講義用ノート（作成 7/4/2002）

Hamilton 形式の力学における正準変換

田崎晴明[1]

正準変換の一般論と例を簡潔にまとめた。必要な結果はすべてここで示してある。簡単のため一変数の場合だけを議論するが、多変数の場合も少し注意すればそのまま同じように議論できる。

1 正準変換

正準座標 q と正準運動量 p で記述される力学系がある。Hamiltonian を $H(p,q)$ とすると、Hamilton の運動方程式は、

$$\begin{aligned} \dot{p}(t) &= -\left.\frac{\partial H(p,q)}{\partial q}\right|_{p=p(t),q=q(t)} \\ \dot{q}(t) &= \left.\frac{\partial H(p,q)}{\partial p}\right|_{p=p(t),q=q(t)} \end{aligned} \tag{1.1}$$

である。

ここで、p, q という変数の組を、別の変数の組 P, Q に変換する。

実現される軌道 $p(t)$, $q(t)$ から上の変換で決まる P, Q の軌道を $P(t)$, $Q(t)$ と書く。また、前と同じ Hamiltonian を P, Q の関数として表したものも（やや怠慢な記法だが）$H(P,Q)$ と書いてしまおう。（正確にいえば、$\tilde{H}(P,Q) = H(p(P,Q), q(P,Q))$ によって新しい関数 $\tilde{H}(P,Q)$ を定義し、これを単に $H(P,Q)$ と書いた。）

上の変換が**正準変換**であるとは、P, Q の変数についても、Hamilton の方程式

$$\begin{aligned} \dot{P}(t) &= -\left.\frac{\partial H(P,Q)}{\partial Q}\right|_{P=P(t),Q=Q(t)} \\ \dot{Q}(t) &= \left.\frac{\partial H(P,Q)}{\partial P}\right|_{P=P(t),Q=Q(t)} \end{aligned} \tag{1.2}$$

が成り立つことである。

ここで、(1.2) で工夫して新しい Hamiltonian をもってきているのではないことに注意。はじめと同じ Hamiltonian を、そのまま（変数変換だけして）使っている。

よって、虚心坦懐に変換をつくっても、普通は正準変換にはならない。以下では、変換が正準変換になるための条件と変換を構成する方法を議論する。

[1] http://www.gakushuin.ac.jp/~881791/, hal.tasaki@gakushuin.ac.jp

2　Poisson の括弧式と正準変換

2.1　Poisson の括弧式

p, q の任意の関数 $f(p,q)$, $g(p,q)$ について、新たな p, q の関数 $[f,g]$ を以下のように定義する[2]。

$$[f,g] = \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} \tag{2.1}$$

すると、一般に

$$[f,f] = 0 \tag{2.2}$$

が成り立つ。また、

$$\frac{d}{dt}f(p(t),q(t)) = [H,f]|_{p=p(t),q=q(t)} \tag{2.3}$$

も成り立つ。

また q, p については、

$$[p,q] = 1 \tag{2.4}$$

という関係が成り立つ。

2.2　正準変換との関係

再び、p, q とから別の変数の組 P, Q への変換を考える。

この変換が正準変換であるための必要十分条件は、

$$[P,Q] = 1 \tag{2.5}$$

が成立することである。

以下、この事実を証明する。

(p,q) が (P,Q) に変換され、$(p+\Delta p, q+\Delta q)$ が $(P+\Delta P, Q+\Delta Q)$ に変換されるとする。Δp, Δq が微小とすると、これらの「ずれ」は、次の関係で結ばれる[3]。

$$\begin{pmatrix} \Delta P \\ \Delta Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q & \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p \\ \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q & \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta p \\ \Delta q \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

[2] $[f,g]$ というのは引数を省略した書き方。省略しないとすると、$[f,g]$ が関数の名前だと考えて、$[f,g](p,q)$ と書くべきだろう。こういう書き方はほとんど見ないが。

[3] 二変数関数の一次までの Taylor 展開をまとめて書いただけ。

ここで、 $\left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q$ は、q を一定にして p で微分することを意味する。他も同様。

同じものを逆に P, Q から p, q への変換とみると、

$$\begin{pmatrix} \Delta p \\ \Delta q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial p}{\partial P}\right)_Q & \left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)_P \\ \left(\frac{\partial q}{\partial P}\right)_Q & \left(\frac{\partial q}{\partial Q}\right)_P \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta P \\ \Delta Q \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

も成立する。

ここで、(2.6) と (2.7) の関係がともに任意の微小変化について成立するのだから、二つの行列について、

$$\begin{pmatrix} \left(\frac{\partial p}{\partial P}\right)_Q & \left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)_P \\ \left(\frac{\partial q}{\partial P}\right)_Q & \left(\frac{\partial q}{\partial Q}\right)_P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q & \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p \\ \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q & \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p \end{pmatrix}^{-1} \tag{2.8}$$

がいえる。逆行列をあからさまに求めると、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial p}{\partial P}\right)_Q & \left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)_P \\ \left(\frac{\partial q}{\partial P}\right)_Q & \left(\frac{\partial q}{\partial Q}\right)_P \end{pmatrix} &= \left\{ \left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p - \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q \right\}^{-1} \times \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p & -\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p \\ -\left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q & \left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{[P,Q]} \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p & -\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p \\ -\left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q & \left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.9}$$

となる。最左辺と最右辺で各成分を見比べることで、導関数についての四つの関係式が得られる。たとえば、右側の二つの成分から、

$$\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p = -[P,Q] \left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)_P \tag{2.10}$$

と

$$\left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q = [P,Q] \left(\frac{\partial q}{\partial Q}\right)_P \tag{2.11}$$

が得られる。

ここで、 $P(t) = P(p(t), q(t))$ を t で微分し、$p(t)$, $q(t)$ についての運動方程式と上で求め

た (2.10), (2.11) を用いると、

$$\begin{aligned}\dot{P}(t) &= \frac{d}{dt}P(p(t), q(t)) \\ &= \dot{p}(t)\left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q + \dot{q}(t)\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p \\ &= -\left(\frac{\partial H}{\partial q}\right)_p\left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q + \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_q\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p \\ &= -[P, Q]\left\{\left(\frac{\partial H}{\partial q}\right)_p\left(\frac{\partial q}{\partial Q}\right)_P + \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_q\left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)_P\right\} \\ &= -[P, Q]\left(\frac{\partial H}{\partial Q}\right)_P \qquad (2.12)\end{aligned}$$

が得られる。唯一予想外なのが最後の等号だが、確かにもとの形をよく見ると二変数関数での微分の変数変換の形 (chain rule) になっている。

$\dot{Q}(t)$ についても、同様の計算ができる。（やってみよう。）その結果と (2.12) をまとめて書くと、

$$\begin{aligned}\dot{P}(t) &= -[P, Q]\left.\frac{\partial H(P, Q)}{\partial Q}\right|_{P=P(t), Q=Q(t)} \\ \dot{Q}(t) &= [P, Q]\left.\frac{\partial H(P, Q)}{\partial P}\right|_{P=P(t), Q=Q(t)} \qquad (2.13)\end{aligned}$$

となる。正準変換の定義を与える (1.2) と比較すれば、たしかに、$[P, Q] = 1$ が正準変換の必要十分条件であることがわかる。

3 母関数と正準変換

次に、母関数を用いた正準変換の構成法を議論する。

$F(q, Q)$ を q と Q の任意の関数とする。この $F(q, Q)$ を変換の母関数とよぶ。

母関数を使って次の二つの関係式を書いてみる。

$$p = \frac{\partial F(q, Q)}{\partial q} \qquad (3.1)$$

$$P = -\frac{\partial F(q, Q)}{\partial Q} \qquad (3.2)$$

これは、q, Q の関数として p, P を表した関係だが、いずれにせよ p, q, P, Q という四つの量の間の関係を定める。よって、母関数を一つ決めれば、p, q から P, Q への変換を一つ定まることになる。

実は、(3.1), (3.2) の形に書けることが、この変換が正準変換であるための必要十分条件なのである。よって、正準変換と関数が対応しているのだから、実は正準変換は無数に存在することがわかる。

以下では、この事実を証明する。

(3.1), (3.2) の書き方にあわせて、 q, Q を独立変数とみなし、 p, P を $p(q,Q), P(q,Q)$ のような関数とみなすことにする。この表示で、Poisson 括弧式

$$[P,Q] = \left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p - \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q \tag{3.3}$$

を計算しよう。

まず、 q を固定し、 Q を $Q \to Q + \Delta Q$ と微小変化させる。これにともなう p と P の微小変化を、それぞれ、 $\Delta p, \Delta P$ とする。よって

$$\Delta P = P(q, Q+\Delta Q) - P(q,Q) = \Delta Q \left(\frac{\partial P}{\partial Q}\right)_q \tag{3.4}$$

となる。これより

$$\left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q = \frac{\Delta P}{\Delta p} = \frac{\Delta Q}{\Delta p}\left(\frac{\partial P}{\partial Q}\right)_q = \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q \left(\frac{\partial P}{\partial Q}\right)_q \tag{3.5}$$

という関係を得る[4]。

次に、 p を固定した微分を扱うため、

$$p(q,Q) = p(q+\Delta q, Q+\Delta Q) \tag{3.6}$$

という関係を保ちつつ $q \to q+\Delta q$, $Q \to Q+\Delta Q$ という微小変化を行う。これにともなう q と P の微小変化を、それぞれ、 $\Delta q, \Delta P$ とする。よって

$$\Delta P = P(q+\Delta q, Q+\Delta Q) - P(q,Q) = \Delta q \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_Q + \Delta Q \left(\frac{\partial P}{\partial Q}\right)_q \tag{3.7}$$

となる。ここから、

$$\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_p = \frac{\Delta P}{\Delta q} = \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_Q + \frac{\Delta Q}{\Delta q}\left(\frac{\partial P}{\partial Q}\right)_q = \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_Q + \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p \left(\frac{\partial P}{\partial Q}\right)_q \tag{3.8}$$

という関係を得る。

[4] $\left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)_q = \frac{\Delta P}{\Delta p}$ などと書けるのは、一貫して q を一定にした上での微小変化を扱っているからである。

ここで (3.5), (3.8) の関係を Poisson の括弧式 (3.3) に代入すれば、

$$\begin{aligned}[P,Q] &= \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q \left(\frac{\partial P}{\partial Q}\right)_q \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p - \left\{\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_Q + \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)_p \left(\frac{\partial P}{\partial Q}\right)_q\right\} \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q \\ &= -\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_Q \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q \end{aligned} \tag{3.9}$$

となる。よって、 $[P,Q]=1$ は

$$\frac{\partial P(q,Q)}{\partial q} = -\frac{\partial p(q,Q)}{\partial Q} \tag{3.10}$$

という条件[5]と同値である。ここで、 q を固定すれば Q は p のみの関数とみなせるので、一変数関数の逆関数の微分についての関係

$$\left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)_q = \left\{\left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)_q\right\}^{-1} \tag{3.11}$$

を使った。

前節の結果を使えば、関係 (3.10) は、p, q から P, Q への変換が正準変換であるための必要十分条件であることがわかった。

今、p, q から P, Q への変換が何らかの母関数 $F(q,Q)$ を使って (3.1), (3.2) で与えられるなら、関係 (3.10) が成立することは自明である。（代入してみよう。）逆に、関係 (3.10) が成立すれば適切な母関数 $F(q,Q)$ を使って変換を (3.1), (3.2) のように表されることも簡単にわかる。たとえば、電磁気学とのアナロジーで次のように考えてみよう。見通しをよくするために（わざわざやる必要もないが）、変数や関数の名前を $q \to x$, $Q \to y$, $p \to -u$, $Q \to v$ と書き換えると、 (3.1), (3.2) は

$$\begin{pmatrix} u(x,y) \\ v(x,y) \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} F(x,y) \tag{3.12}$$

とまとめられる。つまりベクトル場 $(u(x,y), v(x,y))$ が（静電場のように）スカラー場 $F(x,y)$ の勾配 (gradient) で表現できるということだ。このような表現が可能な必要十分条件は、ベクトル場が回転 (rotation) を持たないこと、つまり[6]、

$$\frac{\partial v(x,y)}{\partial x} - \frac{\partial u(x,y)}{\partial y} = 0 \tag{3.13}$$

だが、これはまさに (3.10) に他ならない。

これで、この節の冒頭に示した事実が証明された。

[5]今までの書き方では、$\left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)_Q = -\left(\frac{\partial p}{\partial Q}\right)_q$

[6]このベクトル場は $(u,v,0)$ のように z 成分をもたないので、rotation は z 成分のみがゼロでない。

4　正準変換の例

4.1　一般座標変換

Lagrange 形式で議論した一般座標変換を Hamilton 形式に翻訳すれば、自動的に正準変換が得られることをみよう。ただし、このような変換では座標と運動量が別個に扱われるので、Hamilton 形式ならではの面白みはない。

まず Lagrange 形式から。座標を q とし、Lagrangian を $L(q, \dot{q})$ とする。一般化運動量を

$$p = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)_q \tag{4.1}$$

とし、Hamiltonian を

$$H = p\dot{q} - L \tag{4.2}$$

として Hamilton 形式に移行した。こうすると Hamilton 方程式 (1.1) が成立する。

ここで任意の単調な関数 $f(\cdot)$ を使って、

$$Q = f(q) \tag{4.3}$$

という一般的な座標変換を行う。(4.3) を時間微分して、

$$\dot{Q} = f'(q)\dot{q} \tag{4.4}$$

を得る。Q に対応する一般化運動量は

$$P = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}}\right)_Q = \frac{1}{f'(q)}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)_q = \frac{p}{f'(q)} \tag{4.5}$$

である。ここで、q を固定すれば、(4.4) は単なる定数倍の変換に過ぎないことを使った。ここで Q, P を正準座標、正準運動量とする Hamilton 形式の力学を考えると、Hamiltonian は、

$$H' = P\dot{Q} - L = p\dot{q} - L \tag{4.6}$$

となる。二つ目の等号は、(4.4), (4.5) からでる。けっきょく (4.2) の Hamiltonian H と同じものになる。よって、 q, p から Q, P への変換は正準変換である。

4.2　座標と運動量が混ざる例

もっとも典型的な例（ただし、役には立たない。）は、母関数

$$F(q, Q) = qQ \tag{4.7}$$

から得られる正準変換である。(3.1), (3.2) より、 $p = Q$, $P = -q$ が得られる。つまり、新しい座標と運動量を

$$Q = p, \quad P = -q \tag{4.8}$$

のように定義するということである。座標と運動量が入れ替わってしまったが、たしかに、これでも Hamilton 方程式の形は不変である。このように、Hamilton 形式の力学では、座標と運動量という区別が明確な意味をもたなくなる。

次に調和振動子の例を扱う。Hamiltonian を、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \tag{4.9}$$

と書こう。ω は定数である。ここで母関数

$$F(q, Q) = \frac{m\omega q^2}{2\tan Q} \tag{4.10}$$

から決まる正準変換を行う。

(3.1), (3.2) より

$$\begin{aligned} p &= \frac{m\omega q}{\tan Q} \\ P &= \frac{m\omega q^2}{2\sin^2 Q} \end{aligned} \tag{4.11}$$

となる。このままでは、どういう変換かわからないので、(4.11) を P, Q について解くと、

$$\begin{aligned} Q &= \tan^{-1}\left(\frac{m\omega q}{p}\right) \\ P &= \frac{p^2}{2m\omega} + \frac{m\omega q^2}{2} \end{aligned} \tag{4.12}$$

となる。ここで、(4.9) と (4.12) の二つ目の式を見比べると、新しい変数で表した Hamiltonian は、

$$H = \omega P \tag{4.13}$$

であることがわかる。Hamilton の運動方程式 (1.2) は、

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= \frac{\partial H}{\partial P} = \omega \\ \dot{P} &= -\frac{\partial H}{\partial Q} = 0 \end{aligned} \tag{4.14}$$

となる。これは自明な方程式で、解は、もちろん

$$Q = \omega t + Q_0, \quad P = P_0 \tag{4.15}$$

である。(Q_0, P_0 は定数。)