

第 4 回 ハミルトン方程式

無機材料工学科
准教授 安田公一

1. はじめに

ここでは、今まで天下りの的にしか教わってこなかったであろうハミルトニアン の導出過程を示すと共に、その結果として得られるハミルトン方程式について説明する。

2. エネルギー保存則・運動量保存則

まず、ハミルトニアン の導出の準備として、時間と空間の一様性から得られる保存則について検討する。まず、時間の一様性については、ラグランジアン の時間に関する完全導関数を書き出すと、

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^m \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^m \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} \quad (1)$$

となる。ここで、孤立系を対象とすれば、ラグランジアン が時間に陽に依存しないので、右辺第 3 項は消えて、

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^m \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^m \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \quad (2)$$

となり、ラグランジュ方程式から $\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)$ と書けるので、

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \sum_{i=1}^m \dot{q}_i \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) + \sum_{i=1}^m \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \\ &= \sum_{i=1}^m \frac{d}{dt} \left(\dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

したがって、時間に対してラグランジアンが一様であれば、

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^m \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L \right) = 0 \quad (4)$$

となる。これより、エネルギー E を次のように定義すれば、孤立系の運動に対して E が一定となり、エネルギーが保存されることがわかる。

$$E = \sum_{i=1}^m \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L \quad (5)$$

ここで、ラグランジアンが下記の形式であれば、

$$L(q_i, \dot{q}_i) = T(\dot{q}_i) - U(q) \quad (6)$$

(5)式の右辺第 1 項は、

$$\sum_{i=1}^m \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \sum_{i=1}^m \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \quad (7)$$

となるが、運動エネルギー T は、

$$T = \sum_{i=1}^m \frac{1}{2} m_i \dot{q}_i^2 \quad (8)$$

と書けるので、(7)式に代入すると、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} &= \sum_{i=1}^m \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \\ &= \sum_{i=1}^m \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \left(\sum_{j=1}^m \frac{1}{2} m_j \dot{q}_j^2 \right) \\ &= \sum_{i=1}^m \dot{q}_i \left(\frac{1}{2} m_i \cdot 2 \dot{q}_i \right) \\ &= \sum_{i=1}^m m_i \dot{q}_i^2 \\ &= 2T \end{aligned} \quad (9)$$

この結果を(5)式に代入すると、

$$E = 2T - L = 2T - (T - U) = T + U \quad (10)$$

となって、初等力学の内容と一致する。

次に空間の一様性に関しては、孤立系の力学的性質が空間内の並進に対して不変であると言い換えることができる。そこで、無限小の変位 ε を導入すると、位置ベクトル r_i が $r_i + \varepsilon$ だけ変位した時のラグランジアン L の変化は、

$$\delta L = \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial r_j} \delta r_j = \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial r_j} \varepsilon = \varepsilon \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial r_j} \quad (11)$$

となるが、ラグランジアンが並進に対して不変であれば、任意の ε に対して $\delta L = 0$ となるので、

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial r_j} = 0 \quad (12)$$

となる。ラグランジュの方程式から $\frac{\partial L}{\partial r_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} \right)$ と書けるので、(12)式は、

$$\sum_{j=1}^n \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_j} = \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_j} = 0 \quad (13)$$

となる。そこで、運動量ベクトル P を次式で定義すれば、

$$P = \sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_j} \quad (14)$$

(13)式は、孤立系の運動量が保存されることを意味している。なお、ラグランジアンが一般化座標 q_i で記述されている場合、一般化速度 $\dot{q}_i$ によるラグランジアンの導関数を一般化運動量 p_i

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (15)$$

と定義し、また、一般化座標 q_i によるラグランジアン L の導関数を一般化力 Q_i

$$Q_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (16)$$

と定義すると、ラグランジュ方程式は、

$$\dot{p}_i = Q_i \quad (17)$$

と書くことができる。

3. ハミルトニアンとハミルトン方程式

ラグランジアン $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ は、一般化座標 q_i 、一般化速度 $\dot{q}_i$ 、時間 t を独立変数に持つ関数であり、ラグランジュ方程式は 2 階の微分方程式であった。そこで、一般化速度 $\dot{q}_i$ から一般化運動量 p_i に独立変数をルジャンドル変換することにする。すなわち、

$$H(q_i, p_i, t) \equiv \sum_{i=1}^m p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (18)$$

という新たな関数 $H(q_i, p_i, t)$ を定義する。なぜ、引数がこのように変わるのかは、 H の微小変化を取るとわかる。

$$\begin{aligned} dH &= d\left(\sum_{i=1}^m p_i \dot{q}_i\right) - dL \\ &= \sum_{i=1}^m (p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i) - \left\{ \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right) + \frac{\partial L}{\partial t} dt \right\} \\ &= \sum_{i=1}^m (p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i) - \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + p_i d\dot{q}_i \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_{i=1}^m \left(\dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_{i=1}^m (\dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (19) \end{aligned}$$

ここで、3 番目の等式では一般化運動量の定義を、5 番目の等式では、ラグランジュ方程式 $\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)$ を用いた。(18)式の H のことをハミルトニアンと呼ぶ。ハミルトニアンの全微分を取ると、

$$dH = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (20)$$

となり、(19)式と比較すると、

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (21)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (22)$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t} \quad (23)$$

が得られる。この内の(21)式と(22)式をハミルトン方程式と呼ぶ。このハミルトン方程式も点変換 $q_i \rightarrow q'_i$ に対して不変であることが証明されている。

4. 1次元調和振動子の問題

図1に示す1次元調和振動子の問題についてハミルトニアンを求め、ハミルトン方程式を書き下してみる。さらに、正準変数 (q, p) から、新しい正準変数 (Q, P) に変数変換したときに、ハミルトン方程式が不変になる変換がある。この変数変換は正準変換と呼ばれ、これについても検討する。

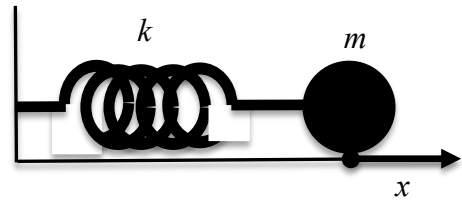


図1 1次元調和振動子

まず、この系の運動エネルギー T は

$$T = \quad (24)$$

ポテンシャルエネルギー U は、

$$U = \quad (25)$$

したがって、ラグランジアン L は

$$L = \quad (26)$$

これより、座標（あるいは、一般化座標でもあるが） x に共役な一般化運動量 p は、

$$p = \quad (27)$$

この p を使ってラグランジアンを書き直すと、

$$L = \quad (28)$$

(28)式を使ってハミルトニアン H を書き下すと、

$$\begin{aligned} H &= \\ &= \\ &= \end{aligned} \quad (29)$$

さらに、この調和振動の固有角振動数を ω とすると、 $\omega = \sqrt{k/m}$ より、 $k = m\omega^2$ となるので、ハミルトニアン H は、

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (30)$$

となる。これをハミルトン方程式に代入すると、

$$\begin{cases} \dot{x} = & (31) \\ \dot{p} = & (32) \end{cases}$$

となる。(31)式は 1 次元調和振動子の運動量の定義、(32)式はニュートンの運動方程式になっていることがわかる。

次に、ハミルトニアンに時間 t が陽に含まれていないことから、

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (33)$$

(20)式の両辺を dt で割って、ハミルトニアンの完全導関数 $dH/dt = \dot{H}$ を求めると

$$\begin{aligned} \dot{H} &= \frac{dH}{dt} \\ &= \left(\frac{\partial H}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} \right) + \frac{\partial H}{\partial t} \\ &= (-\dot{p}x + \dot{x}p) + 0 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (34)$$

となって、ハミルトニアンは不変となる。この場合のハミルトニアンは系のエネルギーを表していて、それを E とすると、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 &= E \\ \therefore \frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{\frac{2E}{m\omega^2}} &= 1 \end{aligned} \quad (35)$$

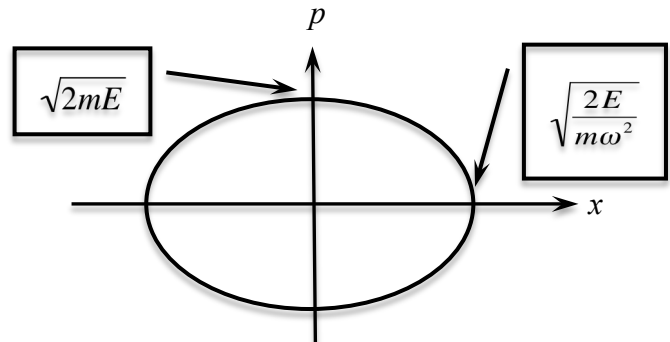


図2 調和振動子の位相空間

となる。これは、 (x, p) 空間において、この 1 次元調和振動子の運動が図2のような楕円軌道上を周回していることを表している。この (x, p) 空間のことを位相空間・ μ 空間と呼び、統計力学でよく使われている。

次に、正準変換の話に移る。これまで何度か出てきた点変換とは、旧座標 q_j から新座標 Q_i に

$$Q_i = Q_i(q_j, t) \quad (36)$$

のように変換される場合である。ハミルトン方程式も、この点変換に対して不変であることが証明されている。では、座標 q_j だけでなく、運動量 p_j も含めて同時に変換して、なおかつ、ハミルトン方程式が不変となるような変換を考え、それを正準変換と呼ぶ。すなわち、

$$\begin{cases} Q_i = Q_i(p_j, q_j, t) \\ P_i = P_i(p_j, q_j, t) \end{cases} \quad (37)$$

$$(38)$$

のように変数変換したときに、この新しい正準変数で書いたハミルトニアン $H'(P_i, Q_i)$ が、次のハミルトン方程式を満たすということである。

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i} \quad (39)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i} \quad (40)$$

正準変換は4つのパターンに分類されるが、それを説明するには、作用積分 S や変分原理によるハミルトン方程式の導出などについて説明しないとならないので、ここでは省略し、引き続き、1次元調和振動子問題を正準変換してみる。新しい正準変数 (P, Q) と古い正準変数 (p, x) の間に、次のような関係があるとすると、

$$p = \sqrt{m\omega}P, \quad x = \frac{1}{\sqrt{m\omega}}Q \quad (41)$$

(41)式を(30)式に代入して、新しい正準変数でのハミルトニアン $H'(P, Q)$ を求めると、

$$H' = \frac{1}{2m}m\omega P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{1}{m\omega}Q^2 = \frac{1}{2}\omega(P^2 + Q^2) \quad (42)$$

この新しい正準変数がハミルトン方程式を満たすことは、簡単な計算からわかる。

$$\left. \begin{aligned} \dot{Q} &= \\ \frac{\partial H'}{\partial P} &= \end{aligned} \right\} \quad \therefore \dot{Q} = \frac{\partial H'}{\partial P}$$

$$\left. \begin{aligned} \dot{P} &= \\ -\frac{\partial H'}{\partial Q} &= \end{aligned} \right\} \quad \therefore \dot{P} = -\frac{\partial H'}{\partial Q}$$

これより、(41)式は正準変換であり、(42)式より (P, Q) 空間では、この1次元調和振動子の運動が円軌道を周回していることがわかる。

さらに、ここでは詳細は示さないが、 $(P, Q) \rightarrow (P', Q')$ に次のような変数変換で正準変換すると、

$$P' = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2), \quad Q' = \tan^{-1} \frac{Q}{P} \quad (43)$$

(P', Q') 空間では、1次元調和振動子の運動は1次元等速直線運動に変わることがわかる。ここまで来ると、運動の個別性と言うことにあまり拘る必要もないことに気づく。