§3　Hamilton 関数と Hamilton の運動方程式

後に述べるように，Euler-Lagrange 方程式(Lagrange の運動方程式）が変分原理から導かれ，Hamilton の運動方程式（正準方程式）もここから得られる．しかし，その前に Hamilton の運動方程式について，簡単な具体的な例で慣れておこう．

１）保存力場の一粒子系に対する Hamilton の運動方程式

保存力場の一粒子系に対する Hamilton の運動方程式について考える．はじめに Lagrangian を考えた時，L＝T−V のように L の具体的な内容を指定して議論した．これと同様にして，Hamilton 関数(Hamiltonian)を，全エネルギ−

$$H \equiv E = T + V \tag{1}$$

と，取り敢えず．定義してこの問題を考える．(x,y,z)座標系での運動量と座標を使って，全エネルギ−としての Hamilton 関数を具体的に書くことが出来る．

$$H = E = T + V = \frac{1}{2m}({p_x}^2 + {p_y}^2 + {p_z}^2) + V(x, y, z). \tag{2}$$

である．(2)は $H(x,y,z;p_x,p_y,p_z)$ であることを示しているから，L の場合と同じように，H をまず p_x,p_y,p_z の各々で偏微分すると次のようになる．

$$\frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{1}{m}p_x, \quad \frac{\partial H}{\partial p_y} = \frac{1}{m}p_y, \quad \frac{\partial H}{\partial p_z} = \frac{1}{m}p_z \tag{3}$$

これらは運動量の定義から， $p_x = m\dot{x}$，　$p_y = m\dot{y}$，　$p_z = m\dot{z}$　であるから，

$$\frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{1}{m}p_x = \dot{x}, \quad \frac{\partial H}{\partial p_y} = \frac{1}{m}p_y = \dot{y}, \quad \frac{\partial H}{\partial p_z} = \frac{1}{m}p_z = \dot{z} \tag{4}$$

一方，H を x，y，z で偏微分すると，V(x,y,z)のみが関係するから，

$$\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial V}{\partial x}, \quad \frac{\partial H}{\partial p_y} = \frac{\partial V}{\partial y}, \quad \frac{\partial H}{\partial p_z} = \frac{\partial V}{\partial z} \tag{5}$$

である．Newton の運動方程式から， $m\ddot{x} = -\dfrac{\partial V}{\partial x}$　であるから，これは

$$m\ddot{x} = \dot{p}_x = -\frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

となる．結局，Hamilton 関数(Hamiltonian)を $H(x,y,z;p_x,p_y,p_z)$ とすると，

$$\frac{\partial H}{\partial x}=-\dot{p}_x,\quad \frac{\partial H}{\partial y}=-\dot{p}_y,\quad \frac{\partial H}{\partial z}=-\dot{p}_z \tag{6}$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_x}=\dot{x},\quad \frac{\partial H}{\partial p_y}=\dot{y},\quad \frac{\partial H}{\partial p_z}=\dot{z} \tag{4}$$

であり，これは Newton の運動方程式と同一の内容となっている．(6)，(4)は保存力場の一粒子系に対する Hamilton の運動方程式である．

この系の Lagrange 関数は，$L(x,y,z,\dot{x},\dot{y},\dot{z})\equiv T-V$ であり，座標の時間微分を含んでいるが，Hamilton 関数は $H(x,y,z;p_x,p_y,p_z)$ であり，形式上時間微分の変数を含んでいない．Newton の運動方程式は，2 階の時間微分方程式で，(x,y,z)に関しての３つの方程式であるが，Hamilton の運動方程式では，６つの変数 $(x,y,z;p_x,p_y,p_z)$ についての時間についての一階の微分方程式である．時間微分を 1 階だけ落とすことで，変数を２倍にしたことになる．さらに，(6)と(4)を比べればわかるように，例えば，$\frac{\partial H}{\partial x}=-\dot{p}_x$ と $\frac{\partial H}{\partial p_x}=\dot{x}$ の対を考えてみると，一方の等式で座標変数とこれに対応した運動量を入れ替え，マイナス符号を付けると，もう一つの等式になる性質を持っている．

２）一般化運動量と正準方程式

これまでの議論を思い起こすと，保存力場の一粒子系に対する Lagrange 関数は $L(x,y,z,\dot{x},\dot{y},\dot{z})\equiv T-V$ であり L の速度成分 $\dot{x}$ を独立変数のように考えて，これで L を偏微分してみると，V は(x,y,z)のみに依るから無関係となり，T だけが関係し，

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}=\frac{\partial}{\dot{x}}(T-V)=\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}=m\dot{x}$$

である．これは p_x のことであるから，

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}=p_x,\quad \frac{\partial L}{\partial \dot{y}}=p_y,\quad \frac{\partial L}{\partial \dot{z}}=p_z \tag{7}$$

である．一方，次のことも確認できる．

$$(p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_z\dot{z}) - L = (p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_z\dot{z}) - (T - V)$$
$$= (1/2)(p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_z\dot{z}) + V = T + V = E = H$$

即ち，

$$H = (p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_z\dot{z}) - L \tag{9}$$

となっている．ここで q_i=x, y, z および，p_i=p_x, p_y, p_z とすると，(9)は，

$$H = \sum_i p_i\dot{q}_i - L(q_i,\dot{q}_i) \tag{10}$$

この全微分をとると，

$$dH = \sum_i p_i d\dot{q}_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \frac{\partial L(q_i,\dot{q}_i)}{\partial q_i}dq_i - \sum_i \frac{\partial L(q_i,\dot{q}_i)}{\partial \dot{q}_i}d\dot{q}_i$$

この結果に(7)を代入すると，第一項と第四項は消えるから，

$$dH = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \frac{\partial L(q_i,\dot{q}_i)}{\partial q_i}dq_i \tag{11}$$

となる． Lagrange の方程式から，

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right) = 0 \quad (i = x,\ y,\ z)$$

であり，さらに，(7)を使うと，

$$\dot{p}_i = \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right) \quad (i = x,\ y,\ z)$$

である．結局，(11)は，次のようになる．

$$dH = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \dot{p}_i dq_i \tag{12}$$

一方，Hamilton 関数は $H(x,y,z;p_x,p_y,p_z)$ であることから，この全微分は，

$$dH = \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i}dq_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i}dp_i \tag{13}$$

である．(12)と(13)で dq_i=dx, dy, dz および，dp_i=dp_x, dp_y, dp_z の係数は等しいとおけるから，

$$\dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x},\ \dot{p}_y = -\frac{\partial H}{\partial y},\ \dot{p}_z = -\frac{\partial H}{\partial z}\quad,\qquad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x},\ \ \dot{y} = \frac{\partial H}{\partial p_y},\ \ \dot{z} = \frac{\partial H}{\partial p_z} \tag{14}$$

を得る. これは保存力場の一粒子系に対する Hamilton の運動方程式である, 既に(4),(6)として得た結果である．Hamiltonian を，単に全エネルギーとしてではなく，(9)或は(10)として導いたことになる.

これから，**一般座標 $\mathbf{q_i}$ に対する一般化運動量 $\mathbf{p_i}$** を定義する.

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i\ \ (i = 1,\ 2,\ .....,f) \tag{8}$$

そして，保存力場の一般的力学系に対する Hamiltonian は，一般化座標系 $(q_1, q_2,\ \cdots, q_f)$ とこれに対応する一般化運動量 $(p_1, p_2,\ \cdots, p_f)$ の関数として,

$$H(q_1, q_2,\ \cdots, q_f; p_1, p_2,\ \cdots, p_f) = \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i p_i - L \tag{9}$$

であり，全エネルギーになっている．この時，Hamilton の運動方程式は,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad (i = 1,2,......,f) \tag{10}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (i = 1,2,......,f) \tag{11}$$

となる．**Hamilton の正準方程式**(canonical equation of motion)とも呼ばれる．この方程式の変数となっている q_i と p_i は**正準変数**(canonical variables)と呼ばれる．**一般化座標 q_i に対応する一般化運動量 p_i は，q_i に共役な正準運動量**（canonical momentum conjugate to q_i)とも呼ばれる.

Newton の運動方程式が，Euler-Lagrange の方程式を経て Hamilton の正準方程式として一般化された.