ハミルトン・ヤコビ方程式

正準変換によって出てくるハミルトン・ヤコビ方程式を扱います。具体的な問題を解いているのは単振動だけです。
最後の方で添え字の扱いを変えているので気を付けてください。
「・」は t による微分です。

「正準変換」で見たように、ハミルトニアン H は正準変換によって正準方程式を変えずに別のハミルトニアン K に変換できます。これを利用して、変換前の座標と運動量を q, p とし、変換後の Q, P を

$$K(Q, P, t) = 0$$

となるように選ぶとします。q, p, Q, P は、$q = (q_1, q_2, \ldots q_n)$ として、n 個の変数を持っているとします。また、q_i は $i = 1, 2, \ldots, n$ とします。

母関数を $W(q, P, t)$ として、正準変換は

$$K = H + \frac{\partial W(q, P, t)}{\partial t} \qquad (\det \frac{\partial^2 W}{\partial q_i \partial P_j} \neq 0) \tag{1a}$$

$$p_i = \frac{\partial W(q, P, t)}{\partial q_i} \tag{1b}$$

$$Q_i = \frac{\partial W(q, P, t)}{\partial P_i} \tag{1c}$$

なので、$K = 0$ のとき

$$H(q, p, t) + \frac{\partial W}{\partial t} = 0$$

という方程式が出てきます。p も書き換えて

$$H(q, \frac{\partial W}{\partial q}, t) + \frac{\partial W}{\partial t} = 0$$

今は $K = 0$ にしているので、変換後の Q, P による正準方程式は

$$\frac{dQ_i}{dt} = 0 \ , \ \frac{dP_i}{dt} = 0$$

このため、W を t で微分すると

$$\frac{dW(q, P, t)}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial W}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial W}{\partial t} = \sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H$$

これはラグランジアン L の定義なので、時間 t_0 から t_f までの積分によって

$$\frac{dW}{dt} = L$$
$$W = \int_{t_0}^{t_f} dt\ L$$

となり、W は作用 S になっていることが分かります。

W を作用 S に書き換えた

$$H(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{2}$$

これをハミルトン・ヤコビ (Hamilton-Jacobi) 方程式と言います。正準変換を $K = 0$ になるように行っただけなので、もとの運動方程式は変更されていません。見てわかるように作用に対する偏微分方程式なので、直接的にハミルトン・ヤコビ方程式を解けば作用 S が求まります。なので、q, p は母関数の関係式から分かります。

しかし厄介なことに、例えば 1 次元ハミルトニアンとして

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + V(q,t) = \frac{1}{2m}(\frac{\partial S}{\partial q})^2 + V(q,t)$$

としたとき、ハミルトン・ヤコビ方程式は非線形の 1 階偏微分方程式になります。このように、ハミルトン・ヤコビ方程式は一般的に非線形です。問題によってはハミルトン・ヤコビ方程式を解いたほうが簡単な場合もありますが、よくある問題だと運動方程式を解いたほうが簡単なことが多いです。

例として 1 次元単振動を見ます。単振動のハミルトニアンは

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

m は質量、ω は角振動数です。これをハミルトン・ヤコビ方程式に入れれば

$$\frac{1}{2m}((\frac{\partial S}{\partial q})^2 + m^2\omega^2 q^2) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

ここで、S の形を

$$S(q,E,t) = G(q,E) - Et$$

と仮定し、正準変換後の変数は (Q,E) とします。ハミルトニアンが陽に時間に依存していなければこの形を仮定できます（より一般的には $S(q,\lambda) = G(q,\lambda) - E(\lambda)t$）。これを入れると

$$\frac{1}{2m}((\frac{\partial G}{\partial q})^2 + m^2\omega^2 q^2) - E = 0$$
$$(\frac{\partial G}{\partial q})^2 = 2mE - m^2\omega^2 q^2$$
$$\frac{\partial G}{\partial q} = \sqrt{2mE}\sqrt{1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2E}} \tag{3}$$

となり、時間依存性がない項の式になります。正の場合を取り出しています。変数と母関数の関係 (1b),(1c) から

$$p = \frac{\partial S}{\partial q}\ ,\ Q = \frac{\partial S}{\partial E}$$

なので、p は

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} = \frac{\partial G}{\partial q} = \sqrt{2mE}\sqrt{1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2E}}$$

これから

$$\frac{p^2}{2m} = E(1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2E})$$
$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

となるので、E はエネルギーです。これは、今の場合でのハミルトニアン・ヤコビ方程式は

$$H = -\frac{\partial S}{\partial t} = E$$

となっているためです。

Q は

$$\begin{aligned}
Q = \frac{\partial S}{\partial E} &= \frac{\partial}{\partial E}\int dq\ (2mE - m^2\omega^2 q^2)^{1/2} - t \\
&= \frac{1}{2}m\int dq(2mE - m^2\omega^2 q^2)^{-1/2} - t \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{E}}\int dq(1 - \frac{m\omega^2}{2E}q^2)^{-1/2} \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{E}}\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\int dz\ (1 - z^2)^{-1/2} - t \qquad (z = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}q) \\
&= \frac{1}{\omega}\arcsin z - t \\
&= \frac{1}{\omega}\arcsin(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}q) - t
\end{aligned}$$

微分なので積分定数は出てきません (積分を先に実行すれば積分定数は微分で消える)。よって

$$q = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin(\omega(t+Q))$$

これを p に入れれば

$$\begin{aligned}
p &= \sqrt{2mE}\sqrt{1-\frac{m\omega^2}{2E}\frac{2E}{m\omega^2}\sin^2(\omega(t+Q))} \\
&= \sqrt{2mE}\sqrt{1-\sin^2(\omega(t+Q))} \\
&= \sqrt{2mE}\cos(\omega(t+Q))
\end{aligned}$$

となって、q, p が求まります。Q, E は変換後のハミルトニアンが $K=0$ であるために時間独立な定数です。なので、定数を 2 つ含む解が求まったことになります。

　また、G は

$$\begin{aligned}
\frac{\partial G}{\partial q} &= \sqrt{2mE}\sqrt{1-\frac{m\omega^2 q^2}{2E}} \\
G(q,E) &= \sqrt{2mE}\int dq\sqrt{1-\frac{m\omega^2 q^2}{2E}} \\
&= \sqrt{2mE}\int dq\sqrt{1-c^2q^2} \quad (c^2 = \frac{m\omega^2}{2E}) \\
&= \sqrt{2mE}\int d\theta\frac{\cos\theta}{c}\sqrt{1-\sin^2\theta} \quad (\sin\theta = cq,\ d\theta = \frac{c}{\cos\theta}dq) \\
&= \frac{\sqrt{2mE}}{c}\int d\theta\cos^2\theta \\
&= \frac{\sqrt{2mE}}{c}(\frac{1}{2}\theta + \frac{1}{4}\sin 2\theta) + C \\
&= \frac{\sqrt{2mE}}{c}(\frac{1}{2}\theta + \frac{1}{2}\sin\theta\cos\theta) + C \quad (\sin 2\theta = 2\sin\theta\cos\theta,\ \cos\theta = \sqrt{1-c^2q^2}) \\
&= \frac{\sqrt{2mE}}{c}(\frac{1}{2}\arcsin(cq) + \frac{1}{2}cq\sqrt{1-c^2q^2}) + C \\
&= \frac{\sqrt{2mE}}{2}(q\sqrt{1-\frac{m\omega^2}{2E}q^2} + \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\arcsin(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}q)) + C
\end{aligned}$$

C は積分定数です。

　ついでに、単振動を使って作用・角変数 (action-angle variables) にも簡単に触れておきます。ハミルトン・ヤコビ方程式は

$$\frac{1}{2m}((\frac{\partial G}{\partial q})^2 + m^2\omega^2q^2) = E \quad (\frac{dG}{dq} = p\ ,\ H = E)$$

これから

$$p^2 = 2mE - mkq^2 \quad (\omega = \sqrt{\frac{k}{m}})$$
$$p = \pm\sqrt{2mE - mkq^2}$$

q^2 なので p の値は q の正負で同じです。q も

$$q_\pm = \pm\sqrt{\frac{1}{mk}(2mE - p^2)}$$

となるので、p の正負で同じです。そして、$|p|$ は $q = 0$ のときに最大になり

$$|p_{max}| = \sqrt{2mE}\ ,\ p_\pm = \pm\sqrt{2mE}$$

$p = 0$ のときに $|q|$ は最大になり

$$|q_{max}| = \sqrt{\frac{2E}{k}}\ ,\ q_\pm = \pm\sqrt{\frac{2E}{k}}$$

というわけで、単振動での q, p は、q, p の位相空間 (q, p による 2 次元平面) で楕円を描きます。
　ここで、その楕円の面積になる積分を

$$J = \int_\gamma dq\ p \tag{4}$$

と与えます (2π で割っていることが多い)。γ は面積になるように取った q の範囲を表します。q, p は与えられた力学的エネルギー E の値で取れる範囲が決まるので、γ は E によって決まります (E の値を変えれば楕円の大きさが変わる)。また、この積分は

$$\oint dq\ p$$

と書かれることが多いですが、紛らわしいのでこの表記は使っていません。楕円の面積になるように積分するので

$$
\begin{aligned}
J = \int_\gamma dq\ p &= 2\int_{q_-}^{q_+} dq\ p_+ \\
&= 2\int_{q_-}^{q_+} dq\sqrt{2mE - mkq^2} \\
&= 2\sqrt{\frac{2mE}{k}}\int_{\theta_-}^{\theta_+} dq\sqrt{2E(1-\sin^2\theta)} \quad (q = \sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\theta\ ,\ dq = \sqrt{\frac{2E}{k}}\cos\theta d\theta) \\
&= 4E\sqrt{\frac{m}{k}}\int_{\theta_-}^{\theta_+} d\theta\cos^2\theta \\
&= 4E\sqrt{\frac{m}{k}}\big[\frac{1}{2}\theta + \frac{1}{4}\sin 2\theta\big]_{\theta_-}^{\theta_+}
\end{aligned}
$$

$\theta_\pm$ は

$$
\begin{aligned}
&q_+ : \sqrt{\frac{2E}{k}} = \sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\theta \ \Rightarrow\ \theta_+ = \frac{\pi}{2} \\
&q_- :\ -\sqrt{\frac{2E}{k}} = \sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\theta \ \Rightarrow\ \theta_- = -\frac{\pi}{2}
\end{aligned}
$$

なので

$$
J = 4\sqrt{\frac{m}{k}}E\frac{\pi}{2} = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}E
$$

これは長半径、短半径を q_+, p_+ とした楕円の面積の式 $\pi q_+ p_+$ と一致します。この結果で重要なのは、J は E に対応する定数という点です。逆に見れば

$$
E(J) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}J = \frac{1}{2\pi}\omega J \tag{5}
$$

これを利用して、E を J に変えた正準変換を作ります。

そのために、正準変換後のハミルトニアン K を

$$
K(J) = H = E(J) = \frac{1}{2\pi}\omega J = \omega J' \quad (J' = \frac{1}{2\pi}J) \tag{6}
$$

と与えることにして、正準変換を

$$
K(J) = H(q(\phi, J), p(\phi, J))\ ,\ p = \frac{\partial W(q, J)}{\partial q}\ ,\ \phi = \frac{\partial W(q, J)}{\partial J} \tag{7}
$$

母関数は時間依存性を持たせずに $W(q,J)$ とし、変換前は q,p、変換後は ϕ,J としています。ハミルトン・ヤコビ方程式での正準変換と違い、ハミルトニアンに $\partial W/\partial t$ の項がいないために $K=0$ ではなくなっています。このため、今の $W(q,J)$ は時間依存しない部分 $G(q,E)$ に対応し、J と E の関係は (5) で与えられています。

ϕ の正準方程式

$$\frac{d\phi}{dt}=\frac{\partial K(J)}{\partial J}$$

において、左辺は ϕ、右辺は J に依存するために両辺は定数です。定数を C として

$$\frac{d\phi}{dt}=C$$
$$\phi=Ct+C_0$$

C_0 は定数です。(6) から $C=\omega/2\pi$ です。

母関数 (3) での E を J に変えるので

$$W(q,J)=G(q,E(J))=G(q,\omega J')=\int dq\sqrt{2m\omega J'-m^2\omega^2q^2}$$

J で微分すると

$$\begin{aligned}\phi=\frac{\partial W(q,J,t)}{\partial J}=\frac{1}{2\pi}\frac{\partial W(q,J',t)}{\partial J'}&=\frac{1}{2\pi}\int dq\frac{m\omega}{\sqrt{2m\omega J'-m^2\omega^2q^2}}\\&=\frac{1}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{2m\omega J'}}\int dq\frac{m\omega}{\sqrt{1-m\omega q^2/2J'}}\end{aligned}$$

積分は

$$\int dq(1-\frac{m\omega}{2J'}q^2)^{-1/2}=\sqrt{\frac{2J'}{m\omega}}\int dz(1-z^2)^{-1/2}=\sqrt{\frac{2J'}{m\omega}}\arcsin z\quad\ (z=\sqrt{\frac{m\omega}{2J'}}q)$$

なので

$$\begin{aligned}
\phi &= \frac{1}{2\pi}\frac{m\omega}{\sqrt{2m\omega J'}}\int dq\frac{1}{\sqrt{1-m\omega q^2/2J'}} \\
&= \frac{1}{2\pi}\frac{m\omega}{\sqrt{2m\omega J'}}\sqrt{\frac{2J'}{m\omega}}\arcsin z \\
&= \frac{1}{2\pi}\arcsin(\sqrt{\frac{m\omega}{2J'}}q) \\
\arcsin(\sqrt{\frac{m\omega}{2J'}}q) &= 2\pi\phi \\
q &= \sqrt{\frac{2J'}{m\omega}}\sin(2\pi\phi) \\
&= \sqrt{\frac{2J'}{m\omega}}\sin(\omega t+C_0)
\end{aligned}$$

J に共役な量 ϕ は角度と分かり、楕円の積分において

$$\int_\gamma d\phi = \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi \tag{8}$$

となっています。

このようにして導入される J を作用変数、ϕ を角変数と呼びます。作用変数と呼ばれるのは、J の次元が、長さを L、質量を M、時間を T とすれば

$$pdq = [L^2MT^{-1}]$$

となって、作用の次元 (エネルギー $\times$ 時間 $= [L^2MT^{-2}\cdot T] = [L^2MT^{-1}]$) と一致するからです。作用・角変数が導入されるのは、今のように q, p が周期性を持ち、(4),(7),(8) が定義されるときです。これは 2 つのパターンがあり、1 つは、周期を T として

$$q(t+T) = q(t)\ ,\ p(t+T) = p(t)$$

となる場合で、単振動はこれです。このように、q, p の両方が周期を持つとき秤動 (ひょうどう、libration) と呼ばれます (天体物理の用語)。もう 1 つは

$$q(t+T) = q_0 + q(t)\ ,\ p(t+T) = p(t)$$

として、q の一定間隔 q_0 ごとに p が周期的な値を持つときで (例えば位相空間で三角関数のような振動になるとき)、回転 (rotation) と呼ばれます。このときの面積は 1 周期の範囲で取ります。例えば、振り子の回転のときに起こります。

単振動の話は終わりにして、ハミルトン・ヤコビ方程式を別の方法で求めます。話は同じなので 1 次元で行います。作用 S はラグランジアンから

$$S(t_f, t_0) = \int_{t_0}^{t_f} dt\ L(q, \dot{q}, t)$$

積分範囲に合わせて $S(t_f, t_0)$ と書いていますが、正確には積分経路の両端の位置にも依存しています。これの位置 q を $q + \delta q$ に動かしたとして、そのときの作用の差 δS は、「オイラー・ラグランジュ方程式」で見たように

$$\begin{aligned}
\delta S &= \int_{t_0}^{t_f} dt\ \delta L \\
&= \int_{t_0}^{t_f} dt\ (L(q+\delta q, \dot{q}+\delta\dot{q}, t) - L(q, \dot{q}, t)) \\
&= \int_{t_0}^{t_f} dt\ (\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q}) \\
&= \int_{t_0}^{t_f} dt\ (\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{d}{dt}\delta q) \\
&= \int_{t_0}^{t_f} dt\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q) + \int_{t_0}^{t_f} dt(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}})\delta q
\end{aligned}$$

ここで、オイラー・ラグランジュ方程式が常に成立しているとします (運動方程式に従う経路を選ぶ)。そうすると

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_f} dt\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\big|_{t_f} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\big|_{t_0}$$

t_0 では $\delta q = 0$ とし、t_f では $\delta q \neq 0$ とすれば

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\big|_{t_f} = p(t_f)\delta q\big|_{t_f}$$

このように、もとの経路と動かした経路での作用の差は t_f での運動量 $p(t_f)$ によって与えられます。微分の形にすれば、t_f において

$$\frac{\partial S}{\partial q} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\big|_{t_f} = p(t_f) \tag{9}$$

となります。

今度は時間も動かして、t_f を $t_f + \delta t$ とします。$t_0, t_f + \delta t$ での q は $q(t_0), q(t_f)$ に固定したままにします。このときの作用の差は

$$\begin{aligned}
\delta S &= \int_{t_0}^{t_f+\delta t} dt\ L(q+\delta q, \dot{q}+\delta\dot{q}, t) - \int_{t_1}^{t_f} dt\ L(q, \dot{q}, t) \\
&= \int_{t_0}^{t_f} dt\ (L(q+\delta q, \dot{q}+\delta\dot{q}, t) - L(q, \dot{q}, t)) + \int_{t_f}^{t_f+\delta t} dt\ L(q+\delta q, \dot{q}+\delta\dot{q}, t)
\end{aligned} \tag{10}$$

第一項は単に δq 動かしたときと同じで、

$$\int_{t_0}^{t_f} dt(L(q+\delta q,\dot{q}+\delta\dot{q},t)-L(q,\dot{q},t))=\int_{t_0}^{t_f} dt\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\delta q)+\int_{t_0}^{t_f} dt(\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}})\delta q$$

経路上でオイラー・ラグランジュ方程式が成立しているとして、これの第 2 項は消します。(10) の第 2 項は積分と微分の関係から

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dy}\int_{y}^{y+\delta y} dx\ f(x) &= f(y+\delta y)\frac{d}{dy}(y+\delta y)-f(y)\\
&= f(y+\delta y)(1+\frac{d}{dy}\delta y)-f(y)\\
&\simeq f(y)(1+\frac{d}{dy}\delta y)+\frac{df}{dy}\delta y-f(y)\\
&= f(y)\frac{d}{dy}\delta y+\frac{df}{dy}\delta y\\
&= \frac{d}{dy}(f(y)\delta y)\\
\int_{y}^{y+\delta y} dx\ f(x) &= f(y)\delta y
\end{aligned}$$

となるので、$\delta t,\delta q,\delta\dot{q}$ の 1 次までで

$$\int_{t_f}^{t_f+\delta t} dt\ L(q+\delta q,\dot{q}+\delta\dot{q},t)=L(q+\delta q,\dot{q}+\delta\dot{q},t)\delta t\big|_{t_f}\simeq L(q,\dot{q},t)\delta t\big|_{t_f}$$

よって、t_0 では $\delta q=0$ なので (10) は

$$\begin{aligned}
\delta S=\int_{t_0}^{t_f} dt\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\delta q)+L(q,\dot{q},t)\delta t\big|_{t_f} &= \frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\delta q\big|_{t_f}-\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\delta q\big|_{t_0}+L(q,\dot{q},t)\delta t\big|_{t_f}\\
&= p\delta q\big|_{t_f}+L(q,\dot{q},t)\delta t\big|_{t_f}
\end{aligned}$$

ハミルトニアンに書き換えると

$$p\delta q+L\delta t=p\delta q+p\dot{q}\delta t-H\delta t$$

q の変化は

$$q'(t)=q(t)+\delta q(t)\ ,\ q'(t')=q'(t+\delta t)=q(t)+\delta\eta(t)$$

となっていて

$$q'(t')=q'(t+\delta t)=q'(t)+\frac{dq}{dt}\delta t=q(t)+\delta q(t)+\frac{dq}{dt}\delta t$$

から

$$\delta\eta(t)=\delta q+\dot{q}\delta t$$

そして、今は q は t_f で固定させて、$q'(t_f+\delta t)=q(t_f)$ としているので $\delta\eta(t_f)=0$ です。このため

$$(p\delta q+p\dot{q}\delta t)|_{t_f}=p\delta\eta|_{t_f}=0$$

となるので

$$\delta S=(p\delta q+L(q,\dot{q},t)\delta t)|_{t_f}=(p\delta q+p\dot{q}\delta t-H\delta t)|_{t_f}=-H\delta t|_{t_f}$$

よって、t_f で

$$H+\frac{\partial S}{\partial t}=0 \tag{11}$$

となります。(9),(11) は、正準変換 (1b),(1a) と同じになっていて、ハミルトン・ヤコビ方程式となります。

ハミルトン・ヤコビ方程式を解く方法として特性曲線法 (method of characteristics) を見ていきます。この方法はハミルトン・ヤコビ方程式の性質を知るためにも重要になっています。

ハミルトニアンは時間独立にし $H(q,p)$ とします。表記を簡単にするために $x_\mu=(t,q_i)$ とし、ギリシャ文字は $\mu=0,1,\dots,n$、ローマ文字は $i=1,2,\dots,n$ とします ($x_0=t,\ x_i=q_i$)。x_μ はあるパラメータ s に従っているとして $x_\mu(s)=(t(s),q_i(s))$ とおきます。$f(x)$ のように書いているときは x_μ に依存することを表します。

(1b) から

$$\alpha_0(s)=\frac{\partial S}{\partial x_0}=\frac{\partial S}{\partial t}\ ,\ \alpha_i(s)=\frac{\partial S}{\partial x_i}=\frac{\partial S}{\partial q_i} \tag{12}$$

とします。これらからハミルトン・ヤコビ方程式は

$$H(x_i,\alpha_i)+\alpha_0=0$$

左辺を $F(x,\alpha)$ として、$F(x,\alpha)=0$ とします。ハミルトン・ヤコビ方程式は S に直接依存していないので、F に S の依存性はないです。α_μ を s で微分してみると

$$\frac{d\alpha_\mu}{ds} = \frac{d}{ds}\frac{\partial S}{\partial x_\mu} = \frac{dx_1}{ds}\frac{\partial}{\partial x_1}\frac{\partial S}{\partial x_\mu} + \cdots + \frac{dx_n}{ds}\frac{\partial}{\partial x_n}\frac{\partial S}{\partial x_\mu} = \sum_{\nu=0}^{n}\frac{dx_\nu}{ds}\frac{\partial^2 S}{\partial x_\nu \partial x_\mu} \tag{13}$$

そして、F を x_μ で微分し、(12) を入れてみると

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_\mu}F = \frac{\partial}{\partial x_\mu}(H(x_i,\alpha_i)+\alpha_0) &= \frac{\partial \alpha_1}{\partial x_\mu}\frac{\partial F}{\partial \alpha_1} + \cdots + \frac{\partial \alpha_n}{\partial x_\mu}\frac{\partial F}{\partial \alpha_n} + \frac{\partial F}{\partial x_\mu} \\
&= \sum_{\nu=0}^{n}\frac{\partial \alpha_\nu}{\partial x_\mu}\frac{\partial F}{\partial \alpha_\nu} + \frac{\partial F}{\partial x_\mu} \\
&= \sum_{\nu=0}^{n}\frac{\partial^2 S}{\partial x_\mu \partial x_\nu}\frac{\partial F}{\partial \alpha_\nu} + \frac{\partial F}{\partial x_\mu} = 0
\end{aligned}$$

これと (13) は似ているのが分かります。このことを利用して、第 1 項の x による 2 回微分を消すことを考えます。そのために、ハミルトン・ヤコビ方程式の解として $S(x(s)) = u(s)$ を仮定し、このとき

$$\frac{dx_\mu}{ds} = \frac{\partial}{\partial \alpha_\mu}F(x,\alpha;u) \tag{14}$$

となっていると仮定します。この仮定によって、(12) は

$$\alpha_\mu(s) = \frac{\partial u}{\partial x_\mu}$$

F の x_μ 微分は

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}F(x,\alpha;u) = \sum_{\nu=0}^{n}\frac{\partial^2 u}{\partial x_\mu \partial x_\nu}\frac{\partial F}{\partial \alpha_\nu} + \frac{\partial F}{\partial x_\mu} = 0$$

これに (14) を入れて

$$\sum_{\nu=0}^{n}\frac{\partial^2 u}{\partial x_\mu \partial x_\nu}\frac{dx_\mu}{ds} + \frac{\partial F}{\partial x_\mu} = 0$$

そして、(13) は

$$\frac{d\alpha_\mu}{ds} = \sum_{\nu=0}^{n}\frac{dx_\nu}{ds}\frac{\partial^2 u}{\partial x_\nu \partial x_\mu}$$

なので

$$\frac{d\alpha_\mu(s)}{ds} = -\frac{\partial F(x,\alpha;u)}{\partial x_\mu}$$

そして、u の s 微分は

$$\frac{du}{ds} = \sum_{\nu=0}^{n}\frac{dx_\nu}{ds}\frac{\partial u}{\partial x_\nu} = \sum_{\nu=0}^{n}\frac{\partial F(x,\alpha;u)}{\partial \alpha_\nu}\alpha_\nu(s)$$

となっています。

というわけで、ハミルトン・ヤコビ方程式から

$$\frac{d\alpha_\mu}{ds} = -\frac{\partial F(x,\alpha;u)}{\partial x_\mu} \tag{15a}$$

$$\frac{dx_\mu}{ds} = \frac{\partial F(x,\alpha;u)}{\partial \alpha_\mu} \tag{15b}$$

$$\frac{du}{ds} = \sum_{\nu=0}^{n}\frac{\partial F(x,\alpha;u)}{\partial \alpha_\nu}\alpha_\nu(s) \tag{15c}$$

という微分方程式が出てきます。これらは形式的には、(15b) から x_μ が求まれば (15a) から α_μ が求まり、x_μ, α_μ が求まれば (15c) から解 u が求まるという構造になっています。というわけで、これらからハミルトン・ヤコビ方程式の解が求まります。このように 1 階偏微分方程式を常微分方程式の組に変えて解く方法が特性曲線法です。(15a),(15b),(15c) は偏微分方程式の言葉で特性方程式 (characteristic equations)、これらの解による曲線 (積分曲線) は特性曲線、特性曲線の集まりは integral surface と言います。また、x_μ は projected characteristic のように呼ばれることもあります。

式をはっきりさせるために、(15a),(15b) を成分を分けて書くと

$$\frac{dt}{ds} = \frac{\partial F}{\partial \alpha_0}\ ,\ \frac{dx_i}{ds} = \frac{\partial F}{\partial \alpha_i}\ ,\ \frac{d\alpha_0}{ds} = -\frac{\partial F}{\partial t}\ ,\ \frac{d\alpha_i}{ds} = -\frac{\partial F}{\partial x_i}$$

$F(x,\alpha) = H(x_i,\alpha_i) + \alpha_0$ から

$$\frac{dt}{ds} = 1\ ,\ \frac{dx_i}{ds} = \frac{\partial F}{\partial \alpha_i} = \frac{\partial H}{\partial \alpha_i}\ ,\ \frac{d\alpha_0}{ds} = 0\ ,\ \frac{d\alpha_i}{ds} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$

と書けて、α_i は (1b) から p_i であるので

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}\ ,\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$

となり、$H(x_i,p_i)$ の正準方程式になります。なので、特性方程式のうちの 2 つは正準方程式です。正準方程式だけで運動は記述できるので (位置と速度が分かるから)、物理の問題を解くのに (15c) は基本的に必要ないです ((15c) は作用を求める式)。

(15c) は

$$\frac{du}{ds}=\frac{\partial F}{\partial\alpha_0}\alpha_0+\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial F}{\partial\alpha_i}\alpha_i=\alpha_0+\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial H}{\partial p_i}p_i=-H+\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial H}{\partial p_i}p_i$$

この式は正準方程式から

$$\frac{du}{dt}=-H+\sum_{i=1}^{n}\frac{dx_i}{dt}p_i=-H+\sum_{i=1}^{n}\dot{q}_ip_i=L$$

となって、ラグランジアンと作用の関係となります。このように仮定 (14) による解は作用の関係を再現します。

ハミルトニアンが x に依存していないとして、$H(\partial S/\partial x_i)$ としてみます。そうすると、正準方程式は

$$\frac{dx_i}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_i}\ ,\ \frac{dp_i}{dt}=0$$

このため、p_i は定数で、x_i も定数になります。なので、特性曲線 x_i は直線となります。この結果は幾何光学での真空中でのアイコナール方程式

$$(\nabla\phi)^2=\frac{\omega^2}{c^2}\qquad(\nabla=(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2},\frac{\partial}{\partial x_3}))$$

との対応に使えます (一般的なアイコナール方程式でも使える)。ϕ は位相の座標依存部分 ($\exp[i(\phi(x_i)-\omega t)]$)、$\omega$ は角振動数、c は光速です。大雑把に言っておきます。これは時間独立な (3) と同じなので、ϕ は作用に対応します。そうするとハミルトニアン $H(\nabla\phi)$ でのハミルトン・ヤコビ方程式なので、$\boldsymbol{x}$ が直線になり、向きは波数ベクトル $\boldsymbol{k}=\nabla\phi$ の方向です。つまり、波面に垂直な方向に進みます。よって、アイコナール方程式は光を線として近似したとき (光の波長が十分小さいとき) の方程式なので、光は真空中を直線で進みます。

もう 1 つよく出てくる話として、シュレーディンガー方程式との対応があります。単純には量子力学での「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」で示してるように、プランク定数 $\hbar$ が 0 の極限でシュレーディンガー方程式が

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)\ \Rightarrow\ H(x,\frac{\partial\rho}{\partial x})-\frac{\partial\rho}{\partial t}=0\qquad(\psi(x,t)=e^{i\rho(x,t)/\hbar}\phi(x,t))$$

となるからです。ハミルトン・ヤコビ方程式との対応は、経路積分の定式化、ボーム (Bohm) による特性曲線は量子的な粒子の位相空間における軌道とする主張などに使われています。このように、波を粒子的に扱うとき (電磁気から幾何光学) と、粒子を波として扱うとき (力学から量子力学) の両方でハミルトン・ヤコビ方程式と同型の方程式が現れます。