

第6章 正準方程式

本章では解析力学における方程式の構造について調べる。実用的な計算のためでなく、数学的な本質に迫るための考察するのだ。数学的な形態を追及しているため、物理現象のしぐみは無視されているかもしれない。しかし、本章で得られる数学記述の美しさが、量子力学や統計力学において活用されることになる。

6.1 循環座標

ラグランジュの運動方程式が与えられ、方程式を解くために拘束条件が設定されているとする。ここでは、ホロノミックな拘束が設定されているとし、散逸関数を必要とする抵抗力の存在は考えないことにする。

問題を解くにあたり、数学記述は一般化座標 q_k を用いるものとする。一般化座標を取り扱うのは、拘束条件を設定しやすいからである。一般化座標における一般化運動量:

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k},$$

の利用価値を考察しよう。例えば、中心力を受けて運動する質点の解析にはカルテシアン座標よりも極座標の方が扱いやすい。極座標を用いると、

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

のように、ラグランジアンが $\dot{\theta}$ を含むが θ を含まない形で記述できることが利点なのだ。ラグランジュの方程式を定義どおりに書くと、

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

なのだが、ラグランジアンに θ が含まれないので、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = p_{\theta} = \text{const},$$

のように、一気に p_θ が決まってしまうのだ。もともと、 $p_\theta = mr^2\dot{\theta}$ だったので、 $\theta = C/r^2$ (C は定数) がわかり、数式から θ を排除して r だけの数式に書き換えれる。そうすると、容易に $r(t)$ が得られるのだ。カルテシアン座標系だと、そんなに簡単にはいかない。

一般化座標に期待する効果は、極座標の例のように、拘束条件によって特定の座標がラグランジアンから姿を消すことだ。拘束条件によって自由度が f になった系では、ラグランジアンは $L(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t)$ となるが、特に注意を要する場合を除き、座標成分を一括にして $L(q, \dot{q}, t)$ と書くことにしよう。

拘束条件によって、ラグランジアンが q_j の依存性をもたない場合、ラグランジュの運動方程式は、

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \text{const},$$

のように変形できる。先ほど極座標の例で見たように、自由度が減れば方程式が簡略化される。そうすると、解の導出が容易になるのだ。この例のように、依存性が脱落した座標成分は**循環座標**と呼ばれる。いうまでもなく、拘束条件によって多くの座標成分が循環座標となる座標系を選ぶことが重要だ。

自由度が f の場合、独立した一般化運動量の成分は f 個だけとることができる。一般化運動量は、 $q_k, \dot{q}_k, t$ の関数である。形式的に書くと、

$$\begin{aligned} p_1 &= p_1(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t), \\ p_1 &= p_2(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t), \\ &\vdots \\ p_f &= p_f(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t), \end{aligned}$$

のような連立方程式とみなすことができる。一般化速度 $\dot{q}_k$ が未知数だとみなせば、これら f この方程式から $\dot{q}_k$ が q_k と t の関数として特定できるはずだ。

中心力による運動 球面座標系を用いて、中心力による運動について考察してみよう。座標として、原点からの距離 r 、天頂角 θ 、方位角 φ を使うことにする。原点 O に中心力の源があると仮定し、位置エネルギーが $U(r)$ で与えられるとする。このとき、ラグランジアンは、

$$L = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta) - U(r),$$

となる。このラグランジアンを座標の時間微分 $\dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\varphi}$ で偏微分することによって、一般化運動量:

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

が得られる。ポテンシャルエネルギーは座標の時間微分についての依存性含んでいないので、 $U(r)$ は運動量に寄与しない。この関係式から一般化座標の時間微分 (速度) は、

$$\dot{r} = \frac{p_r}{m}, \quad \dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2}, \quad \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2 \sin^2 \theta},$$

のように特定できる。これらを用いて運動エネルギーを記述すると、

$$K = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} p_\varphi^2 \right),$$

が得られる。この結果から明らかなように、ラグランジアン $L = K - U$ には φ が含まれないので、方位角 φ は循環座標である。したがって、 p_φ は定数である。中心力による運動におけるこの性質は、ケプラーの法則での面積速度一定の法則に相当する。

6.2 ハミルトンの正準方程式

これまで使ってきたラグランジアンは、エネルギーの次元をもつが、 $L = K - U$ のように運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの差であった。これは、運動の決定を最小化問題に置き換えるためのテクニックである。本節では、全エネルギー $E = K + U$ に相当する数学表現としてハミルトニアンを導入する。

6.2.1 ハミルトニアンの導入

前章で作用積分について考察した際に、ラグランジアンが $L = 2K - E$ であることを利用した。この数式を全エネルギー E を左辺において変形すると、 $E = 2K - L$ が得られる。この関係性に基づいて、

$$H = \sum_k p_k \dot{q}_k - L(q, \dot{q}, t), \quad (6.1)$$

なる量を定義しよう。この量がハミルトニアンと呼ばれる物理量である。右辺の第1項が運動エネルギーの2倍に相当するので、ハミルトニアンは全エネルギーを表現すると期待する。いくつかの例において、全エネルギーが表現されていることを確認しよう。

一次元調和振動子 ある一方向 x に沿って正弦関数にしたがって振動する振動子について考えよう。振動子の質量を m 、振動の角周波数を ω とすると、ラグランジアンと運動量は、

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad p_x = m \dot{x},$$

となるはずだ。これらをハミルトニアンの定義(6.1)に代入すると,

$$H = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad (6.2)$$

が導かれる。右辺の第1項と第2項は、それぞれ、位置エネルギーとポテンシャルエネルギーに相当する。

6.2.2 ハミルトンの原理

ハミルトンの原理は前章で説明した。ラグランジアンの最小化である。本項ではハミルトンの原理を、ハミルトニアンを用いて記述する。既に示したように、ハミルトニアンは,

$$H = 2K - L = 2K - (K - U) = K + U,$$

のように定義されていることから、全エネルギーに相当する。この関係を見ると、前項で定義したハミルトニアンは正しいように思えるのだが、当たり前すぎるところがあって本当に大丈夫なのかと心配になっている。

ラグランジュの運動方程式が、ハミルトンの原理をオイラーの微分方程式で記述した姿だった。今度は、ハミルトンの原理をハミルトニアンで記述したいというのが新たな動機だ。ラグランジュの方程式は、定まった運動 $q_k(t)$ に対して、途中の経路をわずかに変化させたときに、ラグランジアンの時間積分が停留条件を満たす、すなわち、

$$\delta \int L dt = 0,$$

を満たすとの考えで理論を導いた。そのとき微小変化は q_k にだけ与え、 $\dot{q}_k$ の変分は δq_k で得られる値で代用した。

ハミルトニアンは q_k, p_k の関数 (しかも、 t の関数) である。実際の運動は q_k と p_k は全くの独立ではないのだが、それら $2f$ 個の独立な変数をもった関数と考えてみよう。そのような関数を考える上で、それら $2f$ 個の変数を座標軸とする抽象的な $2f$ 次元空間の各点ごとに定まった関数としてハミルトニアンを考えるのだ。その $2f$ 次元空間は位相空間 (phase space) と呼ばれる。例えば、1次元調和振動子の例では、ハミルトニアンは (6.2) で与えられる。全エネルギーを E とすると、ハミルトニアンは、

$$\frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 = E,$$

なる数式に書き換えられる。両辺に $1/E$ を乗じると、この数式は、

$$\frac{p_x^2}{2mE} + \frac{x^2}{E/m\omega^2} = 1,$$

なる形式に書き換えられる。この数式は、 p_x 軸方向に $\sqrt{2mE}$, x 軸方向に $2E/m\omega^2$ の大きさをもつ楕円を表す。つまり、調和振動子の運動は図 6.1 に示すように、2次元の位相空間で楕円を描くのだ。一般的に、運動は $2f$ 次元の位相空間に曲線を描く。運動方程式を得

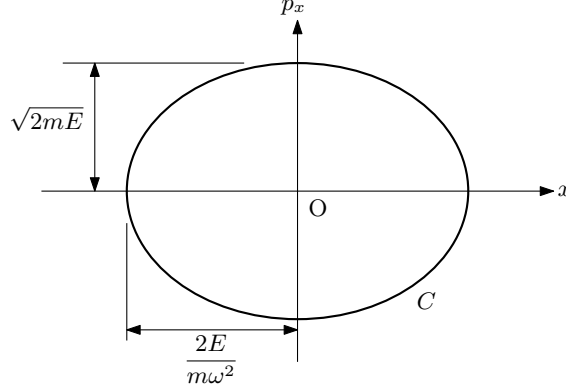


図 6.1: 一次元の調和振動子の位相空間

るには、その曲線から微小に変化した経路を想定するのだ。位相空間が q_k と p_k のように $2f$ この座標成分をもっているので、変分は δq_k と δp_k の $2f$ 個を与えなければならない。その変分に対して調べるのは、ラグランジアンの変分を調べるのだ。

一般的な運動において、ラグランジアンの変分を評価しよう。変分の評価にあたって、本章で導入したハミルトニアンの定義からラグランジアンを取り出そう。つまり、

$$L = \sum_k p_k \dot{q}_k - H,$$

を使って変分を評価する。いささか強引にラグランジアンを取り出した気がするが、この数式を使って、ラグランジアンの変分を計算してみると、

$$\begin{aligned} \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt &= \int_{t_1}^{t_2} \delta L dt = \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_k (\dot{q}_k \delta p_k + p_k \delta \dot{q}_k) - \delta H \right] dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_k \left(\dot{q}_k \delta p_k + p_k \delta \dot{q}_k - \frac{\partial H}{\partial q_k} \delta q_k - \frac{\partial H}{\partial p_k} \delta p_k \right) dt, \end{aligned}$$

が得られる。このうち、被積分関数の第2項について、 $\delta \dot{q}_k = (d/dt)q_k$ の想定で、部分積分を利用して個別に積分を実行すると、

$$\int_{t_1}^{t_2} p_k \delta \dot{q}_k dt = \left[p_k \delta q_k \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \dot{p}_k \delta q_k dt,$$

が得られる。ところが、積分区間の両端 $t = t_1, t_2$ で $\delta q_k = 0$ と考えるので、得られた積分結果の第1項はゼロである。したがって、ハミルトンの原理は、

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_k \left[\left(\dot{q}_k - \frac{\partial H}{\partial p_k} \right) \delta p_k - \left(\dot{p}_k + \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) \delta q_k \right] dt = 0, \quad (6.3)$$

のように数式変形できる。任意の変分 δq_k と δp_k に対してこの数式が成立するには,

$$\frac{dq_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \quad (k = 1, 2, \dots, f), \quad (6.4)$$

が成立しなければならない。この数式が**ハミルトンの正準方程式**である。興味深い形式の数式が得られた。座標と運動量は互いに独立との仮定で数式変形してきたのだが、密接な関係というか、対称性をもった数式が得られた。

ここまでの想定では、ハミルトニアン H は明示的に時間の依存性を含んでいない。ただし、 q_k や p_k に時間の依存性が含まれている。そのとき、 H を時間 t について微分すると、

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{dp_k}{dt} \right),$$

が得られる。この導関数に対して、ハミルトンの正準方程式 (6.4) を適用すると、

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) = 0,$$

が得られる。正準方程式を適用することによって、第1項と第2項が厳密に相殺し、 $\partial H / \partial t = 0$ となるのだ。つまり、明示的な時間依存性を含まなければ、ハミルトニアン H は変化しない。これはローレンツ力を受けて運動する荷電粒子に対しても成立するエネルギー保存則だ。

ハミルトニアン H が時間 t に明示的に依存する状況は、拘束条件が t によって変換する場合、運動座標系を用いる場合である。これらの状況は、外部の系からのエネルギー流入が加わっているので、保存則が成立しなくても当然である。保存則は、エネルギーの源や、エネルギーの流出先までを含めて議論すべきである。

荷電粒子の運動 磁場の中で運動する荷電粒子を、ハミルトニアンを用いて記述しよう。荷電粒子は質量 m 、電荷 e をもっている。座標系として3次元のカルテシアン座標系 $[x, y, z]$ で議論しよう。運動量ベクトルを $[p_x, p_y, p_z]$ 、電磁場のベクトルポテンシャルを $[A_x, A_y, A_z]$ 、さらに、静電ポテンシャルを ϕ とする。ベクトル成分のうち x 成分だけを考えると、正準方程式 (6.4) の第1式は、

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{1}{m}(p_x - eA_x),$$

のように書ける。この数式の両辺に m を乗じると、

$$p_x - eA_x = m\dot{x},$$

なる関係が導かれる。一方、正準方程式の第2式は、

$$\begin{aligned} \frac{dp_x}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x} \\ &= \frac{e}{m} \left[(p_x - eA_x) \frac{\partial A_x}{\partial x} + (p_y - eA_y) \frac{\partial A_y}{\partial y} + (p_z - eA_z) \frac{\partial A_z}{\partial z} \right] - e \frac{\partial \phi}{\partial x}, \end{aligned}$$

のように書ける。この数式について、運動量を表す $p_x - eA_x = m\dot{x}$ (と他の成分) を利用すると、

$$\frac{d}{dt}(m\dot{x} + eA_x) = e \left(\dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial y} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial z} \right) - e \frac{\partial \phi}{\partial x},$$

が得られるのだが、左辺の第2項に注意が必要だ。ベクトルポテンシャル A_x が x, y, z の関数だが、その座標成分は t の関数だと認識する必要がある。その注意のもとで A_x を t について偏微分すると、

$$\frac{\partial A_x}{\partial t} = \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial y} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial z} + \frac{\partial A_x}{\partial t},$$

となるのだ。この結果を使って x 成分について数式を整理すると、

$$m\ddot{x} = -e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) + e (\dot{\mathbf{r}} \times \nabla \times \mathbf{A})_x,$$

が得られる。同様の数式が y, z 成分についても得られるので、まとめると、

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -e \left(\nabla \phi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) + e (\dot{\mathbf{r}} \times \nabla \times \mathbf{A}) = e (\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}),$$

が得られる。これは紛れもなく、ローレンツ力による運動を表現している。

例を示して明らかになったように、ハミルトンの正準方程式は運動方程式の一形態である。このような形式で数式表現することに利点があるのだが、それについては次節で説明する。

6.3 位相空間における運動

自由度が f となるように拘束された条件において、物体の運動は、座標 q_k と運動量 p_k による $2f$ 次元の位相空間での曲線として記述できることを述べた。本節では、位相空間における運動の振る舞いをさらに考察する。

6.3.1 運動の記述

ハミルトニアンが明示的に時間を含まないものとし、 $H(q, p)$ のように $2f$ 次元の位相空間中の点に対応した値をとると仮定しよう。初期条件として、 $t = 0$ におけるすべての質点の座標と運動量が与えられたとする。その初期条件は、位相空間中の1点の座標を一意的に選んだことに相当する。そのとき、その点における H の値だけでなく、 $\partial H / \partial p_k$ や

$\partial H/\partial q_k$ も一意的に定まる。ということは、その後の微小時間 Δt に対応する微小変化 Δq_k や Δp_k も一意的に定まる。具体的に書くと、

$$\Delta q_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \Delta t, \quad \Delta p_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \Delta t, \quad (6.5)$$

となる。初期状態から微小時間 Δt の経過で変化量を積み重ねていくと、任意の時刻において位相空間中のどの場所に物体が存在するか特定できる。物体が存在する位相空間の位置を $[q, p]$ ($2f$ 次元の座標) とすると、物体は時間経過とともに、

$$H(q, p) = E, \quad (6.6)$$

で表される曲線を描く。ここで、エネルギー保存則が成立するため、右辺の E は定数である。この数式によって、自由度が1個だけ減少するので、物体の運動は $2f - 1$ 次元となる¹。すなわち、物体は $2f$ 次元中の超曲面上を運動するのだ。

一次元の調和振動子 位相空間内の運動を調べる対象として1次元の調和振動子を取り扱おう。この例であれば2次元の位相空間で表現できるので、例として最適である²。この場合のハミルトンの正準方程式は、

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} p_x, \quad \frac{dp_x}{dt} = -m\omega^2 x,$$

であり、(6.6) は図 6.1 に示す楕円を与えるはずだ。

初期状態として、 $t = 0$ のとき、 $x = x_0$, $p_x = 0$ としよう。この条件は、位相空間上の点 $P [x_0, 0]$ を始点とすることに相当する。例えば、 $x_0 > 0$ とすると、微小時間 Δt の間に移動する量は、

$$(\Delta x)_1 = \frac{p_x}{m} \Delta t = 0, \quad (\Delta p_x)_1 = -m\omega^2 x_0 \Delta t < 0,$$

であるので、位相空間における点は初期位置 P から下方に動くのだ。さらに微小時間 Δt だけ時間を経過させ、同様の手順で、位相空間における点の移動を追跡できる。結果的に、図 6.2 に示すように、位相空間中の楕円を時計回りに周回する動きが得られる。

ハミルトニアン $H(q, p, t)$ が明示的に時間 t に依存する場合、位相空間中の同じ点 $[q, p]$ においても、 H や $\partial H/\partial t$ が t によって異なるので、初期状態の $[q, p]$ が定まっても、 t によって位相空間中に異なる経路を描く。とはいえ、経路を決定する考え方は上の同じであり、そのときの $\partial H/\partial q_k$ や $\partial H/\partial p_k$ によって経路が決まる。したがって、初期時条件として、時刻 t と座標と運動量 $[q, p]$ を与えれば、その後の運動は一意的に決まるのだ。

¹完全に1次元の変数がなくなるわけではない。三次元空間における曲面のような状態と思えばよい。

²空間次元が2次元以上になると、位相空間が4次元以上になるので紙面で表現できない。

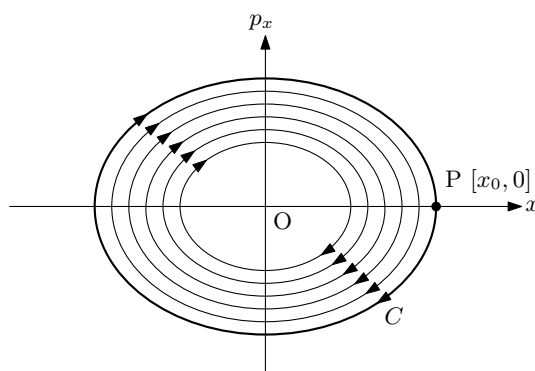


図 6.2: 一次元の調和振動子の位相空間中の運動

一意的に決まるということは、運動経路は枝分かれをすることはないということだ。つまり、同一時刻に位相空間中の任意の1点を通る運動経路は二つ以上存在しない。位置座標 $q_1, q_2, \dots, q_f$ のみでは、日常からわかるように、任意の1点を通る運動経路は無数に想定できる。しかし、運動量 $p_1, p_2, \dots, p_f$ を座標に加えて、 $2f$ 次元の位相空間を考えると、異なる運動経路どうしが交差することがないのだ。例えば、1次元の調和振動子は、位置座標 x のみを考えると、どの振動子も原点を通るのだが、運動量を追加した位相空間を考えると、異なる振動子の運動は、原点を中心とする異なる楕円(図 6.2)を時計回りにたどる経路を描く。このような楕円は無数に想定することができるが、互いに交わることはない。

ハミルトニアンと位相空間を用いた議論は、物体の運動をニュートンやラグランジュの運動方程式とは異なる視点で見ることができる。ニュートンやラグランジュの運動方程式は、 t についての2階の微分方程式であるので、運動を特定するために位置と速度の初期条件が必要である。それに対し、ハミルトニアンは座標を $q_1, q_2, \dots, q_f$ と $p_1, p_2, \dots, p_f$ の $2f$ 個の座標成分を必要とする代わりに、方程式が t についての1階の微分方程式になっている。そのため、位相空間中の初期位置だけ与えれば運動が特定できるのだ。ただし、位相空間中の初期位置には、初期運動量が含まれ、初期運動量は初速度で決まる量なので、ハミルトニアンを用いる議論はニュートンやラグランジュの微分方程式によるアプローチと等価である。

正準方程式(6.4)は、位相空間の各点で、時間に関する導関数 $[\dot{q}_k, \dot{p}_k]$ を与える。それは位相空間における速度とみなせるので、流体における流速の場に類似している。質点の初期条件を与えて運動を解析することは、流線に沿った流体の動きを解析することに相当する。

6.3.2 リウビルの定理

質点は運動するとともに、位置 q_k や運動量 p_k が時間経過とともに変化するので、位相空間中の運動として解釈することができる。初期状態として、位相空間中の有限の領域に含

まれる質点の運動を追跡すると、時間経過とともに、その領域は位置や形を変えるだろう。とはいえ、その運動が正準方程式 (6.4) にしたがうなら、その領域は体積が不変である。その性質はリウビルの定理と呼ばれる。

リウビルの定理を示すため、第 k 番目の座標成分 q_k と運動量 p_k に着目しよう。他の成分についても同様の議論が成立すると考えればよい。図 6.3 に示すように、初期状態として、位相空間中の長方形の領域 ABCD に存在する質点を考えよう。その領域は、微小時間 Δt の経過によって、領域 A'B'C'D' に移動したとする。領域 ABCD に含まれるあらゆる点

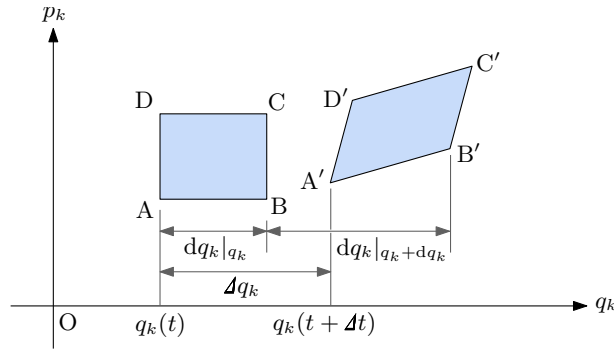


図 6.3: 運動による位相空間中の領域の変化

が、微小時間 Δt を経過した後、領域 A'B'C'D' に移動するという意味だ。ここで、点 A の位相空間における位置を $[q_k, p_k]$ とする。このとき、AA' の水平距離 $\Delta q_k|_{q_k}$ は、

$$\Delta q_k \Big|_{q_k} = \frac{\partial q_k}{\partial t} \Big|_{q_k} \Delta t = \frac{\partial H}{\partial p_k} \Big|_{q_k} \Delta t,$$

で与えられる。右辺の導出には正準方程式 (6.4) を適用した。さらに、 $AB = dq_k$ とすれば、BB' の水平距離 $\Delta q_k|_{q_k + \Delta q_k}$ は、

$$\Delta q_k \Big|_{q_k + \Delta q_k} = \frac{\partial H}{\partial p_k} \Big|_{q_k + \Delta q_k} \Delta t = \left(\frac{\partial H}{\partial p_k} \Big|_{q_k} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial q_k} dq_k \right) \Delta t,$$

となる。したがって、領域 ABCD の水平方向の長さは、微小時間 Δt の経過に伴い、

$$\delta \Delta q_k = \Delta q_k \Big|_{q_k + \Delta q_k} - \Delta q_k \Big|_{q_k} = \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_k} dq_k \cdot \Delta t,$$

だけ伸びる。同様の考察をすれば、領域 ABCD の垂直方向の伸びは、

$$\delta \Delta p_k = - \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_k} dp_k \cdot \Delta t,$$

となるはずだ。この伸びの量に負の符号がついているのは、特別な意図があるわけではなく、正準方程式から素直に計算した結果である。つまり、領域 ABCD は、水平方向が伸びれば、

垂直方向に縮むのだ。簡単のため、初期状態における領域 ABCD が長方形すると、微小時間 Δt が十分に小さいならば、移動先の領域 A'B'C'D' も、ほぼ長方形と考えてもよい³。したがって、領域 A'B'C'D' の面積は、

$$\begin{aligned} S_{A'B'C'D'} &= \left(1 + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_k} \Delta t\right) dq_k \cdot \left(1 - \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_k} \Delta t\right) dp_k \\ &= dq_k dp_k = S_{ABCD}, \end{aligned}$$

となることが導かれる。ここで高次の微小量は無視した。つまり、微小時間を経ても位相空間中の領域の面積は不変である。他の成分についても同様であるので、位相空間中の領域の体積は不変であるといえる。任意時刻への運動は、微小時間における運動の積分であるので、結局、位相空間中の領域の体積は不変のままである。したがって、リウビルの定理が得られる。

リウビルの定理 位相空間内に考えた有限の領域内に存在する各点が正準方程式にしたがって運動する場合、その領域の形は変化していくが、体積は不変に保たれる。

リウビルの定理が主張することは、位相空間における点密度が時間経過に対して一定であるということだ。上で説明した例において、領域 ABCD が運動によって領域 A'B'C'D' に変化するとき、領域 ABCD に含まれていた点がすべて領域 A'B'C'D' に含まれるということだ。つまり、時刻 $t = 0$ において領域 ABCD に含まれる点の数と、その領域から変化した領域 A'B'C'D' に含まれる点の数は等しい。しかも、それらの領域の体積が等しいため、点密度は時間経過によらず一定であるということだ。そのような性質は、統計力学では重要な性質として認識されている。

6.4 ポアソン括弧式

解析力学において、座標 q_k と運動量 p_k は単なる物理量に収まらず、重要な役割をもっている。その事実がポアソン括弧式と呼ばれる数式に現れる。本節ではポアソン括弧式を定義し、その性質を調べていこう。

³ 辺 A'D' が垂直方向に対して微小角 $\delta\theta$ だけ傾いたと仮定すると、 $\cos \delta\theta \simeq 1 - \delta\theta^2/2$ のように、2 次の差分しか現れないため、 $\cos \delta\theta = 1$ と考えてもよい。

6.4.1 括弧式の定義

解析力学では, 座標, 運動量, 時間の関数で記述される量は力学変数と呼ばれる。力学変数の代表例が, 運動エネルギー K , 角運動量 $\mathbf{L}$ である。力学変数は, 運動に伴って時間経過とともに変化する。例えば, 一般の力学変数 F の時間変化の割合を調べるには, 時間微分すればよいので,

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_k \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial F}{\partial p_k} \dot{p}_k \right),$$

なる計算を実行することになる。右辺に含まれる $\dot{q}_k$ と $\dot{p}_k$ について正準方程式 (6.4) を適用すると, 時間微分は,

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_k \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right),$$

のように変形できる。興味深いことに, q_k と p_k に含まれる時間依存性がハミルトニアン H の偏微分で記述できるのだ。

数式 (6.4.1) の右辺の第2項の数式構造は, 解析力学において, しばしば現れる。頻繁に現れるのなら, 総和記号や偏微分記号を省略した記述:

$$[u, v] = \sum_k \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial v}{\partial q_k} \right), \quad (6.7)$$

を定義しよう。この数式が**ポアソン括弧式**である。当然, u と v は力学変数である。ポアソン括弧式を用いると, 力学変数 F の時間微分は,

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [F, H],$$

のような簡単な数式で表現できる。特に, F が明示的に時間の依存性を含んでいない場合, $dF/dt = [F, H]$ となるので, $[F, H] = 0$ であれば F は時間が経過しても常に一定値をとるということだ。

中心力場を運動する物体の角運動量について, 時間微分を考えてみよう。中心力が時間依存をもっていないと仮定しよう。そのとき, 上で書いたように, 時間微分はポアソンの括弧式と等しい。角運動量の x 成分 l_x について, 形式的にポアソンの括弧式を展開すると,

$$\frac{dl_x}{dt} = \frac{\partial l_x}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p_x} - \frac{\partial l_x}{\partial p_x} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial l_x}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p_y} - \frac{\partial l_x}{\partial p_x} \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial l_x}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p_z} - \frac{\partial l_x}{\partial p_x} \frac{\partial H}{\partial z},$$

が得られる。角運動量の x 成分は, $l_x = yp_z - zl_y$ なので, その偏微分は,

$$\begin{aligned} \frac{\partial l_x}{\partial x} &= 0, & \frac{\partial l_x}{\partial y} &= p_z, & \frac{\partial l_x}{\partial z} &= -p_y, \\ \frac{\partial l_x}{\partial p_x} &= 0, & \frac{\partial l_x}{\partial p_y} &= -z, & \frac{\partial l_x}{\partial p_z} &= y, \end{aligned}$$

となる。一方、ハミルトニアンが $H = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m + U(r)$ であることに注意すると、

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial x} &= \frac{\partial U}{\partial x} = \frac{x}{r} \frac{\partial U}{\partial r}, & \frac{\partial H}{\partial p_x} &= \frac{p_x}{m}, \\ \frac{\partial H}{\partial y} &= \frac{\partial U}{\partial y} = \frac{y}{r} \frac{\partial U}{\partial r}, & \frac{\partial H}{\partial p_y} &= \frac{p_y}{m}, \\ \frac{\partial H}{\partial z} &= \frac{\partial U}{\partial z} = \frac{z}{r} \frac{\partial U}{\partial r}, & \frac{\partial H}{\partial p_z} &= \frac{p_z}{m},\end{aligned}$$

が得られる。これらの偏微分を代入すると、

$$[l_x, H] = \frac{p_z p_y - p_y p_z}{m} + \frac{zy - yz}{r} \frac{\partial U}{\partial r} = 0,$$

であることがわかる。この結果は、 $dl_x/dt = 0$ であることを意味する。他の成分 (y 成分と z 成分) も同様なので、結局、 $d\mathbf{l}/dt = 0$ ということだ。つまり、角運動量 $\mathbf{l}$ は保存量である。

特別な場合として、力学変数 F としてハミルトニアン H を選んだ場合も考えてみよう。その場合、 H の時間微分は、

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + [H, H] = \frac{\partial H}{\partial t},$$

となる。ポアソンの括弧式の定義から $[H, H] = 0$ であることは容易に理解できるだろう。つまり、 H が明示的に時間の依存性を含んでいなければ、すなわち、 $\partial H/\partial t = 0$ であれば、 H は保存量となる。これはエネルギー保存則に相当する。

ポアソンの括弧式の力学的変数としてハミルトニアンを選んだのと同様に、座標や運動量を選んでもよい。括弧式の二つの変数のうち、一方を座標か運動量に設定した場合、

$$[u, p_j] = \frac{\partial u}{\partial q_j}, \quad [u, q_j] = -\frac{\partial u}{\partial p_j}, \quad (6.8)$$

なる性質を示す。これらの公式を証明するのは容易である。第1の公式は、

$$[u, p_j] = \sum_k \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \right) = \sum_k \frac{\partial u}{\partial q_k} \delta_{jk} = \frac{\partial u}{\partial q_j},$$

とすればよい。第2の公式も同様に、

$$[u, q_j] = \sum_k \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial q_j}{\partial q_k} \right) = -\sum_k \frac{\partial u}{\partial p_k} \delta_{jk} = -\frac{\partial u}{\partial p_j},$$

のようにして証明できる。これらの公式を証明するにあたり、座標 q_k と運動量 p_k が互いに独立、すなわち、

$$\frac{\partial q_k}{\partial q_j} = \delta_{kj}, \quad \frac{\partial p_k}{\partial p_j} = \delta_{kj}, \quad \frac{\partial q_k}{\partial p_j} = \frac{\partial p_k}{\partial q_j} = 0,$$

であることを利用した。これらの独立性を表す関係式に注意すれば,

$$[q_k, q_j] = 0, \quad [p_k, p_j] = 0, \quad [q_k, p_j] = \delta_{kj}, \quad (6.9)$$

なる関係式も得られる。手順が先ほどと同様であり、容易に証明できるので、その手順を示すことは省略する。ポアソンの括弧式は、量子力学では演算子の交換関係に姿を変えて登場する。関係式 (6.9) は、量子力学では不確定性原理を表現する重要な公式に相当する。

6.4.2 点変換に対する不変性

ポアソンの括弧式は点変換に対して不変である。点変換とは、いわゆる座標変換である。つまり、座標のとり方に関係なく、ポアソンの括弧式が一定ということは、ポアソンの括弧式が物理的に本質的な量であると考えてよさそうだ。

一般化座標 $q_1, q_2, \dots, q_f$ から別の座標 $q'_1, q'_2, \dots, q'_f$ に変換することを考えよう。できるだけ一般的な座標変換を考え、線形変換にとらわれないことにする。新座標は、

$$q'_k = q'_k(q_1, q_2, \dots, q_f, t),$$

のような形、あるいは、その逆変換:

$$q_k = q_k(q'_1, q'_2, \dots, q'_f, t),$$

で記述できるとする。いくら任意の変換といっても、1対1対応でなければ都合が悪いので、1対1対応できる関数に限ることにする。新たな一般化座標も、当然、時間で微分することができ、

$$\dot{q}'_k = \dot{q}'_k(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t) = \frac{\partial q'_k}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial q'_k}{\partial q_j} \dot{q}_j, \quad (6.10)$$

のように記述できる。座標の変換では、 q_j と t にしか依存していなかったが、 $\dot{q}'_k$ の変換では $\dot{q}_j$ の依存性も含まれていることに注意が必要だ。この変換は、

$$\dot{q}_k = \dot{q}_k(q'_1, \dots, q'_f, \dot{q}'_1, \dots, \dot{q}'_f, t) = \frac{\partial q_k}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial q_k}{\partial q'_j} \dot{q}'_j, \quad (6.11)$$

のように逆変換の形で書いてもよい。このような点変換によって、ラグランジアン $L(q, \dot{q}, t)$ は $L'(q', \dot{q}', t)$ のように変わる。とはいっても、ラグランジアンはエネルギーを表すので、点変換によって値が変わるわけではなく、 $L' = L$ である。新しいラグランジアン L' は、

$$p'_k = \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}'_k},$$

のように, 変換後の座標 q'_k に共役な運動量 p'_k を生成する。運動量は, 解析学の公式を用いると,

$$p'_k = \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}'_k} = \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{q}'_k} = \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{q}'_k} p_j, \quad (6.12)$$

なる変換式が導かれる。しかも, 興味深いことに,

$$\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial q_k}{\partial q'_j}, \quad (6.13)$$

なる関係が成立する。この関係は, (6.11) に注目すればよい。座標変換は非線形も許容していたのだが, (6.10) や (6.11) のように, $\dot{q}_k$ や $\dot{q}'_k$ についての依存性が1次なので, このような等式が成立するのだ。しかも, $\dot{q}$ についての依存性は, もはや含まれない。運動量 (6.12) についても同様に p_j で偏微分すると,

$$\frac{\partial p'_k}{\partial p_j} = \frac{\partial q_j}{\partial q'_k}, \quad (6.14)$$

が得られる。ここで, 運動量の変換と座標の変換が逆変換の関係になっている⁴ ことに注意が必要である。

座標変換によるポアソンの括弧式の振る舞いを考察しよう。力学変数 u と v を新たな座標系で, それぞれ, u' と v' のように記述することにしよう。そのとき, ポアソンの括弧式は,

$$[u', v'] = \sum_k \left(\frac{\partial u'}{\partial q'_k} \frac{\partial v'}{\partial p'_k} - \frac{\partial u'}{\partial p'_k} \frac{\partial v'}{\partial q'_k} \right),$$

のように書けるはずだ。ポアソンの括弧式に含まれる偏微分に座標変換を適用すると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u'}{\partial q'_k} &= \sum_j \frac{\partial u}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial q'_k} + \sum_j \frac{\partial u}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial q'_k}, \\ \frac{\partial v'}{\partial p'_k} &= \sum_i \frac{\partial v}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial p'_k}, \end{aligned}$$

が得られる。第1式には $\partial p_j / \partial q'_k$ の項が含まれるが, 第2式には $\partial q_j / \partial p'_k$ の項が含まれない。それは, p_j に q'_k の依存性が含まれるが, q_j には p'_k の依存性が含まれないからだ。これら偏微分の変換式を利用してポアソン括弧式の右辺の第1項を計算すると,

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{\partial u'}{\partial q'_k} \frac{\partial v'}{\partial p'_k} &= \sum_k \left(\sum_j \frac{\partial u}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial q'_k} + \sum_j \frac{\partial v}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial q'_k} \right) \sum_i \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial p'_k} \\ &= \sum_k \sum_i \sum_j \left(\frac{\partial u}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial q'_k} \frac{\partial v}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial p'_k} - \sum_j \frac{\partial u}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial q'_k} \frac{\partial v}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial p'_k} \right) \end{aligned}$$

⁴この事実は, テンソルの知識があれば明らかである。運動量がスカラであるラグランジアン L を速度 $\dot{q}$ で偏微分することによって得られているので, 速度の変換と運動量の変換は逆変換の関係になる。

$$\begin{aligned}
&= \sum_k \sum_i \sum_j \left(\frac{\partial u}{\partial q_j} \frac{\partial v}{\partial p_i} \frac{\partial q_j}{\partial q'_k} \frac{\partial q'_k}{\partial q_i} - \sum_j \frac{\partial u}{\partial p_j} \frac{\partial v}{\partial p_i} \frac{\partial p_j}{\partial q'_k} \frac{\partial q'_k}{\partial q_i} \right) \\
&= \sum_i \sum_j \left(\frac{\partial u}{\partial q_j} \frac{\partial v}{\partial p_i} \frac{\partial q_j}{\partial q_i} - \sum_j \frac{\partial u}{\partial p_j} \frac{\partial v}{\partial p_i} \frac{\partial p_j}{\partial q_i} \right) = \sum_j \frac{\partial u}{\partial q_j} \frac{\partial v}{\partial p_j},
\end{aligned}$$

のように計算できる。第1行目から第2行目への変形には、直前に計算した導関数の変換を適用した。第3行目への変形では、(6.14)を利用した。右辺への数式変形には、 $\partial q_j / \partial q_i = \delta_{ij}$, $\partial p_j / \partial q_i = 0$ なる関係に注意した。一方、同様の手順によって、

$$\sum_k \frac{\partial u'}{\partial p'_k} \frac{\partial v'}{\partial q'_k} = \sum_j \frac{\partial u}{\partial p_j} \frac{\partial v}{\partial q_j},$$

であることが示せる。したがって、

$$[u', v'] = [u, v], \quad (6.15)$$

が成立する。つまり、ポアソン括弧式は点変換に対して不変である。言い換えると、ポアソン括弧式は、座標の設定に依存しない物理量を表現している。つまり、ポアソン括弧式は本質的な物理量を与えると考えてよいだろう。

6.5 正準変換

一般化座標と共役な運動量を変数変換することによって、循環座標を増やすなど、取り扱いが簡単な系をつくることができる。そのような変数変換は正準変換と呼ばれる。

6.5.1 位相空間中の点変換

前節で確認したように、一般化座標 q_k から q'_k への点変換はポアソン括弧式 $[u, v]$ を不変に保つ。このとき、ハミルトンの正準方程式は、

$$\frac{dq_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_k},$$

から、変換後の位相空間中の座標 $[q', p']$ に対応し、

$$\frac{dq'_k}{dt} = \frac{\partial H'}{\partial p'_k}, \quad \frac{dp'_k}{dt} = -\frac{\partial H'}{\partial q'_k},$$

に変換される。変換の前後の数式は、変数にプライム (') が付加されただけであり、同じ数式である。

自由度が f の位相空間は $2f$ 次元空間であるが、点変換は $q_1, \dots, q_f$ の f 個の変数を変換しただけにすぎず、運動量 $p_1, \dots, p_f$ は q_k につられて変換されたにすぎない。それに対して、 p_k を自由変換することはできないかを考えてみよう。もっとも、 q_k と無関係に p_k を変換すると、正準方程式やポアソン括弧式を不変に保つことができなくなる。そうすると、物理的に意味がない形になる。とはいえ、点変換より自由な変換が可能かどうか考察してみよう。

考察のための簡単な例として、1次元の調和振動子を調べてみよう。調和振動子のハミルトニアンは、

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

で与えられる。このハミルトニアンが $H = E$ なる定数とすると、位相空間中に楕円を描く。ここで、楕円を円にするような変換を考えよう。とは言っても、単純に $q \equiv m\omega x$ とすればよいわけではない。なぜならば、そのような定義のもとで、正準方程式が、

$$\dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{q}{m} = -\omega x,$$

のように、実際の $\dot{p}_x$ と異なる結果を導くからだ。つまり、 $q \equiv m\omega x$ はハミルトニアンに円を描かせる、正準方程式がうまく機能しないのだ。その意味で、慎重に変換を選ばなければならない。変換の候補として、

$$q \equiv \gamma x,$$

を考えよう。ここで、 γ は未知数であり、これからの考察の結果として決定のだ。この変換のもとでは、ラグランジアン L は、

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m}{2}\omega^2 x^2 = \frac{m}{2\gamma^2}(\dot{q}^2 - \omega^2 q^2),$$

のように書き換えられる。ラグランジアン L によって、運動量 p が、

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{m}{\gamma^2}\dot{q},$$

となるので、速度 $\dot{q}$ は、

$$\dot{q} = \frac{\gamma^2}{m}p,$$

である。処方箋にしたがってハミルトニアンを計算すると、

$$H = p\dot{q} - L = p \cdot \frac{\gamma^2}{m}p - \frac{m}{2\gamma^2} \left(\frac{\gamma^2}{m}p \right)^2 + \frac{m}{2\gamma^2}\omega^2 q^2 = \frac{\gamma^2}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2\gamma^2}q^2,$$

が得られる。このハミルトニアンが新しい位相空間 (qp 平面) で円を描くためには、

$$\frac{\gamma^2}{2m}p^2 = \frac{m\omega^2}{2\gamma^2},$$

でなければならない。ここで未知数 γ が決定できるわけだ。すなわち、未知数 γ は、

$$\gamma = \sqrt{m\omega}, \quad (6.16)$$

であるべきことが導かれた。したがって、

$$q = \sqrt{m\omega} x \quad p = \sqrt{\frac{m}{\omega}} \dot{x} = \frac{1}{\sqrt{m\omega}} p_x, \quad (6.17)$$

のように変換すれば、ハミルトニアン H は、

$$H = \frac{\omega}{2}(p^2 + q^2), \quad (6.18)$$

となる。確かに、円を描く関数になっている。得られたハミルトニアンが、正準方程式によって、意味のある $\dot{q}$ と $\dot{p}$ を導いてくれるかが問題だ。正準方程式を用いて $\dot{q}$ と $\dot{p}$ を計算すると、

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

が得られるわけだが、(6.17) に注意して、変数を x と p_x に戻すと、

$$\dot{x} = \frac{1}{m} p_x, \quad \dot{p}_x = -m\omega^2 x,$$

のように、変換前と同一の数式に戻った。つまり、座標変換 (6.17) が、ハミルトニアンが円を描くだけでなく、正準方程式も一貫して成立させていることを意味する。

得られた変換によってハミルトニアンが円を描くようになった。全エネルギーを E とすると、その円の半径は $\sqrt{2E/\omega}$ となる。しかも、図 6.4 に示すように、 p 軸を水平方向に、 q 軸を垂直方向にとると、時間経過に伴って運動軌跡は円周を反時計回りにまわるので、数学記述の上で都合だ。図 6.1 では運動量を縦軸にとっていたので、数学的取り扱いを優

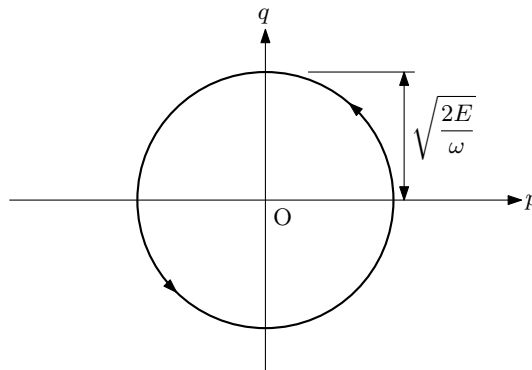


図 6.4: 点変換 (6.17) による 1 次元調和振動子の位相空間

先し、座標軸のとり方を逆にしたわけだ。容易にわかるように、 $\dot{q} = \omega p$ と $\dot{p} = -\omega q$ の組み合わせは、等速円運動に相当する。

位相空間を思い切って、極座標に変換するとどうだろう？ つまり、2次元座標 $[p, q]$ を極座標系 $[P, Q]$ に変換する。その変換は、

$$P = \sqrt{p^2 + q^2}, \quad Q = \arctan \frac{q}{p}, \quad (6.19)$$

で与えるとよいだろう。このように定義すると、ハミルトニアンは、

$$\tilde{H} = \frac{\omega}{2} P^2,$$

となるのだが、このハミルトニアンに正準方程式を適用すると、

$$\dot{Q} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P} = \omega P, \quad \dot{P} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q} = 0,$$

のように誤った結果が得られるのだ。つまり、この P と Q は正準方程式と一貫性がないのだ。もともと、 Q は位相空間における位相角であり、位相空間で等速円運動をするはずだったので、 $\dot{Q} = \omega$ を期待していた。実際に (6.19) を時間微分すると、

$$\dot{Q} = \frac{\dot{q}p - q\dot{p}}{p^2 + q^2},$$

が得られ、この導関数に $\dot{q} = \omega p$ と $\dot{p} = -\omega q$ を代入すると、確かに $\dot{Q} = \omega$ が得られる。それならば、 $\dot{Q} = \omega$ を前提条件にして、正準方程式が成立するような P を特定しよう。正準方程式によって、

$$\dot{Q} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P} = \omega,$$

となるはずなので、単純に $\tilde{H} = \omega P$ としてみよう。もう一方の正準方程式が、

$$\dot{P} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q},$$

であり、この数式に $\tilde{H} = \omega P$ を代入すると、 $\dot{P} = 0$ が導かれる。すなわち、 P は定数だ。これは、直接的にハミルトニアンの時間微分がゼロであることも意味するので、エネルギー保存則と矛盾しない。得られた結果を書くと、

$$Q = \arctan \frac{q}{p}, \quad P = \frac{1}{2}(p^2 + q^2), \quad \tilde{H} = \omega P, \quad (6.20)$$

のように変換式とハミルトニアンが特定された。この結果を見ると、 ω も P 定数だから、確かにハミルトニアン H が定数になっている。新たに得られた位相空間 $[Q, P]$ を描くと図 6.5 が得られる。この位相空間における運動は、 Q 軸に平行に等速直線運動である。この結果にたどり着くまでには、実際の物理現象に忠実な x と p_x から始め、それらが位相空間中で描く楕円を円になるように q と p に変換し、さらに、 P と Q に変換したわけだ。ここで、 P を Q を本来の物理量 x と p_x を用いて書くと、

$$Q = \arctan \frac{m\omega x}{p_x}, \quad P = \frac{p_x^2 + m^2\omega^2 x^2}{2m\omega}, \quad (6.21)$$

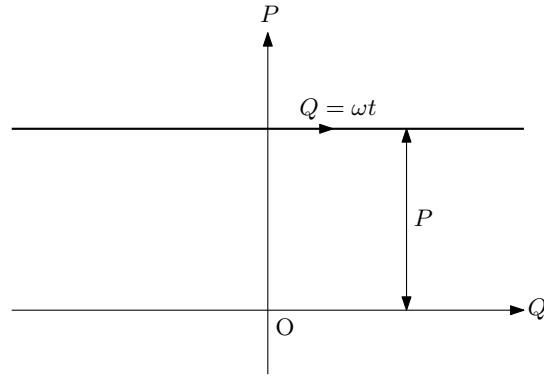


図 6.5: 点変換 (6.20) による 1 次元調和振動子の位相空間

のようになる。形式上, P は一般化運動量と呼ぶべきかもしれないが, このように変換すると P が実質的に運動量として機能するとはいいいがたい。なにしろ, (6.21) に示すように, Q と P の双方に x と p_x が混在して影響しているのだ。とはいえ, うまく変換してやれば, 必要な座標軸を減らせることを例をもって示すことができた。

作用変数と角変数 一次元の調和振動子の位相空間は, $[x, p_x]$ での表現では楕円を描いていた。その楕円の面積を評価してみよう。その面積は,

$$S = \oint p_x dx,$$

なる積分で計算できる。ここで, 位相空間中の楕円を 1 周する区間を積分する意味で周回積分の記号を用いた。調和振動子の振幅を A とすると, 実際の計算としては, 時間 t の経過とともに, x を A から $-A$ まで減少させながら積分し, その後, x を $-A$ から A まで増加させながら積分する。ここで, 調和振動子の位置が $x = A \sin(\omega t + \phi)$ で与えられるとすると,

$$dx = A\omega \cos(\omega t + \phi) dt, \quad p_x = mA\omega \cos(\omega t + \phi),$$

周回積分 S は,

$$S = \oint p_x dx = \int_0^{2\pi/\omega} mA^2\omega^2 \cos^2(\omega t + \phi) dt = \pi m\omega A^2,$$

のように計算される。ここで, 調和振動子が保存するエネルギーが,

$$E = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}mA^2\omega^2,$$

であることに注目すると, 周回積分は,

$$\oint p_x dx = \frac{2\pi}{\omega} E,$$

のように、エネルギーと関係があることが導かれる。この関係を参考にして、

$$J_k = \frac{1}{2\pi} \oint p_k dq_k, \quad (6.22)$$

なる周回積分は**作用変数**として定義される。一次元の調和振動子の場合、作用変数は、

$$J_x = \frac{1}{2\pi} \oint p_x dx = \frac{E}{\omega}, \quad (6.23)$$

である。変換式 (6.21) によると、 P がまさに、作用変数だったわけだ。

作用変数 J_k は、いかなる一般化座標 q_k の定義においても、エネルギーと時間の積に相当する次元をもつ。そのため、作用変数を一般化運動量とみなすと、それに共役な一般化座標は次元をもたない。一次元の調和振動子を参考に、そのような一般化座標は角度であるとの解釈で、**角変数**と呼ばれ、 w_k なる記号で記述されることが多い。例えば、(6.21) で定義される Q は、図 6.4 において動点と原点を結ぶ線分が p 軸となす角度である。

6.5.2 正準変換 I

前項では 1 次元調和振動について座標と運動量を位相空間内の座標と解釈し、遺贈空間ないので座標変換を適用することによって、ハミルトニアン $\tilde{H}$ が Q に依存しない形に書き換えた。つまり、 Q が循環座標となり、その結果、 P を定数になったのだ。同様にしても、任意の運動についても、位相空間に循環座標をつくっていくことが可能である。本項では、循環座標をつくる手法を一般的に説明する。

自由度が f の系について、一般化座標 q_k と、それに共役な一般化運動量 p_k が与えられたとき、これらの物理量と時間 t の関数:

$$\begin{aligned} Q_1 &= Q_1(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f, t), \\ Q_2 &= Q_2(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f, t), \\ &\vdots \\ Q_f &= Q_f(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f, t), \\ P_1 &= P_1(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f, t), \\ P_2 &= P_2(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f, t), \\ &\vdots \\ P_f &= P_f(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f, t), \end{aligned} \quad (6.24)$$

が、変換されたハミルトニアン $\tilde{H}(Q_1, \dots, Q_f, P_1, \dots, P_f, t)$ に関して、変換前と同様の正準方程式:

$$\frac{dQ_k}{dt} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_k}, \quad \frac{dP_k}{dt} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_k}, \quad (6.25)$$

を満たすとき、変換 $[q, p] \mapsto [Q, P]$ は**正準変換**と呼ばれる。点変換も正準方程式を成立させるので、点変換は正準変換の特殊な例である。

正準方程式が拡張されたハミルトンの原理から導かれるので、正準方程式 (6.25) を満たす $[Q, P]$ の組み合わせを得るにはハミルトンの原理から始めるのがよいだろう。つまり、

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_k P_k \dot{Q}_k - \tilde{H}(Q, P, t) \right] dt = 0,$$

に基づいて $[Q, P]$ を決めるのだ。この関係を満たす条件として、

$$\sum_k p_k \dot{q}_k - H(q, p, t) = \sum_k P_k \dot{Q}_k - \tilde{H}(Q, P, t) + \frac{dW}{dt}, \quad (6.26)$$

を考えよう。ここで、 W は1価で連続な関数であり、 Q_k, P_k, t に依存すると仮定する。とは言っても、 Q_k, P_k が t に依存するため、 W は t だけの関数と考えることができ、

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial W}{\partial t} dt = W(Q(t_2), P(t_2), t_2) - W(Q(t_1), P(t_1), t_1),$$

のように積分区間の両端 (t_1 と t_2) だけで値が決まり、途中の区間とは無関係である。つまり、 W は変分の停留性とは無関係なので、解を考える際の自由度として、(6.26) の右辺の最終項を追加したわけだ。

数式 (6.26) は、 q_k, p_k, Q_k, P_k, t といった $4f+1$ 個の変数を含む。とはいえ、変換式 (6.24) で $[q, p]$ と $[Q, P]$ の間の関係が規定されているので、 $4f+1$ 個の変数のうち $2f$ 個は残りの $2f+1$ を用いて記述できるはずだ。その前提条件のもとで、 p, P を q, Q を用いて記述することにしよう。すなわち、取り扱う関数が q, Q, t の関数として表現できると考えるのだ。そのとき、 W も $W(q, Q, t)$ のような関数であるので、

$$\frac{dW}{dt} = \sum_k \left(\frac{\partial W}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial W}{\partial Q_k} \dot{Q}_k \right) + \frac{\partial W}{\partial t},$$

のように書くことができる。この数式を (6.26) に代入すると、

$$\sum_k \left(p_k - \frac{\partial W}{\partial q_k} \right) \dot{q}_k - \sum_k \left(P_k - \frac{\partial W}{\partial Q_k} \right) \dot{Q}_k = H - \tilde{H} + \frac{\partial W}{\partial t},$$

が得られる。この数式が恒等的に成立するには、

$$p_k = \frac{\partial W}{\partial q_k}, \quad P_k = \frac{\partial W}{\partial Q_k}, \quad \tilde{H} = H + \frac{\partial W}{\partial t}, \quad (6.27)$$

でなければならない。特に、変換式 (6.24) が明示的に t を含んでいなければ、 $\partial W / \partial t = 0$ だから、

$$\tilde{H} = H, \quad (6.28)$$

となる。すなわち、ハミルトニアンは不変である。当初、解を考えるときの自由度として関数 W を導入したのだが、(6.27) を見ると、皮肉にも、 W が一般化運動量 p_k や P_k を決めている。

一次元調和振動子 本項で説明した内容を実例によって示そう。例として、1次元調和振動子を考えよう。変換式 (6.19) に注目すると、一般化運動量が、

$$p = \frac{q}{\tan Q}, \quad P = \frac{q^2}{2 \sin^2 Q},$$

なる数式で与えられることがわかる。これらの一般化運動量を導くためには、関数 W は、

$$W = \frac{q^2}{2 \tan Q},$$

でなければならない。この W は、確かに、運動量 p と P を、

$$p = \frac{\partial W}{\partial q}, \quad P = \frac{\partial W}{\partial Q},$$

によって与えることが確認できる。しかも、時間 t の依存性を含んでいないため、 $\tilde{H} = H$ である。

ここで示した調和振動子の例では、 $p(q, Q)$ と $P(q, Q)$ から $W(q, Q)$ を定めた。逆に、 W を先に定めてから (6.27) を用いて p と P を決定することもある。そのような場合、関数 W は、運動量やハミルトニアンの変換を与えることになるので、変換の**母関数**と呼ばれる。

6.5.3 正準変換 II

前項では、一般化座標 q と Q を与え、母関数 $W(q, Q)$ を用いて一般化運動量 p と P を得る方法を示した。本項では、 q と P が与えられる場合を考えよう。考察を進めるため、(6.26) を、

$$\sum_k p_k \dot{q}_k - H(q, p, t) = - \sum_k Q_k \dot{P}_k - \tilde{H}(Q, P, t) + \frac{d}{dt} \left(W + \sum_k P_k Q_k \right), \quad (6.29)$$

のように書き換えておく。ここで、

$$P_k \dot{Q}_k = \frac{d}{dt} P_k Q_k - Q_k \dot{P}_k,$$

なる関係を利用した。さらに、 p と Q の関数として、

$$W' \equiv W + \sum_k P_k Q_k,$$

を定義すると、その時間微分は、

$$\frac{dW'}{dt} = \sum_k \left(\frac{\partial W'}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial W'}{\partial P_k} \dot{P}_k \right) + \frac{\partial W'}{\partial t},$$

となる。この導関数を (6.29) に代入すると,

$$\sum_k \left(p_k - \frac{\partial W'}{\partial q_k} \right) \dot{q}_k + \sum_k \left(Q_k - \frac{\partial W'}{\partial P_k} \right) \dot{P}_k = H - \tilde{H} + \frac{\partial W'}{\partial t},$$

が得られる。この等式を恒等的に成立させるための条件として,

$$p_k = \frac{\partial W'}{\partial q_k}, \quad Q_k = \frac{\partial W'}{\partial P_k}, \quad \tilde{H} = H + \frac{\partial W'}{\partial t}, \quad (6.30)$$

が導出される。関数 W が任意であるので、当然、 W' も任意である。関数 W' が、 $W' \equiv W + \sum P_k Q_k$ のように定義されていたとしても、関数の任意性には影響しない。

関数 W は q と P の関数で与えられるだけでなく、 p と Q の関数で与えられる場合についても同様に正準変換の公式を導出することが可能だ。既に導出した例を含めると、関数 W は、 $W_{pP}(p, P, t)$, $W_{pQ}(p, Q, t)$, $W_{qQ}(q, Q, t)$, $W_{qP}(q, P, t)$ の4種類が考えられる。それらについて、正準方程式の公式を並べると,

$$\text{for } W_{qP}(q, P, t): \quad p_k = \frac{\partial W_{qP}}{\partial q_k}, \quad Q_k = \frac{\partial W_{qP}}{\partial P_k}, \quad \tilde{H} = H + \frac{\partial W_{qP}}{\partial t}, \quad (6.31)$$

$$\text{for } W_{pQ}(p, Q, t): \quad q_k = -\frac{\partial W_{pQ}}{\partial p_k}, \quad P_k = -\frac{\partial W_{pQ}}{\partial Q_k}, \quad \tilde{H} = H + \frac{\partial W_{pQ}}{\partial t}, \quad (6.32)$$

$$\text{for } W_{qQ}(q, Q, t): \quad p_k = \frac{\partial W_{qQ}}{\partial p_k}, \quad P_k = -\frac{\partial W_{qQ}}{\partial Q_k}, \quad \tilde{H} = H + \frac{\partial W_{qQ}}{\partial t}, \quad (6.33)$$

$$\text{for } W_{pP}(p, P, t): \quad q_k = -\frac{\partial W_{pP}}{\partial p_k}, \quad Q_k = \frac{\partial W_{pP}}{\partial P_k}, \quad \tilde{H} = H + \frac{\partial W_{pP}}{\partial t}, \quad (6.34)$$

のようになる。補足をしておくと、 $W_{qp}(q, p, t)$ や $W_{QP}(Q, P, t)$ は考えていない。なぜなら、関数 W は正準変換を与えるための関数であるので、変換前の物理量 $[p, q]$ と変換後の物理量 $[P, Q]$ の組み合わせを変数を変数として含むような関数でなければならないからだ。これらの正準変換を使った例を以下に示していこう。

例 1: 恒等変換 正準変換を与える関数 W が,

$$W = \sum_k P_k q_k,$$

のように定義されるとき、上に示した公式によって,

$$p_k = P_k, \quad Q_k = q_k,$$

のように一般化座標と一般化運動量に変換される。変換されると言っても、単に、記号を入れ替えただけに過ぎない。このような変換は恒等変換と呼ばれる。

例 2: カルテシアン座標と極座標 二次元のカルテシアン座標 $[q_1, q_2] = [x, y]$ から極座標 $[Q_1, Q_2] = [r, \theta]$ への変換を考えよう。このとき、空間座標と運動量の成分は、

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta,$$

$$p_x = p_r \cos \theta - \frac{p_\theta}{r} \sin \theta, \quad p_y = p_r \sin \theta + \frac{p_\theta}{r} \cos \theta,$$

となるので、一般化座標と一般化運動量として表記すると、

$$q_1 = Q_1 \cos Q_2, \quad q_2 = Q_1 \sin Q_2,$$

$$P_1 = p_1 \cos Q_2 - \frac{p_2}{Q_1} \sin Q_2, \quad P_2 = p_1 \sin Q_2 + \frac{p_2}{Q_1} \cos Q_2,$$

が得られる。ここで、 Q と p を、 q と P で表現してみると、

$$Q_1 = \sqrt{q_1^2 + q_2^2}, \quad Q_2 = \arctan \frac{q_2}{q_1},$$

$$p_1 = \frac{P_1 q_1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} - \frac{P_2 q_2}{q_1^2 + q_2^2}, \quad p_2 = \frac{P_1 q_2}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} + \frac{P_2 q_1}{q_1^2 + q_2^2},$$

が得られる。ここで、(6.32) に参照して変換の母関数 W_{pQ} を決定すると、

$$W_{pQ} = P_1 \sqrt{q_1^2 + q_2^2} + P_2 \arctan \frac{q_2}{q_1},$$

が得られるのだ。得られた母関数を当初の記号で書き換えると、

$$W_{p_x r} = p_x \sqrt{x^2 + y^2} + P_\theta \arctan \frac{y}{x},$$

なる数式が得られる。

同じ点変換について、 q と P を Q と p で表現すると、変換の母関数は異なる形式の数式になる。準備として、一般化座標と一般化運動量を記述すると、

$$q_1 = Q_1 \cos Q_2, \quad q_2 = Q_1 \sin Q_2,$$

$$P_1 = p_1 \cos Q_2 + p_2 \sin Q_2, \quad P_2 = -p_1 Q_1 \sin Q_2 + p_2 Q_1 \cos Q_2,$$

のようになる。これらの数式について、(6.32) を参照すると、

$$W_{pQ} = -p_1 Q_1 \cos Q_2 - p_2 Q_1 \sin Q_2,$$

なる変換の母関数が得られる。この関数を当初の記号を用いて書き換えると、

$$W_{pQ} = -p_x r \cos \theta - p_y r \sin \theta,$$

が得られる。母関数 W_{pQ} が逆正接関数を含んでいたのに対し、 W_{pQ} は正弦関数と余弦関数を含んでいる。このように、どの物理量で記述するかによって母関数の形式が大きく異なる。

位相空間の回転運動 時間 t の依存性を明示的に含む変換を考えてみよう。変換の母関数 W が,

$$W = \frac{q^2 \cos \omega t - 2qQ + Q^2 \cos \omega t}{2 \sin \omega t}, \quad (6.35)$$

のように定義されているとする。この W の定義からただちに,

$$Q = -p \sin \omega t + q \cos \omega t, \quad q = P \sin \omega t + Q \cos \omega t, \quad (6.36)$$

が得られる。第1の式は, $p = \partial W / \partial q$ を計算して得られる方程式を Q について解けば導出できる。第2の式は, $P = \partial W / \partial Q$ を計算して得れる方程式を q について解けば導出できる。これらの数式を整理すると,

$$P = p \cos \omega t + q \sin \omega t, \quad Q = -p \sin \omega t + q \cos \omega t, \quad (6.37)$$

$$p = P \cos \omega t - Q \sin \omega t, \quad q = P \sin \omega t + Q \cos \omega t, \quad (6.38)$$

なる関係が得られる。つまり, $[p, q]$ を時間 t の経過に対して角速度 ω で回転させると $[P, Q]$ が得られるということだ。なお, W を t で偏微分すると,

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{q^2 + Q^2 - 2qQ \cos \omega t}{2 \sin^2 \omega t} \omega = -\frac{\omega}{2}(P^2 + Q^2),$$

となるので, 変換後のハミルトニアンは,

$$\tilde{H} = H(P, Q) - \frac{\omega}{2}(P^2 + Q^2),$$

となる。

前に示したように, 調和振動子の振幅を調整すれば, 位相空間を円運動するような形態を実現することが可能である。そのとき, ハミルトニアン H は,

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

であるので, 最終的なハミルトニアンが,

$$\tilde{H} = H + \frac{\partial W}{\partial t} = 0,$$

となってしまうのだ。実は, 時間 t の依存性をもってしまった時点で, ハミルトニアンは系のエネルギーという意味ではなくなっている⁵。だから, ゼロになっても慌てる必要はない。ハミルトニアンがゼロになっていれば,

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P} = 0, \quad \frac{dP}{dt} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q} = 0,$$

⁵エネルギー保存則が表現できなくなっているのが理由だ。

が、ただちに得られるので、

$$Q = \text{const}, \quad P = \text{const},$$

が導かれるのだ。つまり、1次元振動についての位相空間を等速で回転運動させた新たな位相空間においては、振動子は静止する定点となる。このように書いたものの、運動しているものが定点に変換されると思ってはいけない。このような結果になるのは、時間依存性を明確に分離していることに起因するのだ。数式(6.36)に記述されている q をもう少し変形すると、

$$q = \sqrt{P^2 + Q^2} \sin(\omega t + \phi),$$

のような数式に書き換えられる。ただし、 ϕ は定数である。これが、角速度 ω で運動する調和振動子でならば、 P と Q は振動子の振幅を与える定数なのだ。時間経過とともに運動する要素は、 $\sin(\omega t + \phi)$ に含まれている。

6.5.4 ハミルトン・ヤコビの方程式

前項では調和振動子の物理量を様々な方法で変形し、最後にはハミルトニアンをゼロにした。他の運動でもそのような変形が可能であることを調べよう。

位相空間における変換の母関数 W から始めよう。母関数 W は q, P, t の関数であるとする。そのとき、正準変換は、(6.31)にしたがうので、

$$p_k = \frac{\partial}{\partial q_k} W(q, P, t), \quad Q_k = \frac{\partial}{\partial P_k} W(q, P, t), \quad (6.39)$$

で与えられる。変換後のハミルトニアン $\tilde{H} = H + \frac{\partial W}{\partial t}$ が $\tilde{H} = 0$ となるためには、

$$\frac{\partial}{\partial t} W(q, P, t) = -H(q, p, t), \quad (6.40)$$

でなくてはならない。この条件を満たす W が特定できれば、正準方程式によって、

$$\frac{dP_k}{dt} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_k} = 0, \quad (6.41)$$

となるので、 P_k が一定となる。その定数を α_k としよう。つまり、 $P_k = \alpha_k$ とする。この数式を(6.39)の第1式に代入し、その結果を6.40に代入すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} W(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f, t) + H\left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_f}, t\right) = 0, \quad (6.42)$$

が得られる。この数式が、変換の母関数 W が満たすべき方程式であり、ハミルトン・ヤコビの偏微分方程式と呼ばれる。さらに、この方程式の解 W はハミルトンの主関数と呼ば

れる。ハミルトン・ヤコビの微分方程式 (6.42) は, $q_1, \dots, q_f$ と t を変数とする 1 回の微分法定期なので, その解 W には $f+1$ 個の積分定数が現れる。つまり, その微分方程式だけでは解が不定となるので, 初期条件を与えて積分定数を決定すべきである。

ハミルトニアンがゼロ ($\tilde{H} = 0$) ということは, P_k だけでなく Q_k も定数である。そこで, $Q_k = \beta_k$ とおき, $P_k = \alpha_k$ とともに (6.39) に代入すると,

$$p_k = \frac{\partial}{\partial q_k} W(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f, t), \quad (6.43a)$$

$$\beta_k = \frac{\partial}{\partial \alpha_k} W(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f, t), \quad (6.43b)$$

が得られる。これらの方程式は, $q_1, \dots, q_f$ と $p_1, \dots, p_f$ の $2f$ 個の未知数を含むが, 方程式も $2f$ 個あるのですべての未知数が決定できる。この手法ではニュートンの運動方程式やラグランジュの運動方程式, さらに, ハミルトンの正準方程式を直接解かずに物体の運動を決定する。その手法の指針は, (6.42) を解くことによってハミルトンの主関数 W を特定することである。

ハミルトニアンが, t の依存性を明示的に含まず, q と p のみの関数である場合, ハミルトン・ヤコビの偏微分方程式は,

$$\frac{\partial W}{\partial t} + H\left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_f}\right) = 0, \quad (6.44)$$

となる。その場合, W を q の関数と t の関数の和として,

$$W = S(q_1, \dots, q_f) + \Theta(t),$$

であると仮定する。これを (6.44) に代入すると,

$$\frac{d\Theta}{dt} + H\left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = 0,$$

が得られる。第 1 項は t の関数であり, 第 2 項は q の関数である。この数式が恒等的に成立するには, 第 1 項と第 2 項の双方が定数でなければならない。そこで, 定数 E を用いて $H = E$ とすると, $d\Theta/dt = -E$ である。つまり,

$$\Theta(t) = C - Et,$$

である。なお, C は積分定数である。また, 先ほど書いた $H = E$ は丁寧に書くと,

$$H\left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = E, \quad (6.45)$$

である。この方程式もハミルトン・ヤコビの偏微分方程式と呼ばれる。この偏微分方程式を解いて関数 S を特定するには, f 個の積分定数が現れる。そのうちの一つは, 定数 E と

の関係で決定できるので、新たに必要な定数は $f-1$ 個である。それらの定数を $\alpha_2, \dots, \alpha_f$ と書こう。個のように記号を設定したのは、 α_1 が E との関係で決まることを意図している。そのとき、ハミルトンの主関数は、

$$W = S(q_1, \dots, q_f, \alpha_2, \dots, \alpha_f) - Et, \quad (6.46)$$

なる形で書くことができる。このとき、

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k}, \quad \beta_1 = \frac{\partial S}{\partial E} - t, \quad \beta_j = \frac{\partial S}{\partial \alpha_j} \quad (k = 1, 2, \dots, f; j = 2, 3, \dots, f), \quad (6.47)$$

によって解を特定すればよい。これらの式は、 $2f$ の方程式による連立方程式である。数式に明示していないが、これらはすべて、 $q_1, \dots, q_f$ を変数として含んでいる。方程式を解いて、 $q_1, \dots, q_f$ と $p_1, \dots, p_f$ を特定することによって運動が決定できるのだ。なお、特定される座標と運動量は、 $\beta_1, \dots, \beta_f, E, \alpha_2, \dots, \alpha_f$ 、および、 t の関数として表される。

中心力場内の運動 ポテンシャル $U(r)$ が与えられる中心力場を運動する質点の運動を考えよう。二次元の極座標 $[r, \theta]$ を用いて、ハミルトニアンを記述すると、

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) + U(r),$$

となる。ハミルトニアンを、時間 t を含まないハミルトン・ヤコビの偏微分方程式として書き換えると、

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{2mr^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + U(r) = E,$$

が得られる。中心力場において、 θ は循環座標であり、 p_θ は一定であるので、 $p_\theta = \alpha$ とおくことにする。そのとき、

$$\frac{\partial S}{\partial \theta} = \alpha,$$

であるので、 $S = S_r(r) + \alpha\theta$ となるはずだ。これをハミルトン・ヤコビの偏微分方程式に代入すると、

$$\left(\frac{\partial S_r}{\partial r} \right)^2 = 2m[E - U(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2},$$

がえられる。つまり、関数 $S_r(r)$ は、

$$S_r(r) = \pm \int \sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2}} \, dr,$$

である。したがって、関数 S は、

$$S = \pm \int \sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2}} \, dr + \alpha\theta,$$

のように表される。関数 S が特定できれば, (6.47) を用いて運動量と β を計算できる。具体的には,

$$p_r = \frac{\partial S}{\partial r} = \pm \sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2}}, \quad (6.48a)$$

$$\beta_r = \frac{\partial S}{\partial E} - t = \pm \int \frac{m \, dr}{\sqrt{2m[E - U(r)] - \alpha^2/r^2}} - t, \quad (6.48b)$$

$$\beta_\theta = \frac{\partial S}{\partial \alpha} = \pm \int \frac{\alpha}{\sqrt{2m[E - U(r)] - \alpha^2/r^2}} \frac{dt}{r^2} + \theta, \quad (6.48c)$$

となる。なお, 運動量の θ 成分は, 既に述べたように $p_\theta = \alpha$ なる定数である。得られた第1式は, 言うまでもなく運動量の r 成分である。第2式は原点からの距離 r を時間 t の関数で表現し, 軌道を与える。第3式は r と θ の関係によって軌道の形状を与える。第2式と第3式から r を消去すれば, $\theta(t)$ が得られる。