

ルジャンドル変換

ラグランジュからハミルトンへ

ラグランジュ形式の力学についての解説は前回でいったん終わり, 今回からはハミルトン形式の力学を解説する. 一般化座標で運動方程式を書くという目的だけならラグランジュ形式の力学で達成できるのだが, 力学系の数学的性質を調べたり, コンピュータを用いた高度な計算方法を適用するためには, ハミルトン形式の力学の方が有利である. また, ハミルトン形式の力学は, 統計力学や量子力学など, 解析力学を超えて他の分野につながる架け橋にもなる.

ラグランジュ形式の力学とハミルトン形式の力学は無関係ではなく, ルジャンドル変換という数学的変換を通して互いに移り合う. そこで, ルジャンドル変換を学びたいのだが, ルジャンドル変換される対象となるものを先に知っておく必要がある. それが凸関数である. また, 凸関数より簡単な概念として単調増加関数の定義も述べておく.

単調増加関数

実数値関数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ が任意の実数 x_1, x_2 について

$$x_1 \leq x_2 \text{ ならば } f(x_1) \leq f(x_2) \quad (1)$$

が成り立つならば, f を単調増加関数 (monotonically increasing function) あるいは非減少関数 (non-decreasing function) という. さらに, 任意の実数 x_1, x_2 について

$$x_1 < x_2 \text{ ならば } f(x_1) < f(x_2) \quad (2)$$

が成り立つならば, f を狭義の単調増加関数 (strictly increasing function) という. 関数 $f(x)$ の値が任意の実数 x に対して定義されていない場合は, 定義域に入っている x について上の条件を要請する.

連続関数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ のことを C^0 級関数ともいう. 実数関数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ が1回微分できて, 微分した結果得られる導関数 f' が連続関数になるならば, f は連続的微分可能関数 (continuously differentiable function) あるいは C^1 級関数であるという. 同様に, 関数 f が n 回微分できて, n 回微分した結果の導関数 $f^{(n)}$ が連続関数になっていれば, f は n 回連続的微分可能関数あるいは C^n 級関数であるという. さらに, 何回でも微分できて導関数が連続関数になるならば, 無限回連続的微分可能関数あるいは C^∞ 級関数であるという.

問1. 以下の関数のグラフを描け. 各関数は単調増加関数か, また, 狭義の単調増加関数か, 判定せよ.

$$f_1(x) = x \quad (3)$$

$$f_2(x) = x^2 \quad (4)$$

$$f_3(x) = x^3 \quad (5)$$

$$f_4(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ 1 & (x \geq 0) \end{cases} \quad (6)$$

$$f_5(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ x & (0 \leq x \leq 1) \\ 1 & (1 < x) \end{cases} \quad (7)$$

$$f_6(x) = -\frac{1}{x} \quad (x > 0 \text{ とする}) \quad (8)$$

問2. 次の関数 $f(x)$ について $f'(x), f''(x)$ を求めよ. また, $f(x), f'(x), f''(x)$ のグラフを描

け. この関数は C^1 級か? また, C^2 級か?

$$f(x) = \begin{cases} -x^2 & (x < 0) \\ x^2 & (x \geq 0) \end{cases} \quad (9)$$

問 3. 連続的微分可能な関数 $f(x)$ が単調増加関数であるための必要十分条件は

$$f'(x) \geq 0 \quad (10)$$

が任意の x で成り立つことである。「微分可能な関数 $f(x)$ が任意の x について $f'(x) > 0$ を満たすならば, $f(x)$ は狭義の単調増加関数である」は正しいが, 「 $f(x)$ が狭義の単調増加関数ならば $f'(x) > 0$ 」とは言えない. そのような例を示せ. つまり, 狭義の単調増加関数であるが, $f'(x_0) = 0$ となるような x_0 がある関数 $f(x)$ の例を示せ.

問 4. 実数の適当な区間 $I, J \subset \mathbb{R}$ に関して $f: I \rightarrow J$ が上への写像かつ狭義の単調増加関数ならば, 逆関数 $f^{-1}: J \rightarrow I$ が存在することを説明せよ. また, このとき $f^{-1}: J \rightarrow I$ も狭義の単調増加関数になることを説明せよ.

凸関数

この段落では $x = (c_1, c_2, \dots, c_n)$ は n 次元空間の位置ベクトルとする. 2つの点 x_0, x_1 と $0 \leq t \leq 1$ を満たす任意の実数 t に対して

$$x_t = (1-t)x_0 + tx_1 \quad (11)$$

は 2点 x_0, x_1 を結ぶ線分を $t: (1-t)$ の比に内分する点である.

実数値関数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ が任意の実数 x_0, x_1 と $0 \leq t \leq 1$ を満たす任意の実数 t に対して

$$f((1-t)x_0 + tx_1) \leq (1-t)f(x_0) + tf(x_1) \quad (12)$$

を満たすならば, f は下に凸な関数 (downward-convex function), あるいは, たんに凸関数

(convex function) だという. $-f(x)$ が下に凸な関数ならば $f(x)$ は上に凸な関数だという.

さらに, 実数値関数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ が $x_0 \neq x_1$ であるような任意の実数 x_0, x_1 と $0 < t < 1$ を満たす任意の実数 t に対して

$$f((1-t)x_0 + tx_1) < (1-t)f(x_0) + tf(x_1) \quad (13)$$

を満たすならば, f を狭義の凸関数 (strictly convex function) という.

問 5. 凸関数は必ず連続関数であることを証明せよ.

問 6. 以下の関数のグラフを描け. 各関数は凸関数か, また, 狭義の凸関数か, 判定せよ.

$$f_1(x) = x^2 \quad (14)$$

$$f_2(x) = x^3 - x \quad (15)$$

$$f_3(x) = x^4 \quad (16)$$

$$f_4(x) = \begin{cases} (x+1)^2 & (x < -1) \\ 0 & (-1 \leq x \leq 1) \\ (x-1)^2 & (1 < x) \end{cases} \quad (17)$$

$$f_5(x) = \begin{cases} (x-1)^2 & (x < 0) \\ (x+1)^2 & (0 \leq x) \end{cases} \quad (18)$$

$$f_6(x) = e^x \quad (19)$$

$$f_7(x) = e^{-x} \quad (20)$$

$$f_8(x) = -\log x \quad (x \text{ は } x > 0 \text{ に限る}) \quad (21)$$

問 7. 2回連続的微分可能な関数 $f(x)$ が凸関数であるための必要十分条件は

$$f''(x) \geq 0 \quad (22)$$

が任意の x で成り立つことである! 微分可能な関数 f が $f'' > 0$ を満たすならば, f は狭義の凸関数である」は正しいが, 「狭義の凸関数ならば $f'' > 0$ 」とは言えない. そのような例を示せ. つまり, 狭義の凸関数であるが $f''(x) = 0$ となる x もあるような関数 $f(x)$ の例を示せ.

最小値

数の集合 X に対して $\min X$ は X 中の最小の数を表す．例えば，

$$\min\{24, 56, 34, 12, 17\} = 12 \quad (23)$$

である． \min は minimum (最小値) を意味する．同様に，最大値 (maximum) を表す記号として \max も使われる．

関数 $F(x)$ について，変数 x を $a \leq x \leq b$ の範囲で動かしてできる関数値の最小値を

$$\min\{F(x) \mid a \leq x \leq b\} \quad (24)$$

あるいは

$$\min_{a \leq x \leq b} \{F(x)\} \quad (25)$$

と書く．とくに変数 x の変域に制限がない場合，あるいは変域が明らかである場合は，

$$\min_x \{F(x)\} \quad (26)$$

と書かれる．

問 8. 次の値はいくらか．

$$c_1 = \min\{x^2 \mid 1 \leq x \leq 2\} \quad (27)$$

$$c_2 = \min\{x^2 \mid -2 \leq x \leq 2\} \quad (28)$$

ルジャンドル変換

実数関数 $f(x)$ は微分可能でなくてもよいが連続関数だとし，凸関数であることを仮定する．実数変数 p に対して

$$f^*(p) := \min_x \{f(x) - px\} \quad (29)$$

で定められる関数 $f^*(p)$ を f のルジャンドル変換 (Legendre transformation) という． $\min_x \{f(x) - px\}$ は，変数 x の値をいろいろ

変えて $f(x) - px$ が一番小さくなったときの $f(x) - px$ の値である．

また， p の値を一つ選んだときに， $f(x) - px$ を最小値にするような x を $x = \psi(p)$ と書くことにする．ただし，関数 $f(x)$ のグラフがまっすぐになる箇所 (微分が一定値になる区間) では， p の値を一つ選んでも $\psi(p) = x$ は一意に決まらない．

逆に，関数 $f(x)$ のグラフが折れている箇所 (微分が不連続になる点) では， p の値を変えても $\psi(p) = x$ は動かない．

関数 $f(x)$ が連続的微分可能であれば

$$f(x) - px \quad (30)$$

の最小点は， x による微分がゼロになる点であるから

$$\frac{\partial}{\partial x} (f(x) - px) = 0 \quad (31)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} - p = 0 \quad (32)$$

すなわち

$$p = \frac{\partial f(x)}{\partial x} =: \phi(x) \quad (33)$$

を x について解くことによって決まる．したがって，微分可能な凸関数 $f(x)$ をルジャンドル変換した関数 $f^*(p)$ を求めるには，まず (33) 式を書いて，これを x について解いて ($f(x)$ が微分可能な狭義凸関数なら， $p = f'(x)$ は狭義の単調増加関数になり，逆関数が存在する)，

$$x = \psi(p) \quad (34)$$

という形に直し，

$$\begin{aligned} f^*(p) &:= f(x) - px \\ &= f(\psi(p)) - p\psi(p) \end{aligned} \quad (35)$$

を求めればよい．この式を形式的に

$$f^*(p) = f(x) - \frac{\partial f}{\partial x} x \quad (36)$$

と書いてもよい．

また, (35) と (33), (34) より

$$\begin{aligned}\frac{\partial f^*}{\partial p} &= \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial p} - \psi(p) - p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial p} \\ &= p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial p} - x - p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial p} \\ &= -x\end{aligned}\quad (37)$$

が成り立ち, (35) より

$$\begin{aligned}f(x) &= f^*(p) + px \\ &= f^*(p) - p \cdot \frac{\partial f^*}{\partial p}\end{aligned}\quad (38)$$

となる. (36) と (38), (33) と (37) を見比べると, ルジャンドル変換を 2 回やると

$$f^{**}(x) = f(-x)\quad (39)$$

となることがわかる.

問 9. ルジャンドル変換の幾何学的意味を説明せよ.

問 10. 実数 p の値を固定すると,

$$y = px + f^*(p)\quad (40)$$

は傾き p , 切片 $f^*(p)$ の直線の方程式である. p の値を変えていくと, たくさんの直線が定まるが, そのような図形を直線族 (family of lines) という. 直線族の包絡線 (envelope) が,

$$0 = x + \frac{\partial f^*(p)}{\partial p}\quad (41)$$

を p について解いて $p = \phi(x)$ の形に直して, $y = px + f^*(p)$ から p を消去することによって得られることを示せ.

問 11. 以下の関数について以下のことをやれ: (i) 関数 $f(x)$ のグラフを描け. (ii) $p = f'(x)$ を求めて, p の値が動く範囲を述べよ (とくに制限がなければ x は実数全体を動く). (iii) $p = f'(x)$ の式を x について解けるなら $x = \psi(p)$ を求めよ. (iv) $f^* = f - px$ を p だけの式に書き

直して $f^*(p)$ を求めよ. (v) $f^*(p)$ のグラフを描け.

$$f_1(x) = \frac{1}{2}x^2\quad (42)$$

$$f_2(x) = \frac{1}{4}x^4\quad (43)$$

$$f_3(x) = \begin{cases} -x + 1 & (x < -1) \\ 2 & (x = -1) \\ x + 3 & (x > -1) \end{cases}\quad (44)$$

$$f_4(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}(x + 1)^2 & (x < -1) \\ 0 & (-1 \leq x \leq 1) \\ \frac{1}{2}(x - 1)^2 & (1 < x) \end{cases}\quad (45)$$

$$f_5(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}x^2 & (x < -1) \\ \frac{1}{2} & (x = -1) \\ \frac{1}{2} & (-1 < x < 1) \\ \frac{1}{2} & (x = 1) \\ \frac{1}{2}x^2 & (1 < x) \end{cases}\quad (46)$$

$$f_6(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}x^2 & (x < 1) \\ x - \frac{1}{2} & (1 \leq x < 2) \\ \frac{3}{2} & (x = 2) \\ \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2} & (2 < x) \end{cases}\quad (47)$$

$$f_7(x) = e^x\quad (48)$$

$$f_8(x) = \log x \quad (x \text{ は } x > 0 \text{ に限る})\quad (49)$$

問 12. (i) 関数

$$y = f(x) = \sqrt{1 + x^2}\quad (50)$$

のルジャンドル変換 $f^*(p)$ を求めよ. 変数 p のとり得る値の範囲も述べよ.

(ii) $p = \frac{z}{\sqrt{1+z^2}}$ とし, $z = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ を代入して, コンピュータを使って直線 $y = px + f^*(p)$ のグラフを描け. それらに重ねて $y = f(x)$ のグラフも描け.

問 13. 関数 $f(x) = ax + b$ のルジャンドル変換 $f^*(p)$ を求めて, そのグラフを描け.

問 14. $(x, y) = (1, 2)$ という一点は, $x = 1$ だけで定義された関数 $f(1) = 2$ とみなせる. この関数 $f(x)$ のルジャンドル変換 $f^*(p)$ を求めて, そのグラフを描け.

問 15. 傾きが p , 切片が $f^*(p) = 2 - p$ であるような直線の方程式は $y = px + (2 - p)$ である. この直線は, p がいくらであっても $(x, y) = (1, 2)$ を通ることを示せ.

問 16. 関数 $f(x)$ のグラフが折れ曲がり点 (微分が不連続に変わる点) を持つと, 対応するルジャンドル変換 $f^*(p)$ のグラフはまっすぐな線分 (微分が一定値になる区間) を持つことを示せ. また, 関数 $f(x)$ のグラフがまっすぐな区間を持つと, 対応する $f^*(p)$ のグラフは折れ曲がり点を持つことを示せ.

問 17. 次の関数のルジャンドル変換を求めよ:

$$f(x) = ax^2 + bx + c \quad (51)$$

問 18. (i) $\alpha > 1$ であるような実数 α に対して

$$f(x) = \frac{1}{\alpha} x^\alpha \quad (x \text{ の範囲は } x \geq 0) \quad (52)$$

は下に凸な関数であることを示せ.

(ii) 関数 $f(x)$ をルジャンドル変換した $f^*(p)$ が

$$f^*(p) = -\frac{1}{\beta} p^\beta \quad (p \text{ の範囲は } p \geq 0) \quad (53)$$

になることと

$$\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} = 1 \quad (54)$$

が成立することを示せ.

問 19. (33) と (34) は, $x = \psi(p)$ は $p = \phi(x)$ の逆関数であることを意味している. ゆえに

$$1 = \frac{\partial x}{\partial x} = \frac{\partial x}{\partial p} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial p} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (55)$$

が成り立つ. また, (33) より

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (56)$$

$x = \psi(p)$ と (37) より

$$\frac{\partial^2 f^*}{\partial p^2} = -\frac{\partial \psi}{\partial p} \quad (57)$$

である. これらを使って, 元の関数 $f(x)$ が C^2 級で狭義の「下に凸な関数」ならば, そのルジャンドル変換 $f^*(p)$ は C^2 級で狭義の「上に凸な関数」になることを証明せよ.

参考文献

凸関数およびルジャンドル変換については, 次の本の付録に詳しく書かれている.

・田崎晴明 『熱力学: 現代的な視点から』(培風館)

放物線 $y = \frac{1}{2}x^2$ の接線の族 $y = px - \frac{1}{2}p^2 = \pm\sqrt{2q}x - q$

