Hamilton 形式における Hamilton の原理

Hamilton 形式における作用

$$S[q,p]=\int_{t_0}^{t_1}L(t,q,p)\,dt=\int_{t_0}^{t_1}\Big\{\sum_{\alpha=1}^{f}p_\alpha\underbrace{\dot{q}_\alpha}_{\dot{q}_\alpha(t,q,p)}-H(t,q,p)\Big\}dt$$

$\delta S[q,p]=0$ (停留) $\to$ Hamilton 正準方程式が得られる。

($q_\alpha(t)$ ($\alpha=1,\cdots,f$) $t=t_0,t_1$ で固定)

$$\delta S=\int_{t_0}^{t_1}\Big\{\sum_{\alpha=1}^{f}(\underbrace{p_\alpha\delta\dot{q}_\alpha}_{\text{部分積分}}+\dot{q}_\alpha\delta p_\alpha)-\sum_{\alpha=1}^{f}\Big(\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha+\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\delta p_\alpha\Big)\Big\}dt$$

$$=\underbrace{\Big[\sum_{\alpha=1}^{f}p_\alpha\delta q_\alpha\Big]_{t=t_0}^{t_1}}_{0}+\int_{t_0}^{t_1}\sum_{\alpha=1}^{f}\Big\{\Big(\dot{q}_\alpha-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\Big)\delta p_\alpha-\Big(\dot{p}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\Big)\delta q_\alpha\Big\}dt=0,$$

($\because$ $\delta q_\alpha(t_0)=\delta q_\alpha(t_1)=0$)

$$\int_{t_0}^{t_1}\sum_{\alpha=1}^{f}\Big\{\Big(\dot{q}_\alpha-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\Big)\delta p_\alpha-\Big(\dot{p}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\Big)\delta q_\alpha\Big\}dt=0\quad \text{for } {}^\forall\delta q_\alpha,\delta p_\alpha.$$

$$\therefore\ \dot{q}_\alpha=\frac{\partial H}{\partial p_\alpha},\quad \dot{p}_\alpha=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\ (\alpha=1,2,\cdots,f).$$

… 正準方程式が再び得られた。

2.3 正準変換.

正準変数(一般座標・一般運動量)の変換

$$(q,p)=(q_1,\cdots,q_f;p_1,\cdots,p_f)\mapsto(Q,P)=(Q_1,\cdots,Q_f;P_1,\cdots,P_f),$$

$$\left.\begin{aligned}Q_\alpha&=Q_\alpha(t,q,p)=Q_\alpha(t;q_1,\cdots,q_f;p_1,\cdots,p_f)\\P_\alpha&=P_\alpha(t,q,p)=P_\alpha(t;q_1,\cdots,q_f;p_1,\cdots,p_f)\end{aligned}\right\}(\alpha=1,\cdots,f).$$

新しい正準変数も正準方程式を満たす, i.e., ある関数 $K(t,Q,P)$ が存在し、

$$\dot{Q}_\alpha=\frac{\partial K}{\partial P_\alpha},\quad \dot{P}_\alpha=-\frac{\partial K}{\partial Q_\alpha}\quad(\alpha=1,\cdots,f)\quad ①$$

が成り立つような変換が望ましい。

そのような変換はどういうものか?

正準方程式 $\Longleftrightarrow$ Hamiltonの原理 より

$$\delta\int_{t_0}^{t_1}\left\{\sum_{\alpha=1}^{f}p_\alpha\dot{q}_\alpha-H(t,q,p)\right\}dt=0\Longleftrightarrow\delta\int_{t_0}^{t_1}\left\{\sum_{\alpha=1}^{f}P_\alpha\dot{Q}_\alpha-K(t,Q,P)\right\}dt=0\quad ②$$

が成り立てばよい。

②が成り立つのはどのようなときか?

ある関数 $W(t,q,Q)=W(t;q_1,\cdots,q_f;Q_1,\cdots,Q_f)$ が存在し、

$$\sum_{\alpha=1}^{f}p_\alpha\dot{q}_\alpha-H(t,q,p)=\sum_{\alpha=1}^{f}P_\alpha\dot{Q}_\alpha-K(t,Q,P)+\frac{d}{dt}W(t,q,Q)\quad Ⓐ$$

が成り立つとする。

$$\int_{t_0}^{t_1}\left(\sum_{\alpha=1}^{f}p_\alpha\dot{q}_\alpha-H\right)dt=\int_{t_0}^{t_1}\left(\sum_{\alpha=1}^{f}P_\alpha\dot{Q}_\alpha-K\right)dt+W(t_1,q(t_1),Q(t_1))-W(t_0,q(t_0),Q(t_0)).$$

変分をとるとき、$t=t_0,t_1$ で一般座標 q,Q は固定されるので、②が成立する。

Ⓐは、Q,P が正準方程式①を満たすための十分条件である。

変換 $(q,p)\to(Q,P)$ の具体形

Ⓐより

$$dW=\sum_{\alpha=1}^{f}p_\alpha dq_\alpha-\sum_{\alpha=1}^{f}P_\alpha dQ_\alpha+(K-H)dt.$$

それと

$$dW=\sum_{\alpha=1}^{f}\frac{\partial W}{\partial q_\alpha}dq_\alpha+\sum_{\alpha=1}^{f}\frac{\partial W}{\partial Q_\alpha}dQ_\alpha+\frac{\partial W}{\partial t}dt$$

これと比較して,

$$\left.\begin{aligned} & p_\alpha = \frac{\partial W}{\partial q_\alpha}, \quad P_\alpha = -\frac{\partial W}{\partial Q_\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, f), \\ & K = H + \frac{\partial W}{\partial t} \end{aligned}\right\} \text{(A)}$$

正準変換 (canonical transform.)

(A) で与えられる正準変数の変換 $(q, p) \mapsto (Q, P)$

$W(t, q, Q)$ … 正準変換の母関数 (generating function)

例　1次元調和振動子

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2.$$

母関数を

$$W(x, \phi) = \frac{m\omega}{2}x^2 \cot\phi \qquad \left(\cot\phi = \frac{1}{\tan\phi}\right)$$

とする正準変換 $(q, p) \mapsto (\phi, P)$ および新しい Hamiltonian K を求める.

$$p = \frac{\partial W}{\partial x} = m\omega x \cot\phi,$$

$$P = -\frac{\partial W}{\partial \phi} = \frac{m\omega}{2}x^2 \operatorname{cosec}^2\phi \qquad \left(\operatorname{cosec}\phi = \frac{1}{\sin\phi}\right),$$

$$K = H + \frac{\partial W}{\partial t} = H;$$

$$\left.\begin{aligned} & \sqrt{2m\omega P} = m\omega x \operatorname{cosec}\phi \text{ より } p = \sqrt{2m\omega P}\cos\phi, \\ & x = \frac{p}{m\omega\cot\phi} = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\sin\phi. \end{aligned}\right\} \text{(1)}$$

$$K = H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 = \frac{1}{2m}2m\omega P\cos^2\phi + \frac{m\omega^2}{2}\frac{2P}{m\omega}\sin^2\phi = \omega P.$$

$$\therefore \quad K = \omega P.$$

新しい変数に対する Hamilton 正準方程式

$$\dot{\phi} = \frac{\partial K}{\partial P}, \quad \dot{P} = -\frac{\partial K}{\partial \phi}.$$

$$\rightarrow \quad \dot{\phi} = \omega, \quad \dot{P} = 0.$$

$$\begin{cases} \phi = \omega t + \alpha \quad (\alpha : \text{const.}) \\ P = P_0 \quad (\text{const.}) \end{cases}$$

①により元の変数に戻せば，

$$x = \sqrt{\frac{2P_0}{m\omega}} \sin(\omega t + \alpha), \quad p = \sqrt{2m\omega P_0} \cos(\omega t + \alpha).$$

① … Poincaré 変換 と呼ぶ。 □

正準変換の母関数は q, Q を独立変数にもつものとは限らない。
Legendre 変換で独立変数を入れ換える。

$$W_1(t, q, P) = W(t, q, Q) + \sum_{\alpha=1}^{f} P_\alpha Q_\alpha$$

とおくと，

$$dW_1 = \sum_{\alpha=1}^{f} (p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha) + (K - H) dt + \sum_{\alpha=1}^{f} (P_\alpha dQ_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha)$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{f} (p_\alpha dq_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha) + (K - H) dt,$$

$$\therefore \quad p_\alpha = \frac{\partial W_1}{\partial q_\alpha}, \quad Q_\alpha = \frac{\partial W_1}{\partial P_\alpha} \quad (\alpha = 1, \cdots, f), \quad K = H + \frac{\partial W_1}{\partial t}.$$

$$W_2(t, p, Q) = W(t, q, Q) - \sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha q_\alpha$$

とおくと，

$$dW_2 = \sum_{\alpha=1}^{f} (p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha) + (K - H) dt - \sum_{\alpha=1}^{f} (p_\alpha dq_\alpha + q_\alpha dp_\alpha)$$

$$= - \sum_{\alpha=1}^{f} (q_\alpha dp_\alpha + P_\alpha dQ_\alpha) + (K - H) dt,$$

$$\therefore \quad q_\alpha = - \frac{\partial W_2}{\partial p_\alpha}, \quad P_\alpha = - \frac{\partial W_2}{\partial Q_\alpha} \quad (\alpha = 1, \cdots, f); \quad K = H + \frac{\partial W}{\partial t}.$$

$$W_3(t, p, P) = W(t, q, Q) + \sum_{\alpha=1}^{f}(-p_\alpha q_\alpha + P_\alpha Q_\alpha).$$

とおくと、

$$dW_3 = \sum_{\alpha=1}^{f}(p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha) + (K-H)dt$$
$$+ \sum_{\alpha=1}^{f}(-p_\alpha dq_\alpha - q_\alpha dp_\alpha + P_\alpha dQ_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha)$$
$$= \sum_{\alpha=1}^{f}(-q_\alpha dp_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha) + (K-H)dt,$$

$$\therefore\ q_\alpha = -\frac{\partial W_3}{\partial p_\alpha},\quad Q_\alpha = \frac{\partial W_3}{\partial P_\alpha}\ (\alpha = 1, 2, \cdots, f),\quad K = H + \frac{\partial W}{\partial t}.$$

例 $W_1(q, P) = \sum_{\alpha=1}^{f} q_\alpha P_\alpha$,

$$p_\alpha = \frac{\partial W_1}{\partial q_\alpha} = P_\alpha,\quad Q_\alpha = \frac{\partial W_1}{\partial P_\alpha} = q_\alpha$$

$$\therefore\ Q_\alpha = q_\alpha,\quad P_\alpha = p_\alpha\quad (\alpha = 1, \cdots, f)$$

恒等変換は正準変換である; □

例 $W(q, Q) = \sum_{\alpha=1}^{f} q_\alpha Q_\alpha$.

$$p_\alpha = \frac{\partial W}{\partial q_\alpha} = Q_\alpha,\quad P_\alpha = -\frac{\partial W}{\partial Q_\alpha} = -q_\alpha.$$

$\therefore\ Q_\alpha = p_\alpha,\ P_\alpha = -q_\alpha\ (\alpha = 1, \cdots, f)$ …座標と運動量の入れ換え、

Hamilton形式の力学では、座標と運動量は同等な変数と見なす。 □

無限小正準変換

恒等変換からごくわずかんずれた正準変換 $(q,p)\mapsto(q^\epsilon,p^\epsilon)$ $(\epsilon\approx 0)$

母関数

$$W_1(q,p^\epsilon)=\sum_{\alpha=1}^{f} q_\alpha p_\alpha^\epsilon+\epsilon G(q,p^\epsilon)$$

↓

$$p_\alpha=\frac{\partial W_1}{\partial q_\alpha}=p_\alpha^\epsilon+\epsilon\frac{\partial G(q,p^\epsilon)}{\partial q_\alpha},\quad q_\alpha^\epsilon=\frac{\partial W}{\partial p_\alpha^\epsilon}=q_\alpha+\epsilon\frac{\partial G(q,p^\epsilon)}{\partial p_\alpha^\epsilon}.$$

高次の微小量を無視して、

$$\boxed{q_\alpha^\epsilon = q_\alpha+\epsilon \frac{\partial G(q,p)}{\partial p_\alpha},\quad p_\alpha^\epsilon=p_\alpha-\epsilon\frac{\partial G(q,p)}{\partial q_\alpha}}$$

… $G(q,p)$ を生成子とする無限小正準変換

例 <1粒子の3次元運動, Cartesian座標>

生成子 $G=-\mathbf{n}\cdot\mathbf{p}=-n_xp_x-n_yp_y-n_zp_z$

($\mathbf{n}$: 単位ベクトル, $\mathbf{p}$: (初等力学における)運動量)

$$x^\epsilon=x+\epsilon\frac{\partial G}{\partial p_x}=x-\epsilon n_x,\quad y^\epsilon=y-\epsilon n_y,\quad z^\epsilon=z-\epsilon n_z,$$

$$p_x^\epsilon=p_x-\epsilon\frac{\partial G}{\partial x}=p_x,\quad p_y^\epsilon=p_y,\quad p_z^\epsilon=p_z.$$

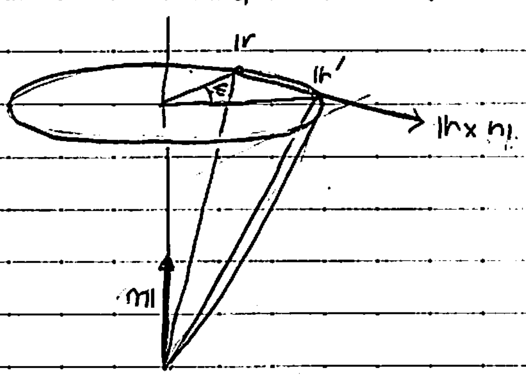
∴ $\mathbf{x}^\epsilon=\mathbf{x}+\epsilon\mathbf{n}$, $\mathbf{p}^\epsilon=\mathbf{p}$ … 無限小ベクトル $\epsilon\mathbf{n}$ だけの空間推進

例 <1粒子の3次元運動>

ある単位ベクトル $\mathbf{n}$ のまわりに座標を微小角 ϵ 回転することを考える。

$\mathbf{r}$: 回転前のある点の座標、

$\mathbf{r}'$: 同じ点の回転後の座標、



$$\mathbf{r}'=\mathbf{r}+\epsilon(\mathbf{r}\times\mathbf{n})$$

↓

実は生成子

$$G=(\mathbf{p}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{n}=-\mathbf{n}\cdot\mathbf{l}$$

の無限小変換である。

∵ $x^\epsilon=x+\epsilon\frac{\partial G}{\partial p_x}=x+\epsilon\frac{\partial}{\partial p_x}\{(\mathbf{p}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{n}\}=x+\epsilon\frac{\partial}{\partial p_x}\{(\mathbf{r}\times\mathbf{n})\cdot\mathbf{p}\}$

$=x+\epsilon(\mathbf{r}\times\mathbf{n})_x$ etc.

保存する運動量 ⟷ 正準変換の生成子.

Noetherの定理　　　　無限量正準変換

① 系が空間推進で不変なとき運動量pが保存する　—$p_i n_i$を生成子とする無限小正準変換は空間推進である

② 系が回転で不変なとき角運動量ℓが保存する　—$\ell_i n_i$を生成子とする無限小正準変換は空間回転である

Noether charge $\quad Q = \sum_{\alpha=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha \frac{\partial G}{\partial p_\alpha}$.

例えば $G = p_\beta$ ととれば，$Q = p_\beta$ … 一般化運動量p_βが保存される.

Hamiltonian $H(q,p)$ を生成子とする無限小変換は何か?

$$q_\alpha^\epsilon = q_\alpha + \epsilon \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad p_\alpha^\epsilon = p_\alpha - \epsilon \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \quad (\alpha = 1, \cdots, f).$$

正準方程式

$$\frac{d q_\alpha}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad \frac{d p_\alpha}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$$

により

$$q_\alpha^\epsilon \simeq q_\alpha(t+\epsilon), \quad p_\alpha^\epsilon \simeq p_\alpha(t+\epsilon) \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, f).$$

正準方程式に従う無限小時間発展は，無限小正準変換である.

(後述) 正準変換を合成したものは正準変換である.

正準方程式に従う時間発展は，正準方程式に従う多くの無限小時間発展の合成だから，正準変換である.

＊ ある時間が経過したあとの座標，運動量も同じ正準方程式に従う.

正準変換の性質

ふたつの正準変換 $(q,p)\mapsto(q',p')$, $(q',p')\mapsto(q'',p'')$ の合成変換
$(q,p)(\mapsto(q',p'))\mapsto(q'',p'')$ は正準変換である。

∵ W' : $(q,p)\mapsto(q',p')$ の母関数,
W'' : $(q',p')\mapsto(q'',p'')$ の母関数

$$\sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha dq_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{f} p'_\alpha dq'_\alpha + \frac{\partial W'}{\partial t}dt = dW',$$

$$\sum_{\alpha=1}^{f} p'_\alpha dq'_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{f} p''_\alpha dq''_\alpha + \frac{\partial W''}{\partial t}dt = dW''.$$

2式の和をとって,

$$\sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha dq_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{f} p''_\alpha dq''_\alpha + \frac{\partial}{\partial t}(W'+W'')dt = d(W'+W'').$$

∴ $(q,p)\mapsto(q'',p'')$ は $W'+W''$ を母関数とする正準変換である。 ☒

* 以降, 正準変換は時刻 t を含まないものとする。
(t はHamiltonianで変わるけど, 正準変数にはパラメータとして入ってくるに過ぎない。)

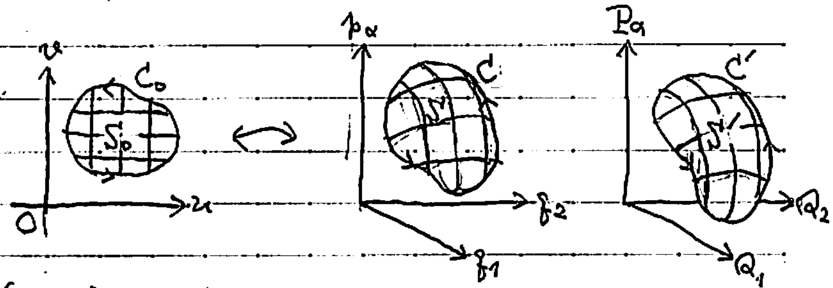
$(q,p)\mapsto(Q,P)$ 正準変換 (母関数 W)

$$\sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha dq_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{f} P_\alpha dQ_\alpha = dW. \quad \text{①}$$

$$\text{①} \Leftrightarrow \oint_C \sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha dq_\alpha = \oint_{C'} \sum_{\alpha=1}^{f} P_\alpha dQ_\alpha$$

(C : (q,p)空間内の任意の閉曲線, C' : C の正準変換による像)

S : C に囲まれた曲面,
S' : C' 〃



パラメータ付け

$q_\alpha = q_\alpha(u,v)$, $p_\alpha = p_\alpha(u,v)$, $(\alpha=1,\cdots,f)$.
$Q_\alpha = Q_\alpha(u,v)$, $P_\alpha = P_\alpha(u,v)$

$$\oint_C \sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha dq_\alpha = \oint_{C_0} \sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha\left(\frac{\partial q_\alpha}{\partial u}du + \frac{\partial q_\alpha}{\partial v}dv\right)$$

[Stokesの定理より]

$$= \iint_{S_0} \sum_{\alpha=1}^{f} \left\{\frac{\partial}{\partial u}\left(p_\alpha \frac{\partial q_\alpha}{\partial v}\right) - \frac{\partial}{\partial v}\left(p_\alpha \frac{\partial q_\alpha}{\partial u}\right)\right\} du\,dv$$

$$= \iint_{S_0} \sum_{\alpha=1}^{f} \left(\frac{\partial p_\alpha}{\partial u}\frac{\partial q_\alpha}{\partial v} - \frac{\partial q_\alpha}{\partial u}\frac{\partial p_\alpha}{\partial v}\right) du\,dv = -\iint_{S_0} \sum_{\alpha=1}^{f} \frac{\partial(q_\alpha, p_\alpha)}{\partial(u,v)}\, du\,dv.$$

同様にして、

$$\oint_C \sum_{\alpha=1}^{f} P_\alpha dQ_\alpha = -\iint_{S_0} \sum_{\alpha=1}^{f} \frac{\partial(Q_\alpha, P_\alpha)}{\partial(u,v)}\, du\,dv.$$

$$\therefore \iint_{S_0} \sum_{\alpha=1}^{f} \frac{\partial(q_\alpha, p_\alpha)}{\partial(u,v)}\, du\,dv = \iint_{S_0} \sum_{\alpha=1}^{f} \frac{\partial(Q_\alpha, P_\alpha)}{\partial(u,v)}\, du\,dv.$$

$$\iint_S \sum_{\alpha=1}^{f} dq_\alpha dp_\alpha = \iint_S \sum_{\alpha=1}^{f} dQ_\alpha dP_\alpha.$$

次の積分は正準変換で不変である：

$$\oint_C \sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha dq_\alpha, \quad \iint_S \sum_{\alpha=1}^{f} dq_\alpha dp_\alpha,$$

C： 位相空間内の閉曲線，

S： 〃 曲面

次の積分も正準変換で不変であることが示される：

$$\int\cdots\int_V dq_1 \cdots dq_f\, dp_1 \cdots dp_f$$

（V： 位相空間内の2f次元領域）

Poisson 括弧

$$\{A, B\} \equiv \sum_{\alpha=1}^{f}\left(\frac{\partial A}{\partial q_\alpha}\frac{\partial B}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial A}{\partial p_\alpha}\frac{\partial B}{\partial q_\alpha}\right)$$

は正準変換で不変であることを、これから示す。

(記号の準備)

$$\mathbb{x} = (x_1 \cdots x_f \; x_{f+1} \cdots x_{2f})^T = (q_1, \cdots, q_f, p_1, \cdots, p_f)^T,$$

$$\mathbb{X} = (X_1 \cdots X_f \; X_{f+1} \cdots X_{2f})^T = (Q_1, \cdots, Q_f, P_1, \cdots, P_f)^T,$$

$$J = \left(\begin{array}{c|c} O & I_f \\ \hline -I_f & O \end{array}\right) \quad (I_f : f \text{次単位行列}),$$

$$\sum_{\alpha=1}^{f}\frac{\partial(q_\alpha, p_\alpha)}{\partial(u, v)} = \frac{\partial \mathbb{x}^T}{\partial u} J \frac{\partial \mathbb{x}}{\partial v}, \quad \sum_{\alpha=1}^{f}\frac{\partial(q_\alpha, p_\alpha)}{\partial(u, v)} = \sum_{\alpha=1}^{f}\frac{\partial(Q_\alpha, P_\alpha)}{\partial(u, v)} \text{ より、}$$

$$\frac{\partial \mathbb{x}^T}{\partial u} J \frac{\partial \mathbb{x}}{\partial v} = \frac{\partial \mathbb{X}^T}{\partial u} J \frac{\partial \mathbb{X}}{\partial v}.$$

$$M = \begin{pmatrix} \frac{\partial X_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial X_1}{\partial x_{2f}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial X_{2f}}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial X_{2f}}{\partial x_{2f}} \end{pmatrix} \quad (2f \times 2f \text{ 行列})$$

を導入すると、合成関数の微分則より $\frac{\partial \mathbb{X}}{\partial u} = M\frac{\partial \mathbb{x}}{\partial u}$ etc. であるから、

$$\frac{\partial \mathbb{x}^T}{\partial u} M^T J M \frac{\partial \mathbb{x}}{\partial v} = \frac{\partial \mathbb{x}^T}{\partial u} J \frac{\partial \mathbb{x}}{\partial v}.$$

これが (q, p) の任意のパラメータ付け (u, v) に対して成り立つから、次を得る:

$$M^T J M = J. \qquad \text{—①}$$

これからさらに、

$$M J M^T = J \qquad \text{—②}$$

が成り立つことを示す。①両辺の det をとって、

$(\det M)^2 \det J = \det J$, $\det J \neq 0$ より、$(\det M)^2 = 1$, $\det M = \pm 1$.

正準変換 $(q, p) \mapsto (Q, P)$ が恒等変換より連続的に変形して得られる変換ならば、

$\det M = 1$ ∴ M は正則行列である

①両辺に右から M^{-1} を掛けて、$M^T J = J M^{-1}$. 両辺に両側から J を掛けると、$J^2 = -I_{2f}$ より $JM^T = M^{-1} J$. 両辺に左辺から M を掛けて②を得る。

$\det M = 1$ は次を意味する：

$$\frac{\partial(Q_1, \cdots, Q_f, P_1, \cdots, P_f)}{\partial(q_1, \cdots, q_f, p_1, \cdots, p_f)} = 1.$$

これより、

$$\int \cdots \int_{V'} dQ_1 \cdots dQ_f \, dP_1 \cdots dP_f$$

$$= \int \cdots \int_V \left| \frac{\partial(Q_1, \cdots, Q_f, P_1, \cdots, P_f)}{\partial(q_1, \cdots, q_f, p_1, \cdots, p_f)} \right| dq_1 \cdots dq_f \, dp_1 \cdots dp_f$$

$$= \int \cdots \int_V dq_1 \cdots dq_f \, dp_1 \cdots dp_f$$

V：位相空間内の $2f$ 次元空間，
V'：V の正準変換による像

位相空間内の $2f$ 次元領域の体積は，正準変換で不変である．

〈Poisson括弧の不変性〉

ナブラ(nabla)演算子を導入：

$$\nabla = \nabla_x = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x_{2f}} \right)^T = \left(\frac{\partial}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial q_f}, \frac{\partial}{\partial p_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial p_f} \right)^T.$$

↓

Poisson括弧 $\boxed{\{A, B\} = (\nabla A)^T J (\nabla B).}$

正準変数 (Q, P) による Poisson括弧を $\{A, B\}'$ と記す：

$$\{A, B\}' \equiv (\nabla_X A)^T J (\nabla_X B) = \sum_{\alpha=1}^{f} \left(\frac{\partial A}{\partial Q_\alpha} \frac{\partial B}{\partial P_\alpha} - \frac{\partial A}{\partial P_\alpha} \frac{\partial B}{\partial Q_\alpha} \right).$$

合成関数の微分則から，

$$\frac{\partial A}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{2f} \frac{\partial A}{\partial X_i} \frac{\partial X_i}{\partial x_j}, \quad (\nabla_x A)^T = (\nabla_X A) M, \quad \nabla_x B = M^T \nabla_X B$$

であるから，

$$\{A, B\} = (\nabla_x A)^T J (\nabla_x B) = (\nabla_X A)^T \overbrace{M J M^T}^{J \ (\because ②)} (\nabla_X B) = (\nabla_X A)^T J (\nabla_X B) = \{A, B\}'. //$$

∴ Poisson括弧は正準変換で不変である．

Hamilton-Jacobi 方程式

最も理想的な正準変換 $(q, p) \mapsto (Q, P)$

… 変換後の Hamiltonian $K = 0$ となっているようなもの

$$\left(\text{正準方程式} \quad \frac{dQ_\alpha}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P_\alpha} = 0, \quad \frac{dP_\alpha}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q_\alpha} = 0 \quad \longrightarrow \quad Q_\alpha = \mathrm{const.} \quad P_\alpha = \mathrm{const.} \right)$$

母関数を $S(q, P, t)$ とおくと、

$$p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}, \quad Q_\alpha = \frac{\partial S}{\partial P_\alpha} \quad (\alpha = 1, \cdots, f), \quad K = H + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

$$\therefore \boxed{H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = H\left(q_1, \cdots, q_f ; \frac{\partial S}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\partial S}{\partial q_f} ; t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.}$$

… Hamilton-Jacobi 方程式

Hamilton-Jacobi 方程式 … $f+1$ 個の独立変数 $q_1, \cdots, q_f, t$ に関する偏微分方程式

→ 一般解 S は $f+1$ 個の定数 $a_1, \cdots, a_{f+1}$ を含む

S が解ならば $S + \mathrm{const.}$ も解である

∴ 定数のひとつ（a_{f+1} とする）は $S + a_{f+1}$ の形で含まれる（→ 以降、a_{f+1} を無視する）。

$$S = S(q, a, t) = S(q_1, \cdots, q_f ; a_1, \cdots, a_f ; t).$$

定数 a_α $(\alpha = 1, \cdots, f)$ が新運動量 P_α である。
新座標を $b_\alpha = Q_\alpha (= \mathrm{const.})$ とおくと、$b_\alpha = \dfrac{\partial S}{\partial a_\alpha}$.

$$\therefore \quad p_\alpha = \frac{\partial S(q, a, t)}{\partial q_\alpha}, \quad b_\alpha = \frac{\partial S(q, a, t)}{\partial a_\alpha} \quad (\alpha = 1, \cdots, f).$$

第2式 → q_α の t 依存性（時間変化）
第1式 → 位相空間内の軌道 $p_\alpha = p_\alpha(q, t)$.

例1　3次元自由粒子の場合、Hamiltonian $H = \dfrac{1}{2m}(p_x{}^2 + p_y{}^2 + p_z{}^2)$.

Hamilton-Jacobi 方程式 $\dfrac{1}{2m}\left\{\left(\dfrac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\dfrac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\dfrac{\partial S}{\partial z}\right)^2\right\} + \dfrac{\partial S}{\partial t} = 0.$ —①

(Hamilton-Jacobi 方程式)

変数分離により解を求める。$S(x,y,z,t) = W(x,y,z) + T(t)$ とおいて

①に代入すると

$$\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)^2 = -2m\frac{dT}{dt}.$$

左辺：x, y, z のみの関数
右辺：t のみの関数
$\therefore$ 両辺 $\equiv$ const $(= 2mE$ とおく$)$.

$$\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)^2 = 2mE, \quad ②$$

$$\frac{dT}{dt} = -E \rightarrow T(t) = -Et, \quad S = W - Et.$$

②を変数分離で解く。$W(x,y,z) = X(x) + Y(y) + Z(z)$ とおいて②に代入すると、

$$\underbrace{\underbrace{\left(\frac{dX}{dx}\right)^2}_{x\text{だけの関数}} + \underbrace{\left(\frac{dY}{dy}\right)^2}_{y\text{だけの関数}} + \underbrace{\left(\frac{dZ}{dz}\right)^2}_{z\text{だけの関数}}}_{} = 2mE.$$

$\therefore$ 各項 $\equiv$ 定数.

$$\frac{dX}{dx} = a_x,\quad \frac{dY}{dy} = a_y,\quad \frac{dZ}{dz} = a_z \quad (a_x, a_y, a_z : \text{const}.).$$

$$X(x) = a_x x,\quad Y(y) = a_y y,\quad Z(z) = a_z z$$

ただし、$a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = 2mE$ とする。

$$\therefore S(x,y,z; a_x, a_y, a_z; t) = a_x x + a_y y + a_z z - Et$$
$$(a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = 2mE).$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_x} = b_x,\quad \frac{\partial S}{\partial a_y} = b_y,\quad \frac{\partial S}{\partial a_z} = b_z \quad (b_x, b_y, b_z : \text{const}.)$$

$$\rightarrow x - \frac{a_x}{m}t = b_x,\quad y - \frac{a_y}{m}t = b_y,\quad z - \frac{a_z}{m}t = b_z.$$

$$\therefore x = \frac{a_x}{m}t + b_x,\quad y = \frac{a_y}{m}t + b_y,\quad z = \frac{a_z}{m}t + b_z$$

…… x, y, z の時間変化（等速直線運動）

$$p_x = \frac{\partial S}{\partial x},\quad p_y = \frac{\partial S}{\partial y},\quad p_z = \frac{\partial S}{\partial z}. \rightarrow p_x = a_x,\quad p_y = a_y,\quad p_z = a_z.$$

□

(Hamilton-Jacobi 方程式)

(例) 1次元調和振動子 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$.

Hamilton-Jacobi 方程式 : $\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$ —— ①

変数分離により解く. $S(q,t) = W(q) + T(t)$ とおいて ① に代入すると,
前例題と同様の議論により,

$$\begin{cases} \frac{1}{2m}\left(\frac{dW}{dq}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = E & \text{—— ②} \\ T(t) = -Et \longrightarrow S(q,t) = W(q) - Et \end{cases}$$

を得る.
② の解は

$$W(q) = \pm\int\sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}\,dq.$$

$$S(q,E,t) = \pm\int\sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}\,dq - Et.$$

…… E が定数 α_α に相当する.

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \beta\ (\text{const.}) \longrightarrow \pm\int\frac{m\,dq}{\sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}} - t = \beta,$$

$$\pm\int\frac{m\,dq}{\sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}} = t + \beta.$$

$$\text{左辺} = \pm\sqrt{\frac{m}{2E}}\int\frac{dq}{\sqrt{1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2E}}} = \pm\sqrt{\frac{m}{2E}}\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\arcsin\left(\sqrt{\frac{m\omega^2 q^2}{2E}}\right)$$

$$= \pm\frac{1}{\omega}\arcsin\left(\sqrt{\frac{m\omega^2 q^2}{2E}}\right) = t + \beta,$$

$$\therefore\ q(t) = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin\omega(t+\beta) \quad \text{…… 単振動の式}$$

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} \longrightarrow p(t) = \pm\frac{2E}{m\omega}\sin\omega(t+\beta).$$

□

(Hamilton - Jacobi 方程式)

$S(q, a, t)$ … Hamilton の主関数

とくに H が t を陽に含まない場合、

$S(q, a, t) = W(q, a) - E(a)t$

$W(q, t)$ … Hamilton の特性関数

＜主関数 S の物理的意味＞

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{\alpha=1}^{f} \dot{q}_\alpha \frac{\partial S}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial S}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha \dot{q}_\alpha - H = L.$$

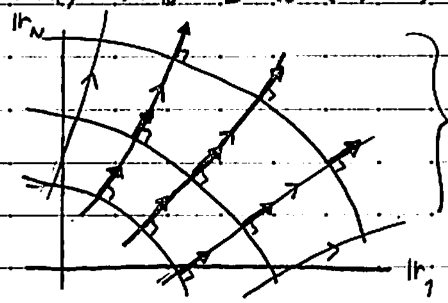
$$\therefore\ S(q(t), a, t) = \int_{t_0}^{t} L(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau)\, d\tau.$$

Hamilton の主関数は、$q(t)$ が実際の物理系の軌道(正準方程式の解)を表すときの作用に他ならない。

[直観的意味]　q_α : 直交座標(Cartesian 座標) $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N$

$$\longrightarrow\ \mathbf{p}_i = \nabla_i S = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}_i}\quad (i = 1, \cdots, N)$$

$(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_N)$ 空間内の S の等高面　＊波動現象の波面に似ている。



様々な初期条件に対する物理系の軌道

主関数 S … 様々な初期条件から出発する系の集まりを考えたとき、その集団が時間の経過に伴いどのように変化するかを示したもの

＊ 量子力学における Schrödinger 方程式

量子力学 : 物質は粒子・波動の二面性をもつ。
└ 波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$

運動量 $\mathbf{p}$ → 波数 $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$、エネルギー E → 角振動数 $\omega = E/\hbar$

$(\hbar = \frac{h}{2\pi},\ h = 6.626068 \times 10^{-34}\ \mathrm{m^2 kg/s}$ Planck 定数$)$

(Hamilton-Jacobi 方程式)

自由粒子の波動関数 … 平面波 $\psi(\mathbf{r},t) = C\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)]$

$$= C\exp\left[\frac{i}{\hbar}\underbrace{(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}_{\text{自由粒子に対する主関数 } S}\right]$$

$$\Downarrow$$

一般の粒子に対する波動関数 … $\psi(\mathbf{r},t) = C\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r},t)\right]$

これより、波動関数が満たすべき方程式を導出する。

$$\psi = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \longrightarrow S = -i\hbar\log\psi + \text{const.}$$

Hamilton-Jacobi 方程式に代入 ($H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U$ とする)

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\mathbf{r}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}}, t\right) = -i\frac{\hbar}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\|\nabla\psi\|^2}{\psi^2} + U = 0.$$

$$\therefore\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\|\nabla\psi\|^2}{\psi} + U\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

ところで、物理の基礎方程式は線形方程式であるはずである。

$$\Delta\psi = \psi\left(\frac{i}{\hbar}\Delta S - \frac{1}{\hbar^2}\|\nabla S\|^2\right)$$

において $|\Delta S| \ll \frac{1}{\hbar}\|\nabla S\|^2$ と仮定すれば、

$$\Delta\psi \approx -\frac{\psi}{\hbar^2}\|\nabla S\|^2 = \frac{\|\nabla\psi\|^2}{\psi}.$$

$$\therefore\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

… Schrödinger 方程式

量子力学における波動関数が従う基礎方程式