1 Legendre 变换

考虑到在理论力学里,从拉格朗日量导出哈密顿量的严格办法是使用 Legendre 变换[1]，我们在这篇笔记里简要介绍一下它的定义和性质。这篇给笔记的主要参考材料是卓里奇的《数学分析-第一卷》（第四版）在第 236 页的习题和阿诺德的《经典力学里的数学方法》第三章里“Legendre 变换”一节。

定义 1.1 设 f 是定义在区间 I 上的（下）凸函数，那么 f 的 *Legendre* 变换为：

$$f^*(p) = \sup\{p \cdot x - f(x) \mid x \in I\} \tag{1}$$

这里 f^* 的定义域为所有使得右侧的上确界有限的 p 构成的集合。

注 1.1 另外在一般的 n 维线性空间 V 上，我们也可以定义凸区域 Ω 上的凸函数和凸函数的 *Legendre* 变换：

$$f^*(p) = \sup_{\overrightarrow{x} \in \Omega} \{\langle p, \overrightarrow{x} \rangle - f(\overrightarrow{x})\}$$

其中 $p \in V^*$ 是 V 的对偶空间中的元素，$\langle \cdot, \cdot \rangle$ 表示 V^* 和 V 的配对。在 $V = \mathbb{R}^n$ 时，p 可以视作一个 n 元数组 $(p_1, p_2, \ldots, p_n)$，满足：对 $\overrightarrow{x} = (x^1, x^2, \ldots, x^n)$（这里 x 右上角的数字是上标，不是指数），有 $\langle p, \overrightarrow{x} \rangle = \sum_{i=1}^n p_i x^i$.

这一定义有些抽象，这里建议最好和函数图像结合起来理解这一定义，不想画图的读者或许可以参考《经典力学里的数学方法》中对应章节中的图片。

下面是一些 Legendre 变换的例子：

例 1.1 (1) $f(x) = x, x \in \mathbb{R} \Longrightarrow f^*(p)$ 仅在一点 $p = 1$ 上有定义，这时 $f(1) = 0$.

(2) $f(x) = x, x \in [-1, 1] \Longrightarrow f^*(p) = |p - 1|, p \in \mathbb{R}$. 这两个例子表明凸函数 f 的定义域是不可忽略的。

(3) $f(x) = x^2 \Longrightarrow f^*(p) = \frac{1}{4}p^2$.

---

[1]Legendre 一般被翻译为勒让德。Legendre 是一位法国数学家，他的名字不读作 legend(传奇)。使用英语里的音标的话，他的名字读作/ləˈʒɑːndh/. 许多法语名字的读音都和英语习惯的发音不同（如伽罗瓦 Galois/gɑlˈwɑ/，泊松 Poisson/pwɑ’son/，韦伊 Weil/weɪı/），这导致它们的音译有些难以理解。

(4) $f(v)=\frac{mv^2}{2}-V_0 \Longrightarrow f^*(p)=\frac{p^2}{2m}+V_0$，数学上讲，这里 m 是一个正的常数，V_0 是一个常数，但在大部分场景里，m 代表质量，V_0 是势能函数在一给定点处的值，v 代表给定点处的速度，p 代表给定点处的动量。这时这个例子表明：拉格朗日量在经过 *Legendre* 变换后就是哈密顿量。

(5) $f(x)=\frac{1}{\alpha}x^\alpha \Longrightarrow f^*(p)=\frac{1}{\beta}p^\beta$，其中 $\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{\beta}=1.$

在上面的例子里，后面几个直接用定义验证或许会有些麻烦，实际上，在 f 可微时，f 的 Legendre 变换有更简单的计算办法，我们概括为下面的命题：

命题 1.1 设凸函数 $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ 可微（这里允许 a,b 取 $\pm\infty$），那么对 $p\in[f'(a),f'(b)]$，有：

$$f^*(p)=px-f(x) \tag{2}$$

其中 $x=x(p)$ 满足 $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\big(x(p)\big)=p.$ 因为 f' 是单调递增的函数，所以大部分时候这样的 x 是唯一的。

这一命题成立的主要原因是：根据函数最值的判断法则，我们可以验证，在 $x(p)$ 处，关于 x 的函数 $px-f(x)$ 取到最大值（因为它在 $x(p)$ 处导数等于 0，且“二阶导数”小于 0），因此我们可以将原本的上确界具体地写出来。

我们列出 Legendre 变换的一些简单性质，这些性质的证明可以留给读者作为练习。对于非数学专业的读者而言，或许理解前面的例子会比这些性质更有用。

命题 1.2 凸函数 f 的 *Legendre* 变换 f^* 仍然是凸函数。

证明 1.0.1 任取 f^* 定义域中的两个数 p_1,p_2 和实数 $\lambda\in(0,1)$，有：

$$\begin{aligned}
f^*(\lambda p_1+(1-\lambda)p_2) &= \sup_{x\in I}\{(\lambda p_1+(1-\lambda)p_2)\cdot x-f(x)\}\\
&= \sup_{x\in I}\{\lambda\big(p_1\cdot x-f(x)\big)+(1-\lambda)\big(p_2\cdot x-f(x)\big)\}\\
&\leqslant \sup_{x\in I}\{\lambda\big(p_1\cdot x-f(x)\big)\}+\sup_{x\in I}\{(1-\lambda)\big(p_2\cdot x-f(x)\big)\}\\
&\leqslant \lambda\cdot\sup_{x\in I}\{p_1\cdot x-f(x)\}+(1-\lambda)\cdot\sup_{x\in I}\{p_2\cdot x-f(x)\}\\
&\leqslant \lambda f^*(p_1)+(1-\lambda)f^*(p_2)
\end{aligned}$$

这就说明了 f^* 是凸的。

命题 1.3 对定义在 $\mathbb{R}$ 上的二阶可微的严格凸函数 $f(x)$，*Legendre* 变换是对合的，也就是它在经过两次 *Legendre* 变换后变成自身，亦即 $(f^*)^* = f$.

证明 1.0.2 我们这里给出主要的步骤，省略掉有关变换后的定义域的一些讨论。

根据命题*1.1*，我们知道

$$f^*(p) = p \cdot x(p) - f(x(p))$$

其中 $x(p)$ 满足 $f'(x(p)) = p$. 这样可以算出 $f^*(p)$ 的导数为：

$$\begin{aligned}(f^*)'(p) &= x(p) + p\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}x(p) - f'(x(p)) \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}x(p) \\ &= x(p) + p\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}x(p) - p \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}x(p) \\ &= x(p)\end{aligned} \tag{3}$$

这时候，我们来看 $(f^*)^*(\bar{x})$，其中 $\bar{x}$ 落在 $(f^*)'$ 的值域里：

$$(f^*)^*(\bar{x}) = \bar{x} \cdot \bar{p}(\bar{x}) - f^*(\bar{p}(x)) = \bar{x} \cdot \bar{p}(\bar{x}) - \bar{p}(\bar{x}) \cdot x(\bar{p}(\bar{x})) + f\big(x(\bar{p}(\bar{x}))\big)$$

其中 $\bar{p}$ 满足 $\bar{x} = (f^*)'(\bar{p})$. 而根据上面的式 *(3)*，我们知道 $(f^*)'(p\bar{(x)}) = x(\bar{p}(\bar{x}))$，因此有：$\bar{x} = x(\bar{p}(\bar{x}))$. 将这一等式代入上面的等式得：

$$f^*(\bar{x}) = \bar{x} \cdot \bar{p}(\bar{x}) - \bar{p}(\bar{x}) \cdot \bar{x} + f(\bar{x}) = f(\bar{x}), \forall \bar{x} \in (f^*)'\text{的值域}. \tag{4}$$

在忽略定义域的情况下，这就说明了 $(f^*)^* = f$.

注 1.2 对一般的凸函数 f（不一定可微，且不一定定义在 $\mathbb{R}$ 上)，这一命题仍然成立，但它的证明会有些麻烦。一个参考资料是 *1970* 年出版的 *Rockafellar* 的书籍 Convex analysis 中的定理 *12.2* 和推论 *12.2.1*.

命题 1.4 对凸函数 $f(x)$，有：

$$y \cdot p \leqslant f(y) + f^*(p), \forall y, p \tag{5}$$

证明 1.0.3 根据 $f^*(p)$ 的定义，有：

$$f^*(p) = \sup_{x \in I}\{p \cdot x - f(x)\} \geqslant p \cdot y - f(y)$$

在经过移项之后，就得到了需要证明的不等式。

最后一个命题可以给出下面的推论：

推论 1.1 *(Younger 不等式)* 设正实数 α, β 满足 $\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{\beta}=1$. 则对任意 $y, p>0$，有：

$$\frac{1}{\alpha} y^{\alpha}+\frac{1}{\beta} p^{\beta} \geqslant y p.$$

我们在定积分一节曾用另一种方式证明过这一结论。

证明 1.0.4 对 $f(x)=\frac{1}{\alpha} x^{\alpha}$ 使用最后一个命题。注意到 $f^{*}(p)=\frac{1}{\beta} p^{\beta}$，这样就证明了推论。

对数学研究来说，Legendre 变换是非线性分析（如非线性偏微分方程）里比较基本的工具。想要更加深入了解的读者可以自行查阅相关书籍。