

数値計算のための解析力学*

陰山 聡

神戸大学システム情報学研究科 計算科学専攻

『解析力学 B』（工学部情報知能工学科）講義資料

ver. 2017.02.24

*これは神戸大学工学部情報知能工学科の講義『解析力学 B』の講義資料を改訂したもので、未完成です。間違いやわかりにくい記述があれば指摘してください。

Contents

1	ラグランジアン	11
1.1	系の自由度と一般化座標	11
1.1.1	表記方法についてのいくつかの注意	11
1.1.2	系の自由度	12
1.2	ポテンシャル	14
1.2.1	ポテンシャルの定義 (復習)	14
1.2.2	ポテンシャルの例	14
1.3	ラグランジアン	16
1.3.1	ラグランジアンとは	16
1.3.2	1 自由度系のラグランジアン	16
1.3.3	多自由度系のラグランジアン	17
1.3.4	ラグランジアンの不定性	21
1.4	演習	21
1.4.1	演習 1	21
1.4.2	演習 2	22
2	ラグランジュの運動方程式	23
2.1	ニュートンの運動方程式	23
2.2	ラグランジュの運動方程式	25
2.3	ラグランジュの運動方程式の簡単な例	26
2.4	演習	29
2.4.1	直線上を滑る質点=バネ系	29
2.4.2	滑りながら倒れる棒	31
2.4.3	円上の質点=バネ系	33
2.4.4	バネ=質点 2 自由度系	35
2.4.5	ころがる円についたおもり	37
2.4.6	2 次元調和振動子	39
3	剛体の運動方程式	43
3.1	オイラー角	43
3.2	静止系での角速度	45
3.3	回転系での角速度	48
3.4	簡潔な計算方法	50
3.5	ラグランジュの運動方程式	51

3.5.1	運動エネルギー	51
3.5.2	ポテンシャル	53
3.5.3	ラグランジアン	54
3.5.4	ラグランジュの運動方程式	54
3.6	オイラー方程式	55
3.7	剛体の角運動量とエネルギー	56
4	対称性と保存則	59
4.1	点変換	59
4.2	保存則	63
4.2.1	循環座標	63
4.2.2	エネルギー	64
4.2.3	運動量と角運動量	65
4.3	ラグランジアンの不定性	68
4.4	荷電粒子の運動	70
4.5	応用	72
4.5.1	一様磁場中の荷電粒子	72
4.5.2	逆 2 乗引力と磁場	73
4.5.3	荷電粒子の運動方程式	77
5	ハミルトニアンと正準方程式	79
5.1	ラグランジュの運動方程式と数値計算	79
5.2	ルジャンドル変換	81
5.3	ハミルトニアン	83
5.4	正準方程式	84
5.4.1	1 自由度系	84
5.4.2	多自由度系	85
5.4.3	相空間	86
5.4.4	簡単な例: 調和振動子	87
5.5	ハミルトニアンとエネルギー	88
5.6	正準方程式のイメージ	89
5.7	リウヴィルの定理	90
5.8	演習	91
5.8.1	問題 1	91
5.8.2	問題 2	92
5.8.3	問題 3	95
5.8.4	問題 4	96
5.8.5	問題 5	98
6	正準変換とポアッソン括弧	101
6.1	座標変換の必要性	101
6.2	正準変換の直接条件	103
6.3	正準変換としての点変換	104
6.4	正準変換の合成	106
6.5	母関数	108
6.6	シンプレクティック条件	113

6.7	ポアッソン括弧	114
6.8	ポアッソン括弧を使った運動方程式	117
6.9	ポアッソン括弧の正準変換不変性	118
6.10	正準変換としての運動	119
6.11	無限小正準変換	120
6.12	不変性と保存則	122
6.13	数値積分と正準変換	124
6.14	練習問題	124
7	ハミルトンの原理	127
7.1	汎関数と変分法	127
7.2	ハミルトンの原理	131
7.3	拡張されたハミルトンの原理	134
7.4	シンプレクティック積分法	136
7.5	オイラー＝ラグランジュ方程式	137
8	シンプレクティック積分法	141
8.1	シンプレクティック積分法	141
8.2	1次陽的シンプレクティック法	142
8.3	練習問題	146
8.4	シンプレクティック性の由来	148
8.4.1	正準方程式の形式的厳密解	148
8.4.2	時間推進演算子が解ける例	149
8.4.3	合成変換による厳密解の近似	150
8.5	エネルギーの誤差	152
8.6	高精度化	155
A	数値積分法	157
A.1	1次オイラー法	157
A.2	2次ルンゲ＝クッタ法	160
A.3	4次ルンゲ＝クッタ法	161
A.4	時間依存のない場合	163
A.5	連立微分方程式系	164
A.6	2階微分方程式系	164

はじめに

ニュートン力学における中心的な概念は「力」であるが、解析力学では「力」はほとんど出てこない。その代わりに基本となるのはラグランジアンとハミルトニアンという関数である。

ニュートン力学の基本方程式はニュートンの運動方程式の一つだけであったが、解析力学には運動方程式がたくさん登場する。これらの式は見た目が全く違うが、同じ力学の問題に対しては当然のことながら同じ解を導く。もちろんその解はニュートンの運動方程式を解いて得られるものと同じである。

どうせ同じ解になるのであれば、ニュートンの運動方程式で十分ではないかと思うかもしれない。しかし解析力学の運動方程式の方がずっと簡単に作ることができる。運動方程式を機械的に作るためのアルゴリズムを提供するのが解析力学である。

具体的な例を挙げてみよう。図1で示すように、二つの放物線

$$y = x^2 + 1 \quad (\text{上側})$$

と

$$y = -x^2 - 1 \quad (\text{下側})$$

に二つの質点（質量 m ）がそれぞれ放物線上に拘束されて動くとする。質点同士

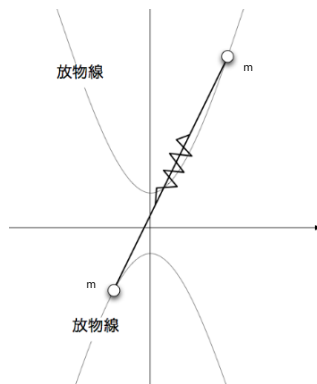


図1: 放物線に拘束された二つの質点の運動（再掲）。

はバネ（バネ定数 k 、自然長 ℓ_0 ）で結ばれている。摩擦は無視する。ニュートン

力学の範囲でこの質点の運動方程式を求めるはなかなか大変であるが、解析力学のアルゴリズムに従えば自動的に次のような方程式（ラグランジュの運動方程式）が得られる。

$$(1 + 4x_0^2)\ddot{x}_0 = -4x_0\dot{x}_0^2 - \left(\frac{k}{m}\right)\left(\frac{s - l_0}{s}\right)(\Delta x + 2x_0\Delta y) \quad (1)$$

$$(1 + 4x_1^2)\ddot{x}_1 = -4x_1\dot{x}_1^2 - \left(\frac{k}{m}\right)\left(\frac{s - l_0}{s}\right)(-\Delta x + 2x_1\Delta y) \quad (2)$$

ここで x_0 と x_1 はそれぞれの質点の x 座標である。また式を短くするために以下の変数を導入しているが、本質的ではない。

$$\Delta x = x_0 - x_1$$

$$\Delta y = x_0^2 + x_1^2 + 2$$

$$s = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$$

上の二つの式 (1) と (2) は変数 x_0 と x_1 に対する微分方程式系である。この方程式の数学的な厳密解（解析解）を求めることはとてもできそうにない。

解の様子をおおざっぱに予測して分かることもある。二つの質点が自然長 l_0 よりも近い位置にあると反発力が働いて互いに遠ざかるように動く。逆に二つの質点が離れていたなら互いに近づこうとする。二つの放物線の間隔は 2 だから、自然長 l_0 が 2 よりも大きいかわ小さいかで、二つの質点の運動の仕方はかなり変わりそうである。いろいろ予測が付かない中で、一つ確かなことは、「全エネルギーは保存する」ということである。つまりバネの持つエネルギーと二つの質点を持つ運動エネルギーの和は常に一定のはずである。

上の例のように「問題設定は単純なのに運動方程式が複雑で、その解を解析的に解くことができそうもない問題」が力学に限らずたくさんある。そのような場合、計算機を使って数値積分すれば十分な精度でその近似解を求めることができる。

微分方程式を四則演算の問題に変換して数値的に近似解を得る操作を「数値積分」という。時間 t は本来、実数であるが、数値積分では、全ての時刻 t での解を得ることを諦めて、離散的な（飛び飛びの）時刻、 $t_0, t_1, t_2, \dots$ での解を求める。その解も正解ではなく、正解に十分近い解（近似解）である。

数値積分の方法（数値積分法）にはさまざまな方法がある。なかでもルンゲ＝クッタ法は有名なので既知かもしれない。どのような数値積分法であってもある程度の誤差は常に存在する。誤差が小さい方法が望ましいのはもちろんであるが、計算の繰り返しによって誤差が蓄積して「とんでもない解」が得られるようでは困る。それはたとえば今の場合、系の全エネルギー（バネのエネルギーと質点の運動エネルギーの和）が、数値積分を重ねているうちに大きく変わっていつてしまうような解である。エネルギーが厳密に保存することはできないにせよ、長時間数値積分してもエネルギーの値が大きくずれていくことはない数値積分法が望ましい。そのような方法は実際にあって、その一つとしてシンプレクティック積分法と呼ばれる方法がある。シンプレクティック積分法の理論的な背景は実は解析力学そのものである。この講義の目標はその理論的背景を理解することである。

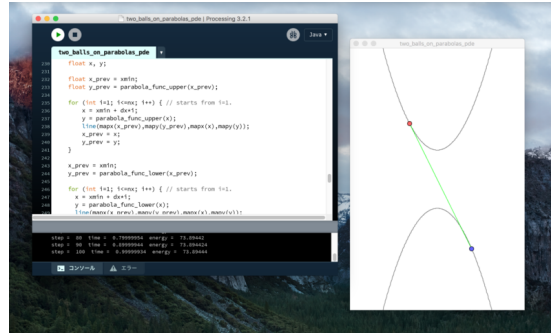
上の式 (1) と (2) を 4 次のルンゲ＝クッタ法で積分する Processing* のプログラム

*<https://processing.org>

ラムを作成した。Processing はオープンソースの可視化ツールである。簡単にインストールできるので自分でも試してみると良い。ソースコード：

two_balls_on_parabolas.pde

はこの講義の web page[†] からダウンロードできる。



このプログラムを動かすと、「果たしてこれは周期運動なのだろうか？」という疑問がわくであろう。パラメータを $k/m = 8$, $\ell_0 = 2.9$ とし、 $x_1 = 1.5$, $x_2 = -0.8$ のから出発したとき（初速度はゼロ）の計算結果を、横軸に x_1 の値、縦軸に x_2 の値をプロットしたものを図 2 に示した。明らかに周期運動ではなく、ほぼ円形の領域を埋め尽くすような軌跡を描くことが分かる。また、描かれる軌跡は初期条件に敏感に依存して大きく変わることも確認できる。（このような運動はカオスと呼ばれる。）

x_1 - x_2 の軌跡を描くこのプログラムは

two_balls_on_parabolas_pde_x1_x2_map.pde

である。これもこの講義の web page からダウンロードできる。

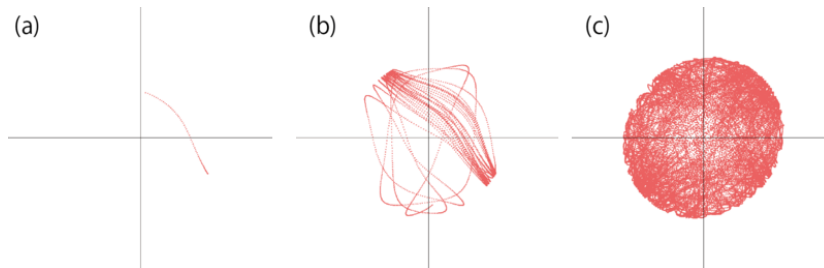


図 2: x_1 (横軸) と x_2 (縦軸) の軌跡。

[†]http://www.research.kobe-u.ac.jp/csi-viz/members/kageyama/lectures/H28_latter/Analytical_Mechanics/index.ja.html

Chapter 1

ラグランジアン

1.1 系の自由度と一般化座標

1.1.1 表記方法についてのいくつかの注意

この資料では、3次元空間のカーテシアン座標を

$$(x, y, z)$$

と書いたり、

$$(x_1, x_2, x_3)$$

と書いたりする。

x 軸に沿って動く質点 P の時刻 t における位置を $x(t)$ と書くとき、 P の速度は

$$v = \frac{dx}{dt}$$

である。この資料では表記を簡潔にするために、

$$v = \dot{x}$$

とも書くことが多い。同様に、2階の時間微分

$$\frac{d^2x}{dt^2}$$

を

$$\ddot{x}$$

と書くことがある。

速度ベクトルは

$$\boldsymbol{v}$$

と書く。3次元の場合その成分は

$$\boldsymbol{v} = (v_x, v_y, v_z) = (v_1, v_2, v_3)$$

と書く。

添え字を使うと、ベクトルの内積は

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{j=1}^3 a_j b_j$$

と簡潔に書ける。

質点 m 、速度 $\mathbf{v}$ の質点をもつ運動エネルギー K は、1 次元では

$$K = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

3 次元では

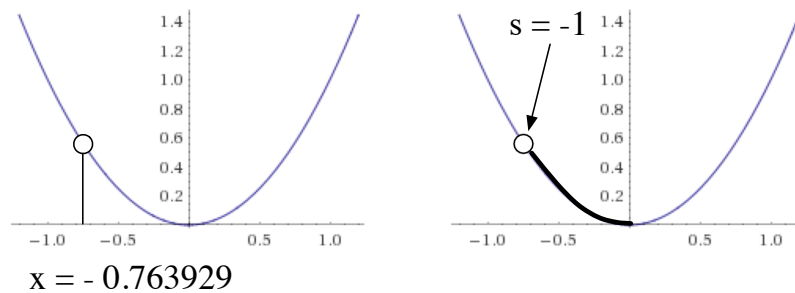
$$K = \frac{1}{2} m (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2) = \frac{m}{2} \sum_{j=1}^3 \dot{x}_j^2$$

と書ける。

1.1.2 系の自由度

解析力学で使う座標系はカーテシアン座標系とは限らない。それぞれの問題に応じて便利な座標系を自由にとることができるのが解析力学の便利なところである。この点については後で詳しく説明する。もちろん球座標や、円筒座標といったカーテシアン以外の「普通の」座標系でもいいが、もっと自由な（便利な）座標をとってよい。

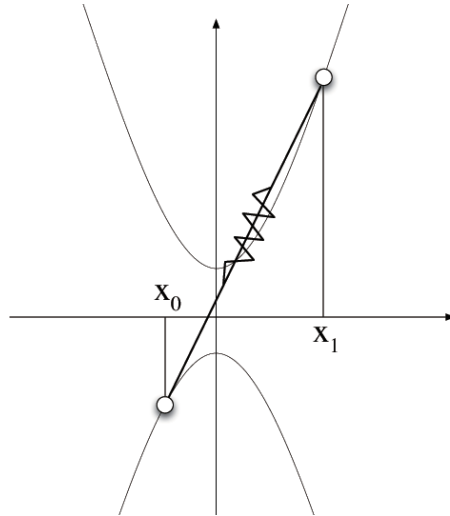
たとえば、一つの質点の運動を考えている場合、その質点の位置が指定できるなら、どんな座標をとってもいい。 x - y 平面上の放物線 $y = x^2$ 型のレールの上に拘束されて（このレール上を滑って）動く質点を考えると、この質点の位置は（ y 座標では無理だが） x 座標を指定すれば一意に決まる。あるいは原点を出発点としてレールに沿った符号付きの長さ s を座標としても良い。



たとえば $s = -1$ というのは、原点から x 軸の負の方向に向かい、この放物線に沿って 1 だけ滑った位置である。これは質点の x 座標の値を使った $x = -0.763929\dots$ と同じ位置を意味する。

その系の「位置」を記述するのに必要な実数変数を**一般化座標**、その実数がいくつ必要かという数をその系の**自由度**という。上の図の系の自由度は 1 である。

先週の講義で例としてあげた二つの放物線に沿って動く（バネで結ばれた）二つの質点の系の自由度は2である。この系の位置を記述するのに、二つの質点の x 座標の値の組 (x_0, x_1) や、それぞれの放物線に沿った（符号付きの）長さを使った (s_0, s_1) を一般化座標としてとることができる [下の図参照]。



解析力学が便利なのは、どんな一般化座標系をとっても方程式の形が同じになるからである。（これから紹介する）ラグランジュの運動方程式は、一般化座標を x とすると、

$$F(x, \dot{x}, \ddot{x}) = 0 \quad (x \text{ に関する 2 階の微分方程式})$$

という形をしている。そして、 x とは別の一般化座標 s をとったとき、この系の運動方程式は、

$$F(s, \dot{s}, \ddot{s}) = 0 \quad (s \text{ に関する 2 階の微分方程式})$$

である。ここでポイントは、上の二つの $F = 0$ という微分方程式は、（中に入っている変数は x と s で異なっている）微分方程式の形としては同じであるということである。ニュートン力学ではこうはいかない。

上に述べたように、ある系のスナップ写真をとった時、その瞬間の系の「位置」を記述するのにいくつの実数が必要なのかというその数が系の自由度である。だが「位置」だけでは、その瞬間のその系その「状態」を完全には記述できない。その瞬間の直後、系がどう変化するか（質点の場合にはどの方向にどの速さで動くか）という情報、つまり速度の情報も必要である。

1.2 ポテンシャル

1.2.1 ポテンシャルの定義（復習）

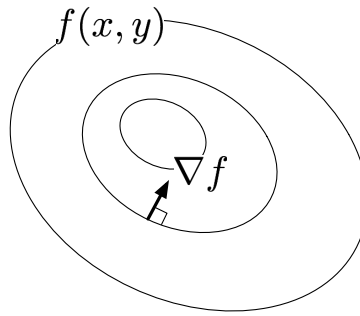
力 $\mathbf{F}$ があるスカラー関数 U を使い

$$\mathbf{F} = -\nabla U$$

あるいは成分表示で、

$$F_i = -\frac{\partial U}{\partial x_i}$$

と書けるとき、 $\mathbf{F}$ は保存力、 U は $\mathbf{F}$ のポテンシャルと呼ばれる。この定義から明らかのように、ポテンシャルは定数分だけ不定である。



ここで勾配 ∇ について復習しておこう。2次元平面 (x, y) 上の関数 $f(x, y)$ の勾配ベクトル $\nabla f(x, y)$ は、その点で f がもっとも増大する方向を指す。その点を通る f の等高線をとると、その等高線に垂直な二つの方向のうち、 $\nabla f(x, y)$ に向くのは f が大きい方である。

1.2.2 ポテンシャルの例

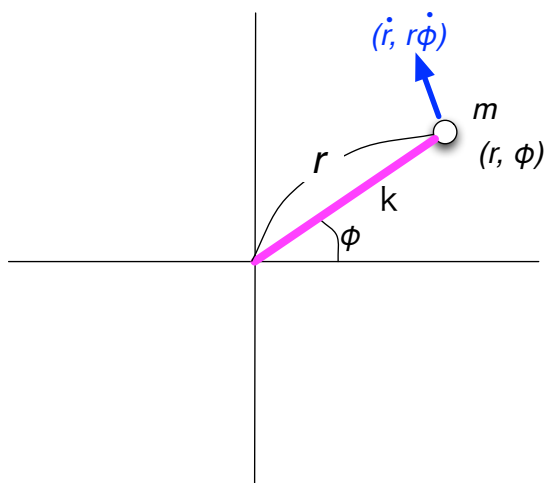
線形バネ バネ定数 k 、自然長 ℓ_0 のバネを考える。質量 m の質点が x 軸に沿って動くとするとき力は

$$F_x = -k(x - \ell_0) \tag{1.1}$$

である。ポテンシャルは

$$U(x) = \frac{k}{2}(x - \ell_0)^2 \tag{1.2}$$

である。



2次元調和振動子 調和振動子系を考える。極座標 (r, ϕ) をとる。力は原点に向かう方向で、原点からの距離 r に比例する。ポテンシャルは

$$U(r) = \frac{k}{2} r^2 \quad (1.3)$$

である。

一様重力 $-z$ 方向の一様な重力を考える。重力加速度は g とする。質量 m にかかる重力は、

$$\mathbf{F} = (0, 0, -mg)$$

であり、そのポテンシャルは

$$U(x, y, z) = mgz$$

である。あるいは

$$U(x_1, x_2, x_3) = mgx_3$$

と書くこともある。

逆自乗重力のポテンシャル

$$F_i = -GMm \frac{x_i}{r^3}$$

$$U = -GMm \frac{1}{r}$$

ちなみに、覚えておくと便利な式：

$$\frac{\partial}{\partial x_i} r^n = nr^{n-1} \frac{x_i}{r}$$

1.3 ラグランジアン

1.3.1 ラグランジアンとは

解析力学は、「力学」といいながらも「力」という概念はほとんど出てこない。代わって中心的な役割を果たすのがここで紹介する「ラグランジアン」と、後ほど紹介する「ハミルトニアン」という関数である。

ラグランジアンの定義は

$$\text{ラグランジアン} = (\text{運動エネルギー}) - (\text{ポテンシャル})$$

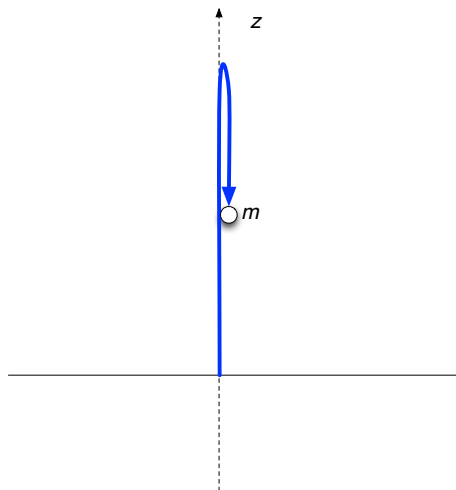
である。ラグランジアンを L 、運動エネルギーを K 、ポテンシャルを U と書けば、

$$L = K - U$$

である。

1.3.2 1 自由度系のラグランジアン

質点の投げ上げ問題 ラグランジアンを具体的に作ってみよう。重力加速度を g とし、質量 m の質点を真上に投げ上げたときの運動を考える。鉛直上向きに軸をとり、時刻 t の質点の位置を一般化座標 $q(t)$ でかく。質点の速度は $dq/dt = \dot{q}$ である。



この系の運動エネルギーは

$$K = \frac{1}{2}m\dot{q}^2$$

ポテンシャルは、

$$U = mgq$$

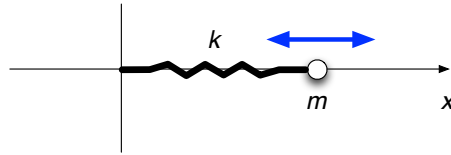
である。したがってこの系のラグランジアンは、

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - mgq \quad (1.4)$$

である。

ラグランジアン L はエネルギーと同じ次元 (SI 単位系ではジュール (J)) をもち、一般化座標 q とその時間微分 $\dot{q}$ の関数である。

直線上の線形バネ (調和振動子) 次に、 x 軸の上を滑らかに動く質点の運動を考えよう。線形バネ (自然長 ℓ_0 , バネ定数 k) が原点とこの質点につながれているものとする。



質点の一般化座標とその時間微分 (速度) を q と $\dot{q} (= dq/dt)$ とすると、この系の運動エネルギー (= 質点の運動エネルギー) は

$$K = \frac{1}{2} m \dot{q}^2,$$

この系のポテンシャル (= バネのポテンシャル) は

$$U = \frac{k}{2} (q - \ell_0)^2$$

である。従って、この系のラグランジアン L は

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{k}{2} (q - \ell_0)^2$$

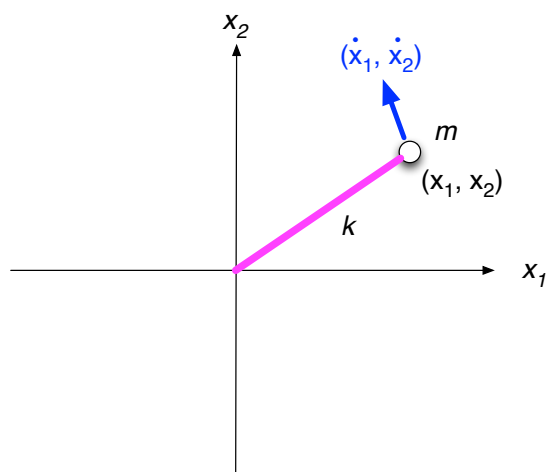
である。バネの自然長が 0 なら

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

となる。

1.3.3 多自由度系のラグランジアン

調和振動子 次に自由度が 2 の系を考えてみよう。 x_1 - x_2 平面で調和振動子系を考える。つまりバネ定数 k 、自然長 $\ell_0 = 0$ の線形バネが、質量 m の質点と、そして他端が原点に固定されている。



質点の位置座標を (x_1, x_2) とすると、質点の速度は $(\dot{x}_1(t), \dot{x}_2(t))$ である。系の運動エネルギーは

$$K = \frac{m}{2} (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2).$$

ポテンシャルは

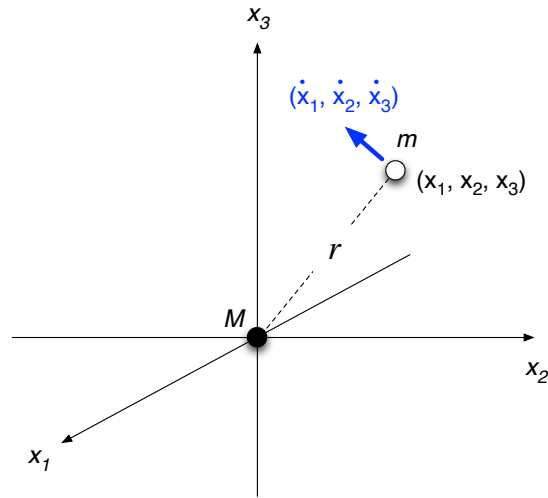
$$U = \frac{k}{2} (x_1^2 + x_2^2).$$

従ってこの系のラグランジアンは

$$L(x_1, x_2, \dot{x}_1, \dot{x}_2) = \frac{m}{2} (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) - \frac{k}{2} (x_1^2 + x_2^2) \quad (1.5)$$

である。

万有引力 次に万有引力（逆自乗力）の下での質点の運動を考えよう。原点に質量 M の太陽がある。太陽は動かないとする。太陽の引力の下での質量 m の地球（質点）の運動を考える。



カーテシアン座標系 x_1 - x_2 - x_3 を使って、地球の位置を座標 (x_1, x_2, x_3) と書く。すると速度は $(\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3)$ である。地球の運動エネルギーは

$$K = \frac{m}{2} \mathbf{v}^2 = \frac{m}{2} (v_1^2 + v_2^2 + v_3^2) = \sum_{j=1}^3 \frac{m}{2} \dot{x}_j \dot{x}_j = \frac{m}{2} \dot{x}_j \dot{x}_j$$

重力のポテンシャルは

$$U = -\frac{GMm}{r} = -\frac{GMm}{\sqrt{\sum_{j=1}^3 x_j x_j}}$$

であるここで G は万有引力定数

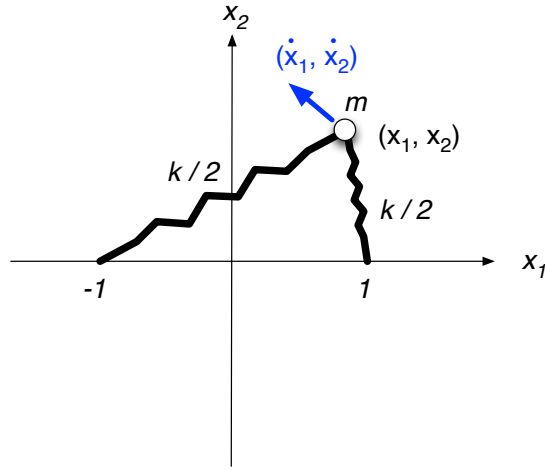
$$G = 6.67384 \times 10^{-11} \quad (\text{m}^3 \text{kg}^{-1} \text{s}^{-2})$$

である。従って、この系のラグランジアン L は

$$L(x_1, x_2, x_3, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3) = \frac{m}{2} \dot{x}_j \dot{x}_j + \frac{GMm}{\sqrt{\sum_{j=1}^3 x_j x_j}}$$

である。

バネが二つある場合 p. 15で x_1 - x_2 平面上のバネ質点系を考えた。今度は、質点が二つのバネに質点 (質量 m) がつながれている場合を考えてみよう。バネ定数はもとの半分の $k/2$ としてみる。自然長は0のままとする。



一方のバネの端は x_1 軸上の点 $(x_1, x_2) = (-1, 0)$ に固定されており、もう一方のバネの端は $(x_1, x_2) = (+1, 0)$ に固定されているものとする。質点の位置を (x_1, x_2) 、速度を $(\dot{x}_1, \dot{x}_2)$ とすると、系の運動エネルギーは

$$K = \frac{m}{2} (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2)$$

である。これは以前と変わらない。一方、系のポテンシャル U は、二つのバネのポテンシャル

$$U_1 = \frac{k}{4} \{(x_1 - 1)^2 + x_2^2\}$$

と

$$U_2 = \frac{k}{4} \{(x_1 + 1)^2 + x_2^2\}$$

の和である。従って

$$U = \frac{k}{4} [\{(x_1 - 1)^2 + x_2^2\} + \{(x_1 + 1)^2 + x_2^2\}]$$

である。従ってこの系のラグランジアンは

$$L(x_1, x_2, \dot{x}_1, \dot{x}_2) = \frac{m}{2} (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) - \frac{k}{4} [\{(x_1 - 1)^2 + x_2^2\} + \{(x_1 + 1)^2 + x_2^2\}] \quad (1.6)$$

である。

ニュートン力学では、「力ベクトル」とか「加速度ベクトル」というベクトル量が基本的な役割を果たす。ニュートンの運動方程式を立てるときにベクトルの成分を分解して考える必要があるのも、そのために計算が煩雑になることが多い。力（ポテンシャル）の源が複数ある時にはさらに解法が複雑になる。

一方、解析力学では、ラグランジアンというスカラー関数が基本的な役割を果たす。ラグランジアンに構成に必要なポテンシャルは、複数の源があってもそれを単に足せばいいだけなので、計算は簡単である。

1.3.4 ラグランジアンの変動性

次章で紹介する「ラグランジュの運動方程式」はラグランジアンから作る微分方程式である。ラグランジアンが同じ系は同じ運動方程式を導くので力学の系としては本質的に同じといえる。

ポテンシャルは定数分だけ不定なので、ラグランジアンもまた定数分だけ不定であることに注意しよう。つまり二つの力学の系のラグランジアンがほとんど同じで、その差が定数分だけのとき、その二つの系の運動方程式は同じである。初期条件が同じであれば同じ解を持つ。

一つのスプリングが原点につながれたときのラグランジアン (1.5) と、上のラグランジアン (1.6) を見てみよう。

見やすいようにここにもう一度書くと、一つのスプリングだけの時のラグランジアンは

$$L_a(x_1, x_2, \dot{x}_1, \dot{x}_2) = \frac{m}{2} (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) - \frac{k}{2} (x_1^2 + x_2^2) \quad (1.7)$$

であった。スプリングが二つの時のラグランジアン (1.6) を整理すると、

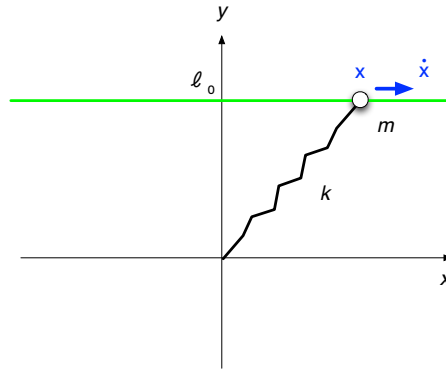
$$L_b(x_1, x_2, \dot{x}_1, \dot{x}_2) = \frac{m}{2} (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) - \frac{k}{2} (x_1^2 + x_2^2) - \frac{k}{2} \quad (1.8)$$

である。

この二つのラグランジアンは定数 $\frac{k}{2}$ だけの差しかない。従って質点は（初期条件が同じであれば）も同じ運動をする。

1.4 演習

1.4.1 演習 1



x - y 平面上に $y = \ell_0$ の直線がある。質量 m の質点がこの直線上を滑らかに（摩擦なしで）動く。スプリング定数 k で、自然長がちょうど ℓ_0 のスプリングがあり、その一端は原点に、もう一端は質点に固定されている。質点の x 座標と x 方向の速度 $\dot{x}$ を使い、この系のラグランジアン $L(x, \dot{x})$ を書け。

解答 運動エネルギーは

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

であり、ポテンシャルは

$$U = \frac{k}{2} (\ell - \ell_0)^2$$

である。ここで

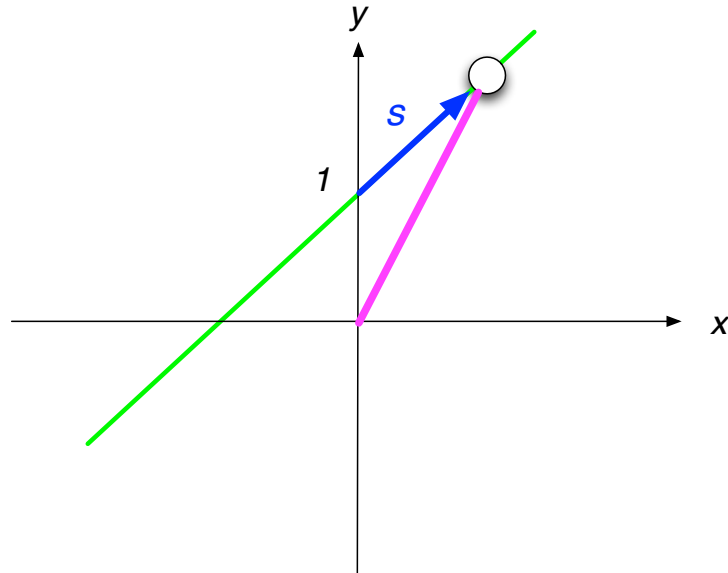
$$\ell = \sqrt{x^2 + \ell_0^2}$$

だから、ラグランジアンは

$$L(x, \dot{x}) = K - U = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{k}{2} \left(\sqrt{x^2 + \ell_0^2} - \ell_0 \right)^2 \quad (1.9)$$

である。 U に出てくる 2 乗の部分を展開しても構わない。

1.4.2 演習 2



x - y 平面上の直線 $y = x + 1$ がある。質量 m の質点がこの直線上を滑らかに (摩擦なしで) 動く。バネ定数 k 、自然長 ℓ_0 がゼロ ($\ell_0 = 0$) のバネがあり、その一端は原点に、もう一端は質点に固定されている。直線と y 軸との交点からの (符号付きの) 距離を s を一般化座標として質点の位置を表現する。この系のラグランジアン $L(s, \dot{s})$ を書け。

【解】 第 2.4.1 章 (p. 29) の問題 (a) の解答を見よ。

Chapter 2

ラグランジュの運動方程式

2.1 ニュートンの運動方程式

カーテシアン座標をとり、 x 軸方向にだけ動く質点を考える。ポテンシャル U の下での質量 m の質点の運動を記述するニュートンの運動方程式は

$$\frac{d}{dt}(mv) + \frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad (2.1)$$

である。ここで v は速度

$$v = \dot{x} \quad (2.2)$$

である。

運動エネルギー K は

$$K = \frac{m}{2}v^2 \quad (2.3)$$

である。これを v の関数とみて、 v で偏微分してみよう。

$$\frac{\partial K}{\partial v} = mv \quad (2.4)$$

この右辺 (=運動量) は式 (2.1) の左辺第一項に出てきた。そこで、式 (2.4) を (2.1) に代入すると、ニュートンの運動方程式は

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial K}{\partial \dot{x}} \right) + \frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad (2.5)$$

である。ここで v の代わりに $\dot{x}$ を使った [式 (2.2)]。

ポテンシャル U は多くの場合、質点の位置 x だけの関数で、速度 $\dot{x}$ には依らない。つまり、

$$\frac{\partial U}{\partial \dot{x}} = 0, \quad (2.6)$$

である。また、

$$\frac{\partial K}{\partial x} = 0, \quad (2.7)$$

も成り立つので、ニュートンの運動方程式 (2.5) はこの系のラグランジアン

$$L(x, \dot{x}) = K(\dot{x}) - U(x) \quad (2.8)$$

を使って書くと

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \quad (2.9)$$

である。

次に (同じカーテシアン座標で) こんどは 3 次元の運動方程式を考えよう。
 $v_i = \dot{x}_i$ を i 方向の速度とすると、運動エネルギーは

$$K = \sum_{j=1}^3 \frac{m}{2} \dot{x}_j \dot{x}_j \quad (2.10)$$

である。ポテンシャル U が速度に依らない、つまり

$$U = U(x_1, x_2, x_3) \quad (2.11)$$

とすると、この系のラグランジアンは

$$L(x_1, x_2, x_3, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3) = K(\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3) - U(x_1, x_2, x_3) \quad (2.12)$$

である。

ニュートンの運動方程式は、

$$\frac{d}{dt} (m\dot{x}_i) + \frac{\partial U}{\partial x_i} = 0, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (2.13)$$

である。

運動エネルギー K [式 (2.10)] を $(\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3)$ の関数とみて、 $\dot{x}_i$ で偏微分すると、 i 方向の運動量

$$\frac{\partial K}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i \quad (2.14)$$

を得る。そこで、式 (2.14) を (2.13) に代入すると、ニュートンの運動方程式は

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial K}{\partial \dot{x}_i} \right) + \frac{\partial U}{\partial x_i} = 0, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.15)$$

と書ける。

式 (2.6) と (2.7) から、ニュートンの運動方程式 (2.15) は、ラグランジアン (2.12) を使って

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \quad (2.16)$$

と書ける。

2.2 ラグランジュの運動方程式

式 (2.9) は (2.16) は、それぞれ 1 次元と 3 次元の（カーテシアン座標の下での）ニュートンの運動方程式をラグランジアンを使って書きなおしたものである。次元が違ってこの二つの式は同じ形をしていることに注目しよう。

実は、運動方程式をラグランジアンを使ってこの形に書くと、系の自由度の数や座標系の取り方に関係なく—つまり一般化座標の下で—いつでも同じ形の運動方程式になる*。これをラグランジュの運動方程式という。

つまり、自由度が N の系で、一般化座標を $(q_1, q_2, \dots, q_N)$ 、ラグランジアンを

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

とすると、ラグランジュの運動方程式は

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.17)$$

である。

特に、自由度が 1 の場合、ラグランジアンは

$$L(q, \dot{q})$$

で、ラグランジュの運動方程式は

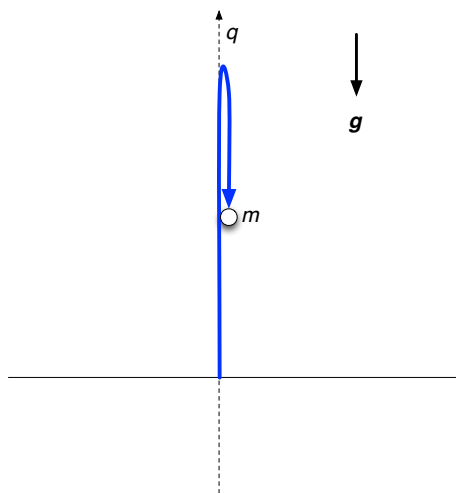
$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad (2.18)$$

である。

なぜこれが正しい運動方程式になるのか？という疑問はしばらく抑えて、今は具体的な例を通じてこの方程式に慣れていこう。

*それがなぜかは後ほど説明する

2.3 ラグランジュの運動方程式の簡単な例



質点の投げ上げ 一般化座標を鉛直上向きの位置 q としたときのラグランジアンは、(1.4) であった。再掲すると、

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - mgq. \quad (2.19)$$

ラグランジュの運動方程式を立ててみよう。まず

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

を計算する。次に

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

に計算する。そして

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -mg$$

を計算する。これをラグランジュの運動方程式に代入すると

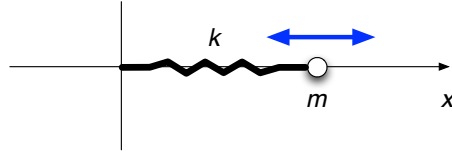
$$\{m\ddot{q}\} - \{-mg\} = 0$$

これがこの系のラグランジュの運動方程式である。

これを書き換えて

$$m\ddot{q} = -mg$$

とするとニュートンの運動方程式と同じである。



直線上の線形バネ（調和振動子） p. 17で考えた問題である。一般化座標を q とすると、1次元調和振動子系のラグランジアンは、

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{k}{2} q^2 \quad (2.20)$$

であった。これからラグランジュの運動方程式を作ってみよう。まずは

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

次に

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

も簡単である。そして、

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -kq$$

だから、ラグランジュの運動方程式は

$$\{m\ddot{q}\} - \{-kq\} = 0 \quad (2.21)$$

である。 $k/m = \omega^2$ とすると

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0 \quad (2.22)$$

となる。この微分方程式の解は、 c_1, c_2 を定数として、

$$q(t) = c_1 \cos(\omega t + c_2), \quad (2.23)$$

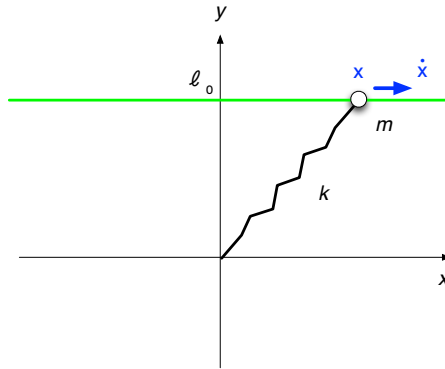
あるいは

$$q(t) = c_1 \cos(\omega t) + c_2 \sin(\omega t) \quad (2.24)$$

である。

直線に拘束された質点 前の章 (p. 21) で考えた問題である。 x - y 平面上に $y = \ell_0$ の直線がある。質量 m の質点がこの直線上を滑らかに（摩擦なしで）動く。バネ定数 k で、自然長がちょうど ℓ_0 のバネがあり、その一端は原点に、もう一端は質点に固定されている。一般化座標として、質点の x 座標を使うと、この系のラグランジアン $L(x, \dot{x})$ は式 (1.9) であった。再掲すると、

$$L(x, \dot{x}) = K - U = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{k}{2} \left(\sqrt{x^2 + \ell_0^2} - \ell_0 \right)^2 \quad (2.25)$$



ラグランジュの運動方程式を作ってみよう。まずは

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

次に

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{d}{dt} (m\dot{x}) = m\ddot{x}$$

次は、式が少しだけ長くなるが、計算は単純である。合成関数の微分法 [式 (??)] より、

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial x} &= -k \left(\sqrt{x^2 + \ell_0^2} - \ell_0 \right) \frac{x}{\sqrt{x^2 + \ell_0^2}} \\ &= -kx \left(1 - \frac{\ell_0}{\sqrt{\ell_0^2 + x^2}} \right) \end{aligned}$$

従って、ラグランジュの運動方程式は

$$\{m\ddot{x}\} - \left\{ -kx \left(1 - \frac{\ell_0}{\sqrt{\ell_0^2 + x^2}} \right) \right\} = 0,$$

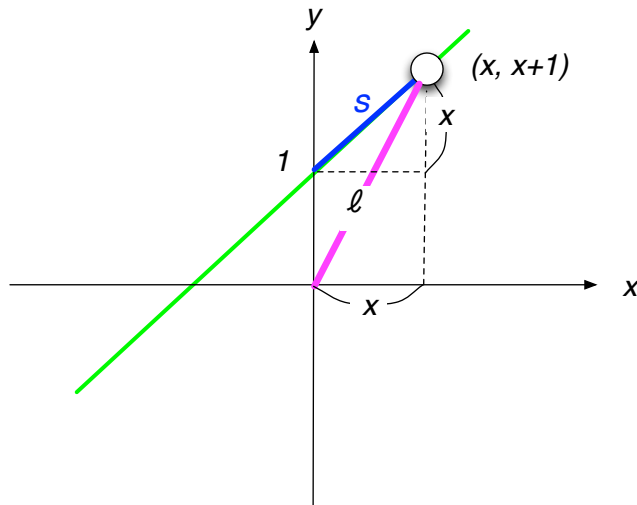
つまり

$$m\ddot{x} + kx \left(1 - \frac{\ell_0}{\sqrt{\ell_0^2 + x^2}} \right) = 0$$

これはニュートン力学の範囲でも導くことができる。ただし、ニュートン力学の方法では、図を見ながら力の分解を幾何学的に注意して導出する必要があるのに対して、ラグランジュの運動方程式では機械的な計算で求めることができたことに注目しよう。

2.4 演習

2.4.1 直線上を滑る質点＝バネ系



問題 ここではラグランジアンだけでなく、運動方程式も求めよう。

x - y 平面上の直線 $y = x + 1$ がある。質量 m の質点がこの直線上を滑らかに（摩擦なしで）動く。バネ定数 k で、自然長 ℓ_0 がゼロ ($\ell_0 = 0$) のバネがあり、その一端は原点に、もう一端は質点に固定されている。直線と y 軸との交点からの（符号付きの）距離を s を質点の一般化座標とする。

(a) この系のラグランジアン $L(s, \dot{s})$ を書け。

(b) ラグランジュの運動方程式を書け。

解答 (a) 運動エネルギーは

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

バネの長さを ℓ とすると、ポテンシャルは

$$U = \frac{k}{2} \ell^2$$

である。 ℓ^2 を一般化座標 s を使って書こう。図から明らかに

$$s = \sqrt{2}x$$

である。これは符号も含めて成り立つ関係である。質点のカーテシアン座標を $(x, y) = (x, x + 1)$ とすると、図から

$$\ell^2 = x^2 + y^2 = x^2 + (x + 1)^2 = 2x^2 + 2x + 1 = s^2 + \sqrt{2}s + 1$$

なので、結局、ラグランジアンは

$$L(s, \dot{s}) = K - U = \frac{m}{2} \dot{s}^2 - \frac{k}{2} (s^2 + \sqrt{2}s + 1)$$

である。定数部分を除いて

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

等としてもよい。

(b)

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{s}} = m\dot{s}$$

なので、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{s}} \right) = m\ddot{s}$$

である。次に

$$\frac{\partial L}{\partial s} = -k \left(s + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)$$

なのでラグランジュの運動方程式は

$$\{m\ddot{s}\} - \left\{ -k \left(s + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right\} = 0,$$

つまり

$$\ddot{s} + \frac{k}{m} \left(s + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) = 0.$$

が答えである。

なお、この運動方程式は

$$\ddot{\tilde{s}} = s + \frac{1}{\sqrt{2}}$$

という新しい一般化座標を定義すると

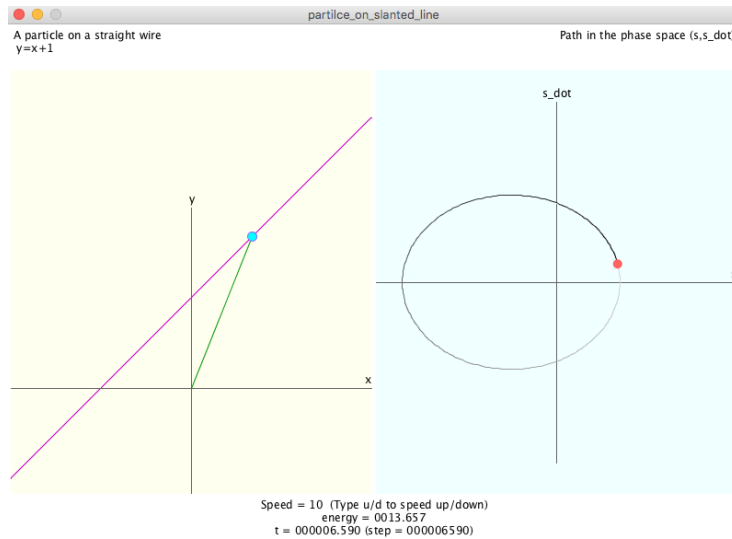
$$\ddot{\tilde{s}} + \frac{k}{m} \tilde{s} = 0$$

となる。この解は

$$\tilde{s} = c_1 \cos(\omega t + c_2)$$

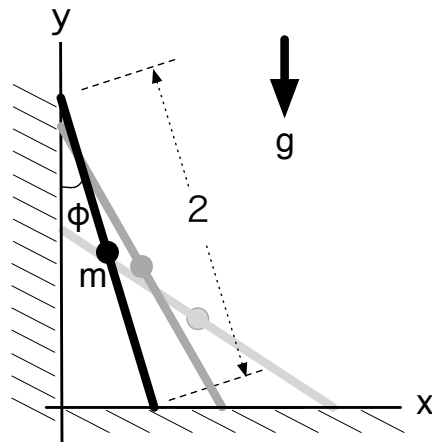
で、 c_1 と c_2 は積分定数、 $\omega = \sqrt{k/m}$ である。これは、同じばね定数 k をもつバネの一端を（原点ではなく）この直線上の点 $(x, y) = (-1/2, 1/2)$ につなげたときの運動と同じであることを意味する。

なお、このラグランジュの運動方程式を 4 次ルンゲ=クッタ法で解くプログラム `partilce_on_slanted_line.pde` を講義の web page においた。



左の図は実空間 (x - y 平面) 上での質点の動きを示したものの、右の図は、一般化座標 s とその時間微分 $\dot{s}$ がつくる空間 (相空間と呼ばれる) 上での系の状態の変化をアニメーションで示したものである。

2.4.2 滑りながら倒れる棒



問題 長さ 2 の重さのない棒の中心に固着した質量 m の質点がある。鉛直下方の一定重力 (重力定数 g) の下、この棒を壁に (斜めに) 立て掛けた。床面に沿って x 軸、壁面に沿って y 軸をとる。棒の両端はそれぞれ壁面と床面から離れない

ように（摩擦なしで）滑りながらこの棒が倒れる途中の運動を考える。棒と壁のなす角度 ϕ を一般化座標とする。

(a) ラグランジアン $L(\phi, \dot{\phi})$ を求めよ。

(b) $\phi(t)$ の運動方程式を書け。

(c) $|\phi| \ll 1$ のときの解を書け。

解答

(a) 質点の位置を (x, y) とすると

$$(x, y) = (\sin \phi, \cos \phi)$$

速度は

$$(\dot{x}, \dot{y}) = (\cos \phi \dot{\phi}, -\sin \phi \dot{\phi})$$

である。棒は質量を持たないので、この系の運動エネルギー K は、質点だけが持っている。従って、

$$K = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{m}{2}\dot{\phi}^2$$

同様に棒はポテンシャルを持たないので、系のポテンシャル U は、質点の重力ポテンシャル

$$U = mgy = mg \cos \phi$$

である。従ってラグランジアンは

$$L(\phi, \dot{\phi}) = \frac{m}{2}\dot{\phi}^2 - mg \cos \phi$$

である。

(b)

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m\dot{\phi}$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} \right) = m\ddot{\phi}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \phi} = -mg \sin \phi$$

これらをラグランジュの運動方程式

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

に代入すると、

$$\{m\ddot{\phi}\} - \{-mg \sin \phi\} = 0$$

整理すると

$$\ddot{\phi} - g \sin \phi = 0$$

これが ϕ の運動方程式である。

(c) $|\phi| \ll 1$ の時、 $\sin \phi \sim \phi$ より、運動方程式は

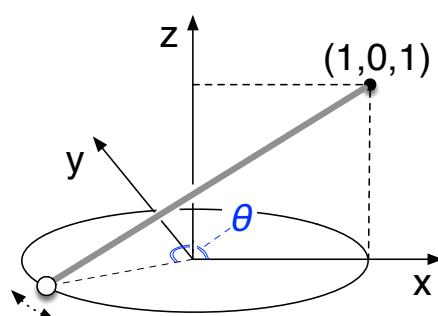
$$\ddot{\phi} = g\phi$$

となる。この微分方程式の一般解は

$$\phi(t) = c_1 e^{\sqrt{g}t} + c_2 e^{-\sqrt{g}t}$$

である。

2.4.3 円上の質点＝バネ系



問題 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。重力と摩擦は無視する。バネ定数は k 、自然長は 0 とする。

- (a) x 軸となす角度 θ を一般化座標とする。たとえば $\theta = 0$ のときの質点の位置は、カーテシアン座標で $(x, y) = (1, 0)$ 。 $\theta = \pi/2$ のときは $(x, y) = (0, 1)$ である。この系のラグランジアン $L(\theta, \dot{\theta})$ を求めよ。
- (b) ラグランジュの運動方程式を書け。
- (c) $|\theta| \ll 1$ の時の解を求めよ。

解答

(a) 運動エネルギーは

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

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

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

だからポテンシャルエネルギーは

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

従ってラグランジアンは

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

(b) 上のラグランジアンを偏微分して、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = m \dot{\theta}$$

だから

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) = m \ddot{\theta}$$

また、

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = -k \sin \theta$$

従ってラグランジュの運動方程式は、

$$\{m \ddot{\theta}\} - \{-k \sin \theta\} = 0$$

つまり

$$m \ddot{\theta} + k \sin \theta = 0$$

である。あるいは

$$\omega^2 := \frac{k}{m}$$

とすると

$$\ddot{\theta} + \omega^2 \sin \theta = 0$$

が運動方程式である。

(c) $|\theta| \ll 1$ のとき $\sin \theta \sim \theta$ だから、運動方程式は

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

である。この微分方程式の解は

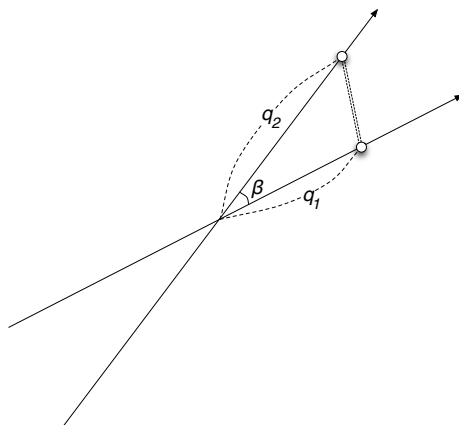
$$\theta(t) = c_1 \cos(\omega t) + c_2 \sin(\omega t)$$

ここで c_1 と c_2 は定数である。あるいは

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

など。

2.4.4 バネ=質点 2 自由度系



問題 原点で角度 β をもって交差する直線 1 と直線 2 がある。質量 m をもつ質点 1 が直線 1 の上を、同じ質量 m をもつ質点 2 が直線 2 の上を摩擦なしに滑る。質点 1 と質点 2 の間をバネ（ばね定数 k 、自然長 0）がつないでいる。質点 1 の（直線 1 上の）座標を q_1 、質点 2 の（直線 2 上の）座標を q_2 として、

- (a) ラグランジアン $L(q_1, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2)$ を書け。
- (b) ラグランジュの運動方程式を書け。
- (c) その運動方程式を解け。

解

- (a) この系の運動エネルギー K は二つの質点をもつ運動エネルギーの和なので

$$K = \frac{m}{2} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) \quad (2.26)$$

である。系のポテンシャル U はバネのポテンシャルだから

$$U = \frac{k}{2} \ell^2 \quad (2.27)$$

である。余弦定理より

$$\ell^2 = q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \cos \beta \quad (2.28)$$

である。従ってラグランジアンは

$$L(q_1, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2) = \frac{m}{2} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{k}{2} (q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \cos \beta) \quad (2.29)$$

である。

(b) 例によっていつもの手続きに従って、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i \quad (i = 1, 2) \quad (2.30)$$

を計算し、次に

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = m\ddot{q}_i \quad (i = 1, 2) \quad (2.31)$$

を計算する。次は q_1 と q_2 とで少し形が違うのでそれぞれ計算しよう。

$$\frac{\partial L}{\partial q_1} = -k(q_1 - q_2 \cos \beta) \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial L}{\partial q_2} = -k(q_2 - q_1 \cos \beta) \quad (2.33)$$

従って運動方程式は、

$$\{m\ddot{q}_1\} - \{-k(q_1 - q_2 \cos \beta)\} = 0 \quad (2.34)$$

と

$$\{m\ddot{q}_2\} - \{-k(q_2 - q_1 \cos \beta)\} = 0 \quad (2.35)$$

である。 $\omega^2 = k/m$ を定義すると、

$$\ddot{q}_1 + \omega^2(q_1 - q_2 \cos \beta) = 0 \quad (2.36)$$

$$\ddot{q}_2 + \omega^2(q_2 - q_1 \cos \beta) = 0 \quad (2.37)$$

と書ける。

(c) 二つの変数

$$s_p = \frac{q_1 + q_2}{2} \quad (2.38)$$

$$s_m = \frac{q_1 - q_2}{2} \quad (2.39)$$

と定義すると、式 (2.36) と (2.37) の和と差から

$$\ddot{s}_p + \omega_m^2 s_p = 0 \quad (2.40)$$

$$\ddot{s}_m + \omega_p^2 s_m = 0 \quad (2.41)$$

を得る。ここで

$$\omega_p = \omega \sqrt{1 + \cos \beta} \quad (2.42)$$

$$\omega_m = \omega \sqrt{1 - \cos \beta} \quad (2.43)$$

はそれぞれ定数である。式 (2.40) と (2.41) はすぐに解けて

$$s_p = c_1 \cos(\omega_m t + c_2) \quad (2.44)$$

$$s_m = c_3 \cos(\omega_p t + c_4) \quad (2.45)$$

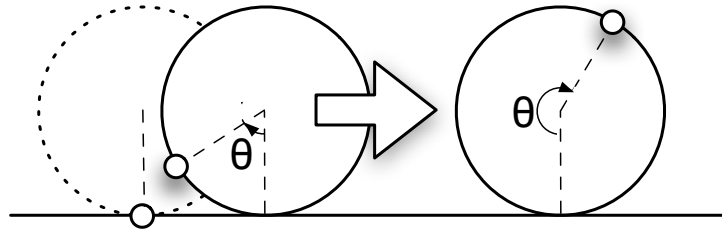
である。積分定数を c_1, c_2, c_3, c_4 とした。式 (2.38) と (2.39) を使って元の変数 q_1 と q_2 に戻せば、

$$q_1(t) = s_p + s_m = c_1 \cos(\omega_m t + c_2) + c_3 \cos(\omega_p t + c_4) \quad (2.46)$$

$$q_2(t) = s_p - s_m = c_1 \cos(\omega_m t + c_2) - c_3 \cos(\omega_p t + c_4) \quad (2.47)$$

が解である。

2.4.5 ころがる円についてのおもり



問題 半径 1 の円がある。この円が x - y 平面内で x 軸の上を転がっていく。(重さのない自転車の車輪のようなものを考えればよい。) 円が転がるときの摩擦はなく、「スリップ」もしないものとする。また、円は x 軸から離れる (ジャンプすることもないものとする。以下、重力 (重力加速度 g) は $-y$ 方向で、 $y = 0$ が地面の高さとする。

この円上のある点に固着した質量 m の質点がある。(自転車の車輪 (チューブ内) に重りがついていると想像せよ。) 初期時刻 $t = 0$ に質点は地面 ($y = 0$) と接触していた。このときの x 座標を原点 $x = 0$ とし、円の中心と質点を結ぶ直線が $-y$ 方向となす角度を θ とする。

- 円の中心の x 座標を θ で書け。
- 質点の x, y 座標を θ で書け。
- 系の運動エネルギー $K(\theta, \dot{\theta})$ を書け。
- この系のラグランジアン $L(\theta, \dot{\theta})$ を書け。
- ラグランジュの運動方程式を書け。

解答

- (a) 円が回転した時にできる円弧の長さだけ円の中心は x 方向に動くから

$$x = \theta$$

(b) 図から

$$x = \theta - \sin \theta$$

$$y = 1 - \cos \theta$$

(c) 上の x と y の式を t で微分すると

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{dx}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = (1 - \cos \theta) \dot{\theta}$$

$$\dot{y} = \frac{dy}{dt} = \frac{dy}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = \sin \theta \dot{\theta}$$

これから運動エネルギーは

$$\begin{aligned} K(\theta, \dot{\theta}) &= \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) \\ &= \frac{m}{2} \{ (1 - \cos \theta)^2 + \sin^2 \theta \} \dot{\theta}^2 \\ &= m(1 - \cos \theta) \dot{\theta}^2 \end{aligned}$$

(d) 地面の高さを $U = 0$ の基準にとれば、ポテンシャルは $U = mgy$ だから、ラグランジアン $L = K - U$ は

$$L(\theta, \dot{\theta}) = m(1 - \cos \theta) \dot{\theta}^2 - mg(1 - \cos \theta)$$

つまり

$$L(\theta, \dot{\theta}) = m(1 - \cos \theta) (\dot{\theta}^2 - g)$$

である。

(e) 上のラグランジアンを偏微分して、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = 2m(1 - \cos \theta) \dot{\theta}$$

だから

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) &= \frac{d}{dt} \{ 2m(1 - \cos \theta) \dot{\theta} \} \\ &= 2m(1 - \cos \theta) \ddot{\theta} + 2m \sin \theta \dot{\theta}^2 \end{aligned}$$

また、

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = m \sin \theta (\dot{\theta}^2 - g)$$

従ってラグランジュの運動方程式は、

$$\{ 2m(1 - \cos \theta) \ddot{\theta} + 2m \sin \theta \dot{\theta}^2 \} - \{ m \sin \theta (\dot{\theta}^2 - g) \} = 0$$

つまり

$$2m(1 - \cos \theta) \ddot{\theta} + m \sin \theta \dot{\theta}^2 + mg \sin \theta = 0$$

である。あるいは両辺を m で割って

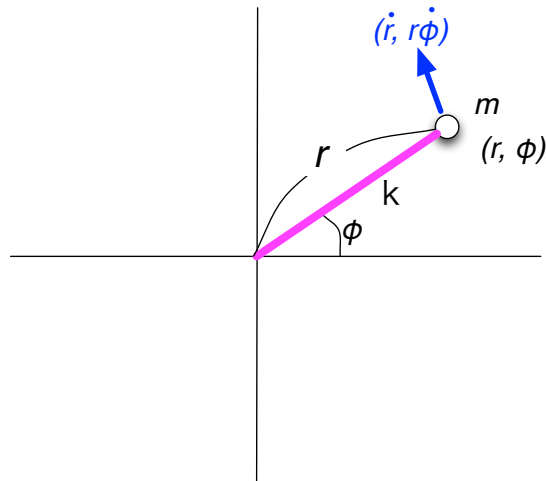
$$2(1 - \cos \theta) \ddot{\theta} + \sin \theta \dot{\theta}^2 + g \sin \theta = 0$$

や

$$2 \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \ddot{\theta} + \dot{\theta}^2 + g = 0$$

など。

2.4.6 2次元調和振動子



バネ定数 k 、自然長 $\ell_0 = 0$ の線形バネが、一方の端は質量 m の質点に、他端は原点に固定されている。この系のラグランジアンは、以前（第 1.3.3 章、p. 17）、カーテシアン座標を一般化座標として考えた。

問題

- (a) 質点の位置の極座標 (r, ϕ) を一般化座標としてラグランジアン $L(r, \phi, \dot{r}, \dot{\phi})$ を導出せよ。
- (b) 運動方程式を導出せよ。

解

(a) ポテンシャルエネルギーは極座標で書けば

$$U = \frac{k}{2} r^2 \quad (2.48)$$

と簡単である。

質点の位置のカーテシアン座標表示 (x_1, x_2) と極座標表示 (r, ϕ) の間には

$$x_1 = r \cos \phi \quad (2.49)$$

$$x_2 = r \sin \phi \quad (2.50)$$

という関係がある。速度を極座標で書くと、

$$v_r = \dot{r} \quad (2.51)$$

$$v_\phi = r\dot{\phi} \quad (2.52)$$

なので、運動エネルギーは

$$K = \frac{m}{2} (v_r^2 + v_\phi^2) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) \quad (2.53)$$

である。式 (2.51) と (2.52) がすぐには分からなければ、以下のように丁寧に計算してもよい。式 (2.49) と (2.50) を時間で微分して

$$v_x = v_1 = \dot{x}_1 = \frac{d}{dt}(r \cos \phi) = \dot{r} \cos \phi - r\dot{\phi} \sin \phi \quad (2.54)$$

$$v_y = v_2 = \dot{x}_2 = \frac{d}{dt}(r \sin \phi) = \dot{r} \sin \phi + r\dot{\phi} \cos \phi \quad (2.55)$$

なので、

$$v^2 = v_1^2 + v_2^2 = (\dot{r} \cos \phi - r\dot{\phi} \sin \phi)^2 + (\dot{r} \sin \phi + r\dot{\phi} \cos \phi)^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 \quad (2.56)$$

から運動エネルギー (2.53) を得る。ラグランジアンは運動エネルギーとポテンシャルを引いて

$$L(r, \phi, \dot{r}, \dot{\phi}) = K - U = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) - \frac{k}{2} r^2 \quad (2.57)$$

である。

(b) ラグランジアン (2.57) から運動方程式を求めよう。まずは r 成分から。

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) = m\ddot{r}$$

$$\frac{\partial L}{\partial r} = mr\dot{\phi}^2 - kr$$

だから運動方程式の r 成分は

$$\{m\ddot{r}\} - \{mr\dot{\phi}^2 - kr\} = 0$$

つまり

$$m\ddot{r} - mr\dot{\phi}^2 + kr = 0$$

である。第 2 項は遠心力である。次に ϕ 成分：

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi}$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} \right) = \frac{d}{dt} (mr^2\dot{\phi})$$

右辺はこれ以上展開しないで次のステップにいこう。 L が ϕ には直接依存していないので、次の項はゼロになる。

$$\frac{\partial L}{\partial \phi} = 0$$

結局、運動方程式の ϕ 成分は、

$$\left\{ \frac{d}{dt} (mr^2\dot{\phi}) \right\} - \{0\} = 0$$

つまり

$$\frac{d}{dt} (mr^2\dot{\phi}) = 0$$

と簡単になる。これは

$$mr^2\dot{\phi} = \text{const.}$$

を意味する。後で述べるが、これは角運動量の保存則を意味する。

Chapter 3

剛体の運動方程式

剛体とは、堅い物体を理想化したものである。堅いので変形はしない。弾性的な変形さえ考えないので、剛体はたたいても音が出ないであろう。剛体の運動を記述する運動方程式の一つはオイラー方程式と呼ばれる。オイラー方程式は角運動量の保存則を使うなどして「賢く」導出することができるが、（これまで何度も強調したように）なにか一般化座標を決めてラグランジアンを求めれば、あとは機械的な計算で運動方程式を得ることができるというのが解析力学のありがたさであり、これは剛体運動の場合も例外ではない。そこでここではオイラー角とよばれるものを一般化座標としたラグランジアンから愚直にオイラー方程式を導出する。この方法は、途中の計算がかなり煩雑になるものの、角速度の存在や、オイラー角と角速度の関係、トルクなどが自動的に導かれる。

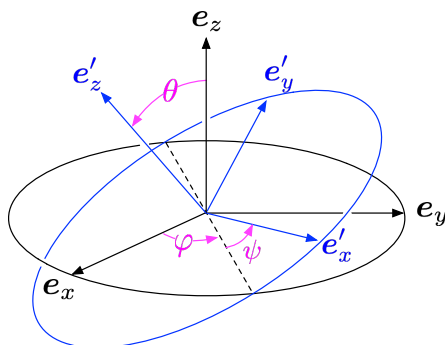
3.1 オイラー角

はじめに3次元空間中を運動する剛体の自由度を考える。重心の位置を指定するのに3の自由度が必要で、あとは重心の周りに剛体を回転させる自由度である。硬直状態で立っている死体を北枕にして寝かせるためには、

1. 死体を床に横たえて（背筋を水平にする）
2. 仰向けにして（顔を上に向ける）
3. 北向きに寝かせる（北枕にする）

必要がある。つまり剛体の回転の自由度は3である。

剛体の向きを指定するのに次に述べる（ zxz 型と呼ばれる）オイラー角をとる。



まず、 z 軸の周りに φ 回転する。次に新しい x 軸の周りに θ 回転する。その回転で移動した z 軸の周りに ψ 回転する。

$$R_1(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

$$R_2(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$R_3(\psi) = \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

として、

$$R(\varphi, \theta, \psi) = R_3(\psi)R_2(\theta)R_1(\varphi) \quad (3.4)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \psi \sin \varphi & \cos \theta \sin \psi \cos \varphi + \cos \psi \sin \varphi & \sin \theta \sin \psi \\ -\cos \theta \cos \psi \sin \varphi - \sin \psi \cos \varphi & \cos \theta \cos \psi \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi & \sin \theta \cos \psi \\ \sin \theta \sin \varphi & -\sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

という行列を定義すると、座標系の基底ベクトルはこの回転で

$$\begin{pmatrix} e'_x \\ e'_y \\ e'_z \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

と変換される。なお、 R は直交行列で、

$$R^t R = R R^t = I \quad (3.7)$$

である。

任意のベクトル $\mathbf{a}$ をとる。回転後の基底系で $\mathbf{a}$ を測ると、

$$\mathbf{a} = (a'_x \ a'_y \ a'_z) \begin{pmatrix} \mathbf{e}'_x \\ \mathbf{e}'_y \\ \mathbf{e}'_z \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

式 (3.6) より

$$\mathbf{a} = (a'_x \ a'_y \ a'_z) R \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

元の座標系で $\mathbf{a}$ を測ると、

$$\mathbf{a} = (a_x \ a_y \ a_z) \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

なので、ベクトルの成分の変換則は

$$(a_x \ a_y \ a_z) = (a'_x \ a'_y \ a'_z) R \quad (3.11)$$

である。これは

$$(a'_x \ a'_y \ a'_z) = (a_x \ a_y \ a_z) R^t \quad (3.12)$$

あるいは

$$\begin{pmatrix} a'_x \\ a'_y \\ a'_z \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

とも書ける。

3.2 静止系での角速度

二つの座標系 G と G' を考える。 G は静止系である。その原点を剛体の重心にとる。 G' は剛体に固定された座標系とする。 G' 系の基底ベクトルは、時間に依存する回転 $R(\varphi(t), \theta(t), \psi(t))$ で回転変換される。剛体に固定された点 $\mathbf{x}$ は G 系で見れば動いているが、回転座標系 G' からみれば止まっている。つまり、

$$\mathbf{x}(t) = (x(t) \ y(t) \ z(t)) \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

$$= (x' \ y' \ z') \begin{pmatrix} \mathbf{e}'_x(t) \\ \mathbf{e}'_y(t) \\ \mathbf{e}'_z(t) \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

この点の速度ベクトルを $\mathbf{v}$ とすると、式 (3.15) を時間微分して、

$$\mathbf{v}(t) = \dot{\mathbf{x}}(t) \quad (3.16)$$

$$= (x' \ y' \ z') \begin{pmatrix} \dot{e}'_x(t) \\ \dot{e}'_y(t) \\ \dot{e}'_z(t) \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

$$= (x' \ y' \ z') \dot{R}(t) \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

$$= (x \ y \ z) R^t(t) \dot{R}(t) \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

速度ベクトル $\mathbf{v}$ を静止系 G で測れば、

$$\mathbf{v} = (v_x \ v_y \ v_z) \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

なので、式 (3.19) と (3.20) より

$$(v_x \ v_y \ v_z) = (x \ y \ z) \Omega \quad (3.21)$$

である。ここで、

$$\Omega = R^t \dot{R} \quad (3.22)$$

は反対称行列（従って対角項がゼロ）である。なぜなら、

$$\Omega = R^t \dot{R} = R^t \left(\frac{\partial R}{\partial \varphi} \dot{\varphi} + \frac{\partial R}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial R}{\partial \psi} \dot{\psi} \right) = R^t \frac{\partial R}{\partial \varphi} \dot{\varphi} + R^t \frac{\partial R}{\partial \theta} \dot{\theta} + R^t \frac{\partial R}{\partial \psi} \dot{\psi} \quad (3.23)$$

に注意し、

$$R^t R = I \quad (3.24)$$

を φ で微分して

$$R^t \frac{\partial R}{\partial \varphi} + \frac{\partial R^t}{\partial \varphi} R = 0 \quad (3.25)$$

つまり

$$R^t \frac{\partial R}{\partial \varphi} + \left(R^t \frac{\partial R}{\partial \varphi} \right)^t = 0 \quad (3.26)$$

これは $R^t (\partial R / \partial \varphi)$ が反対称行列であることを意味する。同様に $R^t (\partial R / \partial \theta)$ と $R^t (\partial R / \partial \psi)$ も反対称行列なので、式 (3.23) から Ω は反対称行列である。

Ω を具体的に求めよう。まず、

$$\dot{R} = \begin{pmatrix} \dot{R}_{11} & \dot{R}_{12} & \dot{R}_{13} \\ \dot{R}_{21} & \dot{R}_{22} & \dot{R}_{23} \\ \dot{R}_{31} & \dot{R}_{32} & \dot{R}_{33} \end{pmatrix} = \frac{\partial R}{\partial \varphi} \dot{\varphi} + \frac{\partial R}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial R}{\partial \psi} \dot{\psi} \quad (3.27)$$

を計算すると、

$$\dot{R}_{11} = \dot{\theta} \sin \theta \sin \psi \sin \varphi - \dot{\varphi}(\cos \theta \sin \psi \cos \varphi + \cos \psi \sin \varphi) - \dot{\psi}(\cos \theta \cos \psi \sin \varphi + \sin \psi \cos \varphi) \quad (3.28)$$

$$\dot{R}_{12} = -\dot{\theta} \sin \theta \sin \psi \cos \varphi + \dot{\varphi}(\cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \psi \sin \varphi) + \dot{\psi}(\cos \theta \cos \psi \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi) \quad (3.29)$$

$$\dot{R}_{13} = \dot{\theta} \cos \theta \sin \psi + \dot{\psi} \sin \theta \cos \psi \quad (3.30)$$

$$\dot{R}_{21} = \dot{\theta} \sin \theta \cos \psi \sin \varphi + \dot{\varphi}(\sin \psi \sin \varphi - \cos \theta \cos \psi \cos \varphi) + \dot{\psi}(\cos \theta \sin \psi \sin \varphi - \cos \psi \cos \varphi) \quad (3.31)$$

$$\dot{R}_{22} = -\dot{\theta} \sin \theta \cos \psi \cos \varphi - \dot{\varphi}(\cos \theta \cos \psi \sin \varphi + \sin \psi \cos \varphi) - \dot{\psi}(\cos \theta \sin \psi \cos \varphi + \cos \psi \sin \varphi) \quad (3.32)$$

$$\dot{R}_{23} = \dot{\theta} \cos \theta \cos \psi - \dot{\psi} \sin \theta \sin \psi \quad (3.33)$$

$$\dot{R}_{31} = \dot{\theta} \cos \theta \sin \varphi + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \varphi \quad (3.34)$$

$$\dot{R}_{32} = \dot{\varphi} \sin \theta \sin \varphi - \dot{\theta} \cos \theta \cos \varphi \quad (3.35)$$

$$\dot{R}_{33} = -\dot{\theta} \sin \theta \quad (3.36)$$

である。これに R^t を左からかけて、

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\psi} \cos \theta + \dot{\varphi} & -\dot{\theta} \sin \varphi + \dot{\psi} \sin \theta \cos \varphi \\ -\dot{\psi} \cos \theta - \dot{\varphi} & 0 & \dot{\theta} \cos \varphi + \dot{\psi} \sin \theta \sin \varphi \\ \dot{\theta} \sin \varphi - \dot{\psi} \sin \theta \cos \varphi & -\dot{\theta} \cos \varphi - \dot{\psi} \sin \theta \sin \varphi & 0 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

を得る。予想通り反対称行列になった。ここで

$$\omega_x = \dot{\theta} \cos \varphi + \dot{\psi} \sin \theta \sin \varphi \quad (3.38)$$

$$\omega_y = \dot{\theta} \sin \varphi - \dot{\psi} \sin \theta \cos \varphi \quad (3.39)$$

$$\omega_z = \dot{\psi} \cos \theta + \dot{\varphi} \quad (3.40)$$

を定義する。この成分は静止系 G で測ったものであることに注意。

$$\Omega = \dot{R}R^t = \begin{pmatrix} 0 & \omega_z & -\omega_y \\ -\omega_z & 0 & \omega_x \\ \omega_y & -\omega_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

と書ける。式 (3.21) に代入すると、

$$v_x = \omega_y z - \omega_z x \quad (3.42)$$

$$v_y = \omega_z x - \omega_x y \quad (3.43)$$

$$v_z = \omega_x y - \omega_y z \quad (3.44)$$

この三つの式を外積記号を使ってまとめて書けば、

$$\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{x} \quad (3.45)$$

とも書ける。この ω は角速度と呼ばれる。

ある剛体が N 個の質点で構成されているとする。 i 番目の質点の位置と速度を $\mathbf{x}_i$ と $\mathbf{v}_i$ とすると、式 (3.42)–(3.44) より、

$$v_{ix}(t) = \omega_y(t)z_i(t) - \omega_z(t)x_i(t) \quad (3.46)$$

$$v_{iy}(t) = \omega_z(t)x_i(t) - \omega_x(t)y_i(t) \quad (3.47)$$

$$v_{iz}(t) = \omega_x(t)y_i(t) - \omega_y(t)z_i(t) \quad (3.48)$$

これからラグランジアンを作ってもよいが、そうするとラグランジュの運動方程式で時間微分をとるときに、 $\mathbf{x}_i(t)$ の時間依存性が出てきて計算が面倒になるので、剛体と共に回転する系 G' で質点の位置を測ることにする。そうすると $\mathbf{x}$ の成分は時間に依存しない。

3.3 回転系での角速度

式 (3.7) と式 (3.18) より、

$$\mathbf{v} = (x' \ y' \ z') \dot{R} R^t R \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

$$= (x' \ y' \ z') \dot{R} R^t \begin{pmatrix} e'_x \\ e'_y \\ e'_z \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

速度ベクトル $\mathbf{v}$ を G' 系で測れば、

$$\mathbf{v} = (v'_x \ v'_y \ v'_z) \begin{pmatrix} e'_x \\ e'_y \\ e'_z \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

なので、式 (3.50) と (3.51) より

$$(v'_x \ v'_y \ v'_z) = (x' \ y' \ z') \Lambda \quad (3.52)$$

ここで

$$\Lambda = \dot{R} R^t \quad (3.53)$$

である。具体的に計算すると、

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\varphi} \cos \theta + \dot{\psi} & \dot{\theta} \sin \psi - \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi \\ -\dot{\varphi} \cos \theta - \dot{\psi} & 0 & \dot{\theta} \cos \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi \\ -\dot{\theta} \sin \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi & -\dot{\theta} \cos \psi - \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi & 0 \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & \omega'_z & -\omega'_y \\ -\omega'_z & 0 & \omega'_x \\ \omega'_y & -\omega'_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

ここで、

$$\omega'_x = \dot{\theta} \cos \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi \quad (3.56)$$

$$\omega'_y = -\dot{\theta} \sin \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi \quad (3.57)$$

$$\omega'_z = \dot{\varphi} \cos \theta + \dot{\psi} \quad (3.58)$$

ちなみにこれを (φ, θ, ψ) について解くと、

$$\dot{\varphi} = \csc \theta (\omega'_x \sin \psi + \omega'_y \cos \psi) \quad (3.59)$$

$$\dot{\theta} = \omega'_x \cos \psi - \omega'_y \sin \psi \quad (3.60)$$

$$\dot{\psi} = \omega'_z - \cot \theta (\omega'_x \sin \psi + \omega'_y \cos \psi) \quad (3.61)$$

この関係は後で使う。式 (3.56)–(3.58) を式 (3.52) に代入すると、

$$v'_x = \omega'_y z' - \omega'_z x' \quad (3.62)$$

$$v'_y = \omega'_z x' - \omega'_x y' \quad (3.63)$$

$$v'_z = \omega'_x y' - \omega'_y z' \quad (3.64)$$

なお、角速度の G 系での成分 (3.38)–(3.40) と、 G' 系での成分 (3.62)–(3.64) を比較すると、

$$\begin{pmatrix} \omega'_x \\ \omega'_y \\ \omega'_z \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

が成り立っていることが確認できる。つまり ω の成分はベクトルの成分と同じ変換則 (3.13) で変換することがわかる。角速度は擬ベクトルである。

式 (3.62)–式 (3.64) を書き直すと

$$\begin{pmatrix} v'_x \\ v'_y \\ v'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-\dot{\theta} \sin \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi) z' - (\dot{\varphi} \cos \theta + \dot{\psi}) y' \\ (\dot{\varphi} \cos \theta + \dot{\psi}) x' - (\dot{\theta} \cos \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi) z' \\ (\dot{\theta} \cos \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi) y' - (-\dot{\theta} \sin \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi) x' \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\theta} \\ \dot{\psi} \end{pmatrix} \quad (3.66)$$

ここで

$$Q = \begin{pmatrix} z' \sin \theta \cos \psi - y' \cos \theta & -z' \sin \psi & -y' \\ x' \cos \theta - z' \sin \theta \sin \psi & -z' \cos \psi & x' \\ y' \sin \theta \sin \psi - x' \sin \theta \cos \psi & x' \sin \psi + y' \cos \psi & 0 \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

である。このことは、オイラー角 (φ, θ, ψ) の微小な差 $(\delta\varphi, \delta\theta, \delta\psi)$ と回転系の座標 (x', y', z') の微小な差 $(\delta x', \delta y', \delta z')$ の関係が次であることを意味する。

$$\begin{pmatrix} \delta x' \\ \delta y' \\ \delta z' \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\theta \\ \delta\psi \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

数字の添え字を使い、 (x', y', z') と (φ, θ, ψ) をそれぞれ (x'_1, x'_2, x'_3) と (ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3) と書くことにすると、式 (3.68) は、

$$\delta x'_\alpha = \sum_{\beta=1}^3 Q_{\alpha\beta} \delta \phi_\beta \quad (3.69)$$

を意味する。つまり

$$\frac{\partial x'_\alpha}{\partial \phi_\beta} = Q_{\alpha\beta} \quad (3.70)$$

である。

3.4 簡潔な計算方法

計算が少々ややこしかったので、テンソル記法でここまでの要点をまとめる*。オイラー角 (φ, θ, ψ) の回転による任意のベクトル $\mathbf{a} = a_i \mathbf{e}_i = a'_i \mathbf{e}'_i$ の成分の変換則は

$$a'_i = R_{ij} a_j \quad (3.71)$$

$$a_i = R_{ji} a'_j \quad (3.72)$$

ここで行列 R は式 (3.5) に示すように複雑な形をしており、その時間微分 $\dot{R}$ はさらに複雑 [式 (3.28)–(3.36)] であるが、その積は以下のような簡潔な関係がある。

$$R_{ij} R_{kj} = R_{ji} R_{jk} = \delta_{ik} \quad (\text{直交行列条件}) \quad (3.73)$$

$$a'_k \dot{R}_{kj} R_{ij} = \epsilon_{ijk} \omega'_j a'_k \quad (\text{式 (3.53) と (3.55)}) \quad (3.74)$$

ここで ω'_j は式 (3.56)–(3.58) で定義された角速度である。

時間依存するベクトル $\mathbf{a}(t) = a_i(t) \mathbf{e}_i = a'_i(t) \mathbf{e}'_i(t)$ の時間微分 $\dot{\mathbf{a}}(t) = \dot{a}_i(t) \mathbf{e}_i = \dot{a}'_i(t) \mathbf{e}'_i(t)$ も当然ベクトルなので

$$b_i \mathbf{e}_i = \dot{\mathbf{a}} = \dot{a}'_i \mathbf{e}'_i + a'_i \dot{\mathbf{e}}'_i \quad (3.75)$$

$$= \dot{a}'_i \mathbf{e}'_i + a'_i \dot{R}_{ij} \mathbf{e}_j \quad (3.76)$$

$$= (\dot{a}'_j R_{ji} + a'_j \dot{R}_{ji}) \mathbf{e}_i \quad (3.77)$$

両辺を比較して

$$b_i = \dot{a}'_j R_{ji} + a'_j \dot{R}_{ji} \quad (3.78)$$

$$= \dot{a}'_j R_{ji} + a'_k \dot{R}_{k\ell} \delta_{\ell i} \quad (3.79)$$

$$= \dot{a}'_j R_{ji} + a'_k \dot{R}_{k\ell} R_{j\ell} R_{ji} \quad [\text{式 (3.73) より}] \quad (3.80)$$

$$= (\dot{a}'_j + a'_k \dot{R}_{k\ell} R_{j\ell}) R_{ji} \quad (3.81)$$

$$= (\dot{a}'_j + \epsilon_{j\ell m} \omega'_\ell a'_m) R_{ji} \quad [\text{式 (3.74) より}] \quad (3.82)$$

*この節だけ繰り返された添え字は和をとる規則を使う。

ベクトル $\mathbf{b}$ の変換則 (3.72) より

$$b'_j = \dot{a}'_j + \epsilon_{j\ell m} \omega'_\ell a'_m \quad (3.83)$$

つまり

$$\begin{pmatrix} \dot{a}_1 \\ \dot{a}_2 \\ \dot{a}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{a}'_1 \\ \dot{a}'_2 \\ \dot{a}'_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \omega'_1 \\ \omega'_2 \\ \omega'_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \end{pmatrix} \quad (3.84)$$

この式の $\mathbf{a} = \mathbf{x}$ という特別な場合が式 (3.62)–(3.64) である。

3.5 ラグランジュの運動方程式

3.5.1 運動エネルギー

N 個の質点で構成されている剛体の運動方程式を作るために、オイラー角 (φ, θ, ψ) を一般化座標としてラグランジアンを作る。(重心の運動は無視できる座標系をとっているものとする。) 質点 i の速度の G' 系の成分は

$$v'_{ix}(t) = \omega'_y(t)z'_i - \omega'_z(t)x'_i \quad (3.85)$$

$$v'_{iy}(t) = \omega'_z(t)x'_i - \omega'_x(t)y'_i \quad (3.86)$$

$$v'_{iz}(t) = \omega'_x(t)y'_i - \omega'_y(t)z'_i \quad (3.87)$$

である。エディントンのイプシロン記号を使うと、

$$v'_\alpha = \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \omega'_\beta x'_\gamma \quad (3.88)$$

ここで $(v'_x, v'_y, v'_z) = (v'_1, v'_2, v'_3)$ 等とした。運動エネルギーは

$$K = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \mathbf{v}_i^2 \quad (3.89)$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \frac{m_i}{2} v_{i\alpha}^2 \quad (3.90)$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \sum_{\beta'=1}^3 \sum_{\gamma'=1}^3 \frac{m_i}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta'\gamma'} \omega'_\beta x'_{i\gamma} \omega'_{\beta'} x'_{i\gamma'} \quad (3.91)$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \sum_{\beta'=1}^3 \sum_{\gamma'=1}^3 \frac{m_i}{2} (\delta_{\beta\beta'} \delta_{\gamma\gamma'} - \delta_{\beta\gamma'} \delta_{\gamma\beta'}) \omega'_\beta x'_{i\gamma} \omega'_{\beta'} x'_{i\gamma'} \quad (3.92)$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \frac{m_i}{2} (\omega'_\beta x'_{i\gamma} \omega'_{\beta'} x'_{i\gamma'} - \omega'_\beta x'_{i\gamma} \omega'_{\gamma} x'_{i\beta}) \quad (3.93)$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left[\sum_{\mu=1}^3 (x'_{i\mu})^2 \sum_{\beta=1}^3 (\omega'_\beta)^2 - \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \omega'_\beta \omega'_\gamma x'_{i\beta} x'_{i\gamma} \right] \quad (3.94)$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left[\sum_{\mu=1}^3 (x'_{i\mu})^2 \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \omega'_\beta \omega'_\gamma \delta_{\beta\gamma} - \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \omega'_\beta \omega'_\gamma x'_{i\beta} x'_{i\gamma} \right] \quad (3.95)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \omega'_\beta \omega'_\gamma \sum_{i=1}^N m_i \left[\sum_{\mu=1}^3 (x'_{i\mu})^2 \delta_{\beta\gamma} - x'_{i\beta} x'_{i\gamma} \right] \quad (3.96)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \omega'_\beta \omega'_\gamma I_{\beta\gamma} \quad (3.97)$$

ここで

$$I_{\beta\gamma} = \sum_{i=1}^N m_i \left[\sum_{\mu=1}^3 (x'_{i\mu})^2 \delta_{\beta\gamma} - x'_{i\beta} x'_{i\gamma} \right] \quad (3.98)$$

を定義した。行列で書くと

$$I = \sum_{i=1}^N m_i \begin{pmatrix} y_i'^2 + z_i'^2 & -x'_i y'_i & -x'_i z'_i \\ -y'_i x'_i & x_i'^2 + z_i'^2 & -y'_i z'_i \\ -z'_i x'_i & -z'_i y'_i & x_i'^2 + y_i'^2 \end{pmatrix} \quad (3.99)$$

この I は慣性テンソルと呼ばれる。この I は対称行列なので、非対角項がゼロになるように G' 系での基底 $\mathbf{e}'_x, \mathbf{e}'_y, \mathbf{e}'_z$ をとることができる。すると、

$$I = \begin{pmatrix} I_1 & 0 & 0 \\ 0 & I_2 & 0 \\ 0 & 0 & I_3 \end{pmatrix}, \quad I_{\beta\gamma} = I_\beta \delta_{\beta\gamma} \quad (3.100)$$

I_1, I_2, I_3 は慣性モーメントと呼ばれる。慣性モーメントは時間に依存しないことに注意。結局、運動エネルギーは

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^3 I_{\beta} (\omega'_{\beta})^2 \quad (3.101)$$

である。

3.5.2 ポテンシャル

以下では $(\varphi, \theta, \psi) = (\phi_1, \phi_2, \phi_3)$ とする。系のポテンシャル U は、剛体を構成する各質点のポテンシャルの和である。 U は質点の位置だけの関数とする。 i 番目の質点の位置を $(x'_i, y'_i, z'_i) = (x'_{i;1}, x'_{i;2}, x'_{i;3})$ と書く。すると、

$$\frac{\partial U}{\partial \phi_{\beta}} = \sum_{i=1}^N \sum_{\gamma=1}^3 \frac{\partial U}{\partial x_{i;\gamma}} \frac{\partial x_{i;\gamma}}{\partial \phi_{\beta}} \quad (3.102)$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{\gamma=1}^3 \frac{\partial U}{\partial x_{i;\gamma}} Q_{i;\gamma\beta} \quad (3.103)$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{\gamma=1}^3 Q_{i;\beta\gamma}^t \frac{\partial U}{\partial x_{i;\gamma}} \quad (3.104)$$

式 (3.103) では式 (3.70) を使った。式 (3.104) の行列 Q_i^t は Q_i の転置である：

$$Q_i^t = \begin{pmatrix} z'_i \sin \theta \cos \psi - y'_i \cos \theta & x'_i \cos \theta - z'_i \sin \theta \sin \psi & y'_i \sin \theta \sin \psi - x'_i \sin \theta \cos \psi \\ -z'_i \sin \psi & -z'_i \cos \psi & x'_i \sin \psi + y'_i \cos \psi \\ -y'_i & x'_i 0 & \end{pmatrix} \quad (3.105)$$

i 番目の質点にかかる力を

$$\begin{pmatrix} f'_{i;x} \\ f'_{i;y} \\ f'_{i;z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial U / \partial x'_i \\ -\partial U / \partial y'_i \\ -\partial U / \partial z'_i \end{pmatrix} \quad (3.106)$$

定義する。同様に

$$\begin{pmatrix} f_{\varphi} \\ f_{\theta} \\ f_{\psi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial U / \partial \varphi \\ -\partial U / \partial \theta \\ -\partial U / \partial \psi \end{pmatrix} \quad (3.107)$$

を定義すると、式 (3.103) より

$$f_{\phi_{\beta}} = \sum_{i=1}^N \sum_{\gamma=1}^3 Q_{i;\beta\gamma}^t f'_{i;\gamma} \quad (3.108)$$

3.5.3 ラグランジアン

運動エネルギーとポテンシャルからラグランジアンをつくる。

$$L(\varphi, \theta, \psi, \dot{\varphi}, \dot{\theta}, \dot{\psi}) = K - U \quad (3.109)$$

$$= \frac{1}{2} \{ I_1(\omega'_1)^2 + I_2(\omega'_2)^2 + I_3(\omega'_3)^2 \} - U(\varphi, \theta, \psi) \quad (3.110)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ I_1(\dot{\theta} \cos \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi)^2 + I_2(-\dot{\theta} \sin \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi)^2 + I_3(\dot{\varphi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 \right\} - U(\varphi, \theta, \psi) \quad (3.111)$$

$$= \frac{1}{2} \dot{\varphi}^2 (I_1 \sin^2 \theta \sin^2 \psi + I_2 \sin^2 \theta \cos^2 \psi + I_3 \cos^2 \theta) + \frac{1}{2} \dot{\theta}^2 (I_1 \cos^2 \psi + I_2 \sin^2 \psi) + \frac{1}{2} I_3 \dot{\psi}^2 + \dot{\varphi} \dot{\theta} \sin \theta \cos \psi \sin \psi (I_1 - I_2) + I_3 \dot{\psi} \dot{\varphi} \cos \theta - U(\varphi, \theta, \psi) \quad (3.112)$$

3.5.4 ラグランジュの運動方程式

ラグランジアンの各微分は以下の通り。

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = I_1 \omega'_1 \sin \theta \sin \psi + I_2 \omega'_2 \sin \theta \cos \psi + I_3 \omega'_3 \cos \theta \quad (3.113)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \varphi} = -\frac{\partial U}{\partial \varphi} = f_\varphi \quad (3.114)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = I_1 \omega'_1 \cos \psi - I_2 \omega'_2 \sin \psi \quad (3.115)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = I_1 \omega'_1 \dot{\varphi} \cos \theta \sin \psi + I_2 \omega'_2 \dot{\varphi} \cos \theta \cos \psi - I_3 \omega'_3 \dot{\varphi} \sin \theta + f_\theta \quad (3.116)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = I_3 \omega'_3 \quad (3.117)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \psi} = I_1 \omega'_1 (-\dot{\theta} \sin \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi) - I_2 \omega'_2 (\dot{\theta} \cos \psi + \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi) + f_\psi \quad (3.118)$$

ここで

$$\ell'_\alpha = I_\alpha \omega'_\alpha \quad (3.119)$$

を定義すると、ラグランジュの運動方程式は

$$\frac{d}{dt} (\ell'_1 \sin \theta \sin \psi + \ell'_2 \sin \theta \cos \psi + \ell'_3 \cos \theta) = f_\varphi \quad (3.120)$$

$$\frac{d}{dt} (\ell'_1 \cos \psi - \ell'_2 \sin \psi) = \ell'_1 \dot{\varphi} \cos \theta \sin \psi + \ell'_2 \dot{\varphi} \cos \theta \cos \psi - \ell'_3 \dot{\varphi} \sin \theta + f_\theta \quad (3.121)$$

$$\frac{d}{dt} \ell'_3 = \ell'_1 \omega'_2 - \ell'_2 \omega'_1 + f_\psi \quad (3.122)$$

3.6 オイラー方程式

式 (3.122) はいいのだが、式 (3.120) と式 (3.121) はこのままでは積分しにくいので、式 (3.122) も使って書き直すと、

$$\frac{d}{dt}\ell'_1 = \ell'_2\omega'_3 - \ell'_3\omega'_2 + f_\theta \cos \psi + (f_\varphi \csc \theta - f_\psi \cot \theta) \sin \psi \quad (3.123)$$

$$\frac{d}{dt}\ell'_2 = \ell'_3\omega'_1 - \ell'_1\omega'_3 - f_\theta \sin \psi + (f_\varphi \csc \theta - f_\psi \cot \theta) \cos \psi \quad (3.124)$$

ここで $(g'_1, g'_2, g'_3) = (g'_x, g'_y, g'_z)$ を次のように定義する。後で示すがこれはトルクである。

$$\begin{pmatrix} g'_1 \\ g'_2 \\ g'_3 \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} f_\varphi \\ f_\theta \\ f_\psi \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} \csc \theta \sin \psi & \cos \psi & -\cot \theta \sin \psi \\ \csc \theta \cos \psi & -\sin \psi & -\cot \theta \cos \psi \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.125)$$

すると

$$\frac{d}{dt}\ell'_1 = \ell'_2\omega'_3 - \ell'_3\omega'_2 + g'_1 \quad (3.126)$$

$$\frac{d}{dt}\ell'_2 = \ell'_3\omega'_1 - \ell'_1\omega'_3 + g'_2 \quad (3.127)$$

$$\frac{d}{dt}\ell'_3 = \ell'_1\omega'_2 - \ell'_2\omega'_1 + g'_3 \quad (3.128)$$

式 (3.122)–(3.124) はオイラー方程式と呼ばれる。オイラー方程式は

$$\begin{pmatrix} \dot{\ell}'_1 \\ \dot{\ell}'_2 \\ \dot{\ell}'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell'_1 \\ \ell'_2 \\ \ell'_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \omega'_1 \\ \omega'_2 \\ \omega'_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g'_1 \\ g'_2 \\ g'_3 \end{pmatrix} \quad (3.129)$$

とも書ける。角速度 $(\omega'_x, \omega'_y, \omega'_z)$ だけを使って書けば

$$\dot{\omega}'_x = \frac{(I_2 - I_3)}{I_1} \omega'_y \omega'_z + \frac{g'_x}{I_1} \quad (3.130)$$

$$\dot{\omega}'_y = \frac{(I_3 - I_1)}{I_2} \omega'_z \omega'_x + \frac{g'_y}{I_2} \quad (3.131)$$

$$\dot{\omega}'_z = \frac{(I_1 - I_2)}{I_3} \omega'_x \omega'_y + \frac{g'_z}{I_3} \quad (3.132)$$

角速度から剛体の向き（オイラー角）を求めるには、式 (3.59)–(3.61) を使ってオイラー角も同時に時間積分する必要がある。

(g'_1, g'_2, g'_3) を求めてみよう。式 (3.125) と (3.108) より

$$g'_\alpha = \sum_{\beta=1}^3 P_{\alpha\beta} f'_\beta \quad (3.133)$$

$$= \sum_{\beta=1}^3 P_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^N \sum_{\gamma=1}^3 Q_{i;\beta\gamma}^t f'_{i;\gamma} \quad (3.134)$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{\gamma=1}^3 (PQ_i^t)_{\alpha\gamma} f'_{i;\gamma} \quad (3.135)$$

ここで行列 PQ_i^t は P と Q_i の積を計算すれば、以下のように簡単になることが分かる。

$$PQ_i^t = \begin{pmatrix} 0 & -z'_i & y'_i \\ z'_i & 0 & -x'_i \\ -y'_i & x'_i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.136)$$

したがって

$$g'_\alpha = \sum_{i=1}^N \epsilon_{\alpha\beta\gamma} x'_{i;\beta} f'_{i;\gamma} \quad (3.137)$$

外積を使えば

$$\begin{pmatrix} g'_1 \\ g'_2 \\ g'_3 \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N \begin{pmatrix} x'_{i;1} \\ x'_{i;2} \\ x'_{i;3} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f'_{i;1} \\ f'_{i;2} \\ f'_{i;3} \end{pmatrix} \quad (3.138)$$

つまり (g'_1, g'_2, g'_3) は各質点にかかるトルクの和（全トルク）を回転系 G' で測った成分である。

3.7 剛体の角運動量とエネルギー

座標の原点を剛体の重心にとる。式 (3.45) を再掲する。

$$\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{x} \quad (3.139)$$

この式は、剛体がどれほど複雑な回転運動をしていても各瞬間に回転の軸 $\boldsymbol{\omega}$ が定義できて、剛体上に固定された点 $\mathbf{x}$ の速度 $\mathbf{v}$ がこのように書けることを意味する。

剛体の角運動量 $\boldsymbol{\ell}$ は

$$\boldsymbol{\ell} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{x}_i \times \mathbf{v}_i \quad (3.140)$$

$$= \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{x}_i \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{x}_i) \quad (3.141)$$

$$= \sum_{i=1}^N m_i \{ (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_i) \boldsymbol{\omega} - (\mathbf{x}_i \cdot \boldsymbol{\omega}) \mathbf{x}_i \} \quad (3.142)$$

まずは、剛体と共に回転しない静止系 G をとり、 x, y, z 成分を数字の添え字を使って $(x_i, y_i, z_i) = (x_{i;1}, y_{i;2}, z_{i;3})$ と書く

$$\ell_\alpha = \sum_{i=1}^N m_i \left\{ \sum_{\gamma=1}^3 x_{i;\gamma} x_{i;\gamma} \Omega_\alpha - x_\alpha \sum_{\beta=1}^3 x_\beta \Omega_\beta \right\} \quad (3.143)$$

$$= \sum_{i=1}^N m_i \left\{ \sum_{\gamma=1}^3 x_{i;\gamma} x_{i;\gamma} \sum_{\beta=1}^3 \delta_{\alpha\beta} \Omega_\beta - x_\alpha \sum_{\beta=1}^3 x_\beta \Omega_\beta \right\} \quad (3.144)$$

$$= \sum_{\gamma=1}^3 \sum_{i=1}^N m_i \left\{ \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma=1}^3 x_{i;\gamma} x_{i;\gamma} - x_\alpha x_\beta \right\} \omega_\beta \quad (3.145)$$

ここで $x_{i\alpha}$ は時間に依存するので不便である。そこで剛体にと共に回転する系 G' で位置を計り、 $(x'_i, y'_i, z'_i) = (x'_{i;1}, y'_{i;2}, z'_{i;3})$ と書くと、

$$\ell'_\alpha = \sum_{\gamma=1}^3 \sum_{i=1}^N m_i \left\{ \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma=1}^3 x'_{i;\gamma} x'_{i;\gamma} - x'_\alpha x'_\beta \right\} \omega'_\beta \quad (3.146)$$

$$= \sum_{\beta=1}^3 I_{\alpha\beta} \omega'_\beta \quad (3.147)$$

ここで $I_{\alpha\beta}$ は時間に依存しない。さらに座標軸（基底ベクトル）の方向をうまくとれば $I_{\alpha\beta}$ は対角項だけになる。すると

$$\ell'_\alpha(t) = I_\alpha \omega'_\alpha(t) \quad (3.148)$$

である。

回転系 G' で測った成分で書いた運動エネルギーは式 (3.101) である。再掲すると、

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^3 I_\beta (\omega'_\beta)^2 \quad (3.149)$$

である。

剛体に何も力が働かなければ剛体の角運動量 ℓ は保存する。何らかの力が働く場合、角運動量を変化をトルクと呼ぶ。トルクを $\mathbf{g}$ と書くと、つまり静止系（慣性系） G で

$$\dot{\ell} = \mathbf{g} \quad (3.150)$$

一般に、任意のベクトル $\mathbf{a}$ の時間変化 $\mathbf{b} = \dot{\mathbf{a}}$ も、もちろんベクトルである。 $\mathbf{b}$ の成分を回転系でを測ると、

$$\begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{a}'_1 \\ \dot{a}'_2 \\ \dot{a}'_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \omega'_1 \\ \omega'_2 \\ \omega'_3 \end{pmatrix} \quad (3.151)$$

かける。式 (3.5) の $R(t)$ を使えば証明できる。

したがって、回転系で測ったトルクの成分を (g'_1, g'_2, g'_3) とすれば、式 (3.150) より、

$$\begin{pmatrix} \dot{\ell}'_1 \\ \dot{\ell}'_2 \\ \dot{\ell}'_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \ell'_1 \\ \ell'_2 \\ \ell'_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \omega'_1 \\ \omega'_2 \\ \omega'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g'_1 \\ g'_2 \\ g'_3 \end{pmatrix} \quad (3.152)$$

こうしてオイラー方程式は角運動量保存則 (3.150) から導出できる。

Chapter 4

対称性と保存則

4.1 点変換

座標 $q_i (i = 1, 2, \dots, N)$ で記述された自由度 N の系を考える。この系を別の座標 $Q_i (i = 1, 2, \dots, N)$ で記述するために座標変換

$$\begin{aligned} Q_1 &= Q_1(q_1, q_2, \dots, q_N) \\ Q_2 &= Q_2(q_1, q_2, \dots, q_N) \\ &\vdots \\ Q_N &= Q_N(q_1, q_2, \dots, q_N) \end{aligned}$$

しよう。二つの座標系の全ての点は一対一に対応しているものとする*。つまり逆の変換

$$\begin{aligned} q_1 &= q_1(Q_1, Q_2, \dots, Q_N) \\ q_2 &= q_2(Q_1, Q_2, \dots, Q_N) \\ &\vdots \\ q_N &= q_N(Q_1, Q_2, \dots, Q_N) \end{aligned}$$

が存在する。このような変換を「点変換」という。

ラグランジュの運動方程式は点変換に対して形を変えない。それを今から確認しよう。目標は

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_k} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} \right\} \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \quad (4.1)$$

という式である。この式は座標 $q_i (i = 1, 2, \dots, N)$ でラグランジュの運動方程式が成り立てば、座標 $Q_i (i = 1, 2, \dots, N)$ でも成り立つということを意味している。

* Q_i での微分もできるとする。

まず、

$$\dot{q}_i = \sum_{j=1}^N \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \dot{Q}_j \quad (4.2)$$

だから

$$\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_j} = \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} \quad (4.3)$$

が成り立つことに注意する。この関係はこのあと何度か使う。

(4.3) を時間微分して

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_k} \right) = \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2 q_i}{\partial Q_j \partial Q_k} \dot{Q}_j \quad (4.4)$$

式 (4.2) より

$$\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2 q_i}{\partial Q_k \partial Q_j} \dot{Q}_j \quad (4.5)$$

この式と (4.4) を比較して、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_k} \right) = \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} \quad (4.6)$$

次に

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{Q}_k} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \quad (4.7)$$

これを時間微分して

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} \right) = \sum_{i=1}^N \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \right) \quad (4.8)$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} \quad (4.9)$$

また、

$$\frac{\partial L}{\partial Q_k} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} \quad (4.10)$$

式 (4.8) と (4.10) より、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_k} &= \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} \right\} - \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial Q_k} \right\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} \right\} \frac{\partial q_i}{\partial Q_k} \end{aligned}$$

従って、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, N) \quad (4.11)$$

が成り立っているならば、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_k} = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, N) \quad (4.12)$$

も成り立つ。

一般化座標をどのようにとってもラグランジュの運動方程式の形が変わらないので、問題に応じて解きやすい一般化座標を自由にとればよい。

なお、上で考えた点変換は時間に依存しない場合であった。時間に陽に依存する点変換

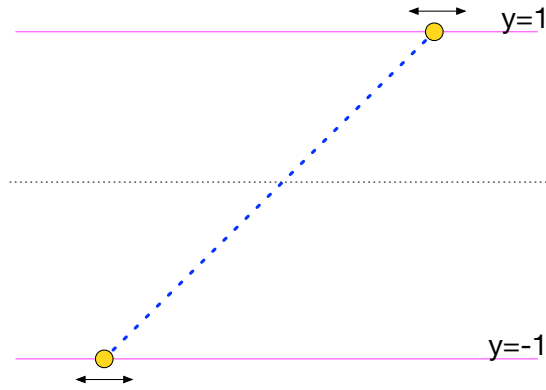
$$Q_1 = Q_1(q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t), t) \quad (4.13)$$

$$Q_2 = Q_2(q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t), t) \quad (4.14)$$

$\vdots$

$$Q_N = Q_N(q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t), t) \quad (4.15)$$

に対してもラグランジュの運動方程式は形を変えない。例えば回転する座標系をとってもよい。一定角速度で回転する回転系にあらわれる見かけの力（コリオリ力と遠心力）はこの時間に依存する点変換によって自然に導くことができる。



例 x - y 平面上の直線 1: $y = 1$ と直線 2: $y = -1$ の上を、同じ質量 m をもつ質点 1 と質点 2 が滑らかに滑る。質点 1 と質点 2 の間はバネ定数 k 、自然長 ℓ_0 の線形バネで結ばれている。

一般化座標 A 一般化座標を質点 1 の x 座標を x_1 と質点 2 の x 座標 x_2 とすると、ラグランジアンは

$$L(x_1, x_2, \dot{x}_1, \dot{x}_2) = \frac{m}{2} (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) - \frac{k}{2} \{(x_1 - x_2)^2 + 4\} \quad (4.16)$$

ラグランジュの運動方程式は、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial x_1} \right) = 0 \quad (4.17)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial x_2} \right) = 0 \quad (4.18)$$

である。具体的には

$$m\ddot{x}_1 + k(x_1 - x_2) = 0 \quad (4.19)$$

$$m\ddot{x}_2 + k(x_2 - x_1) = 0 \quad (4.20)$$

である。

一般化座標 B 上の一般化座標 (x_1, x_2) を次のように点変換して別の一般化座標 (r, s) をとる。

$$r = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad (4.21)$$

$$s = \frac{x_1 - x_2}{2} \quad (4.22)$$

(r は二つの質点の x 座標の重心である。) すると、

$$x_1 = r + s \quad (4.23)$$

$$x_2 = r - s \quad (4.24)$$

つまり

$$\dot{x}_1 = \dot{r} + \dot{s} \quad (4.25)$$

$$\dot{x}_2 = \dot{r} - \dot{s} \quad (4.26)$$

である。したがって、ラグランジアンは

$$L(r, s, \dot{r}, \dot{s}) = m(\dot{r}^2 + \dot{s}^2) - 2k(1 + s^2) \quad (4.27)$$

変換 (4.21) と (4.22) は点変換なので、ラグランジュの運動方程式は、式 (4.17), (4.18) と同じ形である。

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial r} \right) = 0 \quad (4.28)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{s}} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial s} \right) = 0 \quad (4.29)$$

である。具体的には、

$$\ddot{r} = 0 \quad (4.30)$$

$$m\ddot{s} + 2ks = 0 \quad (4.31)$$

式 (4.30) はすぐに解くことができ、

$$r(t) = c_0 + c_1 t \quad (4.32)$$

である (c_0, c_1 は積分定数)。これは系の重心が等速直線運動をすることを意味する。

式 (4.30) が簡単に積分できた理由を振り返ってみると、式 (4.28) の左辺第二項がゼロ、つまり

$$\frac{\partial L}{\partial r} = 0 \quad (4.33)$$

となっていたためである。

4.2 保存則

4.2.1 循環座標

N 自由度系のラグランジアン $L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N)$ から計算される

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (4.34)$$

を一般化座標 q_i に共役 (きょうやく) な運動量、または一般化運動量という[†]。

ラグランジアン $L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N)$ が q_k に依存しないとき、 q_k を循環座標という。ラグランジアン (4.27) で r は循環座標である。

循環座標 q_k に共役な運動量

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \quad (4.35)$$

は時間変化しない。つまり保存する。なぜなら、ラグランジュの運動方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad (4.36)$$

と

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad (4.37)$$

より、

$$\frac{dp_k}{dt} = 0 \quad (4.38)$$

だからである。

[†]一般化運動量はこの講義の後半で話すハミルトン力学では基本変数になる。

例：角運動量の保存 ポテンシャル U が原点からの距離だけに依存するとき、このポテンシャルから導かれる力は中心力と呼ばれる。中心力のもとで運動する一つの質点を考えよう。2次元極座標 $\{r, \phi\}$ で考える。速度の半径 (r) 方向成分は $v_r = \dot{r}$ 、方位角 (ϕ) 方向成分は $v_\phi = r\dot{\phi}$ である。従って

$$v^2 = v_r^2 + v_\phi^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2 \quad (4.39)$$

である。ラグランジアンは

$$L(r, \phi, \dot{r}, \dot{\phi}) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - U(r) \quad (4.40)$$

である。 ϕ は循環座標なので、 ϕ に共役な一般化運動量

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi} \quad (4.41)$$

は保存する。これは角運動量である。

4.2.2 エネルギー

これまでずっとラグランジアン $L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N)$ が時間に陽には依存しない場合を考えてきた[‡]。このような場合、 p_j を q_j に共役な運動量として、

$$h = \sum_{j=1}^N p_j \dot{q}_j - L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N) \quad (4.42)$$

という量は時間変化しない（保存する）。なぜなら

$$\begin{aligned} \frac{dh}{dt} &= \frac{d}{dt} \left\{ \sum_{j=1}^N p_j \dot{q}_j - L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N) \right\} \\ &= \sum_{j=1}^N \dot{p}_j \dot{q}_j + \sum_{j=1}^N p_j \ddot{q}_j - \left(\sum_{j=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_j} \dot{q}_j + \sum_{j=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j \right) \quad [\text{第 2 項と第 4 項がキャンセル}] \\ &= \sum_{j=1}^N \dot{p}_j \dot{q}_j - \sum_{j=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j \\ &= \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} \right\} \dot{q}_j \\ &= 0 \quad [\text{ラグランジュの運動方程式より}] \end{aligned}$$

特に

$$L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N) = K - U \quad (4.43)$$

[‡] ラグランジアンが時間に陽に依存する場合というのは例えば $L(q, \dot{q}, t) = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + \frac{1}{2}q^2 + \cos t$ のような場合。このような場合でもラグランジュの運動方程式は同じである。

という形に書けて、 U が $\dot{q}_i$ には依存せず、

$$K = \sum_{j=1}^N \frac{m}{2} \dot{q}_j \dot{q}_j \quad (4.44)$$

と書ける場合には h の意味が分かりやすくなる。この場合

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial K}{\partial \dot{q}_i} = m \dot{q}_i \quad (4.45)$$

となる。(カーテシアン座標ならこれはよく知られた運動量の定義そのものである。) このとき h は

$$h = \sum_{j=1}^N m \dot{q}_j \dot{q}_j - (K - U) = \sum_{j=1}^N m \dot{q}_j \dot{q}_j - \sum_{j=1}^N \frac{m}{2} \dot{q}_j \dot{q}_j + U = K + U \quad (4.46)$$

つまり運動エネルギーとポテンシャルの和、全エネルギーを表す。上で確認した $dh/dt = 0$ という式はエネルギー保存則を意味する。

4.2.3 運動量と角運動量

ラグランジアン L が時間に陽に依存しないとき、エネルギー保存則が成り立つのを見た。ラグランジアン L が時間に陽に依存しないということは、時間 t の原点をずらし、別の時間座標 t'

$$t \Rightarrow t' = t + t_0 \quad (t_0 \text{ は定数}) \quad (4.47)$$

とずらしても L が変わらないということである。同じようなことが空間をずらす操作についても言える。

x 方向に空間をずらしてもラグランジアン L が変わらないというのは、3次元空間に置かれたその系がカーテシアン座標 x の原点のとりかた(絶対値)に依存しないということである。例えば第4.1章(p.61)で見た問題は、 x 方向にどこか特別な位置はない。(y 方向にはある。)したがって x の原点をどこにとってもラグランジアンは不変であるはずで、実際、式(4.16)は x_1 と x_2 の差、つまり相対置にのみ依存しているのでラグランジアンは不変である。

もっと極端な場合は、外の世界と何も相互作用していないような系である。このような系は、その系を構成する内部要素同士の相対的な位置だけで系がどう変化するか決まるはずである。したがって、そのような系のラグランジアンは、どの位置に座標の原点を設定してもかわらない。

2 質点系の場合 3次元空間中に孤立した二つの質点からなる系を考え、この系をカーテシアン座標をとる。(2質点間の相互作用はなんでもよい。)二つの質点の座標を

$$\mathbf{x} = (x, y, z) \quad (4.48)$$

$$\mathbf{X} = (X, Y, Z) \quad (4.49)$$

として、一般化座標を $(\mathbf{x}, \mathbf{X}) = (x, y, z, X, Y, Z)$, ラグランジアンを

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{x}}, \dot{\mathbf{X}}) \quad (4.50)$$

とする。

この座標系の原点を微小ベクトル $\delta \mathbf{r}$ だけ平行移動した別のカーテシアン座標系 $(\mathbf{x}', \mathbf{X}') = (x', y', z', X', Y', Z')$ をとる。すると

$$\mathbf{x} \Rightarrow \mathbf{x}' = (x + \delta r_x, y + \delta r_y, z + \delta r_z) \quad (4.51)$$

$$\mathbf{X} \Rightarrow \mathbf{X}' = (X + \delta r_x, Y + \delta r_y, Z + \delta r_z) \quad (4.52)$$

$$\dot{\mathbf{x}} \Rightarrow \dot{\mathbf{x}}' = \dot{\mathbf{x}} \quad (4.53)$$

$$\dot{\mathbf{X}} \Rightarrow \dot{\mathbf{X}}' = \dot{\mathbf{X}} \quad (4.54)$$

この座標変換によるラグランジアンの変化は

$$\delta L = L(\mathbf{x}', \dot{\mathbf{x}}', \mathbf{X}', \dot{\mathbf{X}}') - L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \quad (4.55)$$

$$= \frac{\partial L}{\partial x} \delta r_x + \frac{\partial L}{\partial y} \delta r_y + \frac{\partial L}{\partial z} \delta r_z + \frac{\partial L}{\partial X} \delta r_x + \frac{\partial L}{\partial Y} \delta r_y + \frac{\partial L}{\partial Z} \delta r_z \quad (4.56)$$

である。 $\mathbf{x}$ と $\mathbf{X}$ に共役な運動量を $\mathbf{p}$ と $\mathbf{P}$ と書けば、この式は、

$$\delta L = \dot{p}_x \delta r_x + \dot{p}_y \delta r_y + \dot{p}_z \delta r_z + \dot{P}_x \delta r_x + \dot{P}_y \delta r_y + \dot{P}_z \delta r_z \quad (4.57)$$

$$= \frac{d}{dt} (p_x + P_x) \delta r_x + \frac{d}{dt} (p_y + P_y) \delta r_y + \frac{d}{dt} (p_z + P_z) \delta r_z \quad (4.58)$$

$$= \frac{d}{dt} (\mathbf{p} + \mathbf{P}) \cdot \delta \mathbf{r} \quad (4.59)$$

任意の微小ベクトル $\delta \mathbf{r}$ に対して $\delta L = 0$ なので

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{p} + \mathbf{P}) = 0 \quad (4.60)$$

である。これは運動量保存則である。上では二つの質点の系について運動量保存則を示したが、これが二個ではなく任意個数の質点系に対しても成り立つことは上の導出を見れば明らかであろう。

一般化座標の場合 N 自由度系を考える。一般化座標 $(q_1, q_2, \dots, q_N)$ でラグランジアンが

$$L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N) \quad (4.61)$$

とする。それぞれの一般化座標はカーテシアン座標系 $K : (X_1, X_2, X_3)$ で

$$q_i = q_i(X_1, X_2, X_3) \quad (4.62)$$

と書かれる。このカーテシアン座標系 K の原点を微小量 $\delta \mathbf{r}$ だけ平行移動した新しいカーテシアン座標系 $K' : (X'_1, X'_2, X'_3)$ をとる。つまり

$$X_\alpha \Rightarrow X'_\alpha + \delta r_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (4.63)$$

K' 系では一般化座標は

$$q_i \Rightarrow q'_i = q_i(X'_1, X'_2, X'_3) = q_i(X_1, X_2, X_3) + \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial q_i(X_1, X_2, X_3)}{\partial X_\alpha} \delta r_\alpha \quad (4.64)$$

となるので、この平行移動変換による一般化座標の各成分の変化量は

$$\delta q_i = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial q_i}{\partial X_\alpha} \delta r_\alpha \quad (4.65)$$

である。また、

$$\delta \dot{q}_i = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial X_\alpha} \delta r_\alpha = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_i}{\partial X_\alpha} \right) \delta r_\alpha \quad (4.66)$$

である。ラグランジアンの変化量は

$$\delta L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N) = \sum_{j=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_j} \delta q_j + \sum_{j=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta \dot{q}_j \quad (4.67)$$

なので、式 (4.65) と (4.66) より

$$\delta L = \sum_{j=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_j} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \delta r_\alpha + \sum_{j=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \right) \delta r_\alpha \quad (4.68)$$

$$= \sum_{j=1}^N \dot{p}_j \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \delta r_\alpha + \sum_{j=1}^N p_j \sum_{\alpha=1}^3 \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \right) \delta r_\alpha \quad (4.69)$$

$$= \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{j=1}^N \frac{d}{dt} \left(p_j \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \right) \delta r_\alpha \quad (4.70)$$

ここで一般化運動量の定義式 $p_j = \partial L / \partial \dot{q}_j$ とラグランジュの運動方程式を使った。任意の平行移動 δr_α に対して L が不変、つまり $\delta L = 0$ ならば

$$\sum_{j=1}^N \frac{d}{dt} \left(p_j \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \right) = 0 \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (4.71)$$

である。これは

$$Y_\alpha = \sum_{j=1}^N Y_\alpha^j = \sum_{j=1}^N p_j \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (4.72)$$

が保存することを意味する。これは運動量保存則である。

角運動量の保存則 考えている系に「特別な位置」がなければ、系のラグランジアンが平行移動変換に対して不変であり、そのとき運動量が保存することがわかった。同じように、考えている系に「特別な方向」がなければ、その系を観察する人が座標の方向をどう設定しても系のラグランジアンは不変であろう。この場合にも対応する保存量がある。座標系 K を単位ベクトル ω の方向を軸として微小角度 ϵ だけ回転させた新しい座標系 $K''(X''_1, X''_2, X''_3)$ をとると、3次元カーテシアン座標は、

$$X_\alpha \Rightarrow X''_\alpha = X_\alpha + \epsilon \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \omega_\beta X_\gamma \quad (4.73)$$

と変換されるので[§]、一般化座標は

$$q_i \Rightarrow q''_i = q_i + \delta q_i \quad (4.74)$$

$$\delta q_i = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial q_i}{\partial X_\alpha} \delta X_\alpha(q_i) \quad (4.75)$$

$$= \epsilon \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \frac{\partial q_i}{\partial X_\alpha} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \omega_\beta X_\gamma(q_i) \quad (4.76)$$

$$= \epsilon \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \omega_\beta \epsilon_{\beta\gamma\alpha} X_\gamma(q_i) \frac{\partial q_i}{\partial X_\alpha} \quad (4.77)$$

と変換される。運動量と同じように計算すれば、

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{\gamma=1}^3 \sum_{\alpha=1}^3 \epsilon_{\beta\gamma\alpha} \sum_{j=1}^N X_\gamma(q_j) p_j \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \right) = 0 \quad (\beta = 1, 2, 3) \quad (4.78)$$

を得る。 Y^j の定義式 (4.72) を使えば、

$$\sum_{j=1}^N \mathbf{X}(q_j) \times \mathbf{Y}^j = 0 \quad (4.79)$$

が保存する。これは角運動量の保存則である。

4.3 ラグランジアンの変動性

これまで、「ラグランジアン L は、系の運動エネルギー K からポテンシャル U を引いたものである」と説明してきた。実はこの説明は正確ではなく、ある系を記述する—つまりラグランジュの運動方程式を使うとその系の正しい運動方程式を導く—ラグランジアンは無数にある。 $L = K - U$ というラグランジアンはそのうちの一つに過ぎない。

[§] $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ はエディントンのイプシロン。

まずは簡単のために自由度 1 の場合を考える。一般化座標 q のラグランジアン $L(q, \dot{q})$ が与えられているとき、 q の任意関数 $W(q)$ の時間微分を加えた別のラグランジアン

$$L'(q, \dot{q}) = L(q, \dot{q}) + \frac{dW(q)}{dt} \quad (4.80)$$

を考える。

$$\frac{dW(q)}{dt} = \frac{dW(q)}{dq} \dot{q} \quad (4.81)$$

であることに注意すると、この二つのラグランジアンの変位 $dW(q)/dq$ に起因するラグランジュの運動方程式の変位は

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial}{\partial \dot{q}} \left(\frac{dW}{dt} \right) \right\} - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{dW}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{dW(q)}{dq} \right) - \frac{d^2 W(q)}{dq^2} \dot{q} \quad (4.82)$$

$$= \frac{d^2 W(q)}{dq^2} \dot{q} - \frac{d^2 W(q)}{dq^2} \dot{q} \quad (4.83)$$

$$= 0 \quad (4.84)$$

である。つまりラグランジアンは q の任意関数 $W(q)$ の時間微分 $dW(q)/dt$ 分だけ不定である。

たとえば、1 自由度系のラグランジアン $L(q, \dot{q})$ に、(適当に作った) $W(q) = \sin(q^3)$ から作られる

$$\frac{dW}{dt} = \frac{d \sin(q^3)}{dt} = 3q^2 \dot{q} \cos(q^3) \quad (4.85)$$

という妙な項を足しても運動方程式は変わらない。

多自由度系の場合にも同様である。一般化座標 $(q_1, q_2, \dots, q_N)$ の任意の関数 $W(q_1, q_2, \dots, q_N)$ を時間で微分した

$$\frac{dW(q_1, q_2, \dots, q_N)}{dt} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial W}{\partial q_j} \frac{dq_j}{dt} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial W}{\partial q_j} \dot{q}_j \quad (4.86)$$

をラグランジアン L に足しても運動方程式は変わらないことを確認しよう。

$$L^*(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N) = L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N) + \frac{dW(q_1, \dots, q_N)}{dt} \quad (4.87)$$

に対して、ラグランジュの運動方程式を導出してみると、

$$\frac{\partial L^*}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} + \frac{\partial W}{\partial q_k} \quad (4.88)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \dot{q}_k} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial W(q_1, \dots, q_N)}{\partial q_k} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) + \frac{\partial^2 W}{\partial q_k \partial q_j} \dot{q}_j \quad (4.89)$$

一方、式 (4.87) より、

$$\frac{\partial L^*}{\partial q_k} = \frac{\partial L}{\partial q_k} + \frac{\partial^2 W}{\partial q_k \partial q_j} \dot{q}_j \quad (4.90)$$

従って L^* から導かれる運動方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L^*}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L^*}{\partial q_k} = 0 \quad (4.91)$$

は、

$$\left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) + \frac{\partial^2 W}{\partial q_k \partial q_j} \dot{q}_j \right\} - \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_k} + \frac{\partial^2 W}{\partial q_k \partial q_j} \dot{q}_j \right\} = 0 \quad (4.92)$$

つまり、

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad (4.93)$$

となる。これは L から導かれるラグランジュの運動方程式そのものである。

ある系を記述するラグランジアンは一つではない。一般化座標 $\{q_1, q_2, \dots, q_N\}$ の系に対応するラグランジアン L が既知の時、任意の関数 $W(q_1, q_2, \dots, q_N)$ から

$$L' = L + \frac{dW}{dt} \quad (4.94)$$

として「別の」ラグランジアン L' を構成すると、この新しい L' も L から導かれるものと全く同じ運動方程式を導く。つまりある系のラグランジアンは無数にある[¶]。

4.4 荷電粒子の運動

電磁気学で習ったように、電荷 $+e$ をもつ点電荷が静電場 $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ の中にあるとき、そのポテンシャルエネルギー U は、静電ポテンシャルを ψ とすると

$$U(\mathbf{x}) = e\psi(\mathbf{x}) \quad (4.95)$$

である。静電場 $\mathbf{E}$ と静電ポテンシャル U には

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla\psi(\mathbf{x}) \quad (4.96)$$

という関係がある。点電荷の質量を m とするとこの系のラグランジアンは

$$L(x_1, x_2, x_3, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3) = \sum_{j=1}^3 \frac{m}{2} \dot{x}_j \dot{x}_j - e\psi(\mathbf{x}) \quad (4.97)$$

である。ここではこれを短く

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - e\psi(\mathbf{x}) \quad (4.98)$$

[¶]ラグランジアンは上の $dW(q)/dt$ というタイプに限らない。一自由度の質点系でポテンシャルが存在しない系（自由粒子）のラグランジアンは $L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \dot{q}^2$ であるが、 $L'(q, \dot{q}) = e\sqrt{m\dot{q}}$ というラグランジアンも L と同じ運動方程式を導く。

と書くことにする。

次に磁場 $\mathbf{B}$ も考えよう。電場 $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ と磁場 $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$ があるとき、電荷 $+e$ 、質量 m の質点（点電荷）の運動を記述するラグランジアンは

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{x}} + e\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \cdot \dot{\mathbf{x}} - e\psi(\mathbf{x}, t) \quad (4.99)$$

で与えられる。ここで $\mathbf{A}$ と ψ は電磁場のベクトルポテンシャルとスカラーポテンシャルである。

電磁場のベクトルポテンシャルとスカラーポテンシャル

$$A_\alpha = A_\alpha(x_1, x_2, x_3, t) \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (4.100)$$

$$\psi = \psi(x_1, x_2, x_3, t) \quad (4.101)$$

と電場・磁場は、

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \psi \quad (4.102)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.103)$$

という関係で結ばれている。

式 (4.102) と (4.103) から、

$$\mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (4.104)$$

$$\psi \Rightarrow \psi' = \psi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (4.105)$$

という変換で新しいベクトルポテンシャル $\mathbf{A}'$ とスカラーポテンシャル ψ' を作っても、そこから得られる電場と磁場は元と変わらないことが分かる。（ここで $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ は任意のスカラー場である。）なぜなら

$$\mathbf{E}' = -\frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} - \nabla \psi' = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \psi = \mathbf{E} \quad (4.106)$$

$$\mathbf{B}' = \nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times \mathbf{A} + \nabla \times \nabla \Lambda = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} \quad (4.107)$$

だからである。この変換 (4.106) と (4.107) をゲージ変換という。

ラグランジアン (4.99) がゲージ変換によってどう変わるか見てみよう。

$$L \Rightarrow L' = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{x}} + e\mathbf{A}' \cdot \dot{\mathbf{x}} - e\psi' \quad (4.108)$$

$$= \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{x}} + e(\mathbf{A} + \nabla \Lambda) \cdot \dot{\mathbf{x}} - e\left(\psi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}\right) \quad (4.109)$$

$$= \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{x}} + e\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{x}} - e\psi + e\left(\nabla \Lambda \cdot \dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial \Lambda}{\partial t}\right) \quad (4.110)$$

ここで、

$$\nabla \Lambda \cdot \dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial \Lambda}{\partial t} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \dot{x}_j + \frac{\partial \Lambda}{\partial t} = \frac{d\Lambda(\mathbf{x}, t)}{dt} \quad (4.111)$$

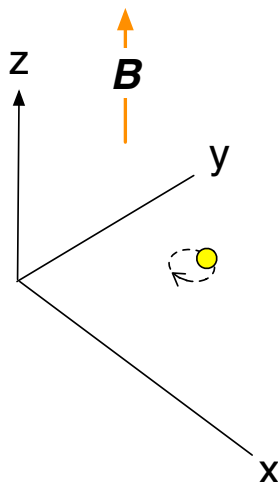
であることに注意すると、

$$L' = L + \frac{d(e\Lambda)}{dt} \quad (4.112)$$

であることが分かる。これは運動方程式に影響を与えないラグランジアンの変換 (4.94) の $W = e\Lambda$ の場合に相当する。つまりゲージ変換でラグランジアンは変わるが、そこから導かれる運動方程式は変わらない。

4.5 応用

4.5.1 一様磁場中の荷電粒子



一様磁場中の荷電粒子の運動を考えてみよう。カーテシアン座標をとり、ベクトルポテンシャルを

$$\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z) = (0, x, 0) \quad (4.113)$$

とする。このとき、磁場は

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, 1) \quad (4.114)$$

である。つまり z 軸方向の一様磁場を意味する。この磁場の下で運動する荷電粒子（質量 m 、電荷 e とする）を考えよう。（サイクロトン運動をすることは既知であろう。）ラグランジアンは、式 (4.99) より

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + ex\dot{y} \quad (4.115)$$

である。ラグランジアン (4.115) からわかる保存量（循環座標に共役な運動量）を二つ書け。

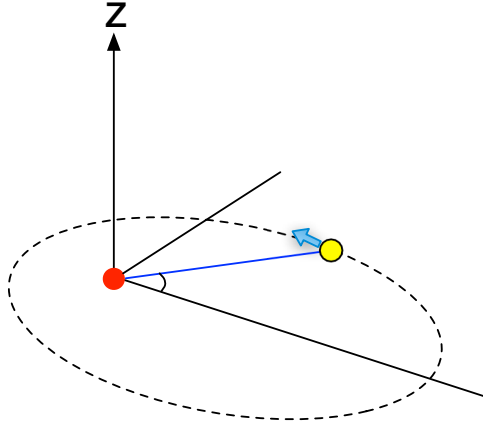
解答 y と z が循環座標である。それぞれに共役な一般化運動量

$$p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} + ex = m\dot{y} + eA_y \quad (4.116)$$

$$p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} \quad (4.117)$$

が保存する。式 (4.117) は質点が z 方向に一定速度で移動することを意味する。式 (4.116) の一般化運動量は、磁場が存在しないとき ($A_y = 0$ のとき) ニュートン力学の意味でいう y 方向への運動量に一致する。

4.5.2 逆 2 乗引力と磁場



原点に固定された電荷 $-Q$ が作る電場のスカラーポテンシャルは

$$\psi(r) = -\frac{Q}{r} \quad (4.118)$$

である。電荷 e をもつ質点が半径 r の位置にいと、その質点がもつポテンシャルエネルギー U は、

$$U(r) = e\psi = -eQ/r \quad (e \text{ は定数}) \quad (4.119)$$

である。質点に作用する力が電場のスカラーポテンシャル以外になれば、質点は (太陽の重力の下で運動する惑星と同様に) 楕円軌道を描いて運動する。この系にさらに磁場をかけてみよう。

円筒座標 $\{r, \phi, z\}$ をとり、以下のようなベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ を考える。

$$\mathbf{A} = (A_r, A_\phi, A_z) = (0, rB_0/2, 0) \quad (B_0 \text{ は定数}) \quad (4.120)$$

ベクトル解析の公式集をみれば分かる通り、一般に円筒座標では

$$(\nabla \times \mathbf{A})_r = \frac{1}{r} \frac{\partial A_z}{\partial \phi} - \frac{\partial A_\phi}{\partial z} \quad (4.121)$$

$$(\nabla \times \mathbf{A})_\phi = \frac{\partial A_r}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial r} \quad (4.122)$$

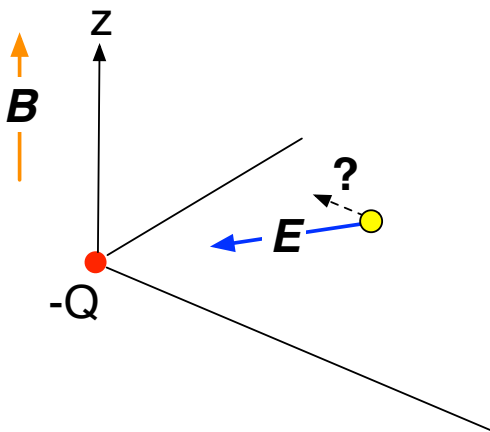
$$(\nabla \times \mathbf{A})_z = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) - \frac{1}{r} \frac{\partial A_r}{\partial \phi} \quad (4.123)$$

である。従って今の場合、磁場 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ は z 成分だけが非ゼロで、

$$\mathbf{B} = (B_r, B_\phi, B_z) = (0, 0, B_0) \quad (4.124)$$

である。つまり上のベクトルポテンシャル (4.120) は、 z 軸方向の一様な磁場のベクトルポテンシャルである。(式 (4.113) のベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ は (ベクトルの場として) 異なるが、同じ磁場を導く。)

いま x - y 平面内の運動だけに限定し、 z 座標は考えないことにしよう。磁場の強さ B_0 がゼロの場合を考えると、荷電粒子は楕円軌道を描くはずである。一方、 B_0 が強い極限では、原点の電荷 $-Q$ からの引力は無視できて、サイクロトロン運動をするはずである。



ラグランジアンを作ってみよう。荷電粒子の速度は円筒座標で書けば

$$\dot{\mathbf{x}} = (v_r, v_\phi, v_z) = (\dot{r}, r\dot{\phi}, v_z) \quad (4.125)$$

である。ベクトルポテンシャルは式 (4.120) なので、この系のラグランジアンは

$$L(r, \phi) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + \frac{eB_0}{2} r^2 \dot{\phi} + \frac{eQ}{r} \quad (4.126)$$

である。

練習問題 前節で述べた重力下の荷電粒子の問題について以下を解け。

(a)

$$mr^2\dot{\phi} + \frac{eB_0}{2}r^2$$

が保存することを示せ。磁場がない ($B_0 = 0$) のときこれはニュートン力学での角運動量 $mr^2\dot{\phi}$ に一致する。

(b) 運動方程式が以下であることを示せ。

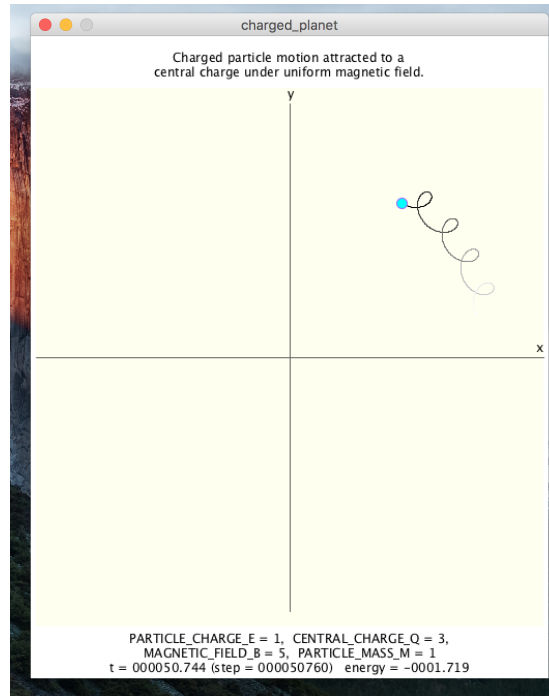
$$\dot{r} = v_r \quad (4.127)$$

$$\dot{v}_r = rv_\phi^2 + \frac{eB_0}{m}rv_\phi - \frac{eQ}{m}\frac{1}{r^2} \quad (4.128)$$

$$\dot{\phi} = v_\phi \quad (4.129)$$

$$\dot{v}_\phi = -2\frac{v_r}{r}v_\phi - \frac{eB_0}{m}\frac{v_r}{r} \quad (4.130)$$

この運動方程式を4次のルンゲ=クッタ法で解く Processing コード (`charged_planet.pde`) を講義の web page に置いた。



解答例

(a) ϕ が循環座標になっているので、 ϕ に共役な一般化運動量

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \dot{\phi} + \frac{eB_0}{2} r^2 = mr^2 \dot{\phi} + e r A_\phi \quad (4.131)$$

は保存する。

(b) まず r 成分の運動方程式を導く。

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} &= m\dot{r} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) &= m\ddot{r} \\ \frac{\partial L}{\partial r} &= m r \dot{\phi}^2 + e B_0 r \dot{\phi} - \frac{Qe}{r^2} \end{aligned}$$

従って運動方程式は

$$\{m\ddot{r}\} - \left\{ m r \dot{\phi}^2 + e B_0 r \dot{\phi} - \frac{Qe}{r^2} \right\} = 0$$

つまり

$$\ddot{r} - r \dot{\phi}^2 - \frac{eB_0}{m} r \dot{\phi} + \frac{eQ}{m} \frac{1}{r^2} = 0$$

である。

既にみたように ϕ 成分は循環座標だから簡単である。

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} &= mr^2 \dot{\phi} + \frac{eB_0}{2} r^2 \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} \right) &= \frac{d}{dt} \left(mr^2 \dot{\phi} + \frac{eB_0}{2} r^2 \right) = 2mr\dot{r}\dot{\phi} + mr^2\ddot{\phi} + eB_0 r \dot{r} = 0 \end{aligned}$$

少し整理すると

$$\ddot{\phi} + 2\frac{\dot{r}}{r}\dot{\phi} + \frac{eB_0}{m} \frac{\dot{r}}{r} = 0$$

となる。結局、 r と ϕ の運動方程式は

$$\ddot{r} = r \dot{\phi}^2 + \frac{eB_0}{m} r \dot{\phi} - \frac{eQ}{m} \frac{1}{r^2} \quad (4.132)$$

$$\ddot{\phi} = -2\frac{\dot{r}}{r}\dot{\phi} - \frac{eB_0}{m} \frac{\dot{r}}{r} \quad (4.133)$$

である。

$$v_r = \dot{r}$$

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

という新しい変数を定義すると、解くべき微分方程式系は (4.127)–(4.130) となる。

4.5.3 荷電粒子の運動方程式

ラグランジアン (4.99) から、荷電粒子の運動方程式

$$m\ddot{\mathbf{x}} = e\{\mathbf{E} + \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}\} \quad (4.134)$$

を導け。

解答例

まずラグランジアン (4.99) から運動方程式の x_1 成分を作る。

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} = m\dot{x}_1 + e A_1$$

から

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} \right) = m\ddot{x}_1 + e \sum_{j=1}^3 \frac{\partial A_1}{\partial x_j} \dot{x}_j + e \frac{\partial A}{\partial t}$$

また、

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = e \sum_{j=1}^3 \frac{\partial A_j}{\partial x_1} \dot{x}_j - e \frac{\partial \psi}{\partial x_1}$$

である。したがって、運動方程式の x_1 成分は、

$$\left\{ m\ddot{x}_1 + e \sum_{j=1}^3 \frac{\partial A_1}{\partial x_j} \dot{x}_j + e \frac{\partial A}{\partial t} \right\} - \left\{ e \sum_{j=1}^3 \frac{\partial A_j}{\partial x_1} \dot{x}_j - e \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right\} = 0$$

ここで j について 1 から 3 までの和をとるときに $j = 1$ では $\partial A_1 / \partial x_j$ と $\partial A_j / \partial x_1$ の二つは同じなのでキャンセルして

$$\left\{ m\ddot{x}_1 + e \frac{\partial A_1}{\partial x_2} \dot{x}_2 + e \frac{\partial A_1}{\partial x_3} \dot{x}_3 + e \frac{\partial A}{\partial t} \right\} - \left\{ e \frac{\partial A_2}{\partial x_1} \dot{x}_2 + e \frac{\partial A_3}{\partial x_1} \dot{x}_3 - e \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right\} = 0$$

となる。つまり

$$m\ddot{x}_1 = e \left\{ \dot{x}_2 \left(\frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2} \right) - \dot{x}_3 \left(\frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1} \right) \right\} - e \frac{\partial A}{\partial t} - e \frac{\partial \psi}{\partial x_1}$$

ここで

$$(\nabla \times \mathbf{A})_3 = \frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2}$$

と

$$(\nabla \times \mathbf{A})_2 = \frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1}$$

を使うと

$$m\ddot{x}_1 = e \{ \dot{x}_2 (\nabla \times \mathbf{A})_3 - \dot{x}_3 (\nabla \times \mathbf{A})_2 \} - e \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right)$$

である。式 (4.102) と (4.103) より、

$$m\ddot{x}_1 = e (\dot{x}_2 B_3 - \dot{x}_3 B_2) + e E_1$$

である。これは

$$m\ddot{x}_1 = e (\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B})_1 + e E_1$$

と書ける。他の成分 (x_2 成分と x_3 成分) についても同様。

Chapter 5

ハミルトニアンと正準方程式

5.1 ラグランジュの運動方程式と数値計算

1 自由度系のラグランジュの運動方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad (5.1)$$

は時間 t に関する 2 階の微分方程式である。

この微分方程式を 4 次のルンゲ=クッタ法のような数値積分法を使って解くのは難しいことではない。まずはラグランジュの運動方程式を

$$\ddot{q} = F(q, \dot{q}) \quad (5.2)$$

という形に変形し、

$$\dot{q} = v \quad (5.3)$$

$$\dot{v} = F(q, v) \quad (5.4)$$

という 2 つの一階微分方程式に分ければよい。

自由度が 2 以上の場合でも同様である。例えば前の章でみた

$$L(r, \phi, \dot{r}, \dot{\phi}) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + \frac{eB_0}{2} r^2 \dot{\phi} + \frac{eQ}{r} \quad (5.5)$$

というラグランジアンから得られる運動方程式は、時間に関する 2 階の微分方程式が 2 つ

$$\ddot{r} = r \dot{\phi}^2 + \frac{eB_0}{m} r \dot{\phi} - \frac{eQ}{m} \frac{1}{r^2} \quad (5.6)$$

$$\ddot{\phi} = -2 \frac{\dot{r}}{r} \dot{\phi} - \frac{eB_0}{m} \frac{\dot{r}}{r} \quad (5.7)$$

であった。これを数値積分で解くには

$$v_r = \dot{r} \quad (5.8)$$

$$v_\phi = \dot{\phi} \quad (5.9)$$

という新しい変数を定義し、時間微分が左辺だけにあらわれるように式を変形すればよい。

$$\dot{r} = v_r \quad (5.10)$$

$$\dot{v}_r = rv_\phi^2 + \frac{eB_0}{m}rv_\phi - \frac{eQ}{m}\frac{1}{r^2} \quad (5.11)$$

$$\dot{\phi} = v_\phi \quad (5.12)$$

$$\dot{v}_\phi = -2\frac{v_r}{r}v_\phi - \frac{eB_0}{m}\frac{v_r}{r} \quad (5.13)$$

これを 4 次ルンゲ=クッタ法などを使って積分するのは簡単である。

一般化して、 N 自由度系のラグランジアン $L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N)$ 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から、

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N) \quad (5.14)$$

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N) \quad (5.15)$$

という $2N$ 個の一階微分方程式系が自然に得られる。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、

$$\dot{q}_i = F_q(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N), \quad (5.16)$$

$$\dot{p}_i = F_p(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (5.17)$$

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。

こうした面倒な式変形なしに、式 (5.16) と式 (5.17) 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る。それは、ハミルトン形式の解析力学と呼ばれる。

ラグランジュ形式の解析力学では、

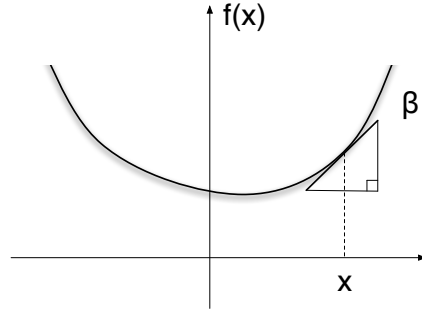
$$p_i = \frac{\partial L(\dots, \dot{q}_i, \dots)}{\partial \dot{q}_i} \quad (5.18)$$

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

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(\dots, p_i, \dots)}{\partial p_i} \quad (5.19)$$

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。 H はハミルトニアンと呼ばれる。

5.2 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

$$\beta = \frac{df(x)}{dx} \quad (5.20)$$

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）。そこで x から β への変数変換

$$x \Leftrightarrow \beta \quad (5.21)$$

を考えよう。この新しい変数 β に対して、式 (5.20) に対応するような関係

$$x = \frac{dg(\beta)}{d\beta} \quad (5.22)$$

を導く関数 $g(\beta)$ は何であろうか？それは

$$x\beta = f + g \quad (5.23)$$

を満たす関数、つまり

$$g(\beta) = x\beta - f(x) \quad (5.24)$$

である。なぜなら

$$g(\beta) = x(\beta)\beta - f(x(\beta)) \quad (5.25)$$

に対して、

$$\frac{dg}{d\beta} = x + \beta \frac{dx}{d\beta} - \frac{df}{dx} \frac{dx}{d\beta} = x \quad (5.26)$$

であるからである。ここで式 (5.20) を使った。式 (5.24) 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 (5.23) 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を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、

$$f_0(x) = x^2 \Leftrightarrow g_0(\beta) = \frac{\beta^2}{4} \quad (5.27)$$

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

$$f_1(x) = (x-1)^2 \quad \Leftrightarrow \quad g_1(\beta) = \frac{\beta^2}{4} + \beta \quad (5.28)$$

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

$$f_2(x) = cx^2 \quad \Leftrightarrow \quad g_2(\beta) = \frac{\beta^2}{4c} \quad (5.29)$$

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、

$$p = \frac{\partial L(\dot{q})}{\partial \dot{q}} \quad (5.30)$$

という式はこのままでは使いにくいので、

$$\dot{q} = \frac{\partial(?) }{\partial p} \quad (5.31)$$

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

$$H(p) = p\dot{q} - L(\dot{q}) \quad (5.32)$$

に対して

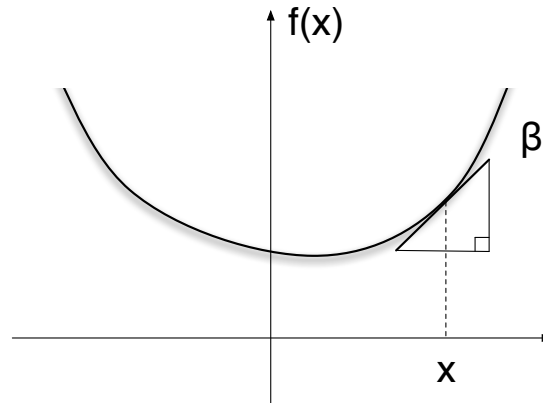
$$\dot{q} = \frac{\partial H(p)}{\partial p} \quad (5.33)$$

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、

$$\frac{\partial H(p)}{\partial p} = \dot{q} + p \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} = \dot{q} + p \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} - p \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} = \dot{q} \quad (5.34)$$

と確かに成り立っている。

ルジャンドル変換としての L と H ルジャンドル変換としての L と H の関係をまとめておこう。



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

...

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

5.3 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

1 自由度系のハミルトニアン

$$H(q, p) = p\dot{q} - L(q, \dot{q}) \quad (5.35)$$

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。 q は正準座標、 p を q に共役な正準運動量という。 q と p の組を正準変数という。

上で書いたように、

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (5.36)$$

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

$$\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial q} \{p\dot{q} - L(q, \dot{q}(q, p))\} \quad (5.37)$$

$$= p \frac{\partial \dot{q}(q, p)}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} \quad (5.38)$$

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p \text{ より} \right) \quad (5.39)$$

$$= -\frac{\partial L}{\partial q} \quad (5.40)$$

$$= -\dot{p} \quad (5.41)$$

ここで、最後の変形では、ラグランジュの運動方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{dp}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q} \quad (5.42)$$

を使った。

5.4 正準方程式

5.4.1 1 自由度系

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 (5.42) を仮定すれば、

$$\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p} \quad (5.43)$$

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、

1 自由度系の正準方程式

$$\dot{q} = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p} \quad (5.44)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q} \quad (5.45)$$

となる。これをハミルトン形式の運動方程式、あるいは正準方程式という。

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

$$H(q, p) = p \dot{q}(q, p) - L(q, \dot{q}(q, p)) \quad (5.46)$$

によってハミルトニアンを構成することができる。(逆に H から L をルジャンドル変換で求めることもできる。) 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。

5.4.2 多自由度系

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 $q_1, \dots, q_N$ と N 個の正準運動量 $p_1, \dots, p_N$ がある。ハミルトニアンはこの $2N$ 個の正準変数の関数 $H(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$ であり、ラグランジアン $L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N)$ からルジャンドル変換

N 自由度系のハミルトニアン

$$H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N) \quad (5.47)$$

で得られる。

系の時間発展を記述する正準方程式は

N 自由度系の正準方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (1 \leq i \leq N) \quad (5.48)$$

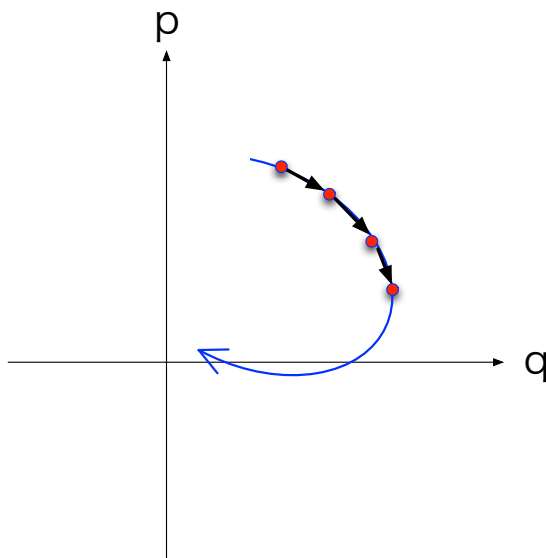
$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (1 \leq i \leq N) \quad (5.49)$$

である。ここで p_i は、 q_i に共役な正準運動量

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (5.50)$$

である。

5.4.3 相空間



ラグランジュ形式の力学では、ラグランジアン $L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N)$ が基本であったのに対し、ハミルトン形式の力学ではハミルトニアン

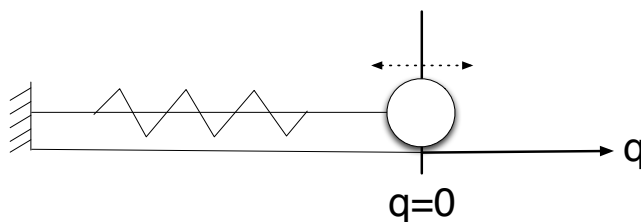
$$H(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N) \quad (5.51)$$

が基本である。ハミルトニアンは合計 $2N$ 個の正準変数 $(q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t), p_1(t), p_2(t), \dots, p_N(t))$ の関数である。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といえる。

N 自由度の系の「状態」はある時刻 t における一般化座標 $(q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t))$ の値だけでは指定できない。 $(\dot{q}_1(t), \dot{q}_2(t), \dots, \dot{q}_N(t))$ の情報、つまりその時の速度も必要である。ハミルトン力学では系の状態を、正準変数 $(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$ を座標として構成される $2N$ 次元の空間の一点で指定する。これを相空間（または位相空間）という。相空間の位置と系の「状態」は一対一に対応する。

相空間中の系の状態（点）がどう動くかを決めるのがハミルトンの正準方程式 (5.48), (5.49) である。二本の軌跡（解曲線）が交わることはない。正準方程式の初期条件は、 $2N$ 個の正準変数 $(q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t), p_1(t), p_2(t), \dots, p_N(t))$ の値で指定される。異なる初期条件から出発した解曲線が交わることはないので、相空間は初期条件を異にする無数の解曲線でびっしりと埋め尽くされている。

5.4.4 簡単な例:調和振動子



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、

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} q^2 \quad (5.52)$$

で与えられる。正準方程式をたててみよう。

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad (5.53)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -kq \quad (5.54)$$

正準方程式 (5.53), (5.54) は、左辺に基本変数の時間微分があり、右辺には時間微分が含まれていない。つまり、式 (5.3) と (5.4) のような形に自動的にになっている。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 (5.52) を q と $\dot{q}$ で書いてみると、

$$H = \frac{m}{2} \dot{q}^2 + \frac{k}{2} q^2 = K + U \quad (5.55)$$

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。

5.5 ハミルトニアンとエネルギー

ハミルトニアン (5.52) 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 $f(q)$ を使って以下の形にかける場合を考えよう。

$$U(q, \dot{q}) = U(q), \quad K(q, \dot{q}) = f(q) \dot{q}^2 \quad (5.56)$$

この場合、ラグランジアン L は

$$L = K - U = f(q) \dot{q}^2 - U(q) \quad (5.57)$$

である。正準運動量は U が $\dot{q}$ に依存しないので K の微分から得られる。

$$p = \frac{\partial K}{\partial \dot{q}} \quad (5.58)$$

つまり

$$p = \frac{\partial K}{\partial \dot{q}} = 2f(q) \dot{q} \quad (5.59)$$

ルジャンドル変換によって

$$H = p\dot{q} - L \quad (5.60)$$

$$= 2f(q) \dot{q} - (f(q) \dot{q}^2 - U(q)) \quad (5.61)$$

$$= f(q) \dot{q}^2 + U(q) \quad (5.62)$$

$$= K + U \quad (5.63)$$

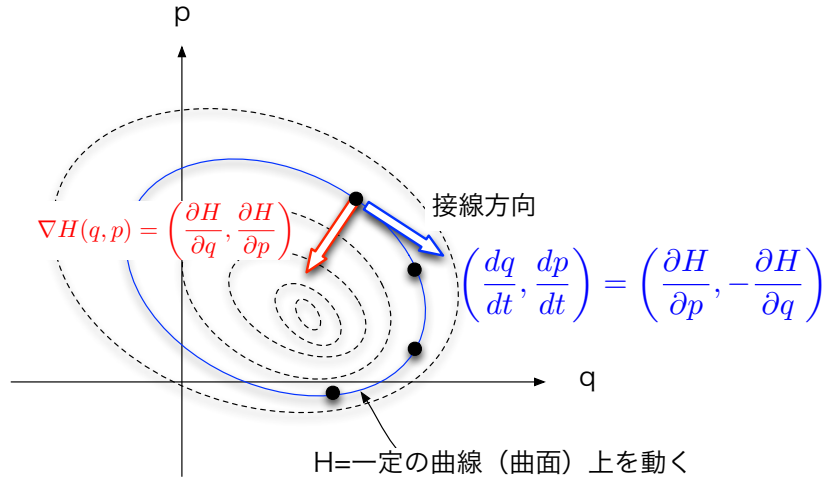
こうして、

$$H = (\text{運動エネルギー}) + (\text{ポテンシャル}) = (\text{全エネルギー}) \quad (5.64)$$

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。

5.6 正準方程式のイメージ



1 自由度系のハミルトニアン $H(q, p)$ を考えよう。これは 2 次元相空間 (q, p) のスカラー場である。系の状態は、相空間中の点 (q_0, p_0) で指定される。正準方程式はこの相空間中の点 (状態) の動き方を定める。

相空間 q - p 中の $H(q, p)$ の勾配 (gradient) ベクトルを考えてみよう。

$$\nabla H = \begin{pmatrix} \partial H / \partial q \\ \partial H / \partial p \end{pmatrix} \quad (5.65)$$

である。以前説明したように (ベクトル解析で習ったように)、このベクトルはその点で H が最も増大する方向を指している。さて、正準方程式をまとめて

$$\begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial H / \partial p \\ -\partial H / \partial q \end{pmatrix} \quad (5.66)$$

と書いてみよう。上の式から、相空間中を動く点の速度ベクトル

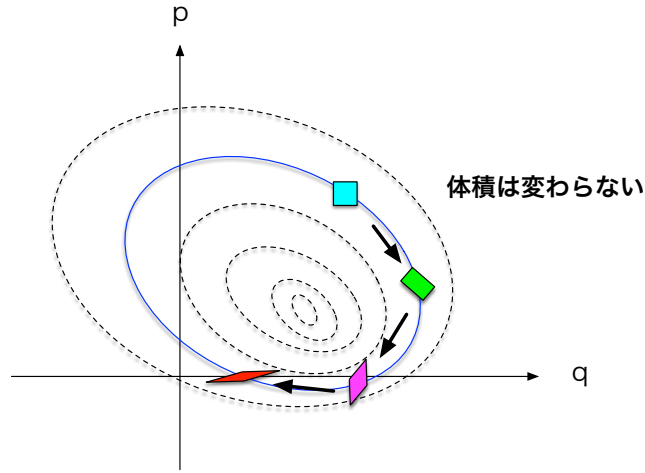
$$\mathbf{u} \equiv \begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{pmatrix} \quad (5.67)$$

と、勾配ベクトル ∇H の内積がゼロ

$$\mathbf{u} \cdot \nabla H = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} = 0 \quad (5.68)$$

つまり直交することがわかる。系は相空間中を常に $H(q, p)$ の等高線の接線方向に動く。従ってその等高線からはずれることはない。これはエネルギー保存則を意味する。多自由度系についての同様な議論が成り立つ。

5.7 リウヴィルの定理



【ここでは流体力学を学んだことのある学生を想定した説明をしている。流体力学をまだ履修していない学生は読み飛ばしてよい。】 N 自由度系の相空間中に点 (状態) がぎっしり無数に分布している様子を思い浮かべよう。一つ一つの点を $2N$ 次元の相空間に存在する仮想的な流体の流体粒子だと考えよう。するとこの流体の流れ

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \\ u_{N+1} \\ u_{N+2} \\ \vdots \\ u_{2N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \vdots \\ \dot{q}_N \\ \dot{p}_1 \\ \dot{p}_2 \\ \vdots \\ \dot{p}_N \end{pmatrix} \quad (5.69)$$

は非圧縮流であることが分かる。なぜならこの流れの ($2N$ 次元の) 発散をとると

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial u_j}{\partial q_j} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial u_{N+j}}{\partial p_j} \quad (5.70)$$

$$= \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_j} + \frac{\partial \dot{p}_j}{\partial p_j} \quad (5.71)$$

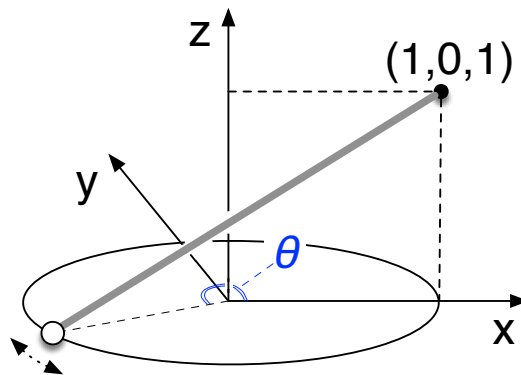
$$= \frac{\partial}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (5.72)$$

$$= 0 \quad (5.73)$$

となるからである。従って相空間中の流れに乗って動く微小な部分は変形はするが体積は変わらない。これをリウヴィルの定理という。

5.8 演習

5.8.1 問題 1



【これは以前 (p.33) も考えた系である。】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。

- 図のように質点が x 軸となす角度 q を一般化座標として、この系のポテンシャル U と運動エネルギー K を求めよ。
- q に共役な運動量 p を求めよ。
- 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。
- 正準方程式を書け。
- $|q| \ll 1$ の時の解を求めよ。

解

- (a) 質点の座標は $(x, y, z) = (\cos q, \sin q, 0)$ である。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

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

である。

運動エネルギーは

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

(b) この系は式 (5.56) の形なので

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

(c) ハミルトニアンは

$$H = K + U$$

より

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

(d)

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \tag{5.74}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -k \sin q \tag{5.75}$$

(d) $|q| \ll 1$ のとき $\sin q \sim q$ だから、(5.75) は

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

となる。式 (5.74) を時間微分した式にこれを代入すると、

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

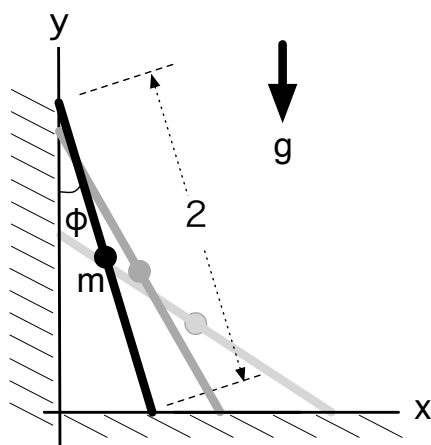
を得る。ここで $\omega^2 = k/m$ である。従って解は

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

c_1 と c_2 は定数。

5.8.2 問題 2

これも以前、ラグランジュ形式で解いた問題である。



長さ 2 の重さのない棒の中心に固着した質量 m の質点がある。鉛直下方の一定重力（重力定数 g ）の下、この棒を壁に（斜めに）立て掛けた。床面に沿って x 軸、壁面に沿って y 軸をとる。棒の両端はそれぞれ壁面と床面から離れないように（摩擦なしで）滑りながらこの棒が倒れる途中の運動を考える。棒と壁のなす角度 q を正準座標とする。

- (a) この系のポテンシャル U と運動エネルギー K を書け。
- (a) q に共役な運動量 p を書け。
- (b) p と q を正準変数としたハミルトニアン $H(q, p)$ を書け。
- (c) 正準方程式を書け。
- (d) $q \ll 1$ の時の解を求めよ。

解答

- (a) 質点の位置を (x, y) とすると

$$(x, y) = (\sin q, \cos q)$$

速度は

$$(\dot{x}, \dot{y}) = (\cos q \dot{q}, -\sin q \dot{q})$$

である。棒は質量を持たないので、この系の運動エネルギー K は、質点だけが持っている。従って、

$$K = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{m}{2}\dot{q}^2$$

同様に棒はポテンシャルを持たないので、系のポテンシャル U は、質点の重力ポテンシャル

$$U = mgy = mg \cos q$$

である。

(b)

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

(c)

$$H = K + U = \frac{p^2}{2m} + mg \cos q$$

(d)

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = mg \sin q\end{aligned}$$

(e) $|q| \ll 1$ の時、 $\sin q \sim q$ より、正準方程式は

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= mgq\end{aligned}$$

となる。この 2 つの式から

$$\ddot{q} = gq$$

この解は c_1 と c_2 を定数として

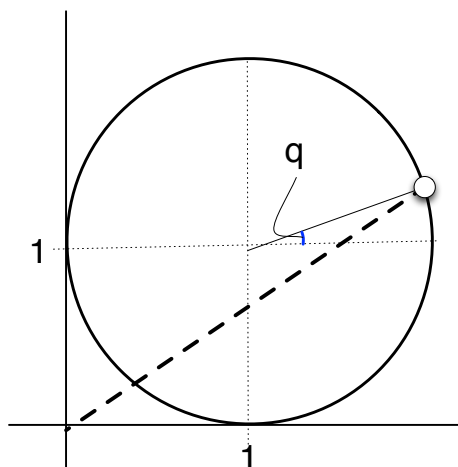
$$q(t) = c_1 e^{\sqrt{g}t} + c_2 e^{-\sqrt{g}t}$$

と書けるが、このうち、自然な（棒が倒れていく）解は $c_2 = 0$ 、つまり

$$q(t) = c_1 e^{\sqrt{g}t}$$

である。棒が倒れるとき、角度が $\sqrt{g}$ の成長率で指数関数的に増大することを意味する。

5.8.3 問題 3



x 軸と y 軸に接する半径 1 の円周上を質量 m の質点が滑らかに滑る。原点と質点はバネ（ばね定数 k 、自然長 0）で結ばれている。図のように x 軸となす角度 q を正準座標とする。

(1-1) この系のハミルトニアン $H(q, p)$ を書け。

(1-2) この系の正準方程式を書け。

(1-3) この質点の運動はある振り子と同じである。どのような振り子か？

解答

(1-1) 質点の速度は $\dot{q}$ 、運動エネルギーは $m\dot{q}^2/2$ 、バネのポテンシャルは

$$U(q) = \frac{k}{2} \{ (1 + \cos q)^2 + (1 + \sin q)^2 \}$$

である。これから、 q に共役な運動量は

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

従って、ハミルトニアンは

$$H(q, p) = K + U = \frac{p^2}{2m} + k(\cos q + \sin q)$$

あるいは

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \sqrt{2}k \cos\left(q - \frac{\pi}{4}\right) \quad (5.76)$$

等としてももちろん構わない。

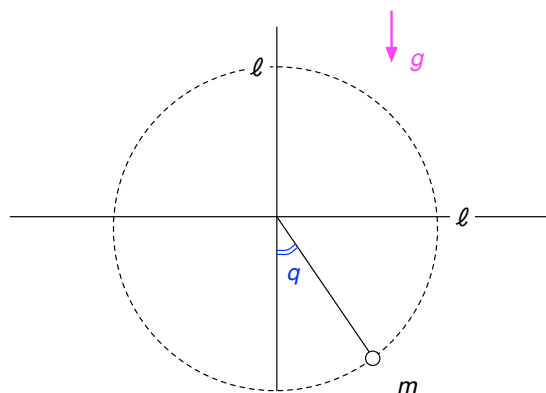
(1-2) 正準方程式は

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \quad (5.77)$$

$$\dot{p} = k(\sin q - \cos q) \quad (5.78)$$

である。

(1-3) $q = 5\pi/4$ 方向に重力加速度のある系での振り子の運動と同じである。



一様重力 g の下で半径 ℓ の円上を滑らかに滑る質量 m の質点の運動を考える。(つまり長さ ℓ の糸による振り子の運動。) 図のように角度 q をとり、 $p = m\ell^2\dot{q}$ とするとこの系のハミルトニアンは

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m\ell^2} - mg \cos q \quad (5.79)$$

2つのハミルトニアン (5.76) と (5.79) を比較すると、バネの問題のハミルトニアン (5.76) は、一様重力下の振り子のハミルトニアン (5.79) を $\ell \rightarrow 1$ 、 $k \rightarrow \sqrt{2}k$ として $q \rightarrow q + 5\pi/4$ と変換した場合に相当することが分かる。つまり、 x 軸から $5\pi/4$ 方向に $\sqrt{2}k$ の重力加速度がある場合の振り子の運動と同じである。

5.8.4 問題 4

ラグランジアンが $L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}(q + \dot{q})^2$ の系について、

(a) ハミルトニアン $H(q, p)$ を書け。

(b) 正準方程式を書け。

(c) $q(0) = p(0) = 1$ を初期条件とし、 $q(t)$ と $p(t)$ を解け。

解答例

(a) ラグランジアン

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} (q + \dot{q})^2$$

から q に共役な正準運動量は

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

である。したがってハミルトニアン H は、 L をルジャンドル変換して

$$\begin{aligned} H(q, p) &= p\dot{q} - L(q, \dot{q}) \\ &= p(p - q) - \frac{1}{2}p^2 \\ &= \frac{p^2}{2} - pq \end{aligned}$$

(b) 正準方程式

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

に上のハミルトニアン $H(q, p)$ を代入すると、

$$\dot{q} = p - q \quad (5.80)$$

と

$$\dot{p} = p \quad (5.81)$$

の二つが求める正準方程式である。

(c) 式 (5.81) の解は、

$$p(t) = c e^t$$

である。ここで c は定数。初期条件 $p(0) = 1$ より、 $c = 1$ 、つまり

$$p(t) = e^t$$

が $p(t)$ の解である。次に式 (5.80) を解く。

$$q(t) = c_1 e^t + c_2 e^{-t} \quad (5.82)$$

と置くと、初期条件 $q(0) = 1$ より

$$c_1 + c_2 = 1 \quad (5.83)$$

また式 (5.80) より

$$\dot{q}(0) = p(0) - q(0) = 1 - 1 = 0$$

一方、式 (5.82) より $\dot{q}(0) = c_1 - c_2$ だから

$$c_1 - c_2 = 0 \quad (5.84)$$

式 (5.83) と (5.84) より、

$$c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$$

である。従って

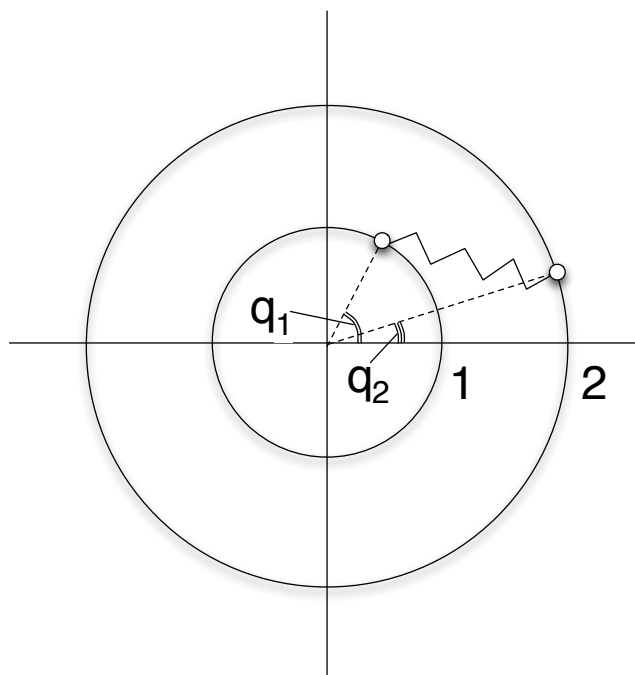
$$q(t) = \frac{1}{2}e^t + \frac{1}{2}e^{-t} = \cosh t$$

である。まとめると

$$\begin{aligned} q(t) &= \cosh t \\ p(t) &= e^t \end{aligned}$$

が求める解である。

5.8.5 問題 5



質量 m の質点が二つ、それぞれ半径 1 と半径 2 の円（中心を共有）の上を滑らかに滑る。二つの質点の間がバネ（バネ定数は k 、自然長は 0）でつな

がれているものとする。二つの円の中心を原点にとり、 x 軸からの角度 q_1 と q_2 を正準座標とする。

問題 正準方程式を書け。

解答例 二つの質点間の距離 ℓ は

$$\ell = \sqrt{5 - 4 \cos(q_1 - q_2)} \quad (5.85)$$

なので、バネのポテンシャルは

$$U = \frac{k}{2} \{5 - 4 \cos(q_1 - q_2)\}$$

である。

この系のラグランジアンは

$$L = K - U = \frac{m}{2} \dot{q}_1^2 + \frac{m}{2} (2\dot{q}_2)^2 - \frac{k}{2} \ell^2(q_1, q_2)$$

である。ここで ℓ は式 (5.85) である。

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = m\dot{q}_1 \quad (5.86)$$

$$p_2 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2} = 4m\dot{q}_2 \quad (5.87)$$

を使ってルジャンドル変換すると、

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2) = p_1 \dot{q}_1 + p_2 \dot{q}_2 - L = \dots = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{8m} + \frac{k}{2} \{5 - 4 \cos(q_1 - q_2)\}$$

である。あるいは

$$H = K + U$$

から直接求めてもよい。

定数部分の $5k/2$ は正準方程式には寄与しないので無視すると、この系のハミルトニアンは

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{8m} - 2k \cos(q_1 - q_2) \quad (5.88)$$

である。正準方程式は、以下の 4 つの式である。

$$\dot{q}_1 = \frac{\partial H}{\partial p_1} = \frac{p_1}{m} \quad (5.89)$$

$$\dot{q}_2 = \frac{\partial H}{\partial p_2} = \frac{p_2}{4m} \quad (5.90)$$

$$\dot{p}_1 = -\frac{\partial H}{\partial q_1} = -2k \sin(q_1 - q_2) \quad (5.91)$$

$$\dot{p}_2 = -\frac{\partial H}{\partial q_2} = 2k \sin(q_1 - q_2) \quad (5.92)$$

Chapter 6

正準変換とポアッソン括弧

6.1 座標変換の必要性

ラグランジュ形式の力学では、一般化座標

$$(q_1, \dots, q_N)$$

から別の一般化座標

$$(Q_1, \dots, Q_N)$$

への点変換

$$Q_i = Q_i(q_1, \dots, q_N) \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (6.1)$$

を施しても、ラグランジュの運動方程式は変換前の

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

と同じ形

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

になることを第 4.1 章 (p.59) で示した。

ハミルトン形式の力学でも同様に運動方程式 (= 正準方程式) の形を変えない座標変換がある。その変換は一般化座標の点変換を含みつつ、より一般的な (もっと自由な) 座標変換である。

まずはそのような座標変換が不可欠となる例を挙げよう。ハミルトニアンが以下で与えられる系を考える。

$$H(q, p) = \frac{q^4 p^2}{2} + \frac{1}{q} \quad (6.2)$$

正準方程式は

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = q^4 p \quad (6.3)$$

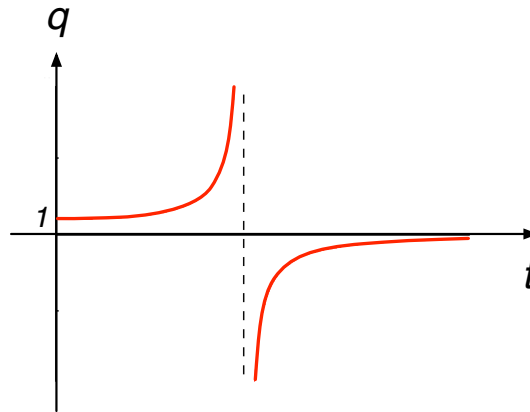
$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -2q^3 p^2 + \frac{1}{q^2} \quad (6.4)$$

である。この方程式を、これまでの例題で何度か使ってきた 4 次ルンゲ＝クッタ法を使った数値積分プログラムに入れて実行すると・・・計算が破綻する！式 (6.4) の右辺第 2 項の分母の q がゼロになったせいかな？と思うかもしれないが、そうではない。調べてみると q や p の値が途中で値が急に大きくなり始めて、最終的には数値的に発散してしまっている。なぜだろうか？

解がこのような発散するのは数値計算手法に問題があるためではなく、むしろ正しく解けているためである。上の正準方程式の解析解は

$$q(t) = \frac{1}{1 - \frac{t^2}{2}}$$

であることは代入すれば分かる。この $q(t)$ は $t = \sqrt{2}$ で発散する。ルンゲ＝クッタ法のような数値積分ルーチンがいくら汎用性が高いといっても、途中で発散するこのような解を求めることはさすがにできない。



このような問題の場合、正準座標 (q, p) を座標変換して、別の正準座標 (Q, P) で解けば数値計算をする上で何も問題は生じない。どのような座標変換をすればいいかについては後で紹介する。

正準座標の座標変換について一般的に考えてみよう。一般に、 N 自由度系のハミルトニアン

$$H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$$

が与えられたとき、正準変数

$$(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$$

から別の変数

$$(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N)$$

への座標変換を考える。いま考えているのは、ラグランジュの運動方程式の場合の点変換 [式 (6.1)] のように一般化座標 q だけを対象とした変換ではなく、一般化座標 q と一般化運動量 p を「混ぜる」ような、座標変換

$$Q_i = Q_i(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (6.5)$$

$$P_i = P_i(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (6.6)$$

である。この場合、ある特定の k に対する Q_k と P_k は、互いに共役な 2 つの座標の対としての意味はあるにせよ、どちらが座標で、どちらが運動量か、という区別は意味がなくなる。

この座標変換で運動方程式の形が変わらない場合を考える。つまり上の座標変換 (6.5) と (6.6) を施しても、変換前の正準方程式正準方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (6.7)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (6.8)$$

と同じ形の

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i}(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) \quad (6.9)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial H}{\partial Q_i}(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) \quad (6.10)$$

という正準方程式が成り立つような変換を考える。このように、正準方程式の形を変えないような正準変数の座標変換を、正準変換という。

6.2 正準変換の直接条件

変換 (6.5) と (6.6) が正準変換であるための条件を求めよう。いま、この変換の逆変換

$$q_i = q_i(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) \quad (6.11)$$

$$p_i = p_i(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) \quad (6.12)$$

も既知とする。

式 (6.9) の右辺を変形すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial P_i} &= \sum_{j=1}^N \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial P_i} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial P_i} \\ &= -\sum_{j=1}^N \dot{p}_j \frac{\partial q_j}{\partial P_i} + \sum_{j=1}^N \dot{q}_j \frac{\partial p_j}{\partial P_i} \quad [\text{正準方程式 (6.7) と (6.8) より}] \end{aligned}$$

一方、式 (6.9) の左辺は

$$\dot{Q}_i = \sum_{j=1}^N \dot{p}_j \frac{\partial Q_i}{\partial p_j} + \sum_{j=1}^N \dot{q}_j \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}$$

である。この 2 つの式の比較と、同様な比較を式 (6.10) に施すことで以下の関係を得る。

正準変換の直接条件

$$\frac{\partial Q_i}{\partial q_j} = \frac{\partial p_j}{\partial P_i} \quad (6.13)$$

$$\frac{\partial Q_i}{\partial p_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial P_i} \quad (6.14)$$

$$\frac{\partial P_i}{\partial p_j} = \frac{\partial q_j}{\partial Q_i} \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial P_i}{\partial q_j} = -\frac{\partial p_j}{\partial Q_i} \quad (6.16)$$

変換 (6.5) と (6.6) が正準変換であるための必要十分条件は、上の条件 (6.13) から (6.16) が成り立っていることである。この条件は正準変換の直接条件と呼ばれる。

自由度が 1 の場合の直接条件は

正準変換の直接条件 (1 自由度系の場合)

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \frac{\partial p}{\partial P}, \quad (6.17)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial p} = -\frac{\partial q}{\partial P}, \quad (6.18)$$

$$\frac{\partial P}{\partial p} = \frac{\partial q}{\partial Q}, \quad (6.19)$$

$$\frac{\partial P}{\partial q} = -\frac{\partial p}{\partial Q} \quad (6.20)$$

である。

6.3 正準変換としての点変換

正準変換の特殊な場合として点変換がある。点変換 (6.1) が正準変換であることを 1 自由度系の場合について直接条件で確認しよう。

q が点変換のとき、 q は Q のある関数 ϕ で

$$q = \phi(Q) \quad (6.21)$$

と書ける。すると

$$\dot{q} = \phi'(Q) \dot{Q} \quad (6.22)$$

である (プライムは微分を意味する)。 q から Q への変換は ϕ の逆関数を使い

$$Q = \phi^{-1}(q) \quad (6.23)$$

と書ける。逆関数の微分は一般的に

$$\frac{d}{dq} \phi^{-1}(q) = \frac{1}{\phi'(\phi^{-1}(q))} \quad (6.24)$$

と書けることに注意しよう。これを使うと、

$$\dot{Q} = \frac{\dot{q}}{\phi'(\phi^{-1}(q))} \quad (6.25)$$

を得る。ここまでが準備である。

式 (6.23) と (6.21) より、

$$0 = \frac{\partial Q}{\partial p} = \frac{\partial q}{\partial P} \quad (6.26)$$

だから、直接条件の中の式 (6.18) は成立していることが簡単に確認できた。

次に式 (6.20) を確認する。定義より、

$$P = \frac{\partial}{\partial \dot{Q}} L(q, \dot{q}) \quad (6.27)$$

$$= \frac{\partial L}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial \dot{Q}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial \dot{Q}} \quad (6.28)$$

第一項は式 (6.21) よりゼロである。第二項を、 p の定義式

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad (6.29)$$

と、式 (6.22) を使って書き換えると

$$P = p \phi'(Q) \quad (6.30)$$

$$= p \phi'(\phi^{-1}(q)) \quad (6.31)$$

式 (6.30) から

$$p = \frac{P}{\phi'(Q)} \quad (6.32)$$

式 (6.31) より

$$\frac{\partial P}{\partial q} = p \frac{d}{dq} \{ \phi'(\phi^{-1}(q)) \} \quad (6.33)$$

$$= p \phi''(\phi^{-1}(q)) \frac{d}{dq} (\phi^{-1}(q)) \quad (6.34)$$

$$= p \phi''(\phi^{-1}(q)) \frac{1}{\phi'(\phi^{-1}(q))} \quad (6.35)$$

ここで式 (6.24) を使った。あとで比較するために右辺を P と Q で書いておくと、式 (6.32) と (6.23) より

$$\frac{\partial P}{\partial q} = \frac{P \phi''(Q)}{\{\phi'(Q)\}^2} \quad (6.36)$$

次に式 (6.32) より

$$\frac{\partial p}{\partial Q} = \frac{\partial}{\partial Q} \left(\frac{P}{\phi'(Q)} \right) = - \frac{P \phi''(Q)}{\{\phi'(Q)\}^2} \quad (6.37)$$

式 (6.37) と (6.36) を比較して

$$\frac{\partial p}{\partial Q} = -\frac{\partial P}{\partial q} \quad (6.38)$$

これが直接条件のうちのひとつ (6.20) である。

次に直接条件のうちの式 (6.17) を確認する。式 (6.23) と (6.24) より、

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \frac{1}{\phi'(\phi^{-1}(q))} = \frac{1}{\phi'(Q)} \quad (6.39)$$

また、式 (6.32) より

$$\frac{\partial p}{\partial P} = \frac{1}{\phi'(Q)} \quad (6.40)$$

だから

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \frac{\partial p}{\partial P} \quad (6.41)$$

最後に式 (6.19) を確認する。式 (6.31) より

$$\frac{\partial P}{\partial p} = \phi'(\phi^{-1}(q)) \quad (6.42)$$

式 (6.23) より

$$\frac{\partial P}{\partial p} = \phi'(Q) \quad (6.43)$$

また、式 (6.21) より

$$\frac{\partial q}{\partial Q} = \phi'(Q) \quad (6.44)$$

上の二つの式より

$$\frac{\partial P}{\partial p} = \frac{\partial q}{\partial Q} \quad (6.45)$$

以上で点変換が正準変換であることが確認できた。

6.4 正準変換の合成

直接条件 (6.13)–(6.16) の対称性から明らかに「正準変換の逆変換は正準変換である」ことがわかる。

また、これらの条件式から「正準変換の合成変換は正準変換である」ということも以下のように証明できる。 q - p の座標から q' - p' への正準変換

$$(q_1, q_2, \dots, p_N) \Rightarrow (q'_1, q'_2, \dots, p'_N)$$

と、 q' - p' 座標から q'' - p'' 座標への正準変換

$$(q'_1, q'_2, \dots, p'_N) \Rightarrow (q''_1, q''_2, \dots, p''_N)$$

を合成した変換、即ち q - p の座標から q'' - p'' への変換

$$(q_1, q_2, \dots, p_N) \Rightarrow (q''_1, q''_2, \dots, p''_N)$$

を考える。式 (6.13) に相当する偏微分を計算すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial q''_i}{\partial q_j} &= \sum_{k=1}^N \frac{\partial q''_i}{\partial q'_k} \frac{\partial q'_k}{\partial q_j} + \sum_{k=1}^N \frac{\partial q''_i}{\partial p'_k} \frac{\partial p'_k}{\partial q_j} \\ &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial p'_k}{\partial p''_i} \right) \left(\frac{\partial p_j}{\partial p'_k} \right) + \sum_{k=1}^N \left(-\frac{\partial q''_k}{\partial p'_i} \right) \left(-\frac{\partial p'_j}{\partial q_k} \right) \\ &= \frac{\partial p_j}{\partial p''_i} \end{aligned} \quad (6.46)$$

である。同様な計算を行いまとめると、結局

$$\frac{\partial q''_i}{\partial q_j} = \frac{\partial p_j}{\partial p''_i}, \quad \frac{\partial q''_i}{\partial p_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial p''_i}, \quad \frac{\partial p''_i}{\partial p_j} = \frac{\partial q_j}{\partial q''_i}, \quad \frac{\partial p''_i}{\partial q_j} = -\frac{\partial p_j}{\partial q''_i} \quad (6.47)$$

が得られる。これは、 q - p の座標から q'' - p'' への変換が正準変換であることの直接条件である。

正準変換の例 最初の例に戻ろう。ハミルトニアン (6.2) をここに再掲する。

$$H(q, p) = \frac{q^4 p^2}{2} + \frac{1}{q} \quad (6.48)$$

このハミルトニアンの正準変数 (q, p) を別の座標に

$$(q, p) \Rightarrow (Q, P)$$

と変換しよう。ここでは具体的に

$$Q = Q(q, p) = q^2 p \quad (6.49)$$

$$P = P(q, p) = 1/q \quad (6.50)$$

という変換を考える。これは正準変換である。確認してみよう。

この変換の逆は

$$q = q(Q, P) = 1/P \quad (6.51)$$

$$p = p(Q, P) = QP^2 \quad (6.52)$$

であることはすぐにわかる。式 (6.49) から

$$\frac{\partial Q}{\partial p} = q^2$$

一方、式 (6.49) より

$$\frac{\partial q}{\partial P} = -1/P^2 = -q^2$$

つまり

$$\frac{\partial Q}{\partial p} = -\frac{\partial q}{\partial P}$$

である。同様な計算によって正準変換の直接条件 (6.17)–(6.18) が全て成り立っていることが確認できる。つまりこの変換 (6.49) と (6.50) は正準変換である。

(Q, P) への変換は正準変換なので、正準方程式が成り立つ。ハミルトニアンはこの新しい正準変数の下、

$$\begin{aligned} H(Q, P) &= \frac{q^4(Q, P)p^2(Q, P)}{2} + \frac{1}{q(Q, P)} \\ &= \frac{Q^2}{2} + P \end{aligned} \quad (6.53)$$

なので、正準方程式は

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= \frac{\partial H}{\partial P} = 1 \\ \dot{P} &= -\frac{\partial H}{\partial Q} = -Q \end{aligned}$$

である。この微分方程式は数値計算しても全く問題ない (実際には手で解けるが)。

6.5 母関数

直接条件 (6.13) から (6.16) を満足するような変換を作るのは結構大変である。式 (6.49) と (6.50) のような変換をどうやって思いついたのであろうか。母関数を使い、直接条件を自動的に満足するような (つまり正準変換になるような) 変換を系統的に構成する方法が開発されている。

q と Q の関数

$$W(q, Q) \quad (6.54)$$

を母関数として

$$P = -\frac{\partial W}{\partial Q}(q, Q) \quad (6.55)$$

$$p = \frac{\partial W}{\partial q} \quad (6.56)$$

という 2 つの式から

$$(q, p) \Rightarrow (Q, P)$$

という座標変換が定義できる。この変換は正準変換になる。

母関数には式 (6.54) 以外にも

$$W(q, P)$$

$$W(p, Q)$$

$$W(p, P)$$

という型があり、それぞれ正準変換を定義する母関数の微分の仕方が異なるが、ここでは深入りしない。

式 (6.55) と (6.56) で定義される変換が正準変換であることは以下のようにして確認できる。

まず、独立変数を q と p としてこの 2 つの式を見ると、

$$\begin{aligned} P(q, p) &= -\frac{\partial W}{\partial Q}(q, Q(q, p)) \\ p &= \frac{\partial W}{\partial q}(q, Q(q, p)) \end{aligned}$$

となる。この 2 つの式を q と p で偏微分すると以下の 4 つの式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial q} &= -\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q} - \frac{\partial^2 W}{\partial Q^2} \frac{\partial Q}{\partial q} \\ \frac{\partial P}{\partial p} &= -\frac{\partial^2 W}{\partial \partial Q^2} \frac{\partial Q}{\partial p} \\ 0 &= \frac{\partial^2 W}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q} \frac{\partial Q}{\partial q} \\ 1 &= \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q} \frac{\partial Q}{\partial p} \end{aligned}$$

この連立方程式を解くと、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial Q}{\partial q} & \frac{\partial Q}{\partial p} \\ \frac{\partial P}{\partial q} & \frac{\partial P}{\partial p} \end{pmatrix} = \frac{1}{\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}} \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 W}{\partial q^2} & 1 \\ \left(\frac{\partial^2 W}{\partial Q^2}\right) \left(\frac{\partial^2 W}{\partial q^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}\right)^2 & -\frac{\partial^2 W}{\partial Q^2} \end{pmatrix} \quad (6.57)$$

を得る。

次に独立変数を Q と P にとって式 (6.55) と (6.56) を見ると、

$$\begin{aligned} P &= -\frac{\partial W}{\partial Q}(q(Q, P), Q) \\ p(Q, P) &= \frac{\partial W}{\partial q}(q(Q, P), Q) \end{aligned}$$

である。この式を今度は Q と P で偏微分すれば同様に連立方程式が得られる。その解は

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial q}{\partial Q} & \frac{\partial q}{\partial P} \\ \frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial p}{\partial P} \end{pmatrix} = \frac{1}{\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}} \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 W}{\partial Q^2} & -1 \\ \left(\frac{\partial^2 W}{\partial Q^2}\right) \left(\frac{\partial^2 W}{\partial q^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial Q}\right)^2 & -\frac{\partial^2 W}{\partial q^2} \end{pmatrix} \quad (6.58)$$

である。

式 (6.57) と (6.58) を比較すると、正準変換であるための直接条件 (6.17)–(6.20) が成り立っていることがわかる。

N 自由度の系に対しては母関数

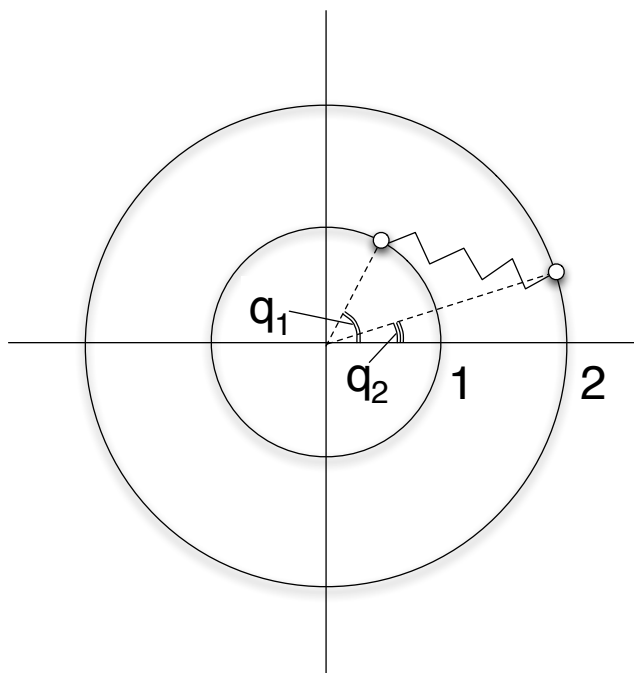
$$W(q_1, \dots, q_N, Q_1, \dots, Q_N) \quad (6.59)$$

から

$$P_i = -\frac{\partial W}{\partial Q_i} \quad (6.60)$$

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} \quad (6.61)$$

によって生成される変換は正準変換となる。



正準変換の例 2 以前考えた問題をもう一度取り上げよう。質量 m の質点が二つの同心円（半径 1 と半径 2）の上を滑らかに滑る。二つの質点の間がバネ（バネ定数は k 、自然長は 0）でつながれているものとする。二つの円の中心を原点にとり、 x 軸からの角度 q_1 と q_2 を正準座標、 $p_1 = m\dot{q}_1$ と $p_2 = 4m\dot{q}_2$ を正準運動量とすると、この系のハミルトニアンは以前も書いたが再掲すると、

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{8m} - 2k \cos(q_1 - q_2) \quad (6.62)$$

である。この正準座標 (q_1, q_2, p_1, p_2) を、母関数

$$W(q_1, q_2, Q_1, Q_2) = (q_2 - q_1)Q_1 - (q_1 + q_2)Q_2 \quad (6.63)$$

を使って正準変換してみよう。

$$P_1 = -\frac{\partial W}{\partial Q_1} = q_1 - q_2 \quad (6.64)$$

$$P_2 = -\frac{\partial W}{\partial Q_2} = q_1 + q_2 \quad (6.65)$$

$$p_1 = \frac{\partial W}{\partial p_1} = -(Q_1 + Q_2) \quad (6.66)$$

$$p_2 = \frac{\partial W}{\partial p_2} = Q_1 - Q_2 \quad (6.67)$$

から、これを整理すると

$$Q_1 = Q_1(q, p) = -\frac{1}{2}(p_1 - p_2) \quad (6.68)$$

$$Q_2 = Q_2(q, p) = -\frac{1}{2}(p_1 + p_2) \quad (6.69)$$

$$P_1 = P_1(q, p) = q_1 - q_2 \quad (6.70)$$

$$P_2 = P_2(q, p) = q_1 + q_2 \quad (6.71)$$

あるいは

$$q_1 = q_1(Q, P) = \frac{1}{2}(P_1 + P_2) \quad (6.72)$$

$$q_2 = q_2(Q, P) = -\frac{1}{2}(P_1 - P_2) \quad (6.73)$$

$$p_1 = p_1(Q, P) = -(Q_1 + Q_2) \quad (6.74)$$

$$p_2 = p_2(Q, P) = Q_1 - Q_2 \quad (6.75)$$

である。新しい正準座標 (Q_1, Q_2, P_1, P_2) で書いたハミルトニアンは式 (6.62) より

$$H(q(Q, P), p(Q, P)) = \cdots = \frac{5}{8m}(Q_1^2 + Q_2^2) + \frac{1}{2m}Q_1Q_2 - 2k \cos P_1$$

つまり

$$H(Q, P) = \frac{5}{8m}(Q_1^2 + Q_2^2) + \frac{1}{2m}Q_1Q_2 - 2k \cos P_1 \quad (6.76)$$

である。このハミルトニアンから正準方程式を作ると、

$$\dot{Q}_1 = 2k \sin P_1 \quad (6.77)$$

$$\dot{Q}_2 = 0 \quad (6.78)$$

$$\dot{P}_1 = -\frac{5}{4m}Q_1 - \frac{1}{2m}Q_2 \quad (6.79)$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{5}{4m}Q_2 - \frac{1}{2m}Q_1 \quad (6.80)$$

式 (6.78) から

$$Q_2 = c \quad (\text{定数}) \quad (6.81)$$

であることがわかるので、これを使えば解くべき正準方程式は、

$$\dot{Q}_1 = 2k \sin P_1 \quad (6.82)$$

$$\dot{P}_1 = -\frac{5}{4m}Q_1 - \frac{c}{2m} \quad (6.83)$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{5c}{4m} - \frac{1}{2m}Q_1 \quad (6.84)$$

と 1 つ減る。特に初期条件で $c = 0$ の場合には

$$\dot{Q}_1 = 2k \sin P_1 \quad (6.85)$$

$$\dot{P}_1 = -\frac{5}{4m}Q_1 \quad (6.86)$$

$$\dot{P}_2 = -\frac{1}{2m}Q_1 \quad (6.87)$$

と簡単になる。

例によってこの常微分方程式系を数値積分プログラムに渡すことは簡単だが、数値的に解かなくてもわかること、あるいは数値的に解くだけでは分からないことがある。

上の式 (6.85) と (6.86) は、振り子の運動方程式と同じである。 P_1 が振り子のふれ角に対応する。

つまり、 $P_1 = 0$ が安定な平衡点であり、初期速度が小さければそこで微小振動（調和振動）をする。初期速度が大きければ振幅が大きな振動となり、ある値よりも大きな初期速度を与えると、同じ方向に回る回転運動が周期的に続く。

$c = Q_2 = 0$ は、(6.69) より $p_1 + p_2 = 0$ を意味する。初期条件でこの和がちょうどゼロになるような初期速度 $\dot{q}_1$ と $\dot{q}_2$ を与えると、この $p_1 + p_2$ はゼロの値を保ち続ける。つまり保存する。

$Q_2 = 0$ という特殊な初期条件でなくても、この系では $Q_2 \propto p_1 + p_2$ は常に一定である [式 (6.81)]。($p_1 + p_2$ は 2 つの質点の角運動量の和である。) ハミルトニアンが (6.62) として与えられたこの系に対して、正準方程式を立て、それを数値的に積分して可視化することは容易であるが、その可視化画像をみても、 $p_1 + p_2$ が厳密に保存することを見抜くのは難しいであろう。一方、正準変換したハミルトニアン (6.76) には P_2 が含まれないことから、 Q_2 が保存量であること（つまり $\dot{Q}_2 = 0$ ）が一目でわかる。数値積分は決して万能ではない。理論と数値計算を相補的に組み合わせることが大事である。

6.6 シンプレクティック条件

N 自由度系を考える。ある時刻の状態を $2N$ 次元の相空間中の点 $\mathbf{r}$ で表す。

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_N \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_N \end{pmatrix}, \quad \text{つまり} \quad r_i = \begin{cases} q_i & (1 \leq i \leq N) \\ p_{i-N} & (N < i \leq 2N) \end{cases}$$

すると、ハミルトニアンを H とすれば、正準方程式は以下のように一行で書ける。

シンプレクティック記法による正準方程式

$$\dot{r}_i = \sum_{j=1}^{2N} J_{ij} \frac{\partial H}{\partial r_j} \quad (6.88)$$

ここで行列 $\mathbf{J}$ は

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (6.89)$$

と定義される。 $\mathbf{0}$ と $\mathbf{1}$ は N 行 N 列のゼロ行列と単位行列である。方程式 (6.88) を正準方程式のシンプレクティック記法と言う。

$\mathbf{J}$ が満たす基本的な関係をまとめておこう。以下 $\mathbf{J}^T$ は $\mathbf{J}$ の転置行列、 $\mathbf{J}^{-1}$ は $\mathbf{J}$ の逆行列である。

$$\mathbf{J}^T = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (6.90)$$

$$\mathbf{J}\mathbf{J}^T = \mathbf{J}^T\mathbf{J} = \mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (6.91)$$

$$\mathbf{J}^T = -\mathbf{J} = \mathbf{J}^{-1} \quad (6.92)$$

$$\mathbf{J}^2 = -\mathbf{1} \quad (6.93)$$

$$|\mathbf{J}| = 1 \quad (6.94)$$

さて、 $\mathbf{r}$ があらわす力学状態を、正準変換した別の座標 $\mathbf{R}$ を使って書こう。つまり

$$R_i = \begin{cases} Q_i & (1 \leq i \leq N) \\ P_{i-N} & (N < i \leq 2N) \end{cases}$$

である。この座標系での正準方程式は

$$\dot{R}_i = \sum_{j=1}^{2N} J_{ij} \frac{\partial H}{\partial R_j} \quad (6.95)$$

と書ける。

式 (6.95) の左辺を書き換えると

$$\dot{R}_i = \sum_{m=1}^{2N} \frac{\partial R_i}{\partial r_m} \dot{r}_m \quad (6.96)$$

$$= \sum_{m=1}^{2N} \sum_{k=1}^{2N} \frac{\partial R_i}{\partial r_m} J_{mk} \frac{\partial H}{\partial r_k} \quad [(6.88) \text{ より}] \quad (6.97)$$

$$= \sum_{m=1}^{2N} \sum_{k=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} \frac{\partial R_i}{\partial r_m} J_{mk} \frac{\partial R_j}{\partial r_k} \frac{\partial H}{\partial R_j} \quad (6.98)$$

これと式 (6.95) の右辺を比較すれば

$$\mathbf{M} \mathbf{J} \mathbf{M}^T = \mathbf{J} \quad (6.99)$$

を得る。ここで行列 $\mathbf{M}$ は

$$M_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial r_j} \quad (6.100)$$

$\mathbf{M}^T$ はその転置行列

$$M_{ij}^T = \frac{\partial R_j}{\partial r_i} \quad (6.101)$$

である。 $\mathbf{M}$ はシンプレクティック行列と呼ばれる。

式 (6.93) と式 (6.99) より

$$\mathbf{M}^T \mathbf{J} \mathbf{M} = \mathbf{J} \quad (6.102)$$

である。

式 (6.99) またはそれと同等な (6.102) は正準変換に対する必要十分条件であり、シンプレクティック条件と呼ばれる。

6.7 ポアッソン括弧

ここでポアッソン括弧とよばれる

$$\{f, g\}_{q,p} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial g}{\partial q_j} \frac{\partial f}{\partial p_j} \right) \quad (6.103)$$

を定義しよう。ここで f と g は相空間の関数である。ポアッソン括弧を行列 $\mathbf{J}$ を使って表現すると

$$\{f, g\}_{q,p} = \sum_{i=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial r_j} \quad (6.104)$$

である。後で示すようにポアッソン括弧はどの正準座標をとっても同じ値になるので以下では下付添え字の $_{q,p}$ を省略する。

ポアッソン括弧

$$\{f, g\} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial g}{\partial q_j} \frac{\partial f}{\partial p_j} \right) \quad (6.105)$$

式 (6.99) は $2N \times 2N$ 個の方程式を表し、その式の右辺は 0 または 1 または -1 の値を持つ。 $\mathbf{M}$ と $\mathbf{J}$ の定義に従ってこの $4N^2$ 個の式を具体的に書くと、ポアッソン括弧を使って次のような 4 つのグループに分けて書くことができる。

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \quad (6.106)$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \quad (6.107)$$

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \quad (6.108)$$

$$\{P_i, Q_j\} = -\delta_{ij} \quad (6.109)$$

ここでいくつかポアッソン括弧の性質を見てみよう。

定義 (6.103) から

$$\{g, f\} = -\{f, g\} \quad (6.110)$$

$$\{f, f\} = 0 \quad (6.111)$$

は自明である。

c, c_1, c_2 を定数として

$$\{c_1 f_1 + c_2 f_2, g\} = c_1 \{f_1, g\} + c_2 \{f_2, g\} \quad (6.112)$$

$$\{f, c_1 g_1 + c_2 g_2\} = c_1 \{f, g_1\} + c_2 \{f, g_2\} \quad (6.113)$$

$$\{c, g\} = 0 \quad (6.114)$$

$$\{f, c\} = 0 \quad (6.115)$$

が成り立つ。

次の式は $\partial q_i / \partial q_j = \delta_{ij}$ 等の関係を使えば確認できる。

$$\{q_i, f\} = \frac{\partial f}{\partial p_i} \quad (6.116)$$

$$\{p_i, f\} = -\frac{\partial f}{\partial q_i} \quad (6.117)$$

上の二つの式から以下の式が成り立つ。

$$\left\{ q_i, \frac{\partial f}{\partial q_j} \right\} + \left\{ p_j, \frac{\partial f}{\partial p_i} \right\} = 0 \quad (6.118)$$

また、式 (6.116) と (6.117) の特別な場合として、

$$\{q_i, q_j\} = 0 \quad (6.119)$$

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad (6.120)$$

$$\{p_i, p_j\} = 0 \quad (6.121)$$

という関係が得られる。

相空間の 3 つの関数 f, g, h に対するポアッソン括弧にはヤコビ恒等式と呼ばれる以下の式が成り立つ。

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \quad (6.122)$$

この証明には以下のようにするのが最も簡潔であろう。

【以下では繰り返された添え字は 1 から $2N$ までの和をとるものとする。】

式 (6.104) より

$$\begin{aligned} \text{式 (6.122) の左辺} &= \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial g}{\partial r_\ell} J_{\ell m} \frac{\partial h}{\partial r_m} \right) \\ &\quad + \frac{\partial g}{\partial r_\ell} J_{\ell j} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial h}{\partial r_m} J_{mi} \frac{\partial f}{\partial r_i} \right) \\ &\quad + \frac{\partial h}{\partial r_m} J_{mj} \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial f}{\partial r_i} J_{il} \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \right) \\ &= \frac{\partial f}{\partial r_i} \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \underbrace{\frac{\partial^2 h}{\partial r_j \partial r_m} (J_{ij} J_{\ell m} + J_{\ell j} J_{mi})}_{(a)} \\ &\quad + \frac{\partial f}{\partial r_i} \frac{\partial h}{\partial r_m} \frac{\partial^2 g}{\partial r_j \partial r_\ell} (J_{ij} J_{\ell m} + J_{mj} J_{il}) \\ &\quad + \frac{\partial g}{\partial r_\ell} \frac{\partial h}{\partial r_m} \frac{\partial^2 f}{\partial r_j \partial r_i} (J_{\ell j} J_{mi} + J_{mj} J_{il}) \end{aligned} \quad (6.123)$$

ここで

$$\begin{aligned} (a) &= \frac{\partial^2 h}{\partial r_j \partial r_m} J_{ij} J_{\ell m} + \frac{\partial^2 h}{\partial r_m \partial r_j} J_{\ell m} J_{ji} \quad [\text{第 2 項の } j \text{ と } m \text{ を交換}] \\ &= \frac{\partial^2 h}{\partial r_j \partial r_m} J_{ij} J_{\ell m} - \frac{\partial^2 h}{\partial r_m \partial r_j} J_{\ell m} J_{ij} \quad [\text{式 (6.92) より}] \\ &= 0 \end{aligned}$$

式 (6.123) の他の 2 項も同様である。従って (6.122) が成り立つ。

式 (6.109) は (6.110) を考えると冗長なので、結局、座標変換 $(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ から $(Q_1, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N)$ への座標変換が正準変換かどうかは、

ポアッソン括弧による正準変換条件

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \quad (6.124)$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \quad (6.125)$$

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \quad (6.126)$$

の 3 つが成り立っているかどうかを確認すれば良いことがわかる。

ポアッソン括弧を使って正準変換かどうかを判定をする際には

$$Q_i = Q_i(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N), \quad (6.127)$$

$$P_i = P_i(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (6.128)$$

という変換の関数形が分かっているならば、その逆

$$q_i = q_i(Q_1, Q_2, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N), \quad (6.129)$$

$$p_i = p_i(Q_1, Q_2, \dots, Q_N, P_1, \dots, P_N) \quad (6.130)$$

がわかっていなくても判定できることに注意しよう。この点で正準変換の直接条件よりも便利と言える。(とはいえ、ハミルトニアンを変換する際にはいずれにせよ逆変換の表式が必要となるが。)

6.8 ポアッソン括弧を使った運動方程式

ポアッソン括弧を使うと様々な量が簡潔に表現される。たとえばある物理量 f が位相空間の関数で、時間に陽には依存しないとき、

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial f}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) \\ &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) \\ &= \{f, H\} \end{aligned} \quad (6.131)$$

である。 f が時間に陽に依存する場合は

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} \quad (6.132)$$

となる。

式 (6.131) の f に (時間に陽に依存しない) ハミルトニアン H を代入すると、

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} = 0 \quad [\text{式 (6.111) より}] \quad (6.133)$$

これはエネルギー保存を意味する。

f と g がどちらも保存量であれば、ポアッソン括弧 $\{f, g\}$ も保存量である。なぜなら定義式 (6.103) より

$$\frac{d}{dt} \{f, g\} = \{\dot{f}, g\} + \{f, \dot{g}\} \quad (6.134)$$

なので、 $\dot{f} = \dot{g} = 0$ の時

$$\frac{d}{dt} \{f, g\} = \{0, g\} + \{f, 0\} = 0 \quad (6.135)$$

だからである。この式はヤコビ恒等式 (6.122) を使っても証明できる。

式 (6.131) において $f = q_i$ と $f = p_i$ の場合には

ポアッソン括弧による正準方程式

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} \quad (6.136)$$

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} \quad (6.137)$$

を得る。これはもとの正準方程式をわざわざポアッソン括弧で書き直したにすぎないが、こう書くと 2 つの式がどちらも同じ形式になる。このことが次回紹介するシンプレクティック積分法において重要になる。

6.9 ポアッソン括弧の正準変換不変性

式 (6.131) の右辺は正準座標 $(q_1, \dots, p_N)$ の空間偏微分であるが、左辺は時間微分だけなので、この量 df/dt は、正準変換した別の座標 $(Q_1, \dots, P_N)$ でみても同じはずである。つまり、

$$\{f(q, p), H(q, p)\}_{q,p} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial f}{\partial p_j} \right) \quad (6.138)$$

と

$$\{f(Q, P), H(Q, P)\}_{Q,P} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial Q_j} \frac{\partial H}{\partial P_j} - \frac{\partial H}{\partial Q_j} \frac{\partial f}{\partial P_j} \right) \quad (6.139)$$

は同じ

$$\{f, H\}_{q,p} = \{f, H\}_{Q,P} \quad (6.140)$$

である。

上の関係は一方が H であるときに限らず、もっと一般に任意の関数 f と g に対して

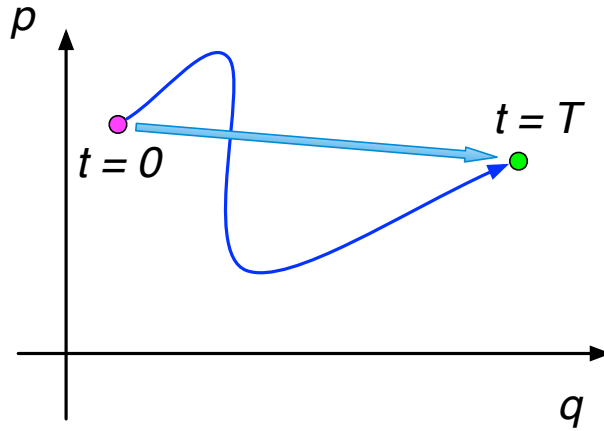
$$\{f, g\}_{q,p} = \{f, g\}_{Q,P} \quad (6.141)$$

であることが以下のようにして証明できる。式 (6.104) より

$$\begin{aligned}
 \{f, g\}_{q,p} &= \sum_{i=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} \frac{\partial f}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial r_j} \\
 &= \sum_{i=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} \sum_{I=1}^{2N} \sum_{J=1}^{2N} \left(\frac{\partial f}{\partial R_I} \frac{\partial R_I}{\partial r_i} \right) J_{ij} \left(\frac{\partial g}{\partial R_J} \frac{\partial R_J}{\partial r_j} \right) \\
 &= \sum_{i=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} \sum_{I=1}^{2N} \sum_{J=1}^{2N} \frac{\partial f}{\partial R_I} \left(\frac{\partial R_I}{\partial r_i} J_{ij} \frac{\partial R_J}{\partial r_j} \right) \frac{\partial g}{\partial R_J} \\
 &= \sum_{I=1}^{2N} \sum_{J=1}^{2N} \frac{\partial f}{\partial R_I} J_{IJ} \frac{\partial g}{\partial R_J} \quad [\text{式 (6.99) より}] \\
 &= \{f, g\}_{Q,P}
 \end{aligned} \tag{6.142}$$

つまりポアソン括弧で書かれた全ての量は正準変換に対して不変である。だからポアソン括弧に微分をとる座標を示す添字をいちいちつける必要はない。

6.10 正準変換としての運動



ある時刻 $t = 0$ で系の状態が $\mathbf{r} = (q_1(0), q_2(0), \dots, p_N(0))$ にあるとする。時間が経過して $t = T$ になったときの状態は相空間中の別の点 $\mathbf{R} = (q_1(T), q_2(T), \dots, p_N(T))$ に移る。これを座標

$$\mathbf{r} = (q_1, q_2, \dots, p_N) = (q_1(0), q_2(0), \dots, p_N(0)) \tag{6.143}$$

から座標

$$\mathbf{R} = (Q_1, Q_2, \dots, Q_N) = (q_1(T), q_2(T), \dots, p_N(T)) \tag{6.144}$$

への座標変換 $\mathbf{r} \Rightarrow \mathbf{R}$ と考えてみよう。運動で結びついているので明らかに $\mathbf{r}$ と $\mathbf{R}$ は全単射である。この変換は正準変換であろうか？ポアッソン括弧による判定条件 (6.124)–(6.126) を使って正準変換であるかどうかを判定しよう。時間の関数 $\{q_i(t), p_j(t)\}$ をテーラー展開すると、

$$\{Q_i, P_j\} = \{q_i(T), p(T)\} \quad (6.145)$$

$$= \{q_i, p_j\} \Big|_{t=0} + \frac{T}{1} \frac{d}{dt} \{q_i, p_j\} \Big|_{t=0} + \frac{T^2}{2!} \frac{d^2}{dt^2} \{q_i, p_j\} \Big|_{t=0} \quad (6.146)$$

$$+ \frac{T^3}{3!} \frac{d^3}{dt^3} \{q_i, p_j\} \Big|_{t=0} + \cdots \quad (6.147)$$

式 (6.131) の $f = \{q_i, p_j\}$ の場合と考えれば、右辺第 2 項は、式 (6.120) を使って、

$$\frac{d}{dt} \{q_i(t), p_j(t)\} \Big|_{t=0} = \{\{q_i(t), p_j(t)\}, H\} \Big|_{t=0} = \{\{q_i, p_j\}, H\} = \{\delta_{ij}, H\} = 0 \quad (6.148)$$

ここで最後の等式では式 (6.114) を使った。同様に

$$\frac{d^2}{dt^2} \{q_i, p_j\} \Big|_{t=0} = \{\{\{q_i, p_j\}, H\}, H\} = \{0, H\} = 0 \quad (6.149)$$

$$\frac{d^3}{dt^3} \{q_i, p_j\} \Big|_{t=0} = \{\{\{\{q_i, p_j\}, H\}, H\}, H\} = 0 \quad (6.150)$$

等が成り立つ。従って

$$\{Q_i, P_j\} = \{q_i(0), p_j(0)\} = \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad (6.151)$$

である。同様に

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \quad (6.152)$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \quad (6.153)$$

が確認できる。従って $\mathbf{r} \Rightarrow \mathbf{R}$ の変換は正準変換であることが示された。運動は正準変換なのである。

6.11 無限小正準変換

ある正準変換

$$\begin{pmatrix} q_i \\ p_i \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} Q_i \\ P_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_i \\ p_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta q_i \\ \delta p_i \end{pmatrix} \quad (6.154)$$

が恒等変換にほとんど等しい場合を考える。恒等変換からの差は小さく、その 2 次以上の項を無視する。このような変換を無限小正準変換という。

ϵ を微小量とすると、ある関数 $G(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$ から次のように定義される変換

$$\delta q_i = \epsilon \{q_i, G\} = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} \quad (6.155)$$

$$\delta p_i = \epsilon \{p_i, G\} = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \quad (6.156)$$

は正準変換である。 G をこの無限小正準変換の生成子という。

変換 (6.155), (6.156) が正準変換であることは条件 (6.124)–(6.126) を使って以下のようにして確認できる。まず式 (6.124) から、

$$\{Q_i, Q_j\} = \{q_i + \delta q_i, q_j + \delta q_j\} \quad (6.157)$$

$$= \{q_i, q_j\} + \{q_i, \delta q_j\} + \{\delta q_i, q_j\} + \{\delta q_i, \delta q_j\} \quad (6.158)$$

$$= 0 + \{q_i, \delta q_j\} + \{\delta q_i, q_j\} + 0 \quad (6.159)$$

最初の項は式 (6.119) よりゼロ、最後の項は 2 次の微量なのでゼロになる。式 (6.155) より

$$\{q_i, \delta q_j\} + \{\delta q_i, q_j\} = \epsilon \{q_i, \{q_j, G\}\} + \epsilon \{\{q_i, G\}, q_j\} \quad (6.160)$$

$$= \epsilon [\{q_i, \{q_j, G\}\} + \{q_j, \{G, q_i\}\}] \quad (6.161)$$

$$= -\epsilon \{G, \{q_i, q_j\}\} \quad [\text{ヤコビ恒等式 (6.122) より}] \quad (6.162)$$

$$= 0 \quad [\text{式 (6.119) より}] \quad (6.163)$$

つまり

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \quad (6.164)$$

である。同様に式 (6.125) と、式 (6.126) も確認できる。

G で生成される無限小正準変換で、一般に物理量 $f(q_1, q_2, \dots, p_N)$ は

$$\delta f = \epsilon \{f, G\} \quad (6.165)$$

だけ変化する。なぜならテーラー展開により、

$$\delta f = f(q_1 + \delta q_1, q_2 + \delta q_2, \dots, p_N + \delta p_N) - f(q_1, q_2, \dots, p_N) \quad (6.166)$$

$$= \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \delta q_j + \frac{\partial f}{\partial p_j} \delta p_j \right) \quad (6.167)$$

$$= \epsilon \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial G}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial G}{\partial q_j} \right) \quad (6.168)$$

$$= \epsilon \{f, G\} \quad (6.169)$$

だからである。

生成子 G の簡単な例は、ある k について

$$G = p_k \quad (6.170)$$

である。このとき

$$q_i \Rightarrow q_i + \delta q_i = q_i + \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i} = q_i + \epsilon \delta_{ik} \quad (6.171)$$

$$p_i \Rightarrow p_i + \delta p_i = p_i \quad (6.172)$$

これは k 番目の正準座標 q_k だけを ϵ ほどずらす無限小正準変換である。

6.12 不変性と保存則

ポアッソン括弧の威力の一つは対称性と保存則の関係がほとんど自明になる点である。ある無限小正準変換に対してハミルトニアン H が不変のとき、その生成子 G は保存する。なぜならこのとき、式 (6.165) より、この変換によるハミルトニアンの変化量は

$$\delta H = \epsilon \{H, G\} = 0 \quad (6.173)$$

で、一方、式 (6.131) より

$$\frac{dG}{dt} = \{G, H\} = -\{H, G\} \quad (6.174)$$

なので

$$\frac{dG}{dt} = 0 \quad (6.175)$$

である。

一般に、ある変換に対してハミルトニアンが不変なとき、その変換に対してハミルトニアンは対称であるという。対称性という表現を使えば、

対称性と保存則

生成子が G の無限小正準変換についてハミルトニアンが対称ならば G は保存量である。

といえる。

例えば、ハミルトニアン H の中で q_k があらわれない（つまり循環座標）であれば、無限小正準変換 (6.171) と (6.172) で H は当然不変なので、この変換の生成子 (6.170) は保存する。つまり

$$\dot{p}_k = 0 \quad (6.176)$$

である。

系の平行移動と運動量 N 自由度の系全体をカーテシアン座標系 (X_1, X_2, X_3) を設定して観察する。系全体を座標軸 X_α の方向に微小な距離 ϵ だけ移動させても（原点を $-\epsilon$ だけ平行移動しても）運動の記述、つまり運動方程式が変わらないとする。平行移動は点変換なので正準変換である（第 6.3 章参照）。このときハミル

トニアンはこの無限小正準変換について対称としてよい。この変換の生成子（＝保存量）は全運動量

$$G_\alpha(q_1, q_2, \dots, p_N) = \sum_{j=1}^N p_j \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \quad (6.177)$$

である。一般化座標は

$$\delta q_i = \epsilon \{q_i, G\} = \epsilon \frac{\partial q_i}{\partial X_\alpha} \quad (6.178)$$

という変換を受ける*。この平行移動変換 [式 (4.65)] と保存則の関係はラグランジュ形式 (p.67) でも見た。

系の回転と角運動量 ある単位ベクトル $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ を軸として系全体を回転して観察しても運動方程式が変わらない場合、 $\boldsymbol{\omega}$ を軸とし、微小な角度 ϵ だけ系を回転する無限小正準変換に対してハミルトニアンは対称である。この対称性に対応する保存量は、

$$G(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \sum_{j=1}^N \omega_\beta \epsilon_{\beta\gamma\alpha} X_\gamma(q_j) p_j \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \quad (6.179)$$

である。これは $\boldsymbol{\omega}$ を軸とする全角運動量である。この保存量から生成される一般化座標の変換は既に式 (4.77) で見たが、

$$\delta q_i = \epsilon \{q_i, G\} = \epsilon \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \omega_\beta \epsilon_{\beta\gamma\alpha} X_\gamma(q_i) \frac{\partial q_i}{\partial X_\alpha} \quad (6.180)$$

である。

式 (4.72) で定義した運動量

$$Y_\alpha^j = p_j \frac{\partial q_j}{\partial X_\alpha} \quad (6.181)$$

を使って書き換えると、

$$G(\boldsymbol{\omega}) = \boldsymbol{\omega} \cdot \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{X}(q_j) \times \mathbf{Y}^j \right) \quad (6.182)$$

系に特別な方向がなければ任意の回転軸 $\boldsymbol{\omega}$ に対して $G(\boldsymbol{\omega})$ が保存するので、式 (6.182) より、全角運動量保存則

$$\sum_{j=1}^N \mathbf{X}(q_j) \times \mathbf{y}^j \quad (6.183)$$

を得る。

* p_i は式 (6.156) に従って複雑な変換を受けるが、具体的な形は今関係ない。最終的なハミルトニアン H が変わらないことが分かっているという前提が重要である。

6.13 数値積分と正準変換

数値積分法を使って力学の問題を解く場合を考える。正準方程式

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (6.184)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (6.185)$$

を陽的 1 次オイラー法で解いたとしよう。

ある時刻 $t = t_n$ にこの系が $\mathbf{r} = (q_1, q_2, \dots, p_N) = (q_1^n, q_2^n, \dots, p_N^n)$ にいたとし、時間刻み Δt で 1 ステップだけ数値積分すると、

$$Q_i = q_i(t + \Delta t) = q_i^{n+1} = q_i^n + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p_i}(\mathbf{r}^n) \quad (6.186)$$

$$P_i = p_i(t + \Delta t) = p_i^{n+1} = p_i^n - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q_i}(\mathbf{r}^n) \quad (6.187)$$

従って新しい時刻 $t = t^{n+1} = t^n + \Delta t$ における状態は $\mathbf{R} = (Q_1, Q_2, \dots, P_N) = (q_1^{n+1}, q_2^{n+1}, \dots, p_N^{n+1})$ となる。

数値積分によって相空間上の点 $\mathbf{r}$ が $\mathbf{R}$ に移されたわけであるが、これは正準変換になっているであろうか？ポアッソン括弧を使って確認してみよう。

$$\begin{aligned} \{Q_i, P_j\} &= \left\{ q_i + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p_i}, p_j - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} \\ &= \{q_i, p_j\} - \Delta t \left\{ q_i, \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} + \Delta t \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_i}, p_j \right\} - \Delta t^2 \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_i}, \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} \end{aligned}$$

ここで右辺第 2 項と第 3 項は式 (6.118) からキャンセルするので、結局

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} - \Delta t^2 \left\{ \frac{\partial H}{\partial p_i}, \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\} \quad (6.188)$$

正準変換であればこの式の右辺は δ_{ij} のはずであるが、右辺第 2 項は一般にはゼロではない。

上の式は、一ステップで $O(\Delta t^2)$ の誤差が生じることを意味する。たとえば $t = 0$ から $t = T$ まで数値積分すると、全部で $T/\Delta t$ 回積分するので、誤差は最大 $O(\Delta t^2) \times (T/\Delta t) = O(\Delta t)$ だけ蓄積する。

ある力学の系を陽的 1 次オイラー法によって数値的に積分して得られた解は、本来の満たすべき「運動は正準変換である」という重要な性質を破ってしまっていることになる。

6.14 練習問題

正準座標 (q, p) の変換 $(q, p) \Rightarrow (Q, P) = (q \cos \phi + p \sin \phi, -q \sin \phi + p \cos \phi)$ は正準変換か (ϕ は定数) ?

【ヒント】正準変換の直接条件 (6.17)–(6.20) をすべて満たしていれば正準変換である。あるいは、ポアソン括弧による判定条件 (6.124)–(6.126) で確認してもよい。

解答例 1 正準変換の直接条件による証明。

$$(Q, P) = (q \cos \phi + p \sin \phi, -q \sin \phi + p \cos \phi) \quad (6.189)$$

の逆変換は

$$(q, p) = (Q \cos \phi - P \sin \phi, Q \sin \phi + P \cos \phi) \quad (6.190)$$

である。微分して

$$(i) \quad \frac{\partial Q}{\partial q} = \cos \phi$$

$$(ii) \quad \frac{\partial p}{\partial P} = \cos \phi$$

従って式 (6.17) が成り立つ。他の式 (6.18)–(6.20) も同様。

解答例 2 ポアソン括弧による証明。式 (6.111) より

$$\{Q, Q\} = \{P, P\} = 0 \quad (6.191)$$

は計算するまでもない。次に

$$\{Q, P\} = \frac{\partial Q}{\partial q} \frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial q} \frac{\partial Q}{\partial p} \quad (6.192)$$

$$= (\cos \phi) (\cos \phi) - (-\sin \phi) (\sin \phi) \quad (6.193)$$

$$= 1 \quad (6.194)$$

自由度 $N = 1$ のときの条件 (6.124)–(6.126) が成り立つので、これは正準変換である。

Chapter 7

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

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

で記述される系の運動方程式が

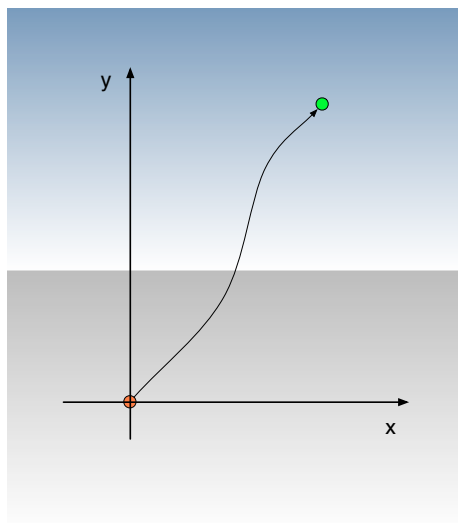
$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

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。

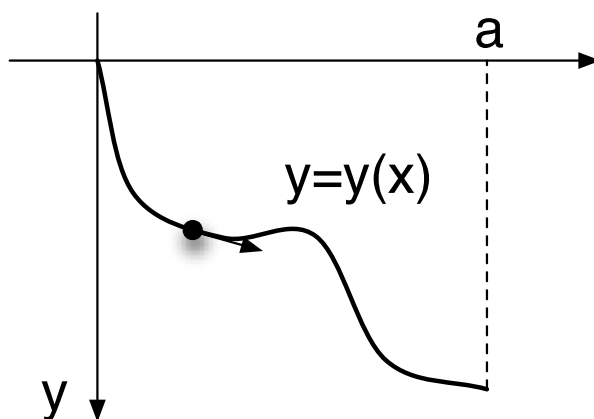
7.1 汎関数と変分法

実関数は「実数に実数が対応する」写像であるのに対して、「関数に実数が対応する」写像が汎関数である。

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だろうか？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 $V_1 \neq V_2$ の場合はどうであろうか？



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

$$\frac{m}{2} \dot{s}^2 - mgy(s) = 0 \quad (7.1)$$

である。従って

$$\dot{s} = \sqrt{2gy(s)} \quad (7.2)$$

微小な距離 Δs を通過するのにかかる微小時間を Δt とすると、

$$\Delta t = \frac{\Delta s}{\dot{s}} \quad (7.3)$$

$$= \frac{\Delta s}{\sqrt{2gy}} \quad (7.4)$$

$$= \frac{\sqrt{1+(y')^2}}{\sqrt{2gy}} \Delta x \quad (7.5)$$

従って、

$$T = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^a \frac{\sqrt{1+(y')^2}}{\sqrt{y}} dx \quad (7.6)$$

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

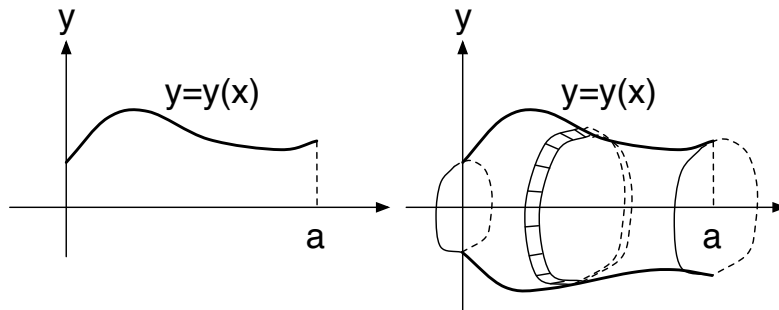
$$T(y, y') = \int_0^a \frac{\sqrt{1+(y')^2}}{\sqrt{y}} dx \quad (7.7)$$

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。

例 3：極小曲面 曲線 $y = y(x)$ ($0 \leq x \leq a$) 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

$$S = 2\pi \int_0^a y(x) \sqrt{1 + (y'(x))^2} dx \quad (7.8)$$

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

$$S(y, y') = \int_0^a y(x) \sqrt{1 + (y'(x))^2} dx \quad (7.9)$$

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。)

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 (7.7) や (7.9) を最小にする関数形 $y = y(x)$ を求めることができる。

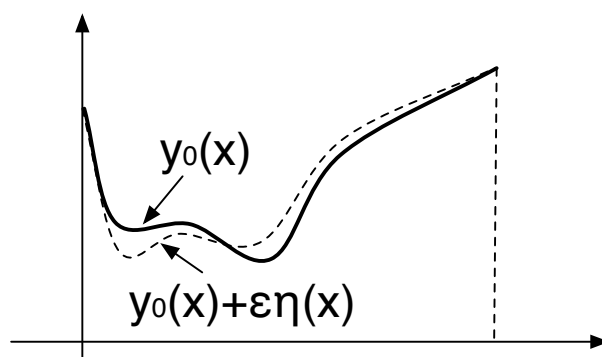
まず微分法の復習をしよう。関数 $y = y(x)$ について $x = x_0$ でテーラー展開すると

$$y(x_0 + \epsilon) = y(x_0) + \epsilon \Delta y(x_0) + O(\epsilon^2) \quad (7.10)$$

ここで

$$\Delta y(x_0) = y'(x_0) \quad (7.11)$$

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

でも汎関数 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

$$\eta(a) = \eta(b) = 0 \quad (7.12)$$

を満たす任意の関数とする。当然 $y'(x) = y'_0(x) + \epsilon\eta'(x)$ である。するとテーラー展開から

$$I(y_0 + \epsilon\eta, y'_0 + \epsilon\eta') = I(y_0, y'_0) + \epsilon\delta I(y_0, y'_0) + O(\epsilon^2) \quad (7.13)$$

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。

7.2 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、

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}) dt \quad (7.14)$$

を定義する。この量は作用と呼ばれる。

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。

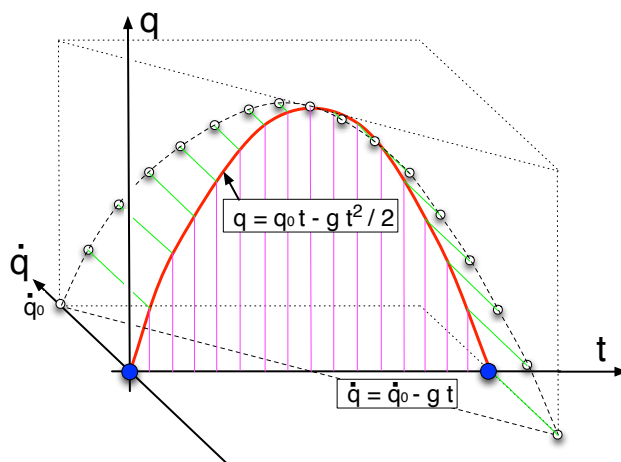
ハミルトンの原理（最小作用の原理）

運動は作用の極値をとる。

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

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N, t) dt \quad (7.15)$$

は極値をとる。



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、実際の質点をとる運動（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

$$\delta \int_0^{t_1} \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - mgq \right) dt = 0 \quad (7.16)$$

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

$$\delta q(t) = \epsilon \eta(t) \quad (7.17)$$

だけ、つまり

$$q(t) \rightarrow q'(t) = q(t) + \epsilon \eta(t) \quad (7.18)$$

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

$$\delta \dot{q}(t) = \epsilon \dot{\eta}(t) \quad (7.19)$$

である。

ラグランジュの運動方程式の導出 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

$$q^k = q(t_k), \quad t_k = t_a + k \Delta t \quad (7.20)$$

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

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}) dt = \sum_{k=0}^{K-1} S_k \quad (7.21)$$

$$S_k = \int_{t_k}^{t_{k+1}} L(q, \dot{q}) dt \quad (7.22)$$

ここで

$$\dot{q}_k = \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t} \quad (7.23)$$

と近似すれば

$$S_k = L(q^k, \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t}) \Delta t + O(\Delta t^2) \quad (7.24)$$

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。

$$\frac{\partial S}{\partial q^k} = 0 \quad (7.25)$$

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。

$$\frac{\partial S_k}{\partial q^k} = \frac{\partial L}{\partial q}(q^k, \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t}) \Delta t - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q^k, \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t}) \quad (7.26)$$

$$\frac{\partial S_{k-1}}{\partial q^k} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q^{k-1}, \frac{q^k - q^{k-1}}{\Delta t}) \quad (7.27)$$

なので、式 (7.25) は

$$\frac{\partial L}{\partial q}(q^k, \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t}) - \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q^k, \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t}) - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q^{k-1}, \frac{q^k - q^{k-1}}{\Delta t}) \right) = 0 \quad (7.28)$$

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

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0 \quad (7.29)$$

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。

7.3 拡張されたハミルトンの原理

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

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}) dt \quad (7.30)$$

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

$$L = p\dot{q} - H \quad (7.31)$$

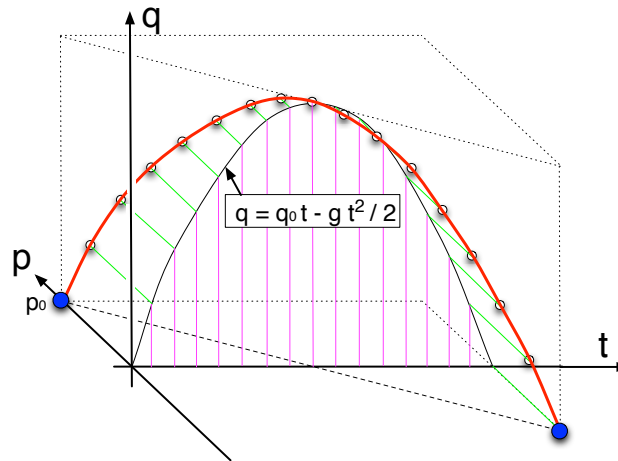
を思い出して、 $q(t)$ と $p(t)$ の汎関数

$$\hat{S} = \int_{t_0}^{t_1} \{p\dot{q} - H(q, p)\} dt \quad (7.32)$$

を考える。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。次の法則が成り立つ。これは拡張されたハミルトンの原理と呼ばれる。

拡張されたハミルトンの原理

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。

式 (7.21) と同様に汎関数 (7.32) を次のように離散化する。

$$\hat{S} = \sum_{k=0}^{K-1} \hat{S}_k \quad (7.33)$$

$$\hat{S}_k = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \{p\dot{q} - H(q, p)\} dt \quad (7.34)$$

この $\hat{S}_k$ の積分を次のように近似する。

$$\hat{S}_k = (p^k \dot{q}^k - H(q^k, p^k)) \Delta t \quad (7.35)$$

ここで

$$\dot{q}^k = \frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t} \quad (7.36)$$

とすると

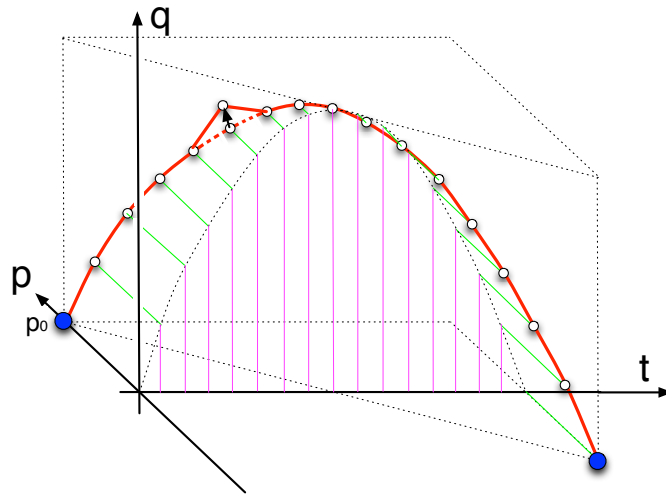
$$\hat{S}_k = p^k (q^{k+1} - q^k) - H(q^k, p^k) \Delta t \quad (7.37)$$

である。拡張されたハミルトンの原理から、特定の k に対して

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial q^k} = 0 \quad (7.38)$$

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial p^k} = 0 \quad (7.39)$$

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 (7.38) から

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{S}}{\partial q^k} &= \frac{\partial \hat{S}_k}{\partial q^k} + \frac{\partial \hat{S}_{k-1}}{\partial q^k} \\ &= -p^k - \frac{\partial H}{\partial q}(q^k, p^k) \Delta t + p^{k-1} - \frac{\partial H}{\partial q}(q^{k-1}, p^{k-1}) \Delta t \\ &= 0\end{aligned}\tag{7.40}$$

$\Delta t = 0$ の極限では

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}\tag{7.41}$$

を得る。

また、 p^k に依存するのは $\hat{S}_k$ だけなので、式 (7.39) は

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{S}}{\partial p^k} &= (q^{k+1} - q^k) - \frac{\partial H}{\partial p}(q^k, p^k) \Delta t \\ &= 0\end{aligned}\tag{7.42}$$

これから $\Delta t = 0$ の極限では

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}\tag{7.43}$$

を得る。

式 (7.41) と (7.39) は正準方程式に他ならない。こうして拡張されたハミルトンの原理から正準方程式が導出された。

7.4 シンプレクティック積分法

上の式 (7.34) 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

$$S_k = p_k (q^{k+1} - q^k) - H(q^{k+1}, p^k) \Delta t\tag{7.44}$$

となる。このとき、拡張されたハミルトンの原理から得られる式 (7.38) と (7.39) から以下を得る：

$$\frac{\partial S}{\partial q^k} = \frac{\partial S_k}{\partial q^k} + \frac{\partial S_{k-1}}{\partial q^k} = -p^k + p^{k-1} - \frac{\partial H}{\partial q}(q^k, p^{k-1}) \Delta t = 0\tag{7.45}$$

$$\frac{\partial S}{\partial p^k} = \frac{\partial S_k}{\partial p^k} = (q^{k+1} - q^k) - \frac{\partial H}{\partial p}(q^{k+1}, p^k) \Delta t = 0\tag{7.46}$$

式 (7.45) で $k \rightarrow k+1$ とすると

$$-p^{k+1} + p^k - \frac{\partial H}{\partial q}(q^{k+1}, p^k) \Delta t = 0 \quad (7.47)$$

まとめると

$$q^{k+1} = q^k + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p}(q^{k+1}, p^k) \quad (7.48)$$

$$p^{k+1} = p^k - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q}(q^{k+1}, p^k) \quad (7.49)$$

を得る。

ハミルトニアンが

$$H(q, p) = K(p) + U(q) \quad (7.50)$$

の形になっているときには式 (7.48) と (7.49) は

$$q^{k+1} = q^k + \Delta t \frac{\partial K}{\partial p}(p^k) \quad (7.51)$$

$$p^{k+1} = p^k - \Delta t \frac{\partial U}{\partial q}(q^{k+1}) \quad (7.52)$$

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。

7.5 オイラー＝ラグランジュ方程式

x の関数 $y(x)$ が、固定された端点

$$y_a = y(a), \quad y_b = y(b) \quad (7.53)$$

という条件の下で、汎関数

$$I(y, y', x) = \int_a^b L(y(x), y'(x), x) dx \quad (7.54)$$

が $y = y(x)$ で極値をとる、つまり

$$\delta I = 0 \quad (7.55)$$

が成り立つ条件を求めておこう。

$y(x)$ を

$$y(x) \rightarrow y(x) + \epsilon \eta(x) \quad (7.56)$$

と変えたときの汎関数 I は

$$I(y + \epsilon \eta, y' + \epsilon \eta', x) = \int_a^b L(y(x) + \epsilon \eta(x), y'(x) + \epsilon \eta'(x), x) dx \quad (7.57)$$

である。ここで、被積分関数を ϵ でテーラー展開すると

$$L(y + \epsilon\eta, y' + \epsilon\eta', x) = L(y, y', x) + \frac{\partial L}{\partial y} \epsilon\eta(x) + \frac{\partial L}{\partial y'} \epsilon\eta'(x) + O(\epsilon^2) \quad (7.58)$$

なので

$$\begin{aligned} I(y + \epsilon\eta, y' + \epsilon\eta', x) &= \int_a^b L(y, y', x) dx \\ &\quad + \epsilon \int_a^b \left(\eta(x) \frac{\partial L}{\partial y} dx + \eta'(x) \frac{\partial L}{\partial y'} \right) dx + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (7.59)$$

$$= I(y, y') + \epsilon \delta I(y, y') + O(\epsilon^2) \quad (7.60)$$

つまり、

$$\delta I = \delta \int_a^b L(y, y', x) dx \quad (7.61)$$

$$= \int_a^b \left(\eta(x) \frac{\partial L}{\partial y} + \eta'(x) \frac{\partial L}{\partial y'} \right) dx \quad (7.62)$$

$$(7.63)$$

である。ここで、式 (7.53) より

$$\eta(a) = \eta(b) = 0 \quad (7.64)$$

なので、

$$\int_a^b \eta'(x) \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) dx = \left[\eta(x) \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) \right]_a^b - \int_a^b \eta(x) \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) dx \quad (7.65)$$

の右辺第一項はゼロになる。すると

$$\delta I = \delta \int_a^b L(y, y', x) dx = \int_a^b \left\{ -\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) + \frac{\partial L}{\partial y} \right\} \eta(x) dx = 0 \quad (7.66)$$

となり、任意の $\eta(x)$ に対して変分 $\delta I = 0$ なので

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) - \frac{\partial L}{\partial y} = 0 \quad (7.67)$$

が成り立つ。これをオイラー＝ラグランジュの方程式という。

関数が N 個、 $y_i(x)$ ($i = 1, \dots, N$) あるときも同様である。 $y_i(a)$ と $y_i(b)$ ($i = 1, \dots, N$) が固定という端点条件の下、汎関数

$$I(y_1, y_2, \dots, y_N, y'_1, y'_2, \dots, y'_N) = \int_a^b L(y_1, y_2, \dots, y_N, y'_1, y'_2, \dots, y'_N, x) dx$$

が極値をとる関数 $y_i(x)$ ($i = 1, \dots, N$) は、 N 個のオイラー＝ラグランジュの方程式

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial y_i} = 0 \quad (i = 1, \dots, N)$$

を満たす。

例として、p.129で紹介した極小曲面を求めてみよう。関数 $y = y(x)$ を x 軸の周りに回転してできる側面の面積を S とすると、

$$S(y, y') = \int_0^a y(x) \sqrt{1 + y'(x)^2} dx \quad (7.68)$$

であった。

$$L(y, y') = y \sqrt{1 + y'^2} \quad (7.69)$$

とすれば、極小曲面は、オイラー＝ラグランジュの方程式 (7.67) の解である。実際に計算してみよう。

$$\frac{\partial L}{\partial y} = \sqrt{1 + y'^2} \quad (7.70)$$

$$\frac{\partial L}{\partial y'} = \frac{yy'}{\sqrt{1 + y'^2}} \quad (7.71)$$

ここまでは簡単。次が計算ミスしやすいので注意。

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{yy'}{\sqrt{1 + y'^2}} \right) \quad (7.72)$$

$$= \frac{y'^2 + yy''}{\sqrt{1 + y'^2}} - \dots \quad (7.73)$$

上の結果を、オイラー＝ラグランジュの方程式 (7.67) に代入し整理すると、

$$yy'' = 1 + y'^2 \quad (7.74)$$

となる。なお、この微分方程式の解は双曲線関数 $y = \cosh(x)$ である。

ハミルトンの原理

$$\delta S = \delta \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}), dt = 0 \quad (7.75)$$

と端点条件

$$\delta q(t_a) = \delta q(t_b) = 0 \quad (7.76)$$

から得られるオイラー＝ラグランジュの方程式がラグランジュの運動方程式

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0 \quad (7.77)$$

である。

最後に、相空間中の軌道 $q(t), p(t)$ が極値をとるという拡張ハミルトンの原理

$$\delta S^* = \delta \int_{t_a}^{t_b} (p \dot{q} - H(q, p)) dt = 0 \quad (7.78)$$

と端点条件

$$\delta q(t_a) = \delta q(t_b) = 0 \quad (7.79)$$

から得られるオイラー＝ラグランジュの方程式が正準方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (7.80)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (7.81)$$

になるが、この際、汎関数 S^* には $\dot{p}$ が現れないので、 p に関する端点条件は不要であることに注意しよう。

Chapter 8

シンプレクティック積分法

8.1 シンプレクティック積分法

前の章の最後に、変分原理（修正ハミルトンの原理）からシンプレクティック積分法という積分法が導出されることを見た。この章ではこのスキームについて詳しく調べる。なお、この章では簡単のため、1自由度系について述べる。多自由度系への一般化は容易である。また、ハミルトニアンが運動エネルギー K とポテンシャル U の和

$$H(q, p) = K(p) + U(q) \quad (8.1)$$

で書かれており、 K と U がそれぞれ p と q だけに依存するような場合について主に考察する。

なお、この章ではいくつかのサンプルプログラムと共に、実際の数値計算例（エネルギーの時間変化のグラフなどと共に）を示すが、そこではそれぞれのスキームの特徴を示すために時間刻み幅 Δt をあえて大きくとっていることに注意すること。

正準座標

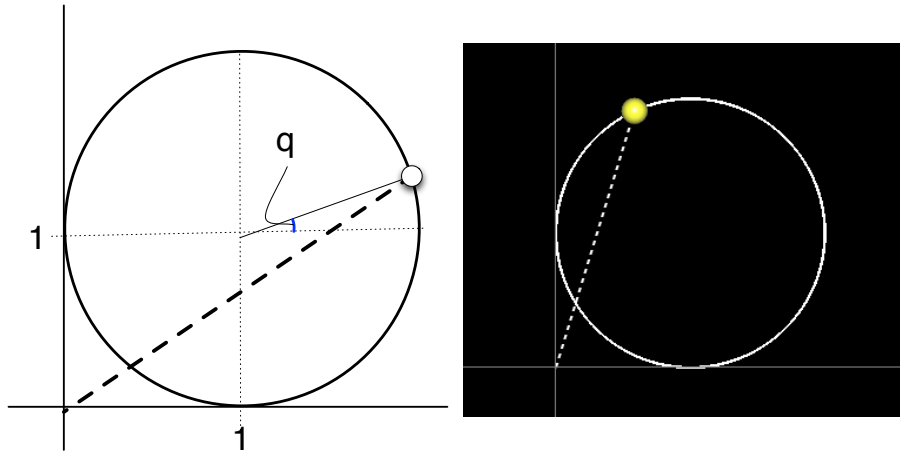
$$\boldsymbol{r} = (q, p)$$

から、別の正準座標

$$\boldsymbol{R} = (Q, P)$$

への変換が正準変換になっているとき、この変換はシンプレクティック条件を満たすことは以前示した。ある変換が正準変換になっていることを、「変換がシンプレクティックである」、あるいは「変換がシンプレクティック性をもつ」と表現する。シンプレクティック性をもつ数値積分法をシンプレクティック積分法という。

例題として、以前も考えたリング上を質点が滑るバネ=質点系をもう一度とりあげよう。 x 軸と y 軸に接する半径 1 の円周上を質量 m の質点が滑らかに滑る。原点と質点はバネ（ばね定数 k 、自然長 0）で結ばれている。図のように x 軸と



なす角度 q とする。ハミルトニアンを再掲すると

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + k(\cos q + \sin q) \quad (8.2)$$

このハミルトニアンは式 (8.1) の形になっていて

$$K(p) = \frac{p^2}{2m} \quad (8.3)$$

$$U(q) = k(\cos q + \sin q) \quad (8.4)$$

である。

8.2 1次陽的シンプレクティック法

前章で確認したように、1次（陽的）オイラー法はシンプレクティックになっていない。そのためにどのような悪影響があるのか、実際にリング上のバネ質点系 (8.2) を、1次オイラー法で解いてみよう。正準方程式を再掲すると、

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m} \quad (8.5)$$

$$\frac{dp}{dt} = k(\sin q - \cos q) \quad (8.6)$$

プログラムの中心部分は以下の通りである：

Listing 8.1: one_ball_on_ring_1stEuler.cpp

```

1
2 void euler1st(struct particle_ *particle, double dt)
3 {
4     //      Hamiltonian

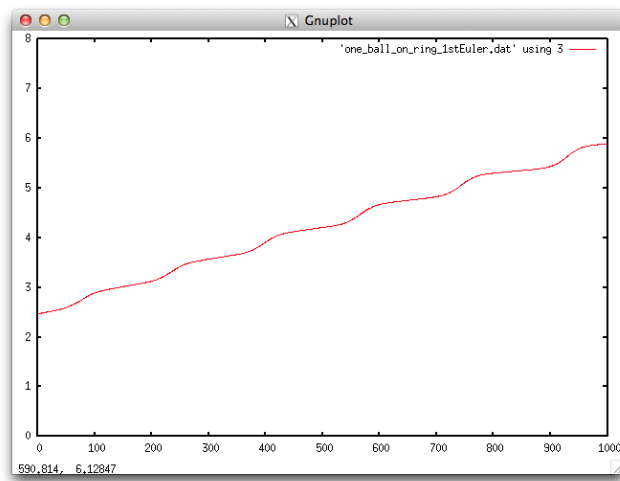
```

```

5      //      H(q,p) = p^2/(2m) + k ( cos q + sin q )
6      //
7      double q = particle->pos[0];
8      double p = particle->pos[1];
9      double dq, dp;
10     dq = ( p * MASS_INV ) * dt;
11     dp = ( SPRING_K * ( sin(q) - cos(q) ) ) * dt;
12     q += dq;
13     p += dp;
14
15     particle->pos[0] = q;
16     particle->pos[1] = p;
17
18     std::cout << "total energy: "
19               << std::scientific
20               << total_energy( particle->pos )
21               << std::endl;
22 }

```

たとえば、 $(q, p) = (2, 0)$ の初期条件の下で、これを実行すると・・・明らかに変なことが起きている。はじめは $q = -3\pi/4$ を中心に振動していた質点が、次第にその振幅を大きくしていき、ついには回転運動をはじめてしまう。これは系の全エネルギーが増加してしまっていることを意味する。実際に全エネルギーをプロットしてみるとそれが確認できる。



1 次オイラー法は、1 ステップで $O(\Delta t^2)$ の誤差がある。有限時間 T まで積分するには $N/\Delta t$ ステップだけ 1 次オイラー法を繰り返し適用するので、最終的には $O(\Delta t)$ の誤差が生じるのは仕方がない。しかしながらこの例のように全エネルギーが変わると解の振る舞いが（振動状態と回転状態の違いのように）定性的に異なる系に対しては、どれだけ長時間（多ステップ）積分しても全エネルギーは

なるべく変わらないようにしたい。

1 ステップで $O(\Delta t)$ の精度をもつ数値積分法 (= 1 次精度積分法) は、 $(O(\Delta t^2))$ だけの自由度があるので 無限のバリエーションが存在する。1 次オイラー法はその中の一つにすぎない。この章では無数にある 1 次精度積分法の中から「シンプレクティック性をもつ」という条件を付けるとエネルギーの保存性がどうなるか調べよう。なお後で見るように 1 次精度のシンプレクティックな数値積分法も複数存在する。

ハミルトニアンが式 (8.1) で与えられるとき、1 次オイラー法は、

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t \frac{dK}{dp}(p^n) \quad (8.7)$$

$$p^{n+1} = p^n - \Delta t \frac{dU}{dq}(q^n) \quad (8.8)$$

と書ける。これをほんの少し (赤字の部分) だけ変えて

1 次シンプレクティック積分法: SI01a

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t \frac{dK}{dp}(p^n) \quad (8.9)$$

$$p^{n+1} = p^n - \Delta t \frac{dU}{dq}(q^{n+1}) \quad (8.10)$$

とする。実はこの積分法はシンプレクティックな積分法になっている。

$\mathbf{r} = (q^n, p^n)$ から $\mathbf{R} = (q^{n+1}, p^{n+1})$ への変換が正準変換であることをポアソン括弧で調べてみよう。1 自由度系の場合には $\{Q, Q\} = \{P, P\} = 0$ は自明なので、 $\{Q, P\}$ だけを調べれば良い。

$$\begin{aligned} Q &= q + \Delta t \frac{dK(p)}{dp} \\ P &= p - \Delta t \frac{dU(Q)}{dq} = p - \Delta t \frac{dU}{dq}\left(q + \Delta t \frac{dK(p)}{dp}\right) \end{aligned}$$

に注意すると、

$$\begin{aligned} \{Q, P\} &= \frac{\partial Q}{\partial q} \frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial q} \frac{\partial Q}{\partial p} \\ &= 1 \times \left[1 - \left(\Delta t \frac{d^2 U}{dq^2} \right) \left(\Delta t \frac{d^2 K}{dp^2} \right) \right] - \left(-\Delta t \frac{d^2 U}{dq^2} \right) \left(\Delta t \frac{d^2 K}{dp^2} \right) \\ &= 1 - \Delta t^2 \frac{d^2 U}{dq^2} \frac{d^2 K}{dp^2} + \Delta t^2 \frac{d^2 U}{dq^2} \frac{d^2 K}{dp^2} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (8.11)$$

従って式 (8.9) と (8.10) は正準変換である。この積分法は 1 次精度の陽的なシンプレクティック法である。ここではこのスキームを SI01a と呼ぶことにする。

式 (8.9) と (8.10) に基づいてコードを作ってみよう。見ての通り、このコードは 1 次オイラー法とほとんど同じである。

Listing 8.2: one_ball_on_ring_1stSymplectic.cpp

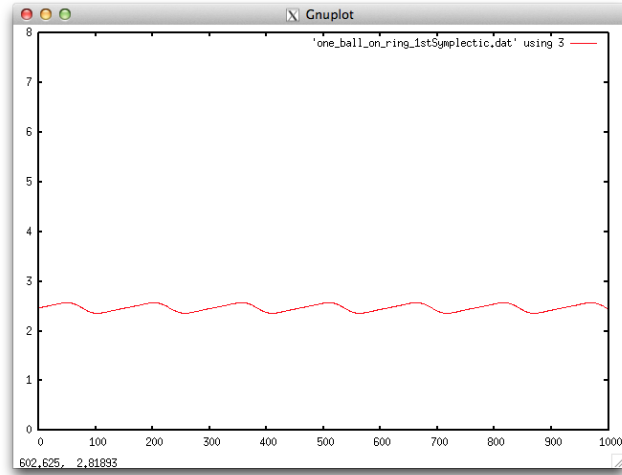
```

1
2 void symplectic1st(struct particle_ *particle, double dt)
3 {
4     //      Hamiltonian
5     //       $H(q,p) = p^2/(2m) + k (\cos q + \sin q)$ 
6     //
7     double p = particle->pos[1];
8     double q = particle->pos[0];
9     double dq, dp;
10
11     dq = ( p * MASS_INV ) * dt;
12     q += dq;
13
14     dp = ( SPRING_K * ( sin(q) - cos(q) ) ) * dt;
15     p += dp;
16
17     particle->pos[0] = q;
18     particle->pos[1] = p;
19
20     std::cout << "total energy: "
21               << std::scientific
22               << total_energy( particle->pos)
23               << std::endl;
24 }
```

このコードを実行すると、図のようにエネルギーは（振動こそすれ）オイラー法の時のように増大し続けることはなく、質点の運動が振動運動が回転運動に変わってしまうような明らかに定性的におかしな解になることもない。

1 次シンプレクティック法 SI01a [式 (8.9) と (8.10)] と 1 次オイラー法 [(8.7) と (8.8)] との違いはほんのわずかである。式 (8.10) で前の時間ステップの値 q^n を使うと 1 次オイラー法となる。このわずかな違いによって積分がシンプレクティック（正準変換）になること、そしてその効果が大きいことは実に印象的である。

1 次シンプレクティック法 SI01a [式 (8.9) と (8.10)] では、式 (8.9) でまず q^n の値を q^{n+1} に更新してからその新しい q^{n+1} を使って式 (8.10) をつかって p^n を更新する。この順番を逆にした以下のスキーム (SI01b) もシンプレクティック性を持つことを確認することができる。



1 次シンプレクティック積分法: SI01b

$$p^{n+1} = p^n - \Delta t \frac{dU}{dq}(q^n) \quad (8.12)$$

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t \frac{dK}{dp}(p^{n+1}) \quad (8.13)$$

8.3 練習問題

ハミルトニアンが $H(q, p) = q^2/2 + p^2/2$ で与えられる系の正準方程式を上記 SI01b アルゴリズムで数値的に積分する。時刻 t における状態を (q, p) 、時刻 $t + \tau$ における状態を (q', p') とすると、 $p' = p - \tau q$ 、 $q' = q + \tau p'$ である。

- (a) 変換 $(q, p) \Rightarrow (q', p')$ が正準変換であることを示せ。
- (b) このアルゴリズムでは全エネルギーの 2 倍 $2E = q^2 + p^2$ が保存しないことを示せ。
- (c) このアルゴリズムでは $2E^* = q^2 + p^2 - \tau qp$ が保存することを示せ。
- (d) 長時間積分をするのにこのアルゴリズムは望ましい性質をもっていると言える。なぜか述べよ。

略解

- (a) 解答例 1: ポアッソン括弧を使う方法。まず、 $\{q', q'\} = \{p', p'\} = 0$ は自明。

次に、

$$\begin{aligned}
 \{q', p'\} &= \{q + \tau p', p'\} \\
 &= \{q, p'\} + \tau \{p', p'\} \\
 &= \{q, p - \tau q\} + 0 \\
 &= \{q, p\} - \tau \{q, q\} \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

従って変換 $(q, p) \Rightarrow (q', p')$ は正準変換である。

解答例 2: 直接条件による方法。

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \tau^2 & \tau \\ -\tau & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

とかけるから、これを解いて

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\tau \\ \tau & 1 - \tau^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix}$$

これから

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial q'}{\partial q} & \frac{\partial q'}{\partial p} \\ \frac{\partial p'}{\partial q} & \frac{\partial p'}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \tau^2 & \tau \\ -\tau & 1 \end{pmatrix}$$

と

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial q}{\partial q'} & \frac{\partial q}{\partial p'} \\ \frac{\partial p}{\partial q'} & \frac{\partial p}{\partial p'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\tau \\ \tau & 1 - \tau^2 \end{pmatrix}$$

を得る。比較すると正準変換の直接条件

$$\frac{\partial q'}{\partial q} = \frac{\partial p}{\partial p'}, \quad \frac{\partial q'}{\partial p} = -\frac{\partial q}{\partial p'}, \quad \frac{\partial p'}{\partial p} = \frac{\partial q}{\partial q'}, \quad \frac{\partial p'}{\partial q} = -\frac{\partial p}{\partial q'}.$$

が成り立っている所以、これは正準変換である。

(b)

$$p = p - \tau q, \quad q' = (1 - \tau^2)q + \tau p$$

だから

$$2E' = q'^2 + p'^2 = (1 - \tau^2 + \tau^4)q^2 + (1 + \tau^2)p^2 - 2\tau^3 qp$$

これは

$$2E = q^2 + p^2$$

と異なる。つまり全エネルギーは保存しない。

(c)

$$q'p' = (1 - 2\tau^2)qp + \tau p^2 - \tau(1 - \tau^2)q^2$$

なので

$$q'^2 + p'^2 - \tau q'p' = q^2 + p^2 - \tau qp$$

 が成り立つ。従って $2E^*$ は保存する。

(d) このアルゴリズムは全エネルギー E は保存しないが、 E とは $O(\tau)$ だけ異なる E^* を保存する。したがって、長時間積分しても全エネルギーの誤差は $O(\tau)$ にとどまるので、全エネルギーの保存性が重要な問題を解くのに適している。

8.4 シンプレクティック性の由来

積分法 SI01a がなぜ正準変換になっているのか、その由来を調べてみよう。

8.4.1 正準方程式の形式的厳密解

以下では相空間中の位置（つまり系の状態） $\mathbf{r}$

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (8.14)$$

の関数に作用する演算子を $\hat{A}$ のようにハットを付けて書くことにする。

正準変数の関数 f と g のポアッソン括弧 $\{f, g\}$ を、 f に $\hat{D}(g)$ という演算子が作用したものとみなすことにしよう。つまり

$$\hat{D}(g)(\cdot) = \{\cdot, g\} \quad (8.15)$$

である。また、

$$\hat{D}^2(g)(\cdot) = \{\{\cdot, g\}, g\} \quad (8.16)$$

のように演算子のべきを定義する。ハミルトニアン $H(q, p)$ の系の正準方程式は

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \hat{D}(H)\mathbf{r} \quad (8.17)$$

と書ける。つまり $\hat{D}(H)$ は系の状態変化（時間微分）の演算子である。

時刻 t の状態 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ から τ だけ時間が経った状態を $\mathbf{r}(t + \tau)$ とする。ここでは τ は有限で、無限小とは限らない。テーラー展開より

$$\mathbf{r}(t + \tau) = \mathbf{r} + \frac{\tau}{1!} \frac{d}{dt} \mathbf{r} + \frac{\tau^2}{2!} \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r} + \frac{\tau^3}{3!} \frac{d^3}{dt^3} \mathbf{r} + \cdots \quad (8.18)$$

$$= \mathbf{r} + \frac{\tau}{1!} \hat{D}(H)\mathbf{r} + \frac{\tau^2}{2!} \hat{D}(H)^2\mathbf{r} + \frac{\tau^3}{3!} \hat{D}(H)^3\mathbf{r} + \cdots \quad (8.19)$$

ここで演算子 $\hat{A}$ の指数関数を

$$\text{Exp}(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n \quad (8.20)$$

と定義すると

$$\mathbf{r}(t + \tau) = \text{Exp}(\tau \hat{D}(H)) \mathbf{r}, \quad (8.21)$$

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(H)) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \hat{D}(H) \quad (8.22)$$

演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(H))$ はハミルトニアン H の系の状態を時間 τ だけ進める（時間推進の）演算子である。式 (8.21) が示すように、正準方程式を積分するということは、時間推進演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(H))$ を求めることに他ならない。

前章で示したように、ハミルトニアン $H(\mathbf{r})$ によって定まる $\mathbf{r}(t) \Rightarrow \mathbf{r}(t + \tau)$ という写像（つまり運動）はシンプレクティック変換なので、時間推進の演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(H))$ はシンプレクティック変換である。

ある座標変換 $\mathbf{r}(0) \Rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r}(\tau)$ について、

$$\mathbf{r}' = \text{Exp}(\tau \hat{D}(h)) \mathbf{r} \quad (8.23)$$

という形で書けるような関数 $h(q, p)$ が存在すれば、この変換は正準変換であり、その変換は h をハミルトニアンとする系の（初期条件 $\mathbf{r}$ から出発して $\mathbf{r}'$ に至る）運動である。

8.4.2 時間推進演算子が解ける例

H が p だけの関数、つまり

$$H = K(p) \quad (8.24)$$

という形で与えられる場合には時間推進演算子を具体的に書くことが可能である。これはポテンシャルの存在しない系の運動（自由運動）に相当する。このとき、式 (8.15) より

$$\hat{D}(H) = \hat{D}(K) = \frac{dK}{dp} \frac{\partial}{\partial q} \quad (8.25)$$

である。一方、正準方程式に戻って考えると

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \begin{pmatrix} \frac{dq}{dt} \\ \frac{dp}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{dK}{dp}(p) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.26)$$

である。この微分方程式は簡単に積分できて

$$\mathbf{r}(t + \tau) = \begin{pmatrix} q(t) + \tau \frac{dK}{dp}(p(t)) \\ p(t) \end{pmatrix} \quad (8.27)$$

である。従って時間推進演算子は

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \mathbf{r} = \begin{pmatrix} q + \tau \frac{dK(p)}{dp} \\ p \end{pmatrix} \quad (8.28)$$

である。

同様にハミルトニアンが q のみの関数

$$H = U(q) \quad (8.29)$$

つまり

$$\hat{D}(H) = \hat{D}(U) = -\frac{dU}{dq} \frac{\partial}{\partial p} \quad (8.30)$$

の場合についても時間推進演算子は厳密に計算できる。このとき正準方程式

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \begin{pmatrix} \frac{dq}{dt} \\ \frac{dp}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{dU(q)}{dq} \end{pmatrix} \quad (8.31)$$

の厳密解は

$$\mathbf{r}(t + \tau) = \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) - \tau \frac{dU}{dq}(q(t)) \end{pmatrix} \quad (8.32)$$

従って時間推進演算子は厳密に

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(U)) \mathbf{r} = \begin{pmatrix} q \\ p - \tau \frac{dU}{dq}(q) \end{pmatrix} \quad (8.33)$$

である。

8.4.3 合成変換による厳密解の近似

時間推進演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(H))$ は、 H が p だけの関数 $K(p)$ の時には式 (8.28) として、 H が q だけの関数 $U(q)$ の時には式 (8.33) として明示的に得られた。しかし、 H が

$$H(q, p) = K(p) + U(q) \quad (8.34)$$

という形の時の時間推進演算子

$$\begin{aligned} \text{Exp}(\tau \hat{D}(K) + \tau \hat{K}(U)) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\tau \hat{D}(K) + \tau \hat{K}(U) \right)^n \\ &= 1 + \tau \hat{D}(K) + \tau \hat{K}(U) \\ &\quad + \frac{\tau^2}{2!} \left(\hat{D}(K)^2 + \hat{D}(K) \hat{D}(U) + \hat{D}(U) \hat{D}(K) + \hat{D}(U)^2 \right) \\ &\quad + \frac{\tau^3}{3!} \left(\hat{D}(K)^3 + \hat{D}(K)^2 \hat{D}(U) + \hat{D}(K) \hat{D}(U) \hat{D}(K) + \dots \right) \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (8.35)$$

を簡単に書くことはできない。

シンプレクティック積分法 SI01a は厳密な時間推進演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(K) + \tau \hat{K}(U))$ を、(演算の形が既知である) 二つの演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(K))$ と $\text{Exp}(\tau \hat{D}(U))$ を組み合わせて

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(H)) = \text{Exp}(\tau \hat{D}(K) + \tau \hat{K}(U)) \quad (8.36)$$

$$\sim \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau \hat{D}(U)) \quad (8.37)$$

と近似する方法である。

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q^n \\ p^n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}' = \begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q^{n+1} \\ p^{n+1} \end{pmatrix}, \quad \tau = \Delta t \quad (8.38)$$

とすると、シンプレクティック積分法 SI01a [式 (8.9) と (8.10)] は

$$q' = q + \tau \frac{dK}{dp}(p) \quad (8.39)$$

$$p' = p - \tau \frac{dU}{dq}(q') \quad (8.40)$$

である。これが

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau \hat{D}(U)) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (8.41)$$

であることを確認しよう。まず、

$$\begin{aligned} \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau \hat{D}(U)) q &= \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \left(1 - \tau \frac{dU}{dq} \frac{\partial}{\partial p} + \cdots \right) q \\ &= \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) q \\ &= \left(1 + \tau \frac{dK}{dp} \frac{\partial}{\partial q} + \tau^2 \left(\frac{dK}{dp} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \cdots \right) q \\ &= q + \tau \frac{dK}{dp} \\ &= q' \end{aligned} \quad (8.42)$$

つぎに

$$\begin{aligned} \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau \hat{D}(U)) p &= \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \left(1 - \tau \frac{dU}{dq} \frac{\partial}{\partial p} + \tau^2 \left(\frac{dU}{dq} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} + \cdots \right) p \\ &= \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \left(p - \tau \frac{dU}{dq} \right) \\ &= \left(1 + \tau \frac{dK}{dp} \frac{\partial}{\partial q} + \tau^2 \left(\frac{dK}{dp} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \cdots \right) \left(p - \tau \frac{dU}{dq} \right) \\ &= p - \tau \left(1 + \tau \frac{dK}{dp} \frac{\partial}{\partial q} + \tau^2 \left(\frac{dK}{dp} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \cdots \right) \frac{dU}{dq}(q) \\ &= p - \tau \frac{dU}{dq}(q + \tau \frac{dK}{dp}) \quad [\text{テーラー展開}] \\ &= p - \tau \frac{dU}{dq}(q') \\ &= p' \end{aligned} \quad (8.43)$$

こうして式 (8.41) が確認できた。

変換 $\text{Exp}(\tau\hat{D}(K))$ と変換 $\text{Exp}(\tau\hat{D}(U))$ はどちらも正準変換であり、第 6.4 章で示したように正準変換の合成変換は正準変換なので、 $\text{Exp}(\tau\hat{D}(K))\text{Exp}(\tau\hat{D}(U))$ も正準変換である。こうして積分公式 SI01a がシンプレクティック性を持つことは確認するまでもなく自明となった。

近似式 (8.37) の誤差を見積もってみよう。

$$\begin{aligned}\text{Exp}(\tau\hat{D}(K))\text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \hat{D}(K)^n \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \hat{D}(U)^n \\ &= 1 + \tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U) \\ &\quad + \frac{\tau^2}{2!} \left(\hat{D}(K)^2 + 2\hat{D}(K)\hat{D}(U) + \hat{D}(U)^2 \right) \\ &\quad + \cdots\end{aligned}\tag{8.44}$$

なので、

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U)) = \text{Exp}(\tau\hat{D}(K))\text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) + \hat{Err}(\tau)\tag{8.45}$$

とすると、式 (8.35) より

$$\hat{Err}(\tau) = \frac{\tau^2}{2} \left(\hat{D}(K)\hat{D}(U) - \hat{D}(U)\hat{D}(K) \right) + \cdots\tag{8.46}$$

つまり 1 ステップの誤差は $O(\tau^2)$ である。これは 1 次オイラー法と同じである。1 ステップあたりの精度は同じなのに SI01a にするとなぜ長時間積分しても全エネルギーがずれていかないのかその理由を次に探る。

8.5 エネルギーの誤差

積分公式 SI01a (及び SI01b) によって、時刻 $t = t^n$ の状態

$$\mathbf{r}^n = \begin{pmatrix} q^n \\ p^n \end{pmatrix}\tag{8.47}$$

が時刻 $t = t^n + \Delta t$ の状態

$$\mathbf{r}^{n+1} = \begin{pmatrix} q^{n+1} \\ p^{n+1} \end{pmatrix}\tag{8.48}$$

に移る。この変換 $\mathbf{r}^n \Rightarrow \mathbf{r}^{n+1}$ は一つの正準変換なので、この正準変換に対応する「仮想的な運動」が存在し、その仮想的な運動に対応するハミルトニアン $\tilde{H}$ も存在するであろう。そのハミルトニアン $\tilde{H}$ は、今考えている (数値積分で解こうとしている) 本来のハミルトニアン H

$$H(q, p) = K(p) + U(q)\tag{8.49}$$

とは一致しない。(一致するのであれば、SI01a は上のハミルトニアンの厳密解を計算できる理想的な数値積分法ということになる。) 本来のハミルトニアン H で

はないが、SI01a は $\tilde{H}$ というハミルトニアンに対する厳密な数値積分法になっている。これの意味するところは大きい。厳密解であれば、この系のエネルギー $\tilde{H}$ が保存する。つまり計算スキーム SI01a はどれだけ長時間積分してもエネルギー $\tilde{H}$ を一定に保つ。では $\tilde{H}$ と H はどれだけずれているのであろうか？

式 (8.45) を再掲すると

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{K}(U)) = \underline{\text{Exp}(\tau\hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau\hat{D}(U))} + \hat{Err}(\tau) \quad (8.50)$$

この下線部が「仮想的な運動」に対応する演算子 $\text{Exp}(\tau\hat{D}(\tilde{H}))$ に一致するはずなので、

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(\tilde{H})) = \text{Exp}(\tau\hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) \quad (8.51)$$

と置き、この $\tilde{H}$ を求める。

一般に非可換演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対して以下の公式 (Baker-Campbell-Hausdorff 公式) が成り立つ。

$$\text{Exp}(\hat{A}) \text{Exp}(\hat{B}) = \text{Exp}(\hat{C}) \quad (8.52)$$

$$\begin{aligned} \hat{C} = & \hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] \\ & + \frac{1}{12}[\hat{A} - \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] \\ & - \frac{1}{24}[\hat{B}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \cdots \end{aligned} \quad (8.53)$$

ここで

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (8.54)$$

等である。これを使うと、

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) = \text{Exp}(\hat{C}) \quad (8.55)$$

として

$$\begin{aligned}
 \hat{C} &= \tau \hat{D}(K) + \tau \hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2} [\hat{D}(K), \hat{D}(U)] \\
 &\quad + \frac{\tau^3}{12} [\hat{D}(K) - \hat{D}(U), [\hat{D}(K), \hat{D}(U)]] \\
 &\quad - \frac{\tau^4}{24} [\hat{D}(U), [\hat{D}(K), [\hat{D}(K), \hat{D}(U)]]] + \dots \\
 &= \tau \hat{D}(K) + \tau \hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2} \hat{D}(\alpha) \\
 &\quad + \frac{\tau^3}{12} [\hat{D}(K - U), \hat{D}(\alpha)] \\
 &\quad - \frac{\tau^4}{24} [\hat{D}(U), [\hat{D}(K), \hat{D}(\alpha)]] + \dots \\
 &= \tau \hat{D}(K) + \tau \hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2} \hat{D}(\alpha) \\
 &\quad + \frac{\tau^3}{12} \hat{D}(\{\alpha, K - U\}) \\
 &\quad - \frac{\tau^4}{24} \hat{D}(\{\{\alpha, K\}, U\}) + \dots \\
 &= \tau \hat{D}(K + U + \frac{\tau}{2} \alpha + \frac{\tau^2}{12} \{\alpha, K - U\} - \frac{\tau^3}{24} \{\{\alpha, K\}, U\} + \dots) \quad (8.56)
 \end{aligned}$$

ここで

$$\alpha = \{U, K\} \quad (8.57)$$

とした。上の式変形では

$$\hat{D}(K) - \hat{D}(U) = \hat{D}(K - U) \quad (8.58)$$

などの $\hat{D}$ の線形性と、次の公式 (8.59) を複数回使った：任意の f, g に対して

$$[\hat{D}(f), \hat{D}(g)] = \hat{D}(\{g, f\}) \quad (8.59)$$

これはヤコビ恒等式を使えば証明できる。

式 (8.51) と (8.55), (8.56) より

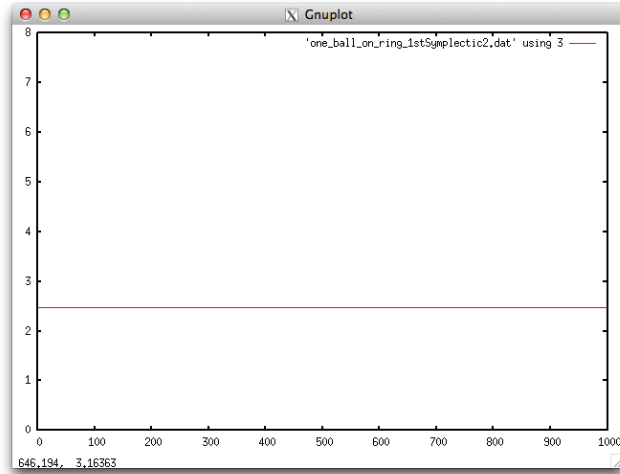
$$\tilde{H} = K + U + \frac{\tau}{2} \alpha + \frac{\tau^2}{12} \{\alpha, K - U\} - \frac{\tau^3}{24} \{\{\alpha, K\}, U\} + \dots \quad (8.60)$$

である。ハミルトニアン (8.49) との差は

$$\tilde{H} - H = \frac{\tau}{2} \alpha + \frac{\tau^2}{12} \{\alpha, K - U\} - \frac{\tau^3}{24} \{\{\alpha, U\}, K\} + \dots \quad (8.61)$$

シンプレクティック積分法 SI01a はどれだけ積分しても、常に $\tilde{H}$ を一定に保つが、その値は本来の系のエネルギー H とは $O(\tau)$ だけしかずれていないことをこの式は意味する。

この章の最初の例題にもどると、SI01a では $O(\tau)$ でエネルギーが振動していた。計算修正されたエネルギー $\hat{H}$ は厳密に保存するはずである。式 (8.60) の無限級数を計算することはできないので、 $O(\tau^2)$ の項までで $\hat{H}$ を近似してプロットしたグラフが以下である。



8.6 高精度化

1 次精度のシンプレクティック法 SI01a (または SI01b) の精度を上げるためには次のようにすれば良い。一般に演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ に対して

$$\text{Exp}(\tau\hat{A} + \tau\hat{B}) = \text{Exp}\left(\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) \text{Exp}(\tau\hat{B}) \text{Exp}\left(\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) + O(\tau^3) \quad (8.62)$$

である。そこで、ハミルトニアン

$$H = U(q) + K(p) \quad (8.63)$$

に対する時間推進演算子を

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(H)) \sim \text{Exp}\left(\frac{\tau}{2}\hat{D}(K)\right) \text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) \text{Exp}\left(\frac{\tau}{2}\hat{D}(K)\right) \quad (8.64)$$

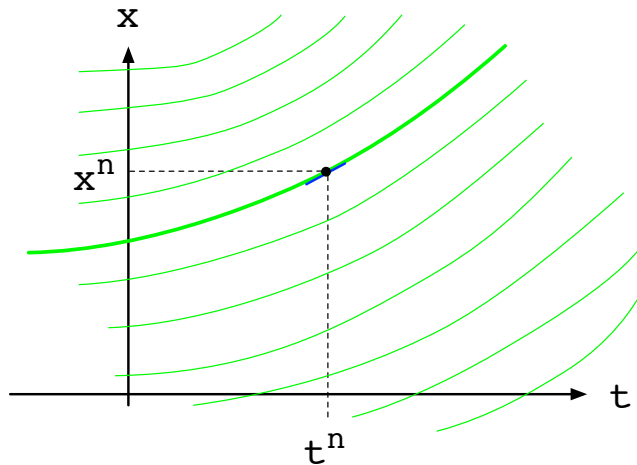
と近似すれば、その誤差は $O(\tau^3)$ なので 2 次精度の数値積分法になっている。また、右辺は既知 (式 (8.28) と式 (8.33)) の正準変換の合成したものなので、全体としても明らかに正準変換になっている。つまりこれは 2 次シンプレクティック法である。さらにより高次のシンプレクティック積分法も開発されている。

最後に：この章では、式 (8.63) という特殊な形のハミルトニアンに対する陽的なシンプレクティック積分法を紹介した。一般的なハミルトニアンに対するシンプレクティック法も存在するが、それは陰的な方法である。つまり毎ステップ連立方程式を解く必要がある。

Appendix A

数値積分法

A.1 1次オイラー法



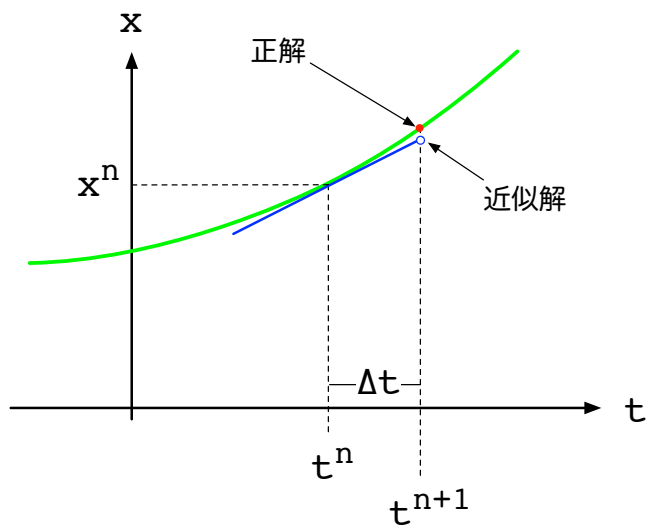
t の関数 $x = x(t)$ の常微分方程式を考える。

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) \quad (\text{A.1})$$

ある時刻 t^n での解 x^n は既知とする。時間が Δt だけ進んだ未来の時刻 $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ での解 x^{n+1} を求める。

微分方程式 (A.1) の右辺 $f(x, t)$ を 2次元空間 t - x の場とみなそう。この微分方程式のある初期条件に対する解は、 t - x 空間上の曲線 $x = x(t)$ である。これを解曲線という。異なる初期条件は異なる解曲線をもつ。二つの解曲線が交わることはない。したがって、この x - t 空間は（異なる初期条件に対応する）無数の解曲線でびつしりと埋め尽くされている。各点での関数 $f(x, t)$ は、その位置を通る解曲線 $x = x(t)$ の接線の傾きである。

さて、この微分方程式 (A.1) を数値的に解く（つまり積分する）ことを考えよう。時刻 t^n での曲線 $x(t)$ の接線を Δt だけ延長して



$$x^{n+1} = x^n + \left(\frac{dx}{dt} \right)^n \Delta t \quad (\text{A.2})$$

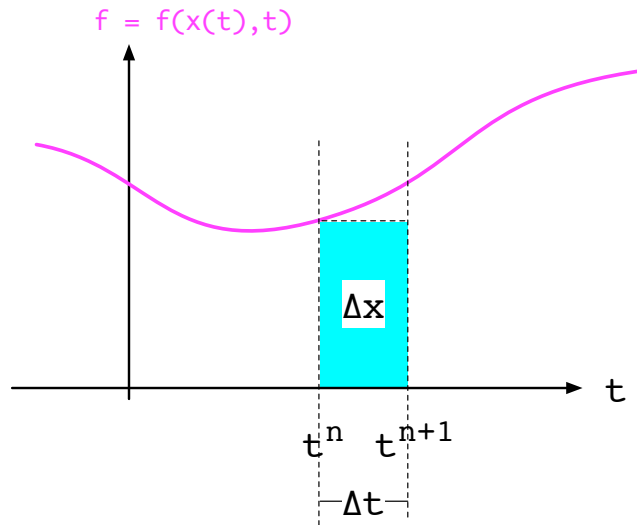
と近似するのが（陽的）1次オイラー法である。式 (A.1) より

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)^n = f(x^n, t^n) \quad (\text{A.3})$$

だから一次オイラー法は

$$x^{n+1} = x^n + f(x^n, t^n) \Delta t \quad (\text{A.4})$$

と書ける。 $x = x(t)$ の曲線がまっすぐ（ t の一次関数）ではない場合、一次オイラー法には誤差があるのが上の図から明らかである。



微分方程式 (A.1) の厳密解は

$$x^{n+1} = x^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(x, \tau) d\tau \quad (\text{A.5})$$

なので、

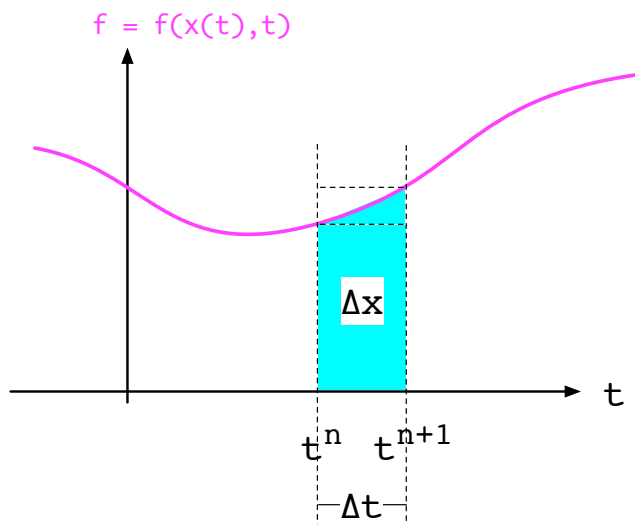
$$\Delta x = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(x, \tau) d\tau \quad (\text{A.6})$$

を定義すると、一次オイラー法は

$$\Delta x \sim f(x^n, t^n) \Delta t \quad (\text{A.7})$$

と近似していることを意味する。

A.2 2次ルンゲ=クッタ法



厳密解の積分

$$\Delta x = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(x, \tau) d\tau \quad (\text{A.8})$$

の精度を上げるためには、台形公式

$$\Delta x = \frac{1}{2} \{f(x^n, t^n) \Delta t + f(x^{n+1}, t^{n+1}) \Delta t\} \quad (\text{A.9})$$

を使えば良い。つまり

$$x^{n+1} = x^n + \frac{1}{2} \{f(x^n, t^n) \Delta t + f(x^{n+1}, t^{n+1}) \Delta t\} \quad (\text{A.10})$$

であるが、右辺の最後の項には、今求めようとしている x^{n+1} が入っているので、このままでは使えない。そこで x^{n+1} を一次オイラー法を使って近似した値 x^* を使う。

$$x^* = x^n + f(x^n, t^n) \Delta t \quad (\text{A.11})$$

$$x^{n+1} = x^n + \frac{1}{2} \{f(x^n, t^n) \Delta t + f(x^*, t^{n+1}) \Delta t\} \quad (\text{A.12})$$

これを2次ルンゲ=クッタ法という。

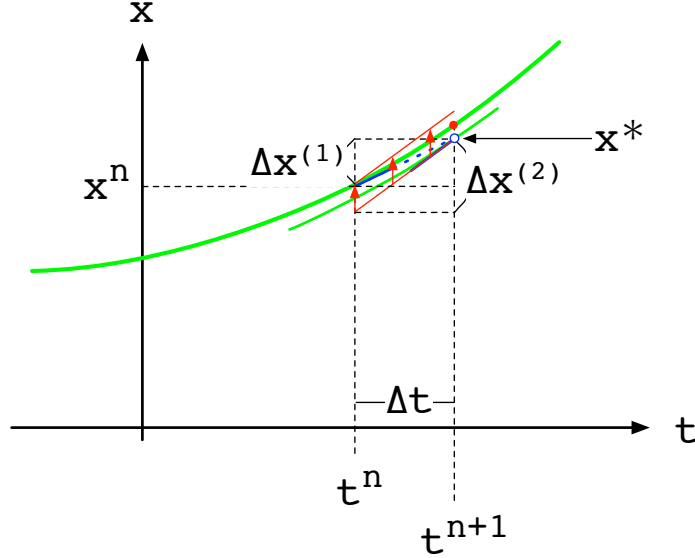
$$\Delta x^{(1)} = f(x^n, t^n) \Delta t \quad (\text{A.13})$$

$$\Delta x^{(2)} = f(x^*, t^{n+1}) \Delta t \quad (\text{A.14})$$

と定義すると、

$$x^{n+1} = x^n + \frac{1}{2} (\Delta x^{(1)} + \Delta x^{(2)}) \quad (\text{A.15})$$

である。



f のグラフではなく、解曲線で考えると、2次ルンゲ=クッタ法は次のように理解できる。

1. t - x 平面上の点 (t^n, x^n) での解曲線の接線を L_1 とする。
2. L_1 と直線 $t = t^{n+1}$ の交点を P とする（一次オイラー法）。
3. P での解曲線の接線を L_2 とする。
4. L_2 を平行移動し、 (t^n, x^n) を通るようにする。これを L'_2 とする。
5. (t^n, x^n) から2本の直線 L_1 と L'_2 をそれぞれ Δt だけ右に進めたときの増分の平均値を x^{n+1} とする。

A.3 4次ルンゲ=クッタ法

2次のルンゲ=クッタ法よりもさらに精度を上げるためには、台形公式 (A.9) の代わりにシンプソンの公式

$$\Delta x = \frac{\Delta t}{6} \{ f^n + 4f^{n+1/2} + f^{n+1} \} \quad (\text{A.16})$$

を使えばよい。ここで

$$f^n = f(x^n, t^n) \quad (\text{A.17})$$

$$f^{n+1/2} = f(x^{n+1/2}, t^{n+1/2}) \quad (\text{A.18})$$

$$f^{n+1} = f(x^{n+1}, t^{n+1}) \quad (\text{A.19})$$

である。(式 (A.18) では $t = t^n + \Delta t/2$ での x と t を $x^{n+1/2}$ と $t^{n+1/2}$ とした。) $f^{n+1/2}$ と f^{n+1} は未知である。そこで、 $f^{n+1/2}$ は 2 次のルンゲ=クッタ法で推測した値を、 f^{n+1} は別の方法で推測した値を用いる。

$$x^{n+1} = x^n + \frac{\Delta t}{6}k_1 + \frac{\Delta t}{3}k_2 + \frac{\Delta t}{3}k_3 + \frac{\Delta t}{6}k_4 \quad (\text{A.20})$$

とするのが 4 次ルンゲ=クッタ法の公式 (の一つ) である。ここで

$$k_1 = f(x^n, t^n) \quad (\text{A.21})$$

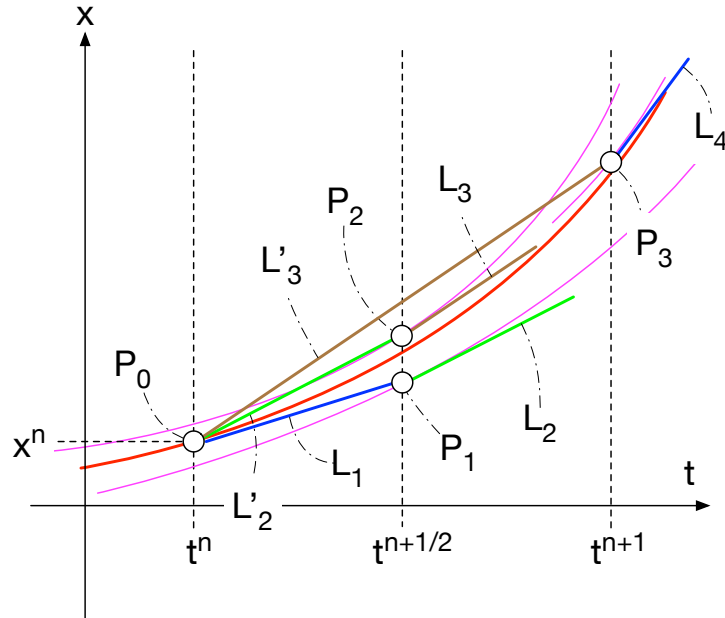
$$k_2 = f(x^n + \frac{\Delta t}{2}k_1, t^n + \frac{\Delta t}{2}) \quad (\text{A.22})$$

$$k_3 = f(x^n + \frac{\Delta t}{2}k_2, t^n + \frac{\Delta t}{2}) \quad (\text{A.23})$$

$$k_4 = f(x^n + \Delta t k_3, t^n + \Delta t) \quad (\text{A.24})$$

である。

解曲線を見てこの公式の意味と手順を考えよう。



4 次ルンゲ=クッタ法の手順

1. $t = t^n$ での x の値を x^n 、点 (t^n, x^n) を P_0 とする。
2. P_0 での解曲線 $x(t)$ の接線を L_1 とする [式 (A.21)]。
3. $t^n + \Delta t/2$ を $t^{n+1/2}$ とし、 L_1 と直線 $t = t^{n+1/2}$ の交点を P_1 とする。
4. P_1 での解曲線の接線を L_2 とする [式 (A.22)]。
5. L_2 を平行移動し、 P_0 を通るようにする。これを L'_2 とする。
6. L'_2 と直線 $t = t^{n+1/2}$ の交点を P_2 とする。
7. P_2 での解曲線の接線を L_3 とする [式 (A.23)]。
8. L_3 を平行移動して、 P_0 を通るようにする。これを直線 L'_3 とする。
9. L'_3 と直線 $t = t^{n+1}$ の交点を P_3 とする。
10. P_3 での解曲線の接線を L_4 とする [式 (A.24)]。
11. L_1, L_2, L_3, L_4 の傾きを 1:2:2:1 の重みで平均した直線を P_0 から伸ばし、 $t = t^n$ との交点の x を x^n とする [式 (A.20)]。

直線 L_i の傾きが k_i である ($i = 1, 2, 3, 4$)。 P_1 と P_2 の中点を求める操作は、時間刻み幅を $\Delta t/2$ としたときの 2 次ルンゲ=クッタに相当する。そこで、 k_2 と k_3 の平均値を

$$\bar{k} = \frac{k_2 + k_3}{2} \quad (\text{A.25})$$

とすれば、最後のステップで x^n から x^{n+1} への増分 k は

$$k = \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6} = \frac{1}{6} \{k_1 + 4\bar{k} + k_4\} \quad (\text{A.26})$$

である。これはシンプソンの公式である。

A.4 時間依存のない場合

解くべき微分方程式が

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x) \quad (\text{A.27})$$

というタイプの場合、つまり右辺が陽には t に依存しない場合、4 次ルンゲ=クッタ法の公式は

$$x(t_0) = x_0 \quad (\text{A.28})$$

として、

$$x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{6}k_1 + \frac{\Delta t}{3}k_2 + \frac{\Delta t}{3}k_3 + \frac{\Delta t}{6}k_4 \quad (\text{A.29})$$

である。ここで

$$k_1 = f(x_n) \quad (\text{A.30})$$

$$k_2 = f(x_n + \frac{\Delta t}{2} k_1) \quad (\text{A.31})$$

$$k_3 = f(x_n + \frac{\Delta t}{2} k_2) \quad (\text{A.32})$$

$$k_4 = f(x_n + \Delta t k_3) \quad (\text{A.33})$$

A.5 連立微分方程式系

連立微分方程式の場合も解ける。たとえば t の関数 $\alpha = \alpha(t)$ と $\beta = \beta(t)$ が結合している系

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha}{dt} &= f(\alpha, \beta, t) \\ \frac{d\beta}{dt} &= g(\alpha, \beta, t) \end{aligned}$$

をルンゲ=クッタ法で数値積分するには、

$$\begin{aligned} \Delta\alpha^{(k)} &= f(\alpha^\dagger, \beta^\dagger, t^\dagger) \Delta t \\ \Delta\beta^{(k)} &= g(\alpha^\dagger, \beta^\dagger, t^\dagger) \Delta t \end{aligned}$$

というそれぞれの変数の増分を計算し、その線形和をとればよい。

A.6 2階微分方程式系

ラグランジアン $L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N)$ からラグランジュの運動方程式を作ると、 q_i の 2 階微分が出てくる。2 階の微分方程式に 4 次ルンゲ=クッタ法などの数値積分法を応用するのは簡単である。変数を増やし（したがって式も増えるが）一階の微分方程式系に変えてから積分すればよい。

例えば q の 2 階微分を含む

$$\ddot{q} = f(q, \dot{q}) \quad (\text{A.34})$$

という微分方程式は、

$$p = \dot{q} \quad (\text{A.35})$$

という新しい変数を定義すれば

$$\dot{p} = f(q, p) \quad (\text{A.36})$$

$$\dot{q} = p \quad (\text{A.37})$$

という連立方程式になり、1 階微分しか出てこない。もとの 2 階微分方程式が連立方程式の場合（自由度が 2 以上の場合）も同様である。