正準変換と母関数について

2001年4月15日

概要

正準変換と母関数の関係についてレポートします。ついでに*Legendre*変換についても簡単にふれます。

Written by KENZOU

【内　容】

［正準変換］

(1)正準変数 $q_i, p_i, Hamiltonian\ H=H(q;p)\quad i=1,\dots,f$

正準方程式 $\dot{q}_i=\dfrac{\partial H(q;p)}{\partial p_i},\ \dot{p}_i=-\dfrac{\partial H(q;p)}{\partial q_i}$ ・・・①

(2)正準変数 $Q_i, P_i, Hamiltonian\ K=K(Q;P)\quad i=1,\dots,f$

正準方程式 $\dot{Q}_i=\dfrac{\partial K(Q;P)}{\partial P_i},\ \dot{P}_i=-\dfrac{\partial K(Q;P)}{\partial Q_i}$ ・・・②

正準変数q_i, p_i, Q_i, P_iが互いに正準変換で結ばれているとき、すなわち

$q_i=q_i(Q_1,\dots,Q_f,P_1,\dots,P_f)\ ,\ p_i=p_i(Q_1,\dots,Q_f,P_1,\dots,P_f)$ ・・・③

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

のとき次の関係式が成り立つ。

$$\sum_i^f p_i\dot{q}_i-H(q;p)=\sum_i^f P_i\dot{Q}_i-K(Q;P)+\frac{dW}{dt}\quad\cdots④$$

ここでWを変換の母関数と呼ぶ。Wは正準変数の任意の関数でよい。

［母関数］

次に、正準変換③、④の具体的な形は母関数Wによって決まることを示します。

④式には$q_i, p_i, Q_i, P_i\ (i=1,\dots,f)$の$4f$個の変数が含まれるが、独立変数の数は$2f$個である。というのは、$4f$個の変数の間には③(④)式で結ばれる$2f$個の関係があるから、結局独立変数の数は$4f-2f$の$2f$個に減ります(^^)。

そこで、母関数Wを$2f$個の変数$q_i, Q_i (i=1,\dots,f)$の関数であるとすると

$$\frac{dW}{dt}=\sum_i^f\left(\frac{\partial W(q;Q)}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial W(q;Q)}{\partial Q_i}\dot{Q}_i\right)\quad\cdots⑤$$

となり、⑤を④に代入して恒等式を解くと正準変換の具体的な形が決まります(^^)。

$$p_i=\frac{\partial W(q;Q)}{\partial q_i},\ P_i=-\frac{\partial W(q;Q)}{\partial Q_i},\ H(q;p)=K(Q;P)\quad\cdots⑥$$

［母関数のいろいろ］
⑥式の母関数は独立変数としてq,Qを選んだが、母関数は独立変数の選び方によって次の４つのうちのいずれかの形に書くことができます。

(A) $W=W(q;Q)$

(B) $W=W(q;P)$

(C) $W=W(p;Q)$

(D) $W=W(p;P)$

次に(A)~(D)のケースで正準変換の具体的な形を調べます。
ここで*Legendre*変換を活用するので、２変数の*Legendre*変換の要点のみをレポートします。
［*Legendre*変換］--
［２変数の*Legendre*変換］・・・（*Legendre*変換の一般論は脚注参照）
２つの変数x,yだけの関数を$f(x,y)$とする。関数fの全微分は、$u=\dfrac{\partial f}{\partial x}$, $v=\dfrac{\partial f}{\partial y}$という新しい変数を導入することで次のように書けます。

$$df=udx+vdy$$

さて、(x,y)という変数から(u,y)という変数に、また(x,y)という変数から(x,v)という変数に変換することを考えます。
①$(x,y)\to(u,y)$への変換
x,yを変数とする記述からu,yを変数とする記述に移ると微分はduおよびdyを用いて表わされることになります。そこで関数gを次式で定義されるu,yの関数とします。なんでこれがu, yの関数なんやねんという疑問は当然起こりますが、少し我慢して$(L\text{-}2)$までいきます。

$$g=f-ux \qquad \cdots(L\text{-}1)$$

ここで、$-ux$という付加項は udx を消すために付け加えていますが、これがミソ(^^)です。
関数gの全微分をとると

$$dg=df-udx-xdu=-xdu+vdy \qquad \cdots(L\text{-}2)$$

となって、これはまさにu,yを変数とする関数gの全微分形式となっています。したがって

$$x=-\frac{\partial g}{\partial u},\quad v=\frac{\partial g}{\partial y} \qquad \cdots(L\text{-}3)$$

とおいても問題ないでしょう。
結局、変数x,yの関数 f は$(L\text{-}1)$の関係を使って変数u,yの関数 g に変換されたと考えることができますね。

②$(x,y)\to(x,v)$への変換：上のケースと同じように考えます。
x,yを変数とする記述からx,vを変数とする記述に移る。そうすると微分はdxおよびdvを用いて表わされる。①のケースと同様にして、関数gを次式で定義されるu,yの関数とします。

$$g=f-vy \qquad \cdots(L\text{-}4)$$

gの微分は

$$dg=df-vdy-ydv=udx-ydv \qquad \cdots(L\text{-}5)$$

となって、x,vを変数とする記述に移ることができました。
ここで

$$y=-\frac{\partial g}{\partial v},\quad u=\frac{\partial g}{\partial x} \qquad \cdots (L\text{-}6)$$

−[以上、$Legendre$変換のメモでした]−−

そこで、本題に戻ります(^^)。
母関数の種類(独立変数の組み合わせの種類分あります)と正準変数−母関数の関係を一覧表として整理しておきます。

	母関数	正準変数と母関数の関係
(A)	$W(q\,;Q)$	$p_i=\frac{\partial W}{\partial q_i},\quad P_i=-\frac{\partial W}{\partial Q_i}$
(B)	$W(q\,;P)$	$p_i=\frac{\partial W}{\partial q_i},\quad Q_i=\frac{\partial W}{\partial P_i}$
(C)	$W(p\,;Q)$	$q_i=-\frac{\partial W}{\partial p_i},\quad P_i=-\frac{\partial W}{\partial Q_i}$
(D)	$W(p\,,P)$	$q_i=-\frac{\partial W}{\partial p_i},\quad Q_i=\frac{\partial W}{\partial P_i}$

[証明]
(A)略
(B) $(q_i, Q_i)\to(q_i, P_i)$の変換は$Legendre$変換②でできます。$(L\text{-}4)$式 $g=f-vy$ で

$$W(q\,;P)\equiv g,\ W(q\,;Q)\equiv f,\ P\equiv v,\ Q\equiv y$$

と対応して考えることができるので(^^);

$$W(q\,;P)=W(q\,;Q)+\sum_i P_iQ_i \qquad \cdots ⑦$$

と書く(※)。⑦に⑥の関係を使って

$$\begin{aligned}
dW(q\,;P)&=dW(q\,;Q)+d\left(\sum_i P_iQ_i\right)\\
&=\sum_i\left(\frac{\partial W(q\,;Q)}{\partial q_i}dq_i+\frac{\partial W(q\,;Q)}{\partial Q_i}dQ_i+Q_idP_i+P_idQ_i\right)\\
&=\sum_i\left(p_idq_i-P_idQ_i+Q_idP_i+P_idQ_i\right)\\
&=\sum_i\left(p_idq_i+Q_idP_i\right) \qquad \cdots ⑧
\end{aligned}$$

(※)⑦式の右辺第2項で符号をプラスにしたのは、⑥より$\frac{\partial W(q\,;Q)}{\partial Q_i}=-P_i$とマイナス符号になるから、この項を消すためにプラス符号とした。このへんがどうも意図的であまり好きではありませんが。。。

⑧式をよく眺めると母関数は独立変数$q\,,P$で記述されていることが分かりますね(^^)。

一方

$$dW(q;P)=\sum_i\left(\frac{\partial W(q;P)}{\partial q_i}dq_i+\frac{\partial W(q;P)}{\partial P_i}dP_i\right) \qquad \cdots⑨$$

⑧と⑨は等しいから

$$p_i=\frac{\partial W(q;P)}{\partial q_i},\ Q_i=\frac{\partial W(q;P)}{\partial P_i} \qquad \cdots⑩$$

(C) $(q_i,Q_i)\to(p_i,Q_i)$の変換はLegendre変換①でできる。 (L-1)式 $g=f-ux$ で

$W(p;Q)\equiv g$, $W(q;Q)\equiv f$, $q\equiv x$, $p\equiv u$

と対応して考えることができるので

$$W(p;Q)=W(q;Q)-\sum_i p_iq_i \qquad \cdots⑪$$

と書く。

$$dW(p;Q)=dW(q;Q)-d\left(\sum_i p_iq_i\right)$$

$$=\sum_i\left(\frac{\partial W(q;Q)}{\partial q_i}dq_i+\frac{\partial W(q;Q)}{\partial Q_i}dQ_i-q_idp_i-p_idq_i\right)$$

$$=\sum_i\left(p_idq_i-P_idQ_i-q_idp_i-p_idq_i\right)$$

$$=\sum_i\left(-P_idQ_i-q_idp_i\right) \qquad \cdots⑫$$

一方

$$dW(p;Q)=\sum_i\left(\frac{\partial W(p;Q)}{\partial p_i}dp_i+\frac{\partial W(p;Q)}{\partial Q_i}dQ_i\right) \qquad \cdots⑬$$

⑫と⑬は等しいから

$$q_i=-\frac{\partial W(p;Q)}{\partial p_i},\ -P_i=\frac{\partial W(p;Q)}{\partial Q_i} \qquad \cdots⑭$$

(D) $(p_i,Q_i)\to(p_i,P_i)$のLegendre変換を考える。(L-4)式 $g=f-vy$ で

$W(p;P)\equiv g$, $W(p;Q)\equiv f$, $P\equiv v$, $Q\equiv y$

と対応して考えることができるので

$$W(p;P)=W(p;Q)+\sum_i P_iQ_i$$

$$=W(q;Q)-\sum_i p_iq_i+\sum_i P_iQ_i \qquad \cdots⑮$$

$$dW(p;P)=\sum_i\left(-P_idQ_i-q_idp_i\right)+d\left(\sum_i P_iQ_i\right)$$

$$=\sum_i\left(-P_idQ_i-q_idp_i+Q_idP_i+P_idQ_i\right)$$

$$=\sum_i \left(-q_i dp_i + Q_i dP_i\right) \qquad \cdots ⑯$$

一方

$$dW(p\,;P)=\sum_i \left(\frac{\partial W(p\,;P)}{\partial p_i}dp_i+\frac{\partial W(p\,;P)}{\partial P_i}dP_i\right) \qquad \cdots ⑰$$

⑯と⑰は等しいから

$$q_i=-\frac{\partial W(p\,;P)}{\partial p_i},\quad Q_i=\frac{\partial W(p\,;P)}{\partial P_i} \qquad \cdots ⑱$$

ずいぶん強引な議論だったのではないか(^^);と思いますが、分かっていただけたでしょうか。
小生の理解はここまでです。ご批判戴ければ嬉しいです。

＝【脚 注】＝＝＝ ・・・あまり参考にならないが。。。

[$Legendre$変換の一般論]

n個の変数$x_1,\ldots,x_n$の与えられた関数を$f=f(x_1,\ldots,x_n)$とします。関数f の全微分は、

$v_i=\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ $(i=1,\ldots,n)$ という新しい変数を導入することで

$$df=\sum_i^n v_i dx_i$$

と書けます

さて、$(x_1,\ldots,x_n)$という変数から$(v_1,\ldots,v_n)$という変数に変換することを考えます。
そこで関数gを次式で定義されるv_i, x_iの関数とします。

$$g=f-\sum_i^n v_i x_i \qquad \cdots (L\text{-}7)$$

関数gの全微分をとると

$$dg=df-\sum_i^n (v_i dx_i+x_i dv_i)=-\sum_i^n x_i dv_i \qquad \cdots (L\text{-}8)$$

となって、これはまさに$v_i(i=1,\ldots,n)$を変数とする関数gの全微分形式となっています。
したがって

$$x_i=-\frac{\partial g}{\partial v_i} \qquad \cdots (L\text{-}9)$$

とおいても問題ないでしょう。

結局、変数$(x_1,\ldots,x_n)$の関数 f は$(L\text{-}8)$の関係を使って変数$(v_1,\ldots,v_n)$の関数gに変換されたと考えることができますね。整理すると以下のような流れになります。

$$f=f(x_1,\ldots,x_n),\ g=f-\sum_i^n v_i x_i \Rightarrow g=g(v_1,\ldots,v_n),\ \frac{\partial g}{\partial v_i}=-x_i \quad \cdots (L\text{-}10)$$

ついでに$Legendre$変換の拡張版を調べておきます。

関数 f が変数$x_1,\ldots,x_n$の他にパラメータ$a_1,\ldots,a_m$を含んでいる場合を調べます。

$$f=f(x_1,\dots,x_n;a_1,\dots,a_m) \qquad \cdots(L\text{-}11)$$

このとき、

$$g=f-\sum_i^n v_i x_i \qquad \cdots(L\text{-}12)$$

という関数を考えると$(L\text{-}10)$の流れから関数gは

$$g=g(v_1,\dots,v_n;a_1,\dots,a_m),\ \frac{\partial g}{\partial v_i}=-x_i \qquad \cdots(L\text{-}13)$$

とパラメータ$a_1,\dots,a_m$を含む変数$v_1,\dots,v_n$の関数となります。

$(L\text{-}13)$より

$$dg=\sum_i^n \frac{\partial g}{\partial v_i}dv_i+\sum_k^m \frac{\partial g}{\partial a_k}da_k$$

$$=-\sum_i^n x_i dv_i+\sum_k^m \frac{\partial g}{\partial a_k}da_k \qquad \cdots(L\text{-}14)$$

また、$(L\text{-}12)$より

$$dg=-\sum_i^n x_i dv_i+\sum_k^m \frac{\partial f}{\partial a_k}da_k \qquad \cdots(L\text{-}15)$$

$(L\text{-}14)$と$(L\text{-}15)$は同値であるから

$$\frac{\partial f}{\partial a_k}=\frac{\partial g}{\partial a_k} \qquad k=1,2,\dots m \qquad \cdots(L\text{-}16)$$

が成立します。

この場合、x_iやv_iを能動変数(*active variable*)、a_kを受動変数(*passive variable*)というらしい(^^);;。