§13 正準変換の積分不変量

配位空間での閉曲線経路に沿った積分は，正準変換で不変となる，また位相空間における一対の正準変数が与える二次元面積素片の積分も正準変換で不変である．これを全ての正準変数対まで拡張した結果が，位相空間体積は保存されるとのリュービル(Liouville)の定理である．ここでは一般論を述べ，具体例は次章で示す．

1）積分不変量：配位空間での閉曲線経路積分

$(q_i, p_i) \to (Q_i, P_i) \quad (i = 1,2,...,f)$ の変換に際し，母関数 W として $W(q_i, Q_i, t)$ を採用すると，

$$W(q_i, Q_i, t) \ : \quad p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i}, \qquad P_i = -\frac{\partial W}{\partial Q_i}, \qquad H' = H + \frac{\partial W}{\partial t} \tag{1}$$

が成立する．そこで，$(q_1, q_2, ...,q_f)$配位空間での任意の経路を考え，そこでの q の座標変化を$(\delta q_1, \delta q_2, ...,\delta q_f)$とし，この経路に対応する$(Q_1, Q_2, ...,Q_f)$配位空間で Q の座標変化を$(\delta Q_1, \delta Q_2, ...,\delta Q_f)$とする．$(q_1, q_2, ...,q_f)$と$(Q_1, Q_2, ...,Q_f)$は時間 t の関数と考えると，§9 の(12)で dt の項が落ちるから，

$$dW(q_i, Q_i) = \sum_{i=1}^{f} p_i dq_i - \sum_{i=1}^{f} P_i dQ_i \tag{2}$$

である．既に述べたように，これは右辺の微分式が W の全微分に対応する完全微分であることを意味している．　正準変換は，$\sum_{i=1}^{f} p_i dq_i - \sum_{i=1}^{f} P_i dQ_i$が完全微分であるような変換であるとも言える．そして，$\sum_{i=1}^{f}(p_i \delta q_i - P_i \delta Q_i)$を作ってみる．(1)が使え，かつ，

$$W(q_i, Q_i, t) = W(q_i(t), Q_i(t)) = W(q_i, Q_i) \tag{1'}$$

となるから，

$$\sum_{i=1}^{f}(p_i \delta q_i - P_i \delta Q_i) = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial W}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial W}{\partial Q_i}\delta Q_i\right) = \delta W \tag{3}$$

となる．経路は任意であるので，元の点にもどる閉曲線経路を考えると，**(3)**の右辺は０でなければならない．従って，$(q_{1,},q_2,.....,q_f)$配位空間での任意の閉曲線経路とこれに対応する$(Q_{1,},Q_2,.....,Q_f)$配位空間での閉曲線経路に対して，

$$\oint\sum_{i=1}^{f} p_i\delta q_i = \oint\sum_{i=1}^{f} P_i\delta Q_i \tag{4}$$

が成り立つ．任意の閉曲線経路についての運動量の積分は，ある正準変数(q_i,p_i)が別の正準変数(Q_i,P_i) に変換されても不変である．即ち，正準変換で不変である．

２） 積分不変量：位相空間における２次元積分

$(q_{1,},q_2,.....,q_f;p_{1,},p_2,.....,p_f)$の位相空間における２次元の表面を考える．正準変数対が作る２次元の表面素片はdp_idq_iであるので，これをp_i, q_i について積分し，i について和を取る．即ち，

$$\sum_i\iint dp_idq = \iint\sum_i dp_idq_i \tag{5}$$

このような２次元積分を考える．積分してから和を取ることは，和をとって積分しても同じである．

今， p_i, q_i は (u,v)の２変数をパラメーターとして，

$$\begin{aligned} &q_{1,} = q_{1,}(u,v),\ q_2 = q_2(u,v),\ .....,\ q_f = q_f(u,v) \\ &p_1 = p_{1,}(u,v),\ p_2 = p_2(u,v),\ .....,\ p_f = p_f(u,v) \end{aligned} \tag{6}$$

と与えられているとする．このp_i, q_i についての積分は，p_i, q_iが(6)のようにu, v の関数であるから，u, v についての積分に直すことが出来る．その時，表面素片dp_idq_iが新変数での素片$dudv$の何倍になっているかを決めことが必要になる．

$$dp_idq_i = \frac{\partial(p_i,q_i)}{\partial(u,v)}dudv = \begin{vmatrix} (\frac{\partial p_i}{\partial u}) & (\frac{\partial p_i}{\partial v}) \\ (\frac{\partial q_i}{\partial u}) & (\frac{\partial q_i}{\partial v}) \end{vmatrix} dudv \tag{7}$$

Jacobian 行列式， $\dfrac{\partial(p_i,q_i)}{\partial(u,v)}$，がこの値である．単に Jacobian，或は 函数行列式とも

呼ばれる．$x = x(u)$である一次元の積分の場合，x に関する積分は，$dx = (dx/du)du$として，u の積分に直す．一変数の積分の場合の(dx/du)が，二変数の積分では, (7)の Jacobian 行列式となる．

一般に多変数の積分の変数変換には，必ずこの Jacobian 行列式が現れる．

$f = f(x,y,z,....)$，$g = g(x,y,z,.....)$，$h = h(x,y,z,.....)$,...............

である時の積分の変換は

$$dfdgdh\cdots = \frac{\partial(f,g,h,......)}{\partial(x,y,x,......)}dxdydz\cdots \quad (8)$$

となり，その時の Jacobian 行列式は，(n,n)行列式として

$$\frac{\partial(f,g,h,......)}{\partial(x,y,x,......)} = \begin{vmatrix} (\frac{\partial f}{\partial x}) & (\frac{\partial f}{\partial y}) & (\frac{\partial f}{\partial z}) & \bullet \\ (\frac{\partial g}{\partial x}) & (\frac{\partial g}{\partial y}) & (\frac{\partial g}{\partial z}) & \bullet \\ (\frac{\partial h}{\partial x}) & (\frac{\partial h}{\partial y}) & (\frac{\partial h}{\partial z}) & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{vmatrix} \quad (9)$$

である．（Jacobian 行列式については，多変数の積分に関する解析学のテキストを必ず参照されたい．）

正準変数対p_i, q_iがなす２次元の表面素片の積分の話に戻る．このp_i, q_iについての二次元積分をJ_1とすると，これは，u，v の積分としては以下のようになる．

$$J_1 \equiv \iint \sum_i dp_i dq_i = \iint \sum_i \frac{\partial(p_i,q_i)}{\partial(u,v)}dudv = \iint \sum_i \begin{vmatrix} (\frac{\partial p_i}{\partial u}) & (\frac{\partial p_i}{\partial v}) \\ (\frac{\partial q_i}{\partial u}) & (\frac{\partial q_i}{\partial v}) \end{vmatrix} dudv \quad (10)$$

一方，別の正準変数対P_i, Q_iがなす位相空間での２次元の表面素片の積分を

$$J'_1 \equiv \iint \sum_i dP_i dQ_i = \iint \sum_i \frac{\partial(P_i,Q_i)}{\partial(u,v)}dudv = \iint \sum_i \begin{vmatrix} (\frac{\partial P_i}{\partial u}) & (\frac{\partial P_i}{\partial v}) \\ (\frac{\partial Q_i}{\partial u}) & (\frac{\partial Q_i}{\partial v}) \end{vmatrix} dudv \quad (11)$$

を考え $J_1 = J'_1$ となることを示す.

正準変換である $(q_i,\ p_i) \to (Q_i,\ P_i)$ の変換を，次の母関数を用いて考える.

$$\mathrm{W}(q_i, P_i, t): \quad p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial W}{\partial P_i}, \qquad H' = H + \frac{\partial W}{\partial t} \tag{12}$$

t は変数のパラメーターとして W は陽に t を含まないとして，これらを用いて Jacobian の $(\frac{\partial p_i}{\partial u})$ と $(\frac{\partial p_i}{\partial v})$ を $\mathrm{W}(q_i, P_i)$ を用いて書き直す．同様に， Jacobian の $(\frac{\partial Q_i}{\partial u})$ と $(\frac{\partial Q_i}{\partial v})$ を $\mathrm{W}(q_i, P_i)$ を用いて書き直し， $J_1 = J'_1$ であることを示せば良い.

まず， $(\frac{\partial p_i}{\partial u}) = \frac{\partial}{\partial u}(\frac{\partial W}{\partial q_i})$ から考える.

$W = W(q_1, q_2, ..., q_f; P_1, P_2, ..., P_f)$ と考えているから， $(\partial W / \partial q_i)$ も $(q_1, q_2, ..., q_f; P_1, P_2, ..., P_f)$ の函数である． $(\partial W / \partial q_i) = w(q_1, q_2, ..., q_f; P_1, P_2, ..., P_f)$ と書く.

$w(q_1, q_2, ..., q_f; P_1, P_2, ..., P_f)$ を u で偏微分することは，合成関数の偏微分規則,

函数 $f(x_1, x_2, ..., x_n)$ *の変数である* $x_1(u, v, ..)$, $x_2(u, v, ..)$, ..., $x_n(u, v, ..)$ *が別の変数* $(u, v, ..)$ *の函数である時,*

$$\frac{\partial f}{\partial u} = \sum_{i=}^{n} (\frac{\partial f}{\partial x_i})(\frac{\partial x_i}{\partial u}), \qquad \frac{\partial f}{\partial v} = \sum_{i=}^{n} (\frac{\partial f}{\partial x_i})(\frac{\partial x_i}{\partial v}) \tag{13}$$

である（この合成関数の偏微分則はこれまでにも何回も使って来ている）.

従って，(13)を使って,

$$(\frac{\partial p_i}{\partial u}) = \frac{\partial}{\partial u}(\frac{\partial W}{\partial q_i}) = \frac{\partial w}{\partial u} = \sum_{j=1}^{f} (\frac{\partial w}{\partial q_j}\frac{\partial q_j}{\partial u} + \frac{\partial w}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial u})$$

$$= \sum_{j=1}^{f} (\frac{\partial^2 \mathrm{W}}{\partial q_j \partial q_i} \cdot \frac{\partial q_j}{\partial u} + \frac{\partial^2 \mathrm{W}}{\partial P_j \partial q_i} \cdot \frac{\partial P_j}{\partial u}) \tag{14}$$

である．同様にして，v による偏微分も以下の結果となる.

$$(\frac{\partial p_i}{\partial v}) = \frac{\partial}{\partial v}(\frac{\partial W}{\partial q_i}) = \frac{\partial w}{\partial v} = \sum_{j=1}^{f} (\frac{\partial^2 \mathrm{W}}{\partial q_j \partial q_i}\frac{\partial q_j}{\partial v} + \frac{\partial^2 \mathrm{W}}{\partial P_j \partial q_i}\frac{\partial P_j}{\partial v}) \tag{15}$$

(14)と(15)の結果を, (10)の Jacobian 行列式の $(\frac{\partial p_i}{\partial u})$ と $(\frac{\partial p_i}{\partial v})$ に代入して, 和をとると,

$$\sum_i \begin{vmatrix} (\frac{\partial p_i}{\partial u}) & (\frac{\partial p_i}{\partial v}) \\ (\frac{\partial q_i}{\partial u}) & (\frac{\partial q_i}{\partial v}) \end{vmatrix} = \sum_i \{(\frac{\partial p_i}{\partial u})(\frac{\partial q_i}{\partial v}) - (\frac{\partial p_i}{\partial v})(\frac{\partial q_i}{\partial u})\}$$

$$= \sum_{i=}^{f}\sum_{j=1}^{f}\{(\frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial q_i}\cdot\frac{\partial q_j}{\partial u}\cdot\frac{\partial q_i}{\partial v} + \frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial q_i}\cdot\frac{\partial P_j}{\partial u}\cdot\frac{\partial q_i}{\partial v}) - (\frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial q_i}\cdot\frac{\partial q_j}{\partial v}\cdot\frac{\partial q_i}{\partial u} + \frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial q_i}\cdot\frac{\partial P_j}{\partial v}\cdot\frac{\partial q_i}{\partial u})\}$$

$$= \sum_{i=1}^{f}\sum_{j=1}^{f}(\frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial q_i}\cdot\frac{\partial P_j}{\partial u}\cdot\frac{\partial q_i}{\partial v} - \frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial q_i}\cdot\frac{\partial P_j}{\partial v}\cdot\frac{\partial q_i}{\partial u}) = \sum_{i=1}^{f}\sum_{j=1}^{f}\frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial q_i}\{(\frac{\partial P_j}{\partial u})(\frac{\partial q_i}{\partial v}) - (\frac{\partial P_j}{\partial v})(\frac{\partial q_i}{\partial u})\}$$

となる．二行目で，第一括弧の第一項と第二括弧の第一項は i,j についての和を取ることで相殺され，二つの括弧の第二項のみが残る．これが Jacobian の形に書けることはすぐに判るから，

$$\sum_i \begin{vmatrix} (\frac{\partial p_i}{\partial u}) & (\frac{\partial p_i}{\partial v}) \\ (\frac{\partial q_i}{\partial u}) & (\frac{\partial q_i}{\partial v}) \end{vmatrix} = \sum_j \sum_i (\frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial q_i}) \begin{vmatrix} (\frac{\partial P_j}{\partial u}) & (\frac{\partial P_j}{\partial v}) \\ (\frac{\partial q_i}{\partial u}) & (\frac{\partial q_i}{\partial v}) \end{vmatrix} \tag{16}$$

である．従って，(10)は,

$$J_1 \equiv \iint \sum_i dp_i dq_i = \iint \sum_j \sum_i (\frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial q_i}) \begin{vmatrix} (\frac{\partial P_j}{\partial u}) & (\frac{\partial P_j}{\partial v}) \\ (\frac{\partial q_i}{\partial u}) & (\frac{\partial q_i}{\partial v}) \end{vmatrix} dudv \tag{17}$$

(11)の Jacobian の $(\frac{\partial Q_i}{\partial u})$ と $(\frac{\partial Q_i}{\partial v})$ も， $Q_i = \frac{\partial W(q_i, P_i)}{\partial P_i}$ を用いて次のように書き直す.

$$(\frac{\partial Q_i}{\partial u}) = \frac{\partial}{\partial u}(\frac{\partial Q_i}{\partial P_i}) = \sum_{j=1}^{f}(\frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial P_i}\cdot\frac{\partial q_j}{\partial u} + \frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial P_i}\cdot\frac{\partial P_j}{\partial u})$$

$$(\frac{\partial Q_i}{\partial v}) = \frac{\partial}{\partial v}(\frac{\partial Q_i}{\partial P_i}) = \sum_{j=1}^{f}(\frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial P_i}\cdot\frac{\partial q_j}{\partial v} + \frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial P_i}\cdot\frac{\partial P_j}{\partial v})$$

$$\sum_i \begin{vmatrix} (\frac{\partial P_i}{\partial u}) & (\frac{\partial P_i}{\partial v}) \\ (\frac{\partial Q_i}{\partial u}) & (\frac{\partial Q_i}{\partial v}) \end{vmatrix} = \sum_i \{(\frac{\partial P_i}{\partial u})(\frac{\partial Q_i}{\partial v}) - (\frac{\partial P_i}{\partial v})(\frac{\partial Q_i}{\partial u})\}$$

$$=\sum_{i=1}^{f}\sum_{j=1}^{f}\left(\frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial P_i}\cdot\frac{\partial q_j}{\partial v}\cdot\frac{\partial P_i}{\partial u}+\frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial P_i}\cdot\frac{\partial P_j}{\partial v}\cdot\frac{\partial P_i}{\partial u}\right)-\sum_{i=1}^{f}\sum_{j=1}^{f}\left(\frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial P_i}\cdot\frac{\partial q_j}{\partial u}\cdot\frac{\partial P_i}{\partial v}+\frac{\partial^2 W}{\partial P_j \partial P_i}\cdot\frac{\partial P_j}{\partial u}\cdot\frac{\partial P_i}{\partial v}\right)$$

$$=\sum_j\sum_i\left(\frac{\partial^2 W}{\partial q_i \partial P_j}\right)\left\{\left(\frac{\partial P_i}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial q_j}{\partial v}\right)-\left(\frac{\partial P_i}{\partial v}\right)\left(\frac{\partial q_j}{\partial u}\right)\right\}=\sum_j\sum_i\left(\frac{\partial^2 W}{\partial q_i \partial P_j}\right)\begin{vmatrix}\left(\frac{\partial P_i}{\partial u}\right) & \left(\frac{\partial P_i}{\partial v}\right)\\ \left(\frac{\partial q_j}{\partial u}\right) & \left(\frac{\partial q_j}{\partial v}\right)\end{vmatrix}$$

第二の等式で，二つの括弧内の第二項は２重和を取ることで相殺される．二つの第一項だけが残る．(11)は結局，

$$J'_1\equiv\iint\sum_i dP_i dQ_i=\iint\sum_j\sum_i\left(\frac{\partial^2 W}{\partial q_i \partial P_j}\right)\begin{vmatrix}\left(\frac{\partial P_i}{\partial u}\right) & \left(\frac{\partial P_i}{\partial v}\right)\\ \left(\frac{\partial q_j}{\partial u}\right) & \left(\frac{\partial q_j}{\partial v}\right)\end{vmatrix}dudv \tag{18}$$

となる．(18)と(19)の右辺は同じであるから，

$$J_1\equiv\iint\sum_i dp_i dq_i=J'_1\equiv\iint\sum_i dP_i dQ_i \tag{19}$$

である．正準変換$(q_i,\ p_i)\rightarrow(Q_i,\ P_i)$において，位相空間での２次元の表面素片の積分は不変である．

(10)の積分に，もう一つの正準変数対が作る２次元の表面素片$dp_j dq_j$を掛けて，もう一回積分を繰り返せば，同様にして，

$$J_2\equiv\iint\iint\sum_j\sum_i dp_i dq_i dp_j dq_j \qquad (2\times 2)\text{次元積分}$$

の４次元積分が不変量であることを示すことが出来る．このような繰り返しはｆ回まで続けることができるから，

$$J_s\equiv\iint\cdots\iint\sum_{r_1\le f}\sum_{r_s\le f}dp_{r_1}dq_{r_1}\cdots dp_{r_s}dq_{r_s} \qquad (2\times s)\text{次元積分}\ (s\le f)$$

の積分も不変量である．特に，s＝ｆの時，J_f は，$(q_1,q_2,.....,q_f;p_1,p_2,.....,p_f)$の位相空間の２ｆ次元の積分になる．この積分は２ｆ次元位相空間の”体積”に相当するから．位相空間の形状は運動とともに変わったとしても，位相空間体積は保存されることを意味する．これはリュービル(Liouville)の定理の一表現であり，統計力学の基礎

である．これについては以下で少し補足する．