力学・解析力学の基礎 2

Udemy 講師：T Tetsuya

2018/02/12

概要

本書ではハミルトニアンモンテカルロ法で出てくるハミルトニアンについて力学・解析力学の観点から導出を行う。まず初めに力学の基礎から出発し、物理の基礎的な用語、また運動方程式や Newton 力学の枠組みを理解する。次に Newton 力学では扱いにくい中心力が働く場合を考える。極座標への変換が比較的大変である事を経験し、座標変換不変な微分方程式という観点から Lagrange 力学という着想が生まれる。また、位相空間という位置と運動量で物体の運動を記述する観点から Hamilton 力学の枠組みを理解する。この力学・解析力学の基礎 2 では解析力学のパートを学習していく。前回の力学のパートよりも数学的な難易度は上がっている。本書を読むうえで必要な数学的なレベルとしては、ベクトル、大学レベルの微分・積分に加えて、汎関数への理解が必要である。

目次

1 解析力学の基礎 2
1.1 プラトンの洞窟の比喩 2
1.2 力学を捉え直す 3
1.3 最小作用の原理 4
1.4 Lagrange 方程式 5
1.5 自由な質点のラグランジアン 7
1.6 ポテンシャル中の質点のラグランジアン 8
1.7 極座標再訪 9
1.8 Hamilton 力学へ 10
1.9 Legendre 変換 10
1.10 ハミルトニアン・正準方程式 12
1.11 エネルギー保存則 13
1.12 位相空間 14
1.13 Hamilton 力学の手続き 14
1.14 最後に 15

1　解析力学の基礎

このセクションでは Newton 力学とは別の力学的な枠組みである Lagrange 力学と Hamilton 力学という別の形式の力学を紹介していく。Newton 力学では座標変換に対して式変形が大変というデメリットがあったが、この困難さを克服するために座標変換に対して不変な微分方程式である、Lagrange 方程式や正準方程式を導入する。前回の力学よりも抽象的で尚且つ数学的な難易度は上がってしまう。物理学科の学生が解析力学をきっかけに物理を嫌いになりそうになる気持ちも理解できると思う。ただ、数学的に難しい話をする前に、まずは力学自体への自然観を捉え直すところから学習を始める。この為、まずはプラトンの洞窟の比喩から始める。

1.1　プラトンの洞窟の比喩

この節では力学の捉え方からもう一度考え直していくのだが、その最初のステップとして有名なプラトンの洞窟の比喩から話を始めていく。この話は有名なので、知っている方も多いと思うが、Fig.1.1 のように、囚人が洞窟の中に捕らわれている。囚人たちは手足を縛られており、洞窟の壁の方しか見ることが出来ない。この壁には演者たちが発生させている影絵が映っており、囚人たちはこの影絵こそが世界だと思ってしまう。
しかし、実際のところ、そのメカニズムは影絵を発生させている演者たちである。この比喩から 1 つ分かる事は、知覚できるもしくは観測できるものだけが全てであると考えるのではなく、その背景[*1]にあるメカニズムを想像する事が重要であるという事である。すなわち、目に見えない部分にこそ重要な本質が隠されているかもしれないという事は心に留めておく必要があるだろう。

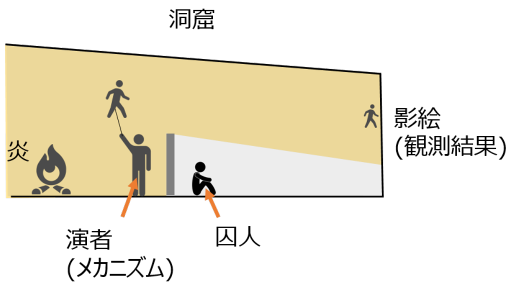

Fig.1.1　プラトンの洞窟の比喩：洞窟にいる囚人は手足を縛られており、洞窟に映る影絵 (観測結果) しか見ることができない。しかし、メカニズム (演者) は当の本人たちの見ることが出来ないところに存在する

[*1] 今の状況にはぴったりの言葉である。オヤジギャグのようだが、演者はまさに囚人の背後にいる

1.2　力学を捉え直す

さて、先の話を念頭に置きながら、力学を捉え直してみよう。Newton が見つけた運動の 3 法則から復習しておくと、次のようなものだった。

Newton の運動の 3 法則

1. **運動の第一法則 (慣性の法則)**:力が作用しない限り、物体は静止か等速直線運動を続ける
2. **運動の第二法則 (運動の法則)**:物体にかかる加速度 $\ddot{\mathbf{r}}$、物体の質量 m, 物体に働く力 $\mathbf{F}$ とすると、物体の運動は運動方程式 $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ に従う
3. **運動の第三法則 (作用・反作用の法則)**:物体 1 から 2 に働く力を $\mathbf{F_{12}}$, 物体 2 から 1 に働く力を $\mathbf{F_{21}}$ としたときに、$\mathbf{F_{12}} = -\mathbf{F_{21}}$

しかし、よくよく考えると何故、力が働かなければ物体は静止か等速直線運動をしないといけないのだろうか？このような疑問を周囲の人に言えば、恐らく変な人だと思われるだろう。彼らにしてみれば、**”そんな事は当たり前だから”**である。似た言葉に**常識**という言葉がある。この言葉は科学を学ぶ上では危険である。この言葉を使うだけで、普段であればその考え方の正当性や詳しい説明を省くことができ、便利な言葉だが、この言葉の真に意味するところは**”この現象はよくあることだから、これ以上考えるのはやめよう”**という事である。先ほどの、プラトンの洞窟の比喩で言うところの囚人に近い考え方である。[*2]もちろん日常的に全ての項目に 1 から理由を話し始めると会話に時間がかかる。このような事を会社でやると上司に”結論は何ですか?”と聞かれる事になるので、便宜を図る上ではどんどん使えばよい。ただ、科学を学ぶときには何故という言葉を排除しないようにしよう。さて、話を戻すと何故、力が働かない場合には物体は静止か等速直線運動を続けるのだろうか？ Fig.1.2 の破線のように等速直線運動以外の経路だって考えることが出来るが、実際に観測される経路は実線の等速直線運動をする経路である。この何故特定の経路が選ばれるのかという考え方が、Newton 力学とは別の力学の枠組みである Lagrange 力学の考え方・自然観である。Lagrange 力学では実現される運動の経路は他の経路と異なり、特別な条件を満たしているのではないかと考える。これが最小作用の原理であり、Lagrange 力学の出発点である。

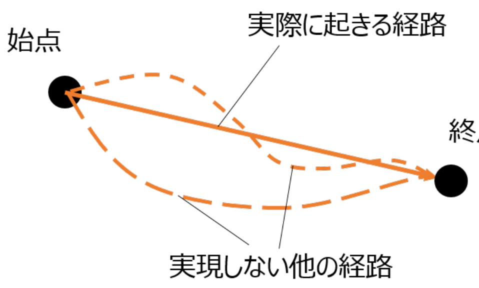

Fig.1.2　様々な経路。力が働かなければ、物体は等速直線運動を続け、実線の経路が実現される。

[*2] 囚人の中にはメカニズムに気付いている人もきっといるだろうが

1.3　最小作用の原理

前節の最後に物体の運動では様々な経路が考えうるが、実現される経路は特別な条件を満たしており、それが最小作用の原理であると述べた。この節あたりから話が抽象的になってきて、分かりにくいと感じるかもしれない。やはり、物事の本質というのは突き詰めていったエッセンスなので、表現が分かりにくいのだ。さて、最小作用の原理の内容に入っていく。最小作用の原理の内容とは以下のような内容である。

最小作用の原理

> 力学系を特徴づける量として、**作用**という量を考える。そして、この世界で実現される
> 系の運動はこの作用を最小にするように運動が決まる。

つまり、Newton 力学では指導原理が運動の 3 法則であったが、Lagrange 力学では、指導原理がこの最小作用の原理であり、同じ運動を記述する力学でも運動に対する考え方が異なるという事が分かるだろう。Lagrange 力学の考え方は大変興味深く、現実に起こる観測結果を直接は目に見えない作用という量を通して運動のメカニズムを考えていることになる。私が初めてこの最小作用の原理を学んだときは、その考え方に衝撃を受けた記憶がある。

さて、それでは作用とは何なのかを具体的に考えていこう。作用は力学系を特徴づける量である。Newton 力学の手続きでも学んだが、運動を決めるには運動方程式を立てて、それを解き、初期条件として、座標と速度を決めれば系の運動が完全に記述できていた。すなわち、系の運動を特徴づける量である作用は座標や速度に関係しているはずである。ただし、座標や速度を決める際に直交座標系を使わないといけない理由はどこにもない。従って、任意の座標系における座標と速度を指定すればよい。このような座標と速度の事を**一般化座標**と**一般化速度**といい、直交座標系と区別する意味を込めて、それぞれ $q, \dot{q}$ で表される。

そして、作用は様々な経路で作用の値が具体的にいくらになるのかを計算する事ができる必要がある。すなわち、何か決まった量をそれぞれの経路で積分し、そしてその中で最も作用が小さくなるような経路が実際に系で実現される経路である。そこで、この何か決まった量を $L(q, \dot{q})$ と表し、ラグランジアンと名前を付ける。このラグランジアンは先ほど述べた通り、力学系を特徴づける必要があるので、$q, \dot{q}$ の関数になっている。そして作用はこのラグランジアンを経路に渡って積分した量になる。すなわち、作用を I で表したときに

$$I[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}) dt \tag{1}$$

と表せる。ここで $I[q(t)]$ は経路 $q(t)$ の汎関数である。汎関数は聞きなれない言葉かもしれないが、関数の関数の事である。まず関数とは $f(x) = x^2$ のような x の値を決めると、一つの値が関数によって決まるようなものだが、汎関数とは一つの関数 (ここでは系の経路 $q(t)$ の事) が決まると、1 つ値が定まるような量である。それでは一旦、ラグランジアンの中身を決定する問題は後回しにして、以下ではこの作用を最小化するにはどのような式に従えばよいかを導出していく。

1.4　Lagrange 方程式

この節では具体的に、最小作用の原理に従って、作用を最小化する方程式を導く。ここでは、Fig.1.3 のように t_1 から t_2 まで系が運動する場合に、端点は固定した状態で、その間の過程で色々な経路を考えてみる。ここでは、いきなりそのような作用を最小化する経路 $q(t)$ が見つかった (Fig.1.3 の実線) としよう。その時に、その経路から僅かに外れた経路 $q(t)+\delta q(t)$ という経路を考えると、必ず作用は $q(t)$ より大きくなる。ここで、$\delta q(t)$ は $q(t)$ の**変分**という量であり、関数の微小変化である。普段、微小量を考えるときは x の微小変化など 1 つのスカラー量の微小変化を考えているが、今は系の経路という関数 $q(t)$ を変化させている。さて、この時にこの変分が十分小さな変化だと考えると、作用は極値 (最小値) を取っているので、1 次の変化量は 0 である。イメージ的には $f(x)=x^2$ の最小値を計算するときには、この関数を微分し、$f'(x)=0$ の点を探すと思うが、これと同じことを関数でやっている。したがって、

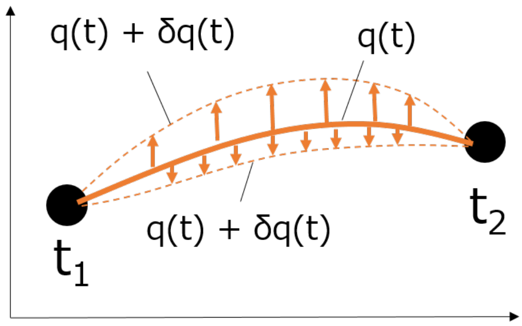

Fig.1.3　作用が最小の経路 $q(t)$ とそこから僅かに外れた経路 $q(t)+\delta q(t)$

$$\delta I[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} (L(q+\delta q, \dot{q}+\delta\dot{q}) - L(q,\dot{q}))dt = 0 \tag{2}$$

ここで、変分が十分微小な量である事から、$L(q+\delta q, \dot{q}+\delta\dot{q})$ を 1 次の項まで Taylor 展開して、

$$L(q+\delta q, \dot{q}+\delta\dot{q}) = L(q,\dot{q}) + \frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q} \tag{3}$$

これを先ほどの (2) に代入すれば

$$\delta I[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q}\right) dt = 0 \tag{4}$$

となることは分かるだろう。さて、ここから少しだけ式変形する。$\delta\dot{q} = \delta\frac{dq}{dt} = \frac{d}{dt}\delta q$ を用いて、

$$\delta I[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{d}{dt}\delta q\right) dt = 0 \tag{5}$$

第 2 項を部分積分して、

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right) dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q(t)\right]_{t_1}^{t_2} = 0 \tag{6}$$

となる。最後の項は、端点を固定しているという条件 $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ から落ちる。最後に、δq で纏めれば、

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) \delta q dt = 0 \tag{7}$$

となる。ここで、任意の変分について、$q(t)$ が最小である必要があるので、被積分関数の括弧の中が 0 となる必要がある。すなわち、

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \tag{8}$$

である。これが、作用を最小化する[*3]為にラグランジアンが満たすべき方程式であり、**Lagrange 方程式**と呼ばれる。この Lagrange 方程式から系の運動を決めると Newton の運動方程式と等価になるはずである。実際には Lagrange 方程式は作用を最小化する以外の要請はしていない。この為、単位が現実の世界で観測される速度や加速度と一致するように、すなわち Newton 力学に合うように比例定数を決める必要がある。

[*3] 正確には極値を取る

1.5　自由な質点のラグランジアン

前節では最小作用の原理に基づいて、作用を最小化するための Lagrange 方程式を導いた。この節では後回しにしていたラグランジアンの形を具体的に決めていく。まずは最も分かりやすい自由な質点のラグランジアンを考える。自由な質点とは力が働いていない質点の運動である。この場合にはラグランジアンが満たすべき性質からラグランジアンの形を導く。系の運動はラグランジアンによって特徴づけられている。したがって、ラグランジアンは座標系の原点の取り方に依存してはいけない。例えば、Fig.1.4 のように質点が同じ運動をしていても (x,y,z) 軸として、どの軸を選ぶかの組み合わせによって速度は正にも負にもなる。例えば、質点と同じ向きに x 軸を選べば速度は正だが、反対向きの軸を選んでいる場合には速度は負になる。しかし、運動としては同じであり、単に選んだ軸が異なるだけの話である。このような空間はどの向きも同じ資格を持つことを**空間の等方性**という。したがって、空間の等方性から自由な質点のラグランジアンは軸の選び方によって異なる $q, \dot{q}$ に依存してはならないという事が分かるだろう。では、何に依存するかといえば、速度の大きさに依存する。速度の大きさはどの座標系を選んでも同じであるので、自由な質点のラグランジアンは速度の大きさのみに依存する。すなわち、比例定数を a としたとき、ラグランジアンの関数形は

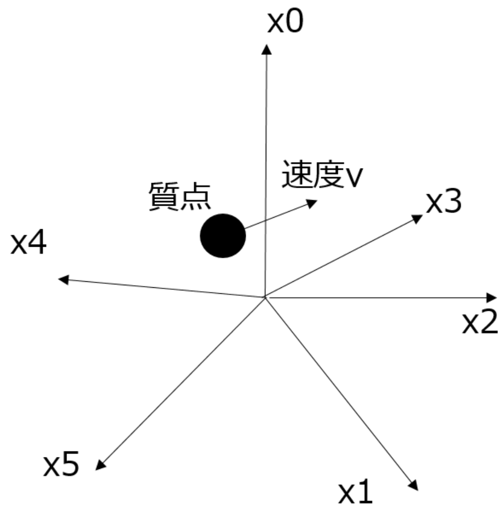

Fig.1.4　自由な質点の運動を記述するためには様々な x 軸、y 軸の組み合わせがあるが、ラグランジアンは特定の軸に依存してはいけない。

$$L(\dot{q}) = a\dot{q}^2 \tag{9}$$

となる。そして、比例定数 a は Newton 力学の単位に合わせるために $a = \frac{1}{2}m$ と置く。ここで、m は系の質量である。つまり、自由な質点のラグランジアンは運動エネルギーに等しい。力学を学んだときにわざわざ仕事やエネルギーの概念を学んだが、それには意味があったというわけである。

さて、ラグランジアンの関数形が決まったので、これを Lagrange 方程式に代入してみよう。q についての偏微分は 0 なので $\dot{q}$ の偏微分を計算すると、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q} \tag{10}$$

となる事が分かるが、ここで運動量が出てきていることが分かる。運動量もまた便宜的に作った量ではなく自然界における最も基本的な量の一つである事が分かってきたのではないだろうか。このラグランジアンから導かれる $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ を**一般化運動量**という。さて、Lagrange 方程式に今得た結果を代入すると、

$$\frac{d}{dt}m\dot{q} = 0 \Leftrightarrow m\dot{q} = const. \tag{11}$$

となり、これは力が働かない場合、系は等速直線運動を続けるという慣性の法則の内容である。最小作用の原理に基づくと、不思議なことに、慣性の法則が導かれ、Newton 力学と整合性があるという事が分かると思う。

1.6　ポテンシャル中の質点のラグランジアン

前節では自由な質点の場合にラグランジアンの具体的な関数形を決め、それが運動エネルギーに等しい事を学んだ。エネルギーにはもう 1 つポテンシャルエネルギーがあったかと思うが、今回は重力のような保存力を考え、そのポテンシャル中の粒子のラグランジアンの関数形を決定する。前節では、ラグランジアンが満たすべき性質から関数形を導いたが、ポテンシャル中のラグランジアンは Newton の運動方程式と合うように、次のように決められる。

$$L = T - U \tag{12}$$

ここで、T は系の運動エネルギー、U は系が運動をしている空間のポテンシャルである。このように天下り的に与えられるのは気持ち悪いかもしれないが、このようにラグランジアンを決定することで、Newton 力学と整合することになる。例として、重力ポテンシャルを考えてみよう。力学のパートで学んだ通り、重力のポテンシャルは

$$U(q) = mgq \tag{13}$$

であった。ここで g は重力加速度である。この場合に、ラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - mgq \tag{14}$$

となる事が分かるが、これを Lagrange 方程式に代入してみると

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -mg \tag{15}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q} \tag{16}$$

なので、

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \Leftrightarrow m\ddot{q} + mg = 0 \tag{17}$$

$$\tag{18}$$

となり、運動方程式を再現している事が分かる。この為、ラグランジアンを $L = T - U$ と定義すれば、Lagrange 方程式が Newton の運動方程式と等価になる。

1.7　極座標再訪

前節で、ポテンシャル中の系のラグランジアンの具体的な形も決まった。そこで、本節ではNewton 力学で大変苦労した中心力の場合にはどうなるのかを見てみよう。例題としては、力学のパートで取り扱った惑星の運動 (Fig.1.5 参照) を取り上げる。系には万有引力が働いているとして、ラグランジアンを求めよう。ここでは座標系として極座標を使用する。また式変形を簡単にするため、万有引力ポテンシャルの関数形は陽に書かず、$U(q)$ のまま取り扱う。極座標での速度は直交座標系の時と異なり、r, θ を使って表す必要がある。Fig.1.6 を見ると、r 方向と θ 方向の速度はそれぞれ $\dot{r}, r\dot{\theta}$ であることが分かる。したがって、ラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + (r\dot{\theta})^2) - U(r) \tag{19}$$

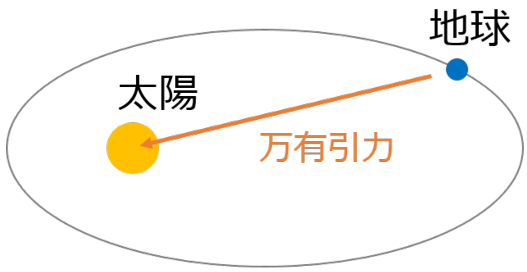

Fig.1.5　惑星の運動

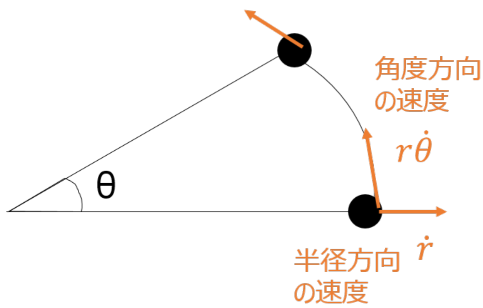

Fig.1.6　極座標での (r, θ) 方向の速度

となる。ここでラグランジアンが r は含むが θ は含んでいないことに注意しよう。この場合、$\frac{\partial L}{\partial \theta} = 0$ となるので、Lagrange 方程式から θ の一般化運動量の時間変化は 0 となる事が分かるだろう。すなわち、力学のパートでも出てきたが、θ は循環座標である。このように、Newton 力学と異なり、いきなり極座標でラグランジアンを考えればよいので、座標変換という面倒な作業が発生しないのである。これが、最小作用の原理という抽象的な原理から出発して特定の座標系に依存しない Lagrange 方程式を導出したメリットである。また、r 方向の Lagrange 方程式は、

$$\frac{\partial L}{\partial r} = mr\dot{\theta}^2 - \frac{dU(r)}{dr} \tag{20}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \tag{21}$$

であり、(20) の最後の項は、保存力 F_r を導く。これを Lagrange 方程式に代入して、

$$\frac{d}{dt}(m\dot{r}) - mr\dot{\theta}^2 - F_r = 0 \Leftrightarrow m(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2) = F_r \tag{22}$$

となり、力学のパートと同じ運動方程式が導かれた。すなわち、Lagrange 方程式こそが Lagrange 力学における運動方程式の役割を果たしている。

それでは、Lagrange 力学において系の運動を決定する手続きを纏めておこう。

Lagrange 力学の手続き

1. 系のラグランジアンを決定する
2. Lagrange 方程式を解く

このように Newton 力学と手続き自体が異なるという事が分かる。どちらの枠組みであっても得られる系の運動の結果自体は同じであるが、Lagrange 力学の枠組みは座標変換などに強く、簡単に系の運動方程式を導くことが出来る。

1.8　Hamilton 力学へ

前節では Lagrange 方程式を用いれば極座標系でも容易に運動方程式を導くことが出来ることを見た。力学の問題を解くという意味では、この Lagrage 力学を使えばよいが、この節以降では Lagrange 力学を更に抽象化した別の力学的な枠組みとして、Hamilton 力学を導入していく。Lagrange 力学では独立変数が $\{q, \dot{q}\}$ であったが、この Hamilton 力学の枠組みでは独立変数が $\{q, p\}$ の組に変化する。独立変数が変化しただけであれば、Hamilton 力学を導入する意味はあるのかと思うかもしれないが、結論から述べれば、意味はある。ハミルトニアンモンテカルロの説明に不要なので、説明はしないが Hamilton 力学では座標変換に強いだけでなく、**正準変換**という変数同士を混ぜるような変換もかなり自在にできるようになる。詳細を知りたい方は参考文献に解析力学の参考書を挙げておくので、参考にしてほしい。また系の運動の記述の仕方も Lagrange 力学と異なり、一般化座標 q と一般化運動量 p からなる位相空間という空間で系の運動を記述することになる。こちらは詳細を後で述べる。それでは、ラグランジアンから **Legendre 変換**という独立変数を変換するための数学的な手続きを用いて、ハミルトニアンを導いていく。まず次節では Legedre 変換の説明から入る。

1.9　Legendre 変換

ここでは、ラグランジアンを Legendre 変換して、ついに目的であるハミルトニアンを導く。その前に、Legendre 変換という難しそうな変換について説明する必要がある。Legendre 変換とは端的に言えば、独立変数の組をある組から別の組に変換する数学的な手続きの事である。まずは、変換される関数 ($f(x)$ とする) が**凸関数**であるとしよう。突然、凸関数といわれてもピンと来ないが、凸関数とは端的に言えば、2 次関数のような**単調な関数**の事である。単調な関数というのは傾き $f'(x)$ の符号が変わらないような関数の値が増え続けるか減り続けるような関数をイメージすればよい。Fig.1.7 に凸関数のイメージを示した。この図では上に凸の関数になっているが、単調であればよいので、2 次関数のように下に凸でもよい。ラグランジアンは凸関数なのかと思うかもしれないが、ラグランジアン $L = T - U$ であり、T は $\dot{q}$ の 2 次関数であるので $\dot{q}$ について凸関数である。

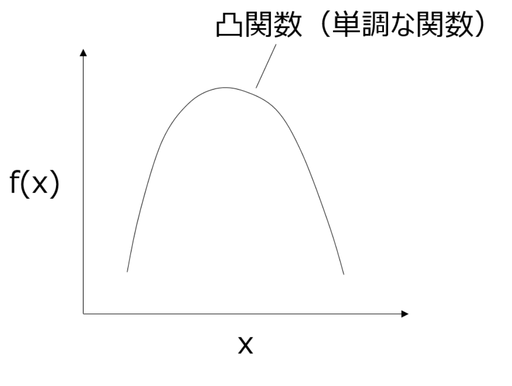

Fig.1.7　凸関数のイメージ。名前の通り山の形をしていて単調な関数の事。2 次関数のように下に凸でもよい。

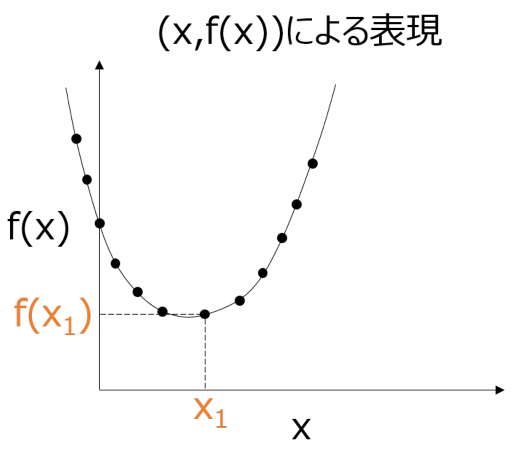

Fig.1.8　2 次関数を (x,f(x)) の組で保存した様子

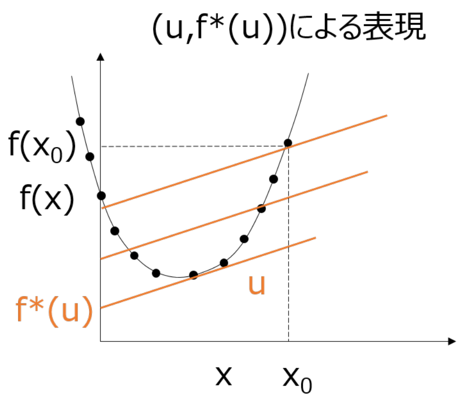

Fig.1.9　2 次関数を $(u, f^*(u))$ の組で保存した様子

さて、ここから f(x)(ラグランジアンだと思ってほしい) という関数を Legendre 変換し、独立変数 x(こちらは $\dot{q}$) から別の独立変数である u(これが移る先の p) に移る。この時に、独立変数が持つ情報について考える必要がある。例えば、変換元の関数が $f(x) = x^2$ だったとしよう。この時に、この f(x) という関数を表すのに、$(x, f(x))$ の組として、

$$(1, 1), (2, 4), (3, 9), (4, 16), \cdots \tag{23}$$

と表しておけば、関数が凸関数の場合、2 次関数という情報は失われない。すなわち、関数は単調なので、それぞれの x の値が決まれば一意的に f(x) の値も一つに決まる。つまり、$(x, f(x))$ の組は 2 次関数を表すのに十分な情報量であるといえる。この様子を Fig.1.8 に示した。一方で、$(x, f(x))$ と同じだけの情報をもった別の表現がないだろうか？例えば、別の表現として、f(x) の傾き $f'(x)$ はどうだろうか？
試しに計算してみると、$f'(x) = 2x$ なので

$$f'(1) = 2, f'(2) = 4, f'(3) = 6, f'(4) = 8, \cdots \tag{24}$$

であり、やはり関数が凸関数のような単調な関数であれば、それぞれの傾きは 1 度しか出てこない。つまり、傾きという別の情報から元の 2 次関数を復元することが出来そうだが、これだと 1 つ問題がある。それは $f(x) = x^2 + 1$ のような y 方向に平行移動した関数を持ってきたとき、定数の微分は 0 であるので 2 つの関数を区別できない。つまり、傾きだけだと y 軸方向の情報が一部失われてしまう。そこで何かもう一つ情報が必要である。そのような情報は一意的に決まるような情報で尚且つ y 軸に関する情報である必要がある。そこで、$f'(x)$ の様々な傾きのうち、 1 つの傾き u を選んで、直線を引いてみる。この直線は f(x) のうち、$(x_0, f(x_0))$ を通るような直線だとしよう。イメージで言えば、Fig.1.9 の赤の直線のうち一番上の直線である。この直線は $(x_0, f(x_0))$ を通るので、直線の方程式は

$$y = u(x - x_0) + f(x_0) \tag{25}$$

となる。そして、この直線の切片を求めるには $x = 0$ を代入すればよく、そのような切片を y_0 とすると、

$$y_0 = -ux_0 + f(x_0) \tag{26}$$

となることはすぐに分かるだろう。そして、このような切片 y_0 を最小化するような x_0 はただ一つしかない。それは図から明らかであるが、Fig.1.9 の赤の直線のうち一番下の直線である。このように傾き u の直線の切片を最小化する x はただ 1 つであり、尚且つ y 軸に関する情報を与えるので、この情報とセットにすればよい事が分かる。よって、以上を纏め、関数 f(x) の Legendre 変換を次のように定める。

Legendre 変換

関数 f(x) に対して、$f^*(u) = \min_x\{f(x) - ux\}$ で定められるような関数 $f^*(u)$ を f(x) の Legendre 変換という。

ここで $\min_x f(x)$ は $f(x)$ 最小にするような x を取るという意味である。これは f(x) が凸関数のような単調な関数であるから言えることであり、複雑な関数で最小値が一意的に定まらないときには情報が失われてしまう事が分かる。長かったが、これで Legendre 変換とは何かが分かったと思うので、次節ではラグランジアンを Legendre 変換してみよう。

1.10 ハミルトニアン・正準方程式

本節ではラグランジアンを Legendre 変換して、独立変数の組を $\{q, \dot{q}\}$ から $\{q, p\}$ に変換する。前節の x の部分が $\dot{q}$ であり、u が p である (表す記号が変わっただけ)。この時、ラグランジアンの Legendre 変換を $H(q, p)$ で表すと

$$H(q, p) = \max_{\dot{q}}\{p\dot{q} - L(q, \dot{q})\} \tag{27}$$

となる。前節と括弧の中身の符号を入れ替え、関数を最大化する形で Legendre 変換しているが、この $H(q, p)$ がハミルトニアンである。動画の講義の中では単に系の力学的エネルギーと説明していたが、実際には長い道のりを経て、ラグランジアンを Legendre 変換したものこそがハミルトニアンである。このまま一気に Hamilton 力学の運動方程式である正準方程式まで導いてしまおう。まず、ラグランジアンの全微分の表式を求める。全微分というのは例えば、2 つの変数からなる関数 $f(x_1, x_2)$ があった時に、関数の微小変化 df を考えると、それぞれの独立変数ごとの寄与で表されるといったものである。すなわち、

$$df(x_1, x_2) = \frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}dx_2 \tag{28}$$

となる。ラグランジアン $L(q, \dot{q})$ は独立変数が $\{q, \dot{q}\}$ なので、全微分は

$$dL(q, \dot{q}) = \frac{\partial L}{\partial q}dq + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} \tag{29}$$

だが、$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ は一般化運動量 p である事と、また Lagrange 方程式が

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial L}{\partial q} = \frac{d}{dt}p \tag{30}$$

であることを用いると、結局、ラグランジアンの全微分は

$$dL(q, \dot{q}) = \dot{p}dq + pd\dot{q} \tag{31}$$

となる。今度はこれをハミルトニアンの全微分の表式に代入する。$\dot{q}$ についての最大化は常に最後に行うとして表式から省き、単に $H(q,p) = p\dot{q} - L(q,\dot{q})$ と表記するとハミルトニアンの全微分は

$$
\begin{aligned}
dH(q,p) &= d(p\dot{q}) - dL && (32)\\
&= \dot{q}dp + pd\dot{q} - (\dot{p}dq + pd\dot{q}) && (33)\\
&= \dot{q}dp - \dot{p}dq && (34)
\end{aligned}
$$

となる。この全微分の表式からも独立変数が $\{q,p\}$ の組になっていることが分かる。そして、全微分は本来、

$$
dH(q,p) = \frac{\partial H}{\partial q}dq + \frac{\partial H}{\partial p}dp \tag{35}
$$

で表されるので、(34),(35) を見比べれば、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial p} &= \dot{q} && (36)\\
-\frac{\partial H}{\partial q} &= \dot{p} && (37)
\end{aligned}
$$

が成り立つ事が分かる。これが**正準方程式**である。今までの Newton の運動方程式や Lagrange 方程式とは少し異なり、対称的できれいな形をしている。Hamilton 力学ではこの正準方程式が系の運動を記述する運動方程式になる。このすぐ後で導出するが、正準方程式で決定された経路はハミルトニアンを一定に保つ事が分かる。

1.11 エネルギー保存則

力学のパートや動画の解説の中では、ハミルトニアンは系の力学的エネルギーであるといった。実際に力学エネルギーになっているかチェックしてみよう。q,p は一般化座標、一般化運動量であるから、ここでは $q = x, \dot{q} = v, p = mv$ を代入し、さらに $L = T - U$ を用いると、

$$
\begin{aligned}
H(q,p) &= p\dot{q} - L(q,\dot{q}) && (38)\\
&= mv^2 - \left(\frac{1}{2}mv^2 - U(x)\right) && (39)\\
&= \frac{1}{2}mv^2 + U(x) && (40)
\end{aligned}
$$

という事で系の力学的エネルギーになっている事が分かる。さらに、力学的エネルギーが保存されているか確認するために、ハミルトニアンの時間変化を計算しよう。

$$
\frac{dH(q,p)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{dp}{dt} \tag{41}
$$

となるが、正準方程式より、

$$
\frac{dH(q,p)}{dt} = -\dot{p}\dot{q} + \dot{q}\dot{p} = 0 \tag{42}
$$

となり、ハミルトニアンは一定に保たれる量である事が分かる。すなわち、力学的エネルギー保存則が導出されるわけである。

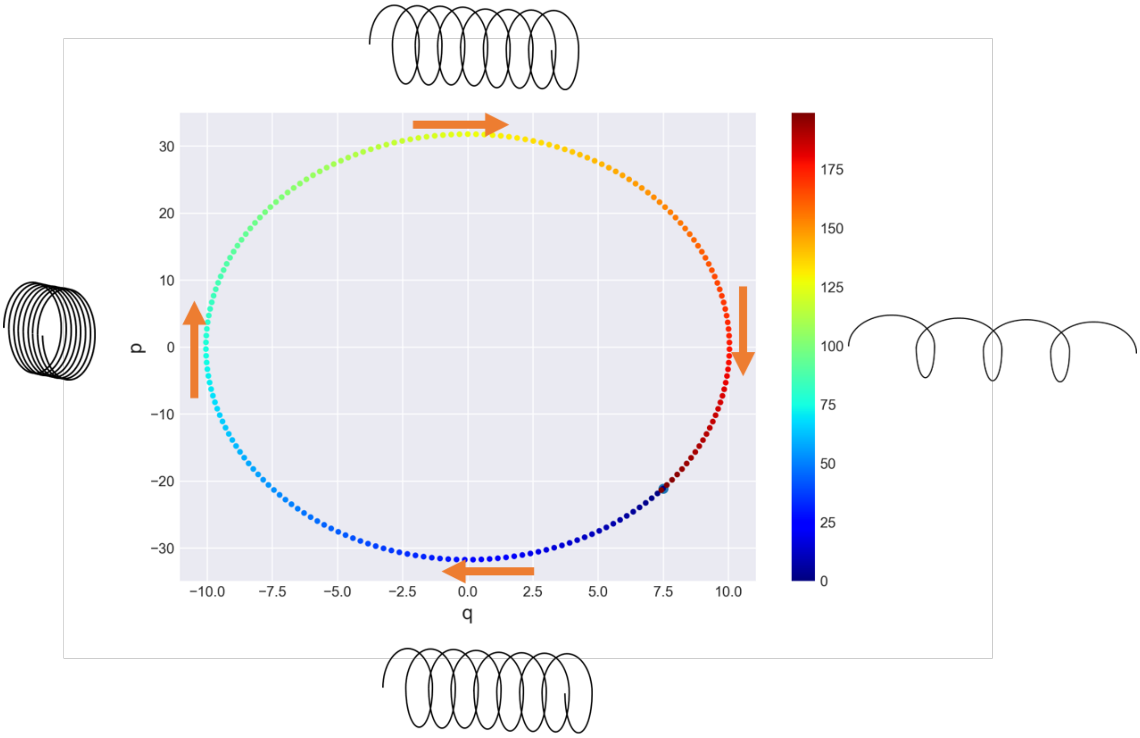

Fig.1.10　バネの運動における位相空間での軌跡。カラーバーは時間 t を表している。

1.12　位相空間

Hamilton 力学では系の運動の記述に $\{q, p\}$ を軸に取った**位相空間**という特別な空間で表す。例えば、バネの運動における位相空間での系の軌跡を Fig.1.10 に示す。バネの運動ではバネを自然な長さから x だけ伸ばして離した時に、力 $F = -kx$ が働く。ここで、k はバネ定数である。すなわち、バネが縮む向きに力が働くが、今度は行き過ぎて x だけ自然な長さよりも縮む。そしてまた x だけ伸びるという振動を周期的に繰り返す。この様子が、Fig.1.10 に描かれている。この時、バネの運動はハミルトニアンを一定に保つような経路で運動を行う。それが Fig.1.10 に描かれた軌跡というわけである。バネのポテンシャルは保存力の定義から、$U(x) = \frac{1}{2}kx^2$ となる事がすぐに分かると思うが、これにより、ハミルトニアン $H(q, p)$ は

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2 \tag{43}$$

となり、楕円の式をしていることが分かると思う。この為、軌跡も位相空間で楕円になっている。

1.13　Hamilton 力学の手続き

最後に、Hamilton 力学での系の運動を決定する手続きを紹介しておく。

Hamilton 力学の手続き

1. 系のハミルトニアンを導く
2. 正準方程式を解き、q,p の時間変化を求める
3. 求めた q,p の軌跡を位相空間にプロットする

このように系のハミルトニアンを構成し、そのハミルトニアンの正準方程式を解き、系の運動を決定する力学の枠組みを Hamilton 力学という。Hamilton 力学が Lagrange 力学に比べて、どう便利なのかは巻末に挙げた専門書を紐解いて欲しい。

1.14 最後に

さて、本節で最後の節となる。非常に長い道のりであったが、以上で全てである。後半は数学的にかなり高度だったかと思うが、いかがだっただろうか？一応、最後にこの 2 つのパートで学んだ事を一通り纏めておこう。本付録ではまず力学のパートからスタートし、位置、速度、加速度など基礎的な用語の紹介から行い、Newton 力学の基礎を学んだ。そして、極座標系では Newton 力学を用いると座標変換が大変であることを実際に計算を通して学んだ。次に、解析力学のパートに入り、力学の捉え方が全く異なる最小作用の原理から別の力学体系である Lagrange 力学が導出された。この最小作用の原理から導かれる Lagrange 方程式は Newton 力学の運動方程式と同じであり、慣性の法則なども自然と導かれた。またラグランジアンを Legendre 変換を通して、ハミルトニアンを導出し、全微分の表式から正準方程式を導いた。最後に、Hamilton 力学では位相空間という q,p による空間で運動が記述され、系の運動はその位相空間の中に、ハミルトニアンを一定にするように軌跡が決まるという Hamilton 力学の枠組みを学んだ。

これら全てを一度で理解するのは難しいと思われるので、何度か繰り返し流れを追ってみてほしい。そうすることで、段々と理解が深まり、それぞれの力学の哲学的な部分を感じ取れるのではないだろうか。

この 2 つのパートで力学と解析力学をある程度解説してきた。概要でも述べた通り、本書の立場では、ハミルトニアンと関係のないところはほとんど飛ばしたので、より詳細を知りたい読者は下の参考書を紐解くとよいだろう。以下に挙げた参考書はどれをとってもかなり本格的な解析力学の教科書となっている。また Legendre 変換については一番下の統計力学の教科書の付録がかなり参考になる。教科書の本編自体も洗練された内容であり、紹介しておく。

参考文献

[1] 原島　鮮, ”力学 *2* 解析力学”(裳華房, 1973)
[2] 須藤 靖, ”解析力学・量子論”(東京大学出版会, 2008)
[3] 前野　昌弘, ”よくわかる　解析力学”(東京図書, 2013)
[4] エリ・ランダウ, ”力学　ランダウ=リフシッツ理論物理学教程”(東京図書, 1986)
[5] 田崎 晴明, ”統計力学¡*2*¿”(培風館, 2008)