＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝

正準形式の理論

2001.6.28　by KENZOU

＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝

1．正準方程式

ある物理系が一般化座標 q_i(i=1,2,…,f)で記述されているとする。$Lagrangian$が与えられるとその系の力学的性質は決まる。その際の一般化運動量（q_iに共役な運動量）を

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad (1)$$

で定義します。新しく導入した変数 p_i の時間微分は$Lagrange$の運動方程式

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

より

$$\dot{p}_i=\frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad (1)'$$

となる。ここで q_i と運動量 p_i は互いに共役とよばれます。

次に

$$H=\sum_i p_i\dot{q}_i-L \qquad (2)$$

によって$Hamiltonian$を定義します。ところで$Hamiltinian$はこのままだと q_i, $\dot{q}_i$ の関数となるので、それを(1)の逆変換を使って $\dot{q}_i$ を消去してしまいましょう。そうすると(2)式は q_i と p_i のみの関数で表わされて今後の展開に非常に便利になります(^^)。

そこで、q_i と p_i を独立変数(注-1)とみなし、$\dot{q}_i$ は(1)式の逆変換を使ってq_i と p_i で表してHを次式の表式で書くことにします。

$$H=H(q_1,\cdots,q_f\,;\,p_1,\cdots,p_f\,)=H(q\,;p\,) \qquad (3)$$

(注-1)

$p_i=\partial L\left(q_i;\dot{q}_i\right)/\partial\dot{q}_i$ で与えられるから、p_i と q_i は独立という訳にはいかないのではないかという疑問が出てくる。これを以下に検証する。

$\dot{q}_i$ や L は q_i と p_i の関数であるから $\dot{q}_i=\dot{q}_i\langle q_i\,;\,p_i\rangle$, $L=L\langle q_i\,;\,p_i\rangle$ と書ける。また、$Lagrangian$ から$Hamiltonian$ への変換(2)は $Legendre$変換（正準変換と母関数.pdf参照）の一種となっている。つまり、Lでは独立変数が q_i と $\dot{q}_i$ であり

$$dL=\sum_i\left\{\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right)\underset{\sim\sim}{dq_i}+\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\underset{\sim\sim}{d\dot{q}_i}\right\}$$

と書ける。一方、H では

$$
\begin{aligned}
dH &= d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i\right) - d\,L \\
&= \sum_i \left\{ p_i\, d\dot{q}_i + \dot{q}_i\, dp_i - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right) dq_i - \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) d\dot{q}_i \right\} \\
&= \sum_{\mathrm{i}} \left\{ \dot{q}_i\, dp_i - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right) dq_i \right\} \\
&= \sum_{\mathrm{i}} \left\{ \dot{q}_i\, dp_i - p_i dq_i \right\} \qquad (4)
\end{aligned}
$$

となって、p_i と q_i が独立変数となっていることになりますね(^^)。
****

(3)(4)式より

$$
\begin{aligned}
dH &= \sum_i \left\{ \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) dq_i + \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\right) dp_i \right\} \\
&= \sum_i \left(-p_i dq_i + \dot{q}_i dp_i \right) \qquad (5)
\end{aligned}
$$

これから

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad (6)$$

$$p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (7)$$

(6)(7)式を*Hamilton*の運動方程式あるいは正準運動方程式とよび、*Hamilton*の運動方程式を成立させる変数 q_i と p_i を正準変数といいます。

ちょっとここで(6)(7)式が1階の微分方程式になっていることに注意しましょう。つまり、もともと q_i の2階の微分方程式であった運動方程式を、運動量を新たな変数とみなすことで連立1階の微分方程式に書き換えていますね。だからナンやねん、ということですが、このあたりは(p_i, q_i)からなる位相空間を考えるとその有り難味がでてきます(^^)。この点はまたのちほど。。。。

ということで、少し演習をやって頭のこりをほぐしましょう(^^)。ナヌ、そんなものでほぐれるかって？　たしかに。。。(m^^m);;

＝問題＝

***Hamiltonia*が $H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + eA_0$ 与えられているとき、*Lagrangian*を求めよ。**

＝答え＝

正準方程式より

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{1}{m}\left(p_i - \frac{e}{c}A_i\right),\ \ p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = m\dot{q}_i + \frac{e}{c}A_I$$

ベクトル形式で書きなおすと

$$\dot{\boldsymbol{q}}_i = \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right),\ \boldsymbol{p} = m\dot{\boldsymbol{q}} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$$

一方、*Lagrangian*は

$$\begin{aligned} L &= \boldsymbol{p}\bullet\boldsymbol{x} - H \\ &= \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p}^2 - \frac{e}{c}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}\right) - \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}^2 - \frac{2e}{c}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A} + \frac{e^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2\right) - eA_0 \\ &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) - eA_0 \\ &= \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{q}}\left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) - eA_0 \\ &= \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{q}}^2 + \frac{e}{c}\dot{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{A} - eA_0 \qquad // \end{aligned}$$

２．変分原理と正準方程式

ここでは、上の項で求めた正準方程式を変分原理から導くことにします。そのシナリオは次の通り。すなわち、*Hamiltonian* が与えられているとき

$$\begin{aligned} \overline{L} &\equiv \sum_i p_i\dot{q}_i - H(q\,;p) \\ &= \overline{L}\left(q_1,\cdots,q_f,p_1,\cdots,p_f\right) \end{aligned} \tag{8}$$

を定義する。この$\overline{L}$は合計$2f$ 個の q_i, p_iの関数と考える。次に、作用積分

$$\overline{I} = \int_{t_1}^{t_2} dt\overline{L} = \int_{t_1}^{t_2} dt\left\{\sum_i p_i\dot{q}_i - H(q\,;p)\right\} \tag{9}$$

を定義し、これが独立な q と p に対して極値をとるところを求めると、これは正準方程式を満たすということになるわけです。

さて、考える変分として

$$q_i \to q_i + h_i \equiv q_i' \tag{10}$$

$$p_i \to p_i + z_i \equiv p_i' \tag{11}$$

とします。例によって積分の上限、下限で $d\,q_i=0$ としますが$d\,p_i=0$ も要求することにします。実はこの要請のもとで p と q は変数として対等になるのですね。このことによって、qと pを混ぜるような変換(注-2) に対しても変分原理の成立がいえるようになります。
要求条件より

$$h_i(t_2) = h_i(t_1) = 0 \tag{12}$$

$$z_i(t_2) = z_i(t_1) = 0 \tag{13}$$

これで材料は揃入ましたので計算にとりかかることにします。

$$d\bar{I} = \grave{\mathrm{O}}_{t_1}^{t_2} dt \left\{ d\sum_i p_i \dot{q}_i - d H(q\,;p) \right\}$$

$$= \grave{\mathrm{O}}_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_i \left(d p_i \dot{q}_i + p_i d\,\dot{q}_i \right) - \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} h_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} x_i \right) \right\}$$

$$= \grave{\mathrm{O}}_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_i \left(x_i \dot{q}_i + p_i \dot{h}_i \right) - \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} h_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} x_i \right) \right\}$$

$$= \grave{\mathrm{O}}_{t_1}^{t_2} dt \left\{ -\sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} + \dot{p}_i \right) h_i + \sum_i \left(-\frac{\partial H}{\partial p_i} + \dot{q}_i \right) z_i \right\} + \left[\sum_i p_i h_i \right]_{t_1}^{t_2}$$

この式の最後の項は(12)(13)より消えますから、全く任意のh_iとz_iに対して、この式が0となるのは

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad (14)$$

$$p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (15)$$

が成り立つときに限られるます。でてまいりましたね、正準方程式が(^^)。

(注-2)*

q と p の混ざった変換を考える。ポイントはq とp についての$Hamilton$ の方程式(14)(15)が成り立つとき、変換後の変数Q とP についても同じ形式の方程式が成立するかどうかという点にある。結論から先に言うと、成立する。

q と p の混ざった変換

$$Q = aq + bp \qquad (16)$$

$$P = -bq + ap \qquad (17)$$

ただし、a, b は

$$a^2 + b^2 = 1 \qquad (18)$$

を満たす任意の数とする。ここで (16)(17) を逆変換すると、(18)によって

$$q = aQ - b\,P \qquad (19)$$

$$p = -bP + bQ \qquad (20)$$

となる。これを成分表示で書いて演算すると

$$\frac{\partial q_i}{\partial P_j} = -b d_{ij}, \quad \frac{\partial q_i}{\partial Q_j} = -a d_{ij} \qquad (21)$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial P_j} = a d_{ij}, \quad \frac{\partial p_i}{\partial Q_j} = b d_{ij} \qquad (22)$$

となる。ここで d_{ij} はKroneckerのd 。

さて、(19)(20)を $Hamiltonian$ に代入してQ とP で表わすと

$$\frac{\partial H}{\partial P_i} = \sum_{j=1}^{3} \left(\frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial P_i} + \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial P_i} \right)$$

$$=-b\frac{\partial H}{\partial q_i}+a\frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{23}$$

$$\frac{\partial H}{\partial Q_i}=\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial q_j}{\partial Q_i}+\frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial p_j}{\partial Q_i}\right)$$

$$=a\frac{\partial H}{\partial q_i}+b\frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{24}$$

一方、(16)(17)の両辺を時間微分すると

$$\dot{Q}_i=a\ \dot{q}_i+b\ \dot{p}_i \tag{25}$$

$$\dot{P}_i=a\ \dot{p}_i-b\ \dot{q}_i \tag{26}$$

従って、

$$\dot{Q}_i-\frac{\partial H}{\partial P_i}=a\left(\dot{q}_i-\frac{\partial H}{\partial p_i}\right)+b\left(\dot{p}_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) \tag{27}$$

$$\dot{P}_i+\frac{\partial H}{\partial Q_i}=a\left(\dot{p}_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)-b\left(\dot{q}_i-\frac{\partial H}{\partial p_i}\right) \tag{28}$$

となるから、右辺が0なら Q と P に対しても $Hamilton$ の方程式が成り立つ。

****

さて、正準方程式の形は、(注-1)で見たように p や q を混ぜるような一般的な変数変換に対しても不変でした。正準変換論というのはこのように正準方程式の形を変えないような p や q を混ぜるような変換を探していくということなのですね。

ここの仕上げとして次の演習問題をやっておきましょう(^^)。ただし、ここでの解答は正準変換と母関数の知識を使っています(手抜き)ので、先にそちらを学習しておいたほうがいいかも。。。(^^);;

＝問題＝

***Hamiltonia*の方程式**

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

が変数変換

$$Q_i=Q_i(q_1,\cdots,q_f,p_1,\cdots,p_f),\quad P_i=P_i(q_1,\cdots,q_f,p_1,\cdots,p_f)$$

で形を変えないための条件を求めよ。ただしこの変換の逆変換の存在は仮定する。
また、逆に正準方程式が変数によらず形を変えないのは正準変換に限ることを証明せよ。

＝答え＝

①正準変換 $(q,p)\to(Q,P)$とすると、母関数Wを使って

$$(A)\ \ W=W(Q,p)\ \Rightarrow\ \ q_i=-\frac{\partial W}{\partial p_i},\ \ P_i=-\frac{\partial W}{\partial Q_i}$$

$(B)\ W=W(q,Q)\ \Rightarrow\ p_i=\dfrac{\partial W}{\partial q_i},\quad P_i=-\dfrac{\partial W}{\partial Q_i}$

$(C)\ W=W(P,p)\ \Rightarrow\ q_i=-\dfrac{\partial W}{\partial p_i},\ Q_i=\dfrac{\partial W}{\partial P_i}$

$(D)\ W=W(q,P)\ \Rightarrow\ Q_i=\dfrac{\partial W}{\partial P_i},\quad p_i=\dfrac{\partial W}{\partial q_i}$

となる。

$$(A)\text{より}\ \frac{\partial q_i}{\partial Q_k}=-\frac{\partial}{\partial Q_k}\left(\frac{\partial W}{\partial p_i}\right)=-\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial W}{\partial Q_k}\right)=\frac{\partial P_k}{\partial p_i}$$

$$(B)\text{より}\ \frac{\partial p_i}{\partial Q_k}=-\frac{\partial}{\partial Q_k}\left(\frac{\partial W}{\partial q_i}\right)=-\frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial W}{\partial Q_k}\right)=-\frac{\partial P_k}{\partial p_i}$$

$$(C)\text{より}\ \frac{\partial q_i}{\partial P_k}=-\frac{\partial}{\partial P_k}\left(\frac{\partial W}{\partial p_i}\right)=-\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial W}{\partial P_k}\right)=-\frac{\partial Q_k}{\partial p_i}$$

$$(D)\text{より}\ \frac{\partial p_i}{\partial P_k}=\frac{\partial}{\partial P_k}\left(\frac{\partial W}{\partial q_i}\right)=\frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial W}{\partial P_k}\right)=\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}$$

従って求める条件を整理すると

$$\frac{\partial q_i}{\partial Q_k}=\frac{\partial P_k}{\partial p_i},\quad \frac{\partial p_i}{\partial Q_k}=-\frac{\partial P_k}{\partial p_i},\quad \frac{\partial q_i}{\partial P_k}=-\frac{\partial Q_k}{\partial p_i},\quad \frac{\partial p_i}{\partial P_k}=\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}$$

②$(q,p)\to(Q,P)$を正準変換とし、変換後の*Hamiltonian* を K とすると

$$H(q,p)=K(Q,P)$$

従って次の正準方程式が成り立たなければなりません。

$$\frac{\partial H}{\partial P_i}=\dot{Q}_i,\quad \frac{\partial H}{\partial Q_i}=-\dot{P}_i \qquad \text{(i)}$$

そこで、(i)が成立するための条件を求める。

$$\frac{\partial H}{\partial P_i}-\dot{Q}_i=\sum_k\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial p_k}{\partial P_i}+\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial P_i}\right)-\sum_k\left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k}\dot{q}_k+\frac{\partial Q_i}{\partial p_k}\dot{p}_k\right)$$

$$=\sum_k\left(\frac{\partial p_k}{\partial P_i}-\frac{\partial Q_i}{\partial q_k}\right)\dot{q}_k-\sum_i\left(\frac{\partial q_k}{\partial P_i}+\frac{\partial Q_i}{\partial p_k}\right)\dot{p}_k=0 \qquad \text{(ii)}$$

(ii)式が恒等的に成り立つためには

$$\frac{\partial p_k}{\partial P_i}=\frac{\partial Q_i}{\partial q_k},\quad \frac{\partial q_k}{\partial P_i}=-\frac{\partial Q_i}{\partial p_k} \qquad \text{(iii)}$$

また、

$$\frac{\partial H}{\partial Q_i}+\dot{P}_i=\sum_k\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial p_k}{\partial Q_i}+\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}\right)+\sum_k\left(\frac{\partial P_i}{\partial q_k}\dot{q}_k+\frac{\partial P_i}{\partial p_k}\dot{p}_k\right)$$

$$=\sum_k\left(\frac{\partial p_k}{\partial Q_i}+\frac{\partial P_i}{\partial q_k}\right)\dot{q}_k-\sum_k\left(\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}-\frac{\partial P_i}{\partial p_k}\right)\dot{p}_k=0 \qquad \text{(iv)}$$

(iv)式が恒等的に成り立つためには

$$\frac{\partial p_k}{\partial Q_i} = -\frac{\partial P_i}{\partial q_k}, \quad \frac{\partial q_k}{\partial Q_i} = \frac{\partial P_i}{\partial p_k} \qquad (\mathrm{v})$$

(iii)式、(ｖ)式が成立するのは①より$(q,p) \to \langle Q,P \rangle$が正準変換のときに限られる。//

これでこの項のノートは終わります。頭の中は偏微分の記号で一杯になりませんでしたか？
小生はご多分に漏れずあたまがクラクラしました。。。(^^);;

（以上）