第 7 回　最小作用の原理と正準変換

理学部　齊藤国靖 *

2023 年 6 月 2 日

第 2 回に最小作用の原理からラグランジュ方程式を導いたが，正準方程式についても最小作用の原理が基本であることを説明する．また，正準変換という変数変換の方法を導入し，具体的な例を挙げて説明する．正準変換は無限小正準変換など今後の内容の基礎となる重要な考え方である．

1　最小作用の原理

一般座標と一般運動量の全成分を合わせて

$$(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$$

と表せば，これは 2n 次元空間内の点と考えることができる．この様に，座標と運動量で定義される空間を**位相空間**という．

「第 2 回　変分法と最小作用の原理」で，汎関数 I の変分を

$$\begin{aligned}
\delta I &= \delta \int_a^b f(x, y_i, \dot{y}_i) dx \\
&= \int_a^b \left\{ \frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}_i}\right) \right\} \delta y_i \; dx
\end{aligned} \tag{1}$$

で定義した．但し，添え字 i に対してアインシュタインの縮約記法を用いている．f は x の関数 $y_i(x)$ とその導関数 $\dot{y}_i(x)$ の関数であり，変分が常にゼロ $\delta I = 0$ であれば

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}_i}\right) - \frac{\partial f}{\partial y_i} = 0 \tag{2}$$

が成立する（オイラー・ラグランジュ方程式）．f がラグランジアン $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ の場合，

$$\begin{aligned}
x &\longrightarrow t \\
y_i &\longrightarrow q_i
\end{aligned}$$

と置き換えることで，汎関数 I は作用 S となり，最小作用の原理 $\delta S = 0$ からラグランジュ方程

* k.saitoh@cc.kyoto-su.ac.jp

式が導かれる．そこで，ハミルトニアンの定義式（第１０回参照）を使って

$$\begin{aligned} f &= L(q_i, \dot{q}_i, t) \\ &= \dot{q}_i p_i - H(q_i, p_i, t) \end{aligned} \tag{3}$$

と表せば，今度は f を位相空間内の点 (q_i, p_i) とその時間微分の関数とみなせる．つまり，最小作用の原理 $\delta S = 0$ の結果，式 (2) で

$$\begin{array}{ccc} x & \longrightarrow & t \\ y_i & \longrightarrow & q_i \ \text{ or } \ p_i \\ f & \longrightarrow & \dot{q}_i p_i - H(q_i, p_i, t) \end{array}$$

と置き換えたものが成立する．従って，$y_i = q_i$ とした場合，$y_i = p_i$ とした場合にそれぞれ

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}\{\dot{q}_i p_i - H(q_i, p_i, t)\}\right) - \frac{\partial}{\partial q_i}\{\dot{q}_i p_i - H(q_i, p_i, t)\} = 0 \tag{4}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{p}_i}\{\dot{q}_i p_i - H(q_i, p_i, t)\}\right) - \frac{\partial}{\partial p_i}\{\dot{q}_i p_i - H(q_i, p_i, t)\} = 0 \tag{5}$$

が成立する．

式 (4) を計算すると，$H(q_i, p_i, t)$ は $\dot{q}_i$ を含まないから

$$\frac{d}{dt}p_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \qquad \therefore \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{6}$$

となる．また，式 (5) を計算すると，$H(q_i, p_i, t)$ は $\dot{p}_i$ を含まないから

$$-\dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} = 0 \qquad \therefore \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{7}$$

となり，これら式 (6) と (7) は正準方程式に一致する．よって，ラグランジュ方程式と同様，正準方程式も最小作用の原理の帰結である．

2　正準変換

位相空間内の点 (q_i, p_i) を新しい変数 (Q_i, P_i) に変換することを考える．このとき，ハミルトニアン $H(q_i, p_i, t)$ は新しいハミルトニアン $K(Q_i, P_i, t)$ に変換される．そこで，変換後の変数 Q_i, P_i とハミルトニアン $K(Q_i, P_i, t)$ が正準方程式

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \tag{8}$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \tag{9}$$

を再び満たす場合，この変換を**正準変換**という．

2.1　母関数

前述の通り，正準方程式は最小作用の原理の帰結である．変換前の変数 q_i, p_i とハミルトニアン $H(q_i, p_i, t)$ に対応する最小作用の原理は

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \{p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t)\}\, dt = 0 \tag{10}$$

である．一方，変換後の変数 Q_i, P_i とハミルトニアン $K(Q_i, P_i, t)$ に対応する最小作用の原理は

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left\{P_i \dot{Q}_i - K(Q_i, P_i, t)\right\} dt = 0 \tag{11}$$

である．式 (10) と (11) は共にゼロなので，左辺の被積分関数同士は等しい．但し，ラグランジアンには時間に関する導関数 dF/dt の不定性があった様に（第 2 回参照），作用の変分の被積分関数には不定性がある．式 (10) と (11) の被積分関数にも同じ不定性があり，これらの被積分関数は不定性も含めて等しい．つまり，

$$p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF}{dt} \tag{12}$$

であり，右辺の不定性を表す関数 F のことを正準変換 $(q_i, p_i) \to (Q_i, P_i)$ の**母関数**という．

2.2　正準変換の例 1

正準変換は何か母関数を与えることで決まる．例えば，

$$F = F_1(q_i, Q_i, t) \tag{13}$$

であれば，時間に関する微分が

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

なので，これを式 (12) に代入して整理すると

$$\begin{gathered}
p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial t} \\
\therefore \left(p_i - \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\right) \dot{q}_i - \left(P_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\right) \dot{Q}_i + \left(K - H - \frac{\partial F_1}{\partial t}\right) = 0 \\
\therefore \left(p_i - \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\right) dq_i - \left(P_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\right) dQ_i + \left(K - H - \frac{\partial F_1}{\partial t}\right) dt = 0
\end{gathered}$$

となる．これが常に成り立つには，変分 dq_i, dQ_i, dt の各係数がゼロであり，

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\ , \qquad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\ , \qquad K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t} \tag{14}$$

となる．

適当な母関数 $F_1(q_i, Q_i, t)$ を選んで，式 (14) を満たす変数変換 $(q_i, p_i) \to (Q_i, P_i)$ が見つかれば，それは正準変換である．例えば，

$$F_1(q_i, Q_i, t) = q_i Q_i$$

の場合，式 (14) より

$$p_i = Q_i\ , \quad P_i = -q_i\ , \quad K = H$$

となる．従って，変数変換 $(q_i, p_i) \to (Q_i, P_i) = (p_i, -q_i)$ は正準変換であり，変換によってハミルトニアンは不変である．

2.3　正準変換の例２

同様に，母関数が

$$F = F_2(q_i, P_i, t) - Q_i P_i \tag{15}$$

であれば，

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\dot{P}_i + \frac{\partial F_2}{\partial t} - \dot{Q}_i P_i - Q_i \dot{P}_i$$

なので，これを式 (12) に代入して整理すると

$$p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\dot{P}_i + \frac{\partial F_2}{\partial t} - \dot{Q}_i P_i - Q_i \dot{P}_i$$

$$\therefore \left(p_i - \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\right)\dot{q}_i + \left(Q_i - \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\right)\dot{P}_i + \left(K - H - \frac{\partial F_2}{\partial t}\right) = 0$$

$$\therefore \left(p_i - \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\right)dq_i + \left(Q_i - \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\right)dP_i + \left(K - H - \frac{\partial F_2}{\partial t}\right)dt = 0$$

となる．これが常に成り立つには，変分 dq_i, dP_i, dt の各係数がゼロであり，

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}\ , \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\ , \quad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \tag{16}$$

となる．

例えば，

$$F_2(q_i, P_i, t) = f_i(q_1, \ldots, q_n) P_i$$

の場合，式 (16) より，変換後の座標は

$$Q_i = f_i(q_1, \ldots, q_n)$$

となる．この様に，座標の間だけの変換を**点変換**という．さらに，関数 $f_i(q_1, \ldots, q_n)$ は任意なので，全ての点変換は正準変換であることが解る．