应用数学和力学编委会编
重 庆 出 版 社 出 版

正则变换的一种群表示

侯碧辉[①]　　杨洪波[②]

(张鸿庆推荐, 1995 年 11 月 17 日收到, 1997 年 9 月 15 日收到修改稿)

摘　要

经典力学中的哈密顿正则变换所涉及的 4 个母函数 $F_1(q, Q)$, $F_2(q, P)$, $F_3(p, P)$, $F_4(p, Q)$ 和 4 种正则变量 q, p, Q, P 之间所有的关系, 可以由 7 个基本关系式经线性变换而得到, 这些变换是勒让德变换, 变换是由 32 个 8× 8 的变换矩阵来实现的, 而这 32 个矩阵以 4 1 的关系与具有 8 个群元的 D_4 点群同态• 热力学中的 4 个状态函数 $G(P, T)$, $H(P, S)$, $U(V, S)$, $F(V, T)$ 和 4 个热力学变量 P, V, T, S 之间的变换关系恰好与正则变换关系相同• 热力学状态方程是源于宏观测量的实验结果的概括, 而哈密顿正则变换是经典力学的理论性总结, 它们的群表示是相同的, 即它们的数学结构是相同的, 这种共性表明热力学变换是一维哈密顿正则变换的实例•

关键词　正则变换　母函数　群论　群表示　变换矩阵
中图分类号　O316, O152

经典力学中, 将 s 个广义位标和 s 个广义动量组成的空间, 定义为 2s 维相空间• 在 2s 维相空间中, 保持哈密顿正则方程形式不变, 将体系的哈密顿量 $H(q_\alpha, p_\alpha, t)$ 变换为 $K(Q_\alpha, P_\alpha, t)$, 其中 $\alpha = 1, 2, \cdots, s$; 而 q_α, Q_α 为广义坐标, p_α, P_α 为广义动量, t 是时间• 变换条件是如下 4 种形式的勒让德变换之一:

$$\sum_{\alpha=1}^{s}(p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha) + (K - H)dt = dF_1(q, Q, t)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{s}(p_\alpha dq_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha) + (K - H)dt = dF_2(q, P, t)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{s}(-q_\alpha dp_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha) + (K - H)dt = dF_3(p, P, t)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{s}(-q_\alpha dp_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha) + (K - H)dt = dF_4(p, Q, t)$$

其中 F_1, F_2, F_3, F_4 叫母函数• 为便于论述, 以一维体系, 二维相空间为例进行讨论; 对多维情况, 只须对含有 q, p, Q, P 的项进行 $\alpha = 1, 2, \cdots, s$ 的求和即可• 上述正则变换的 4 个母函数 $F_1(q, Q)$, $F_2(q, P)$, $F_3(p, P)$, $F_4(p, Q)$ 和 4 种正则变量 q, p, Q, P 之间的基本关系是

$$F_2 = F_1 + QP, \quad F_3 = F_1 - qp + QP, \quad F_4 = F_1 - qp$$

$$dF_1 = pdq - PdQ, \quad dF_2 = pdq + QdP, \quad dF_3 = -qdp + QdP, \quad dF_4 = -qdp - PdQ$$

① 中国科学技术大学物理系, 合肥 230026
② 中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026

其中只有 4 个等式是独立的, 例如由前 4 式可推出后 3 式来• 这些等式以及由它们导出的更多的关系式全都可以借助一个简单的助记图写出[1] • 上述 7 个式子中, 4 个母函数都是以线性形式出现, 而 4 个正则变量则都是以双线性形式出现, 这种双线性形式的 $qp=(-q)(-p)$, $(-q)p=q(-p)$, $QP=(-Q)(-P)$ 等等• 下面的讨论将看到, 这会使变换矩阵出现 4 种等价的形式•

如果能找出 $F_1, F_2, F_3, F_4, q, p, Q, P$ 这 8 个量的线性变换, 就能用简单的方式从已知的方程导出新的方程• 为了便于表达, 将上述 7 个关系式分别用 $X_i(i=1, 2, \cdots, 7)$ 代表, 也就是,

$$X_1 = F_1 - F_2 + QP,\quad X_2 = F_1 - F_3 - qp + QP$$

$$X_3 = F_1 - F_4 - qp,\quad X_4 = dF_1 - pdq + PdQ$$

$$X_5 = dF_2 - pdq - QdP,\quad X_6 = dF_3 + qdp - QdP,\quad X_7 = dF_4 + qdp + PdQ$$

可以找到一个合适的变换矩阵 D_2,

$$D_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

D_2 矩阵作用到 8 个量组成的矢量上得到一个新矢量,

$$\begin{pmatrix} F_1' \\ F_2' \\ F_3' \\ F_4' \\ q' \\ p' \\ Q' \\ P' \end{pmatrix} = D_2 \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ q \\ p \\ Q \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_4 \\ F_3 \\ F_2 \\ F_1 \\ p \\ -q \\ Q \\ P \end{pmatrix}$$

变换使得原来的 7 个关系式 X_i, 变为由 X_i 线性组合成的 7 个新的关系式 X_1', 例如, 设 $X_1 = F_1 - F_2 + QP$ 的形式不变, 经 D_2 变换后的 $X_1' = F_1' - F_2' + Q'P' = F_4 - F_3 + PQ = X_2 - X_3$• 同样, 可以推出, 经 D_2 变换, 还有如下的等价关系式:

$$X_2' = X_1 - X_2,\quad X_3' = -X_3,\quad X_4' = X_7$$

$$X_5' = X_6,\quad X_6' = X_5,\quad X_7' = X_4$$

类似 D_2 的矩阵一共有 32 个, 它们构成群• 由于在 X_i 中 qp, QP 总是成对出现, 而不出现 qQ, qP, pQ, pP, 所以有用的只是这个群的商群, 它有 8 个群元• 这里要注意, 不要把 7 个基本关系式的线性变换与正则变换本身混淆起来, 我们这里讨论的是基本关系式的线性变换, 它们的性质是由类似 D_2 的 8×8 的变换矩阵来体现的• 除了 D_2 外, 必有一个 8×8 幺矩阵 D_1, 及另外 6 个变换矩阵:

$$D_3=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&-1&0&0&0\\0&0&0&0&0&-1&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&-1\\0&0&0&0&0&0&1&0\end{pmatrix},\quad D_4=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&0&0&-1\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&-1&0&0\end{pmatrix}$$

$$D_5=\begin{pmatrix}0&0&1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\end{pmatrix},\quad D_6=\begin{pmatrix}0&0&0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&-1&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\end{pmatrix}$$

$$D_7=\begin{pmatrix}0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&-1&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&-1\\0&0&0&0&0&0&1&0\end{pmatrix},\quad D_8=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&-1\\0&0&0&0&0&0&-1&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&-1&0&0\end{pmatrix}$$

这 8 个矩阵两两相乘的结果不超出它们，并满足构成群的 4 个条件，具体矩阵相乘的结果见表 1。

表 1 变换矩阵的群乘表

	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7	D_8
D_1	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7	D_8
D_2	D_2	D_1	D_7	D_8	D_6	D_5	D_3	D_4
D_3	D_3	D_7	D_1	D_6	D_8	D_4	D_2	D_5
D_4	D_4	D_6	D_8	D_1	D_7	D_2	D_5	D_3
D_5	D_5	D_8	D_6	D_7	D_1	D_3	D_4	D_2
D_6	D_6	D_4	D_5	D_3	D_2	D_7	D_8	D_1
D_7	D_7	D_3	D_2	D_5	D_4	D_8	D_1	D_6
D_8	D_8	D_5	D_4	D_2	D_3	D_1	D_6	D_7

从表 1 的乘法关系可以看出, 这 8 个矩阵的集合满足群的要求: 有乘法定义——矩阵乘法; 有幺元 D_1; 相乘具有封闭性和结合律; 每个元素有逆元• 因此它们构成一个群, 这个群与晶体点群中 8 个元素的 D_4 点群是同构群[2]•

需要注意的是, 如前所述, 由于正则变量 q, p, Q, P 是以双线性形式在关系中出现, 因此表 1 中的每个矩阵 $D_j\,(j = 1, 2, 3, \cdots, 8)$ 都有 4 种等价的形式, 也就是说变换矩阵实际上有 32 个, 左上角子矩阵相同的右下角 4×4 子矩阵有 4 种等价的形式, 以 D_2 为例, 其右下角 4×4 子矩阵

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

是等价的, 只采用其中一种就可以了• 其中比较特别的是幺元 D_1, 参见表 1 的乘法关系, 有 4 个等价的矩阵,

$$D_2^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = D_1', \quad D_3^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = D_1''$$

$$D_6D_8 = D_8D_6 = D_7^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = D_1^{\circledS}$$

显然 $D_1'D_1' = D_1''D_1'' = D_1^{\circledS}D_1^{\circledS} = I$• 表 1 中只有 $D_4^2 = D_5^2$ 是严格的幺矩阵 I•

类似的, D_2 等价的形式有

$$D_3D_7 = D_7D_3 = D_5D_8 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$
D_4 D_6 = D_8 D_4 = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1
\end{pmatrix}
$$

是 等

$$
D_6 D_5 = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
$$

其余类同•

变换矩阵 $D_j(j=1,2,3,\cdots,8)$ 还使 7 个表达式 $X_i(i=1,2,\cdots,7)$ 变换成表达式 X_i', 每个 X_i' 可以表示为 X_i 的线性组合, 其具体组合形式如表 2 所示, 多数是只有一项, 有两项的较少, 没有三项以上的组合, 而且组合系数只取 $-1, 0, 1$•

表 2　　关系式 X_i 的变换

	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7	D_8
X_1'	X_1	X_2-X_3	$-X_1$	X_3	X_1-X_2	$-X_3$	X_3-X_2	X_2-X_1
X_2'	X_2	X_1-X_3	X_3-X_1	X_2	$-X_2$	X_1-X_3	$-X_2$	X_3-X_1
X_3'	X_3	$-X_3$	X_2-X_1	X_1	X_3-X_2	X_2-X_3	X_1-X_2	$-X_1$
X_4'	X_4	X_7	X_5	X_4	X_6	X_7	X_6	X_5
X_5'	X_5	X_6	X_4	X_7	X_5	X_4	X_7	X_6
X_6'	X_6	X_5	X_7	X_6	X_4	X_5	X_4	X_7
X_7'	X_7	X_4	X_6	X_5	X_7	X_6	X_5	X_4

我们曾经讨论过一维体系的正则变换与热力学基本方程, 它们具有完全相同的数学结构[1], 各个量之间一对一的关系是:

F_1	$\longleftrightarrow G$	吉布斯函数;	F_2	$\longleftrightarrow H$	焓
F_3	$\longleftrightarrow U$	总能量;	F_4	$\longleftrightarrow F$	自由能
q	$\longleftrightarrow P$	压力;	p	$\longleftrightarrow V$	体积
Q	$\longleftrightarrow T$	温度;	P	$\longleftrightarrow S$	熵

因此可以将 7 个表达式 X_i 直接用热力学量代替而得出热力学方程, 其变换形式, 以及 8 个矩

阵(严格地讲应是32个矩阵)• J. S. Lomont 曾对热力学函数及其方程的群表示作过讨论[3],其实只要做上述替代就可以了,就是说热力学状态函数和变量及其所有方程的群表示本质上就是一维体系正则变换群表示的具体化• 例如我们熟知的热力学方程:

$$dG = VdP - SdT,\ dH = VdP + TdS,\ dU = -PdV + TdS,\ dF = -PdV - SdT$$

就是7个基本关系中的 X_4, X_5, X_6 和 X_7,用热力学量作了替换后的形式• 从这个意义上来看,热力学方程及其变换,就是正则变换的实例,从群表示的角度来看都是 D_4 群• 热力学状态方程是源于实验的宏观测量结果的概括,而哈密顿正则变换是经典力学的理论性总结(其中哈密顿量是微观量子力学的基石),它们具有相同的群表示,这一事实有说服力地证明了它们具有相同的数学结构• 类似这种殊途同归的情况可能也存在于其它物理学领域中• 这对从整体上来研究物理学本质具有深刻的意义•

参 考 文 献

1 侯碧辉,正则变换助记图,大学物理,**11**(8) (1992),1—3.

2 Michael Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics*, McGraw_Hill Book Company, New York (1964),16.

3 J. S. Lomont, *Applications of Finite Groups*, Academic Press, New York, London (1959),36—40.

A Group Representation of Canonical Transformation

Hou Bihui

(Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, P. R. China)

Yang Hongbo

(Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, P. R. China)

Abstract

The mutual relationships between four generating functions $F_1(q, Q)$, $F_2(q, P)$, $F_3(p, P)$, $F_4(p, Q)$ and four kinds of canonical variables q, p, Q, P concerned in Hamilton′s canonical transformations, can be got with linear transformations from seven basic formulae. All of them are Legendre′s transformation, which are implemented by 32 matrices of 8×8 which are homomorphic to D_4 point group of 8 elements with correspondence of 4∶1. Transformations and relationships of four state functions $G(P, T)$, $H(P, S)$, $U(V, S)$, $F(V, T)$ and four variables P, V, T, S in thermodynamics, are just the same Lagendre′s transformations with the relationships of canonical transformations. The state functions of thermodynamics are summaryly founded on experimental results of macroscope measurements, and Hamilton′s canonical transformations are theoretical generalization of classical mechanics. Both group represents are the same, and it is to say, their mathematical frames are the same. This generality indicates the thermodynamical transformation is an example of one_dimensional Hamilton′s canonical transformation.

Key words canonical transformations, group theory, group represent, transformation matrix