1　ハミルトニアンとハミルトンの正準方程式

1.1　ハミルトンの正準方程式を導く

オイラー・ラグランジュの運動方程式は,

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

であった．この方程式は（殆ど）どのような座標を選んでも同じ形で書けるというメリットがあるが，ニュートンの運動方程式に対応して時間の二回微分を含んでしまうという特徴がある．この方程式をより解きやすく，より対称性がはっきりするように変形したものがこれから導くハミルトンの正準方程式である．

まず最初に方程式 (1) を一階の微分方程式にするために,

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \qquad (i=1,\,2,\,\cdots,\,f) \tag{2}$$

と置こう．こうすると，L が $\{q_i\}$, $\{\dot{q}_i\}$ 及び t の関数であることより，p_i 達も,

$$p_i=p_i(q_1,\,q_2,\,\cdot,\,q_f,\,\dot{q}_1,\,\dot{q}_2,\,\cdots,\,\dot{q}_f,\,t), \qquad (i=1,\,2,\,\cdots,\,f) \tag{3}$$

となる．これを (1) 式に代入することにより,

$$\frac{d}{dt}p_i-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0, \qquad (i=1,\,2,\,\cdots,\,f)$$

即ち,

$$\dot{p}_i=\frac{\partial L}{\partial q_i}, \qquad (i=1,\,2,\,\cdots,\,f)$$

が得られるから,

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

と書けるから,

$$d\left(\sum_{i=1}^{f}p_i\dot{q}_i-L\right)=\sum_{i=1}^{f}(\dot{q}_i dp_i-p_i dq_i)-\frac{\partial L}{\partial t}dt \tag{4}$$

が成り立つ．ここで,

$$H\overset{\text{def}}{=}\sum_{i=1}^{f}p_i\dot{q}_i-L \tag{5}$$

と置くと，(4) の右辺の形から考えて，H の独立変数は $\{q_i\}$, $\{p_i\}$ 及び t ととるのが適当なので，(3) を $\dot{q}_i$ について解き,

$$\dot{q}_i=\dot{q}_i(q_1,\,q_2,\,\cdot,\,q_f,\,p_1,\,p_2,\,\cdots,\,p_f,\,t), \qquad (i=1,\,2,\,\cdots,\,f) \tag{6}$$

達を (5) に代入して,

$$H=H(q_1,\,q_2,\,\cdot,\,q_f,\,p_1,\,p_2,\,\cdots,\,p_f,\,t), \qquad (i=1,\,2,\,\cdots,\,f) \tag{7}$$

と書くことが出来る．このように (5) で定義された H を一般化座標 $\{q_i\}$ と一般化運動量 $\{p_i\}$ で書き表したとき，これをハミルトニアンと呼ぶ.

$$dH=\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial H}{\partial q_i}dq_i+\frac{\partial H}{\partial p_i}dp_i\right)+\frac{\partial H}{\partial t}dt \tag{8}$$

だから，(4) と比較することにより，

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad\qquad (i = 1,\, 2,\, \cdots,\, f) \tag{9}$$

及び,

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}, \tag{10}$$

が得られる.

1.2 最小作用の法則からハミルトンの正準方程式を導く

まず,

$$L \equiv \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - H(\{q_i,\, p_i\}), \tag{11}$$

とおく．すると最小作用の原理から,

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} L dt = \delta \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - H dt = \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^{f} \delta(\dot{q}_i p_i) - \delta H dt, \tag{12}$$

ここで,

$$\delta(\dot{q}_i p_i) = p_i \delta \dot{q}_i + \dot{q}_i \delta p_i, \tag{13}$$

で,

$$\delta \dot{q}_i = \frac{d}{dt} \delta q_i, \tag{14}$$

だから，部分積分によって,

$$\int_{t_0}^{t_1} p_i \delta \dot{q}_i dt = \Big[p_i \delta q_i \Big]_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} \dot{p}_i \delta q_i dt \tag{15}$$

となるが，ここで積分の端点は固定されているから，$\delta q_i = 0$ である．従って,

$$\int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^{f} \delta(\dot{q}_i p_i) dt = \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \delta p_i + \sum_{i=1}^{f} p_i \delta \dot{q}_i dt = \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \delta p_i - \sum_{i=1}^{f} \dot{p}_i \delta q_i dt \tag{16}$$

ここで,

$$\delta H = \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i + \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i, \tag{17}$$

が成り立つから，(12) 式に代入して,

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} L dt = \delta \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \delta p_i - \sum_{i=1}^{f} \dot{p}_i \delta q_i - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i dt \tag{18}$$

$$= \delta \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^{f} \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \sum_{i=1}^{f} \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i dt \tag{19}$$

$$= 0 \tag{20}$$

となる．ここで t_0 と t_1 の間隔を微小にとると，被積分関数は定数関数に近づくが，今右辺は 0 であるので，その値は 0 に違いない．すると各 q_i，p_i は全て独立だから，括弧の中身は全て 0 でなければならないことになるので,

$$\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} = 0, \qquad\qquad (i = 1,\, 2,\, \cdots,\, f) \tag{21}$$

$$\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} = 0, \qquad\qquad (i = 1,\, 2,\, \cdots,\, f) \tag{22}$$

即ち,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad (i = 1,\, 2,\, \cdots,\, f) \tag{23}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad (i = 1,\, 2,\, \cdots,\, f) \tag{24}$$

が得られた.

この結果をまとめると次のようになる: まず,

1. $L = T - U$ などによって系のラグランジアンを一般化座標 $\{q_i\}$, $\{\dot{q}_i\}$ で表す.
2. $p_i \equiv \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ によって一般化運動量を定義する.
3. $H \overset{\mathrm{def}}{=} \sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}_i - L$ と置く.
4. $H = L(q_1,\, q_2,\, \cdot,\, q_f,\, \dot{q}_1,\, \dot{q}_2,\, \cdots,\, \dot{q}_f,\, t)$ を改めて, $H = H(q_1,\, q_2,\, \cdot,\, q_f,\, p_1,\, p_2,\, \cdots,\, p_f,\, t)$ に変数変換をしておく.
5. このようにして得られたハミルトニアン H に対して, $\dfrac{dq_i}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dfrac{dp_i}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial q_i}$ 及び, $\dfrac{\partial H}{\partial t} = -\dfrac{\partial L}{\partial t}$ が新しい運動方程式になる. この式は変数の個数が 2 倍になったのと引き換えに, ニュートンの運動方程式やオイラー・ラグランジュ方程式と異なり一階の方程式であり, かつ, 変数 q_i と p_i に対してかなり対称性がある形になっている.

1.3 ハミルトニアンとエネルギー積分

さて, 前項までに得られたハミルトニアン H とは一体物理的に何を意味するのであろうか? それを確認するために次のエネルギー積分を求めよう. ここでは, 力がポテンシャルから導ける場合について示す.

まず, オイラー・ラグランジュの方程式より,

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \qquad (i = 1,\, 2,\, \cdots,\, f) \tag{25}$$

であるから, $\dot{q}_i$ を掛けて和をとると,

$$\sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \tag{26}$$

が成り立つ. ここで,

$$L = L(q_1(t),\, q_2(t),\, \cdots,\, q_f(t),\, \dot{q}_1(t),\, \dot{q}_2(t),\, \cdots,\, \dot{q}_f(t)), \tag{27}$$

が成り立つから,

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i, \tag{28}$$

より,

$$\sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial q_i}\dot{q}_i = \frac{dL}{dt} - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i, \tag{29}$$

が成り立つから, (12) 式は,

$$\sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \left(\frac{dL}{dt} - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i\right) = 0, \tag{30}$$

となるので, これをまとめると,

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i} - L\right) = 0, \tag{31}$$

より，

$$\sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i} - L = C(\text{定数}), \tag{32}$$

が得られる．このままではこの結果が何を意味するのか分かりにくいから，

$$\sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i}, \tag{33}$$

の部分が一体何を意味するのか調べてみよう．まずデカルト座標で表した運動エネルギー T は次の通りである:

$$T = \sum_{i=1}^{f} \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2, \tag{34}$$

ここで $\dot{x}_i$ 達は広義座標 $\dot{q}_i$ 達と，

$$\dot{x}_i = \sum_{j=1}^{f} \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \dot{q}_j, \tag{35}$$

の関係で結ばれているから，これを (20) に代入して，

$$T = \sum_{i=1}^{f} \frac{1}{2} m_i \left(\sum_{j=1}^{f} \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \dot{q}_j \right)^2, \tag{36}$$

が成り立つから，これを $\dot{q}_r$ で偏微分して，

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_r} = \sum_{i=1}^{f} \frac{1}{2} m_i \times 2 \left(\sum_{j=1}^{f} \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \dot{q}_j \right) \frac{\partial x_i}{\partial q_r}, \tag{37}$$

これに $\dot{q}_r$ を掛けて和をとると，

$$\begin{aligned}
\sum_{r=1}^{f} \dot{q}_r \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_r} &= \sum_{r=1}^{f} \sum_{i=1}^{f} \frac{1}{2} m_i \times 2 \left(\sum_{j=1}^{f} \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \dot{q}_j \right) \frac{\partial x_i}{\partial q_r} \dot{q}_r & (38) \\
&= 2 \sum_{i=1}^{f} \frac{1}{2} m_i \left(\sum_{j=1}^{f} \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \dot{q}_j \right) \sum_{r=1}^{f} \frac{\partial x_i}{\partial q_r} \dot{q}_r & (39) \\
&= 2 \sum_{i=1}^{f} \frac{1}{2} m_i \left(\sum_{j=1}^{f} \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \dot{q}_j \right)^2 & (40) \\
&= 2T, & (41)
\end{aligned}$$

この結果を式 (18) に代入すると，

$$H = \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i} - L = 2T - (T - V) = T + V = C, \tag{42}$$

より，ハミルトニアン H は全エネルギーを表し，それが保存することを示す式であることが分かる．逆に言えば，正準変数としての関係，

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \tag{43}$$

を満たす，一般化座標 $\{q_i\}$ 及び $\{p_i\}$ によって系全体のエネルギーが表されていればまず”大体は”ハミルトニアンになっているのでそれによって簡単に運動方程式を解くことが出来ることになる．