拘束条件

粒子の運動に対して制限が加わっている場合での、ラグランジアンとハミルトニアンを見ていきます。ここでの話は解析力学を始めてやるような人は飛ばしたほうがいいです。
前半は一般的な話をして、後半で具体例を使います。
ここではドットのついたものは時間微分 $\dot{x} = dx/dt =$ だとします。

最初に簡単に行列の表記をまとめておきます。行列に慣れている人は飛ばしてください。$N \times N$ 行列は

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1N} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{N1} & C_{N2} & \cdots & C_{NN} \end{pmatrix}$$

こんなもので、C_{11}, C_{12} とかが行列 C の成分 (もしくは要素) です ($C_{11} = 5, C_{12} = 21$ とか)。で、行列の成分を $C_{ij}(i, j = 1, 2, \dots, N)$ と書きます。行列の成分に注目して行列の計算を行うときには

$$C_{ij} = A_{ij} + B_{ij}$$

みたいに書き (添え字の数字は揃える)、

$$C = A + B$$

と同じことです。掛け算のときは

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^{N} A_{ik} B_{kj}$$

$$C = AB$$

と書きます。例えば、2×2 行列だとすれば

$$C_{ij} = A_{i1} B_{1j} + A_{i2} B_{2j}$$

$C = AB$ のときの計算は

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

なので、

$$C_{11} = A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} \ , \ C_{12} = A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \ , \ \cdots$$

となって一致しています。成分表示での決まりごとは左辺の添え字 (i と j) が、右辺の添え字において和と無関係にいなければいけないということです。和を取るのは k に対してで、i, j は和と無関係になっています。なので、

行列の成分を表す添え字から式が間違っているかどうかを見ることが出来ます。ちなみに、添え字に対して和を取ることは、潰すと表現されます。今の場合では添え字 k を潰すと言うことになります。

ここから本題になります。オイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$$

これの左辺は微分の連鎖則を使うことで (L は $q, \dot{q}$ の関数)

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{d\dot{q}}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \frac{dq}{dt}\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$$

となるので、オイラー・ラグランジュ方程式の形を

$$\ddot{q}\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2} = \frac{\partial L}{\partial q} - \dot{q}\frac{\partial^2 L}{\partial q \partial \dot{q}}$$

という形にできます。これは N 次元に一般化すれば

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad (i = 1, \ldots, N)$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{d\dot{q}_j}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_j}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + \frac{dq_j}{dt}\frac{\partial}{\partial q_j}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad (i, j = 1, \ldots, N)$$

となるだけなので

$$\ddot{q}_j\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \dot{q}_j\frac{\partial^2 L}{\partial q_j \partial \dot{q}_i} \tag{1}$$

となります。単純に i, j で区別しているだけです。

こんな形に変形させた理由を説明します。(1) の左辺を見てみると $\ddot{q}_j$ という加速度がいます。もし、この加速度 $\ddot{q}_j$ を求めたいなら、$\partial^2 L/\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j$ を右辺に持っていけばいいです。そうすれば解ける解けないは別にすれば、$\ddot{q}_j$ は位置 q と速度 $\dot{q}$ によって完全に決定できるはずです。つまり、$\ddot{q}_j$ を決定するためには $\partial^2 L/\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j$ が右辺に持っていける、違う言い方をすれば、$\partial^2 L/\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j$ の逆数が存在しなければいけないということです。この部分を

$$M_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j}$$

と書くことにして、行列扱いにします。この行列 M_{ij} を Hessian 行列と呼びます。行列と言っているのは

$$M = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_1 \partial \dot{q}_1} & \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_1 \partial \dot{q}_2} & \cdots & \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_1 \partial \dot{q}_N} \\ \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_2 \partial \dot{q}_1} & \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_2 \partial \dot{q}_2} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_N \partial \dot{q}_1} & \cdots & \cdots & \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_N \partial \dot{q}_N} \end{pmatrix}$$

このように書けるからです。M_{ij} の逆行列が存在するためには

$$\det M_{ij} \neq 0$$

でなければいけないことになります。det は行列式を表します (行列式が 0 のときその行列は逆行列を持たない)。もし、$\det M_{ij} = 0$ だとしたら、$\ddot{q}_j$ を完全に決定することができなくなります (運動方程式に任意の関数が現れる)。このように行列 M_{ij} の行列式がゼロかそうでないかで状況が変わります。ゼロのときを特異系 (singular system) と呼びます (特異系の具体的な例は (7) で説明してます)。

解析力学での基本的な変数は、一般化座標 q、それの時間微分 $\dot{q}$、q と共役な運動量 p で、オイラー・ラグランジュ方程式や正準方程式はこれらを決定するための方程式です。特異系でないならこれらの量は決定できるような構造を持っています。

では、特異系において、こららの量がどのようになっているのかを見ます。ハミルトニアンと共役運動量 p は

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^{N} p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t)$$

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (i = 1, \ldots, N)$$

$p_i, \dot{q}_i$ は N 次元ベクトル (N 行 1 列の行列) だと思ってください。共役運動量 p_i の式は、N 個の $\dot{q}_i$ が全て決定できているならそれに対応した N 個の p_i も決まることを言っています。この場合はそれだけで話が終わるので無視します。特異系での構造を調べるために p_i の式を Hessian 行列で書きます。Hessian 行列が $\dot{q}$ に依存していない q の関数で書けるなら (これはラグランジアンが $\dot{q}$ の 2 次までしか含んでいない場合。通常、3 次以上まで考えることはほぼない)、p_i は

$$p_i = \sum_{j=1}^{N} M_{ij}(q) \dot{q}_j$$

と書けます。この式から、M_{ij} が $\dot{q}_i$ と p_i の関係を与えていることが分かり、M_{ij} の階数 (rank) が N なら p_i と $\dot{q}_i$ の対応を N 個全てに渡って与えることが出来ます。しかし、階数 R が $R < N$ の場合では行列要素がゼロの部分が現れるために、明らかに p_i と $\dot{q}_i$ の関係式を N 個与えることが出来ません (今の場合 M_{ij} は $N \times N$ の正方行列なので $N = R$ でなければ逆行列は存在しないため、$R < N$ は特異系であることを表します)。形式的にこのことを示します。Hessian 行列が階数 R の $N \times N$ 行列だとすれば、行列の性質より $R \times R$ 行列 J_R によって

$$M'_{ij} = \begin{pmatrix} J_R & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \sum_{k,l=1}^{N} T_{ik} M_{kl} T^t_{lj}$$

と変形することが出来ます。T が M をこのように書き換えるための変換行列で、これについている t は転置を取ることを表し、$T^t = T^{-1}$ です。この変換行列 T を作用させて

$$\sum_{j=1}^{N} T_{ij} p_j = \sum_{j,k=1}^{N} T_{ij} M_{jk} \dot{q}_k$$

こんなのを考えると

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{N} T_{ij}p_j &= \sum_{j,k=1}^{N} T_{ij}M_{jk}T^t_{kl}T_{lk}\dot{q}_k \\ &= \sum_{k,l=1}^{N} M'_{il}T_{lk}\dot{q}_k \\ Tp &= \begin{pmatrix} J_R & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} T(R,N) \\ T(N-R,N) \end{pmatrix}\dot{q} \\ &= \begin{pmatrix} J_R T(R,N) \\ 0 \end{pmatrix}\dot{q}\end{aligned}$$

と書き換えることが出来ます ($T(R,N)$ は $R\times N$ 行列であることを表しています)。これの式から直接的に、$R+1$ から N までの式が

$$\sum_{j=1}^{N} T_{ij}p_j = 0 \qquad (i = R+1,\ldots,N)$$

を与えていることが分かり、$\dot{q}$ を含まない q,p に対する式となっています。このように階数が $R < N$ のとき ($\det M_{ij} = 0$, 特異系) に現れる $\dot{q}$ を含まない、正準変数 (q,p) に対する関係式を拘束条件 (constrains) と呼びます。拘束条件は形式的に

$$\phi_\alpha(q,p) = 0 \qquad (\alpha = 1,\ldots,N-R)$$

とよく書かれます (拘束条件は上の話から分かるように $N-R$ 個ある)。

　これで特異系においては正準変数間の関係式として拘束条件が存在することが分かりました。次に拘束条件がハミルトニアンにどのように現れるのかを見ます。拘束条件が A 個あるとして

$$\phi_\alpha(q,p,t) = 0 \qquad (\alpha = 1,2,\cdots,A) \tag{2}$$

とします。作用の定義はラグランジアンもしくはハミルトニアンによって

$$S = \int dtL(q,\dot{q},t) = \int dt(p\dot{q} - H(q,p,t))$$

$$H(q,p,t) = \sum_{i=1}^{N} p_i\dot{q}_i - L(q,\dot{q},t)$$

作用の変分は変形していくと、「ハミルトン形式」でやったように

$$\delta S = -\int dt\delta q_i\left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\right) + \int dt\delta p_i\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\right) = 0 \tag{3}$$

こんな形になります。ここからは Σ 記号を省いて

$$\delta q_i\dot{p}_i = \delta q_1\dot{p}_1 + \delta q_2\dot{p}_2 + \cdots + \delta q_N\dot{p}_N$$

$$\delta q_i \frac{\partial H}{\partial q_i} = \delta q_1 \frac{\partial H}{\partial q_1} + \delta q_2 \frac{\partial H}{\partial q_2} + \cdots + \delta q_N \frac{\partial H}{\partial q_N}$$

このように同じ添え字での掛け算には和を取るようにします。(2) での拘束条件は q と p の関数なので

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial p_i}\delta p_i = 0$$

と書くことができます。これを δS から引くんですが、定数 λ_α(後で出てくるラグランジュの未定乗数に対応) をかけても式の意味は変わらないので、λ_α を左辺にかけたものを使って

$$-\int dt\delta q_i \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} + \lambda_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial q_i}\right) + \int dt\delta p_i \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} - \lambda_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial p_i}\right) = 0$$

δq_i と δp_i の係数が 0 になるとすれば

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} + \lambda_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial p_i}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \lambda_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial q_i}$$

という関係式が出てきて、これは正準変数 q, p によるポアソン括弧

$$\{F, H\}_P = \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

を使えば

$$\begin{aligned}
\dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} + \lambda_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial p_i} \\
&= \frac{\partial q_i}{\partial q_j}\frac{\partial (H + \lambda_\alpha \phi_\alpha)}{\partial p_j} - \frac{\partial q_i}{\partial p_j}\frac{\partial (H + \lambda_\alpha \phi_\alpha)}{\partial q_j} \\
&= \delta_{ij}\frac{\partial H}{\partial p_j} + \delta_{ij}\lambda_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial p_j} \\
&= \{q_i, H + \lambda_\alpha \phi_\alpha\}_P
\end{aligned} \tag{4a}$$

$$\begin{aligned}
\dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \lambda_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial q_i} \\
&= \frac{\partial p_i}{\partial q_j}\frac{\partial (H + \lambda_\alpha \phi_\alpha)}{\partial p_j} - \frac{\partial p_i}{\partial p_j}\frac{\partial (H + \lambda_\alpha \phi_\alpha)}{\partial q_j} \\
&= \{p_i, H + \lambda_\alpha \phi_\alpha\}_P
\end{aligned} \tag{4b}$$

と書くことが出来ます。途中での δ_{ij} はクロネッカーデルタで $i = j$ のとき 1 で $i \neq j$ では 0 という記号です。この結果と通常のポアソン括弧による正準方程式

$$\dot{p} = \{p, H\}_P$$

$$\dot{q} = \{q, H\}_P$$

を比べてみると、ハミルトニアンが

$$H \ \Rightarrow \ H + \lambda_\alpha \phi_\alpha$$

と変更されることが分かります。つまり、拘束条件があるとき、ハミルトニアンは

$$H_T = H + \lambda_\alpha \phi_\alpha \quad (\alpha = 1, \ldots, A) \tag{5}$$

と定義し直されます。そうすることで q, p, t を変数に持つ関数に対して

$$\frac{dF(q,p,t)}{dt} = \{F, H_T\}_P + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{6}$$

という「ハミルトン形式」で出てきた形と同じに書けます。重要なことは拘束条件が成立しているときに (4a)(4b)(6) は成立するということです。後、注意ですが、ポアソン括弧の計算には $\phi_\alpha = 0$ を使ってはいけないです。

一つ記号を定義しておきます。(4a)(4b)(6) は拘束条件が成立する q, p において成り立っている式です。そのために、拘束条件が成立しているときっという注釈がつきます。で、いちいちそんなことを書くのは面倒なので、その意味を含めている記号「≈」を定義します。拘束条件 $\phi_\alpha = 0$ を満たす q, p を使っているときに成立するという意味から、「≈」による式は弱い等式 (weak equality) と呼ばれます。例えば (6) は

$$\frac{dF(q,p,t)}{dt} \approx \{F, H_T\}_P + \frac{\partial F}{\partial t}$$

と書くことで、拘束条件の下で成立するという意味になります。これ以降、弱い等式を使って書いていきます。

これで拘束条件があるときの正準方程式が作れたので、時間発展する粒子を記述できるようになりました。この粒子が時間発展するという状況から、拘束条件にさらに条件をつけることができます。時間発展する状況においても拘束条件 $\phi_\alpha = 0$ が成立しているためには時間微分によって拘束条件が変化しない、つまり

$$\frac{d\phi_\alpha}{dt} = \{\phi_\alpha, H\}_P + \lambda_\beta \{\phi_\alpha, \phi_\beta\}_P + \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} \approx 0 \quad (\alpha, \beta = 1, \ldots, A)$$

という制限がかかります。この制限を整合性の条件と呼びます。そして、整合性の条件が満たされないときには、新しい拘束条件

$$\chi_\gamma(q, p, t) = 0 \quad (\gamma = 1, \ldots, C)$$

が発生します。このように出てくる拘束条件を第二次拘束条件 (secondary constrains) と言います。こういったときの ϕ_α の方は第一次拘束条件 (primary constraints) と呼びます。で、第二次拘束条件の整合性の条件が満たされないときにはさらに新しい拘束条件が現れ続け、整合性の条件が成立するまで出てきます (拘束条件でなく未定乗数 λ_α を決める式になっている場合もある)。

拘束条件の重要な分類として第一類 (first class)、第二類 (second class) というのがあります。分類の仕方は単純で q, p の関数 $F(q, p)$ と拘束条件とのポアソン括弧が

$$\{F, \phi_\alpha\}_P \approx 0 \quad (\alpha = 1, \ldots, A)$$

であれば F を第一類、そうでなければ第二類と呼びます。このとき、A 個の拘束条件 ϕ_α のうち、$a = 1, \ldots, r$ が

$$\{\phi_a, \phi_\alpha\}_P \approx 0$$

$b = r+1, \ldots, A$ が

$$\{\phi_b, \phi_\alpha\}_P = f_{b\alpha}$$

であっとき、ϕ_a が第一類拘束条件、ϕ_b が第二類拘束条件となります。拘束条件の第一次と第二次の分類は拘束条件の出方の区別でしかないですが、第一類、第二類は拘束条件の性質と関連する重要な分類です。

具体的な場合を見ていきます。まず、特異系でのラグランジアンがどういったものなのかを示すと、例えば

$$L = \frac{1}{2}(\dot{x}(t) - y(t))^2 \tag{7}$$

このようなのがそうです。実際に、Hessian 行列は

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}\partial \dot{x}} & \dfrac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}\partial \dot{y}} \\ \dfrac{\partial^2 L}{\partial \dot{y}\partial \dot{x}} & \dfrac{\partial^2 L}{\partial \dot{y}\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となっているので、行列式が 0 の特異系になっています。運動方程式は、オイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0\ ,\ \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial L}{\partial y} = 0$$

から

$$\ddot{x} - \dot{y} = 0\ ,\ \dot{x} - y = 0 \tag{8}$$

というように求まります。しかし、初期値を与えてもこの微分方程式の解を決定しきることができません。実際に一般解を出してみます。まず $\dot{x} = y$ と $\ddot{x} = \dot{y}$ から

$$x(t) = C_1 + C_2 t + \frac{1}{2}C_3 t^2\ ,\ y(t) = C_2 + C_3 t$$

こんな形が考えられ、C_1, C_2, C_3 は

$$x(0) = C_1\ ,\ y(0) = C_2\ ,\ \dot{x}(0) = C_2\ ,\ \dot{y}(0) = C_3$$

という初期値に対応しています。しかし、$\dot{x} = y$ は任意の関数 $F(t)$ を加えて

$$x(t) = C_1 + C_2 t + \frac{1}{2}C_3 t^2 + \int_0^t F(t')dt'\ ,\ y(t) = C_2 + C_3 t + F(t)$$

$$F(0) = 0$$

$$\Big(\frac{d}{dt}\int_0^t F(t')dt' = F(t) - F(0)\Big)$$

としても成立し、$\ddot{x} = \dot{y}$ も $\dot{F}(0) = 0$ を加えれば成立します。というわけで、こっちが一般解になります。これから分かるように任意の時間の関数 $F(t)$ が入り込んでいるために、$x(t), y(t)$ を決定できていません。こうなってい

るのは実は当たり前で、(9) は 2 つ方程式があるように見えて、本質的に $\dot{x}=y$ のみの方程式だからです。1 つの方程式に対して 2 つの関数 $x(t), y(t)$ では決定できないのが当たり前です。このように特異系では微分方程式の解を決定しきることができません。

次に拘束条件を加えた場合での運動についてみていきます。粒子の運動を考えたときに、初速度を v_0 とし単に重力しか力がかかっていないときに作る運動方程式は

$$m\ddot{x}=0$$

$$m\ddot{y}=mg$$

こんなのになって、初期条件を与えて解けば放物線軌道を描きます。このときに、粒子の運動に対して、例えば何かの曲線上で運動しろ、みたいな条件をつけます。これが拘束条件となります。ここでは、簡単にするために時間に対して直接は依存していないとし、拘束条件を

$$\phi(x,y)=0$$

と与え、x, y の動きに対して条件を加えます。

拘束条件がある時の問題に対する方法として、ラグランジュの未定乗数法というのがあってこれの説明をしておきます。ある関数 $f(x_1, x_2, \cdots x_n)$ の極値を拘束条件 $\phi(x_1, x_2, \cdots x_n)=0$ があるときで考えてみます。何も条件がなければ $x_1, \cdots, x_n$ はそれぞれが独立なんですが、今の場合拘束条件 $\phi(x_1, x_2, \cdots x_n)=0$ があるために、$n-1$ 個が独立な変数の数になります。関数 $f(x_1, x_2, \cdots x_n)$ の極値は微分形では

$$df(x_1, x_2, \cdots x_n)=\frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1+\frac{\partial f}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\frac{\partial f}{\partial x_n}dx_n=0 \tag{9}$$

これだけで、他に条件が何もなければ極値は

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}=0 \quad (i=1,2,3,\cdots n)$$

で求められます。今はこれに対して条件があり、条件の微分形は

$$d\phi(x_1, x_2, \cdots x_n)=\frac{\partial \phi}{\partial x_1}dx_1+\frac{\partial \phi}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\frac{\partial \phi}{\partial x_n}dx_n=0 \tag{10}$$

ここで、パラメータ λ を使って

$$\tilde{f}(x_1, x_2, \cdots x_n)=f(x_1, x_2, \cdots x_n)+\lambda\phi(x_1, x_2, \cdots x_n) \tag{11}$$

というのを作ります。この $\tilde{f}$ は (9) と (10) から

$$\begin{aligned}
d\tilde{f}(x_1, x_2, \cdots x_n) &= df(x_1, x_2, \cdots x_n)+\lambda d\phi(x_1, x_2, \cdots x_n)\\
&= \frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1+\frac{\partial f}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\frac{\partial f}{\partial x_n}dx_n+\lambda(\frac{\partial \phi}{\partial x_1}dx_1+\frac{\partial \phi}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\frac{\partial \phi}{\partial x_n}dx_n)\\
&= \sum_{i=1}^{n}(\frac{\partial f}{\partial x_i}+\lambda\frac{\partial \phi}{\partial x_i})dx_i\\
&= 0
\end{aligned}$$

そして、λ を

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}+\lambda\frac{\partial \phi}{\partial x_1}=0$$

になるように決めます。残った $2,\cdots,n$ は独立変数であるために、残りも

$$(\frac{\partial f}{\partial x_k}+\lambda\frac{\partial \phi}{\partial x_k})dx_k=0 \quad (k=2,3,\cdots,n)$$

でなければいけないことになります。このことから結局、拘束条件がある時でも独立変数を $x_1,\cdots,x_n$ としていいことになります。つまり、(11) のように $\tilde{f}$ を作ることで拘束条件の存在を気にしなくてよくなっているということです。というわけで

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}=-\lambda\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (i=1,2,\cdots,n) \tag{12}$$

であることになります。この式が拘束条件があるときの極値の条件です。ここで導入した λ がラグランジュの未定乗数 (undetermined multiplier、もしくは未定係数) で、(12) を解いて、拘束条件 $\phi=0$ を満たすようにしてやることで決まります。この方法をラグランジュの未定乗数法と呼んでいます。また、これは拘束条件が N 個あるときにも同じようにできます。

次に、拘束条件がある場合での運動方程式をラグランジアンを使って求めるにはどうしたらいいのかという話になります。オイラー・ラグランジュ方程式を求めるときに使った変数は独立であるということを要求していますが、拘束条件があると、もはや独立ではなくなってしまうためにオイラー・ラグランジュ方程式は成り立たなくなります。これを回避する手段として未定乗数を使います。何をするのかというと、通常のラグランジアンの形を

$$\begin{aligned}L(x_1,\cdots,x_n\dot{x}_1,\cdots,\dot{x}_n) \ \Rightarrow \ & L(x_1,\cdots,x_n\dot{x}_1,\cdots,\dot{x}_n,\lambda,\dot{\lambda})\\ &=L(x_1,\cdots,x_n\dot{x}_1,\cdots,\dot{x}_n)+\lambda\phi(x_1,\cdots,x_n)\end{aligned}$$

のように変更します。$\phi(x_1,\cdots,x_n)$ が拘束条件です。これを使って放物線軌道を描く粒子に対して、ある曲面上の曲線に運動を拘束した場合を考え、そのときの正準方程式がどうなるのか見てみます。

拘束条件のないラグランジアンは

$$L_0(x,y,\dot{x},\dot{y})=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2)+mgy$$

これに対して、拘束条件がある場合は、λ と $\dot{\lambda}$ も変数に取り込んで

$$L(x,y,\lambda,\dot{x},\dot{y},\dot{\lambda})=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2)+mgy+\lambda\phi(x,y)=L_0(x,y,\dot{x},\dot{y})+\lambda\phi(x,y) \tag{13}$$

オイラー・ラグランジュ方程式に入れて計算してけば

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}-\frac{\partial L}{\partial x}=0 \ \Rightarrow \ m\ddot{x}-\lambda\frac{\partial \phi}{\partial x}=0\\ &\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{y}}-\frac{\partial L}{\partial y}=0 \ \Rightarrow \ m\ddot{y}-mg-\lambda\frac{\partial \phi}{\partial y}=0\\ &\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\lambda}}-\frac{\partial L}{\partial \lambda}=0 \ \Rightarrow \ \phi(x,y)=0\end{aligned}$$

これを見てわかるように、$\lambda\partial\phi/\partial x$ と $\lambda\partial\phi/\partial y$ が、ある曲線上に粒子を拘束する拘束力を表す項になっています。また、λ に関するオイラー・ラグランジュ方程式によって拘束条件の式が導かれています。

次にハミルトン形式ではどうなっているのか見ます。まずは正準共役な量が必要で、ラグランジアン (13) によって

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\ ,\ p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\ ,\ p_\lambda = \frac{\partial L}{\partial \dot{\lambda}} \tag{14}$$

このように定義します。座標 x, y だけでなく λ に関しても取ります。そして、ハミルトニアンは $q_i = x, y, \lambda,\ p_i = p_x, p_y, p_\lambda$ として

$$H(q,p) = p_i\dot{q}_i - L(q,\dot{q}) = p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_\lambda\dot{\lambda} - L(q,\dot{q})$$

によって定義します。ここで、p_λ は $p_\lambda = 0$ であることがすぐにわかり、このようにラグランジアンから直接出てくる条件が第一次拘束条件となります。$p_\lambda = 0$ のおかげでハミルトニアンから正体不明の $\dot{\lambda}$ が無くなってくれて、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
H = p_i\dot{q}_i - L &= p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_\lambda\dot{\lambda} - \frac{1}{2}m(\dot{x}+\dot{y})^2 - mgy - \lambda\phi(x,y)\\
&= \frac{1}{m}p_x^2 + \frac{1}{m}p_y^2 - \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) - mgy - \lambda\phi(x,y)\\
&= \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 - mgy - \lambda\phi(x,y)
\end{aligned}$$

これは (5) のように定義しなおしたハミルトニアンに対応します。ハミルトニアンが求まったので、ここから正準方程式を作ってみます。正準方程式は

$$\delta S = \delta\int_{t_1}^{t_2} dt(p\dot{q} - H) = 0$$

ここからルジャンドル変換を行って δH の変数を q, p にして、$\delta p\dot{q} - p\delta\dot{q} - \delta H(q,p)$ を計算することで導けます。ハミルトニアンはラグランジアンから

$$H = p\dot{q} - L(q,\dot{q})$$

となって、この H の全微分を求めます。この式から $p, \dot{q}$ を今の場合にして考えれば、ハミルトニアンの全微分は

$$\delta H = \delta p_x\dot{x} + p_x\delta\dot{x} + \delta p_y\dot{y} + p_y\delta\dot{y} + p_\lambda\delta\dot{\lambda} - \delta L$$

そして、ラグランジアンの変数は $x, y, \lambda, \dot{x}, \dot{y}, \dot{\lambda}$ なので

$$\begin{aligned}
\delta H &= \delta p_x\dot{x} + p_x\delta\dot{x} + \delta p_y\dot{y} + p_y\delta\dot{y} + \delta p_\lambda\dot{\lambda} + p_\lambda\delta\dot{\lambda}\\
&\qquad - (\frac{\partial L}{\partial x}\delta x + \frac{\partial L}{\partial y}\delta y + \frac{\partial L}{\partial \lambda}\delta\lambda + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\delta\dot{y} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\lambda}}\delta\dot{\lambda})\\
&= \delta p_x\dot{x} + \delta p_y\dot{y} + \delta p_\lambda\dot{\lambda} - (\frac{\partial L}{\partial x}\delta x + \frac{\partial L}{\partial y}\delta y + \frac{\partial L}{\partial \lambda}\delta\lambda)\\
&\qquad + (p_x - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}})\delta\dot{x} + (p_y - \frac{\partial L}{\partial \dot{y}})\delta\dot{y} + (p_\lambda - \frac{\partial L}{\partial \dot{\lambda}})\delta\dot{\lambda}
\end{aligned}$$

さらに (14) より

$$\delta H = \delta p_x \dot{x} + \delta p_y \dot{y} + \delta p_\lambda \dot{\lambda} - (\frac{\partial L}{\partial x}\delta x + \frac{\partial L}{\partial y}\delta y + \frac{\partial L}{\partial \lambda}\delta\lambda) \tag{15}$$

そしてこれとは別に、H はルジャンドル変換によって変数を正準共役なものになっているために、変数が $x, y, \lambda, p_x, p_y, p_\lambda$ であることから

$$\delta H = \frac{\partial H}{\partial p_x}\delta p_x + \frac{\partial H}{\partial p_y}\delta p_y + \frac{\partial H}{\partial p_\lambda}\delta p_\lambda + \frac{\partial H}{\partial x}\delta x + \frac{\partial H}{\partial y}\delta y + \frac{\partial H}{\partial \lambda}\delta\lambda \tag{16}$$

で、(15) から (16) を引くことで

$$\begin{aligned} 0 &= (\dot{x} - \frac{\partial H}{\partial p_x})\delta p_x + (\dot{y} - \frac{\partial H}{\partial p_y})\delta p_y + (\dot{\lambda} - \frac{\partial H}{\partial p_\lambda})\delta p_\lambda \\ &\quad - (\frac{\partial L}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial x})\delta x - (\frac{\partial L}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial y})\delta y - (\frac{\partial L}{\partial \lambda} + \frac{\partial H}{\partial \lambda})\delta\lambda \end{aligned}$$

$\partial L/\partial x, \partial L/\partial y, \partial L/\partial \lambda$ は正準関係から

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \dot{p}_x \ , \ \frac{\partial L}{\partial y} = \dot{p}_y \ , \ \frac{\partial L}{\partial \lambda} = \dot{p}_\lambda$$

というわけで

$$\begin{aligned} 0 =&(\dot{x} - \frac{\partial H}{\partial p_x})\delta p_x + (\dot{y} - \frac{\partial H}{\partial p_y})\delta p_y + (\dot{\lambda} - \frac{\partial H}{\partial p_\lambda})\delta p_\lambda \\ &- (\dot{p}_x + \frac{\partial H}{\partial x})\delta x - (\dot{p}_y + \frac{\partial H}{\partial y})\delta y - (\dot{p}_\lambda + \frac{\partial H}{\partial \lambda})\delta\lambda \end{aligned}$$

となります。各変数が独立であるなら δp_x とかの係数は全て 0 になることから正準方程式

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} \ , \ \dot{y} = \frac{\partial H}{\partial p_y} \ , \ \dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x} \ , \ \dot{p}_y = -\frac{\partial H}{\partial y} \ , \ \dot{p}_\lambda = -\frac{\partial H}{\partial \lambda}$$

は導かれます。このとき $\dot{\lambda} = \partial H/\partial p_\lambda$ は成立していません。なぜなら (14) を見てわかるように、$p_\lambda = 0$ なので、

$$\dot{\lambda} - \frac{\partial H}{\partial p_\lambda}$$

は絶対に 0 でなくてはいけないというわけではないからです。このため λ に対する正準方程式が成り立っていません。これが拘束条件があるときの特徴で、正準方程式の一部が欠落します。
　整合性の条件も見ておきます。今使っているハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 - mgy - \lambda\phi(x, y)$$

そして、第一次拘束条件は $p_\lambda = 0$ なので、p_λ の正準方程式から時間微分は

$$\dot{p}_\lambda = -\frac{\partial H}{\partial \lambda} = \phi(x,y)$$

であることがわかります。さらに $p_\lambda = 0$ であることから、$\phi(x,y) \neq 0$ だとまずいことになります。よって $\phi(x,y)$ は

$$\phi(x,y) = 0$$

であることを自然と要求しています。さらに拘束条件内の x, y は正準方程式に従うために $\dot{\phi}(x,y)$ に対して

$$\begin{aligned}
\ddot{p}_\lambda = \frac{d\phi}{dt} &= \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{dy}{dt} \\
&= \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial p_x} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial H}{\partial p_y} \\
&= \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{p_x}{m} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{p_y}{m} \\
&= (\frac{p_x}{m}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{p_y}{m}\frac{\partial}{\partial y})\phi
\end{aligned}$$

という式が現れるので

$$\ddot{p}_\lambda = 0$$

この制限がかかることになります。このことを繰り返していくことで

$$\frac{d^l p_\lambda}{dt^l} = 0 \quad (l = 0, 1, 2, \cdots)$$

ということがわかり、これが今の場合での整合性の条件となります。$l = 0$ の時に第一次拘束条件になり、$l = 1, 2, \cdots$ で第二次拘束条件になり、l が増えていくに従ってどんどん自由度が制限されていき、終わったところで粒子の運動が決定されます。