超越した存在の視点からみた運動の法則である。与えられた条件（たとえば上の質点投げ上げの例では、$q(t_0) = q(t_1) = 0$）の下で、考えられるありとあらゆる運動を「とりあえず」試してみて、そして、運動から得られる作用の積分値を最後に比較し、極値を出した運動だけが「採用」されて、現実世界で起きるのはその現象になるというイメージであろうか。このような突飛なイメージは量子力学を勉強すると、必ずしも突拍子もないものではないことがわかる。

変分原理で記述された自然法則には一種独特の単純さと美しさがある。力学に限らず多くの自然法則がこのような変分原理で記述される。

13.5 変分原理からの正準方程式の導出

ラグランジュの運動方程式がハミルトンの原理から導かれたように、正準方程式もある種の変分原理から導くことができる。

ハミルトンの原理で極値をとるのは、作用

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q})\, dt \tag{13.15}$$

であった。そこで、これをヒントにしてそのような変分原理を推測してみよう。ハミルトニアン $H(q,p)$ が与えられた系を考える。独立変数は q と p である。ルジャンドル変換の関係

$$L = p\,\dot{q} - H \tag{13.16}$$

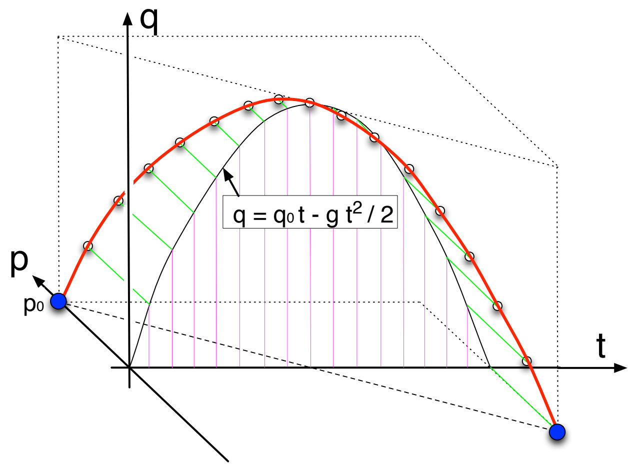
を思い出して、$q(t)$, p, $\dot{q}$, $\dot{p}$ で書かれた汎関数

$$\hat{S} = \int_{t_0}^{t_1} \{p\dot{q} - H(q,p)\}\, dt \tag{13.17}$$

を考える。（ここには $\dot{p}$ に関係する項はない。）ここで注意すべきは、この汎関数は 2 次元（N 自由度系の場合には $2N$ 次元）の相空間中での軌跡 $(q(t), p(t))$ の汎関数であるという点である。この点がハミルトンの原理との大きな違いである。すると次の法則が成り立つ。これは修正ハミルトンの原理と呼ばれる。

修正ハミルトンの原理

運動は汎関数 $\hat{S}$ の極値をとる。



ラグランジュの運動方程式を導いたハミルトンの原理と違うのは、q と p の相空間の中で描かれる軌跡（trajectory）の変分問題になっているということである。質点の投げ上げの問題に戻ると、上の図で相空間中の実際の運動の軌跡は赤の実線とする。この曲線を少しだけ変形しても、つまり変分をとっても汎関数 $\hat{I}$ が変わらないというのが、この変分原理である。このとき q の方向と p の方向に自由に変形しても良いというのがハミルトンの原理と異なる。

第 13.3 章と同様な方法で汎関数 (13.17) を次のように離散化する。

$$S = \sum_{k=0}^{K-1} S_k \tag{13.18}$$

$$S_k = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \{p\dot{q} - H(q,p)\}\, dt \tag{13.19}$$

この S_k の積分を次のように近似する。

$$S_k = \left(p^k \dot{q}^k - H(q^k, p^k)\right) \Delta t \tag{13.20}$$

ここで

$$\dot{q}^k = \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t} \tag{13.21}$$

とすると

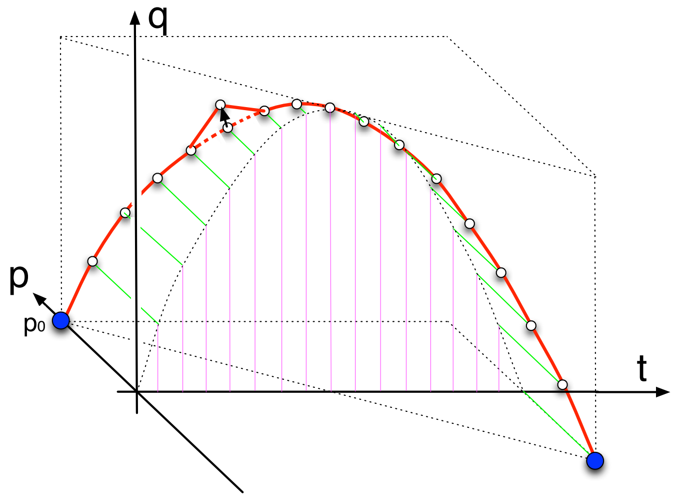
$$S_k = p^k \left(q^{k+1} - q^k\right) - H(q^k, p^k)\Delta t \tag{13.22}$$

である。修正ハミルトンの原理から、特定の k に対して

$$\frac{\partial S}{\partial q^k} = 0 \tag{13.23}$$

$$\frac{\partial S}{\partial p^k} = 0 \tag{13.24}$$

が成り立つ。



q^k に依存するのは S_k と S_{k-1} だけなので、式 (13.23) から

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial q^k} &= \frac{\partial S_k}{\partial q^k} + \frac{\partial S_{k-1}}{\partial q^k} \\ &= -p^k - \frac{\partial H}{\partial q}(q^k, p^k)\Delta t + p^{k-1} - \frac{\partial H}{\partial q}(q^{k-1}, p^{k-1})\Delta t \\ &= 0\end{aligned} \tag{13.25}$$

$\Delta t = 0$ の極限では

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{13.26}$$

を得る。

また、p^k に依存するのは S_k だけなので、式 (13.24) は

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial p^k} &= \left(q^{k+1} - q^k\right) - \frac{\partial H}{\partial p}(q^k, p^k)\Delta t \\ &= 0 \end{aligned} \tag{13.27}$$

これから $\Delta t = 0$ の極限では

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \tag{13.28}$$

を得る。

式 (13.26) と (13.24) は正準方程式に他ならない。こうして正準方程式が修正ハミルトンの原理から導出された。

13.6 シンプレクティック積分法

上の式 (13.19) において、$t = t_k$ から t_{k+1} までの時間積分をするときの q と p の値を

$$q = q_{k+1}$$

$$p = p_k$$

としてみよう。すると

$$S_k = p_k\left(q^{k+1} - q^k\right) - H(q^{k+1}, p^k)\,\Delta t \tag{13.29}$$

となる。このとき、修正ハミルトンの原理から得られる式 (13.23) と (13.24) から以下を得る：

$$\frac{\partial S}{\partial q^k} = \frac{\partial S_k}{\partial q^k} + \frac{\partial S_{k-1}}{\partial q^k} = -p^k + p^{k-1} - \frac{\partial H}{\partial q}(q^k, p^{k-1})\,\Delta t = 0 \tag{13.30}$$

$$\frac{\partial S}{\partial p^k} = \frac{\partial S_k}{\partial p^k} = \left(q^{k+1} - q^k\right) - \frac{\partial H}{\partial p}(q^{k+1}, p^k)\,\Delta t = 0 \tag{13.31}$$

式 (13.30) で $k \to k+1$ とすると

$$-p^{k+1} + p^k - \frac{\partial H}{\partial q}(q^{k+1}, p^k)\,\Delta t = 0 \tag{13.32}$$

まとめると

$$q^{k+1} = q^k + \Delta t\frac{\partial H}{\partial p}(q^{k+1}, p^k) \tag{13.33}$$

$$p^{k+1} = p^k - \Delta t\frac{\partial H}{\partial q}(q^{k+1}, p^k) \tag{13.34}$$

を得る。

ハミルトニアンが

$$H(q, p) = K(p) + U(q) \tag{13.35}$$

の形になっているときには式 (13.33) と (13.34) は

$$q^{k+1} = q^k + \Delta t \frac{\partial K}{\partial p}(p^k) \tag{13.36}$$

$$p^{k+1} = p^k - \Delta t \frac{\partial U}{\partial q}(q^{k+1}) \tag{13.37}$$

となり、陽的なアルゴリズムになる。これを（一次陽的）シンプレクティック積分法とよぶ。