

前回の演習問題の答

[問 4.1] 球座標 r, θ, ϕ と共役な運動量 p_r, p_θ, p_ϕ を用いて質量 m の質点の運動エネルギーを $T = \frac{1}{2m} [A p_r^2 + B p_\theta^2 + C p_\phi^2]$ とするとき、 $A(r, \theta, \phi)$ 、 $B(r, \theta, \phi)$ 、 $C(r, \theta, \phi)$ を求めよ。

解答: 球座標で運動エネルギー T を $r, \theta, \phi, \dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\phi}$ で表すと、 $T = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 \sin^2 \theta)$ (1)

一方、 $p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$ 、 $p_\theta \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta}$ 、 $p_\phi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 (\sin^2 \theta) \dot{\phi}$ より、
 $\dot{r} = \frac{1}{m} p_r$ 、 $\dot{\theta} = \frac{1}{mr^2} p_\theta$ 、 $\dot{\phi} = \frac{1}{mr^2 \sin^2 \theta} p_\phi$ となる。これを (1) に代入すると、

$$T = \frac{m}{2} \left(\frac{1}{m^2} p_r^2 + r^2 \frac{1}{m^2 r^4} p_\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta \frac{1}{m^2 r^4 \sin^4 \theta} p_\phi^2 \right) = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} p_\phi^2 \right) \quad (2)$$

$$\text{したがって } A = 1, \quad B = \frac{1}{r^2}, \quad C = \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \quad (3)$$

この問題の趣旨:

- ・ q と \dot{q} と p は独立ではない
- ・したがってある量が q と \dot{q} の関数として書けていれば、それは q と p の関数として書くことができる
- ・そのことを運動エネルギー T を例として確認するのが本問である

では(1)式と(2)式は、どちらをどういうときに使えばよいか?

前回の授業からわかる通り、ラグランジュの力学を使うときは、(1)式、ハミルトンの力学を使うときは(2)式を使うことになる。

4.1.2 正準方程式と位相空間

ではいよいよラグランジアン⁵の独立変数 q_j, \dot{q}_j を q_j, p_j に変更するルジャンドル変換を実行しよう。前節の x を \dot{q}_j に、 f を L に、 u を p_j に、 g を H にすればよい。すべての j に対し一斉にルジャンドル変換する⁵。前節最後の議論から結果はただちに

$$H = \sum_j \dot{q}_j p_j - L(t, \{q_j\}, \{\dot{q}_j\}) \quad (4.13)$$

である。ここで q_1, \dots, q_n を略して $\{q_j\}$ などと書いた。もちろん右辺において、 $p_j \equiv \partial L / \partial \dot{q}_j$ ($j = 1, \dots, n$) を逆に解いて、すべてを q_j と p_j の関数にしておく必要がある。こうしてハミルトニアン $H(t, \{q_j\}, \{p_j\})$ を得る。次にこれの全微分であるが、ラグランジュの運動方程式を援用して

$$\begin{aligned} dH &= \sum_j (p_j dq_j + \dot{q}_j dp_j) - dL(t, \{q_j\}, \{\dot{q}_j\}) \\ &= \sum_j (p_j dq_j + \dot{q}_j dp_j) - \left[\frac{\partial L}{\partial t} dt + \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j \right) \right] \\ &= \sum_j (p_j dq_j + \dot{q}_j dp_j) - \left[\frac{\partial L}{\partial t} dt + \sum_j (\dot{p}_j dq_j + p_j d\dot{q}_j) \right] \\ &= -\frac{\partial L}{\partial t} dt + \sum_j (\dot{q}_j dp_j - \dot{p}_j dq_j) \end{aligned} \quad (4.14)$$

これと全微分の一般式

$$dH = \frac{\partial H}{\partial t} dt + \sum_j \left(\frac{\partial H}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial H}{\partial p_j} dp_j \right) \quad (4.15)$$

を比べると

⁵一部の変数だけルジャンドル変換をすると、その変数についてはハミルトニアンで、変換しなかった変数についてはラグランジアンであるような関数ができる。それをラウシアン (Routhian) という。

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad \text{および} \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (\text{すべての } j \text{ に対して}) \quad (4.16)$$

を得る。これは時間に関して1階の連立微分方程式になっている。これを 正準方程式 (canonical equations) あるいは ハミルトンの運動方程式 (Hamilton's equations of motion) あるいは ハミルトンの正準運動方程式 (Hamilton's canonical equations of motion) と呼ぶ。逆に、(4.16) 式を満たすような q と p の組み合わせを 正準変数 (canonical variable) という。

(4.16) の第1式を $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p_j}$ と書かなかったのは、ハミルトン形式ではあくまで q と p が独立変数であることを意識し、ラグランジュ形式で独立変数である q と \dot{q} の世界でないことを強調したいからである。しかし \dot{q}_j と $\frac{dq_j}{dt}$ は同じことなので、ラグランジュ形式からハミルトン形式に移行するときに現れる \dot{q} を $\frac{dq}{dt}$ に置き換えることは何ら問題はない。(4.14) の両端をイコールで結んだ式の両辺を dt で割ったあとにそのような置き換えをすると、

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t} + \sum_j (\dot{p}_j \dot{q}_j - \dot{q}_j \dot{p}_j) = -\frac{\partial L}{\partial t} \quad (4.17)$$

となる。これはラグランジアンが陽に時間に依存しない場合はエネルギーが保存することを言っている。

具体的な問題で(4.16)を解くと、 $q_j(t)$ と $p_j(t)$ の運動がわかる。この「 t を媒介変数とした q_j と p_j の軌跡」を位相空間すなわち q_j, p_j 空間でプロットすると、初期条件に応じて軌跡が一つ決まる。同一の点から複数の運動が発生することはないから、この軌跡群は交わることはない。このようなことから、解の構造を俯瞰したいという目的のためにはハミルトン形式を用いて位相空間で考える方が見通しがよくなる。

以下、正準方程式を使った解法と位相空間での軌跡の例を示す。挙げた例は単純なものであるが、そこでの主眼はハミルトン形式を使うと解き易くなることを見るのではなく、解の構造が分析しやすくなること、およびその次のリウビルの定理の視覚化や正準変換への準備をすることである。

4.1.3 1次元調和振動子

バネ定数 k のバネに付けられた質量 m の質点が x 軸に沿って往復運動をしている。バネの自然長のときの質点の座標を $x = 0$ とすると、この系のハミルトニアン $H = T + U$ は

$$H = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} k x^2 \quad (4.18)$$

である。正準方程式は

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} p_x \quad \text{および} \quad \frac{dp_x}{dt} = -kx \quad (4.19)$$

となる。 $x = x_0 \cos \omega t$ の解を仮定すると

$$p_x = -m\omega x_0 \sin \omega t \quad \text{および} \quad x = \frac{m\omega^2 x_0}{k} \cos \omega t \quad (4.20)$$

となる。よって $k = m\omega^2$ である。以後 k を ω で表すと、

$$\frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} k x^2 = \frac{m}{2} \omega^2 x_0^2 (\sin^2 \omega t + \cos^2 \omega t) = \frac{m}{2} \omega^2 x_0^2 = E \quad (\text{const.}) \quad (4.21)$$

さらに x_0 の代わりに保存量であるエネルギー E を使うことにすると、(4.20) は

$$x = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \cos \omega t \quad \text{および} \quad p_x = -\sqrt{2mE} \sin \omega t \quad (4.22)$$

となる。この軌跡を位相空間 (x, p_x 平面) にプロットすると図4.3の一番外側の楕円になる。図ではそれより小さいいくつかの E の値について軌跡を示した。エネルギー E がより大きい場合も、原点を中心とする大きい楕円が重なって行くだけである。媒介変数である時間 t が経つにつれ、どの楕円上も (x, p_x) 点は同じ ω で時計回りに回転する。しかしそのようなアニメーションがなくても動きは容易に想像でき、この図だけで「1次元調和振動子の運動はただ一種類 — 位相空間内の同心楕円のどれかを ω で回る — だけである」ことがわかる。

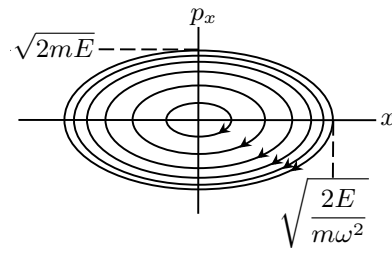


図 4.3: 1次元調和振動子の位相空間上の軌跡。

もう一つ付け足すならば、 $x = p_x = 0$ の原点は、バネの力や重力などが釣り合っ質点が静止状態にあることを示す。すなわち自分からはそこから動かない固定点 (fixed point) であるが、固定点には安定なもの不安定なもの中立なもの⁶がある。今の場合安定な釣り合いを表す「安定な固定点」である。

4.1.4 剛体棒単振り子

長さ ℓ の重さのない剛体棒の先に付いた質量 m の質点が重力加速度 g の重力場の中で運動している。状況としては例題 2.4 (図 2.2) と同じく、鉛直面内 (紙面内) を動く。質点が紙面の手前や奥に振れる運動は考えない。ただし例題 2.4 (図 2.2) と異なる想定も入れる。すなわち、糸でなく剛体棒とし、天井を外して剛体棒が天井でつかえることがないとする。このため質点が振り子の支点より高く上がることもある。真上まで行ってそのまま逆側に降りて、鉛直面内を回転運動を続ける運動も考察の対象とする。要するに重力場中に立てて置かれた円周上に束縛された質点の運動を考える。当然ながら微小振動近似は使わない。

⁶床に置かれたボールのように、ずらしたとき戻るわけでもどこかに行くわけでもないが、ずれたままとどまる。

この状況で運動の種類を考える。直感的には、回転運動を続けるか、回転まで行かずに往復運動をするかに大別できると思いつくであろう。ここで位相空間を使うと、もう少し様子がきちんとわかるのである。単振り子のラグランジアン (2.24) で $T - U$ を $T + U$ に変え、変数を $\dot{\theta}$ から p_θ に変えると、

$$H = \frac{1}{2m} \frac{1}{\ell^2} p_\theta^2 - mg\ell \cos \theta \quad (4.23)$$

である。運動エネルギーが (2.24) と $mg\ell$ だけ異なるのは、最下点で静止している状態のエネルギーをゼロにとりただけで、本質的なことではない。そのエネルギーの原点の取り方にかかわらず正準方程式は

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{1}{m\ell^2} p_\theta \quad \text{および} \quad \frac{dp_\theta}{dt} = mg\ell \sin \theta \quad (4.24)$$

となる。微小振動近似を使わないからには、これより先の計算は楕円関数が必要となるので、結果だけ概念図で示そう。 θ, p_θ の位相空間では図 4.4 のような軌跡になる。(θ は 2π の周期性を示す。)

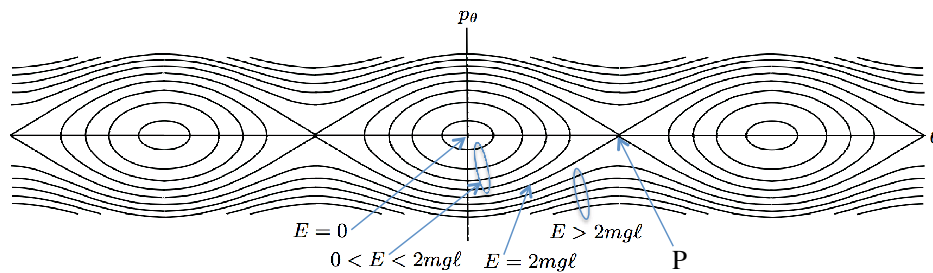


図 4.4: 剛体棒振り子の位相空間上の軌跡。

この軌跡を分類するならば、

- (1) $E = 0$ すなわち原点、
- (2) $0 < E < 2mgl$ の楕円群 (正確には楕円でない)、
- (3) $E > 2mgl$ の水平に波打つ曲線群
- (4) (2) と (3) の境界に位置する $E = 2mgl$ の「目の形をした」曲線、
- (5) そしてその交点に位置する点 P

に分けられる。それぞれ運動は次の通りである。

- (1) $E = 0$ の原点は最下点での静止状態である。これは「安定な固定点」である。
- (2) $0 < E < 2mgl$ の長円群は往復運動である。特に微小振動近似が使える原点近くでは前節の調和振動子の楕円群と同じ構造である。
- (3) $E > 2mgl$ の水平に波打つ曲線群は回転運動である。振り子が真下を通るときは速く真上を通るときは遅い。いずれにせよ θ は増える (減る) 一方である。
- (4) $E = 2mgl$ の「目の形をした」曲線は特異な動きを示す。真上の状態から無限の時間を経て落ちて来て、真下をぐるんと回ったあと逆向きにまた無限の時間をかけて真上に向かう。原理的には一回きりの振動である。
- (5) 点 P は最初から真上にある状態で、釣り合いの点である。ただし「不安定な固定点」である。

前に「位相空間の軌跡は交わることはない」と書いたが、例外として点 P のような特異な点があり得る。しかしその点は有限時間で通過することはできないし、初めからその点にあればどちらの分岐に行っていくのかわからずとどまるしかない。

4.2 正準変換

ラグランジュ形式の力学では座標変換が (独立性さえ保てば) 自由にできた。ハミルトン形式の力学に特徴的なこととして、変数には座標と運動量があるので、正準方程式を変えない変換は 正準変換 (canonical transform) というものに限られるという事情がある。これは理論を不便にするものというより、あるべき変数のペアとは何かという視点をもたらしてくれ、理論のさらなる展開を可能とするものである。それは量子力学にも繋がるポアソン括弧式やハミルトン・ヤコビの方程式を導き、統計力学に繋がるリウビルの定理も導く。

4.2.1 座標と運動量にまたがる変換

4.1.3 節の 1 次調和振動子の位相空間上の軌跡は楕円になると言った。 m や ω が異なれば横長の楕円になったり縦長の楕円になったりするわけである。しかし x と p_x はそもそも物理的次元が異なるので、横長か縦長かに意味はないはずである。ならば横軸縦軸を適当に規格化して新しく q と p を定義して同じ次元の量になるようにして、軌道を円に統一してしまおうとできないだろうか。次に、仮にそれができたとして、今度は q と p を極座標 R と θ にすれば軌道はもっと単純化されて $R = \text{const.}$ となつて、その直線上を θ が $\theta = \omega t$ で等速で動くことになろう。このように物事をなるべく単純化・規格化する方が、楕円群よりは見通しがよいのではないか。

長らくラグランジュ形式の力学に親しんで来ると、このような変換は自由にできると思ってしまうであろう。座標変換に限ればそうなのだが、ハミルトン形式の力学では一般座標と一般運動量が独立変数なので、実は許される変換は正準変換というものに限られるのである。そのことを、いま挙げている例から始めて一般論へと

展開して行こう。まず上記の第一ステップ「横軸縦軸の伸縮」であるが、縦軸だけ $1/m\omega$ 倍すれば円になることは明白である。しかしこれでは q と p が正準方程式 (4.16) と同一にはならず、力学的調和振動子特有の $m\omega$ というパラメーターが入りこんでしまう。パラメーターが入らず (4.16) がそのまま成り立つようにするには、

$$q \equiv \sqrt{m\omega} x, \quad p \equiv \sqrt{\frac{1}{m\omega}} p_x \quad (4.25)$$

とする必要があることがすぐにわかる。このように、 x の伸縮と p_x の伸縮は自由には選べない。もともと p_x はラグランジアン \dot{x} の偏微分で定義されているので、 p_x をそのままにして x だけ勝手に伸縮してはいけないのである。(4.25) は OK であり、とにかくこれで円軌道にはなる。その円の半径はエネルギー E の平方根に比例して $\sqrt{2E/\omega}$ である。

この「 x, p_x から q, p への変換」まではよいのであるが、さらに q, p から極座標 R, Θ へ勝手に変換してはいけないことを、次に見て行こう。

仮に極座標と同様、

$$q = R \cos \Theta, \quad p = R \sin \Theta \quad (4.26)$$

によって R と Θ を定めてみよう。ハミルトニアンは

$$H = \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \frac{1}{2m} p_x^2 = \frac{\omega}{2} (q^2 + p^2) = \frac{\omega}{2} R^2 \quad (4.27)$$

となる。正準方程式は

$$\frac{dR}{dt} = 0, \quad \frac{d\Theta}{dt} = \omega R \quad (4.28)$$

となり、これを解くと $R = \text{const.}$ ($\equiv R_0$ とする) および $\Theta = \omega R_0 t + \Theta_0$ となる。ただし Θ_0 は初期位相である。いま Θ_0 は話に関係ないので一般性を失うことなく $\Theta_0 = 0$ とする。これを q, p に戻し、さらに x, p_x に戻すと、 $q = R_0 \cos(\omega R_0 t)$, $p = R_0 \sin(\omega R_0 t)$ そして $x = \sqrt{\frac{1}{m\omega}} R_0 \cos(\omega R_0 t)$, $p_x = \sqrt{m\omega} R_0 \sin(\omega R_0 t)$ となる。そうすると調和振動子が ω で振動するためには $R_0 = 1$ でなければならない。積分定数であるはずの R_0 が規定されてしまうので、振幅の自由度 (エネルギー E の自由度) を許す (4.22) に一致しない。これは、一見自然な極座標を選んだつもりの変換 (4.26) に難があるのである。

次に、このような難点のない極座標の変換を紹介する。

ために

$$q = \sqrt{2R} \cos \Theta, \quad p = \sqrt{2R} \sin \Theta \quad (4.29)$$

によって R と Θ を定めてみよう。ハミルトニアンは

$$H = \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \frac{1}{2m} p_x^2 = \frac{\omega}{2} (q^2 + p^2) = \omega R \quad (4.30)$$

となる。正準方程式は

$$\frac{dR}{dt} = 0, \quad \frac{d\Theta}{dt} = \omega \quad (4.31)$$

となり、これを解くと (初期位相は 0 として) $R = R_0$ および $\Theta = \omega t$ となる。極座標を選んでしまった前の例と異なり、 R_0 は Θ の方程式に縛られることなく、調和振動子のエネルギー E に応じて $R_0 = E/\omega$ を選べばよい。新しい位相空間 (横軸 Θ 、縦軸 R 、その逆でもよい) 上では、エネルギー E の調和振動子は $R_0 = E/\omega$ の直線上を速度 ω で等速直線運動をする。 Θ も R も x と p_x を等しく含んでおり、どちらが本来の座標あるいは運動量に近いかとは言えなくなっている。(4.29) が OK である理由を一般化したのが 4.2.3 節で述べる正準変換である。そのとき次節で述べる「ハミルトンの原理を位相空間に拡張したもの」を用いるので、まずそれを紹介する。

4.2.2 ハミルトンの原理による正準方程式の導出

調和振動子の話を一般化するにあたり、ハミルトンの正準方程式をハミルトンの原理で導いておく。2.1.3～2.1.4節でラグランジュの運動方程式を導いたとき $\delta \int L dt = 0$ というハミルトンの原理を用いたが、この積分の中で変分をとるべき変数は座標のみであった。それは各時刻 t において座標を $x(t) \rightarrow x(t) + \delta x(t)$ と変化させれば、自動的に $\delta \dot{x} = \frac{d}{dt} \delta x$ となることを使ったからであった。ハミルトン形式では q と p が独立変数であるが、これらの変分を独立にとりてそれぞれの係数 = 0 とすることは許されるだろうか？

まずはその方法の可能性を探ってみよう。ハミルトニアンとラグランジアンの関係 (3.133) 式: $H \equiv \sum_j p_j \dot{q}_j - L$ より、ハミルトンの変分原理は

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \left(\sum_j p_j \dot{q}_j - H \right) dt = 0 \quad (4.32)$$

と書ける。今はハミルトン形式の世界であるから、 \dot{q} も H もすべて q と p の関数で表しておく。ここで変分 δq と δp を独立にとると、これは

$$\int_{t_0}^{t_1} \sum_j \left(\delta p_j \dot{q}_j + p_j \delta \dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \delta p_j - \frac{\partial H}{\partial q_j} \delta q_j \right) dt = 0 \quad (4.33)$$

を意味し、部分積分と「端点 t_0 および t_1 で変分は 0」から導かれる $\int_{t_0}^{t_1} p_j \delta \dot{q}_j dt = - \int_{t_0}^{t_1} \dot{p}_j \delta q_j dt$ を使うと、

$$\int_{t_0}^{t_1} \sum_j \left[\left(\dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \right) \delta p_j - \left(\dot{p}_j + \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) \delta q_j \right] dt = 0 \quad (4.34)$$

となる。ここで変分 δq と δp が全く独立とすれば、それぞれの係数が 0 でなければならないので、正準方程式が得られる。

しかしラグランジュ形式の世界では \dot{q} は q の時間微分という関係があり、それだから変分は δq だけを考えた。ハミルトン形式の世界でも δp_j と δq_j に何か関係があつて両方を独立と考えてはいけなく、ということはないだろうか？ もし独立でないとする、(4.34) 式の Σ の中が各 j に対して 0 という以外、何も言えなくなってしまう。ところがいま $\partial H / \partial p_j$ を計算してみると、(3.139) を援用して、

$$\frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\sum_k p_k \dot{q}_k - L \right) = \dot{q}_j + \sum_k \left(p_k \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial p_j} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial p_j} \right) \quad (4.35)$$

となるので、 $p_k \equiv \partial L / \partial \dot{q}_k$ である限り右辺の和は消えて \dot{q}_j だけ残るから、(4.34) の第一項内の $\left(\dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \right)$ はそもそも 0 なのである。すると (4.34) の左辺は第二項の積分のみとなり、今度はそれがどんな δq_j に対しても 0 なのだから $\left(\dot{p}_j + \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) = 0$ でなければならない。このように正準方程式はきちんと導かれるので、そうであるならば、「 δq_j と δp_j は独立に動けるとして、実現される運動に対応する q_j と p_j と H の組み合わせに対して (4.34) が成り立つ」と考えて、その結果正準方程式が導かれるというように見直す。これを — すなわち変分原理 (4.32) において δq_j と δp_j が独立に動くと考えることによりハミルトニアンが決まり正準方程式が導かれると考えることを — 位相空間でのハミルトンの原理という。

次節ではハミルトンの原理を使って正準変換の条件を調べて行く。

4.2.3 正準変換と母関数

一般座標 q_j とその共役運動量 p_j ($j = 1, 2, \dots, n$) という $2n$ 個の変数から、 Q_j とその共役運動量 P_j ($j = 1, 2, \dots, n$) という $2n$ 個の変数への変換

$$\left. \begin{aligned} Q_1 &= Q_1(t, q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) \\ &\dots\dots\dots \\ Q_n &= Q_n(t, q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) \end{aligned} \right\} \quad (4.36)$$

$$\left. \begin{aligned} P_1 &= P_1(t, q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) \\ &\dots\dots\dots \\ P_n &= P_n(t, q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) \end{aligned} \right\} \quad (4.37)$$

を考える⁷。これに伴い適切な関数 $\tilde{H}(t, Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n)$ が存在して

$$\frac{dQ_j}{dt} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_j} \quad \text{および} \quad \frac{dP_j}{dt} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_j} \quad (\text{すべての } j \text{ に対して}) \quad (4.38)$$

が成り立つとき⁸、この変換を 正準変換 (canonical transformation) という。前節のハミルトンの原理によれば、(4.38) が成り立つためには

⁷回転座標系など変換自体が t に陽に依存する場合も想定しているが、そうでない場合は引数の最初の t を省く。

⁸4.2.1 節では時間に依存しない変換だったためハミルトニアン候補は必然的にエネルギーである必要があった。したがって (4.38) を満たす「適切な関数」をいろいろ探しに行くことはせず、変換 (4.26) によるエネルギーの表現 (4.27) をハミルトニアン候補としてみたり (これは結果的に正準方程式を導かず正しくなかった)、あるいは (4.29) によるエネルギーの表現 (4.30) をハミルトニアン候補としてみたりした (こちらは正準方程式になった)。

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \left(\sum_j P_j \dot{Q}_j - \tilde{H} \right) dt = 0 \quad (4.39)$$

であればよい。しからばこの式と (4.32) が同時に満たされるためには

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - H = \sum_j P_j \dot{Q}_j - \tilde{H} \quad (\text{実は不十分}) \quad (4.40)$$

としたくなるだろうが、これは実は不十分である。なぜなら 2.2.3 の注 11 で「ラグランジアンには不定性がある。適当な関数 $W(t, q_1, q_2, \dots, q_n)$ の微分 dW/dt を付け加えてもラグランジュの運動方程式は変わらない」と書いたことを思い出してほしい。このことから

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - H = \sum_j P_j \dot{Q}_j - \tilde{H} + \frac{dW}{dt} \quad (\text{正}) \quad (4.41)$$

である。ただし W は $(t, Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n)$ の微分可能な任意の関数である。この W を正準変換の母関数という。

(4.41) は変数として一見 t と $q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n$ および $Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n$ の $4n + 1$ 個の変数を含むように見えるが、(4.36) および (4.37) の $2n$ 個の変換式があるので、独立な変数は $2n + 1$ 個である。そのうち一つは t だから、結局 $2n$ 個が独立変数として残り、それは大文字小文字の座標と運動量の計 $4n$ 個から選ばれる。 $4n$ 個から $2n$ 個を選ぶ方法は無数にあるが、四種類ほど挙げておこう。

正準変換 I: $q_1, \dots, q_n, Q_1, \dots, Q_n$ の関数として母関数を選ぶ場合

この場合

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\partial W}{\partial t} + \sum_j \left(\frac{\partial W}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial W}{\partial Q_j} \dot{Q}_j \right) \quad (4.42)$$

となるので、これを (4.41) に入れ、両辺に dt をかけ適当に移項すると、

$$\left(H - \tilde{H} + \frac{\partial W}{\partial t}\right) dt = \sum_j \left[\left(p_j - \frac{\partial W}{\partial q_j}\right) dq_j + \left(P_j + \frac{\partial W}{\partial Q_j}\right) dQ_j \right] \quad (4.43)$$

したがって

$$\tilde{H} = H + \frac{\partial W}{\partial t}, \quad p_j = \frac{\partial W}{\partial q_j}, \quad P_j = -\frac{\partial W}{\partial Q_j} \quad (4.44)$$

特に母関数 W が時間に陽に依存しない場合は $\tilde{H} = H$ となる。具体例は後ほど示す。

正準変換 II : $q_1, \dots, q_n, P_1, \dots, P_n$ の関数として母関数を選ぶ場合

この場合

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\partial W}{\partial t} + \sum_j \left(\frac{\partial W}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial W}{\partial P_j} \dot{P}_j \right) \quad (4.45)$$

となるが、今度はこれを直接 (4.41) に入れても進まないで、先に (4.41) を適切な形に変形しておく。いま $\frac{d}{dt}PQ = P\dot{Q} + \dot{P}Q$ であることを使うと (4.41) は

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - H = -\sum_j \dot{P}_j Q_j - \tilde{H} + \frac{dW'}{dt} \quad \text{ただし} \quad W' \equiv W + \sum_j P_j Q_j \quad (4.46)$$

と変形される。これに (4.45) を入れ、両辺に dt をかけ適当に移項すると、

$$\left(H - \tilde{H} + \frac{\partial W'}{\partial t}\right) dt = \sum_j \left[\left(p_j - \frac{\partial W'}{\partial q_j}\right) dq_j + \left(Q_j - \frac{\partial W'}{\partial P_j}\right) dP_j \right] \quad (4.47)$$

したがって

$$\tilde{H} = H + \frac{\partial W'}{\partial t}, \quad p_j = \frac{\partial W'}{\partial q_j}, \quad Q_j = \frac{\partial W'}{\partial P_j} \quad (4.48)$$

となる。

所望の正準変換を与える $W'(q_1, \dots, q_n, P_1, \dots, P_n)$ を探すにあたり、まず $W(q_1, \dots, q_n, Q_1, \dots, Q_n)$ を何か仮定してから (4.46) を使って W' を $q_1, \dots, q_n, P_1, \dots, P_n$ の関数として求める、などという手続きを踏む必要はない。もともと W 自体が任意なのだから、(4.46) は忘れていきなり $W'(q_1, \dots, q_n, P_1, \dots, P_n)$ を仮定し、(4.48) を使って正準変換を構築すればよい。具体例は後ほど示す。

正準変換 III : $p_1, \dots, p_n, Q_1, \dots, Q_n$ の関数として母関数を選ぶ場合

正準変換 II と同様

$$W'' \equiv W - \sum_j p_j q_j \quad (4.49)$$

とすれば

$$\tilde{H} = H + \frac{\partial W''}{\partial t}, \quad q_j = -\frac{\partial W''}{\partial p_j}, \quad P_j = -\frac{\partial W''}{\partial Q_j} \quad (4.50)$$

である。これも (4.49) は忘れて最初から $W''(p_1, \dots, p_n, Q_1, \dots, Q_n)$ を決め、(4.50) を使って正準変換を構築すればよい。

正準変換 IV : $p_1, \dots, p_n, P_1, \dots, P_n$ の関数として母関数を選ぶ場合

$$W''' \equiv W + \sum_j (P_j Q_j - p_j q_j) \quad (4.51)$$

とすれば

$$\tilde{H} = H + \frac{\partial W'''}{\partial t}, \quad q_j = -\frac{\partial W'''}{\partial p_j}, \quad Q_j = \frac{\partial W''}{\partial P_j} \quad (4.52)$$

である。これもまず $W'''(p_1, \dots, p_n, P_1, \dots, P_n)$ を決めて (4.52) を使えばよいことは同じである。

4.2.4 正準変換の例

以下しばらく添え字 j を落とす。必要なら付いていると思えばよい。

恒等変換

正準変換 II で母関数を $W' = qP$ として (4.48) を使うと

$$Q = q \quad p = P \quad (4.53)$$

を得る。あるいは正準変換 III で $W'' = -pQ$ として (4.52) を使うと、

$$q = Q \quad P = p \quad (4.54)$$

を得る。これは事実上何も変換しない 恒等変換 (identity transformation) である。

[問 4.4] 調和振動子の座標と運動量を無次元化して円軌道を得るために施した変数変換 (4.25) は正準変換である。その母関数は何か? 正準変換 II と III のそれぞれについて求めよ。

座標と運動量にまたがる変換

正準変換 I で $W = qQ$ として (4.44) を使うと

$$p = Q \quad P = -q \quad (4.55)$$

を得る。あるいは正準変換 IV で $W''' = -pP$ として (4.50) を使うと、

$$q = P \quad Q = -p \quad (4.56)$$

を得る。これは単に座標と運動量を入れ替える変換である。

次に、 q, p から R, Θ への変換 (4.29) を考える。そのとき見たように、これは正準変換のはずである。いま正準変換 I で $W = (q^2/2) \cot \Theta$ とすると、

$$p = q \cot \Theta \quad \text{および} \quad R = \frac{q^2}{2} (1 + \cot^2 \Theta) \quad (4.57)$$

を得る。これは書き換えると

$$\Theta = \tan^{-1} \left(\frac{q}{p} \right) \quad \text{および} \quad R = \frac{1}{2} (p^2 + q^2) \quad (4.58)$$

あるいはこれを逆に解いて (4.29) を導く。

以上、座標と運動量にまたがる変換 2 例からわかるように、ハミルトン形式の力学では座標とか運動量とかという言葉は本来の意味を忘れてもよく、共役な変数あるいは正準変数と呼ぶ方が適切である。