§4　変分原理(Hamilton の原理)

Lagrange の運動方程式（Euler-Lagrange の方程式)や Hamilton の正準方程式が，**変分原理**(variation principle)から導けることは William R. Hamilton (1805-1865) が見出したので，変分原理は Hamilton の原理とも呼ばれる．Newton 力学を，Lagrange 形式を経由して，美しい単純な Hamilton 形式に書き改めたのは，Hamilton であり，Hamiltonian (Hamilton 関数）としてその名を古典力学，量子力学に残すことになった．

*詩人としての性向も強く持つ多感な天才 Hamilton の人生は，しかし，辛い孤独なものであったらしい．彼の人生の物語は，**藤原正彦著「心は孤独な数学者」（新潮社，1997）**に「**アイルランドの悲劇と栄光**」と題して紹介されているので，是非一読を勧める．Hamiltonian (Hamilton 関数）を少しは身近に感じることが出来る．*

１）作用積分と変分原理：Euler-Lagrange 方程式の導出

系の Lagrangian　が，

$$L = L(q_1, q_2, \cdots, q_f; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_f) \tag{1}$$

と与えられているとする．この系の刻々の空間座標は$(q_1, q_2, \cdots, q_f)$の一組で与えられるので，$(q_1, q_2, \cdots, q_f)$は，f 次元空間の一点の位置を代表している．このような座標変数で指定される”空間”を特に**配位空間**（configuration space）と言う．

刻々の系の位置は配位空間上の点に対応しており，時間が経過するとともに，その点の軌跡は f 次元の曲線を描きながら変化してゆく．このような曲線を**経路**と呼ぶ．

次のような，経路に沿った$L = L(q_1, q_2, \cdots, q_f; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_f)$の時間についての定積分を**作用積分**（action integral）と定義する．

$$I \equiv \int_{t_1}^{t_2} L(q_1, q_2, \cdots, q_f; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_f)dt \tag{2}$$

初めと終わりの時間は t_1 と t_2 と指定されているので，その時の系の位置 P_1 と P_2 も指定されており，これらは固定点である．

$$P_1 = (q_1(t_1), q_2(t_1), ..., q_f(t_1))$$

$$P_2 = (q_1(t_2), q_2(t_2), ..., q_f(t_2))$$

系の t_1 での位置 P_1 から t_2 の位置 P_2 に至る経路の点 P は,

$$P = (q_1(t), q_2(t), ..., q_f(t)) \qquad (t_1 \le t \le t_2) \tag{3}$$

となる．こような経路は幾つもあるが, **変分原理**は,

「現実の系の運動がたどる経路は，(2)の作用積分が極値を取るものである」

と考える．

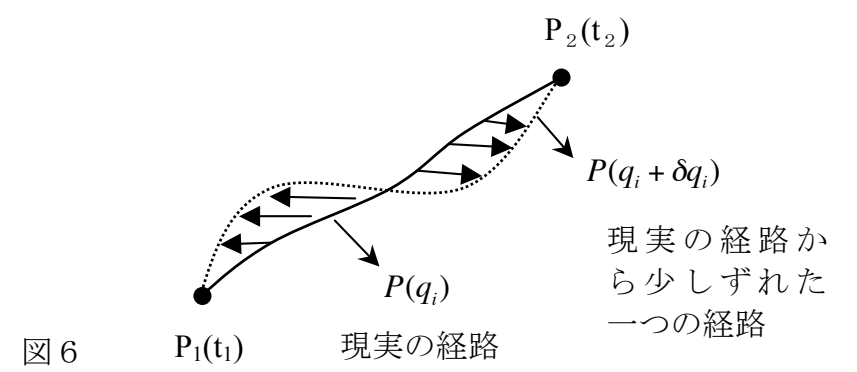

図 6

(2)の作用積分が極値を取るとの意味を考える為に, 現実の経路から少しずれた一つの経路,

$$P' = (q_1(t) + \delta q_1(t), q_2(t) + \delta q_2(t), ..., q_f(t) + \delta q_f(t)) \qquad (t_1 \le t \le t_2) \tag{4}$$

を考えて，この作用積分 I' を考える．

$$I' \equiv \int_{t_1}^{t_2} L(q_1 + \delta q_1, q_2 + \delta q_2, \cdots, q_f + \delta q_f; \dot{q}_1 + \delta \dot{q}_1, \dot{q}_2 + \delta \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_f + \delta \dot{q}_f) dt \tag{5}$$

作用積分は t_1 と t_2 が指定された定積分であるので, その時の系の位置 P_1 と P_2 は, 現実の経路に関する作用積分(I)でも，これからずれた経路(5)についての作用積分(I')でも，同じである．

(2)の作用積分が極値を取るとは，どのような微少量の$\delta q_1(t), \delta q_2(t), ..., \delta q_f(t)$に対しても，$I'-I=\delta I$ が０となることである．$I'-I=\delta I$を微小変化の一次まで取ったものを変分と呼んでいる．

変分原理,”変分＝０”，は簡単に書く場合は，次の様になる．

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L(q_1, \cdots, q_f; \dot{q}_{11}, \cdots, \dot{q}_f)dt = 0$$

ここでは丁寧に書こう，

$$\begin{aligned} I'-I=\delta I &= \int_{t_1}^{t_2} L(q_1+\delta q_1, \cdots, q_f+\delta q_f; \dot{q}_1+\delta\dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_f+\delta\dot{q}_f)dt \\ &\quad -\int_{t_1}^{t_2} L(q_1, \cdots, q_f; \dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_f)dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \{\frac{\partial L}{\partial q_1}\delta q_1 + \cdots + \frac{\partial L}{\partial q_f}\delta q_f + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}\delta\dot{q}_1 + \cdots \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_f}\delta\dot{q}_f)dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{f} (\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta\dot{q}_i)dt = 0 \end{aligned} \tag{6}$$

簡単表現を使うと，

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L(q_1+\delta q_1, \cdots, q_f+\delta q_f; \dot{q}_1+\delta\dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_f+\delta\dot{q}_f)dt$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{f} (\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta\dot{q}_i)dt = 0$$

である．

(6)の括弧内の第二項は時間微分であり，$\delta\dot{q}_i = \frac{d}{dt}(\delta q_i)$であり，全体は t に関する定積分なので，部分積分が使える．積分と和は入れ替えても良いから，

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{f} (\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta\dot{q}_i)dt = \sum_{i=1}^{f} (\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\frac{d(\delta q_i)}{dt}dt) = \sum_{i=1}^{f} [\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i]_{t_1}^{t_2} - \sum_{i=1}^{f} \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i})\delta q_i dt \tag{7}$$

t_1とt_2は指定されており，二つの作用積分で同じであるから，

$$\delta q_1(t_1) = \delta q_1(t_2) = 0,\quad \delta q_2(t_1) = \delta q_2(t_2) = 0,\ \ldots,\ \delta q_f(t_1) = \delta q_f(t_1) = 0$$

であり，(7)右辺の第一項は０である．この(7)の結果を(6)に戻すと，

$$I' - I = \delta I = \int_{t_1}^{t_2} [\sum_{i=1}^{f} \{\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i})\}\delta q_i] dt = 0 \qquad (8)$$

となる．どのような$\delta q_1(t), \delta q_2(t), \ldots, \delta q_f(t)$に対しも (8)＝０が成立するとは，

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) = 0 \qquad (i = 1,2,\ldots\ldots,f) \qquad (9)$$

であり，Lagrange の運動方程式（Euler-Lagrange 方程式）が成立することである．

以上のように，**変分原理（Hamilton の原理）は，**初期座標値と終期座標値を固定した作用積分が極値（停留値）をとるのが現実の運動であると考える．この原理から Lagrange の運動方程式（Euler-Lagrange 方程式）が導出される．

Lagrangian には，一般化座標とその時間微分が含まれているので，はじめは，(6)のように一般化座標とその時間微分の変分を取っているが，最終的には，(8)のように，**時間微分の変分は消え**，f 個の**一般化座標のみの変分**になっていることに注意．次に，Lagrangian を Hamiltonian をで表現し，変分原理を用いて，Hamiltonian の正準方程式を得ることを述べるが，これとの相違に注意されたい．

２）Hamilton の正準方程式: Lagrangian から Hamiltonian へ

系の Lagrangian　$L = L(q_1, q_2, \cdots, q_f; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_f)$の変数$(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_f)$を新たな変数$(p_1, p_2, \cdots, p_f)$に変えるためには，$L$ に代えて新たな関数 H

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

を定義する．熱力学で多用される Legendre 変換，

”*新関数＝（新変数と消したい旧変数の積の和）－（旧関数*)”

に対応する変換である．

(1) の左辺 $H(q_1, q_2, \cdots, q_f; p_1, p_2, \cdots, p_f)$ の全微分は,

$$dH = \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \tag{2}$$

一方，(1)の右辺の全微分は,

$$dH = \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i dp_i + \sum_{i=1}^{f} p_i d\dot{q}_i - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \tag{3}$$

となる．既に述べたように，一般座標 q_i に対する一般化運動量 p_i は次のように定義される．

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i \quad (i = 1, 2, \ldots\ldots, f) \tag{4}$$

これにより(3)の第二項と第四項は相互に打ち消す．また，１）の Lagrange の運動方程式（Euler-Lagrange 方程式）は,

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \qquad (i = 1,2,\ldots\ldots,f) \tag{5}$$

であり，(4)を代入すると,

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}(p_i) = 0 \quad \text{or} \quad \dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad (i = 1,2,\ldots\ldots,f) \tag{6}$$

であるから，(3)に(4), (6)を代入すると,

$$dH = \sum_{i=1}^{f} \dot{q}_i dp_i - \sum_{i=1}^{f} \dot{p}_i dq_i \tag{7}$$

となる．(2)と(7)で，dp_i と dq_i の係数は等しいことが必要であるり,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (i = 1,2,\ldots\ldots,f) \tag{8}$$

である．これは既に説明した Hamilton の正準方程式である．２f 個の一階の連立微分方程式である．この点は既に説明してある．

しかし，(1)の Hamiltonian に変分原理を直接適用することで，Hamilton の正準方程式を直接導くことも出来る．変分原理での作用積分は Lagrangian が用いられているから， Hamiltonian を用いて Lagrangian を表すと(1)で，L と H を入れ替えて,

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

である．

変分原理から，

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \{ \sum_{i=1}^{f} (p_i \delta \dot{q}_i + \dot{q}_i \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i) \} dt = 0 \tag{9}$$

第一項に**時間微分**があるので，１）の場合と同じように部分積分を行う．

$$\int_{t_1}^{t_2} (\sum_{i=1}^{f} p_i \delta \dot{q}_i) dt = \sum_{i=}^{f} \int_{t_1}^{t_2} \{ p_i \frac{d}{dt} (\delta q_i) \} dt = \sum_{i=1}^{f} [p_i \delta q_i]_{t_1}^{t_2} - \sum_{i=1}^{f} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{p}_i \delta q_i) dt$$

この右辺第一項は０となるので，この結果を，(9)に戻すと，結局，

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{f} \{ (\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}) \delta p_i - (\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i) \} dt = 0 \tag{10}$$

$$\delta q_1(t_1) = \delta q_1(t_2) = 0, \quad \delta q_2(t_1) = \delta q_2(t_2) = 0, \ \ldots, \ \delta q_f(t_1) = \delta q_f(t_2) = 0 \tag{10-1}$$

だけではなく，

$$\delta p_1(t_1) = \delta p_1(t_2) = 0, \quad \delta p_2(t_1) = \delta p_2(t_2) = 0, \ \ldots, \ \delta p_f(t_1) = \delta p_f(t_2) = 0 \tag{10-2}$$

を考え，かつ，いかなる δq_i，δp_i　に対しても(10)が恒等的に０である為には，

$$\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} = 0, \qquad \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1,2,\ldots\ldots,f)$$

となる．これは，Hamilton の正準方程式に他ならない．

(10)で，２f 個の δq_i，δp_i の変分を考えており，一般化座標と一般化運動量が共に独立変数と見なされている．(q_i, p_i) で決まる空間を特に**位相空間 (phase space)**と言う．正準変数が張る空間が位相空間であるとも言える．一般化座標 (q_i) だけで指定される空間を**配位空間（configuration space)**と言うことをのべたが，位相空間の重要性と配位空間の違いについては，後に改めて議論する．

３）Hamilton 関数（Hamiltonian）の具体例

Hamilton 関数の意味については既に述べたように，系の全エネルギーである

が，幾つかの具体例でこれを確認し，正準方程式を求めておこう．

＜調和振動子＞

質量 m，バネ定数 k の一次元の調和振動子の Lagrangian　は，

$$L(x,\dot{x}) = T - V = (1/2)m(\dot{x})^2 - (1/2)kx^2 \tag{11}$$

である．これから，

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x},\ H = p\dot{x} - L = p(\frac{1}{m}p) - \frac{1}{2}m(\frac{1}{m}p)^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2 \tag{12}$$

である．正準方程式は，

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{1}{m}p, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx \tag{13}$$

である．　　第一式を時間微分して第二式に代入して $\dot{p}$ を消去すると，

$\ddot{x} = -(k/m)x$　であり，この解は既に述べたように，

$x = A\cos(\omega t + \phi)$ である．ただし、　$\omega = \sqrt{k/m}$　であり、これは単振動の角振動数である．A は振幅の定数、ϕ　は初期位相を表す定数である．

＜保存力場の一粒子系＞

直交座標系でのこの系の Hamilton 関数は既に議論している．

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

ここでは，極座標系での Hamilton 関数を求める．

極座標系での Lagrange 関数は，

$$L = (1/2)m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 sin^2\varphi) - V(r,\theta,\varphi)$$

として既に得られているから，r, θ, φ　に正準共役な運動量 p_r, p_θ, p_φ は，

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \qquad p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}, \qquad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}\, sin^2\theta \tag{14}$$

となる．　$H = \sum_{i=1}^{f} p_i\dot{q}_i - L$　として Hamilton 関数を求めると，

$$H = p_r\dot{r} + p_\theta\dot{\theta} + p_\varphi\dot{\varphi} - (1/2)m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 sin^2\varphi) + V(r,\theta,\varphi)$$

$$= \frac{1}{m}(p_r)^2 + \frac{1}{mr^2}(p_\theta)^2 + \frac{1}{mr^2 sin^2\theta}(p_\varphi)^2$$

$$-(1/2)m\{(p_r/m)^2 + r^2(p_\theta/mr^2)^2 + r^2 sin^2\varphi(p_\varphi/mr^2 sin^2\theta)^2\} + V(r,\theta,\varphi)$$

整理すると以下のようになる．

$$H = \frac{1}{2m}\{(p_r)^2 + \frac{1}{r^2}(p_\theta)^2 + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}(p_\varphi)^2\} + V(r,\theta,\varphi) \qquad (15)$$

この H から正準方程式は自動的に求まるので，自らやってみて欲しい．

4) 循環座標と運動量の保存

前節終わりで，保存力場の一粒子系の Hamiltonian は，

$$H = \frac{1}{2m}\{(p_r)^2 + \frac{1}{r^2}(p_\theta)^2 + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}(p_\varphi)^2\} + V(r,\theta,\varphi) \qquad (15)$$

であった．原子核の廻りの電子の平面内運動については，Lagrangian の応用例として述べたが，この Hamiltonian は，$\theta=\pi/2$, $p_\theta=0$, $V=-(Ze^2/r)$として，(15)から次のようになる．

$$H = \frac{1}{2m}\{(p_r)^2 + \frac{1}{r^2}(p_\varphi)^2\} - Ze^2/r \qquad (16)$$

(1)で定義したように，一般に，Hamiltonian は一般化座標と一般化運動量の関数である．

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

ところが，(16)の例では，$H = H(r; p_r, p_\varphi)$となっており，座標変数φが H に含まれていない．このように Hamiltonian に含まれない座標変数のことを**循環座標** (cyclic coordinates)と呼ぶ．すでに見たように，この系の Lagrange の運動方程式は，

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}}) - \frac{\partial L}{\partial r} = m\ddot{r} - mr\dot{\varphi}^2 + Ze^2/r^2 = 0$$

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}) - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\varphi}) = 0$$

であった．二番目の式は角運動量の保存則を表しており，循環座標であるφの角運動量は定数になっている．

一般的に ”循環座標に対応する一般化運動量は定数である” ことを，(1)のH の定義と(8)の正準方程式 $\dot{q}_i = \dfrac{\partial H}{\partial p_i}$，$\dot{p}_i = -\dfrac{\partial H}{\partial q_i}$ $(i = 1,2,.....,f)$ から確認してみる．

今，座標変数のうち，q_1 が循環座標であるとすると，

$$H = H(q_2, \cdots, q_f; p_1, p_2, \cdots, p_f)$$

(8)の正準方程式から，

$$\dot{p}_1 = -\frac{\partial H}{\partial q_1} = 0 \qquad \text{即ち} \quad \dot{p}_1 = \frac{dp_1}{dt} = 0$$

であるので，一般化座標q_1に対応する一般化運動量p_1は定数である．

５）Lagrangian の任意性と Hamiltonian

5.1　Lagrangian の任意性

荷電粒子の運動や後の正準変換の議論では，Lagrangian の任意性が重要となる．これについてあらかじめ考えておく．

$$\bar{L} = L(q_i,\dot{q}_i) + \frac{dF}{dt} \tag{1}$$

を考えた時，$L(q_i,\dot{q}_i)$が変分原理を満足すれば，(1)の$\bar{L}$も変分原理を満足する．F は $F(q_i(t),t)$ なる任意の関数で，その変数は，**配位空間の座標変数** $q_i(t)$，$i = 1,2,....,f$ と時間 t である．これが成立することを以下で確認する．

$L(q_i,\dot{q}_i)$が変分原理を満足するとは，Lagrange の運動方程式

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) \tag{2}$$

が成立することと同じである．従って，$\bar{L}$についても，

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}(\frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{q}_i}) \tag{3}$$

であることを示せば良い．$F(q_i(t),t)$であるから，(1)のdF/dtを全ての変数を用いた間接微分に直す．

$$\bar{L} = L + \frac{dF}{dt} = L + \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

即ち，

$$\bar{L} = L + \sum_i \frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{4}$$

(3)右辺の$(\frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{q}_i})$を作るために，(4)の両辺を$\dot{q}_i$で微分するが，$F(q_i(t),t)$は$\dot{q}_i$を含んでいないから，

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial F}{\partial q_i} \tag{5}$$

である．これを時間で微分し，(3)右辺を作る．$\frac{\partial F}{\partial q_i}$は$F(q_i(t),t)$と同様に変数は$q_i(t),t$であることに注意して，

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial \overline{L}}{\partial \dot{q}_i}) = \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) + \sum_j \frac{\partial}{\partial q_j}(\frac{\partial F}{\partial q_i})\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(\frac{\partial F}{\partial q_i})$$

となる．これは，

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial \overline{L}}{\partial \dot{q}_i}) = \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) + \sum_j (\frac{\partial^2 F}{\partial q_j \partial q_i})\dot{q}_j + \frac{\partial^2 F}{\partial t \partial q_i} \tag{6}$$

一方，(3)左辺の$\frac{\partial \overline{L}}{\partial q_i}$は，(4)を$q_i$で偏微分して，

$$\frac{\partial \overline{L}}{\partial q_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} + \sum_j \frac{\partial^2 F}{\partial q_i \partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial^2 F}{\partial q_i \partial t} \tag{7}$$

である．(7)-(6)を作ると，偏微分の順序は関係ないから，

$$\frac{\partial \overline{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial \overline{L}}{\partial \dot{q}_i}) = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) = 0 \tag{9}$$

である．$L(q_i,\dot{q}_i)$が変分原理を満足するとは，$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) = 0$を満たすことであるから，(9)より (1)の$\overline{L}$も変分原理を満たす.

以上は， Lagrange の運動方程式に戻り，微分法で(9)であることを確認した．しかし，変分原理そのものを使えばもっと簡単である．

$$\overline{L} = L(q_i,\dot{q}_i) + \frac{dF}{dt} = L(q_i,\dot{q}_i) + \dot{F} \tag{1}$$

の変分を考える．$L(q_i,\dot{q}_i)$が変分原理を満足することは前提であるから， $\dot{F}$の変分だけを考えれば良い.

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} \dot{F}dt = \delta\int_{t_1}^{t_2} dF = \delta\{F(t_2) - F(t_1)\} = \delta F(t_2) - \delta F(t_1) \tag{10}$$

$F(t_2) - F(t_1)$は，t_1，t_2における$F(q_i(t),t)$の値で定数であるから，この変分は必ず０である．

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} \{L(q_i,\dot{q}_i) + \frac{dF}{dt}\}dt = \delta\int_{t_1}^{t_2} L(q_i,\dot{q}_i)dt \tag{11}$$

故に，$L(q_i,\dot{q}_i)$の変分が０であれば, (7)の$\overline{L} = L(q_i,\dot{q}_i) + \frac{dF(q_i,t)}{dt}$の変分も０である．

このように，$L(q_i,\dot{q}_i)$が変分原理を満たす時，$L(q_i,\dot{q}_i)$に任意関数の時間微分を

加えた$\overline{L} = L(q_i,\dot{q}_i) + \dfrac{dF(q_i,t)}{dt}$も変分原理を満たす．変分原理を満たすとの性質では，$L(q_i,\dot{q}_i)$と$\overline{L} = L(q_i,\dot{q}_i) + \dfrac{dF(q_i,t)}{dt}$が区別できない．Lagrangian は，このような任意性，不定性を本来的に持っている．

5.2　Lagrangian の任意性による Hamiltonian への影響

Lagrangian $L(q_i,\dot{q}_i)$が運動方程式を満足する時，$\overline{L} = L(q_i,\dot{q}_i) + \dfrac{dF(q_i,t)}{dt}$も同じ運動方程式を満足するという Lagrangian の任意性，不定性がある．これはどのような影響を Hamiltonian に与えるのであろうか？　これを考える．

もちろん，$L(q_i,\dot{q}_i) \to H(q_i,p_i)$の変換では，

$$p_k = \frac{\partial L(q_k,\dot{q}_k)}{\partial \dot{q}_k} \tag{1-1}$$

が成立しており，

$$H(q_i,p_i) = \sum_i p_i\dot{q}_i - L(q_i,\dot{q}_i) \tag{1-2}$$

の Legendre 変換で与えられる$H(q_i,p_i)$は，正準運動方程式，

$$\frac{dq_i}{dt} = \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \frac{dp_i}{dt} = \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{1-3}$$

を満足しているとする．

$$\overline{L}(q_i,\dot{q}_i,t) = L(q_i,\dot{q}_i) + \frac{dF(q_i,t)}{dt} \tag{1-4}$$

から，この$\overline{L}$に対応する Hamiltonian $\overline{H}$を作ってみれば良い．

その前に，三つ注意する点がある．第一は，何度もやったように，$F(q_k,t)$は変数が(q_k,t)であるから，時間による微分は変数の偏微分と座標の時間偏微分の積の和で表現できる．

$$\frac{dF(q_k,t)}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial F}{\partial q_k}\dot{q}_k \tag{2}$$

(1-4)右辺の第二項はこれで置き換える．$\partial F(q_k,t)/\partial t$ は$\dot{q}_k$を含まないことに注意．

注意点の第二は，ここでの Legendre 変換は，$\overline{L}(q_k,\dot{q}_k,t) \to \overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)$ の変数変

換であることである．(1-2)の $L(q_i,\dot{q}_i)\to H(q_i,p_i)$ ではないので，$\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)$ の $\overline{p}_k$ と(1-2)の p_k は区別が必要である．従って，ここでの Legendre 変換は

$$\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)=\sum_k \overline{p}_k\dot{q}_k-\overline{L}(q_k,\dot{q}_k,t)$$

$$=\sum_k \overline{p}_k\dot{q}_k-L(q_k,\dot{q}_k)-\frac{d}{dt}F(q_k,t)$$

$$=\sum_k \overline{p}_k\dot{q}_k-L(q_k,\dot{q}_k)-\frac{\partial F}{\partial t}-\sum_k(\frac{\partial F}{\partial q_k})\dot{q}_k \tag{3}$$

である．最後の等式には(2)を使った．

注意の第三点は，$\overline{L}(q_k,\dot{q}_k,t)\to\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)$ の変数変換では，

$$\overline{p}_k=\frac{\partial\overline{L}(q_k,\dot{q}_k,t)}{\partial\dot{q}_k} \tag{4}$$

であるから，(1-1), (2)を使って，

$$\overline{p}_k=\frac{\partial\overline{L}(q_k,\dot{q}_k,t)}{\partial\dot{q}_k}=\frac{\partial}{\partial\dot{q}_k}\{L(q_k,\dot{q}_k)+\frac{d}{dt}F(q_k,t)\}=p_k+\frac{\partial F}{\partial q_k} \tag{5}$$

である．$\partial F(q_k,t)/\partial t$ は $\dot{q}_k$ を含まないから消える．

(3)の $\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)$ と，(1-2)の元々の $H(q_i,p_i)=\sum_i p_i\dot{q}_i-L(q_i,\dot{q}_i)$ の関係は，

(3)の右辺に(5)を代入して，

$$\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)=\sum_k(p_k+\frac{\partial F}{\partial q_k})\dot{q}_k-L(q_k,\dot{q}_k)-\frac{\partial F}{\partial t}-\sum_k(\frac{\partial F}{\partial q_k})\dot{q}_k$$

$$=\sum_k p_k\dot{q}_k-L(q_k,\dot{q}_k)-\frac{\partial F}{\partial t}$$

$$=H(p_k,q_k)-\frac{\partial F}{\partial t}$$

$$=H(\overline{p}_k-\frac{\partial F}{\partial q_k},q_k)-\frac{\partial F}{\partial t} \tag{6}$$

となる．最後から二番目の式は，$\overline{H}\to H$ と $\overline{p}_k\to p_k$ を同時に変換した結果を示している．一方，最後の等式は，変数 $(\overline{p}_k,q_k,t)$ を左辺側と同じにものに戻しているから，変数が同じ時の $\overline{H}\to H$ の変換関係だけを示している．

Lagrangian が

$$L(q_i,\dot{q}_i) \rightarrow \overline{L}(q_i,\dot{q}_i,t) = L(q_i,\dot{q}_i) + \frac{dF(q_i,t)}{dt} \tag{7}$$

と変換されることで，Hamiltonian は，

$$H(p_k,q_k) \rightarrow \overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t) = H(\overline{p}_k - \frac{\partial F}{\partial q_k},q_k) - \frac{\partial F}{\partial t} \tag{8}$$

また，正準運動量は，(5)のように，

$$p_k \quad \rightarrow \quad \overline{p}_k = p_k + \frac{\partial F}{\partial q_k} \tag{5}$$

変換されることがわかった.

(7)の Lagrangian の変換によって，Lagrange の運動方程式は不変であることは既に確認しているが, Hamilton の正準方程式の場合はどうであろうか？　当然, Lagrangian の運動方程式と同じように不変であるはずである. それは以下のように確認できる.

$\partial\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)/\partial\overline{p}_k$を作ってみると，以下のように$\dot{q}_k$に等しいことが判る.

$$\frac{\partial\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)}{\partial\overline{p}_k} = \frac{\partial\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)}{\partial p_k}(\frac{\partial p_k}{\partial\overline{p}_k}) = \frac{\partial H(\overline{p}_k - \partial F/\partial q_k,q_k,t)}{\partial p_k} = \frac{\partial H(p_k,q_k)}{\partial p_k} = \dot{q}_k$$

第二の等号では，(5)で F は p_k を含まないから，$(\partial p_k/\partial\overline{p}_k) = 1$になることと，変数はそのままにして H を変更する場合の(6)式，を使っている．三番目の等式は，(5)を使い変数のみを　$\overline{p}_k \rightarrow p_k$　と戻している.

$\partial\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)/\partial q_k$についても同様で，以下の通り$-\dot{p}_k$に等しい.

$$\frac{\partial\overline{H}(\overline{p}_k,q_k,t)}{\partial q_k} = \frac{\partial H(\overline{p}_k - \partial F/\partial q_k,q_k,t)}{\partial q_k} = \frac{\partial H(p_k,q_k)}{\partial q_k} = -\dot{p}_k$$

以上の$\frac{dF(q_i,t)}{dt}$に関与する Lagrangian の任意性は，Hamiltonian や正準運動量の表現式をかえる．しかし，**正準運動方程式自体は不変**である．荷電粒子の運動に関連する**ゲージ変換**の議論や，後の**正準変換の母関数**の議論で重要となる.

保存系の場合, Hamiltonian は全エネルギーとして判り易いが, $L = T - V$ であり，これが何であるか直ちには言えない．おまけに，上記の任意性がある．一体 Lagrangian は何んだろうか？　このような疑問当然が湧いてくるが, ここは少し

我慢しよう.