

## 第1回 ニュートンの運動方程式と変数変換

### 0. はじめに (ガイダンス)

終電間際の車内。アルコールが入った顔の 50 前後の二人「最近の若者ときたら、この忙しいときに休暇願。グアムで1週間のバカンスだとか、どういうつもりなんだ」「まったく、何考えているんでしょうね」よくみかける光景だが、このとき、筆者の体内アルコール濃度も高かったので、この会話からひとつの哲学的真実が見えたような気がした。『理解するとは、どういうつもりで何を考えているかが、分かること、もしくは分かったつもりになることである』と悟ったのである。「何考えているんだ」と怒鳴る前に何考えているのか考えてみるのも面白い。

上の哲学的命題は意外と正しいのではないかと思うことがある。

国際会議での日本の研究者・技術者からの発表が「新たな技術を使ってみました」型のもが多く、さみしい思いを味わうことがある。もっと深く理解し、その技術のよさを建築に生かしたいものであると思う。そのためには、まず建築の現実的状況の理解が必要であるが、その次に大切なのは新技術の深い理解である。とくに、そうした技術が「どういうつもりで作られたのか」、開発者は「何を考えていたのか」まで理解しておくべきだろう。

海外や他分野から日本の建築の分野に新しい技術が導入される時、その技術の実用性に関心が集中し、その技術のバックグラウンドについての理解が浅いことが多い。そのため他の研究者の類似的な適用研究にとどまり、その技術の可能性をフルに使いこなしていないものもしばしば見かける。

近年、建築の分野でも最適化という言葉が使用されるようになってきた。応用例も増え、実用的な技術となりつつある。本誌でも、その先端的研究の連載記事もあった。また、建築学会でも、最適化に関する特別委員会が設置され成果をあげている。

最適化技法の活用も、上記のようなジレンマに巻き込まれつつあるように思う。最適化技法が適用される建築の問題認識については、個々に議論すべきであろうが、最適化技術についての認識を深めることは、もっと積極的に行なうべきであると思う。このような観点から、数回にわたって最適化技術のバックグラウンドについて語りたいと思う。

話題は、最適化という技法が最近のもののように理解されがちであるが、むしろわれわれが長く付き合ってきた古典物理学に源流があり、学生時代に学んだことのすぐ近くに最適化技法のルーツがあったということである。物理学を真面目に勉強なさった方には、最適化技法が極めて親しいものであることを力説する。話の流れは、1) ニュートンの運動方程式からスタートし、2) 運動方程式と等価な表現としてラグランジアンというものを使ったオイラー・ラグランジュ方程式というものがあることを述べ、3) ラグランジアンが何のために考えられたか（ここでは変数変換の計算でくたびれないためなのだという結論になる）を説明する。ここで、ややとっぴであるが4) 運動する粒子を擬人化し、粒子もある評価関数を最小化するように運動しているのではないかと考えてみる。5) この最小化のための技術として変分法の概略を説明する。面白いことに6) 評価関数最小化運動であることと、オイラー・ラグランジュ方程式を満足することと等価であることがわかる。この対応関係を利用し、7) 与えられた評価関数を最小化するような運動方程式をコンピュータ内に作れば、運動の結果として評価関数の最小化が実現できるという最近の最適化技術の常套手段を説明する。8) ふたたび変数変換について考え、これを効率的に行うためのルジャンドル変換というものがあることを説明する。9) ルジャンドル変換を活用すると、ラグランジアンからハミルトニアンというもっと便利な道具ができる。10) 最大値原理というパワフルな最適制御方法を説明し、これが、ハミルトニアンを用いて運動を考えていることと等価であることを説明する。

以上が本講座のあらすじである。要するに、最適化技術といっても、古典力学という中で開発されたテクニックが運動と評価関数の変化という対応性を利用して活かされているということである。

また、本講座では数式が出てくるが、大学初年に習うものである。卒業から月日のたっている読者を想定して、高校数学レベルで理解できるようにこころがける。

やや長い前書きとなったが、筆者がどういうつもりで本講座を書こうとしているかを理解いただければ幸いである。

## 1. ニュートンの運動方程式

対象の変化を記述する方程式で最も知られているのは、次のニュートンの運動方程式であろう。つまり、質量  $m$  のひとつの質点に力

$F$  (各軸方向成分が  $F_x, F_y, F_z$ ) が働いているときの位置座標  $(x, y, z)$  の時間変化は、次式で与えられる。

$$m \frac{d^2}{dt^2} x = F_x, \quad m \frac{d^2}{dt^2} y = F_y, \quad m \frac{d^2}{dt^2} z = F_z \quad (1.1)$$

かなり前に勉強したことを思い出していただくため、具体的な例をあげると、重力下での運動は、

$$m \frac{d^2}{dt^2} x = 0, \quad m \frac{d^2}{dt^2} y = 0, \quad m \frac{d^2}{dt^2} z = -mg \quad (1.2)$$

となるし、 $x$  方向に伸縮するバネの場合は、次のようになる。

$$m \frac{d^2}{dt^2} x = -kx \quad (1.3)$$

さて、ニュートンの運動方程式を(1.1)式のように成分ごとに書くのは面倒なので、ベクトル  $\mathbf{x} = (x, y, z)$ ,  $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$  を用いて、

$$m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{x} = \mathbf{F} \quad (1.1b)$$

と書くこともある。また、時間微分については、次のように書くこともある。

$$\frac{d}{dt} x = \dot{x}, \quad \frac{d^2}{dt^2} x = \ddot{x}$$

この表記法では、ニュートンの運動方程式は以下のようなになる。

$$m\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{F} \quad (1.1c)$$

以上の表記方法の確認のもとで、いよいよ本題にはいるが、以下の議論を分かりやすくするため、ポテンシャル場の運動に限定しておく。ポテンシャル場という言葉を知らなくともよい。先の例であげた重力場、バネはポテンシャル場で、少しうるさく言うと、位置の関数であるポテンシャルという量  $V$  があり、力の各方向成分は、この量の各方向の勾配で表される。具体的に示したほうが分かりやすいので、重力場とバネの例で述べる。重力の場合のポテンシャルは、

$$V(x, y, z) = mgz \quad (1.4)$$

であり、力は以下のように表される。

$$F_x = -\frac{\partial}{\partial x} V(x, y, z) \quad (1.5a)$$

$$F_y = -\frac{\partial}{\partial y} V(x, y, z) \quad (1.5b)$$

$$F_z = -\frac{\partial}{\partial z}V(x, y, z) \quad (1.5c)$$

上の式中にでてくる微分に似た記号は偏微分の記号である。忘れた方のために念をおすと、(1.5a)式では  $V$  を  $x$  以外は定数だとみなして  $x$  で微分をし、(1.5b)式では  $V$  を  $y$  以外は定数だとみなして  $y$  で微分することを意味する。したがって、(1.4)式をそれぞれ  $x, y, z$  で偏微分することで(1.5)式右边を計算すると、

$$F_x = 0, \quad F_y = 0, \quad F_z = -mg$$

となる。つまり、ニュートンの運動方程式は、

$$m\ddot{x} = 0, \quad m\ddot{y} = 0, \quad m\ddot{z} = -mg$$

となって、(1.2)式に一致している。

バネの場合も、

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x}V(x), \quad V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

と表現できる（上の第2式を  $x$  で偏微分して第1式に代入すると、(1.3)式と一致すること確かめてほしい）。

以上のようにポテンシャル場の場合にはニュートンの運動方程式は、

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x}V(x, y, z) \quad (1.6a)$$

$$m\ddot{y} = -\frac{\partial}{\partial y}V(x, y, z) \quad (1.6b)$$

$$m\ddot{z} = -\frac{\partial}{\partial z}V(x, y, z) \quad (1.6c)$$

と表される。これを、以下のように簡略的に表現することがある。

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla V(\mathbf{x}) \quad (1.6d)$$

となる。上式の逆三角の記号はそれぞれの成分ごとに偏微分するという意味で、ナブラと読む。

以下の議論では、(1.6)式で表されるポテンシャル場の運動方程式に限定したが、例にみたようにかなり一般的なものである。ただし、途中でロケットを噴射したりする運動は含まれていない。もちろん、どこかのテレビ局で強調されている念力の効果も含まれていない。

## 2. ニュートンの運動方程式における変数変換

重力場での質点の運動やバネの運動のような場合には、(1.6d)の形

の方程式で運動が記述できたことになる。抽象的に議論するのであれば、形式的にはこの方程式で議論してゆけばよいのだが、具体的に各時刻での位置を特定したいなどというときには、3次元空間であれば、(1.6a)~(1.6c)のように成分ごとの3本の方程式で計算しなければならないし、また、質点の数が増えれば、質点の数の3倍の連立方程式となり、計算も大変面倒になる。

そうした面倒を避けるために、問題の状況に応じて、変数変換をしたりする。たとえば、原点からの距離だけでポテンシャルが決まるような場合には、極座標で計算した方が便利になる。ところが、上記の直交座標で記述されたニュートンの運動方程式を極座標で書き直すのは、かなり面倒な計算となる。今回は、この計算がかなり面倒であることを実感して頂き、次回以降の先人達の努力とアイデアがいかに関われわれを助けてくれたかの理解に供したい。

任意のポテンシャル関数  $V(x,y,z)$  が与えられているとき極座標変換を行うと(1.6a)~(1.6c)式がどうなるかを計算する。この文章を書くに先立って筆者も計算してみたが大変複雑で何度も計算ミスをしてしまいなかなか正しい結果にたどりつけない。また、式の展開も分量がありすぎるので、以下では、2次元の場合に限って計算することにする。つまり、ニュートンの運動方程式が、

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x}V(x, y), \quad m\ddot{y} = -\frac{\partial}{\partial y}V(x, y) \quad (2.1)$$

のときに、変数変換

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta \quad (2.2)$$

をした場合に(2.1)式が  $r$  と  $\theta$  でどのように表すことができるかを調べる。

途中の計算が正しくなされているかを確認するため、ポテンシャル関数の具体例を作っておく。水平方向  $x$ 、垂直方向  $y$  の2次元内運動で水平方向にバネの力が作用し垂直方向に重力が働いているとする。このときポテンシャルは、

$$V(x, y) = mgy + \frac{1}{2}kx^2 \quad (2.3a)$$

であり、

$$\frac{\partial V}{\partial x} = kx, \quad \frac{\partial V}{\partial y} = mg \quad (2.3b)$$

なので、運動方程式は、次のようになる。

$$m\ddot{x} = -kx, \quad m\ddot{y} = -mg \quad (2.3c)$$

方程式(2.3a)～(2.3c)はあくまでも特殊事例で、以下の議論はどんなポテンシャル関数でも成立する一般的なものである。

ポテンシャル関数  $V(x,y)$  の  $r$  と  $\theta$  での書き換えは単に変数  $x,y$  に (2.2)式を代入するだけで  $V(r, \theta)$  が得られる。しかし、運動方程式右辺は、ポテンシャル関数を変数  $x,y$  で偏微分したものなので、これを計算しなければならない。このためにはどんな関数でも成立する偏微分公式、

$$\frac{\partial}{\partial x} V(r, \theta) = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial \theta} \quad (2.4a)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} V(r, \theta) = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial V}{\partial \theta} \quad (2.4b)$$

を用いる。この式で、 $\frac{\partial V}{\partial r}, \frac{\partial V}{\partial \theta}$  は、 $r, \theta$  の関数  $V(x,y)$  を  $r$  と  $\theta$  で偏微分することで求まるので、 $\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial r}{\partial y}, \frac{\partial \theta}{\partial x}, \frac{\partial \theta}{\partial y}$  を計算しておく必要がある。

そこで、

$$x^2 + y^2 = r^2 \cos^2 \theta + r^2 \sin^2 \theta = r^2 (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta)$$

つまり、

$$r^2 = x^2 + y^2 \quad (2.5)$$

であることから、 $r$  が  $x, y$  の関数とみなすことができる。そこで、この式を変数  $x$  で偏微分することで、

$$2r \frac{\partial r}{\partial x} = 2x$$

となるので、

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \frac{r \cos \theta}{r} = \cos \theta \quad (2.6a)$$

が得られる。

同様にして、(2.5)を変数  $y$  で偏微分することで、以下の結果を得る。

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \quad (2.6b)$$

次に、

$$\tan \theta = \frac{r \sin \theta}{r \cos \theta} = \frac{y}{x} \quad (2.7)$$

であることから、 $\theta$  が  $x, y$  の関数になっているとみなすことができ

る。そこで、この式を変数  $x$  で偏微分することで、

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \tan \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{y}{x} \right)$$

であり、

$$\frac{1}{\cos^2 \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{y}{x^2} = -\frac{r \sin \theta}{r^2 \cos^2 \theta}$$

と計算され、結局次の結果をえる。

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{\sin \theta}{r} \quad (2.8a)$$

同様にして、(2.7)を変数  $y$  で偏微分することで、以下の結果を得る。

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos \theta}{r} \quad (2.8b)$$

以上の結果、(2.6)、(2.8)式を(2.4)に代入することで、やっと以下の結果が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial x} V(r, \theta) = \cos \theta \frac{\partial V}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial V}{\partial \theta} \quad (2.9a)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} V(r, \theta) = \sin \theta \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial V}{\partial \theta} \quad (2.9b)$$

かなり複雑な計算となってきたので、(2.3)の特殊事例で計算が間違っていないことを確認しておこう。この事例では、

$$\frac{\partial V}{\partial x} = kx = kr \cos \theta, \quad \frac{\partial V}{\partial y} = mg \quad (2.10)$$

とならなければならない。まず、(2.3a)に変数変換式(2.2)を代入することで、ポテンシャルが以下のように  $r$  と  $\theta$  で表される。

$$V(r, \theta) = mgr \sin \theta + \frac{1}{2} kr^2 \cos^2 \theta \quad (2.11)$$

これを  $r$  と  $\theta$  で偏微分することで以下を得る。

$$\frac{\partial V}{\partial r} = mg \sin \theta + kr \cos^2 \theta \quad (2.12a)$$

$$\frac{\partial V}{\partial \theta} = mgr \cos \theta - kr^2 \cos \theta \sin \theta \quad (2.12b)$$

この結果を(2.9)式に代入することで、

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial x} &= kr \cos \theta \{ \cos^2 \theta + \sin^2 \theta \} \\ &= kr \cos \theta \end{aligned}$$

$$\frac{\partial V}{\partial y} = mg\{\cos^2 \theta + \sin^2 \theta\} = mg$$

となる。この結果は(2.10)式に一致する。したがって、運動方程式(2.1)の右辺の変数  $r, \theta$  への書き換えは正しくいっているようだ。

次に運動方程式(2.1)の左辺の変数  $r, \theta$  へ書き換えを試みる。時間による2階微分を計算するため、まず、変数変換式(2.2)を時間微分することで、

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{d}{dt}(r \cos \theta) = \frac{dr}{dt} \cos \theta + r \frac{d}{dt} \cos \theta \\ &= \dot{r} \cos \theta - r \dot{\theta} \sin \theta \end{aligned} \quad (2.13a)$$

$$\dot{y} = \frac{d}{dt}(r \sin \theta) = \dot{r} \sin \theta + r \dot{\theta} \cos \theta \quad (2.13b)$$

となる。さらに、上式を時間微分することで、以下の結果を得る。

$$\ddot{x} = \ddot{r} \cos \theta - 2\dot{r}\dot{\theta} \sin \theta - r\ddot{\theta} \sin \theta - r\dot{\theta}^2 \cos \theta \quad (2.14a)$$

$$\ddot{y} = \ddot{r} \sin \theta + 2\dot{r}\dot{\theta} \cos \theta + r\ddot{\theta} \cos \theta - r\dot{\theta}^2 \sin \theta \quad (2.14b)$$

運動方程式(2.1)の左辺に、この結果(2.14)を代入し、右辺に先の結果(2.9)を代入することで、以下の変数  $r, \theta$  で表現したニュートンの運動方程式が得られる。

$$\begin{aligned} m(\ddot{r} \cos \theta - 2\dot{r}\dot{\theta} \sin \theta - r\ddot{\theta} \sin \theta - r\dot{\theta}^2 \cos \theta) \\ = -\cos \theta \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial V}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (2.15a)$$

$$\begin{aligned} m(\ddot{r} \sin \theta + 2\dot{r}\dot{\theta} \cos \theta + r\ddot{\theta} \cos \theta - r\dot{\theta}^2 \sin \theta) \\ = -\sin \theta \frac{\partial V}{\partial r} - \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial V}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (2.15b)$$

得られた結果は複雑であり、見通しも悪い。少し工夫してみよう。(2.1)の右辺に(2.9)式を代入した式、

$$m\ddot{x} = -\cos \theta \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial V}{\partial \theta} \quad (2.16a)$$

$$m\ddot{y} = -\sin \theta \frac{\partial V}{\partial r} - \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial V}{\partial \theta} \quad (2.16b)$$

において、(2.16a)×cosθ+(2.16b)×sinθを計算すると、

$$\begin{aligned} m\ddot{x} \cos \theta + m\ddot{y} \sin \theta &= -\cos^2 \theta \frac{\partial V}{\partial r} - \sin^2 \theta \frac{\partial V}{\partial r} \\ &= -\frac{\partial V}{\partial r} \end{aligned}$$

となり、この式の左辺に(2.14)式を代入し、整理することで、次式

を得る。

$$m(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2) = -\frac{\partial V}{\partial r} \quad (2.17a)$$

同様に、(2.16a) $\times\sin\theta$ +(2.16b) $\times\cos\theta$  を計算し、(2.14)式を代入することで、次式を得る。

$$m(2r\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta}) = -\frac{\partial V}{\partial \theta} \quad (2.17b)$$

(2.15)より(2.17)の方が簡単にはなっているが、それでも分かりにくい。

以上の計算は2次元に限定した場合であるにもかかわらず計算が複雑であった。3次元の場合はもっと複雑になる。また、数式の形が複雑で見通しが悪い。

次回では、この複雑な計算を回避し、見通しのよい形で議論するために、先人たちがどのような工夫をしたかを見てみたい。