解析力学 I

野尻　伸一

理学研究科　素粒子宇宙物理学専攻

1　シラバス

- 本講義の目的とねらい
  ラクラジアンやハミルトニアンを用いた理論形式は，質点や剛体などの力学系の運動を調べるために非常に有効である。また、2 年後期に学ぶ量子力学 I を理解する上でも、解析力学は必要不可欠である。本講義では，その基本原理を理解すると共に，簡単な応用を通じて手法を取得する。

- 授業内容

  1. 作用原理とラグランジュの方程式
  2. 変分法とその応用
  3. 拘束系とラグランジュ未定係数法
  4. 正準方程式と正準変換
  5. ポアソン括弧
  6. ハミルトン・ヤコビ形式
  7. ネーターの定理

- 到達目標
  ラグラジアンやハミルトニアンを構築する方法を習得し，それらを用いて力学系の運動を理解することができるようになる。

- 参考書

  – ゴールドシュタイン，サーコフ，ポール「古典力学 上，下」（吉岡書店）
  – ランダウ，リフシッツ「力学」（東京図書）
  – 畑浩之「基幹講座 物理学　解析力学」（東京図書）

- 関連する科目
  物理学演習 I-1 において，講義内容の理解を深め，計算力を養う。また，本講義は 2 年次後期に開講される解析力学 II の基礎となるものである。

2　Introduction

解析力学はニュートン力学を数学的に整理したものですが、この解析力学が有用な理由は次のようなものです。

- 一般の座標系で運動方程式を書き下すことが容易。
- 対称性と保存則の関係が明白になる。
- 量子力学や統計力学の基礎となる。

もう少し詳しく説明しましょう。

- 一般の座標系で運動方程式を書き下すことが容易です。

  ニュートンの運動方程式
  $$m\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F} \tag{1}$$
  はデカルト座標（直角座標）でのみ正しい式です。ここで、$\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ は質点の位置ベクトル、m は質点の質量、$\boldsymbol{F}$ はその質点に働く力です。この運動方程式を極座標などの一般の座標で書き換えることはかなり面倒です。

  解析力学で使われる基本的な量はラグランジアン（ラグランジュは人名）と呼ばれ、L という文字であらわされることが多いですが、この量は運動エネルギー T と位置（ポテンシャル）エネルギー V の差で与えられます：
  $$L = T - V \tag{2}$$
  運動エネルギーも位置エネルギーもその大きさは座標の取り方に依りません。ラグランジアンを時間積分したものを作用と言い、しばしば S という文字で表します：
  $$S \equiv \int_{t_1}^{t_2} dtL \tag{3}$$
  この量が最小（極値）を取るという条件から得られるオイラー=ラグランジュ方程式がニュートンの運動方程式の一般化となっています。座標の取り方に依らない量が最小値を取る条件は、当然座標に依りませんから、ラグランジアンをどんな座標系で表しても得られるオイラー=ラグランジュ方程式は物理的に同等となります。この「同等」という意味は、ある座標系で得られたオイラー=ラグランジュ方程式を変数変換で別の座標系を使って書き直すと、その座標系を使って得られるオイラー=ラグランジュ方程式が導かれるという意味です。

- 対称性と保存則の関係が明白になります。

  対称性というのは考えている系に対し、ある変換をしたときに不変になるということです。例えば左右対称というのは右と左を入れ替えるという変換をしても変わらないということです。また、軸対称というのはある軸を中心に回転させても不変になるということです。並進や回転などの連続な変換の下でラグランジアンが不変になるか、時間の全微分となる場合（後で「全微分」という言葉は説明します）に、作用は不変になります。この時にオイラー=ラグランジュ方程式を使うと保存する量があることが分かります。この保存量は並進に対しては運動量、回転に対しては角運動量、また、時間をずらす変換に対してはエネルギーになります。

- 量子力学や統計力学の基礎となります。

  解析力学にはラグランジアンを使うラグランジュ形式の他にハミトニアン（ハミルトンが人名）を使うハミルトン形式（または正準形式）というものがあります。この二つの形式の大きな違

いはラグランジアンが一般化された座標とその時間微分、すなわち一般化速度の関数であるのに対し、ハミルトニアンが一般化座標とそれに共役な運動量（この言葉も後で説明します)、すなわち一般化運動量の関数になっているということです。このハミルトニアンは量子力学の基礎方程式であるシュレディンガー方程式で使われますし、ハミルトン形式で現れるポアソン括弧というものは量子力学での交換関係に当たります。また、一般化座標と一般化運動量の空間を位相空間と呼びますが、その体積は時間発展や様々な変数変換の下で不変なため、統計力学で状態の体積を定義するときに使われます。

解析力学の形式にも欠点があります。その一つは摩擦力など非保存力が扱いにくい、ということです。ところが、自然界ではミクロに見ればすべての力は保存則であり、今のところラグランジアンを持たないような自然現象は見つかっていません。これは解析力学という論理形式が、自然界の法則に制限を与えているようにも見えます。このようなことはミクロな物理学ではしばしば起こります。

3 ラグランジアンとオイラー=ラグランジュ方程式

運動エネルギー T と位置エネルギー V の差をラグランジアン L と呼びます:

$$L = T - V\ . \tag{4}$$

ラグランジアン L が一般の座標 q^i、$(i = 1, 2, \cdots N)$ とその時間微分 $\dot{q}^i$ で表されているとき $(L = L(q^i, \dot{q}^i))$、

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \tag{5}$$

を q^i に「共役な」運動量といいます。ここで、$\dot{} = \frac{d}{dt}$ です。

一個の質点の運動エネルギー T はその質点の質量を m、速さを v とすると

$$T = \frac{1}{2} m v^2 \tag{6}$$

と書けます。質点の速さの 2 乗はデカルト座標（直角座標）では $v^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2$ と表されます。一般の座標 $\{q^i\}$, $(i = 1, 2, 3)$ では $x = x(q^i(t))$ なので、

$$\dot{x} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial x}{\partial q^i} \dot{q}^i \tag{7}$$

であり、

$$v^2 = \sum_{i,j=1}^{3} \left\{ \frac{\partial x}{\partial q^i}\frac{\partial x}{\partial q^j} + \frac{\partial y}{\partial q^i}\frac{\partial y}{\partial q^j} + \frac{\partial z}{\partial q^i}\frac{\partial z}{\partial q^j} \right\} \dot{q}^i \dot{q}^j \tag{8}$$

であることがわかります。

また、

$$0 = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q^i} \tag{9}$$

をオイラー=ラグランジュ方程式と呼び、ニュートンの運動方程式の一般化になっています。

デカルト座標（直角座標）では質量 m の一個の質点に対するラグランジアンは位置エネルギー $V(x^i)$ $(\{x^i\}=\{x,y,z\},\ i=1,2,3)$ を使い、

$$L(x^i,\dot{x}^i)=\frac{1}{2}m\sum_{i=1,2,3}\left(\dot{x}^i\right)^2-V(x^i) \tag{10}$$

と書けますが（一般には（磁場を受けている場合など）位置（ポテンシャル）エネルギーも $\dot{x}^i$ によることがあります $V=V(x^i,\dot{x}^i)$）、これから導かれるオイラー=ラグランジュ方程式はニュートンの運動方程式に他なりません：

$$m\ddot{x}^i=-\frac{\partial V}{\partial x^i}\ . \tag{11}$$

また、x^i に共役な運動量は通常の運動量です：

$$p_i=m\dot{x}^i \tag{12}$$

一般の座標についてのオイラー=ラグランジュ方程式はニュートンの運動方程式と同等です。実際、一般の座標については $x^i=x^i(q^j)$ と思うと、$\dot{x}^i=\sum_{j=1,2,3}\frac{\partial x^i}{\partial q^j}\dot{q}^j$ なので

$$L(q^i,\dot{q}^i)=L\left(x^i(q^j),\dot{x}^i=\sum_{j=1,2,3}\frac{\partial x^i}{\partial q^j}\dot{q}^j\right) \tag{13}$$

を使うと、

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right)-\frac{\partial L}{\partial q^i}\\
&=\sum_{j=1,2,3}\left\{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^j}\frac{\partial x^j}{\partial q^i}\right)-\left(\frac{\partial L}{\partial x^j}\frac{\partial x^j}{\partial q^i}+\sum_{k=,1,2,3}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^j}\frac{\partial^2 x^j}{\partial q^i\partial q^k}\dot{q}^k\right)\right\}\\
&=\sum_{j=1,2,3}\left\{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^j}\right)\frac{\partial x^j}{\partial q^i}+\sum_{k=1,2,3}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^j}\frac{\partial^2 x^j}{\partial q^k\partial q^i}\dot{q}^k-\frac{\partial L}{\partial x^j}\frac{\partial x^j}{\partial q^i}-\sum_{k=,1,2,3}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^j}\frac{\partial^2 x^j}{\partial q^i\partial q^k}\dot{q}^k\right\}\\
&=\sum_{j=1,2,3}\left(\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^j}\right)-\frac{\partial L}{\partial x^j}\right)\frac{\partial x^j}{\partial q^i}=\sum_{j=1,2,3}\left(m\ddot{x}^j+\frac{\partial V}{\partial x^j}\right)\frac{\partial x^j}{\partial q^i}=0
\end{aligned} \tag{14}$$

となり、オイラー=ラグランジュ方程式とニュートンの運動方程式の同等性が分かります。

デカルト座標（直角座標）では、運動エネルギーは座標の時間微分のみに依っていて座標には依らず、多くの場合位置（ポテンシャル）エネルギーは座標のみに依っていますが、一般化座標では運動エネルギーは座標にも依りますし、位置（ポテンシャル）エネルギーも一般には（一般化座標を使うかどうかに依らず）座標の時間微分による場合もありますが、そのような場合でもオイラー=ラグランジュ方程式を使うことができます。

4　最小作用の原理

F を $q^i(t)$ と $\dot{q}^i(t)$ の関数とします。$q^i(t_1)=q^i_1$ また $q^i(t_2)=q^i_2$ $(t_2>t_1)$ という条件を付けたときに、$q^i(t)$ という関数をいろいろと変えて $S=\int_{t_1}^{t_2}dtF\left(q^i(t),\dot{q}^i(t)\right)$ という量が極小値又は極大値を持

つような関数 $q^i(t)=q_0^i(t)$ を考えてみましょう。このとき S は関数 $q^i=q^i(t)$ を与えれば値が決まります。このような関数から数への写像を汎関数といいます。

今、$\delta q^i(t)$ を $\delta q^i(t_1)=0$ および $\delta q^i(t_2)=0$ という条件を満たす任意の関数とします。$q^i(t)=q_0^i(t)+\epsilon\delta q^i(t)$ とおきますと、S は ϵ の関数とみなせます。このとき、$\epsilon\delta q^i(t)$ を $q^i(t)$ の変分といいます。$q^i(t)=q_0^i(t)$ で S という量が極小値又は極大値を持つということは $\left.\frac{dS}{d\epsilon}\right|_{\epsilon=0}=0$ でなければなりません。これより

$$0=\left.\frac{dS}{d\epsilon}\right|_{\epsilon=0}=\int_{t_1}^{t_2}dt\left\{\frac{\partial F}{\partial q^i(t)}\delta q^i(t)+\frac{\partial F}{\partial\left(\dot{q}^i(t)\right)}\delta\dot{q}^i(t)\right\}=\int_{t_1}^{t_2}dt\left\{\frac{\partial F}{\partial q^i(t)}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial F}{\partial\left(\dot{q}^i(t)\right)}\right)\right\}\delta q^i(t) \tag{15}$$

となります。ここで、最後の変形のところで部分積分と $\delta q^i(t_1)=0$ および $\delta q^i(t_2)=0$ という条件を使いました。今、$\delta q^i(t)$ はこの条件を除き任意の関数なので、S という量が極小値又は極大値を持つためには、$q^i(t)=q_0^i(t)$ のとき、

$$\frac{\partial F}{\partial q^i(t)}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial F}{\partial\left(\dot{q}^i(t)\right)}\right)=0 \tag{16}$$

でなければならないことが分かります。この方程式をオイラーの方程式と言いますが、F をラグランジアンとすればこれはオイラー=ラグランジュ方程式に他なりません。このとき S は「作用」です。すなわち、運動方程式の解は作用を最小になります（実際は単に極値をとります)。これを「最小作用の原理」といいます。

再度強調しますが、質点の速さは座標系の取り方によらないので運動エネルギー T も座標にはよりません。位置エネルギーも座標系の取り方にはよらないのでラグランジアンも座標によらず、その値が極値を取るという条件も座標によりません。従って、オイラー=ラグランジュ方程式が座標によらず成り立つ、または、異なる座標を選んで得られたオイラー=ラグランジュ方程式が互いに同等になることが分かります。

上記の変分の考え方は力学系に限らず、様々な場合に応用ができます。例えば半径が R_1 と R_2 で、中心軸を同じくし、互いに距離 l だけ離れた平行な 2 つの輪の間に石鹸膜を張らせることを考えましょう。石鹸膜はなるべくその面積が最小になろうとします。輪の中心軸を x 軸に取り、二つの輪が $x=x_1$ と $x=x_2$ にあり、x での石鹸膜の半径を $r(x)$ とします。そうすると $r(x_1)=R_1, r(x_2)=R_2$ であり、石鹸膜の面積は次のように与えられます：

$$S=2\pi\int_{x_1}^{x=2}dxF\left(r(x),r'(x)\right)\ ,\quad F\left(r(x),r'(x)\right)\equiv r(x)\sqrt{1+r'(x)^2} \tag{17}$$

そうするとオイラー方程式は次のようになります：

$$0=\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial\dot{r}}\right)-\frac{\partial F}{\partial r}=\frac{d}{dr}\left(\frac{rr'}{\sqrt{1+r'^2}}\right)-\sqrt{1+r'^2} \tag{18}$$

この解は

$$r(x)=\frac{1}{a}\cosh\left(a\left(x-x_0\right)\right) \tag{19}$$

で与えられます。ここで a と x_0 は定数で

$$R_1=\frac{1}{a}\cosh\left(a\left(x_1-x_0\right)\right)\ ,\quad R_2=\frac{1}{a}\cosh\left(a\left(x_2-x_0\right)\right) \tag{20}$$

を満たします。

5　拘束系とラグランジュ未定係数法

細い針金を通る穴の開いたビーズ玉の運動のように、質点の運動がある軌道や曲面上に拘束されている場合があります。このような場合、軌道や曲面上の座標系を使って運動を考えることもできますが、これらの軌道や曲面が埋め込まれた座標を使って考えるほうが便利な場合があります。例えば q^i $(i = 1, 2, \cdots, N)$ という N 個の座標で張られた空間の中に、

$$f_j\left(q^i\right) = 0\,, \quad j = 1, 2, \cdots M < N \tag{21}$$

という M 個の条件を置くことで、運動を制限し軌道や曲面を定めることができます。このような条件を置くにはラグランジュ未定係数 λ^j というものを使い、次のようなラグランジアンを考えればいいことが分かります：

$$L\left(q^i, \dot{q}^i, \lambda^j\right) = L_0\left(q^i, \dot{q}^i\right) + \lambda^j f_j\left(q^i\right) \tag{22}$$

ここで $L_0\left(q^i, \dot{q}^i\right)$ は質点の運動に制限が付いていないときのラグランジアンです。もし λ^j を座標の一つと考えて λ^j についてのオイラー=ラグランジュ方程式を考えると (21) の条件が得られます。

具体的な例として、xy 平面上の質量 m の自由粒子（ポテンシャルによる力を受けない）が半径 R の原点を中心とする円周上を運動しているとしましょう。この時ラグランジュ未定係数を λ として、

$$L = L_0 + \lambda f\,, \quad L_0 = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2\right)\,, \quad f = x^2 + y^2 - R^2 \tag{23}$$

というラグランジアンを考えればいいことになります。λ についてのオイラー=ラグランジュ方程式から

$$x^2 + y^2 - R^2 = 0 \tag{24}$$

という条件が得られ、x, y についてのオイラー=ラグランジュ方程式から

$$m\ddot{x} = -2\lambda x\,, \quad m\ddot{y} = -2\lambda y \tag{25}$$

が得られます。(24) を時間について微分すると

$$x\dot{x} + y\dot{y} = 0 \tag{26}$$

という式が得られますが、これは質点の位置座標と速度が直交していることを示しています。これは質点が円周上を運動していれば当然のことです。一方、運動方程式 (25) とこの式 (26) を使うと

$$\frac{d}{dt}\left\{\frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2\right)\right\} = m\left(\dot{x}\ddot{x} + \dot{y}\ddot{y}\right) = -2m\lambda\left(\dot{x}x + \dot{y}y\right) = 0 \tag{27}$$

となるため、運動エネルギーが保存していることが分かります。

$$\frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2\right) = \frac{1}{2}mv^2 = E \text{ (定数)} \tag{28}$$

これは速さ $v = \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}$ が一定であることも示しています。また、(26) を更に時間について微分し、(24), (25), (28) を使うと

$$0 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + x\ddot{x} + y\ddot{y} = v^2 - \frac{2\lambda}{m}\left(x^2 + y^2\right) = v^2 - \frac{2\lambda R^2}{m} \tag{29}$$

なので、λ が定数で

$$\lambda = \frac{mv^2}{2R^2} \tag{30}$$

となることが分かります。この式を (25) に代入すると、

$$m\ddot{x} = -\frac{mv^2 x}{R^2}, \quad m\ddot{y} = -\frac{mv^2 y}{R^2} \tag{31}$$

となることが分かりますが、$\left(-\frac{x}{R}, -\frac{y}{R}\right)$ が円周の中心を向く単位ベクトルであるので、(31) の各式の右辺は質点の運動を円周上に留めてとどめておくための向心力に他なりません。

6　対称性と保存量

前にも書きましたように、対称性というのは考えている系に対し、ある変換をしたときに不変になるということです。並進や回転などの連続な変換の下でラグランジアンが不変になるか、時間の全微分となる場合に、作用は不変になります。この時にオイラー=ラグランジュ方程式を使うと保存する量があることが分かります。この保存量は並進に対しては運動量、回転に対しては角運動量、また、時間をずらす変換に対してはエネルギーになります。

ある量 O が保存するということは、

$$\frac{dO}{dt} = 0 \tag{32}$$

ということです。

対称性を表すのに、しばしば「サイクリック（巡回的）」という言葉を使います。例えば、質量 m の質点に軸対称な力の働いているラグランジアンを考えましょう：

$$L = \frac{1}{2}\left(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\theta}^2\right) - V(\rho) \tag{33}$$

このラグランジアンには $\dot{\theta}$ は含まれていますが θ そのものは現れていません。このため、オイラー=ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}}\right) = \frac{\partial L}{\partial \theta} = 0 \tag{34}$$

より

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = m\rho^2\dot{\theta} \tag{35}$$

という量が保存していることが分かります。この量は角運動量に他なりません。このようにラグランジアンがある座標 q^i を含んでいないときに q^i に共役な運動量 $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$ が保存することはオイラー=ラグランジュ方程式から分かります。

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right) = \frac{\partial L}{\partial q^i} = 0 \tag{36}$$

このようにある座標 q^i がラグランジアンに含まれていないとき、このような座標のことをしばしば「サイクリック（巡回的）」と言います。ただし一般的にはこれらの座標が巡回的（周期的）というわけではありません。例えば x 軸上を運動する自由粒子（力を受けていない粒子のことです）を考えましょう。このラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \tag{37}$$

ですが、このラグランジアンには x が含まれていないので x はサイクリックな座標であり、その共役運動量は通常の運動量の x 成分です：

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \tag{38}$$

サイクリックな座標の一般化として、次のように座標に対し微小変換（変化分で展開した際の 2 次以上の項を無視するという意味です）を考えます：

$$q^i \to q^i + \epsilon\delta q^i\,, \quad \left(\dot{q}^i \to \dot{q}^i + \epsilon\delta\dot{q}^i\right) \tag{39}$$

ここで ϵ は変換が微少だということを表す微小な数です。この時ラグランジアンの変化分がゼロになるか何かある量 F の時間微分になっているとしましょう。

$$L\left(q^i + \epsilon\delta q^i, \dot{q}^i + \epsilon\delta\dot{q}^i\right) - L\left(q^i, \dot{q}^i\right) = \epsilon\left(\frac{\partial L}{\partial q^i}\delta q^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta\dot{q}^i\right) = \epsilon\frac{dF}{dt} \tag{40}$$

作用を考えると、時間積分の両端では $\delta q = 0$ になるように境界条件を取っていますので $\frac{dF}{dt} \neq 0$ でも作用は不変になります。オイラー=ラグランジュ方程式を使うと

$$\frac{\partial L}{\partial q^i}\delta q^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta\dot{q}^i = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right)\delta q^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta\dot{q}^i = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta\dot{q}^i\right) \tag{41}$$

なので

$$O \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta\dot{q}^i - F \tag{42}$$

という量が保存することが分かります。先ほどの角運動量の時の変換は $\theta \to \theta + \epsilon\theta_0$、運動量の x 成分に対する変換は $x \to x + \epsilon x_0$ ($\theta_0,\ x_0$ は定数) と座標を定数分だけずらした変換に対応しています。この時 $F = 0$ です。

次に時間を少しずらす変換を考えましょう。

$$t \to t + \epsilon \tag{43}$$

この時

$$q^i \to q^i + \epsilon\dot{q}^i\,, \quad \dot{q}^i \to \dot{q}^i + \epsilon\ddot{q}^i \tag{44}$$

となりますので、ラグランジアンが時間に陽によっていないときは

$$L\left(q^i + \epsilon\dot{q}^i, \dot{q}^i + \epsilon\ddot{q}^i\right) - L\left(q^i, \dot{q}^i\right) = \epsilon\frac{dL}{dt} \tag{45}$$

となり、

$$E = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i - L \tag{46}$$

という量が保存しますが、これはエネルギーに他なりません。ラグランジアンが時間に陽に依っている場合 $L = L\left(q^i, \dot{q}^i, t\right)$ は

$$\epsilon\frac{dL}{dt} = \epsilon\left(\frac{\partial L}{\partial q^i}\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\ddot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t}\right) \neq L\left(q^i + \epsilon\dot{q}^i, \dot{q}^i + \epsilon\ddot{q}^i, t\right) - L\left(q^i, \dot{q}^i, t\right) = \epsilon\left(\frac{\partial L}{\partial q^i}\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\ddot{q}^i\right) \tag{47}$$

となりますのでエネルギーは保存しません。

7　正準変数とハミルトニアン

ラグランジアン L は座標 q^i、$(i = 1, 2, \cdots N)$ とその時間微分 $\dot{q}^i$ で表されています:$(L = L\left(q^i, \dot{q}^i\right))$。$q^i$ に「共役な」運動量は $p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$ で定義されますがが、これを $\dot{q}^i$ について解くことにより、$\dot{q}^i$ を q^i と p_i の関数として表すことができます。このとき、q^i と p_i の関数としてハミルトニアンを次のように定義します:

$$H\left(q^i, p_i\right) \equiv \sum_i p_i \dot{q}^i\left(q^j, p_j\right) - L\left(q^i, \dot{q}^i\left(q^j, p_j\right)\right) \tag{48}$$

このようなラグランジアンからハミルトニアンへの変換を「ルジャンドレ変換」と呼びます。(48) と (46) を比べれば、ハミルトニアンの値がエネルギーになることがわかりますが、ハミルトニアンは q^i と p_i の関数となっています。共役な運動量の定義を使うと、

$$\frac{\partial H}{\partial p_j} = \sum_i \frac{\partial \dot{q}^i}{\partial p_j} p_i + \dot{q}^j - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\frac{\partial \dot{q}^i}{\partial p_j} = \dot{q}^j \tag{49}$$

であることがわかり、共役な運動量の定義とオイラー=ラグランジュ方程式を使うと、

$$\frac{\partial H}{\partial q^j} = \sum_i p_i \frac{\partial \dot{q}^i}{\partial q^j} - \frac{\partial L}{\partial q^j} - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\frac{\partial \dot{q}^i}{\partial q^j} = \sum_i p_i \frac{\partial \dot{q}^i}{\partial q^j} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j}\right) - \sum_i p_i \frac{\partial \dot{q}^i}{\partial q^j} = -\dot{p}_j \tag{50}$$

であることがわかります。このようにして得られた 2 つの式

$$\dot{q}^j = \frac{\partial H}{\partial p_j}\ , \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q^j} \tag{51}$$

をハミルトンの運動方程式といいます。また (q^i, p_i), $i = 1, 2, \cdots, N$ が作る $2N$-次元の空間を「位相空間」といい、(q^i, p_i) の集合を「正準変数」といいます。

8　正準変換

ハミルトニアンの定義式 (48) より

$$L = \sum_i p_i \dot{q}^i\left(q^j, p_j\right) - H \tag{52}$$

なので、作用 S は

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\sum_i p_i \dot{q}^i - H\right) \tag{53}$$

となります。q^i と p_i を独立な変数ととると、

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \left(\delta p_i \dot{q}^i + p_i \delta \dot{q}^i - \frac{\partial H}{\partial q^i}\delta q^i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\delta p_i\right) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \left(\left(\dot{q}^i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\right)\delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q^i}\right)\delta q^i\right)\end{aligned} \tag{54}$$

となり、作用が極値を取るという条件（$\delta S = 0$）からハミルトンの運動方程式 (51) が得られます。

正準変数 (q^i, p_i), $i = 1, 2, \cdots, N$ を新しい正準変数 (Q^i, P_i) に変換することを考えましょう。新しい正準変数に対するハミルトニアンを $\mathcal{H}$、作用を S' とすると、

$$S' = \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\sum_i P_i \dot{Q}^i - \mathcal{H} \right) \tag{55}$$

となりますが、$\delta S = 0$ のときに $\delta S' = 0$ であるためには作用の被積分関数の差が時間の全微分であればいいことになります。

$$\sum_i p_i \dot{q}^i - H = \sum_i P_i \dot{Q}^i - \mathcal{H} + \frac{dK}{dt} \tag{56}$$

もし、$K = K(q^i, Q^i, t)$ であれば、

$$\frac{dK}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial K}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial K}{\partial Q^i} \dot{Q}^i \right) + \frac{\partial K}{\partial t} \tag{57}$$

ですので (56) より

$$p_i = \frac{\partial K}{\partial q^i} \ , \quad P_i = -\frac{\partial K}{\partial Q^i} \ , \quad \mathcal{H} = H + \frac{\partial K}{\partial t} \tag{58}$$

が得られます。$K = K(q^i, Q^i, t)$ は「母関数」と呼ばれます。$K = K(q^i, Q^i, t)$ の代わりに $K = \tilde{K}(q^i, P_i, t) - \sum_i Q^i P_i$ として、

$$p_i = \frac{\partial \tilde{K}}{\partial q^i} \ , \quad Q^i = \frac{\partial \tilde{K}}{\partial P_i} \ , \quad \mathcal{H} = H + \frac{\partial \tilde{K}}{\partial t} \tag{59}$$

としたり、$K = \hat{K}(p_i, Q^i, t) + \sum_i q^i p_i$ を母関数として、

$$q^i = -\frac{\partial \hat{K}}{\partial p_i} \ , \quad P_i = -\frac{\partial \hat{K}}{\partial Q^i}, \quad \mathcal{H} = H + \frac{\partial \hat{K}}{\partial t} \tag{60}$$

とすることもできます。(59) の場合には

$$K\left(q^i, Q^i, t\right) = \tilde{K}\left(q^i, P_i\left(q^i, Q^i, t\right), t\right) - \sum_i Q^i P_i\left(q^i, Q^i, t\right) \tag{61}$$

の関係があります。

ただし、P_i を q^i, Q^i でうまく書き表せない場合があり、その時は (61) は使えません。例えば、$f(q)$ を q の適当な関数としたとき、$Q = f(q)$ となるような正準変換の母関数 $\tilde{K}(q, P)$ は

$$\tilde{K}(q, P) = P f(q) \tag{62}$$

で与えられ

$$P = \frac{p}{f'(q)} \tag{63}$$

となりますが、p を q と Q で書き表すことはできないので (61) は使えません。ただし、(59)、(60) から

$$\hat{K}(p, Q) = -q(p, Q)p - QP(p, Q) + \tilde{K}(q(p, Q), P(p, Q)) \tag{64}$$

なので、$Q=f(q)$ を $q=f^{-1}(Q)$ と逆関数を使って表すと

$$\hat{K}(p,Q)=-f^{-1}(Q)p-\frac{Qp}{f'\left(f^{-1}\left(Q\right)\right)}+\frac{pQ}{f'\left(f^{-1}\left(Q\right)\right)}=-f^{-1}(Q)p \tag{65}$$

となり、

$$q=-\frac{\partial \hat{K}}{\partial p}=f^{-1}(Q)\,,\quad P=-\frac{\partial \hat{K}}{\partial Q}=\frac{p}{f'(q)} \tag{66}$$

が得られます。ただし、$Q=f(q)$ から $\frac{df^{-1}(Q)}{dQ}=\frac{dq}{dQ}=\frac{1}{\frac{dQ}{dq}}=\frac{1}{f'(q)}$ となることを使いました。

座標 q^i および p_i の時間発展も正準変換とみなすことができます。今 δt を時間の次元を持つ微小量とし、次のような母関数を考えましょう：

$$K(q^i,P_i)=\sum_i q^iP_i+\delta tH\left(q^i,P_i\right) \tag{67}$$

ここで $H\left(q^i,p_i\right)$ はハミルトニアンで (67) では p_i を P_i に置き換えています。そうすると (59) を使うことにより、

$$p_i=P_i+\delta t\frac{\partial H\left(q^i,P_i\right)}{\partial q^i}\ ,\quad Q^i=q^i+\delta t\frac{\partial H\left(q^i,P_i\right)}{\partial P_i} \tag{68}$$

が得られますが、$Q^i(t)=q^i(t+\delta t)$、$P_i(t)=p_i(t+\delta t)$ とみなし、δt の二乗以上の項を無視すれば (68) はハミルトンの運動方程式 (51) 式となります。

後の (77) の辺りで見るように正準変換で位相空間の体積は変わりません。すなわち

$$dQdP=\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}-\frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q}\right)dqdp=dqdp \tag{69}$$

上の議論でみたように (q,p) の時間発展も正準変換とみなすことができます。これより、位相空間の微小な体積を $dqdp$ で定義したとき、これは時間とともに変わらない、すなわち、$\frac{d}{dt}\left(dqdp\right)=0$ であることが分かります。これをリュウビルの定理といいます。

9　ポアソン括弧式

一般に物理量 $F\left(q^i(t),p_i(t),t\right)$ の時間変化は

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+\sum_i\left(\frac{\partial F}{\partial q^i}\dot{q}^i+\frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)=\frac{\partial F}{\partial t}+\sum_i\left(\frac{\partial F}{\partial q^i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q^i}\right)=\frac{\partial F}{\partial t}+[F,H] \tag{70}$$

で与えられます。ここで、[,] はポアソンの括弧式と呼ばれ、一般の物理量 F、G に対し、

$$[F,G]\equiv\sum_i\left(\frac{\partial F}{\partial q^i}\frac{\partial G}{\partial p_i}-\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q^i}\right) \tag{71}$$

で定義されます。もし、F があらわに時刻 t によらなければ $\frac{\partial F}{\partial t}=0$ なので、

$$\frac{dF}{dt}=[F,H] \tag{72}$$

であり、もし $[F,H]=0$ であれば、F は時間によらず一定、すなわち保存することが分かります。特に、ハミルトニアン H はポアソンの括弧式の定義より $[H,H]=0$ なので、あらわに時刻によらなければ保存します。ポアソンの括弧式は次のような性質を持っています：

$$
\begin{aligned}
&1\ [F,G]=-[G,F] \\
&2\ [q^i,q^j]=[p_i,p_j]=0\ ,\quad [q^i,p_j]=\delta^i{}_j\ ,\quad \text{ただし}\quad \delta^i{}_j\equiv\begin{cases}1 & i=j\\ 0 & i\neq j\end{cases} \\
&3\ [F,G_1G_2]=[F,G_1]G_2+G_1[F,G_2]\ ,\quad [F_1F_2,G]=[F_1,G]F_2+F_1[F_2,G] \\
&4\ \left[q^i,(p_j)^n\right]=n\,(p_j)^{n-1}\,\delta^i{}_j\ ,\quad \left[p_i,\left(q^j\right)^n\right]=-n\left(q^j\right)^{n-1}\delta^j{}_i \\
&5\ \left[q^i,F\right]=\frac{\partial F}{\partial p_i}\ ,\quad [p_i,F]=-\frac{\partial F}{\partial q^i}\ , \\
&6\ [[F,G],J]+[[G,J],F]+[[J,F],G]=0
\end{aligned}
\tag{73}
$$

F と G が保存し、$[F,H]=[G,H]=0$ であるとき上の 6 より

$$
[[F,G],H]=-[[G,H],F]-[[H,F],G]=0 \tag{74}
$$

であり、$[F,G]$ という量も保存することが分かります。ポアソンの括弧式は正準変換で不変であり、ポアソンの括弧式は量子力学における交換子に対応します。

母関数が $K=K(q,Q,t)$ である $(q,p)\to(Q,P)=(Q(q,p,t),P(q,p,t))$ という正準変換を考えます。このとき、$\frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial G}{\partial p}-\frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial G}{\partial q}=\frac{\partial F}{\partial Q}\frac{\partial G}{\partial P}-\frac{\partial F}{\partial P}\frac{\partial G}{\partial Q}$ である、すなわちポアソンの括弧式が正準変換で不変であることを示します。$K=K\left(q,Q(q,p,t),t\right)$ とみなすと、$p=\partial K/\partial q$, $P=-\partial K/\partial Q$ より

$$
1=\frac{\partial p}{\partial p}=\frac{\partial^2 K}{\partial Q\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p}\ ,\quad \frac{\partial P}{\partial p}=-\frac{\partial^2 K}{\partial Q^2}\frac{\partial Q}{\partial p}\ ,\quad \frac{\partial P}{\partial q}=-\frac{\partial^2 K}{\partial q\partial Q}-\frac{\partial^2 K}{\partial Q^2}\frac{\partial Q}{\partial q} \tag{75}
$$

となります。上の三つ目の式に $\frac{\partial Q}{\partial p}$ をかけ、一つ目と二つ目の式を使うと、

$$
\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p}=-\frac{\partial^2 K}{\partial q\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p}-\frac{\partial Q}{\partial q}\left(\frac{\partial^2 K}{\partial Q^2}\frac{\partial Q}{\partial p}\right)=-1+\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} \tag{76}
$$

すなわち、

$$
\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}-\frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q}=1 \tag{77}
$$

であることが分かります。これを使うことにより

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial G}{\partial p}-\frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial G}{\partial q}&=\left(\frac{\partial F}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q}+\frac{\partial F}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}\right)\left(\frac{\partial G}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p}+\frac{\partial G}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}\right)\\
&-\left(\frac{\partial F}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p}+\frac{\partial F}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}\right)\left(\frac{\partial G}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q}+\frac{\partial G}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}\right)\\
&=\left(\frac{\partial F}{\partial Q}\frac{\partial G}{\partial P}-\frac{\partial F}{\partial P}\frac{\partial G}{\partial Q}\right)\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}-\frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial P}{\partial q}\right)=\frac{\partial F}{\partial Q}\frac{\partial G}{\partial P}-\frac{\partial F}{\partial P}\frac{\partial G}{\partial Q}
\end{aligned}
\tag{78}
$$

を示すことが出来ます。

次に一般にポアソン括弧が正準変換で変わらないことを見ます。

母関数が $\bar{K}=\bar{K}(p_i,P_i)$ で与えられる正準変換を考えますと $Q^i=\frac{\partial\bar{K}}{\partial P_i}$ から、

$$
\begin{aligned}
\left[Q^i,Q^j\right] =& \sum_k\left\{\frac{\partial Q^i}{\partial q^k}\frac{\partial Q^j}{\partial p_k}-\frac{\partial Q^i}{\partial p_k}\frac{\partial Q^j}{\partial q^k}\right\} \\
=& \sum_{k,l}\left\{\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial P_l\partial P_i}\frac{\partial P_l}{\partial q^k}\left(\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial p_k\partial P_j}+\sum_m\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial P_m\partial P_j}\frac{\partial P_m}{\partial p_k}\right)\right. \\
&\left.-\left(\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial p_k\partial P_i}+\sum_m\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial P_m\partial P_i}\frac{\partial P_m}{\partial p_k}\right)\frac{\partial\bar{K}}{\partial P_l\partial P_j}\frac{\partial P_l}{\partial q^k}\right\}
\end{aligned}
\tag{79}
$$

が得られますが、

$$
\delta^i{}_j=\frac{\partial q^i}{\partial q^j}=-\sum_k\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial P_k\partial p_i}\frac{\partial P_k}{\partial q^j}
\tag{80}
$$

従って $\frac{\partial^2K}{\partial P_k\partial p_i}$ と $-\frac{\partial P_k}{\partial q^j}$ は逆行列の関係にあるので、

$$
\delta^i{}_j=-\sum_k\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial P_i\partial p_k}\frac{\partial P_j}{\partial q^k}
\tag{81}
$$

を得、この式 (81) と (79) を使うことにより

$$
\left[Q^i,Q^j\right]=\sum_{l,m}\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial P_l\partial P_i}\frac{\partial^2\bar{K}}{\partial P_m\partial P_j}\left[P_l,P_m\right]
\tag{82}
$$

であることが分かります。

今 $K(q^i,Q^i)$ で与えられる正準変換を考えます。先ほど出てきた $\bar{K}$ とは

$$
\bar{K}=K+\sum_{i=1}^N\left(Q^iP_i-q^ip_i\right)
\tag{83}
$$

という関係があります。$p_i=\frac{\partial K}{\partial q^i}$, $P_i=-\frac{\partial K}{\partial Q^i}$ なので次の等式を得ます：

$$
\begin{aligned}
&\delta_i{}^j=\frac{\partial p_i}{\partial p_j}=\sum_k\frac{\partial^2K}{\partial Q^k\partial q^i}\frac{\partial Q^k}{\partial p_j}\,,\quad \frac{\partial P_i}{\partial q^j}=-\frac{\partial^2K}{\partial q^j\partial Q^i}-\sum_k\frac{\partial^2K}{\partial Q^k\partial Q^i}\frac{\partial Q^k}{\partial q^j}\,,\\
&\frac{\partial P_i}{\partial p_j}=-\sum_k\frac{\partial^2K}{\partial Q^k\partial Q^i}\frac{\partial Q^k}{\partial p_j}
\end{aligned}
\tag{84}
$$

(84) の第一式から $\frac{\partial^2K}{\partial Q^k\partial q^i}$ と $\frac{\partial Q^k}{\partial p_j}$ が互いに逆行列であることが分かるので

$$
\delta_i{}^j=\sum_k\frac{\partial^2K}{\partial Q^i\partial q^k}\frac{\partial Q^j}{\partial p_k}
\tag{85}
$$

を得ます。これより

$$
\sum_k\frac{\partial P_i}{\partial q^k}\frac{\partial Q^j}{\partial p_k}=-\sum_k\frac{\partial^2K}{\partial q^k\partial Q^i}\frac{\partial Q^j}{\partial p_k}-\sum_{k,l}\frac{\partial^2K}{\partial Q^l\partial Q^i}\frac{\partial Q^l}{\partial q^k}\frac{\partial Q^j}{\partial p_k}
\tag{86}
$$

が得られますが、(82) $\left(\sum_k \frac{\partial Q^i}{\partial p_k}\frac{\partial Q^j}{\partial q^k} = \sum_k \frac{\partial Q^i}{\partial q^k}\frac{\partial Q^j}{\partial p_k}\right)$ と (85) を使うことにより (86) を次のように書き直すことができます：

$$\begin{aligned}\sum_k \frac{\partial P_i}{\partial q^k}\frac{\partial Q^j}{\partial p_k} &= -\,{\delta_i}^j - \sum_{k,l}\frac{\partial^2 K}{\partial Q^l \partial Q^i}\frac{\partial Q^j}{\partial q^k}\frac{\partial Q^l}{\partial p_k} - \sum_l \frac{\partial^2 K}{\partial Q^l \partial Q^i}\left[Q^l, Q^j\right] \\ &= -\,{\delta_i}^j + \sum_k \frac{\partial P_i}{\partial p_k}\frac{\partial Q^j}{\partial q^k} - \sum_l \frac{\partial^2 K}{\partial Q^l \partial Q^i}\left[Q^l, Q^j\right] \end{aligned} \tag{87}$$

従って、

$$\left[Q^i, P_j\right] = {\delta^i}_j + \sum_l \frac{\partial^2 K}{\partial Q^l \partial Q^i}\left[Q^l, Q^j\right] \tag{88}$$

が得られます。

また、(84) から

$$\begin{aligned}\left[P_i, P_j\right] =& \sum_l \left\{\left(-\frac{\partial^2 K}{\partial q^l \partial Q^i} - \sum_k \frac{\partial^2 K}{\partial Q^k \partial Q^i}\frac{\partial Q^k}{\partial q^l}\right)\left(-\sum_m \frac{\partial^2 K}{\partial Q^m \partial Q^j}\frac{\partial Q^m}{\partial p_l}\right)\right. \\ &\left. - \left(-\sum_m \frac{\partial^2 K}{\partial Q^m \partial Q^i}\frac{\partial Q^m}{\partial p_l}\right)\left(-\frac{\partial^2 K}{\partial q^l \partial Q^j} - \sum_k \frac{\partial^2 K}{\partial Q^k \partial Q^j}\frac{\partial Q^k}{\partial q^l}\right)\right\} \\ =& \sum_{l,m}\left(\frac{\partial^2 K}{\partial q^l \partial Q^i}\frac{\partial^2 K}{\partial Q^m \partial Q^j}\frac{\partial Q^m}{\partial p_l} - \frac{\partial^2 K}{\partial Q^m \partial Q^i}\frac{\partial Q^m}{\partial p_l}\frac{\partial^2 K}{\partial Q^k \partial Q^j}\right) \\ &+ \sum_{k,m}\frac{\partial^2 K}{\partial Q^k \partial Q^i}\frac{\partial^2 K}{\partial Q^m \partial Q^j}\left[Q^k, Q^m\right] \end{aligned} \tag{89}$$

を得ますが。(82) と (89) で $\bar{K}$ と K は異なりますが、二つの式が矛盾がないためには

$$\left[Q^i, Q^j\right] = \left[P_i, P_j\right] = 0 \tag{90}$$

を得、更に (88) から

$$\left[Q^i, P_j\right] = {\delta^i}_j \tag{91}$$

を得ます。実際 (90) が正しいことは (89) を (82) に代入して得られる式

$$0 = \sum_{k,l}{M^{ij}}_{kl}\left[Q^k, Q^l\right]\ , \quad {M^{ij}}_{kl} \equiv {\delta^i}_k {\delta^j}_l - \sum_{mn}\frac{\partial^2 \bar{K}}{\partial P_m \partial P_i}\frac{\partial^2 \bar{K}}{\partial P_n \partial P_j}\frac{\partial^2 K}{\partial Q^k \partial Q^m}\frac{\partial^2 K}{\partial Q^l \partial Q^n} \tag{92}$$

で ${M^{ij}}_{kl}$ を (ij) を行の成分、(kl) を列とする $N^2 \times N^2$ 行列とみなしたとき、具体的な例を（恒等変換のから微小に異なる変換など）考えればわかるように ${M^{ij}}_{kl}$ は一般に逆を持つので (92) が成り立つためには $[Q^i, Q^j] = 0$ でないといけないことが分かります。更に (89) を使えば、$[P_i, P_j] = 0$ であることも分かります。

以上の結果を使うと

$$
\begin{aligned}
[F,G] &\equiv \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q^i}\frac{\partial G}{\partial p_i}-\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q^i}\right)\\
&=\sum_{i,j,k}\left\{\left(\frac{\partial F}{\partial Q^j}\frac{\partial Q^j}{\partial q^i}+\frac{\partial F}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial q^i}\right)\left(\frac{\partial G}{\partial Q^k}\frac{\partial Q^k}{\partial p_i}+\frac{\partial G}{\partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial p_i}\right)\right.\\
&\quad\left.-\left(\frac{\partial F}{\partial Q^k}\frac{\partial Q^k}{\partial p_i}+\frac{\partial F}{\partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial p_i}\right)\left(\frac{\partial G}{\partial Q^j}\frac{\partial Q^j}{\partial q^i}+\frac{\partial G}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial q^i}\right)\right\}\\
&=\sum_{i,j}\left\{\frac{\partial F}{\partial Q^i}\frac{\partial G}{\partial Q^j}\left[Q^i,Q^j\right]+\frac{\partial F}{\partial P_i}\frac{\partial G}{\partial P_j}\left[P_i,P_j\right]+\left(\frac{\partial F}{\partial Q^i}\frac{\partial G}{\partial P_j}-\frac{\partial F}{\partial P_j}\frac{\partial G}{\partial Q^i}\right)\left[Q^i,P_j\right]\right\}
\end{aligned}
\tag{93}
$$

となり、更に (90) と (91) を使うことにより、

$$
[F,G]=\sum_i\left(\frac{\partial F}{\partial Q^i}\frac{\partial G}{\partial P_i}-\frac{\partial F}{\partial P_i}\frac{\partial G}{\partial Q^i}\right)
\tag{94}
$$

を得ます。従って、ポアソン括弧は正準変換で変わりません。

ポアソン括弧が変わらないような変数変換を正準変換と定義する教科書もあります。

ネーターの定理で $q^i \to q^i+\epsilon\delta q^i\left(q^j,\dot{q}^j\right)$ という変換を考え、ラグランジアンが $L\to L+\epsilon\frac{dF\left(q^i,\dot{q}^i\right)}{dt}$ となったとき $O=\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta q^i - F$ という量が保存します。今、オイラーラグランジュ方程式を使うと

$$
\begin{aligned}
&\sum_i\left\{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right)\delta q^i+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\sum_j\left(\frac{\partial \delta q^i}{\partial q^j}\dot{q}^j+\frac{\partial \delta q^i}{\partial \dot{q}^j}\ddot{q}^j\right)\right\}\\
&=\sum_i\left\{\frac{\partial L}{\partial q^i}\delta q^i+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\sum_j\left(\frac{\partial \delta q^i}{\partial q^j}\dot{q}^j+\frac{\partial \delta q^i}{\partial \dot{q}^j}\ddot{q}^j\right)\right\}=\sum_j\left(\frac{\partial F}{\partial q^j}\dot{q}^j+\frac{\partial F}{\partial \dot{q}^j}\ddot{q}^j\right)
\end{aligned}
\tag{95}
$$

なので $\ddot{q}^j$ の項を比べることにより

$$
\sum_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\frac{\partial \delta q^i}{\partial \dot{q}^j}=\sum_i p_i\frac{\partial \delta q^i}{\partial \dot{q}^j}=\frac{\partial F}{\partial \dot{q}^j}
\tag{96}
$$

を得ます。正準形式では $\dot{q}^i=\dot{q}^i\left(q^j,p_j\right)$ なので、

$$
O=\sum_i p_i\delta q^i\left(q^j,\dot{q}^j\left(q^k,p_k\right)\right)-F\left(q^i,\dot{q}^i\left(q^j,p_j\right)\right)
\tag{97}
$$

と書けます。これより

$$
\left[q^i,O\right]=\frac{\partial O}{\partial p_i}=\delta q^i+\sum_{j,k}p_j\frac{\partial \delta q^j}{\partial \dot{q}^k}\frac{\partial \dot{q}^k}{\partial p_i}-\sum_j\frac{\partial F}{\partial \dot{q}^j}\frac{\partial \dot{q}^j}{\partial p_i}
\tag{98}
$$

となりますが (96) を使うことにより

$$
\left[q^i,O\right]=\delta q^i
\tag{99}
$$

を得ます。

10　回転と角運動量

質量 m の質点が中心力ポテンシャル $V(r)$ のもとで空間内を運動しているとき、デカルト座標（直角座標） $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ を使うと、ラグランジアンからハミルトニアンは次のようになります。

$$L=\frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\dot{\boldsymbol{r}}-V(r)\ ,\quad H=\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}}{2m}+V(r) \tag{100}$$

この時、角運動量が保存することはポアソン（Poisson）の括弧式を使うことから次のように示すことが出来ます。すなわち、角運動量は $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=(yp_z-zp_y,zp_x-xp_z,xp_y-yp_x)$ なので、例えば L_x と H のポアソン括弧式は

$$\begin{aligned}[L_x,H]=&\frac{\partial L_x}{\partial y}\frac{\partial H}{\partial p_y}-\frac{\partial L_x}{\partial p_y}\frac{\partial H}{\partial y}+\frac{\partial L_x}{\partial z}\frac{\partial H}{\partial p_z}-\frac{\partial L_x}{\partial p_z}\frac{\partial H}{\partial z}\\ =&\frac{p_zp_y}{m}+\frac{zy}{r}V'(r)-\frac{p_yp_z}{m}-\frac{yz}{r}V'(r)=0\end{aligned} \tag{101}$$

他の成分も同様に $[L_y,H]=[L_z,H]=0$ を示すことが出来、角運動量が保存することが分かります。また、角運動量の x-成分と y-成分のポアソンの括弧式を計算すると次のようになります。

$$[L_x,L_y]=\frac{\partial L_x}{\partial z}\frac{\partial L_y}{\partial p_z}-\frac{\partial L_x}{\partial p_z}\frac{\partial L_y}{\partial z}=p_yx-yp_x=L_z \tag{102}$$

同様に

$$[L_y,L_z]=L_x\ ,\quad [L_z,L_x]=L_y \tag{103}$$

直角座標 (x,y,z) は球座標 (r,θ,ϕ) を使って次のように書けます：

$$x=r\sin\theta\cos\phi\,,\quad y=r\sin\theta\sin\phi\,,\quad z=r\cos\theta \tag{104}$$

ϵ を微小な数として ϵ^2 以上を無視して次のような変換を考えます：

$$r\to r\,,\quad \theta\to\theta\,,\quad \phi\to\phi+\epsilon \tag{105}$$

これが z 軸周りの微小な回転

$$x\to x-\epsilon y\,,\quad y\to y+\epsilon x\,,\quad z\to z \tag{106}$$

となっていることはすぐにわかります。

$$x\to x-\epsilon r\sin\theta\sin\phi=x-\epsilon y\,,\quad y\to y+\epsilon r\sin\theta\cos\phi=y+\epsilon x\,,\quad z\to z \tag{107}$$

一方

$$r\to r\,,\quad \theta\to\theta-\epsilon\sin\phi\,,\quad \phi\to\phi-\epsilon\cot\theta\cos\phi\,,\quad \left(\cot\theta\equiv\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right) \tag{108}$$

という変換が x 軸周りの微小な回転

$$x\to x\,,\quad y\to y-\epsilon z\,,\quad z\to z+\epsilon y \tag{109}$$

となっていることを次のように示すことができます：

$$\begin{aligned} x \to & x + r\left(\cos\theta\cos\phi\left(-\epsilon\sin\phi\right) - \sin\theta\sin\phi\left(-\epsilon\cot\theta\cos\phi\right)\right) = 0\,, \\ y \to & y + r\left(\cos\theta\sin\phi\left(-\epsilon\sin\phi\right) + \sin\theta\cos\phi\left(-\epsilon\cot\theta\cos\phi\right)\right) = y - \epsilon r\cos\theta = y - \epsilon z\,, \\ z \to & z - r\sin\theta\left(-\epsilon\sin\phi\right) = z + \epsilon y \end{aligned} \tag{110}$$

極座標を使うことにより (100) のラグランジアンは次のように書けます：

$$L = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2\right) - V(r) \tag{111}$$

このラグランジアンでは ϕ はサイクリックな座標となっているので (105) の変換の下で不変になっていることはすぐにわかり、ϕ に共役な運動量

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}} = mr^2\sin^2\theta\dot{\phi} \tag{112}$$

が保存します。この運動量 p_ϕ は角運動量の z 成分 $L_z = m\left(x\dot{y} - y\dot{x}\right)$ に他なりません。実際

$$\begin{aligned} \dot{x} =& \dot{r}\sin\theta\cos\phi + \dot{\theta}r\cos\theta\cos\phi - \dot{\phi}\sin\theta\sin\phi\,, \\ \dot{y} =& \dot{r}\sin\theta\sin\phi + \dot{\theta}r\cos\theta\sin\phi + \dot{\phi}\sin\theta\cos\phi\,, \\ \dot{z} =& \dot{r}\cos\theta - \dot{\theta}r\sin\theta \end{aligned} \tag{113}$$

より

$$\begin{aligned} L_z =& m\left(x\dot{y} - y\dot{x}\right) \\ =& m\Big\{r\sin\theta\cos\phi\left(\dot{r}\sin\theta\sin\phi + \dot{\theta}r\cos\theta\sin\phi + \dot{\phi}\sin\theta\cos\phi\right) \\ & -r\sin\theta\sin\phi\left(\dot{r}\sin\theta\cos\phi + \dot{\theta}r\cos\theta\cos\phi - \dot{\phi}\sin\theta\sin\phi\right)\Big\} \\ =& mr^2\sin^2\theta\dot{\phi} \end{aligned} \tag{114}$$

となります。またラグランジアン (111) は (108) の変換の下でも不変になっています：

$$L \to L + mr^2\epsilon\left(-\dot{\theta}\cos\phi\dot{\phi} - \sin\theta\cos\theta\sin\phi\dot{\phi}^2 + \sin^2\theta\dot{\phi}\left(\frac{\cos\phi}{\sin^2\theta}\dot{\theta} + \cot\theta\sin\phi\dot{\phi}\right)\right) = L \tag{115}$$

(108) の変換に対応する保存量は次のようになります：

$$\frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}}\left(-\sin\phi\right) + \frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}}\left(-\cot\theta\cos\phi\right) = -mr^2\left(\dot{\theta}\sin\phi + \dot{\phi}\sin\theta\cos\theta\cos\phi\right) \tag{116}$$

この保存量は角運動量の x 成分 $L_x = m\left(y\dot{z} - z\dot{y}\right)$ になります。実際 (113) を使うと

$$\begin{aligned} L_x =& m\Big(r\sin\theta\sin\phi\left(\dot{r}\cos\theta - \dot{\theta}r\sin\theta\right) \\ & -r\cos\theta\left(\dot{r}\sin\theta\sin\phi + \dot{\theta}r\cos\theta\sin\phi + \dot{\phi}\sin\theta\cos\phi\right)\Big) \\ =& -mr^2\left(\dot{\theta}\sin\phi + \dot{\phi}\sin\theta\cos\theta\cos\phi\right) \end{aligned} \tag{117}$$

更に

$$p_r = m\dot{r}\,, \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta}\,, \quad p_\phi = mr^2 \sin\theta\dot{\phi} \tag{118}$$

を使うと

$$L_x = -\sin\phi p_\theta - \cot\theta\cos\phi p_\phi \tag{119}$$

を得ます。角運動量の y 成分については後で議論します。また、(103) の $[L_z, L_x] = L_y$ を使うと

$$L_y = \cos\phi p_\theta - \cot\theta\sin\phi p_\phi \tag{120}$$

を得ます。座標 r, θ, ϕ と L_z, L_x とのポアソン括弧は (105), (108) の変換になっています。

$$\begin{aligned} &[r, L_z] = [\theta, L_z] = 0\,, \quad [L_z \phi] = 1\,, \\ &[r, L_x] = 0\,, \quad [\theta, L_x] = -\sin\phi\,, \quad [\phi, L_x] = -\cot\theta\cos\phi \end{aligned} \tag{121}$$

一方 L_y とのポアソン括弧は

$$[r, L_y] = 0\,, \quad [\theta, L_y] = \cos\phi\,, \quad [\phi, L_z] = -\cot\theta\sin\phi \tag{122}$$

となり、L_y が次の変換を引き起こすことが分かります：

$$r \to r\,, \quad \theta \to \theta + \epsilon\cos\phi\,, \quad \phi \to \phi - \epsilon\cot\theta\sin\phi \tag{123}$$

もちろん、この変換の下でもラグランジアン (111) は不変になっています。また、ラグランジアン (111) に対応するハミルトニアンは次のようになります。

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2\sin^2\theta}\right) - V(r) \tag{124}$$

このハミルトニアンについても $[L_x, H] = [L_y, H] = [L_z, H] = 0$ を示すことが出来ます。

11　ハミルトン=ヤコビ方程式

先に作用 $S = \int_{t_1}^{t_2} dt L\left(q^i(t), \dot{q}^i(t), t\right)$ の変分をとる際に、$q^i(t_1) = q_1^i$ および $q^i(t_2) = q_2^i$ $(t_2 > t_1)$ という条件を課しました。$q^i(t)$ として運動方程式（オイラー=ラグランジュ方程式）の解を考えれば S を $q^i(t_1) = q_1^i$ と $q^i(t_2) = q_2^i$ の関数とみなすことができます：$S = S\left(q^i(t_1), q^i(t_2), t_1, t_2\right)$。今、$q^i(t_1) = q_1^i$ を固定して、$q^i(t_2) = q_2^i$ を $q^i(t_2) = q_2^i + \epsilon\delta q_2^i$ だけ変更したとすると、それに伴い運動方程式の解も $q^i(t)$ から $q^i(t) + \epsilon\delta q^i(t)$ だけ変わります。ここで、$\delta q^i(t)$ は $\delta q^i(t_1) = 0$ および $\delta q^i(t_2) = \delta q_2^i$ という条件を満たします。これによる作用の変化分は

$$\begin{aligned} \delta S =& \epsilon\int_{t_1}^{t_2} dt \left\{\frac{\partial L}{\partial q^i(t)}\delta q^i(t) + \frac{\partial L}{\partial\left(\dot{q}^i(t)\right)}\delta\dot{q}^i(t)\right\} \\ =& \epsilon\left[\left.\frac{\partial L}{\partial\left(\dot{q}^i(t)\right)}\delta q^i(t)\right|_{t=t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{\frac{\partial L}{\partial q^i(t)} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\left(\dot{q}^i(t)\right)}\right)\right\}\delta q^i(t)\right] \end{aligned} \tag{125}$$

二つ目の等号のところで、$\delta q^i(t_2) = \delta q^i_2 \neq 0$ のために、部分積分した際に、$t = t_2$ の項（最後の式の 1 項目）が残ってくることに注意してください。最後の式の二項目は $q^i(t)$ が運動方程式の解ならばゼロになります。また、$\frac{\partial L}{\partial(\dot{q}^i(t))} = p_i(t)$ なので、

$$\frac{\partial S}{\partial q^i(t_2)} = p_i(t_2) \tag{126}$$

であることが分かります。

定義より、$\frac{dS}{dt_2} = L\left(q^i(t_2), \dot{q}^i(t_2), t_2\right)$ ですが、一方、

$$\frac{dS}{dt_2} = \frac{\partial S}{\partial t_2} + \frac{\partial S}{\partial q^i(t_2)}\dot{q}^i(t_2) \tag{127}$$

なので、

$$0 = \frac{\partial S}{\partial t_2} + p_i(t_2)\dot{q}^i(t_2) - L\left(q^i(t_2), \dot{q}^i(t_2), t_2\right) = \frac{\partial S}{\partial t_2} + H\left(q^i(t_2), p_i(t_2), t_2\right) \tag{128}$$

となります。$\frac{\partial S}{\partial q^i(t_2)} = p_i(t_2)$ なので、

$$0 = \frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q^i(t), \frac{\partial S}{\partial q^i(t)}, t\right) \tag{129}$$

がえられます。この式をハミルトン=ヤコビの方程式といいます。ここで簡単のため t_2 を t と書きました。もしハミルトニアン H があらわに時刻 t によらなければ、H は定数であり（$H = E$）、S が $S = S_0\left(q^i(t)\right) - Et$ と書けますので、

$$H\left(q^i(t), \frac{\partial S_0}{\partial q^i(t)}\right) = E \tag{130}$$

が得られます。

ハミルトン=ヤコビの方程式 (129) は q^i と時刻についての 1 階微分だけを含んでいるので $i = 1, 2, \cdots, N$ とすると $N+1$ 個の積分定数を含みます。S はハミルトン=ヤコビの方程式の中に微分の形でだけ含まれているので、$S = S_1$ というひとつの解が見つかればそれを定数 A だけずらした $S = S_1 + A$ も解であることが分かります。$N+1$ 個の積分定数のうちひとつはこの定数 A になるので、ハミルトン=ヤコビの方程式の解は次のような形になります：

$$S = S_1\left(q^1, q^2, \cdots, q^N; \alpha^1, \alpha^2, \cdots, \alpha^N, t\right) + A \tag{131}$$

ここで α^i が残りの N 個の積分定数になります。ハミルトニアンが陽に t を含まない場合はエネルギー　E も α^i の一つになります。今、α^i を新たな座標と思い、S を母関数と思って ($W = S$)、正準変換を考えてみます。 α^i に共役な運動量を β_i とすると

$$\beta_i = -\frac{\partial S}{\partial \alpha^i} \tag{132}$$

となります。また、新しいハミルトニアン $\mathcal{H}$ は

$$\mathcal{H} = H + \frac{\partial S}{\partial t} \tag{133}$$

ですが、ハミルトン=ヤコビの方程式を使うと $\mathcal{H} = 0$ であることが分かります。これより明らかに $[\beta_i, \mathcal{H}] = 0$ なので、α^i ばかりではなく β_i も定数であることが分かります。

最も簡単な例として x 軸上を運動する質量 m の自由粒子を考えてみましょう。ハミルトニアンは $H = \frac{p^2}{2m}$ なので、ハミルトン=ヤコビの方程式は

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 = E\,, \tag{134}$$

となります。ここで座標が一つだけなので $\frac{\partial S_0}{\partial q^i(t)}$ が偏微分ではなく $\frac{dS_0}{dx}$ と常微分になりました。がこの解は

$$S_0 = \pm x\sqrt{2mE} + A\,, \tag{135}$$

であり、

$$S = \pm x\sqrt{2mE} - Et + A\,, \tag{136}$$

となります。E を新しい座標と思いますと、それに共役な運動量 β は

$$\beta = -\frac{\partial S}{\partial E} = \mp x\sqrt{\frac{m}{2E}} + t\,, \tag{137}$$

すなわち、

$$x = \pm t\sqrt{\frac{2E}{m}} - \beta\sqrt{\frac{2E}{m}}\,, \tag{138}$$

と等速度運動が得られます。x に共役な運動量 p は

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} = \pm\sqrt{2mE}\,, \tag{139}$$

$E = \frac{p^2}{2m}$ とよく知られた結果になり、(140) も

$$x = \frac{p}{m}t - \beta\sqrt{\frac{2E}{m}}\,, \tag{140}$$

となります。

A　ルンゲ=レンツベクトル

逆2乗力の中心力を受けて運動する質量 m の質点の質点のラグランジアンは次のように書けます：

$$L=\frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\dot{\boldsymbol{r}}+\frac{k}{r} \tag{141}$$

この系では角運動量 $\boldsymbol{L}$ やエネルギー以外にもルンゲ=レンツベクトル

$$\boldsymbol{A}\equiv\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\frac{mk\boldsymbol{r}}{r}=-\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{p}+p^2\boldsymbol{r}-\frac{mk\boldsymbol{r}}{r} \tag{142}$$

というものが保存します。実際運動方程式

$$m\ddot{\boldsymbol{r}}=\dot{\boldsymbol{p}}=-\frac{k\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{143}$$

と角運動量の保存則 $\dot{L}=0$ を使うと

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{A}}=&\dot{\boldsymbol{p}}\times\left(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\right)+\frac{mk\dot{\boldsymbol{r}}}{r}-\frac{mk\dot{r}\boldsymbol{r}}{r^2}=-\frac{k}{r^3}\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\right)+\frac{k\boldsymbol{p}}{r}-\frac{mk\left(\boldsymbol{r}\cdot\dot{\boldsymbol{r}}\right)\boldsymbol{r}}{r^3}\\ =&\frac{k}{r^3}\left(\left(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{p}-\left(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)\boldsymbol{r}\right)+\frac{k\boldsymbol{p}}{r}-\frac{k\left(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)\boldsymbol{r}}{r^3}=0\end{aligned} \tag{144}$$

ここで、$\boldsymbol{A}\times\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}\right)=-\left(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}\right)\boldsymbol{C}+\left(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C}\right)\boldsymbol{B}$ および $r^2=\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}$ から得られる $r\dot{r}=\boldsymbol{r}\cdot\dot{\boldsymbol{r}}$ という等式を使いました。

(141) に対応するハミルトニアンは

$$H=\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}}{2m}-\frac{k}{r} \tag{145}$$

$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{A}$ とのポアソン括弧は $\boldsymbol{\epsilon}$ を微小な定数ベクトルとして、

$$\left[\boldsymbol{r},\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{A}\right]=-\left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p}\right)\boldsymbol{r}-\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{\epsilon}+2\left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{p}=\boldsymbol{\epsilon}\times\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}\right)+\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\epsilon}\right) \tag{146}$$

これより

$$\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\epsilon}\times\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}\right)+\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\epsilon}\right) \tag{147}$$

という変換を考えると

$$\dot{\boldsymbol{r}}\to\dot{\boldsymbol{r}}+\boldsymbol{\epsilon}\times\left(\dot{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{r}\right)+\frac{1}{m}\boldsymbol{p}\times\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\epsilon}\right)+\boldsymbol{r}\times\left(\dot{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{\epsilon}\right) \tag{148}$$

そうするとラグランジアンの変化分は

$$
\begin{aligned}
L \to & L + \frac{1}{m}\boldsymbol{p}\cdot\left(\boldsymbol{\epsilon}\times(\dot{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{r}) + \frac{1}{m}\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\epsilon}) + \boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\epsilon})\right) \\
& \quad - \frac{k}{r^3}\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{\epsilon}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\epsilon})) \\
= & L + \frac{1}{m}\boldsymbol{p}\cdot\left(-(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\dot{\boldsymbol{p}})\,\boldsymbol{r} + (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})\,\dot{\boldsymbol{p}} - (\boldsymbol{r}\cdot\dot{\boldsymbol{p}})\,\boldsymbol{\epsilon} + (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\epsilon})\,\dot{\boldsymbol{p}}\right) \\
& \quad - \frac{k}{r^3}\boldsymbol{r}\cdot\left(-(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p})\,\boldsymbol{r} + (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{p}\right) \\
= & L + m\left(-(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\ddot{\boldsymbol{r}})(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\ddot{\boldsymbol{r}}) - (\boldsymbol{r}\cdot\ddot{\boldsymbol{r}})(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{\epsilon}) + (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\epsilon})(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\ddot{\boldsymbol{r}})\right) \\
& \quad - km\left(-\frac{(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\dot{\boldsymbol{r}})}{r} + \frac{(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{r}\cdot\dot{\boldsymbol{r}})}{r^3}\right) \\
= & L + \frac{d}{dt}\left\{m\left(-(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\dot{\boldsymbol{r}})(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\dot{\boldsymbol{r}})\right) + \frac{km\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r}}{r}\right\} \\
= & L + \frac{d}{dt}\left\{\frac{1}{m}\left(-(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})\,p^2\right) + \frac{km\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r}}{r}\right\}
\end{aligned}
\tag{149}
$$

従って保存量は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{A} = & \frac{1}{m}\boldsymbol{p}\cdot\left(-(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p})\,\boldsymbol{r} - (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{\epsilon} + 2(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{p}\right) - \frac{1}{m}\left(-(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})\,p^2\right) - \frac{km\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r}}{r} \\
= & \frac{1}{m}\left(-(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r})\,p^2\right) - \frac{km\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r}}{r} \\
= & \boldsymbol{\epsilon}\left\{\frac{1}{m}\left(-(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{p} + p^2\boldsymbol{r}\right) - \frac{km\boldsymbol{r}}{r}\right\} \\
= & \boldsymbol{\epsilon}\left\{\frac{1}{m}\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) - \frac{km\boldsymbol{r}}{r}\right\}
\end{aligned}
\tag{150}
$$

となり、確かにルンゲ=レンツベクトル (142) が現れることが分かります。

ルンゲ=レンツベクトル同士のポアソン括弧は次のようになります：

$$
[A_x, A_y] = -\left(p^2 - \frac{2km}{r}\right)L_z\,. \tag{151}
$$

ここで $p^2 - \frac{2km}{r} = 2mE$ であり、エネルギー E が保存するので定数になります。

B　高階微分の理論のエネルギー

ここではラグランジアンが高階微分を含む理論のエネルギーを考えてみます。

最初に次のようにラグランジアンが 2 階の高階微分を含む場合を考えてみましょう：

$$
L = L(q, \dot{q}, \ddot{q})\,. \tag{152}
$$

ここでは簡単のためにラグランジアンが陽に時間 t に依っていないとします。そうすると一般化されたオイラー=ラグランジュ方程式は次のようになります：

$$
0 = \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) + \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\right)\,. \tag{153}
$$

これを使うことにより

$$
\begin{aligned}
\frac{dL}{dt} =& \frac{\partial L}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\ddot{q} + \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\dddot{q} \\
=& \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\dot{q} - \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\right)\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\ddot{q} + \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\dddot{q} \\
=& \frac{d}{dt}\left\{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{q} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\right)\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\ddot{q}\right\}.
\end{aligned} \tag{154}
$$

となりますのでエネルギーに対応する保存量が次のように与えられることが分かります：

$$
E = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{q} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\right)\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\ddot{q} - L\,. \tag{155}
$$

より一般的に次のような一般の高階微分を含むラグランジアンを考えてみましょう：

$$
L = L\left(q, \dot{q}, \cdots, q^{(N)}\right)\,. \tag{156}
$$

そうするとオイラー=ラグランジュ方程式は

$$
0 = \frac{\partial L}{\partial q} + \sum_{n=1}^{N} (-)^n \frac{d^n}{dt^n}\left(\frac{\partial L}{\partial q^{(n)}}\right)\,. \tag{157}
$$

となり、

$$
\begin{aligned}
\frac{dL}{dt} =& \frac{\partial L}{\partial q}\dot{q} + \sum_{n=1}^{N} \frac{\partial L}{\partial q^{(n)}} q^{(n+1)} \\
=& \sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{\partial L}{\partial q^{(n)}} q^{(n+1)} - (-)^n \frac{d^n}{dt^n}\left(\frac{\partial L}{\partial q^{(n)}}\right)\dot{q}\right\} \\
=& \sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{\partial L}{\partial q^{(n)}} q^{(n+1)} - (-)^n \frac{d}{dt}\left(\frac{d^{n-1}}{dt^{n-1}}\left(\frac{\partial L}{\partial q^{(n)}}\right)\dot{q}\right) - (-)^{n-1} \frac{d^{n-1}}{dt^{n-1}}\left(\frac{\partial L}{\partial q^{(n)}}\right)\ddot{q}\right\} \\
=& \frac{d}{dt}\left\{\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{n} (-)^{k-1}\left(\frac{d^{k-1}}{dt^{k-1}}\left(\frac{\partial L}{\partial q^{(n)}}\right) q^{(n-k+1)}\right)\right\}.
\end{aligned} \tag{158}
$$

であることから保存量であるエネルギーを次のように定義できることが分かります：

$$
\begin{aligned}
E =& \sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{n} (-)^{k-1} \frac{d^{k-1}}{dt^{k-1}}\left(\frac{\partial L}{\partial q^{(n)}}\right) q^{(n-k+1)} - L \\
=& \sum_{l=1}^{N}\sum_{k=0}^{N-l} (-1)^k \frac{d^k}{dt^k}\left(\frac{\partial L}{\partial q^{(l+k)}}\right) q^{(l)} - L\,.
\end{aligned} \tag{159}
$$

C　高階微分の理論の正準形式

ここではラグランジアンが高階微分を含む理論の正準形式を考えてみます。

今作用は次のように与えられます：

$$S=\int dtL\,. \tag{160}$$

もし、通常のように $L=L(q,\dot{q})$ であればラグランジュ乗数 p と q_1 を使い、作用を次のように書き直すことが出来ます：

$$S=\int dt\left(p\left(\dot{q}-q_1\right)+L\left(q,q_1\right)\right)\,. \tag{161}$$

実際 p についての変分でn $q_1=\dot{q}$ が得られますので、この表式を作用 (161) に代入すると下の作用 (160) が得られます。一方、q_1 の変分により

$$p=\frac{\partial L}{\partial q_1}\,. \tag{162}$$

が得られます。この式 (162) を q_1 について q と p の関数として解き、$q_1=q_1(q,p)$、この表式を代入することにより、作用 (161) を次のように書き直すことが出来ます：

$$S=\int dt\left(p\dot{q}-H(q,p)\right)\,,\quad H(q,p)\equiv pq_1(q,p)-L\left(q,q_1(q,p)\right)\,. \tag{163}$$

これによりハミルトニアンを使った標準的な正準形式が得られます。

次に $L=L(q,\dot{q},\ddot{q})$ の場合を考えてみましょう。ラグランジュ乗数 p_1, p_2, q_1, q_2 を導入し、作用 (160) を次のように書き直します：

$$S=\int dt\left(p_1\left(\dot{q}-q_1\right)+p_2\left(\dot{q}_1-q_2\right)+L\left(q,q_1,q_2\right)\right)\,. \tag{164}$$

そうすると q_1 と q_2 の変分により、

$$p_1+\dot{p}_2=\frac{\partial L}{\partial q_1}\,,\quad p_2=\frac{\partial L}{\partial q_2}\,. \tag{165}$$

が得られ、

$$p_1=\frac{\partial L}{\partial q_1}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial q_2}\right)\,. \tag{166}$$

となり、この二つ目の方程式を q_2 について q, q_1, p_1, p_2 の関数として解き $q_2(q,q_1,p_2)$、作用 (164) を次のように書き直します：

$$\begin{aligned}S=&\int dt\left\{p_1\dot{q}+p_2\dot{q}_1-H\left(q,q_1,p_1,p_2\right)\right\}\,,\\ H\left(q,q_1,p_1,p_2\right)=&p_1q_1+p_2q_2\left(q,q_1,p_2\right)-L\left(q,q_1,q_2\left(q,q_1,p_2\right)\right)\,.\end{aligned} \tag{167}$$

そうすると q_1 と q_2 を $\dot{q}$ 及び $\ddot{q}$ と同一視することにより、H が (155) のエネルギーと一致することが分かります。

より一般に $L=L\left(q,\dot{q},\cdots q^{(N)}\right)$ というラグランジアンを考えます。ラグランジュ乗数 p_i と q_i $(i=1,2,\cdots,N)$ を導入し、作用 (160) を次のように書き直します：

$$S=\int dt\left(\sum_{i=1}^{N}p_i\left(\dot{q}_{i-1}-q_i\right)+L\left(q_0,q_1,\cdots,q_N\right)\right)\,. \tag{168}$$

ここで q を q_0, $q_0 \equiv q$ と書きました。それにより q_i $i = 1, \cdots N-1$ についての変分を使い、

$$p_i + \dot{p}_{i+1} = \frac{\partial L}{\partial q_i}\,, \tag{169}$$

が得られ、q_N についての変分から

$$p_N = \frac{\partial L}{\partial q_N}\,, \tag{170}$$

が得られますが、これを q_N について解きます、$q_N = q_N\left(q_0, q_1, \cdots, q_{N-1}, p_N\right)$。また、(169) 式により

$$p_i = \sum_{k=0}^{N-i} (-)^k \frac{d^k}{dt^k}\left(\frac{\partial L}{\partial q_{i+k}}\right)\,. \tag{171}$$

を得るので、作用 (172) を次のように書き直します：

$$\begin{aligned} S &= \int dt \left(\sum_{i=1}^{N} p_i \dot{q}_{i-1} - H\left(q_0, q_1, \cdots, q_{N-1}, p_1, p_2, \cdots p_N\right)\right)\,, \\ H\left(q_0, q_1, \cdots q_{N-1}, p_1, p_2, \cdots, p_N\right) &\equiv \sum_{i=1}^{N-1} p_i q_i + p_N q_N\left(q_0, q_1, \cdots, q_{N-1}, p_N\right) \\ &\quad - L\left(q_0, q_1, \cdots, q_{N-1}, q_N\left(q_0, q_1, \cdots, q_{N-1}, p_N\right)\right)\,. \end{aligned} \tag{172}$$

そうすると $q_i = q^{(i)}$ とみなすことにより (159) の H がエネルギーとなります。ハミルトニアン H は p_i $(i = 1, 2, \cdots, N-1)$ について線形であるため、不安定性が生じます。