ハミルトン形式

「オイラー・ラグランジュ方程式」のところでは、ラグランジアンが分かれば運動についての情報を引き出せることが分かりましたが、ここではもう 1 つ重要な量であるハミルトニアンを定義して、オイラー・ラグランジュ方程式と同等の方程式を導きます。それによる定式化がハミルトン形式です。
「·」は d/dt です。

話の流れははっきりしていますが、遠回りになる話でハミルトニアンを定義します。まずは一般化運動量と呼ばれるものを定義します。オイラー・ラグランジュ方程式に

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$$

というのを含んだ項があったと思いますが、これは（エネルギー/速度）の次元を持っており、運動量の次元と一致することから

$$p=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$$

という一般化運動量 (もしくは共役運動量) と呼ばれるものを定義することができます。このような形 (q とその時間微分 $\dot{q}$ でラグランジアンを偏微分したもの) で出てくる 2 つの変数の組を正準共役と言い、正準変数と呼ばれます (今の場合は q, p)。例えば自由粒子のラグランジアンを入れてみれば p は運動量 $m\dot{q}$ になっていることが分かります。また、オイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}-\frac{\partial L}{\partial q}=0$$

から

$$\dot{p}=\frac{\partial L}{\partial q}$$

となっていることも分かります。
ここで注意すべきなのは、一般化運動量は $p=m\dot{q}$ とは定義されていない点です。あくまで、位置を表す変数 q の相方として p を定義しているだけです。例えば 3 次元座標 $\boldsymbol{x}=(x,y,z)$ で運動エネルギーが $m\dot{\boldsymbol{x}}^2/2$ で与えられるなら、$\boldsymbol{p}=m\dot{\boldsymbol{x}}$ となるということで、一般的にこうなるとは言っていないです。
一般化運動量の話はここで終わらせて、ラグランジアンの全微分について見ていきます。「オイラー・ラグランジュ方程式」のところでは、ラグランジアンの独立変数は $q, \dot{q}$ だけで行っていましたが、ついでなので時間 t も含めた形にします (時間を陽に含んでいる)。
ラグランジアン $L(q_1,q_2,\ldots,q_n,\dot{q}_1,\dot{q}_2,\ldots,\dot{q}_n,t)$ の全微分は

$$dL=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}dq_i+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}d\dot{q}_i\right)+\frac{\partial L}{\partial t}dt$$

ラグランジアンの変数から分かるように、正準変数として $(q_1,p_1),(q_2,p_2),\ldots,(q_n,p_n)$ という複数組あるとします。これは dt で割って

$$\frac{dL}{dt}=\sum_i\frac{\partial L}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt}+\sum_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\frac{d\dot{q}_i}{dt}+\frac{\partial L}{\partial t}$$

これとは別にオイラー・ラグランジュ方程式

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

に $\dot{q}$ をかけて和をとると

$$\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i} = \sum_i \dot{q}_i \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)$$

この左辺はさっきの式の第一項と一致しているので

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\dot{q}_i + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\frac{d\dot{q}_i}{dt} + \frac{\partial L}{\partial t}$$

そして、右辺の第一項と第二項は

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\dot{q}_i + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\frac{d\dot{q}_i}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i\right)$$

という 1 つの時間微分によってかけるので

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i\right) + \frac{\partial L}{\partial t}$$

左辺を右辺にもっていき時間微分でくくれば

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L\right) + \frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

ここに最初の一般化運動量を使えば

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - L\right) + \frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

このカッコの中 $\Sigma p_i \dot{q}_i - L$ をハミルトニアン (Hamiltonian) と呼び H で表します。よってこの式は

$$\frac{dH}{dt} + \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \tag{1}$$

と書かれます。繰り返しておきますが、L の変数は $q_i, \dot{q}_i, t$ です。

ここから見やすくするために、正準変数は 1 組だとします。複数組ある場合でも和の記号をつければいいだけなので、話は同じです。

オイラー・ラグランジュ方程式の変形からハミルトニアンを与えましたが、このままではハミルトニアンの正体がよく分かりません (何を変数に持つかも分からない)。後で触れますが、今の結果 $H = p\dot{q} - L$ に具体的なラグランジアンの形を与えて、力学との対応からハミルトニアンを全力学的エネルギーとして出せますが、一般的にそうだとは言えないです。

というわけで、ハミルトニアンをさらに見ていき、それの関係式を導きます。そのために変分問題をハミルトニアンを使って書いていきます。ハミルトニアンの定義は上で与えたもので

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

と与えられます。変分問題を考えたとき、ラグランジアンをこれによって書き換えることで、作用は

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

ここで問題になるのが H の変分 δH は何かということです。δH は H の変化分なので、H の変数が何かを知る必要があります。このときに使われるものがルジャンドル変換 (Legendre transformation) と呼ばれるものですが、まずはそれに触れずにハミルトニアンの変数を決めます。ルジャンドル変換は簡単に言ってしまえば、$F(x,y)$ という関数を $G(a,y)$ みたいに変換する作業のことです。

ラグランジアン $L(q,\dot{q},t)$ の変化 (全微分) は

$$dL = \frac{\partial L}{\partial q}dq + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial t}dt \tag{2}$$

そしてハミルトニアンでの p はラグランジアンから

$$H = p\dot{q} - L = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{q} - L$$

とできます。H が実際に何を独立変数に持っているかはまだ分かりませんが、この式の構成上、H の変化は右辺での $\dot{q}.p, L$ の変化によるものなので

$$dH = \dot{q}dp + pd\dot{q} - dL = \dot{q}dp + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} - dL$$

これに (2) を入れると

$$dH = \dot{q}dp - \frac{\partial L}{\partial q}dq - \frac{\partial L}{\partial t}dt = \dot{q}dp - \dot{p}dq - \frac{\partial L}{\partial t}dt \tag{3}$$

となって、$d\dot{q}$ の項が消えます。このように、dH は q,p,t の変化によって作られるので、ハミルトニアン H の独立変数は q,p,t です。このため、変分問題が、変数 $(q,\dot{q})$ を持つラグランジアンによるものから、変数 (q,p) を持つハミルトニアンによるものになったことが分かります。これと同じ操作をするのがルジャンドル変換です (詳しいことは「正準変換」参照)。後で結果だけ示します。

このように独立変数が変わったので、ラグランジアンでは独立変数 $q,\dot{q}$ に対して変分 δq を使ったことに対応するように、ハミルトニアンでは変分 $\delta q, \delta p$ を考えることにします。つまり、q,p で指定される点の運動に対しての変分を考えるということです。このときも、ラグランジアンと同じように、時間の両端（始点と終点）t_1, t_2 では

$$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = \delta p(t_1) = \delta p(t_2) = 0$$

とします。また、q,p で点を指定する空間は位相空間 (phase space) と呼ばれるので、位相空間での変分と言う事が出来ます。

というわけでハミルトニアンの変数は q,p,t (q,p は正準変数) とし、変分は q,p に対して取るとして続きを計算していきます。そうすると、作用の変分は

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

ここで、

$$\frac{d}{dt}(p\delta q) = \dot{p}\delta q + p\delta\dot{q}$$

を使うと

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

と変形できます。ハミルトニアンの変分は

$$\delta H = \frac{\partial H}{\partial q}\delta q + \frac{\partial H}{\partial p}\delta p \tag{4}$$

$H(q,p,t)$ としていますが、時間の変分は考えないです。これを入れて

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

ここでも 2 行目から 3 行目にいくときに $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ を使っています。そうすると $\delta S = 0$ が成り立つためには

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

この連立方程式が満たされる必要があり、正準方程式 (canonical equation) やハミルトン (Hamilton) の運動方程式と呼ばれます。この 2 つの式はラグランジアンからハミルトニアンへの書き換えでの、(3) と (4) (変分でなければ dH, dq, dp となるだけ) の比較からも出てきます。また、ハミルトニアンが時間に依存していてもいなくても正準方程式はこの形になります。理由は簡単で時間に対しては変分を取らないために、新しい項が出てこないからです ((4) のまま。ただし、後で見ますが時間変化も考えるならもう 1 つ関係が出てきます)。

正準方程式は変分問題から出てきたものなので、オイラー・ラグランジュ方程式 (運動方程式) と同等です。これが欲しかった結果で、ハミルトニアンを定義することで、変分問題に対して、オイラー・ラグランジュ方程式とは別形式の定式化が組み立てられました。このようにハミルトニアンを使った定式化をハミルトン形式と言います。

ここで H の物理的な意味を見ておきます。ここでの話からは、H はラグランジアンと同じように運動方程式を導くために導入されただけのように見えますが、他の意味も持っています。具体的にするために単純な場合として、運動エネルギー $T = m\dot{q}^2/2$、ポテンシャル (位置エネルギー)$U(q)$ での運動を見てみます (ポテンシャル $U(q)$ での粒子の運動)。そうすると、ラグランジアン $L(q,\dot{q})$ からハミルトニアンは、一般化運動量 p によって

$$\begin{aligned}
H(q,p) = p\dot{q} - L &= m\dot{q}^2 - (\frac{1}{2}m\dot{q}^2 - U) \\
&= \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + U(q) \\
= \frac{p^2}{2m} + U(q) \quad (p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}) &= T + U \quad (T = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 = \frac{p^2}{2m})
\end{aligned}$$

これは明らかに全力学的エネルギー E になっています。つまり、このような関係 (H が $T+U$ で書ける) が成立しているなら、ハミルトニアンは全力学的エネルギーに相当することになります。そして、今の $L(q,\dot{q})$ では

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

なので、(1) からハミルトニアンの時間微分は

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

これは全力学的エネルギーが保存量 (運動の恒量) になっていることと同じ意味になります。これから、自由粒子 (質点) が時間に対して一様 (時間依存しない) なポテンシャル中を運動するときには全力学的エネルギーは保存す

るという力学の法則の、全力学的エネルギーをハミルトニアンに言い換えられます。なので、ハミルトニアンは力学的エネルギーと同じだとされます。しかし、ハミルトニアン＝力学的エネルギーと定義するのは間違いです。ハミルトニアンの定義は $H = p\dot{q} - L$ です。さらに注意ですが、今計算したようにハミルトニアンを $p\dot{q} - L$ から求めるとき、$\dot{q}$ を一般化運動量に書き換えなくてはいけません。これはハミルトニアンの変数は q, p と定義されているからです。

また、$\partial L/\partial t = 0$ は時間が一様であることを言っているように、$\partial L/\partial q = 0$ は空間の一様性を表わします。空間 (時間) の一様性というのは、どこかの位置 (時間) で振る舞いを変えたりしないのっぺらとした状況をいいます (もっと簡単に言えば、特別な場所がない)。

ここまで見てきた話は変分によるものでしたが、別の方向から同じ結果を出します。こちらのほうが、より簡単で本質的な方法でハミルトニアンの関係式を出すことが出来ます。その方法はハミルトニアンをラグランジアンのルジャンドル変換として定義することです。ルジャンドル変換は最初に与えたハミルトニアンの定義そのものになっていて

$$H(q, p, t) = p\dot{q} - L(q, \dot{q}, t) \tag{5}$$

と与えられています。この変換が成立するためには変数間の関係として

$$\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial L}{\partial q}\ ,\ \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}\ ,\ p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\ ,\ \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

というのが成立している必要があります。これらの関係は (5) を各変数で偏微分すれば出てきます（t に陽に依存しているのは H と L)。このようにラグランジアンのルジャンドル変換がハミルトニアンだとして定義すると、そのときの変数の関係式が、一般化運動量と正準方程式にそのまま対応します。正準方程式の $\dot{p}$ の式がないように見えますが、オイラー・ラグランジュ方程式を使うことで

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

と出てきます。というわけで、正準方程式はルジャンドル変換 (変数の変更) と変分問題 (オイラー・ラグランジュ方程式) を合わせる事で出てきます。

また、$\partial H/\partial t = -\partial L/\partial t$ というのが新しく出てきていますが、これは時間変化から出てくる関係です。このことは、時間に依存しているときの (3)

$$dH = \dot{q}dp + pd\dot{q} - dL = \dot{q}dp - \dot{p}dq - \frac{\partial L}{\partial t}dt$$

と

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q}dq + \frac{\partial H}{\partial p}dp + \frac{\partial H}{\partial t}dt$$

を見比べれば

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}\ ,\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}\ ,\ \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

となることから分かります。新しく出てきた 3 番目の式は (1) での微分が偏微分になっているものですが、正準方程式を使うと

$$\frac{dH(q, p, t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial t} = -\dot{p}\dot{q} + \dot{q}\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H(q, p, t)}{\partial t}$$

となっているので一致します。また、これから H が時間に陽に依存していなければ H は保存量になっていることも分かります。

このように、ハミルトニアンはラグランジアンのルジャンドル変換によって定義されるとすべきものです (変数を変えるルジャンドル変換で定義されているので、ハミルトニアンを $\dot{q}$ を含む形で書いてはいけない)。なので、

全力学的エネルギーとしてハミルトニアンを定義するのでなく、ルジャンドル変換したら全力学的エネルギーになったと理解すべきです。こうすることでハミルトニアンを抽象化された話に適用することができます。目にすることはあまりないですが、実際にハミルトニアンが全力学的エネルギーにならない場合があります (減衰振動の問題とか)。

次にポアソン括弧を導入します。そのために、ハミルトニアンでなく正準変数 q, p と時間 t を持つ任意の関数 F を考えてみます。これの全微分は

$$dF = \frac{\partial F}{\partial q}dq + \frac{\partial F}{\partial p}dp + \frac{\partial F}{\partial t}dt$$

これを dt で割って

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

これに正準方程式を代入すると

$$\frac{dF}{dt} = \ \frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial F}{\partial t} = \ \{F, H\}_{PB} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

この $\{\ \}_{PB}$ はポアソン括弧 (Poisson bracket) と呼ばれるもので、定義は見たとおりで

$$\{A, B\}_{PB} = \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q}$$

となっています。この式は右辺が 0 ならば時間依存していない、つまり保存量となると言っています。もっとわかりやすくすれば

$$\{F, H\}_{PB} = \frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}$$

が成り立てばいいということです。つまり条件は、F と H の並びを交換できるかということです。交換可ならば F は保存量になります。もし $F(q, p, t)$ が $F(q, p)$ だったら

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\}_{PB}$$

となります。ポアソン括弧は単なる表記というだけでなく、解析力学の理論構造の構築や、量子論への移行において重要な役割を持ちます。

正準変数とのポアソン括弧を計算してみると

$$\{q, H\}_{PB} = \frac{\partial q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$\{p, H\}_{PB} = \frac{\partial p}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial p}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

となっているので、正準方程式は

$$\dot{q} = \{q, H\}_{PB}$$

$$\dot{p} = \{p, H\}_{PB}$$

と書くことができます。また、これから正準変数は時間の偏微分に対して

$$\frac{\partial}{\partial t}q = 0\ ,\ \ \frac{\partial}{\partial t}p = 0$$

となっています。

ここまでの話は正準変数が 1 組の場合でしたが複数組あるときでも同様にできます。大本である作用の変分が 0 という式は

$$\delta S = \delta\int_{t_1}^{t_2} dt(\sum_{i=1}^{n} p_i\dot{q}_i - H) = 0$$

となることから同じようにやっていけば、正準方程式は

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}\ ,\ \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

となり、$F(q_1, q_2 \ldots, q_n, p_1, p_2, \ldots, p_n, t)$ のとき

$$\begin{aligned}
\frac{dF}{dt} &= \frac{\partial F}{\partial q_1}\frac{dq_1}{dt} + \cdots + \frac{\partial F}{\partial q_n}\frac{dq_n}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_1}\frac{dp_1}{dt} + \cdots + \frac{\partial F}{\partial p_n}\frac{dp_n}{dt} + \frac{\partial F}{\partial t} \\
&= \sum_{i=1}^{n}\Big(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}\Big) + \frac{\partial F}{\partial t} \\
&= \sum_{i=1}^{n}\Big(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\Big) + \frac{\partial F}{\partial t}
\end{aligned}$$

となるので、ポアソン括弧は

$$\{A, B\}_{PB} = \sum_{i=1}^{n}\Big(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}\Big)$$

と与えられます。正準方程式は

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\}_{PB} = \sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{\partial p_i}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial p_i}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j}\Big) = -\sum_{j=1}^{n}\delta_{ij}\frac{\partial H}{\partial q_j} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}_{PB} = \sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{\partial q_i}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial q_i}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j}\Big) = \sum_{j=1}^{n}\delta_{ij}\frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

となります。δ_{ij} はクロネッカーデルタで $i = j$ のとき 1 で、$i \neq j$ のとき 0 となる記号です ($\partial p_1/\partial p_1 = \partial p_2/\partial p_2 = \cdots = 1$ で、$\partial p_1/\partial p_2 = \partial p_2/\partial p_1 = \cdots = 0$ だから)。なので、

$$\sum_{j=1}^{n}\delta_{ij}\frac{\partial H}{\partial q_j}$$

において、$j = 1, 2, \ldots i, \ldots, n$ で $j = i$ になったときだけを拾って $\partial H/\partial q_j \Rightarrow \partial H/\partial q_i$ となります。

これがそのまま量子力学の関係に適用できることをディラックが発見し、ハミルトニアンや正準方程式等が量子力学に応用されていきます。