§6 Transformaciones canónicas.

Existen muy diversas razones por las cuales es conveniente considerar el tema de las transformaciones canónicas. De manera informal diremos que una transformación canónica es una transformación -invertible- de las coordenadas de posición y momento que "preservan" las ecuaciones de movimiento.

Para mencionar tan solo uno de los posibles usos, supongamos que tenemos dado un sistema descrito por el Hamiltoniano $H(q,p)$. Si fuera posible encontrar una transformación de coordenadas $(q,p) \mapsto (Q,P)$, de tal forma que las soluciones de las ecuaciones de Hamilton para el nuevo Hamiltoniano $\tilde{H}(Q,P)$ correspondan a las soluciones de las ecs. para $H(q,p)$, y si además es posible lograr que para las nuevas coordenadas algunas de estas sean cíclicas, es decir, que para algunas Q_i se tenga $\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_i} = 0$, entonces tendremos $P_i = \text{cte}$, lo cual simplificará enormemente la solución de las ecs. de Hamilton.

Por simplicidad en la notación, vamos a considerar sistemas de 1 grado de libertad. Sin embargo, todo lo que diremos será igualmente válido para sistemas con n-grados de libertad.

Comencemos entonces por un sistema descrito por las variables (q,p), con Hamiltoniano $H(q,p)$.

Las trayectorias físicas son soluciones a las ecs. de Hamilton,

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}.$$

Buscamos una transformación de coordenadas

$$\Psi : (q,p) \longmapsto (Q,P)$$

que cumpla con las siguientes condiciones:

(i) Ψ debe ser un difeomorfismo. Esto quiere decir que debe ser un mapa biyectivo, diferenciable y con inversa diferenciable.

(ii) El Hamiltoniano transformado, definido por

$$\tilde{H}(Q,P) = H(q(Q,P), p(Q,P)) \equiv H(\Psi^{-1}(Q,P)),$$

debe dar lugar a soluciones de las ecs. de Hamilton que estén en correspondencia con las soluciones de las ecs. respectivas para H.

- Como la transformación debe ser invertible, debe ser posible escribir el "nuevo" par de variables en términos de las variables "viejas" y viceversa:

$$\begin{matrix} Q = Q(q,p) \\ P = P(q,p) \end{matrix} \quad \xleftrightarrow[\text{invertible}]{\Psi \text{ es}} \quad \begin{matrix} q = q(Q,P) \\ p = p(Q,P). \end{matrix}$$

- Aunque por simplicidad no lo haremos aquí, también es posible (y a veces realmente conveniente) considerar transformaciones que también dependan del tiempo.

- Veamos entonces qué consecuencias tienen las condiciones (i) y (ii).

↳ Queremos que en el nuevo sistema de coordenadas se sigan cumpliendo las ecs. de Hamilton:

$$-\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q} = \dot{P} \quad , \quad \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P} = \dot{Q}$$

A partir de $\tilde{H}(Q,P) = H(q(Q,P), p(Q,P))$ calculamos:

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial P} = \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial P} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial P} \overset{!}{=} \dot{Q} = \frac{\partial Q}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial Q}{\partial q}\dot{q}$$

$$= -\frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} ,$$

donde en la última línea hemos usado las ecs. de Hamilton para el sistema original. Comparando términos a ambos lados, obtenemos:

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \frac{\partial p}{\partial P} \quad , \quad \frac{\partial q}{\partial P} = -\frac{\partial Q}{\partial p} \qquad (1).$$

Algo similar ocurre al considerar la transformación inversa:

$$H(q,p) = \tilde{H}(Q(q,p), P(q,p)) .$$

Salvo el cambio de q por Q y p por P, el cálculo es exactamente el mismo, de tal forma que debemos tener:

$$\frac{\partial q}{\partial Q} = \frac{\partial P}{\partial p} \quad , \quad \frac{\partial Q}{\partial p} = -\frac{\partial q}{\partial P} \qquad (2)$$

Si ahora hacemos uso de la otra ecuación de movimiento,

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q} = -\dot{P} ,$$

obtenemos

$$\frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial Q} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial Q} \overset{!}{=} -\dot{P} = -\frac{\partial P}{\partial q}\dot{q} - \frac{\partial P}{\partial p}\dot{p} \overset{\text{Ham}}{=} -\frac{\partial P}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} + \frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}$$

$$\hookrightarrow \quad \frac{\partial q}{\partial Q} = \frac{\partial P}{\partial p} \quad , \quad \frac{\partial p}{\partial Q} = -\frac{\partial P}{\partial q} \qquad (3)$$

Invirtiendo nuevamente las relaciones, obtenemos

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \frac{\partial p}{\partial P} \quad , \quad \frac{\partial Q}{\partial p} = -\frac{\partial q}{\partial P} \qquad (4)$$

Para interpretar el resultado obtenido (ecs. (1) – (4)), observemos que la matriz de derivadas de $\Psi : (q,p) \mapsto (Q,P)$ se puede escribir como sigue:

$$D\Psi := \begin{pmatrix} \frac{\partial Q}{\partial q} & \frac{\partial Q}{\partial p} \\ \frac{\partial P}{\partial q} & \frac{\partial P}{\partial p} \end{pmatrix} \qquad (5)$$

Las ecs. (1) – (4) implican que $D\Psi$ también se puede escribir como

$$D\Psi = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial P} & -\frac{\partial q}{\partial P} \\ -\frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial q}{\partial Q} \end{pmatrix},$$

de donde se obtiene

$$(D\Psi)^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial P} & -\frac{\partial p}{\partial Q} \\ -\frac{\partial q}{\partial P} & \frac{\partial q}{\partial Q} \end{pmatrix} \qquad (6)$$

Si ahora introducimos una matriz

$$J := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (7)$$

obtenemos las siguientes relaciones:

$$(D\Psi)^T J = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial P} & -\frac{\partial p}{\partial Q} \\ -\frac{\partial q}{\partial P} & \frac{\partial q}{\partial Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial p}{\partial P} \\ -\frac{\partial q}{\partial Q} & -\frac{\partial q}{\partial P} \end{pmatrix}, \qquad (8)$$

$$J\, D\Psi^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial q}{\partial Q} & \frac{\partial q}{\partial P} \\ \frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial p}{\partial P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial Q} & \frac{\partial p}{\partial P} \\ -\frac{\partial q}{\partial Q} & -\frac{\partial q}{\partial P} \end{pmatrix}, \qquad (9)$$

es decir,

$$(D\Psi)^T J = J\, D\Psi^{-1}$$

o, de manera equivalente, teniendo en cuenta que $D\Psi^{-1} = (D\Psi)^{-1}$,

$$\boxed{(D\Psi)^T J (D\Psi) = J} \qquad (10)$$

Comparemos esta expresión con la correspondiente para un espacio con producto interior →

Sea g una forma bilineal simétrica (digamos, en $\mathbb{R}^n$).

Si g es no-degenerada, entonces da lugar a un producto interior

$$(u,v) = u^T g v.$$

Pregunta: ¿Cuál es el conjunto de transformaciones que preserva dicha forma bilineal?

→ Una transf. R que preserve g debe cumplir

$$(Ru, Rv) = (u,v) \qquad \forall\, u, v \in \mathbb{R}^n.$$

Pero esto es equivalente a pedir $\underbrace{(Ru)^T}_{=u^T R^T} g\, R v = u^T g v$

$$\searrow \quad R^T g R = g. \qquad (11)$$

Las transformaciones R que satisfacen (11) son —por definición— las transformaciones ortogonales. Nótese que en este caso g es una forma bilineal <u>simétrica</u> ($g^T = g$)

La similitud entre (10) y (11) es evidente. Una diferencia importante es que en (10) tenemos una forma bilineal <u>antisimétrica</u> ($J^T = -J$).

A esta forma la llamaremos "forma simpléctica"

- Así como las matrices R que satisfacen (11) forman un grupo (el grupo ortogonal), las matrices M que satisfacen $M^T J M = J$ también forman un grupo, llamado "grupo simpléctico" (nótese que tales matrices M deben automáticamente ser invertibles!)

La ec. (10) nos da entonces la condición adicional que estábamos buscando. El conjunto de los difeomorfismos Ψ que satisfacen (10) es evidentemente infinito.
Tales transformaciones serán llamadas transformaciones canónicas (o, en lenguaje matemático, "simplectomorfismos" o "transformaciones simplécticas")

Funciones generadoras

Una forma de construir transformaciones canónicas es por medio del uso de "funciones generadores". Esto requiere reformular el principio variacional en el contexto del formalismo Hamiltoniano. Para esto consideremos curvas

$$t \longmapsto \gamma(t) = (q(t), p(t))$$

en el espacio de fase.
Sea $F(\gamma, \dot{\gamma}) = p\dot{q} - H(q,p)$, donde se entiende que $\dot{\gamma} = (\dot{q}, \dot{p})$.
Estudiemos el problema de extremización del funcional

$$I[\gamma] = \int F(\gamma, \dot{\gamma})\,dt.$$

Las ecuaciones de Euler para este problema variacional son las siguientes:

$$0 \overset{!}{=} \frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial F}{\partial q} = \frac{d}{dt}p + \frac{\partial H}{\partial q} \longrightarrow \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

$$0 \overset{!}{=} \cancelto{0}{\frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{p}}} - \frac{\partial F}{\partial p} = -\frac{\partial F}{\partial p} = -\left(\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p}\right) \rightarrow \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p},$$

i.e., justamente las ecuaciones de Hamilton!

Al discutir el formalismo Lagrangiano vimos que si añadimos a L una función que es una derivada total, $L \mapsto L' = L + \frac{dM}{dt}$, entonces las ecuaciones de movimiento permanecen invariantes. De la misma forma, teniendo en cuenta que (por la definición misma de transformación canónica) tanto $p\dot{q} - H(q,p)$ como $P\dot{Q} - \tilde{H}(Q,P)$ deben dar lugar a soluciones equivalentes, debe ser posible añadir a cualquiera de las dos la derivada total de alguna función.

Si ahora invertimos el argumento, damos con una nueva forma de definir transformación canónica, de la siguiente forma: Escogiendo una función M (que depende de alguna combinación de las variables nuevas y viejas), imponemos la condición

$$p\dot{q} - H(q,p) = P\dot{Q} - \tilde{H}(Q,P) + \frac{dM}{dt} \qquad (11)$$

Como se discute en todos los textos de Mecánica Clásica, hay 4 "clases" principales de funciones M (llamadas "funciones generadoras") que se diferencian entre sí por su dependencia de las diferentes variables q, p, Q, P.

Estudiemos entonces los diferentes casos:

1) q, Q: variables independientes.

Para una función $M_1 = M_1(q,Q)$, la ecuación (11) nos lleva a

$$p\dot{q} - H(q,p) = P\dot{Q} - \tilde{H}(Q,P) + \frac{\partial M_1}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial M_1}{\partial Q}\dot{Q} \qquad (12)$$

Reagrupando términos, obtenemos:

$$\left(p - \frac{\partial M_1}{\partial q}\right)\dot{q} + \left[\tilde{H}(Q,P) - H(q,p)\right] = \left(P + \frac{\partial M_1}{\partial Q}\right)\dot{Q}.$$

Teniendo en cuenta que q y Q son considerados en este caso variables independientes, obtenemos

$$p = \frac{\partial M_1}{\partial q} \quad , \quad P = -\frac{\partial M_1}{\partial Q} \quad , \quad H(q,p) = \tilde{H}(Q,P) \qquad (13)$$

de donde al tomar derivadas parciales mixtas (aquí asumimos que M_1 es diferenciable) obtenemos la relación

$$\frac{\partial p}{\partial Q} = -\frac{\partial P}{\partial q} , \qquad (14)$$

que es justo la segunda identidad en (3).

A partir de la forma explícita de M_1 debe ser posible, en principio, obtener la transformación canónica $(q,p) \mapsto (Q,P)$. Ilustremos el procedimiento con un ejemplo sencillo.

<u>Ejemplo</u> (Oscilador armónico)

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

Objetivo: encontrar una transformación canónica $\Psi(q,p) = (Q,P)$ para la cual Q sea una coordenada cíclica: $\dot{P} = 0$.

La función más simple de q y Q que podemos proponer es un producto de una función $g(q)$ por una función $f(Q)$:

$$M_1(q,Q) = g(q)\, f(Q), \qquad (15)$$

es decir, M_1 es "separable". Las ecs. (13) entonces nos dicen que se debe cumplir

$$\left.\begin{aligned} p &\overset{(13)}{=} \frac{\partial M_1}{\partial q} \overset{(15)}{=} g'(q)\, f(Q) \\ P &\overset{(13)}{=} -\frac{\partial M_1}{\partial Q} \overset{(15)}{=} -g(q)\, f'(Q) \end{aligned}\right. \qquad (16)$$

Por otro lado, la forma más simple de lograr tener $\dot{P}=0$ es si $\tilde{H}(Q,P)=\lambda P$. Si asumimos esto e insertamos las expresiones (16) en el Hamiltoniano $H(q,p)$, obtenemos, por (13):

$$\frac{(g')^2 f^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = \lambda P$$

Esta expresión se simplifica si $(g'(q))^2 \sim q^2$, ya que podemos factorizar q^2.

→ Proponer $g(q) = \frac{1}{2}\alpha q^2$

→ $$\left(\frac{\alpha^2}{2m} f^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\right) q^2 = \lambda P$$

Si tomamos $\alpha = m\omega$ y "absorvemos" las demás constantes en λ, llegamos a

$$(fq)^2 + q^2 = \lambda P,$$

lo cual sugiere tomar

$$q = \sqrt{\lambda P}\sin Q \quad , \quad qf = \sqrt{\lambda P}\cos Q .$$

Dividiendo las dos anteriores expresiones llegamos finalmente a

$$\left.\begin{array}{l} \bullet\ f(Q) = \cot Q \\ \bullet\ g(q) = \frac{m\omega}{2} q^2 \end{array}\right\} \quad M_1(q,Q) = \frac{m\omega}{2} q^2 \cot Q \qquad (17)$$

Haciendo uso de las identidades (13), podemos encontrar la forma explícita de la transformación canónica:

$$\left.\begin{array}{l} p = \frac{\partial M_1}{\partial q} = m\omega q \cot Q \\ P = -\frac{\partial M_1}{\partial Q} = \frac{m\omega q^2}{2}\frac{1}{\sin^2 Q} \end{array}\right\} \longrightarrow \begin{array}{l} q = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\sin Q \\ p = \sqrt{2m\omega P}\cos Q \end{array} \qquad (18)$$

El Hamiltoniano, en las nuevas variables, toma la forma

$$\tilde{H}(Q,P) = H(q(Q,P), p(Q,P))$$
$$= p^2/2m + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2$$
$$= \frac{2m\omega P \cos^2 Q}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(\frac{2P}{m\omega}\right) \sin^2 Q$$
$$= \omega P$$
$$\longrightarrow \quad \tilde{H}(Q,P) = \omega P \qquad (19)$$

Ecs. de Hamilton:

$$\dot{P} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q} = 0 \quad \longrightarrow \quad P = cte$$
$$\dot{Q} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P} = \omega \quad \longrightarrow \quad Q(t) = \omega t + \phi$$

"ángulo" !

Usando (18) obtenemos, como era de esperarse,

$$q(t) = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin(\omega t + \phi).$$

Vemos que Q es una "variable angular". ¿Qué significado tiene P? Podemos usar conservación de energía, para calcular

$$E = \frac{1}{2} m \dot{q}(0)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 q(0)^2 = \omega P$$

$$q(0) = \sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \sin\phi, \quad \dot{q}(0) = \omega\sqrt{\frac{2P}{m\omega}} \cos\phi$$

$\rightarrow$ P es una constante que tiene unidades [energía × tiempo] = [acción].

Las nuevas variables Q y P son un ejemplo de variables de <u>ángulo-acción</u>, que estudiaremos en más detalle luego.

<u>Ejercicio</u>: Partiendo de (18), escribir la transf. canónica en la forma $(Q,P) = \Psi(q,p)$ y verificar que se cumple la relación (10).

Teniendo en cuenta que $-P = \frac{\partial M_1}{\partial Q}(q,Q)$, nos podamos plantear el problema de reemplazar Q por la derivada $\frac{\partial M_1}{\partial Q}$ como variable independiente. Asumiendo que las condiciones que garantizan la existencia de una función $Q = Q(q,P)$ t.q. $-P = \frac{\partial M_1}{\partial Q}(q, Q(q,P))$, tenemos, para la transformada de Legendre,

$$(\mathcal{L} M_1)(q,P) = (-P)\,Q(q,P) - M_1(q, Q(q,P)).$$

Esto nos lleva a considerar el segundo caso:

2) q, P : variables independientes.

Si definimos

$$M_2(q,P) = P\,Q(q,P) + M_1(q, Q(q,P)), \tag{20}$$

entonces obtenemos

$$\frac{\partial M_2}{\partial q} = P\frac{\partial Q}{\partial q} + \frac{\partial M_1}{\partial q} + \underbrace{\frac{\partial M_1}{\partial Q}}_{=-P}\frac{\partial Q}{\partial q} = \frac{\partial M_1}{\partial q} = p$$

Así mismo,

$$\frac{\partial M_2}{\partial P} = \frac{\partial}{\partial P}\left(P\,Q(q,P) + M_1(q,Q(q,P))\right)$$

$$= Q + P\frac{\partial Q}{\partial P} + \underbrace{\frac{\partial M_1}{\partial Q}}_{=-P}\frac{\partial Q}{\partial P} = Q$$

También podemos obtener este resultado si reemplazamos (20) en (11)/(12):

$$p\dot{q} - H = P\dot{Q} - \tilde{H} + \frac{dM_1}{dt} = P\dot{Q} - \tilde{H} + \frac{d}{dt}\left(M_2(q,P) - PQ\right)$$

$$= \cancel{P\dot{Q}} - \tilde{H} + \frac{\partial M_2}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial M_2}{\partial P}\dot{P} - \dot{P}Q - \cancel{P\dot{Q}}$$

$$\Rightarrow \quad p = \frac{\partial M_2}{\partial q}, \qquad Q = \frac{\partial M_2}{\partial P} \tag{21}$$

De esta forma podemos obviar el paso por la transformada de Legendre. Por ejemplo,

3) Q, p : variables independientes

$$p\dot{q} - \cancel{H} = P\dot{Q} - \cancel{\tilde{H}} + \frac{d}{dt}\left(M_3(Q,p) + \alpha\right)$$

$$p\dot{q} = P\dot{Q} + \frac{\partial M_3}{\partial Q}\dot{Q} + \frac{\partial M_3}{\partial p}\dot{p} + \dot{\alpha}$$

De esta expresión vemos que la escogencia adecuada de α está dada por $\alpha = qp \longrightarrow$

$$\cancel{p\dot{q}} = P\dot{Q} + \frac{\partial M_3}{\partial Q}\dot{Q} + \frac{\partial M_3}{\partial p}\dot{p} + \cancel{\dot{q}p} + q\dot{p} \Rightarrow$$

$$P = -\frac{\partial M_3}{\partial Q}, \quad q = -\frac{\partial M_3}{\partial p} \qquad (22)$$

4) p, P : variables independientes

$$p\dot{q} - \cancel{H} = P\dot{Q} - \cancel{\tilde{H}} + \frac{d}{dt}\left(M_4(p,P) - PQ + pq\right)$$

$$p\dot{q} = P\dot{Q} + \frac{\partial M_4}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial M_4}{\partial P}\dot{P} - \dot{P}Q - P\dot{Q} + p\dot{q} + \dot{p}q$$

$$Q = \frac{\partial M_4}{\partial P}, \quad q = -\frac{\partial M_4}{\partial p} \qquad (23)$$

Observación.

En cualquiera de los 4 casos anteriores, hubiéramos podido incluir una dependencia temporal en la función M, lo cual hubiera dado lugar a la siguiente regla de transformación para el Hamiltoniano:

$$\tilde{H} = H + \frac{\partial M}{\partial t}. \qquad (24).$$