§9　正準変換とその母関数

正準方程式を不変にする正準変数の変換を考える．この変換が力学的運動の問題を解く際に絶大な力を発揮する．

1）正準変換

Hamiltonian が時間を陽に含まない場合も，陽に含む場合も，Hamiltonian に変分原理を直接適用することで，Hamilton の正準方程式を直接導いた．

$$H(q_1, q_2, \cdots, q_f; p_1, p_2, \cdots, p_f; t) = \sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}_i - L \tag{1}$$

$$\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1,2,......,f) \tag{2}$$

q_i，p_iは一般化座標とこれに対応する一般化運動量であり，正準変数と呼ばれることも述べた．

(1), (2)が成立する時，$(q_i,\ p_i) \to (Q_k,\ P_k)$の変換を考える．

$$Q_k = Q_k(q_i, p_i, t)\ , \qquad P_k = P_k(q_i, p_i, t) \tag{3}$$

(3)の変換を (1),(2)に適用した時， Q_k，P_kがやはり新たな Hamiltonian を H’とする正準方程式,

$$H'(Q_1, Q_2, \cdots, Q_f; P_1, P_2, \cdots, P_f; t) = \sum_{i=1}^{f} P_i \dot{Q}_i - L' \tag{4}$$

$$\dot{Q}_k = \frac{dQ_k}{dt} = \frac{\partial H'}{\partial P_k}, \qquad \dot{P}_k = \frac{dPk}{dt} = -\frac{\partial H'}{\partial Q_k} \quad (k = 1,2,......,f) \tag{5}$$

を満足しているとする．この時，$(q_i,\ p_i) \to (Q_k,\ P_k)$の変換は**正準変換**（canonical transformation）と呼ばれる．**正準方程式を満足する変数変換**である．当然であろうが， (3)で表される一般的変換の全てが正準変換である訳ではない．変数間に特別な関係がある場合に限られるはずである．そのような**変数間の関係はどんな形で与えられるのか？**について以下で考える．

しかし，その前に (3)のような変換をなぜ考えるのかについて少し議論しよう．初

めに見たように，Lagrangian は座標変換に対して不変であった． (3)と関連させれば，$Q_k = Q_k(q_i,t)$，$P_k = P_k(q_i,p_i,t)$である．座標変換だから座標$q_i \leftrightarrow Q_i$間の対応は一義的で，新座標の$Q_k = Q_k(q_i,t)$ に旧運動量p_iは介在しない．しかし，座標変換後の新運動量には旧座標・旧運動量のq_i,p_i が介在する．だから，$P_k = P_k(q_i,p_i,t)$である．Lagrangian が不変な座標変換でも，$P_k = P_k(q_i,p_i,t)$ではq_i,p_iが混ざり合う．一方，正準変数の考え方の基本は，q_i,p_iの両者を対等に扱うことである．だから，単なる座標変換ではなく，(3)のようにQ_kに対してもP_kと同じようにq_i,p_iの混ざりあう変換を一旦は許す．然る後に，それらの中から，正準方程式を不変にする変換，正準変換，のみを選ぶ．後に見るように，正準方程式を不変にする変換は問題を単純化するからである．しかし，この考え方は，ちょっと狭いのである．初めはどんな変換も OK と述べている様に聞こえるが，本当の狙いは”正準方程式を不変にする変換”だけなのである．だから正準変換の必要十分条件は何かが後に問題にされる．

２） 正準変換の母関数

q_i，p_i についての(1), (2)もQ_i，P_i についての(4), (5)も，変分原理を満たしている．(1), (2) に対しては，(1)から L を H で表して，

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} Ldt = \delta\int_{t_1}^{t_2}\{\sum_{i=1}^{f} p_i\dot{q}_i - H\}dt = 0 \tag{6}$$

同様にして，(4)において L'を H'で表して，

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L'\,dt = \delta\int_{t_1}^{t_2}\{\sum_{i=1}^{f} P_i\dot{Q}_i - H'\}dt = 0 \tag{7}$$

である．当然，

$$\sum_{i=1}^{f} p_i\dot{q}_i - H = \sum_{i=1}^{f} P_i\dot{Q}_i - H' \tag{8}$$

が成立していれば，(6)，(7)が両立することは自明である．

しかし，変分原理の最後に述べたように，変分原理を満足する Lagrangian にはそ

の Lagrangian に任意の関数 $dF(q_i,t)/dt$ を加えた Lagrangian もやはり変分原理を満たすという任意性があった．(7)は位相空間変数の議論であるから，任意の関数 F は $F(q_i,p_i,t)$ と考えねばならないが，(8)の左辺に $dF(q_i,p_i,t)/dt$ を加えても(6)の変分原理を満たし，同様に，(8)の右辺に $dF'(Q_i,P_i,t)/dt$ を加えたものも(7)の変分原理を満足すると考えてみよう．故に，

$$(\sum_{i=1}^{f} p_i\dot{q}_i - H) + \frac{dF(q_i,p_i,t)}{dt} = (\sum_{i=1}^{f} P_i\dot{Q}_i - H') + \frac{dF'(Q_i,P_i,t)}{dt}$$

左辺の $dF(q_i,p_i,t)/dt$ を移行して $dF'(Q_i,P_i,t)/dt$ と一緒にして，任意の関数 W，

$$W(q_i,p_i,t) \equiv F'(Q_i(q_k,p_k),P_i((Q_i(q_k,p_k),t) - F(q_i,p_i,t) \qquad (9)$$

としても，(3)の変換を考えているので，同じことである．従って，

$$(\sum_{i=1}^{f} p_i\dot{q}_i - H) = (\sum_{i=1}^{f} P_i\dot{Q}_i - H') + \frac{dW(q_i,p_i,t)}{dt} \qquad (10)$$

の恒等式が成立する．この両辺に dt を掛けて，次の W の全微分の形に直せば，

$$dW(q_i,p_i,t) = \sum_{i=1}^{f} p_i dq_i - \sum_{i=1}^{f} P_i dQ_i + (H'-H)dt \qquad (11)$$

となる．この右辺は q_i,Q_i,t に関する微分式である．変数としては，t を別にすると，２f 個の q_i,p_i であるが，(3)の変換を考えているので，q_i,p_i の代わりに，２f 個の q_i,Q_i を考えてもおかしくはない．**もし，$W = W_1(q_i,Q_i,t)$ であれば，(11)右辺の微分式は W の全微分になる．即ち，(11)右辺の微分式は W の完全微分となる**．この条**件は，**$W_1(q_i,Q_i,t)$ の全微分を求めて(11)右辺に等置して，dq_i,dQ_i,dt の各係数が等しいとすれば良い．即ち，

$$dW_1(q_i,Q_i,t) = \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial W_1}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial W_1}{\partial Q_i} dQ_i + \frac{\partial W_1}{\partial t} dt = \sum_{i=1}^{f} p_i dq_i - \sum_{i=1}^{f} P_i dQ_i + (H'-H)dt \qquad (12)$$

である．**(11)右辺の微分式が全微分であるような関数 W を考えることが出来る．***この考え方は，熱力学の第一，第二法則が与える微分式から，熱力学量 U（内部エネルギー）を議論するのと同じである．両者の対比は次章で述べる．*

１．$W=W_1(q_i,Q_i,t)$の場合

(12) でdq_i,dQ_i,dtの各係数が等しいとして，

$$p_i=\frac{\partial}{\partial q_i}W_1(q_i,Q_i,t),\quad P_i=-\frac{\partial}{\partial Q_i}W_1(q_i,Q_i,t),\quad (H'-H)=\frac{\partial}{\partial t}W_1(q_i,Q_i,t) \qquad (13\text{-}1)$$

の結果を得る．さらに，完全微分の性質として，変数対(q_i,Q_k)の間には,

$$\frac{\partial}{\partial Q_k}(\frac{\partial}{\partial q_i}W)=\frac{\partial}{\partial q_i}(\frac{\partial}{\partial Q_k}W)$$

が成立するので，二階の偏微分の関係として，(13-1)より,

$$\frac{\partial}{\partial Q_k}(\frac{\partial}{\partial q_i}W_1)=\frac{\partial p_i}{\partial Q_k},\qquad \frac{\partial}{\partial q_i}(\frac{\partial}{\partial Q_k}W_1)=-\frac{\partial P_k}{\partial q_i}$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial Q_k}=-\frac{\partial P_k}{\partial q_i} \qquad (13\text{-}2)$$

が成立している．

$W=W_1(q_i,Q_i,t)$の時，(13-1)の第一式をQ_iについて解き，$Q_i=Q_i(q_k,p_k,t)$を求め，これを(13-1)の第二式に代入すれば．$P_i=P_i(q_k,p_k,t)$が得られる．$(q_i,\ p_i)\rightarrow(Q_i,\ P_i)$の正準変換ができる．$W=W_1(q_i,Q_i,t)$は正準変換を指定するので，**正準変換の母関数**(generating function)と呼ばれる．

関数 W の(2f+1)個の独立な変数の組み合わせは，t は別にして考えると，$(i=1,2,...,f)$として，$W=W_1(q_i,Q_i,t)$の場合も含めて，次の４つの場合になる．

$$W=W_1(q_i,Q_i,t),\quad W=W_2(q_i,P_i,t),\quad W=W_3(p_i,Q_i,t),\quad W=W_4(p_i,P_i,t) \qquad (14)$$

W_2,W_3,W_4も**正準変換の母関数**である．W_2,W_3,W_4のそれぞれについて，$W=W_1(q_i,Q_i,t)$の(12)と類似の式が得られるので，同じように考えれば良い．(14)における母関数 W の違いは，独立変数の選択問題であるから，$W=W_1(q_i,Q_i,t)$に対する Legendre 変換を考えて系統的に全て導出できる. 残りの３つの場合について以下の結果となる．

２．$W=W_2(q_i,P_i,t)$の場合： $W_1(q_i,Q_i,t)\rightarrow W_2(q_i,P_i,t)$ の Legendre 変換を行う．

(12)の $dW_1(q_i,Q_i,t)=\sum_{i=1}^{f}p_i dq_i-\sum_{i=1}^{f}P_i dQ_i+(H'-H)dt$ を用いて，$Q_i\to P_i$ の変数変換を行う．即ち，第二項の $P_i dQ_i$ を消して $Q_i dP_i$ に変える．その為には，

$W_2(q_i,P_i,t)\equiv\sum_{i=1}^{f}P_i Q_i+W_1(q_i,Q_i,t)$ と定義して，この両辺の微分を作れば，

$$
\begin{aligned}
dW_2(q_i,P_i,t)&\equiv\sum_{i=1}^{f}P_i dQ_i+\sum_{i=1}^{f}Q_i dP_i+dW_1(q_i,Q_i,t)\\
&=\sum_{i=1}^{f}p_i dq_i+\sum_{i=1}^{f}Q_i dP_i+(H'-H)dt \qquad (15)
\end{aligned}
$$

となる．$P_i dQ_i$ が相殺されて $Q_i dP_i$ が残り，新変数の組に対する微分式が得られる．従って，(15)は，1. の(12)に相当するから，同様にして，

$$p_i=\frac{\partial W}{\partial q_i},\qquad Q_i=\frac{\partial W}{\partial P_i},\qquad H'=H+\frac{\partial W}{\partial t} \qquad (15\text{-}1)$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial P_k}=\frac{\partial Q_k}{\partial q_i} \qquad (15\text{-}2)$$

３． $W=W_3(p_i,Q_i,t)$ の場合： $W_1(q_i,Q_i,t)\to W_3(p_i,Q_i,t)$ の Legendre 変換を行う．

(12)右辺の第一項 $p_i dq_i$ を $q_i dp_i$ に変える．その為に，

$W_3(p_i,Q_i,t)\equiv-\sum_{i=1}^{f}p_i q_i+W_1(q_i,Q_i,t)$ と定義し，両辺の微分を作る：

$$
\begin{aligned}
dW_3(p_i,Q_i,t)&\equiv-\sum_{i=1}^{f}p_i dq_i-\sum_{i=1}^{f}q_i dp_i+dW_1(q_i,Q_i,t)\\
&=-\sum_{i=1}^{f}q_i dp_i-\sum_{i=1}^{f}P_i dQ_i+(H'-H)dt \qquad (16)
\end{aligned}
$$

となり，新たな変数の組に対する微分式が得られる．従って，(16)から

$$q_i=-\frac{\partial W}{\partial p_i}\ ,\qquad P_i=-\frac{\partial W}{\partial Q_i},\qquad H'=H+\frac{\partial W}{\partial t} \qquad (16\text{-}1)$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial Q_k} = \frac{\partial P_k}{\partial p_i} \tag{16-2}$$

４． $W = W_4(p_i, P_i, t)$ **の場合：** $W_3(p_i, Q_i, t) \to W_4(p_i, P_i, t)$ の Legendre 変換を行う．

(16)の W_3 で第二項 $P_i dQ$ を $Q_i dP_i$ に変える．その為に，

$W_4(p_i, P_i, t) \equiv \sum_{i=1}^{f} P_i Q_i + W_3(p_i, Q_i, t)$ と定義し，両辺の微分を作ると

$$dW_4(p_i, P_i, t) \equiv \sum_{i=1}^{f} P_i dQ_i + \sum_{i=1}^{f} Q_i dP_i + dW_3(p_i, Q_i, t)$$

$$= -\sum_{i=1}^{f} q_i dp_i + \sum_{i=1}^{f} Q_i dP_i + (H' - H)dt \tag{17}$$

となり，新たな変数の組に対する微分式が得られる．故に(17)から，

$$q_i = -\frac{\partial W}{\partial p_i}\ , \qquad Q_i = \frac{\partial W}{\partial P_i}, \qquad H' = H + \frac{\partial W}{\partial t} \tag{17-1}$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial P_k} = -\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} \tag{17-2}$$

となる．

もし，t を変数(q, p, Q, P)のパラメーターとしてのみ考えて良い場合は，W は t を陽に含まず， W の t に依る偏微分は０となる．従って， $H = H'$ である．これは Hamiltonian が変化しない保存量であることを意味する．Hamiltonian が力学系を規定する保存量である場合に当たる．

＜母関数 W の例＞

１） $W = \sum_i q_i P_i$ の場合: これは，

W(q_i, P_i, t): $p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i}$, $Q_i = \frac{\partial W}{\partial P_i}$, $H' = H + \frac{\partial W}{\partial t}$ に相当するので，

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} = P_i, \qquad Q_i = \frac{\partial W}{\partial P_i} = q_i$$

となる．この母関数 W では変数は実質的に変わらない．**恒等変換**と呼ばれる．

２） $W = \sum_i q_i Q_i$ の場合:　これは，

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

が当てはまるので，

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} = Q_i, \qquad P_i = -\frac{\partial W}{\partial Q_i} = -q_i,$$

となる．この正準変換では，新旧の変数で座標と運動量が入れ替わる．この**正準変換の凄いところは，座標と運動量を名前だけの形式的ものにしてしまい，両者を同等の変数にしてしまう**ことである．座標と運動量と呼ばずに，**正準共役変数**と呼ぶ理由である．もともと我々は，座標と運動量を区別して, Newton 力学から出発した．しかし，正準変換に至ると，座標と運動量もさらに抽象化・一般化されてしまい，正準共役変数となる．

３） (r,θ,φ) 極座標系での，座標を (q_1,q_2,q_3)，（x，y，z）座標の運動量 (p_x,p_y,p_z) を (P_1,P_2,P_3) として， $W = p_x r sin\theta \cos\varphi + p_y r sin\theta sin\varphi + p_z r\cos\theta$ を考える．　$\mathrm{W}(q_i,P_i)$ であるので，(ii)　$\mathrm{W}(q_i,P_i,t)$: $p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i}$，$Q_i = \frac{\partial W}{\partial P_i}$，$H' = H + \frac{\partial W}{\partial t}$　が該当するので，

$$p_r = \frac{\partial W}{\partial q_i} = p_x sin\theta \cos\varphi + p_y sin\theta sin\varphi + p_z \cos\theta$$

$$p_\theta = \frac{\partial W}{\partial \theta} = p_x r\cos\theta\cos\varphi + p_y r\cos\theta sin\varphi - p_z r sin\theta$$

$$p_\varphi = \frac{\partial W}{\partial \varphi} = -p_x r sin\theta sin\varphi + p_y sin\theta\cos\varphi$$

$$x = \frac{\partial W}{\partial p_x} = r sin\theta\cos\varphi, \quad y = \frac{\partial W}{\partial p_y} = r sin\theta sin\varphi, \quad z = \frac{\partial W}{\partial p_z} = r\cos\theta, \quad q_i = -\frac{\partial W}{\partial p_i}$$