Capítulo 29

Transformaciones canónicas

29.1 Introducción

Consideremos una transformación arbitraria de las coordenadas en el espacio de las fases de dimensión $2(3N-k)$ (con el tiempo como un parámetro)

$$\begin{aligned} Q_j &= Q_j(q_1, ..., q_{3N-k}; p_1, ..., p_{3N-k}; t) \\ P_j &= P_j(q_1, ..., q_{3N-k}; p_1, ..., p_{3N-k}; t) \end{aligned}$$

para $j+1, 2, ..., 3N-k$. Para no volvernos locos con los subíndices, en lo que sigue utilizaremos una notación simplificada, dada por $x = (x_1, x_2, ..., x_{3N-k})$ de manera tal que las ecuaciones anteriores se escriben

$$Q = Q(q, p, t) \qquad , \qquad P = P(q, p, t)$$

Como primer requisito pedimos que esta transformación esté bien definida, es decir que su Jacobiano sea distinto de cero,

$$\frac{\partial(Q, P)}{\partial(q, p)} \neq 0$$

Ahora, diremos que una transformación es *canónica* si, partiendo de "cualquier" sistema Hamiltoniano

$$\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \qquad , \qquad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

podemos encontrar alguna función $H = H(Q, P, t)$, tal que las nuevas variables también verifiquen ecuaciones canónicas de Hamilton

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

La importancia de estudiar las transformaciones canónicas se debe a la posibilidad de que permitan encontrar un Hamiltoniano H con una estructura más simple que la del Hamiltoniano original $\mathcal{H}$.

Si en el espacio de fases realizamos dos transformaciones canónicas sucesivamente, la transformación resultante también es canónica. Más aún, una transformación que es la inversa de una cierta transformación canónica también lo es. Por último, la transformación identidad $Q = q$, $P = p$ también es una transformación canónica. Estas propiedades hacen que las transformaciones canónicas asociadas a un dado sistema dinámico formen lo que se denomina un *grupo*.

Dos ejemplos obvios de transformaciones canónicas son $Q_j = \alpha q_j$, $P_j = \beta p_j$, con Hamiltoniano $H = \alpha\beta\mathcal{H}$ y $Q_j = \alpha p_j$, $P_j = \beta q_j$, con Hamiltoniano $H = -\alpha\beta\mathcal{H}$, con $\alpha \neq 0$ y $\beta \neq 0$. Un ejemplo no tan simple de transformación canónica es $Q_j = p_j \tan t$, $P_j = q_j \cot t$ con Hamiltoniano

$$H = -\mathcal{H} + \frac{1}{\operatorname{sen} t \cos t} \sum_{j=1}^{3N-k} Q_j P_j$$

29.2 Función generatriz

Para derivar las condiciones bajo las cuales una transformación es canónica, consideremos los espacios de fase extendidos (q, p, t) y (Q, P, t), relacionados entre si por una transformación canónica $(q, p) \leftrightarrow (Q, P)$. Consideremos sobre ambos espacios dos tubos de trayectorias reales y dos contornos cerrados $\mathcal{C}$ y C sobre ellos. Suponemos que, tanto los tubos como los contornos en ambos espacios de fase no son independientes, sino que están relacionados entre sí por la transformación $(q, p) \leftrightarrow (Q, P)$. Cortamos ambos tubos por un mismo hiperplano $t = constante$, generando así dos contornos $\mathcal{C}_0$ y C_0 sobre cada tubo de trayectorias. Puesto que el tiempo permanece inalterado en la transformación $(q, p) \leftrightarrow (Q, P)$, estos dos contornos también están relacionados por la misma transformación. Por la invariancia de la integral de Poincaré-Cartan sabemos que

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{C}} (p \, \mathrm{d}q - \mathcal{H} \, \mathrm{d}t) &= \int_{\mathcal{C}_0} p \, \mathrm{d}q \\ \int_{C} (P \, \mathrm{d}Q - H \, \mathrm{d}t) &= \int_{C_0} P \, \mathrm{d}Q \end{aligned}$$

donde, en nuestra notación simplificada debe entenderse, por ejemplo, que $p \, \mathrm{d}q = \sum_{j=1}^{3N-k} p_j \, \mathrm{d}q_j$. Si ahora tomamos la integral $\int_{C_0} P \, \mathrm{d}Q$ y pasamos a las variables (q, p) por medio de la transformación canónica, la integral resultante es una integral relativa de primer orden en el espacio de las fases (q, p). Por lo tanto, el teorema de Lee Hwa-Chung nos indica que, puesto que esta integral es un invariante, entonces sólo puede diferir de $\int_{\mathcal{C}_0} p \, \mathrm{d}q$ en un factor constante c,

$$\int_{C_0} P \, \mathrm{d}Q = c \int_{\mathcal{C}_0} p \, \mathrm{d}q$$

Resulta entonces que

$$\int_{C} (P \, \mathrm{d}Q - H \, \mathrm{d}t) = c \int_{\mathcal{C}} (p \, \mathrm{d}q - \mathcal{H} \, \mathrm{d}t)$$

Pero C y $\mathcal{C}$ son el mismo circuito (salvo que en el primer caso está en términos de las variables (Q, P), y por lo tanto podemos escribir la relación anterior como

$$\int_{\mathcal{C}} (P\ \mathrm{d}Q - H\ \mathrm{d}t) - c\ (p\ \mathrm{d}q - \mathcal{H}\ \mathrm{d}t) = 0$$

Ahora $\mathcal{C}$ es un contorno absolutamente arbitrario en el espacio de fases extendido (q, p, t) de dimensión $2(3N - k) + 1$. Por lo tanto, la integral sólo se puede anular si la expresión bajo el signo integral es un diferencial total de alguna función $\mathcal{S} = \mathcal{S}(q, p, t)$ en ese espacio. Escribimos entonces

$$P\ \mathrm{d}Q - H\ \mathrm{d}t = c\ (p\ \mathrm{d}q - \mathcal{H}\ \mathrm{d}t) - \mathrm{d}\mathcal{S}$$

Llamaremos con el nombre de *Función generatriz* de la transformación canónica a la función $\mathcal{S}$, y *valencia* a la constante c. Las transformaciones canónicas también se suelen denominar *transformaciones de contacto*. Por otra parte, la transformación canónica se denomina *univalente* si $c = 1$. Muchos autores afirman erróneamente que estas transformaciones univalentes agotan todas las posibles transformaciones canónicas. Ello no es necesariamente así, como se ve con cualquiera de los ejemplos de la sección anterior.

Tenemos entonces que si la transformación $(q, p) \leftrightarrow (Q, P)$)es canónica, entonces existe una función generatriz $\mathcal{S} = \mathcal{S}(q, p, t)$ y una valencia c tales que la ecuación anterior se verifica para *cualquier* Hamiltoniano $\mathcal{H}$ y la correspondiente función H.

Para dar generalidad a este resultado nos falta demostrar la inversa. Supongamos entonces que dada una transformación $(q, p) \leftrightarrow (Q, P)$, hemos podido encontrar una función generatriz $\mathcal{S} = \mathcal{S}(q, p, t)$ y una valencia c tales que la ecuación

$$P\ \mathrm{d}Q - H_o\ \mathrm{d}t = c\ (p\ \mathrm{d}q - \mathcal{H}_o\ \mathrm{d}t) - \mathrm{d}\mathcal{S}$$

se satisface para *un dado* par de funciones $\mathcal{H}_o$ y H_o. La invariancia de la integral de Poincaré-Cartan, $\mathcal{K} = \int_{\mathcal{C}} (p\ \mathrm{d}q - \mathcal{H}_o\ \mathrm{d}t)$ implica la de la integral $K = \int_C (P\ \mathrm{d}Q - H_o\ \mathrm{d}t)$. Con ello el sistema también es Hamiltoniano en las nuevas variables y -por lo tanto- la transformación está transformando un sistema Hamiltoniano en otro que también lo es. Pero no basta para afirmar que la transformación es canónica. Esta falla se ve claramente al advertir que cualquier transformación lleva el sistema Hamiltoniano con $\mathcal{H}_o = 0$ a otro con $H = 0$, sin que la transformación sea necesariamente canónica. Para demostrar que la transformación es canónica, nos falta probrar que esta ecuación se sigue satisfaciendo para *cualquier* función $\mathcal{H}$. Y completar este paso es una tarea bastante fácil. Dada cualquier función $\mathcal{H}$, definimos

$$H - H_o = c(\mathcal{H} - \mathcal{H}_o)$$

Multiplicando por dt y restando miembro a miembro por la ecuación anterior, obtenemos que la ecuación

$$P\ \mathrm{d}Q - H\ \mathrm{d}t = c\ (p\ \mathrm{d}q - \mathcal{H}\ \mathrm{d}t) - \mathrm{d}\mathcal{S}$$

se satisface para *cualquier* función $\mathcal{H}$.

> Una condición necesaria y suficiente para que una transformación $(q,p) \leftrightarrow (Q,P)$ sea canónica es que exista una función generatriz $\mathcal{S} = \mathcal{S}(q,p,t)$ y una valencia c tales que
>
> $$P\ \mathrm{d}Q - H\ \mathrm{d}t = c\ (p\ \mathrm{d}q - \mathcal{H}\ \mathrm{d}t) - \mathrm{d}\mathcal{S}$$

29.3 Transformaciones canónicas libres

Decimos que una transformación canónica es *libre* si además cumple que el siguiente Jacobiano es distinto de cero

$$\frac{\partial(Q)}{\partial(p)} \neq 0$$

Por ejemplo, de las tres transformaciones canónicas consideradas en la primera sección de este capítulo, vemos que la $Q_j = \alpha q_j$, $P_j = \beta p_j$, no es libre, mientras que si lo son las otras dos $Q_j = \alpha p_j$, $P_j = \beta q_j$, y $Q_j = p_j \tan t$, $P_j = q_j \cot t$.

La desigualdad $\partial(Q)/\partial(p) \neq 0$ asegura que las cantidades q, Q y t son independientes, y que por lo tanto pueden tomarse como variables básicas del problema dinámico. Explicaremos mejor esta idea. Partimos de las ecuaciones de transformación $Q = Q(q,p,t)$, $P = P(q,p,t)$ y queremos invertir las $3N - k$ primeras ecuaciones para obtener $p = p(q,Q,t)$ y esto sólo lo podremos hacer siempre que el Jacobiano correspondiente sea no nulo, que es lo que expresa la condición anterior. Ahora, una vez que hemos logrado esto, podemos escribir cualquier función de las variables independientes (q,p,t) en función de las nuevas variables (q,Q,t), también independientes en virtud de lo anterior. En particular, podemos escribir la función generatriz en términos de esta nuevas variables $\mathcal{S} = \mathcal{S}(q,Q,t)$. Tenemos entonces que

$$\begin{aligned} c\ (p\ \mathrm{d}q - \mathcal{H}\ \mathrm{d}t) - (P\ \mathrm{d}Q - H\ \mathrm{d}t) &= \mathrm{d}\mathcal{S}(q,Q,t) \\ &= \frac{\partial S}{\partial q}\ \mathrm{d}q + \frac{\partial S}{\partial Q}\ \mathrm{d}Q + \frac{\partial S}{\partial t}\ \mathrm{d}t \end{aligned}$$

Igualando los coeficientes de los diferenciales obtenemos las siguientes $2(3N-k)+1$ ecuaciones

$$\frac{\partial S}{\partial q_j} = cp_j \qquad \frac{\partial S}{\partial Q_j} = -P_j \qquad H = c\mathcal{H} + \frac{\partial S}{\partial t}$$

Vamos a ver ahora que las primeras $2(3N-k)$ ecuaciones definen en la transformación canónica libre en forma unívoca. Con esto queremos decir en que dada la función generatriz $\mathcal{S}$ (con ciertas condiciones que ya analizaremos) y la valencia $c \neq 0$, es posible obtener la transformación canónica correspondiente. La última ecuación sólo da una relación simple entre los Hamiltonianos $\mathcal{H}$ y H. El primer paso en esta demostración va a ser probar que la función generatriz de una transformación canónica libre debe verificar que

$$\det\left(\frac{\partial^2\mathcal{S}}{\partial q_j\,\partial Q_\ell}\right) \neq 0$$

Este es un resultado muy importante porque, traducido como $\partial(p)/\partial(Q) \neq 0$, nos permite asegurar que es posible invertir las $3N-k$ ecuaciones

$$\frac{\partial S}{\partial q_j}(q,Q,t) = cp_j$$

para obtener las nuevas variables Q en función de las viejas, es decir $Q = Q(q,p,t)$. Por otra parte, el segundo conjunto de $3N-k$

$$\frac{\partial S}{\partial Q_j}(q,Q,t) = -cP_j$$

ya nos está dando los nuevos momentos conjugados P en función de las viejas variables $P = P(q,p,t)$ al aplicar la transformación $Q = Q(q,p,t)$ anterior. O sea que podemos conocer las nuevas variables en función de las viejas, v.g. conocemos la ley de transformación $(q,p) \to (Q,P)$. Y esta transformación es reversible. En efecto, la misma ley $\det\left(\partial^2\mathcal{S}/\partial q_j\,\partial Q_\ell\right) \neq 0$ nos asegura que el segundo conjunto de $3N-k$ ecuaciones es reversible, y podemos obtener $q = q(Q,P,t)$. Por otra parte, del primer conjunto de $3N-k$ ecuaciones conocemos $p = p(q,Q,t)$, y reemplazando las ecuaciones anteriores obtenemos $p = p(Q,P,t)$. Con esto completamos la relación $(Q,P) \to (q,p)$.

Demostremos entonces que $\det\left(\partial^2\mathcal{S}/\partial q_j\,\partial Q_\ell\right) \neq 0$. Para ello, vemos que (q,p) son cantidades independientes. Ahora, siendo $p = p(q,Q,t)$ funciones de Q y considerando a q como parámetros, traducimos esta independencia en el sentido de que no se puede anular el Jacobiano $\partial(p_j)/\partial(Q_\ell) \neq 0$. Y usando que $\partial S/\partial q_j = cp_j$, obtenemos finalmente

$$\det\left(\frac{\partial^2\mathcal{S}}{\partial q_j\,\partial Q_\ell}\right) \neq 0$$

29.4 Ejemplos

A partir de la relación $H = c\mathcal{H} + \partial S/\partial t$, vemos que una transformación canónica libre deja invariante el Hamiltoniano (salvo por una constante multiplicativa dada por la valencia) si y sólo si la función generatriz no es una función explícita del tiempo. Pero esto es justamente lo que no queremos, ya que la utilidad de las transformaciones canónicas está en poder obtener un nuevo sistema donde el Hamiltoniano sea más simple. Por ejemplo, la transformación $Q_j = \alpha p_j$, $P_j = \beta q_j$, tiene valencia $c = -\alpha\beta$ y función generatriz $S = -\beta \sum q_j Q_j$, independiente del tiempo, y con ello el Hamiltoniano sólo se modifica en una constante multiplicativa $H = -\alpha\beta\mathcal{H}$. La transformación canónica $Q_j = p_j \tan t$, $P_j = q_j \cot t$, en cambio, tiene valencia $c = -1$ y función generatriz $S = -\cot t \sum q_j Q_j$ dependiente del tiempo, y por lo tanto produce una transformación no trivial del Hamiltoniano

$$H = -\mathcal{H} + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 t} \sum_{j=1}^{3N-k} q_j Q_j$$

29.5 Algunas propiedades adicionales de las transformaciones canónicas

Consideremos la matriz Jacobiana de orden $2(3N-k)$ asociada a una transformación canónica

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \partial(Q)/\partial(q) & \partial(Q)/\partial(p) \\ \partial(P)/\partial(q) & \partial(P)/\partial(p) \end{pmatrix}$$

tal que $\det\mathcal{M} = \partial(Q,P)/\partial(q,p) \neq 0$. Definimos también la matriz

$$\mathcal{E} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$$

donde I es la matriz identidad de orden $3N-k$. Se puede demostrar que

$$\mathcal{M}^t\,\mathcal{E}\,\mathcal{M} = c\mathcal{E}$$

donde c es la valencia de la transformación. Calculando el determinante de la expresión anterior, obtenemos que $\det\mathcal{M} = c^{3N-k}$. Una matriz con estas propiedades se denomina *simplicial*.

Estas matrices proporcionan una técnica para saber cuando una transformación arbitraria es canónica, ya que se puede demostrar que

> Para que una transformación $Q = Q(q,p,t)$, $P = P(q,p,t)$ sea canónica es necesario y suficiente que su matriz jacobiana verifique la ecuación anterior para algún valor constante de la valencia c.

Y aquí obtenemos una forma alternativa de llegar al teorema de Liouville. Recordemos que su demostración se reducía a probar que el Jacobiano $\partial(q,p)/\partial(q^i,p^i)$ era constantemente igual a la unidad. Pero ahora sabemos que este Jacobiano es el determinante de la matriz Jacobiana $\mathcal{M}$ asociada a la transformación canónica univalente ($c = 1$) que relaciona las coordenadas (q, p) con sus valores iniciales (q^i, p^i). Por lo tanto, $\partial(q, p)/\partial(q^i, p^i) = \det\mathcal{M} = c^{3N-k} = 1$.

Después de un poco de algebra, la proposición anterior para las transformaciones canónicas se puede poner en términos de los corchetes de Poisson. Si anotamos $[f, g]_{q,p}$ al corchete de Poisson en las variables (q, p), es decir

$$[f, g]_{q,p} = \sum_{j}^{3N-k} \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} \right)$$

entonces se verifica que

> Para que una transformación $Q = Q(q, p, t)$, $P = P(q, p, t)$ sea canónica es necesario y suficiente que $[f, g]_{q,p} = c[f, g]_{Q,P}$ para cualquier par de funciones f y g y alguna dada constante $c \neq 0$.

En particular vemos que el corchete de Poisson es invariante ante transformaciones canónicas univalentes.