# 正準変換

正準方程式を不変にする変換である正準変換の話をします。
正準変数を複数組にしているので和の記号が出てきますが、煩わしかったら正準変数が 1 組だと思って和の記号を無視すればいいです。
ドットは時間微分 $\dot{q} = dq/dt$ です。

「ハミルトン形式」で簡単に触れたルジャンドル変換を先に見ておきます。まず、変数を 2 つ持つ $f(x, y)$ という関数を用意します。これの全微分 $df$ は定義そのままに

$$df = \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy$$

このように全微分は関数の変数の微小変化による和の形を取るので、右辺を

$$\frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy \ \Rightarrow \ Adz + \frac{\partial f}{\partial y}dy$$

と書き換えられれば、$z, y$ を変数に持つ新しい関数になります。新しい関数を $g(y, z)$ とすれば全微分は

$$dg = \frac{\partial g}{\partial y}dy + \frac{\partial g}{\partial z}dz$$

なので、$df$ から

$$dg = df - \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial g}{\partial z}dz \quad\quad (A = \frac{\partial g}{\partial z})$$

とすれば $dg$ は作れます。ここで、右辺第二項での $\partial f/\partial x$ が $z$、$\partial g/\partial z$ が $-x$ になるとすれば

$$dg = df - zdx - xdz$$

よって、新しい関数 $g(y, z)$ は元の関数 $f(x, y)$ から

$$g(y, z) = f(x, y) - xz$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial g}{\partial y}\ ,\ \frac{\partial f}{\partial x} = z\ ,\ \frac{\partial g}{\partial z} = -x$$

変数 $x, z$ は自由に選べているわけではないことに注意してください。偏微分すれば $\partial f/\partial x = z,\ \partial g/\partial z = -x$ になっていることが分かります。このように変数を変更した関数を作る変換をルシャンドル変換と言います。これは

$$g(y, z) = xz + f(x, y)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial g}{\partial y}\ ,\ \frac{\partial f}{\partial x} = -z\ ,\ \frac{\partial g}{\partial z} = x$$

としても同じです。ルジャンドル変換と分かっていれば混乱はしないですが、ルジャンドル変換の形 $dg = df - zdx - xdz$ から、$g$ の変数が $x, y, z$ であるように見えてしまうので状況が複雑なときには気をつけたほうがいいかもしれません。

正準変換の話に移ります。正準方程式は運動方程式なので、正準方程式の形を変えない $q, p$ の変換なら同じ運動を記述します。このような変換があればハミルトニアンの形を変えられるので便利です。というわけで、正準方程式の形を変えない変換を作ります。正準方程式の形を変えない (正準方程式が不変) というのはハミルトニアン $H(q,p,t)$ の正準方程式が、$q, p$ を $Q, P$ と変換したときに、変換後のハミルトニアン $K(Q,P,t)$ によって

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}\ ,\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}\ \Rightarrow\ \dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P}\ ,\ \dot{P} = -\frac{\partial K}{\partial Q}$$

となっていることです。$Q, P$ は $q, p$ を変換して作るので $Q(q,p), P(q,p)$ で、逆変換 $(Q, P \Rightarrow q, p)$ では $q(Q,P), p(Q,P)$ となっています。

話をより一般化するために、正準変数を $q, p$ の一組でなく、$(q_1,p_1),(q_1,p_1),\ldots,(q_n,p_n)$ とします。なので、正準方程式は

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}\ ,\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}\qquad (i = 1,2,\ldots,n)$$

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}\ ,\ \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}\qquad (i = 1,2,\ldots,n)$$

変換後による $Q, P$ は変換前の $q, p$ と $t$ から

$$Q(q_1,q_2,\ldots,q_n,p_1,p_2,\ldots,p_n,t) \tag{1a}$$

$$P(q_1,q_2,\ldots,q_n,p_1,p_2,\ldots,p_n,t) \tag{1b}$$

逆変換では

$$q(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n,P_1,P_2,\ldots,P_n,t) \tag{1c}$$

$$p(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n,P_1,P_2,\ldots,P_n,t) \tag{1d}$$

面倒なので変数に全部含まれているときは単に $Q(q,p,t)$ のように書きます。

正準方程式を求めるための出発点は作用の変分が 0 という

$$\delta S = \delta\int_{t_1}^{t_2} dt(\sum_{i=1}^{n} p_i\dot{q}_i - H(q,p,t)) = 0$$

この式です。つまり、作用の変分の形が同じなら変換後も正準方程式の形は同じになるので、$p_i, q_i$ と $Q_i, P_i$ は

$$\sum_{i=1}^{n} p_i\dot{q}_i - H(q,p,t) = \sum_{i=1}^{n} P_i\dot{Q}_i - K(Q,P,t)$$

という関係を持っていればいいです。しかし、これでは見るからに変換に制限がかかりすぎているので、手を加えます。作用の変分の形が変わらなければ正準方程式も変わらないというのを利用します。これ以降 $\Sigma$ 記号で範囲を書いていないものは $1 \sim n$ とします。

関数 $W$ の時間微分を作用の変分の式に加えてみると

$$\begin{aligned}\delta\int_{t_1}^{t_2} dt(\sum_i p_i\dot{q}_i - H + \frac{dW}{dt}) &= \delta\int_{t_1}^{t_2} dt(\sum_i p_i\dot{q}_i - H) + \delta\int_{t_1}^{t_2} dt\frac{dW}{dt}\\ &= \delta\int_{t_1}^{t_2} dt(\sum_i p_i\dot{q}_i - H) + \big[\delta W\big]_{t_1}^{t_2}\end{aligned}$$

$W$ は $q,p \Rightarrow Q,P$ の変換に関わるように導入したいので、素直に考えれば $q,p,Q,P,t$ の関数です。$W$ の変分を取ると (変分は $q,p,Q,P$ の経路をずらす)

$$[\delta W]_{t_1}^{t_2} = \big[\frac{\partial W}{\partial q}\delta q + \frac{\partial W}{\partial p}\delta p + \frac{\partial W}{\partial Q}\delta Q + \frac{\partial W}{\partial P}\delta P\big]_{t_1}^{t_2}$$

ここで、これが 0 になるとします。つまり、両端 $t_1, t_2$ で変分が全て 0 とします。実際に、正準方程式を作るとき変分 $\delta q, \delta p$ は時間の両端 $t_1, t_2$ で 0 になるように取っており、変換後の $Q, P$ の変分も両端で 0 になるという条件は受け継がないと正準方程式を作れないので $\delta Q(t_1) = \delta Q(t_2) = 0, \delta P(t_1) = \delta P(t_2) = 0$ とする必要があります。よって、$[\delta W]_{t_1}^{t_2} = 0$ から

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt(\sum_i p_i\dot{q}_i - H + \frac{dW}{dt}) = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt(\sum_i p_i\dot{q}_i - H)$$

となって作用の変分は形を変えないことになります。この作用積分に $dW/dt$ を加えても正準方程式の形を変えないという性質から

$$\sum_i p_i\dot{q}_i - H(q,p,t) = \sum_i P_i\dot{Q}_i - K(Q,P,t) + \frac{dW}{dt} \tag{2}$$

とできます。これを変形してみると

$$\sum_i p_i\frac{dq_i}{dt} - H(q,p,t) - \sum_i P_i\frac{dQ}{dt} + K(Q,P,t) = \frac{dW}{dt}$$

$$\sum_i p_i dq_i - \sum_i P_i dQ_i - (H-K)dt = dW$$

となっているので、$q_i$ と $Q_i$ が独立であるなら、$W$ は $q,Q,t$ の関数であればいいことになります (このように定義すると $q_i$ と $p_i$ が独立でない)。後で分かりますが、この関数 $W$ は母関数と呼ばれます。というわけで、$W$ の変数を書けば

$$\sum_i p_i\dot{q}_i - H(q,p,t) = \sum_i P_i\dot{Q}_i - K(Q,P,t) + \frac{dW(q,Q,t)}{dt} \tag{3}$$

これが正準方程式の形を変えない変換を作るための関係式となり、これを満たす変換を正準変換 (canonical transformation) と言います。しかし、これからだけでは $q,p,Q,P$ にどういう制限がかかっているのか分からないので変形して、関係を取り出します。

まず、$W$ に触れておきます。最初に $W$ は $q,p,Q,P,t$ の関数と言いましたが、全部の変数を持った状況でなく、各正準変数を $(q,Q),(q,P),(Q,p),(p,P)$ とする 4 パターンを考えます。(1a)〜(1d) によって変換前の正準変数 $q,p$ と変換後の正準変数 $Q,P$ から 1 つずつ選べば残った方が決まるようになっているので、$W(q,p,Q,P,t)$ をこのような 4 パターンにできます。変数の変更はルジャンドル変換で行えるために、各パターンはルジャンドル変換で繋げられるので、変数が異なっているものを与えられた変数によって

$$W_1(q,Q,t)\ ,\ W_2(q,P,t)\ ,\ W_3(Q,p,t)\ ,\ W_4(p,P,t)$$

と定義します。(3) にいる $W_1$ の性質を受け継がせながらルジャンドル変換で $W_2, W_3, W_4$ に持っていけば、どれを使っても正準変換にすることができます。

ここでは $W$ の変数をこのように 4 パターンに取っていますが、$W_1(q,Q,t)$ からの変数の置き換え方は $2^{2n}$ 個あります。これは $(q,Q)$ において $q_i$ を $p_i$ に置き換えるときに $q_i$ の全てでなく一部を $p_i$ に、同様に $Q_i$ の一部を $P_i$

に置き換えるということもできるためです (例えば $q_2$ だけを $p_2$ に置き換える)。そうすると、$q_i$ は $n$ 個あるので、配置場所の数が $n$ あり、そこに $q_i$ か $p_i$ のどちらかが入るという場合の数の問題になって、これは $2^n$ 通りです。そして、$q_i, p_i$ の配置に対して同じことを $Q_i$ でも行うので、全体で $(2^n)^2 = 2^{2n}$ となります。

(3) が成立しているときの $W_1$ の関係を取り出します。$W_1(q, Q, t)$ の時間微分は偏微分の連鎖則から

$$\frac{dW_1}{dt} = \frac{\partial W_1}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial W_1}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} + \sum_i \frac{\partial W_1}{\partial Q_i}\frac{dQ_i}{dt}$$

これを (3) に入れると

$$\begin{aligned}
\frac{dW_1}{dt} &= \sum_i p_i \frac{dq_i}{dt} - H(q,p,t) - \sum_i P_i \frac{dQ_i}{dt} + K(Q,P,t) \\
0 &= \sum_i p_i \frac{dq_i}{dt} - \sum_i P_i \frac{dQ_i}{dt} - (H - K + \frac{dW_1}{dt}) \\
&= \sum_i p_i \frac{dq_i}{dt} - \sum_i P_i \frac{dQ_i}{dt} - \big(H - K + \frac{\partial W_1}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial W_1}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} + \sum_i \frac{\partial W_1}{\partial Q_i}\frac{dQ_i}{dt}\big) \\
&= \sum_i \big(p_i - \frac{\partial W_1}{\partial q_i}\big)\frac{dq_i}{dt} - \sum_i \big(P_i + \frac{\partial W_1}{\partial Q_i}\big)\frac{dQ_i}{dt} - \big(H - K + \frac{\partial W_1}{\partial t}\big)
\end{aligned}$$

これから各項が 0 になる必要があるので

$$p_i = \frac{\partial W_1(q,Q,t)}{\partial q_i} \tag{4a}$$

$$P_i = -\frac{\partial W_1(q,Q,t)}{\partial Q_i} \tag{4b}$$

$$H = K - \frac{\partial W_1(q,Q,t)}{\partial t} \tag{4c}$$

となっています。$W_1$ は $H$ から $K$ を与え、$p_i = \partial W_1(q,Q,t)/\partial q_i$ から変換後の $Q$ を変換前の $q, p$ で与え、$P_i = -\partial W_1(q,Q,t)/\partial Q_i$ から変換前の $q$ を変換後の $Q, P$ で与えるので、$W_1$ はどのような変換をしているのかを決めています。このように、$W_1$ ($W_2, W_3, W_4$ も ) は変換の形を与えることから母関数と呼ばれます。これらの関係は (3) から求められているので、与えられた変換が (4a),(4b),(4c) を満たすとき正準変換となります。なので、(4a),(4b),(4c) が正準変換の条件です。$W_1$ だけでは変数が $q, Q$ の場合しか使えないので、$W_2, W_3, W_4$ の場合も求めます。

ちなみに、$W_1$ には付加的な条件として

$$\frac{\partial W_1(q,Q,t)}{\partial q_i \partial Q_j} \neq 0$$

というのもあります。$W_2, W_3, W_4$ にも同様の条件があり、これらが 0 になると逆変換が求められないからです。

$W_1(q, Q, t)$ から $W_2(q, P, t)$ へルジャンドル変換で繋げます。ルジャンドル変換は

$$g(y,z) = f(x,y) - xz$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial g}{\partial y}\ ,\ \frac{\partial f}{\partial x} = z\ ,\ \frac{\partial g}{\partial z} = -x$$

となっているので、これを今の場合に当てはめると、$Q_i$ を $P_i$ に変更することから、(4b) を考慮して

$$W_2(q,P,t) = W_1(q,Q,t) - \sum_i Q_i(-P_i) = W_1(q,Q,t) + \sum_i Q_i P_i$$

$$\frac{\partial W_1}{\partial q_i} = \frac{\partial W_2}{\partial q_i}\ ,\ \frac{\partial W_1}{\partial Q_i} = -P_i\ ,\ \frac{\partial W_2}{\partial P_i} = Q_i\ ,\ \frac{\partial W_1}{\partial t} = \frac{\partial W_2}{\partial t}$$

と変換すればいいです。そうすると $W_2$ は (4a) を使うことで

$$Q_i = \frac{\partial W_2(q,P,t)}{\partial P_i} \tag{5a}$$

$$p_i = \frac{\partial W_2(q,P,t)}{\partial q_i} \tag{5b}$$

$$H = K - \frac{\partial W_2(q,P,t)}{\partial t} \tag{5c}$$

という関係を持ちます。同じようにして、$W_3(Q,p,t)$ は $W_1(q,Q,t)$ から

$$W_3(Q,p,t) = W_1(q,Q,t) - \sum_i q_i p_i$$

$$\frac{\partial W_1}{\partial Q_i} = \frac{\partial W_3}{\partial Q_i}\ ,\ \frac{\partial W_1}{\partial q_i} = p_i\ ,\ \frac{\partial W_3}{\partial p_i} = -q_i\ ,\ \frac{\partial W_1}{\partial t} = \frac{\partial W_3}{\partial t}$$

これらと (4b) から

$$q_i = -\frac{\partial W_3(Q,p,t)}{\partial p_i}$$

$$P_i = -\frac{\partial W_3(Q,p,t)}{\partial Q_i}$$

$$H = K - \frac{\partial W_3(Q,p,t)}{\partial t}$$

$W_4(p,P,t)$ は $W_2(q,P,t)$ から

$$W_4(p,P,t) = W_2(q,P,t) - \sum_i q_i p_i$$

$$\frac{\partial W_2}{\partial P_i} = \frac{\partial W_4}{\partial P_i}\ ,\ \frac{\partial W_2}{\partial q_i} = p_i\ ,\ \frac{\partial W_4}{\partial p_i} = -q_i\ ,\ \frac{\partial W_2}{\partial t} = \frac{\partial W_4}{\partial t}$$

これらと (5a) から

$$q_i = -\frac{\partial W_4(p,P,t)}{\partial p_i}$$

$$Q_i = \frac{\partial W_4(p,P,t)}{\partial P_i}$$

$$H = K - \frac{\partial W_4(p,P,t)}{\partial t}$$

まとめると

$$
\begin{aligned}
W_1(q,Q,t)\ &:\quad p_i=\frac{\partial W_1}{\partial q_i} \qquad P_i=-\frac{\partial W_1}{\partial Q_i} \qquad H=K-\frac{\partial W_1}{\partial t}\\
W_2(q,P,t)\ &:\quad Q_i=\frac{\partial W_2}{\partial P_i} \qquad p_i=\frac{\partial W_2}{\partial q_i} \qquad H=K-\frac{\partial W_2}{\partial t}\\
W_3(Q,p,t)\ &:\quad q_i=-\frac{\partial W_3}{\partial p_i} \qquad P_i=-\frac{\partial W_3}{\partial Q_i} \qquad H=K-\frac{\partial W_3}{\partial t}\\
W_4(p,P,t)\ &:\quad q_i=-\frac{\partial W_4}{\partial p_i} \qquad Q_i=\frac{\partial W_4}{\partial P_i} \qquad H=K-\frac{\partial W_4}{\partial t}
\end{aligned}
\tag{6}
$$

$W_2,W_3,W_4$ は $W_1$ の性質を踏まえているので、正準変換は $W_1,W_2,W_3,W_4$ のどれからでも作ることができ、その対応する母関数の関係を満たす必要があります。また、ハミルトニアンの関係を見ると分かるように、母関数が陽に時間依存していない $W_1(q,Q)$ のようなとき $K(Q,P,t)=H(q,p,t)$ となります。母関数が陽に時間依存していなく $K(Q,P,t)=H(q,p,t),\ Q(q,p),\ P(q,p)$ となる場合を時間依存しない正準変換と言います。$Q,P$ が時間に依存しなくなる理由は補足 2 を見てください。

ちなみに、ルジャンドル変換を 2 重に行うようにするなら、例えば

$$
W_4(p,P,t)=W_1(q,Q,t)-\sum_i q_ip_i+\sum_i Q_iP_i
$$

のようにもできます。これは $W_1$ から $W_2$ にいって $W_4$ にいくというものなので、$W_2$ が求まっているなら余計な手順になります。

ここからさらに母関数ではなく直接 $q,p,Q,P$ の間にある条件を求めます。$P_i$ を $q_j$ で偏微分すると $W_1$ の関係を使うことで

$$
\frac{\partial P_i}{\partial q_j}=-\frac{\partial}{\partial q_j}\frac{\partial W_1}{\partial Q_i}=-\frac{\partial}{\partial Q_i}\frac{\partial W_1}{\partial q_j}=-\frac{\partial p_j}{\partial Q_i}
$$

となって、$W_1$ から $q,Q,p,P$ の関係として

$$
\frac{\partial P_i}{\partial q_j}=-\frac{\partial p_j}{\partial Q_i}
$$

というのが取り出せます。$Q_i$ を $q_i$ で偏微分すると $W_2$ から

$$
\frac{\partial Q_i}{\partial q_j}=\frac{\partial}{\partial q_j}\frac{\partial W_2(q,P,t)}{\partial P_i}=\frac{\partial}{\partial P_i}\frac{\partial W_2(q,P,t)}{\partial q_j}=\frac{\partial p_j}{\partial P_i}
$$

$P_i$ を $p_j$ で偏微分すると $W_3$ から

$$
\frac{\partial P_i}{\partial p_j}=-\frac{\partial}{\partial p_j}\frac{\partial W_3(Q,p,t)}{\partial Q_i}=\frac{\partial}{\partial Q_i}\frac{\partial W_3(Q,p,t)}{\partial p_j}=\frac{\partial q_j}{\partial Q_i}
$$

$Q_i$ を $p_j$ で偏微分すると $W_4$ から

$$
\frac{\partial Q_i}{\partial p_j}=\frac{\partial}{\partial p_j}\frac{\partial W_4(p,P,t)}{\partial P_i}=\frac{\partial}{\partial P_i}\frac{\partial W_4(p,P,t)}{\partial p_j}=-\frac{\partial q_j}{\partial P_i}
$$

というわけで、$W$ の現れない関係として

$$\frac{\partial P_i}{\partial q_j}=-\frac{\partial p_j}{\partial Q_i}\ ,\ \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}=\frac{\partial p_j}{\partial P_i}\ ,\ \frac{\partial P_i}{\partial p_j}=\frac{\partial q_j}{\partial Q_i}\ ,\ \frac{\partial Q_i}{\partial p_j}=-\frac{\partial q_j}{\partial P_i} \tag{7}$$

これらも (3) から求められたものなので、これらが成立しているときに正準変換となります。これらの関係式を正準変換の必要十分条件と言う場合が多いです。今は正準方程式が不変というのからこの条件に辿りつきましたが、この条件式を逆に辿っていけば正準方程式が不変になっていることが分かるので、必要十分条件です。より直接的にこの条件によって正準方程式が不変になることが分かるポアソン括弧を使った方法を下の補足 1 で見ています。

いくつかの正準変換の例を見ていきます。

- 恒等変換

  母関数として $W_2$ を使い

$$W_2(q,P)=\sum_i q_iP_i$$

  これは $W_2$ の関係から

$$p_i=\frac{\partial W_2}{\partial q_i}=P_i\ ,\ Q_i=\frac{\partial W_2}{\partial P_i}=q_i\ ,\ H=K-\frac{\partial W_2}{\partial t}=K$$

  となるのが分かります。$p_i=P_i$、$q_i=Q_i$、$H=K$ なので、変換の前後で同じです。よって、これは恒等変換です。

- 無限小変換

  よく出てくる無限小変換は $x\Rightarrow x+\epsilon$ みたいな格好をしていることから、恒等変換に微小な項をくっ付ければ無限小変換になることが予想できるので

$$W_2(q,P,t)=\sum_i q_iP_i+\epsilon G(q,P,t)$$

  というのを考えてみます。$\epsilon$ は微小量です。この場合では

$$p_i=\frac{\partial W_2}{\partial q_i}=P_i+\epsilon\frac{\partial G}{\partial q_i}$$
$$Q_i=\frac{\partial W_2}{\partial P_i}=q_i+\epsilon\frac{\partial G}{\partial P_i}$$

  無限小変換が欲しいので、$Q_i,P_i$ は

$$Q_i=q_i+\epsilon\alpha_i(q,p,t)$$
$$P_i=p_i+\epsilon\beta_i(q,p,t)$$

  となっているとします。そうすると

$$\epsilon\alpha_i = Q_i - q_i = q_i + \epsilon\frac{\partial G}{\partial P_i} - q_i = \epsilon\frac{\partial G}{\partial P_i}$$

$$\epsilon\beta_i = P_i - p_i = p_i - \epsilon\frac{\partial G}{\partial q_i} - p_i = -\epsilon\frac{\partial G}{\partial q_i}$$

ここで、$G(q,P,t)$ は $G(q,p+\epsilon\beta(q,p,t),t)$ なので、

$$\epsilon\alpha_i = \epsilon\frac{\partial G(q,P,t)}{\partial P_i} \simeq \epsilon\frac{\partial G(q,p,t)}{\partial p_i}$$

$$\epsilon\beta_i = -\epsilon\frac{\partial G(q,P,t)}{\partial q_i} \simeq -\epsilon\frac{\partial G(q,p,t)}{\partial q_i}$$

$$\Big(\frac{\partial}{\partial P_i} = \sum_j \frac{\partial q_j}{\partial P_i}\frac{\partial}{\partial q_j} + \sum_j \frac{\partial p_j}{\partial P_i}\frac{\partial}{\partial p_j} = \sum_j(\delta_{ij} + \epsilon\frac{\partial \beta}{\partial P_i})\frac{\partial}{\partial p_j} \simeq \frac{\partial}{\partial p_i}\Big)$$

と近似できます。$\epsilon$ は微小量なので 2 次以上の項を無視しています。よって、$G(q,p,t)$ から微小な変化部分 $\alpha_i, \beta_i$ が与えられるので、各種の無限小変換は母関数の中の $G(q,P,t)$ を $G(q,p,t)$ と近似したものによって作れます。無限小変換ではこの $G(q,p,t)$ を母関数と呼んだり、生成子と呼んだりします ($qP$ 項は恒等変換部分だから)。

無限小変換の簡単な例は $\alpha_i = 1, \beta = 0$ とした単なる座標の平行移動で

$$Q_i = q_i + \epsilon_i\ ,\ P_i = p_i$$

これは

$$\epsilon\frac{\partial G(q,p,t)}{\partial p_i} = \epsilon_i$$

になればいいので

$$\epsilon G(p) = \sum_i \epsilon_i p_i \qquad (\epsilon\frac{\partial G}{\partial p_j} = \sum_i \epsilon_i\delta_{ij} = \epsilon_j)$$

と簡単に $G(q,p,t)$ が求まり、$p_i$ にのみ依存していることが分かります。ここで覚えておくと良いのは、座標の平行移動はそれの正準共役な運動量によって作られているという点です。これは量子論へいくと非常によく出てきます。

時間の微小変化を考えた

$$Q_i = q_i(t+dt) \simeq q_i(t) + \frac{dq_i}{dt}dt$$

$$P_i = p_i(t+dt) \simeq p_i(t) + \frac{dp_i}{dt}dt$$

この場合では

$$\epsilon\frac{\partial G(q,p,t)}{\partial p_i}=\frac{dq_i}{dt}dt$$

$$-\epsilon\frac{\partial G(q,p,t)}{\partial q_i}=\frac{dp_i}{dt}dt$$

これの右辺は正準変数の時間微分で、左辺は正準変数による微分なので、$G$ をハミルトニアン $H$ とすれば正準方程式として成立しています ($\epsilon$ と $dt$ は微小量なので $\epsilon=dt$ とできる )。なので、$G$ はハミルトニアン $H$ です。このことから、$q(t)$ から微小時間たった $Q_i=q_i(t+dt), P_i=p_i(t+dt)$ は

$$\begin{aligned}
&Q_i=q_i(t+dt)\simeq q_i(t)+\frac{dq_i}{dt}dt=q_i(t)+\frac{\partial G(q,p,t)}{\partial p_i}dt=q_i(t)+\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p_i}dt\\
&P_i=p_i(t+dt)\simeq p_i(t)-\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q_i}dt
\end{aligned}$$

となり、変化分がハミルトニアンによって作られています。このようにハミルトニアンが時間発展を作っているというのも量子論で使われます。というより、シュレーディンガー方程式はハミルトニアンが時間発展を作ることを仮定しています。

ルジャンドル変換で $W_1$ に持っていっても同じ変換になることも示しておきます。ルジャンドル変換から $W_1$ と $W_2$ は

$$W_2(q,P,t)=W_1(q,Q,t)+\sum_i Q_iP_i$$

なので、$W_2$ での無限小変換の形を入れることで $W_1$ は

$$W_1(q,Q,t)=W_2(q,P,t)-\sum_i Q_iP_i=\sum_i P_i(q_i-Q_i)+\epsilon G(q,P,t)$$

となります。$\partial W_1/\partial Q_i=P_i$ がルジャンドル変換の条件として与えられているので、ルジャンドル変換で繋いだ形を $W_1$ の関係に入れても $q_i$ の変換の形を出すことができません。なので、(3) に戻ります。

$W_1$ の時間微分は

$$\begin{aligned}
\frac{dW_1}{dt}&=\sum_i\frac{dP_i}{dt}(q_i-Q_i)+\sum_i P_i(\frac{dq_i}{dt}-\frac{dQ_i}{dt})+\epsilon\frac{dG(q,P,t)}{dt}\\
&=\sum_i(q_i-Q_i)\frac{dP_i}{dt}+\sum_i P_i(\frac{dq_i}{dt}-\frac{dQ_i}{dt})+\epsilon(\frac{\partial G}{\partial t}+\sum_i\frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt}+\sum_i\frac{\partial G}{\partial P_i}\frac{dP_i}{dt})
\end{aligned}$$

これを入れてやると

$$\sum_i p_i\frac{dq_i}{dt}-\sum_i P_i\frac{dQ}{dt}-(H-K)=\frac{dW_1}{dt}$$

$$\sum_i(p_i-P_i-\epsilon\frac{\partial G}{\partial q_i})\frac{dq_i}{dt}-\sum_i(q_i-Q_i+\frac{\partial G}{\partial P_i})\frac{dP_i}{dt}-(H-K+\epsilon\frac{\partial G}{\partial t})=0$$

よって

$$Q_i = q_i + \epsilon\frac{\partial G(q,P,t)}{\partial P_i}\ ,\ P_i = p_i - \epsilon\frac{\partial G(q,P,t)}{\partial q_i}$$

となって無限小変換の形になります。

- 正準変数の交換
  他の簡単な例としては

$$W_1(q,Q) = \sum_i q_i Q_i$$

これは

$$p_i = \frac{\partial W_1(q,Q)}{\partial q_i} = Q_i$$
$$P_i = -\frac{\partial W_1(q,Q)}{\partial Q_i} = -q_i$$

となるので、正準変数を交換する変換になっています。

- バネの単振動
  少し複雑な例も見ておきます。1 次元のバネの単振動のハミルトニアンはラグランジアン

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

からハミルトニアンは

$$H = p\dot{q} - \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

$p$ は

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$$

なので、これを入れて $\dot{q}$ を消すことでハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{m} - \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

となります (ハミルトニアンの変数は $q, p$)。

先に変換で持っていきたい形を作ります。ハミルトニアンの形を見ると、$q^2$ と $p^2$ がいるので三角関数の $\sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$ を利用して、ハミルトニアンが簡単な形になるようにします。というわけで

$$q=\frac{F(P)}{m\omega}\sin Q\ ,\ p=F(P)\cos Q$$

という変換になっているとします。そして、変換後のハミルトニアンは $K(Q,P)=H(q,p)$ になるとすれば

$$K(Q,P)=H(q(Q,P),p(Q,P))=\frac{F^2(P)}{2m}\cos^2 Q+\frac{F^2(P)}{2m}\sin^2 Q=\frac{F^2(P)}{2m}$$

このように簡単そうな形になります。しかし、問題なのはこれが正準変換になっているのかです。正準変換であるためには母関数が作れる必要があります。なので、母関数が作れるように $F(P)$ を求めます。

変換に対応する母関数を出します。まず、未知関数の $F(P)$ を消すために $p/q$ を計算して

$$\frac{p}{q}=m\omega\frac{\cos Q}{\sin Q}$$

$$p=m\omega q\frac{\cos Q}{\sin Q}$$

$p$ は $W_1$ から作ることができき

$$\frac{\partial W_1}{\partial q}=p=m\omega q\frac{\cos Q}{\sin Q}$$

よって $W_1$ を

$$W_1(q,Q)=\frac{1}{2}m\omega q^2\frac{\cos Q}{\sin Q}+C(Q)$$

と与えればいいことになります。$C(Q)$ は $q$ で偏微分すれば消える $Q$ にのみ依存する項 (定数も含める) です。そうすると $P$ は

$$P=-\frac{\partial W_1}{\partial Q}=-\frac{1}{2}m\omega q^2(-1-\frac{\cos^2 Q}{\sin^2 Q})=\frac{1}{2}m\omega q^2\frac{1}{\sin^2 Q}-\frac{\partial C(Q)}{\partial Q}$$

と求まり、これを変形すると

$$q^2=\frac{2P}{m\omega}\sin^2 Q+C'(Q)$$

$C'(Q)=0$ で $q$ の変換の形が出てくるので、$C(Q)=0$ とします。よって、$W_1$ が求まり、$W_1$ の関係を満たしているので正準変換で、母関数が時間に依存していないので $K=H$ にもなっています。

というわけで、$F(P)$ は

$$F(P)=\sqrt{2m\omega P}$$

となるので、変換は

$$q(Q,P)=\sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\sin Q\ ,\ p(Q,P)=\sqrt{2m\omega P}\cos Q$$

ハミルトニアンは

$$K=\omega P$$

これの利点はハミルトニアンが簡単になっただけでなく、正準方程式を見ると

$$\frac{dQ}{dt}=\frac{\partial K}{\partial P}=\omega\ ,\ \frac{dP}{dt}=-\frac{\partial K}{\partial Q}=0$$

となるので

$$Q=\omega t+C_1\ ,\ P=C_2$$

ハミルトニアンは全エネルギー $E$ と等しいので、$C_2$ を $E/\omega$ として、$q,p$ にこれらを入れると

$$q=\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin(\omega t+C_1)\ ,\ p=\sqrt{2mE}\cos(\omega t+C_1)$$

このように単振動の運動方程式である 2 階微分方程式を解く必要なく、単純な計算によって解が求まります。

**・補足 1**
ポアソン括弧

$$\{A,B\}_{PB}=\sum_i\Big(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}\Big)$$

を使って、正準変換の条件を出します。ポアソン括弧を使えば正準方程式は

$$\frac{dq_i}{dt}=\{q_i,H\}_{PB},\ \frac{dp_i}{dt}=\{p_i,H\}_{PB}$$

また、関数 $F(q,p,t)$ の時間微分は

$$\frac{dF}{dt}=\{F,H\}_{PB}+\frac{\partial F}{\partial t}\qquad(\frac{dF}{dt}=\sum_i\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt}+\sum_i\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}+\frac{\partial F}{\partial t})$$

今知りたいのは、正準変換であるための関係である

$$\sum_i p_i\dot{q}_i-H(p,q,t)=\sum_i P_i\dot{Q}_i-K(Q,P,t)+\frac{dW}{dt}$$

これが正準変数にどのような条件を与えているのかです。これが満たされていれば変換後の正準変数によって

$$\frac{dQ_i}{dt}=\{Q_i,K\}_{\overline{PB}}=\frac{\partial K}{\partial P_i}\ ,\ \frac{dP_i}{dt}=\{P_i,K\}_{\overline{PB}}=-\frac{\partial K}{\partial Q_i}$$

$$\Big(\{A,B\}_{\overline{PB}}=\sum_i\Big(\frac{\partial A}{\partial Q_i}\frac{\partial B}{\partial P_i}-\frac{\partial A}{\partial P_i}\frac{\partial B}{\partial Q_i}\Big)\Big)$$

となります。

先に結果からいけば、$Q(q,p,t),P(q,p,t),K(Q,P,t)$ による正準方程式が成立するためには、$q,p$ によるポアソン括弧 $\{\ ,\ \}_{PB}$ と、$Q,P$ によるポアソン括弧 $\{\ ,\ \}_{\overline{PB}}$ が

$$\{A,B\}_{PB}=\{A,B\}_{\overline{PB}}$$

となっているとすることが必要です。この条件を使うと

$$\frac{dQ_i}{dt}=\{Q_i,H\}_{PB}+\frac{\partial Q_i}{\partial t}=\{Q_i,H\}_{\overline{PB}}+\frac{\partial Q_i}{\partial t}=\sum_j(\frac{\partial Q_i}{\partial Q_j}\frac{\partial H}{\partial P_j}-\frac{\partial Q_i}{\partial P_j}\frac{\partial H}{\partial Q_j})+\frac{\partial Q_i}{\partial t}=\frac{\partial H}{\partial P_i}+\frac{\partial Q_i}{\partial t}$$

母関数 $W_2(q,P,t)$ から $Q_i=\partial W_2/\partial P_i$、$K=H+\partial W_2/\partial t$ なので

$$\frac{dQ_i}{dt}=\frac{\partial H}{\partial P_i}+\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial W_2}{\partial P_i}=\frac{\partial}{\partial P_i}(H+\frac{\partial W_2}{\partial t})=\frac{\partial K}{\partial P_i}\tag{8}$$

このように $Q_i,P_i$ での正準方程式になります。$P_i$ でも同様です。よって、ポアソン括弧の関係 $\{A,B\}_{PB}=\{A,B\}_{\overline{PB}}$ が成立していれば正準方程式は形を変えません。なので、ポアソン括弧が不変なら正準変換と言えます (正準変換ならポアソン括弧は不変とも言える)。

ではポアソン括弧が不変になるための条件はなんなのかを求めます。時間依存していても変わらないので $A(q,p),B(q,p)$ という任意関数を用意します。$A(q(Q,P,t),p(Q,P,t))$ から、$q,p$ を $Q,P$ で書いたとして $A$ を $Q,P$ の関数だとみなすことで

$$\frac{\partial A}{\partial q_i}=\sum_j\Big(\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}+\frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial q_i}\Big)\ ,\ \frac{\partial A}{\partial p_i}=\sum_j\Big(\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_j}{\partial p_i}+\frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial p_i}\Big)$$

となるので、$q,p$ によるポアソン括弧にいれて

$$
\begin{aligned}
\{A,B\}_{PB} =& \sum_i \Big(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}\Big) \\
=& \sum_i \Big(\sum_j \Big(\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial q_i}\Big)\sum_k \Big(\frac{\partial B}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} + \frac{\partial B}{\partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial p_i}\Big)\Big) \\
&-\sum_i \Big(\sum_j \Big(\frac{\partial B}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial B}{\partial P_j}\frac{\partial P_j}{\partial q_i}\Big)\sum_k \Big(\frac{\partial A}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} + \frac{\partial A}{\partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial p_i}\Big)\Big) \\
=& \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\sum_i\Big(\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} - \frac{\partial Q_j}{\partial p_i}\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}\Big) + \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial B}{\partial P_k}\sum_i\Big(\frac{\partial P_j}{\partial q_i}\frac{\partial P_k}{\partial p_i} - \frac{\partial P_j}{\partial p_i}\frac{\partial P_k}{\partial q_i}\Big) \\
&+\sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial P_k}\sum_i\Big(\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}\frac{\partial P_k}{\partial p_i} - \frac{\partial Q_j}{\partial p_i}\frac{\partial P_k}{\partial q_i}\Big) + \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\sum_i\Big(\frac{\partial P_j}{\partial q_i}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} - \frac{\partial P_j}{\partial p_i}\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}\Big) \\
=& \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\{Q_j,Q_k\}_{PB} + \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial B}{\partial P_k}\{P_j,P_k\}_{PB} \\
&+\sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial P_k}\{Q_j,P_k\}_{PB} + \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\{P_j,Q_k\}_{PB} \\
=& \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\{Q_j,Q_k\}_{PB} + \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial B}{\partial P_k}\{P_j,P_k\}_{PB} \\
&+\sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial P_k}\{Q_j,P_k\}_{PB} - \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial P_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\{Q_k,P_j\}_{PB}
\end{aligned}
$$

途中で

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} - \sum_{j,k}\frac{\partial B}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} \\
&= \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} - \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_k}\frac{\partial B}{\partial Q_j}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i} \\
&= \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_j}{\partial q_i}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} - \sum_{j,k}\frac{\partial A}{\partial Q_j}\frac{\partial B}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_j}{\partial p_i}\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}
\end{aligned}
$$

のように添え字を付け替えています ($j,k$ どちらも同じ範囲で和を取るので入れ替えても問題ない)。
　このとき

$$
\{Q_i,Q_j\}_{PB} = \{P_i,P_j\}_{PB} = 0\ ,\ \{P_i,Q_j\}_{PB} = \delta_{ij} \tag{9}
$$

になっていれば

$$
\{A,B\}_{PB} = \sum_i(\frac{\partial A}{\partial Q_i}\frac{\partial B}{\partial P_i} - \frac{\partial A}{\partial P_i}\frac{\partial B}{\partial Q_i}) = \{A,B\}_{\overline{PB}}
$$

となります。よって、ポアソン括弧が不変であるためには $\{Q_i,Q_j\}_{PB} = \{P_i,P_j\}_{PB} = 0,\ \{P_i,Q_j\}_{PB} = \delta_{ij}$ であればいいことになります。そして例えば

$$\{Q_i, Q_j\}_{PB} = \sum_k(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k}\frac{\partial Q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_k}\frac{\partial Q_j}{\partial q_k}) = 0$$

これの第一項に (7) での

$$\frac{\partial Q_i}{\partial q_j} = \frac{\partial p_j}{\partial P_i}$$

第二項に

$$\frac{\partial Q_i}{\partial p_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial P_i}$$

を入れてみると、逆変換 $q_i(Q,P), p_i(Q,P)$ から

$$\sum_k(\frac{\partial Q_i}{\partial q_k}\frac{\partial Q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial Q_i}{\partial p_k}\frac{\partial Q_j}{\partial q_k}) = \sum_k(\frac{\partial p_k}{\partial P_i}\frac{\partial Q_j}{\partial p_k} + \frac{\partial q_k}{\partial P_i}\frac{\partial Q_j}{\partial q_k}) = \frac{\partial Q_j(q,p)}{\partial P_i} = 0$$

$Q_i$ と $P_i$ は独立変数なので微分すれば 0 です。他の場合も同様にできます。というわけで、ポアソン括弧による条件 (9) は (7) と等価です。

**・補足 2**

ポアソン括弧を使った正準変換の構造をもう少し見ておきます。補足 1 での最初のほうでの話を別の方向から見ます。変換前のハミルトニアンは $H(q(Q,P,t), p(Q,P,t))$ から、$H$ を $q,p$ でなく $Q,P$ の関数と見ると (正準変数が 1 組の場合とします)、$Q$ の時間微分は

$$\begin{aligned}
\dot{Q} &= \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial t} \\
&= \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial Q}{\partial t} \\
&= \frac{\partial Q}{\partial q}(\frac{\partial H}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}) - \frac{\partial Q}{\partial p}(\frac{\partial H}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}) + \frac{\partial Q}{\partial t} \\
&= \frac{\partial H}{\partial Q}(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p}) + \frac{\partial H}{\partial P}(\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p}) + \frac{\partial Q}{\partial t} \\
&= \frac{\partial H}{\partial Q}\{Q,Q\}_{PB} + \frac{\partial H}{\partial P}\{Q,P\}_{PB} + \frac{\partial Q}{\partial t}
\end{aligned}$$

ポアソン括弧が $\{\ ,\ \}_{PB} = \{\ ,\ \}_{\overline{PB}}$ となっているなら

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial P} + \frac{\partial Q}{\partial t}$$

そして、これが変換後の正準方程式になるためには

$$\frac{\partial K}{\partial P} = \frac{\partial H}{\partial P} + \frac{\partial Q}{\partial t} \tag{10}$$

という関係になっていればいいです。$P$ の場合でも同様にできて

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial K}{\partial Q} = \dot{P} &= \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial t} \\
&= \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial P}{\partial t} \\
&= \frac{\partial P}{\partial q}(\frac{\partial H}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial p}) - \frac{\partial P}{\partial p}(\frac{\partial H}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial q}) + \frac{\partial Q}{\partial t} \\
&= \frac{\partial H}{\partial Q}(\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}) + \frac{\partial H}{\partial P}(\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p}) + \frac{\partial Q}{\partial t} \\
&= \frac{\partial H}{\partial Q}\{P, Q\}_{PB} + \frac{\partial H}{\partial P}\{P, P\}_{PB} + \frac{\partial Q}{\partial t} \\
&= -\frac{\partial H}{\partial Q} + \frac{\partial Q}{\partial t}
\end{aligned}$$

なので、ポアソン括弧が $\{\ ,\ \}_{PB} = \{\ ,\ \}_{\overline{PB}}$ なら

$$\frac{\partial K}{\partial Q} = \frac{\partial H}{\partial Q} - \frac{\partial Q}{\partial t} \tag{11}$$

つまり、正準方程式であるためにはポアソン括弧が

$$\{Q, Q\}_{PB} = \{P, P\}_{PB} = 0\ ,\ \{Q, P\}_{PB} = 1$$

である必要があり、$\{\ ,\ \}_{PB} = \{\ ,\ \}_{\overline{PB}}$ であれば成立します。これは補足 1 での話の簡易版です。そして、今はさらに、(10),(11) の関係も要求しています。ここではこの関係の意味を見ます。

まずポアソン括弧 $\{Q, P\}_{PB} = 1$ を変形させて

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} &= 1 \\
-\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} &= 1 - \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial P}{\partial p} \\
-\frac{\partial}{\partial q}(P\frac{\partial Q}{\partial p}) + P\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial p} &= \frac{\partial}{\partial p}(p - P\frac{\partial Q}{\partial q}) + P\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial Q}{\partial q} \\
\frac{\partial}{\partial q}(P\frac{\partial Q}{\partial p}) &= \frac{\partial}{\partial p}(P\frac{\partial Q}{\partial q} - p)
\end{aligned}$$

これは $q, p$ で偏微分可能な連続な関数 $F$ を使うと

$$\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial F}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial F}{\partial q}$$

と書けます。さらに $F$ が時間依存性を持っており、連続な関数として

$$\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial F}{\partial p}$$

のように入れ替え可能な関数とします。このとき $dF$ は

$$dF=\frac{\partial F}{\partial q}dq+\frac{\partial F}{\partial p}dp+\frac{\partial F}{\partial t}dt=(P\frac{\partial Q}{\partial q}-p)dq+P\frac{\partial Q}{\partial p}dp+\frac{\partial F}{\partial t}dt \tag{12}$$

ここで $q,Q,t$ に依存する関数 $G$ を用意して

$$dG=PdQ-Kdt-pdq+Hdt$$

と書けるとします。$Q$ は $q,p,t$ の関数だとしているので

$$\begin{aligned}dG&=P(\frac{\partial Q}{\partial q}dq+\frac{\partial Q}{\partial p}dp+\frac{\partial Q}{\partial t}dt)-Kdt-pdq+Hdt\\&=(P\frac{\partial Q}{\partial q}-p)dq+P\frac{\partial Q}{\partial p}dp+(H-K+P\frac{\partial Q}{\partial t})dt\end{aligned}$$

これと (12) を比較すると、$dq,dp$ の項が一致しています。$dt$ の項も一致しているとすれば

$$\frac{\partial F}{\partial t}=H-K+P\frac{\partial Q}{\partial t} \tag{13}$$

これでいいのか確かめます。偏微分の順序

$$\frac{\partial}{\partial p}(\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial F}{\partial t})=\frac{\partial}{\partial p}(\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial F}{\partial q})$$

から

$$\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial F}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial F}{\partial q}$$

となっていればいいので

$$\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial F}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial q}(H-K+P\frac{\partial Q}{\partial t})\ ,\ \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial F}{\partial q}=\frac{\partial}{\partial t}(P\frac{\partial Q}{\partial q}-p)$$

が等しければ良いです。今は全微分を $q,p,t$ で与えられているので、$q,p,t$ を独立変数として計算すると

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial q}(H-K+P\frac{\partial Q}{\partial t})-\frac{\partial}{\partial t}(P\frac{\partial Q}{\partial q}-p)\\
&=\frac{\partial}{\partial q}(H-K)+\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial t}+P\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial t}-\frac{\partial P}{\partial t}\frac{\partial Q}{\partial q}-P\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial Q}{\partial q}+\frac{\partial p}{\partial t}\\
&=\frac{\partial}{\partial q}(H-K)+\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial Q}{\partial t}-\frac{\partial P}{\partial t}\frac{\partial Q}{\partial q}\\
&=\frac{\partial}{\partial q}(H-K)-\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial}{\partial P}(H-K)-\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial}{\partial Q}(H-K)\\
&=\frac{\partial}{\partial q}(H-K)-(\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial}{\partial P}+\frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial}{\partial Q})(H-K)\\
&=\frac{\partial}{\partial q}(H-K)-\frac{\partial}{\partial q}(H-K)\\
&=0
\end{aligned}
$$

途中で正準方程式になるための条件 (10),(11) を使い、最後から 2 行目は $H, K$ を $Q, P, t$ の関数として書き換えています。この結果から (13) で問題ないです。よって、$dF$ と $dG$ が一致しているので

$$dF = PdQ - Kdt - pdq + Hdt$$

となって、$F$ は $q, Q, t$ の関数とできます。そして、これと (2) は一致しているので $F$ は母関数です。つまり、正準方程式が不変であるためには、ポアソン括弧が

$$\{Q, P\}_{PB} = 1 \tag{14}$$

であることと

$$\frac{\partial K}{\partial P} = \frac{\partial H}{\partial P} + \frac{\partial Q}{\partial t}\ ,\ \frac{\partial K}{\partial Q} = \frac{\partial H}{\partial Q} - \frac{\partial Q}{\partial t} \tag{15}$$

という関係が満たされている必要があり、満たされているとき母関数が作れます。ここでの話を簡単に言えば、作用積分を使わずに直接正準方程式が不変であるという状況で行ったら、ポアソン括弧の関係 (14) だけでなく、それに関連して母関数となるための条件が出てきたということです。

上で行ったように作用積分の変分が不変であることから母関数を定義すれば、これと同じ条件 (正準方程式を不変にするために作用積分の変分が不変とするので (14),(15) が成立している状況になる) での母関数がその段階で作られ、正準変換の条件 (6) を満たせばいいというように出てきます。実際に、(15) は $W_2, W_4$ で成立しています。なので、(8) で母関数 $W$ と変換前のハミルトニアン $H$ と変換後のハミルトニアン $K$ の関係を使用することで正準方程式が不変になったということです。ようは、作用積分の変分が不変だとして行うと母関数は存在すること前提で話が進むので、母関数の条件というより正準変換の条件として出てきたということです。

また、(10) から、$K(Q, P, t) = H(q, p, t)$ となるのは $Q$ が時間依存性を含んでいない $Q(q, p), P(q, p)$ のときだと分かり (時間依存しない正準変換)、このときは (15) の条件が必要ありません。