第7章 正準方程式

§40 ハミルトン方程式

ラグランジュ力学は，一般化座標とそれに対応する"一般化速度"によって系の力学的状態が完全に記述できることを前提にしている．

一方で，一般化座標ではなく一般化運動量によって系を記述することが，系の記述にすぐれた点を示すことも，よくある．そこで，そのような定式化をおこなうことについて考えてみよう．これは，$L(q, \dot{q}, t) \longrightarrow H(q, p, t)$ への変換として考えることができる．

この変換は，数学的にはルジャンドル変換として行われることになる．座標と速度についてのラグランジアンの完全微分は

$$dL = \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \underbrace{+ \frac{\partial L}{\partial t} dt}$$

この項がついていてもよいが，今回の議論には関係ないので，略す．

$$= \sum_i \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) dq_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \quad \cdots ①$$

$$= \sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i \qquad \left(p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} : \text{一般化運動量}\right)$$

とかける．

ここで，ハミルトニアン $H(q, p, t)$ を

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \quad \cdots ②$$

で定めると，①より，ハミルトニアンの全微分は

$$dH = \sum_i \dot{q}_i dp_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i - \sum_i p_i d\dot{q}_i - \sum_i \dot{p}_i dq_i$$

$$= -\sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i \quad \cdots ③$$

とかける（※正確には，ここではじめて $H = H(q, p, t)$ とかけることが分かる）．③より，ただちに

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \cdots ④$$

がわかる．この簡潔で対称的な2つの方程式は，ハミルトンの正準方程式とよばれている．

> ※ ハミルトンの正準方程式は，のちにでるポアソンカッコを用いると，
>
> $$\frac{dq}{dt} = [q, H], \quad \frac{dp}{dt} = [p, H]$$
>
> としてエレガントに書ける．これはちょうど，量子力学におけるハイゼンベルクの運動方程式によく似ている．

エネルギー保存則からの帰結

②の定義からすぐに分かるように、ハミルトニアン $H(q,p,t)$ はふつうは系のもつ全エネルギーである。これは言われてみれば当たり前なのだが、同時に新たな帰結をもたらすことが、次のようにして分かる。

ハミルトニアンの時間についての微分に④を代入すると、

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H(q_i,p_i,t)}{\partial t} + \sum_i \underbrace{\frac{\partial H(q_i,p_i,t)}{\partial q_i}}_{=-\dot{p}_i}\dot{q}_i + \sum_i \underbrace{\frac{\partial H(q_i,p_i,t)}{\partial p_i}}_{=\dot{q}_i}\dot{p}_i$$

$$= \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_i\left(-\dot{p}_i\dot{q}_i + \dot{q}_i\dot{p}_i\right) = \frac{\partial H}{\partial t}$$

である。これより、

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H(q_i,p_i,t)}{\partial t} \qquad \cdots ⑤$$

とわかる。これは、ハミルトニアン H が q_i, p_i のみによって書けるとき、系の全エネルギーが自動的に保存していることを示している。これはハミルトン力学ならではの新たな帰結である。

力学変数が $q, \dot{q}$（あるいは $p, \dot{p}$）以外のパラメーター λ を含むとき

L または H が、力学 $q, \dot{q}$ あるいは q, p のほかにさまざまなパラメーターをふくむことがある。これは t でもよいし、それ以外にも系に作用する外部の場の性質（外力など）でもよい。このとき、そのようなパラメーターを λ とすると、L は

$$dL = \sum_i \dot{p}_i\, dq_i + \sum_i p_i\, d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \lambda}d\lambda \qquad \cdots ⑥$$

と書ける。ハミルトニアン $dH = d(p_i\dot{q}_i) - dL$ の場合は、（符号が変わって）

$$dH = -\sum_i \dot{p}_i\, dq_i + \sum_i \dot{q}_i\, dp_i - \frac{\partial L}{\partial \lambda}d\lambda \qquad \cdots ⑦$$

⑥, ⑦より

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

と書ける。（もっともありうるのは、$\lambda = t$ のときだろう。）

いろいろな座標のハミルトニアン(3次元)

(i) デカルト座標

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - U(\mathbf{r})$$

より

$$p_x = m\dot{x}, \quad p_y = m\dot{y}, \quad p_z = m\dot{z}$$

なので、これより

$$H = p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_z\dot{z} - L = \underline{\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(\mathbf{r})}.$$

(ii) 円柱座標

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2) - U(\mathbf{r})$$

$$\therefore \ p_r = m\dot{r}, \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta} \ (\text{角運動量}), \quad p_z = m\dot{z}$$

これより

$$H = p_r\dot{r} + p_\theta\dot{\theta} + p_z\dot{z} - L = \underline{\frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + p_z^2\right) + U(\mathbf{r})}$$

(iii) 極座標

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\sin^2\theta) - U(\mathbf{r})$$

$$\therefore \ p_r = m\dot{r}, \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta}, \quad p_\varphi = mr^2\dot{\varphi}\sin^2\theta$$

$$\therefore \ H = \underline{\frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\theta}\right) + U(\mathbf{r})}$$

(iv) 回転座標

$$L = \frac{1}{2}m|\dot{\mathbf{r}} + \boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r}|^2 - U(\mathbf{r})$$

$$= \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 + m\dot{\mathbf{r}}\cdot(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r}) + \frac{1}{2}m|\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r}|^2 - U(\mathbf{r})$$

これより $\mathbb{p} = m\dot{\mathbb{r}} + m\,\omega \times \mathbb{r}$ で，ハミルトニアンは，

$$H = \frac{\mathbb{p}^2}{2m} - \mathbb{p}\cdot(\omega \times \mathbb{r}) + U(\mathbb{r})$$

である．これを $\mathbb{r}, \dot{\mathbb{r}}$ で表すと，全エネルギーは

$$E\,(=H) = \frac{1}{2}m\dot{\mathbb{r}}^2 \underbrace{- \frac{1}{2}m|\omega \times \mathbb{r}|^2}_{\text{回転エネルギー}} + U(\mathbb{r})$$

である．

ハミルトニアンの自由度

ハミルトニアンには，ラグランジアンと同じく，$f(q,t)$ の時間微分だけ自由度が残っている．

ラグランジアン L' を，L を用いて

$$L' = L + \frac{df}{dt} \qquad \left(\text{但し } \frac{df}{dt} = \frac{df(q(t), t)}{dt}\right)$$

とおくことにしよう．すでにやったように，L と L' は物理的に本質的に等価である．
これより，ハミルトニアンは，

$$H' = \underbrace{\sum_i p_i \dot{q}_i - L}_{=H} - \frac{df}{dt} = H - \frac{df}{dt}$$

とかける．H と H' は力学的に本質的に等価であるはずなので，これより H にも，L と同じく

$$+\frac{df(q,t)}{dt}$$

だけの自由度がある．