VI. Hamilton の方程式およびポアッソンのかっこ

1. Lagrangian から Hamiltonian へ変換する

Lagrange の形式では、座標 (q_i) および速度 $(\dot{q}_i)$を変数として利用して力学的な状態を記述した。これから勉強する Hamilton の形式では、座標 (q_i) および Sect. (II) で導入した運動量

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{1}$$

を変数として利用する。そのときに Lagrangian [1] $L(q, \dot{q}, t)$ に対応する関数は Hamiltonian $H(p, q, t)$ と呼ばれ、そのための変数変換は「Legendre 変換」と呼ばれている。

Lagrangian $L(q, \dot{q}, t)$ の全微分は

$$\mathrm{d}L = \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i}\mathrm{d}q_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\mathrm{d}\dot{q}_i = \sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}q_i + \sum_i p_i \mathrm{d}\dot{q}_i \tag{2}$$

で表される。上式では運動量の定義 (1) および Euler-Lagrange 方程式 $\dfrac{\partial L}{\partial q_i} = \dot{p}_i$ を使った。

式 (2) 右辺の第2項は次のように変形できる：

$$\sum_i p_i \mathrm{d}\dot{q}_i = \mathrm{d}\left(\sum_i p_i \dot{q}_i\right) - \sum_i \dot{q}_i \mathrm{d}p_i$$

それを利用して、式 (2) は次のように書き変えられる：

$$\mathrm{d}\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L\right) = -\sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}q_i + \sum_i \dot{q}_i \mathrm{d}p_i \tag{3}$$

[1] 以下の式では、文字 q は全ての座標変数 $(q_1, q_2, \ldots q_s)$ を表している。同様に、文字 $\dot{q}$ および p は全て (s個) の速度変数および運動量変数を表している。

この式の左辺に現れる物理量 $(\sum_i p_i\dot{q}_i - L)$ は力学的なエネルギーであり (Sect. 2 に参照)、右辺から分かるようにそのエネルギーが q_i と p_i の関数として表されている。その関数は Hamiltonian と呼ばれている：

$$H(p,q,t) = \sum_i p_i\dot{q}_i - L(q,\dot{q},t) \tag{4}$$

ただし、この式の右辺に現れる $\dot{q}_i$ は、式 (1) の関係式 $p_i = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ を使って p_i で表さなければならないことに注意する。式 (4) は Legendre 変換 $L(q,\dot{q},t) \longrightarrow H(p,q,t)$ を表している。

式 (3) から、Hamiltonian の全微分は

$$\mathrm{d}H = -\sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}q_i + \sum_i \dot{q}_i \mathrm{d}p_i \tag{5}$$

となるので、次式が成り立つ：

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{6}$$

この $2s$ 個の一次微分方程式は Hamilton の方程式（もしくは正準方程式 (canonical equations)) と呼ばれ、s 個の二次微分方程式である Euler-Lagrange 方程式と等価である。

Hamiltonian $H(p,q,t)$ の時間微分は次のように表される：

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{7}$$

ただし、最後の等式では (6) を使った。式 (7) は、Hamiltonian は時間 t に陽に依存しなければ（即ち時間に依存する外場がなければ）力学的エネルギーが保存されることを表している。

Legendre 変換の具体例として、中心ポテンシャル $U(r)$ の中で運動する粒子 (質量 m) の Lagrangian を極座標で表たとき、Hamiltonian および Hamilton の方程式を導く:

1 粒子の Lagrangian $L = m/2\,(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - U(r)$ に $x = r\sin\Theta\cos\varphi$, $y = r\sin\Theta\sin\varphi$, $z = r\cos\Theta$ を代入すると

$$L = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\Theta}^2 + r^2\sin^2\Theta\;\dot{\varphi}^2\right) - U(r) \tag{8}$$

となる。正準運動量 p_r, p_Θ, p_φ は、式 (1) に従って次のようになる：

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}\,, \qquad p_\Theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\Theta}} = mr^2\dot{\Theta}\,, \qquad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}\sin^2\Theta$$

それらの式を逆に速度について得くと

$$\dot{r} = \frac{p_r}{m}\,, \qquad \dot{\Theta} = \frac{p_\Theta}{mr^2}\,, \qquad \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2\sin^2\Theta}$$

になる。それらの式を使って、Hamiltonian (4) は次のようになる：

$$H = p_r\dot{r} + p_\Theta\dot{\Theta} + p_\varphi\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\Theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\Theta}\right) + U(r) \tag{9}$$

次に Hamilton の方程式 (6) を書き出す：

(1) (r, p_r) について：

$$\begin{aligned}\dot{r} &= \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m}\\ \dot{p}_r &= -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\Theta^2}{mr^3} + \frac{p_\varphi^2}{mr^3\sin^2\Theta} - U'(r)\end{aligned}$$

(2) (Θ, p_Θ) について：

$$\begin{aligned}\dot{\Theta} &= \frac{\partial H}{\partial p_\Theta} = \frac{p_\Theta}{mr^2} \\ \dot{p}_\Theta &= -\frac{\partial H}{\partial \Theta} = \frac{p_\varphi^2 \cos\Theta}{mr^2 \sin^3\Theta}\end{aligned}$$

(3) (φ, p_φ) について：

$$\begin{aligned}\dot{\varphi} &= \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2 \sin^2\Theta} \\ \dot{p}_\varphi &= -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0\end{aligned}$$

この Hamliton の方程式は、Lagrangian (8) から導かれる Euler-Lagrange 方程式と等価であることも確認することができる。

2. Poisson bracket （ポアッソンのかっこ)

任意の関数 $f(p,q,t)$ の時間微分は次のように表される：

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial f}{\partial p_k}\dot{p}_k \right)$$

ここで $\dot{q}_k$ および $\dot{p}_k$ を Hamilton 方程式 (4) を使って表すと次式になる：

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\} \tag{10}$$

ただし H と f との Poisson かっこは次のように定義した：

$$\{H, f\} = \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial f}{\partial q_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial f}{\partial p_k} \right) \tag{11}$$

従って、$f(p,q,t)$ が保存量であるための条件 (ただし f が時間に陽に依存しない場合) は次のように表すことができる：

$$\{H, f\} = 0 \tag{12}$$

すなわち、Hamltonian との Poisson かっこはゼロになる物理量は保存量である。

式 (11) の一般化として、任意の関数 $f(p,q,t)$ と $g(p,q,t)$ との Poisson かっこは次のように定義されている：

$$\{f,g\} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k} - \frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k}\right) \tag{13}$$

例えば g として座標の成分 $(g = q_k)$ および運動量の成分 $(g = p_k)$ をとるときに、 Poisson かっこ (13) は次のようになる：

$$\{f, q_k\} = \frac{\partial f}{\partial p_k}, \qquad \{f, p_k\} = -\frac{\partial f}{\partial q_k}$$

ただし $\frac{\partial q_k}{\partial q_l} = \frac{\partial p_k}{\partial p_l} = \delta_{kl}$ および $\frac{\partial q_k}{\partial p_l} = \frac{\partial p_k}{\partial q_l} = 0$ を使った [2]。また、上式に $f = q_i$ および $f = p_i$ をとるときに、

$$\{q_i, q_k\} = 0\,, \qquad \{p_i, p_k\} = 0\,, \qquad \{p_i, q_k\} = \delta_{ik}$$

が得られる。それらの関係式は量子力学を勉強するときに大切になる。

3つの任意の関数 f, g, h の間に次の Jacobi の恒等式が成り立つ（定義式 (13) を利用して証明できる）：

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{f, h\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \tag{14}$$

Jacobi の恒等式から次のことが言える：f と g が保存量であれば、$\{f, g\}$ も保存量である。証明は簡単のため f, g が時間に陽に依存しない場合を示す： Jacobi 恒等式 (14) で $h = H$ を使うと

$$\{f, \{g, H\}\} + \{g, \{f, H\}\} + \{H, \{f, g\}\} = 0$$

[2] 以前も使った Kronecker delta 記号は, $i = j$ の場合は $\delta_{ij} = 1$, $i \neq j$ の場合は $\delta_{ij} = 0$ で定義されている。

となる。従って、$\{f,H\}=\{g,H\}=0$ であれば、$\{H,\{f,g\}\}$ もゼロでなければならない。従って、$\{f,g\}$ は保存量である。一般の証明（f,g が陽に時間に依存する場合も含めて）: 教科書に参照。