漫谈几何量子化（十二）正则变换

量子力学的波函数只依赖于相空间的“一半”坐标。一般的辛流形没有自然的“坐标”，“动量”分离，或者说，在局部上有多种选择“坐标”“动量”分离的方式。在经典力学里，虽然有自然的坐标和动量，但仍然可以通过所谓“正则变换”选择新的“坐标”“动量”，它们没有物理上的含义，但可以把运动方程化为比较简单的形式。Hamilton-Jacobi 方法假定有一个正则变换可以把运动方程化为“最简”形式，然后得到这个变换的“生成函数”所满足的方程，这就是著名的 Hamilton-Jacobi 方程。

当年量子力学以两种形式出现，矩阵力学实现为 Hamilton 正则方程形式，波动力学受到 Hamilton-Jacobi 方程的启发。这不是偶然，因为早在19世纪初年，Hamilton 就已经非常深刻地理解了“波”和“粒子”的统一性。说到这里，想起来上周还看到这里图书馆门口放着有人还回来的《Hamilton 论文集》。我自己一直没有勇气去读他的东西，但我想对于做数学物理的人来说，Hamilton 的全集值得挖掘。

现在用微分几何的语言描述一下正则变换和 Hamilton-Jacobi 方法。为了同先贤们保持一致，我们就研究最原始的辛流形---位形空间的余切丛 T^*Q. 首先来看这个辛流形上有趣的数学。

它上面的辛形式是恰当的，有一个原形式 θ。在局部坐标下的表达式大家都很熟悉了。这个原形式有一个有趣的内在描述。它是一个 1-形式，要定义它，只需定义它在任何切向量 $\xi \in T(T^*Q)$ 的值。这里涉及到两个投影，$\Pi : T(T^*Q) \to T^*Q, \quad \pi_* : T(T^*Q) \to TQ$. 定义 $\theta(\xi) = -\langle \Pi\xi, \pi_*\xi \rangle$. 这里的尖括号是 Q 的余切空间和切空间的配对。在局部坐标下，$\theta = -\sum p_i \, dq^i$.（这里的负号看上去很不和谐，它说明 $\sum dp_i \wedge dq^i$ 才是更自然的辛形式。不过为了同经典力学保持一致，还是采用 dq 在前面的辛形式。）

位形空间的一个 1-形式 $\alpha \in \Omega^1(Q)$ 是向量丛 T^*Q 的一个截面，也就是一个光滑映射 $\alpha : Q \to T^*Q, \quad q \mapsto \alpha_q$ 使得 $\pi \circ \alpha = \mathrm{Id}_Q$。有趣的是，$\alpha^*(-\theta) = \alpha$, 因为

$$(\alpha^*(-\theta))_q(X) = -\theta((\alpha_*)_q X) = \langle \alpha_q, X_q \rangle$$

α 的像 $R(\alpha)$ 与 Q 微分同胚。那么以上关系实际上意味着，α 是闭形式当且仅当 $R(\alpha)$ 是 Lagrange 子流形，即，辛形式在其上的限制恒等于0的极大子流形。局部上闭形式是恰当形式，所以局部上存在 Q 上的函数 S, 使得 $dS = \alpha$. 这个函数叫做相应的 Lagrange 子流形 $R(\alpha)$ 的“生成函数”。

下面先把正则变换同 Lagrange 子流形联系起来，这样正则变换也会有生成函数。本来正则变换是在一个相空间上发生的，但为了让符号更清晰，来看两个同维数的位形空间。正则变换就是保持辛形式的微分同胚，

$$\rho : T^*Q \to T^*Q' \qquad \text{such that} \qquad \rho^*\omega' = \omega$$

两个辛流形的乘积还是一个辛流形$(T^*Q \times T^*Q',\ \omega+\omega')$. 计算两个辛形式的和在正则变换的“图像”$Gr(\rho)=\{(m,\rho(m))\mid m\in T^*Q\}\subset T^*Q\times T^*Q'$上的限制,

$$\omega(\xi)+\omega'(\rho_*\xi)=\omega(\xi)+\rho^*\omega(\xi)=\omega(\xi)+\omega(\xi)$$

如果其中一个辛形式有个负号，就正好抵消。引入“反正则变换”$\bar{\rho}(\alpha_q)=-\rho(\alpha_q)$，则它的图像$Gr(\bar{\rho})$是乘积空间的 Lagrange 子流形。

要写出这个 Lagrange 子流形的局部生成函数，需要它局部上是一个$Q\times Q'$上的 1-形式的图像。引入局部辛坐标，假定$\rho:(q,p)\mapsto(q',p')$. 它对应的反正则变换$\bar{\rho}:(q,p)\mapsto(q',-p')$的图像如果是一个 1-形式$(\alpha_{(q,q')},\ \alpha'_{(q,q')})$的像集，那么对任何$(q^*,q'^*)\in Q\times Q'$, 存在唯一的$p^*$, 使得$\pi_1\circ\bar{\rho}(q^*,p^*)=q'^*$. 由隐函数定理，这个方程在局部有唯一解的条件是 Jacobi 矩阵$\partial q'/\partial p$处处非退化。解出$p^*=p^*(q^*,q'^*)$之后，记

$$p'^*=\pi_2\circ\rho(q^*,\ p^*(q^*,q'^*))=:p^*(q^*,q'^*)$$

则可写出 1-形式$p^*(q,q')dq-p'^*(q,q')dq'$, 它是闭的（因为对应于 Lagrange 子流形），所以局部存在原函数

$$S(q,q')=\int^{(q,q')}p^*(q,q')dq-p'^*(q,q')dq'$$

定义到相差一个常数。这个函数就称为正则变换ρ的局部生成函数。

反过来，如果有一函数$S(q,q')\in C^\infty(Q\times Q')$，它的微分给出$T^*(Q\times Q')=T^*Q\times T^*Q'$的一个 Lagrange 子流形。这个子流形可以实现为一个反正则变换的图像的条件为（用局部坐标），对任意(q^*,p^*), 存在唯一的q'^*, 满足方程

$$\frac{\partial S}{\partial q}(q^*,q'^*)=p^*$$

这个方程在局部有唯一解的条件是 Hessian 矩阵$\dfrac{\partial^2 S}{\partial q'\partial q}$处处非退化。解出$q'^*=q'^*(q^*,p^*)$之后，得到 S 生成的局部正则变换

$$(q,p)\quad\mapsto\quad\left(q'^*(q,p),\ -\frac{\partial S}{\partial q'}(q,q'^*(q,p))\right).$$

看一个重要例子。经典系统的时间演化由一个相空间上的函数 H (Hamiltonian) 决定如下：它对应到切向量场 X_H, 而切向量场会在局部生成单参数变换群 $\rho_t : T^*Q \to T^*Q$. 这个群里每一个变换都保持辛形式，所以是正则变换。现在固定一个时间 t, 看怎样写出 ρ_t 的局部生成函数。回顾之前的讨论，首先要对任意 (q,q') 找到相应的 p 使得具有初相 (q,p) 的系统在 t 时间后位置为 q'. 这是 Hamilton 运动方程的边值问题。解边值问题，得到 (q(t),p(t)), 那么初动量和末动量就分别为 p=p(0) 和 p'=p(t). 这个由边值得到初动量的过程可以看作是一个局部微分同胚 $h : Q \times Q \mapsto T^*Q$. 这个微分同胚把我们寻找的 $Q \times Q$ 上的 1-形式（见前面两段分析）“ 推进 ” 到相空间上的 1-形式 $-\theta + \rho_t^*\theta$. 因为

$$\frac{d}{dt}(\rho_t^*\theta - \theta) = \mathcal{L}_{X_H}\theta = X_H \lrcorner d\theta + d(\theta(X_H)) = d(\theta(X_H) - H)$$

右边外微分符号里面实际上是 H 的 Legendre 变换，即 Lagrange 量。所以这个 1-形式在相空间上可以写成 Lagrange 量（作为相空间上的函数）的微分 dL 沿真实运动轨迹的积分

$$\int_0^t dL(q(s), p(s))\ ds = d\Big(\int_0^t L(q(s), p(s))\ ds \Big)。$$

很明显这个形式的原函数是所谓“ Hamilton 主函数 ”(Lagrange 量的时间积分)

$$\widetilde{S}(q, p, t) = \int_0^t L(q(s), p(s))\ ds \quad \text{with} \quad (q(0), p(0)) = (q, p)$$

它是相空间上的函数（系统初相的函数）。而 $Q \times Q$ 上的生成函数就是复合

$$S(q, q', t) = \widetilde{S}(h(q, q'), t)$$

反过来，由这个生成函数得到等价于系统演化的一系列正则变换 ρ_t 的过程实际上蕴涵了所谓“ Hamilton 原理 ”（最小作用量原理之一），即，系统用时间 t 从 q 到 q' 的真实演化使 $S(q, q', t)$ 作为运动轨迹的泛函取到临界值。

用 Lagrange 子流形来代表正则变换，是几何学家 Weinstein 的创见。用这个观点来看待经典力学，更容易把正则变换，生成函数，系统演化之间的关系理清楚。