已修订
21-12-31，17:34

第 6 章 HAMILTON 力学

一、 HAMILTON 方程

n个的 2 阶常微分方程等价于$2n$个 1 阶常微分方程，例如拉格朗日方程可以改写成

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}=\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}\Leftrightarrow\begin{cases}\dot{p}_\alpha=\dfrac{\partial L}{\partial q_\alpha}\\ p_\alpha=\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\end{cases}$$

在拥有拉格朗日力学这样强有力的理论之后，我们之所以仍然需要把力学方程写成哈密顿形式，主要有两个原因：（1）方程更对称，从而进行理论方法的研究更方便；（2） 哈密顿力学与量子力学有更直接的对应关系。

1. 相空间

除了时间参数，拉氏量$L=L(t,q,\dot{q})$的自变量是广义坐标和广义速度，

$$L=L(t,q,\dot{q}),$$

$$q_\alpha,\dot{q}_\alpha,\qquad \alpha=1,2,\cdots,n.$$

在哈密顿力学中，自变量取为广义坐标q_α和广义动量

$$p_\alpha=p_\alpha(t,q,\dot{q})=\frac{\partial L(t,q,\dot{q})}{\partial \dot{q}_\alpha}$$

这些变量被看成是$2s$维**相空间**的坐标，其中q_α称为**正则坐标**，p_α称为**正则动量**，(q_α,p_α)称为一对**共轭的正则变量**。

2. 非奇异拉格朗日系统

变量代换

$$\{q_\alpha,\dot{q}_\alpha|\alpha=1,2,\cdots,n\}\to\{q_\alpha,p_\alpha|\alpha=1,2,\cdots,n\}$$

可行的条件是拉氏量非奇异，即雅可比行列式

$$\det\left(\frac{\partial p_\alpha}{\partial \dot{q}_\beta}\right)=\det\left(\frac{\partial^2 L(t,q,\dot{q})}{\partial \dot{q}_\alpha\partial \dot{q}_\beta}\right)\neq 0$$

定理 在力学的问题中，采用恰当定义的广义坐标的系统，其拉格朗日函数是非奇异的。

证明 对力学问题，

$$L(t,q,\dot{q})=T(t,q,\dot{q})-V(t,q)$$

质点系的动能为

$$T=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}m_i\left(\frac{d\vec{r}_i(t,q)}{dt}\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}m_i\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\beta}\dot{q}_\alpha\dot{q}_\beta+\sum_{i=1}^{N}m_i\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial t}\dot{q}_\alpha+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}m_i\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial t}\cdot\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial t}$$

$$\frac{\partial^2L(t,q,\dot{q})}{\partial\dot{q}_\alpha\partial\dot{q}_\beta}=\frac{\partial^2T(t,q,\dot{q})}{\partial\dot{q}_\alpha\partial\dot{q}_\beta}=\sum_{i=1}^{N}m_i\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\beta}$$

取固定的时刻，对于恰当定义的（well-defined）广义坐标，

$$\delta\vec{r}_i=\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha,\qquad i=1,2,\cdots,N$$

从而$\{\delta\vec{r}_i=\vec{0},i=1,2,\cdots,N\}$的必要条件是$\{\delta q_\alpha=0,\alpha=1,2,\cdots,s\}$；否则意味着广义坐标$\{q_\alpha|\alpha=1,2,\cdots,s\}$改变时，质点组的位形$\{\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N\}$没有变化，

$$\delta\vec{r}_i=\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha=0,\qquad i=1,2,\cdots,N$$

即广义坐标的定义有奇异性。所以

$$\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\beta}\delta q_\alpha\delta q_\beta=|\delta\vec{r}_i|^2\geq 0,\qquad (i\text{不求和})$$

等号仅在δq_α全为零成立，即

$$\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\beta}\ (i\text{不求和})$$

是$n\times n$的对称正定矩阵，从而

$$\frac{\partial^2L(t,q,\dot{q})}{\partial\dot{q}_\alpha\partial\dot{q}_\beta}=\sum_{i=1}^{N}m_i\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial\vec{r}_i(t,q)}{\partial q_\beta}$$

是对称正定矩阵，行列式非零。

当拉格朗日理论被应用到非力学系统时，上述证明不适用，但一般来说，系统应该是非奇异的。本章暂不讨论奇异系统。

3. LEGENDRE 变换

将广义速度$\{\dot{q}_\alpha|\alpha=1,2,\cdots,n\}$变换为正则动量$\{p_\alpha|\alpha=1,2,\cdots,n\}$，哈密顿采用了勒让德变换。

设函数$f=f(x_1,\cdots,x_n)$，记梯度为

$$p_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial f}{\partial x_\alpha}$$

引进函数

$$g(p_1,\cdots,p_n) \stackrel{\text{def}}{=} p_\alpha x_\alpha - f(x_1,\cdots,x_n)$$

注意等式右边的x_α，必须通过求解方程组

$$p_\alpha = \frac{\partial f}{\partial x_\alpha}, \qquad \alpha = 1,2,\cdots,n$$

得到$x_\alpha = x_\alpha(p_1,\cdots,p_n)$之后代入，以完成变量代换。

这个方程组可解的条件是

$$\det\left(\frac{\partial p_\alpha}{\partial x_\beta}\right) = \det\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}\right) \neq 0$$

推论 Legendre 变换是对合的（involutive），即对$g(p)$进行 Legendre 变换，可得$f(x)$。

4. 哈密顿正则函数

对拉格朗日函数$L = L(t,q,\dot{q})$作勒让德变换，

$$H = p_\alpha \dot{q}_\alpha - L$$

变换分为两步进行。首先写出广义能量函数（为了不混淆，这里暂时换了一个符号）

$$E(t,q,\dot{q}) \stackrel{\text{def}}{=} p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(t,q,\dot{q})$$

然后由

$$p_\alpha = \frac{\partial L(t,q,\dot{q})}{\partial \dot{q}_\alpha}$$

反解出$\dot{q}_\alpha(t,q,p)$，代入广义能量函数，得到

$$H(t,q,p) = E\big(t,q,\dot{q}_\alpha(t,q,p)\big)$$

称$H(t,q,p)$为**哈密顿量**或者**哈密顿正则函数**。

哈密顿函数与拉格朗日函数等价，可完全描述系统的动力学性质。

广义能量函数$H(t,q,\dot{q})$和哈密顿函数$H(t,q,p)$是同一个物理量，只是自变量不同，函数表达式不同。

5. 保守系统的哈密顿方程

对广义能量函数微分，

$$
\begin{aligned}
& dE(t,q,\dot{q}) = d\{p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(t,q,\dot{q})\} \\
& = p_\alpha d\dot{q}_\alpha + \dot{q}_\alpha dp_\alpha - \frac{\partial L}{\partial t}dt - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}dq_\alpha - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}d\dot{q}_\alpha = -\frac{\partial L}{\partial t}dt - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}dq_\alpha + \dot{q}_\alpha dp_\alpha
\end{aligned}
$$

我们利用广义动量的定义$p_\alpha = \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$消去了$d\dot{q}_\alpha$项。

对哈密顿函数$H(t,q,p)$微分，

$$
dH(t,q,p) = \frac{\partial H}{\partial t}dt + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}dq_\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}dp_\alpha
$$

于是有恒等式

$$
dE(t,q,\dot{q}) \equiv dH(t,q,p)
$$

$$
-\frac{\partial L}{\partial t}dt - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}dq_\alpha + \dot{q}_\alpha dp_\alpha \equiv \frac{\partial H}{\partial t}dt + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}dq_\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}dp_\alpha
$$

所以

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial L}{\partial t} \equiv -\dfrac{\partial H}{\partial t} \\
\dfrac{\partial L}{\partial q_\alpha} \equiv -\dfrac{\partial H}{\partial q_\alpha} \\
\dot{q}_\alpha \equiv \dfrac{\partial H}{\partial p_\alpha}
\end{cases}
$$

现在把拉氏方程

$$
\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = \dot{p}_\alpha
$$

代入第二式得

$$
\dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}
$$

于是物理运动满足**哈密顿方程**

$$
\begin{cases}
\dot{q}_\alpha = \dfrac{\partial H}{\partial p_\alpha} \\
\dot{p}_\alpha = -\dfrac{\partial H}{\partial q_\alpha}
\end{cases}
$$

又称为**正则方程**（因为方程很对称）。

推论：L 不显含时间⇔H 不显含时间。

6. 非保守系统的哈密顿方程

由非保守系统的拉氏方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}-\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}=Q_\alpha$$

$$\dot{p}_\alpha=\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}-Q_\alpha$$

可得

$$\begin{cases}\dot{q}_\alpha=\dfrac{\partial H}{\partial p_\alpha}\\ \dot{p}_\alpha=-\dfrac{\partial H}{\partial q_\alpha}+Q_\alpha\end{cases}$$

7. 正则方程的循环积分和广义能量积分

（1） H不含某个坐标→循环积分 $\dot{p}_\alpha=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}=0,\ p_\alpha=\text{constant}$

这时可以在哈密顿中把p_α用常数替代，q_α不再作为系统的一个自由度，可以遗弃。

（2） H不含某个正则动量p_α →循环积分 $\dot{q}_\alpha=\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}=0,\ q_\alpha=\text{constant}$ （这在拉氏框架中没有）

（3） H不含时间，$\frac{dH}{dt}=\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial t}=\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha=0,\ H=\text{constant}$

例 1 设单摆与垂直向下方向的夹角为φ，

$$T=\frac{1}{2}ml^2\dot{\varphi}^2,\qquad V=-mgl\cos\varphi\Rightarrow L=T-V=\frac{1}{2}ml^2\dot{\varphi}^2+mgl\cos\varphi$$

$$p_\varphi=\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}}=ml^2\dot{\varphi}\Rightarrow\dot{\varphi}=\frac{p_\varphi}{ml^2},\qquad H=p_\varphi\dot{\varphi}-L=\frac{p_\varphi^2}{2ml^2}-mgl\cos\varphi$$

正则方程为

$$\dot{\varphi}=\frac{\partial H}{\partial p_\varphi}=\frac{p_\varphi}{ml^2},\qquad \dot{p}_\varphi=-\frac{\partial H}{\partial\varphi}=-mgl\sin\varphi\Leftrightarrow\text{L.eq.}:\ddot{\varphi}l-g\sin\varphi=0$$

例 2 中心势中的质点

在平面极坐标下，拉氏函数为

$$L=\frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2\right)-V(r)$$

广义动量为

$$p_r=\frac{\partial L}{\partial \dot{r}}=m\dot{r},\qquad p_\theta=\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}}=mr^2\dot{\theta}\Rightarrow \dot{r}=\frac{p_r}{m},\qquad \dot{\theta}=\frac{p_\theta}{mr^2}$$

作勒让得变换，

$$H=\dot{r}p_r+\dot{\theta}p_\theta-L=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{1}{r^2}p_\theta^2\right)+V(r)$$

正则方程

$$\begin{cases}\dot{r}=\dfrac{p_r}{m},\qquad \dot{p}_r=\dfrac{p_\theta^2}{mr^3}-\dfrac{dV(r)}{dr};\\ \dot{\theta}=\dfrac{p_\theta}{mr^2},\quad \dot{p}_\theta=0.\end{cases}$$

在 Hamilton 力学框架下求解问题的一般步骤：

（1）建立坐标系；（2）写出拉氏量；（3）写出广义动量并反解，利用 Legendré变换写出 Hamiltonian（有时可无需拉氏量，直接写出$H=T_2-T_0+V$）；（4）写出正则方程；（5）求解方程。

例 已知谐振子的哈密顿函数

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kq^2$$

利用勒让德变换求拉氏函数。

解：变换关系

$$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p}=\frac{p}{m}\Rightarrow p=m\dot{q}$$

拉氏量

$$L=p\dot{q}-H=p\dot{q}-\frac{p^2}{2m}-\frac{1}{2}kq^2=\frac{1}{2}m\dot{q}^2-\frac{1}{2}kq^2$$

8. 位力定理

$$\left.\begin{aligned}\lim_{\tau\to+\infty}\frac{1}{\tau}(p_\alpha q_\alpha)|_0^\tau=0\\ \frac{d}{dt}(p_\alpha q_\alpha)=\dot{p}_\alpha q_\alpha+p_\alpha\dot{q}_\alpha\\ \dot{q}_\alpha=\frac{\partial H}{\partial p_\alpha},\qquad \dot{p}_\alpha=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\end{aligned}\right\}\Longrightarrow\left\langle p_\alpha\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\right\rangle=\left\langle q_\alpha\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right\rangle$$

9. ROUTH 变换

如果只对部分变量作 Legendre 变换，$2n$个变量取为

$$q_i, \dot{q}_i, q_\alpha, p_\alpha, \qquad i = 1,2,\cdots,k; \alpha = k+1,\cdots,n$$

定义劳斯函数（Routhian）

$$R(t, q_i, \dot{q}_i, q_\alpha, p_\alpha) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\alpha=k+1}^{n} p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(t, q_i, \dot{q}_i, q_\alpha, \dot{q}_\alpha)$$

可给出运动方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial R}{\partial q_i} = 0, \qquad i = 1,\cdots,k;$$

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial R}{\partial p_\alpha}, \qquad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial R}{\partial q_\alpha}, \qquad \alpha = k+1,\cdots,n$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}.$$

Routh 方程的一个重要用途是在发现循环坐标后，减少方程的数目：如果直接将循环积分代入拉氏量，所得的新“拉氏函数”不能给出正确的拉氏方程；而把循环积分代入哈密顿量是可行的。故只需对循环坐标作勒让德变换。

例 中心力场中的运动，

$$L = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2\right) - V(r)$$

有循环坐标θ，

$$p_\theta = mr^2\dot{\theta} = J \Rightarrow \dot{\theta} = \frac{J}{mr^2}$$

$$L_{eff}(r,\dot{r}) = L - p_\theta\dot{\theta} = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 - \frac{J^2}{2mr^2} - V(r)$$
$$\stackrel{\text{def}}{=} T' - V_{eff}(r),$$

$$T' \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}m\dot{r}^2, \qquad V_{eff}(r) \stackrel{\text{def}}{=} V(r) + \frac{J^2}{2mr^2}$$

即有心力场质点的运动，等价于等效势场中的一维运动, $\frac{J^2}{2mr^2}$称为离心势。

由于循环坐标及对应的广义动量已被消去，剩下的变量满足 Lagrange 方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial R}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial R}{\partial r} = 0, \rightarrow m\ddot{r} - \frac{J^2}{mr^3} = -\frac{dV}{dr} = F_r(r)$$

注：如果直接将$\dot{\theta} = \frac{J}{mr^2}$代入拉氏量

$$L=\frac{1}{2}m\left(\dot r^2+r^2\dot\theta^2\right)-V(r)=\frac{1}{2}m\dot r^2+\frac{J^2}{2mr^2}-V(r)$$

离心势的符号不对，会得出错误的运动方程（留作练习）。

10. 带电粒子的运动

（1）相对论带电粒子

电磁场中的相对论带电粒子的拉氏量（光速$c=1$）

$$L=-m_0\sqrt{1-\dot{\vec r}^2}-q\phi+q\vec A\cdot\dot{\vec r}$$

$$\vec p=\frac{m_0\dot{\vec r}}{\sqrt{1-\dot{\vec r}^2}}+q\vec A,\qquad \dot{\vec r}=\frac{\vec p-q\vec A}{\sqrt{\left(\vec p-q\vec A\right)^2+m_0^2}}$$

哈密顿函数

$$H(t,\vec r,\vec p)=\vec p\cdot\dot{\vec r}-L=\sqrt{\left(\vec p-q\vec A\right)^2+m_0^2}+q\phi$$

正则方程

$$\begin{cases}\dot{\vec r}=\dfrac{\vec p-q\vec A}{\sqrt{\left(\vec p-q\vec A\right)^2+m_0^2}}\\ \dot{\vec p}=\dfrac{q}{\sqrt{\left(\vec p-q\vec A\right)^2+m_0^2}}\left(p_j-qA_j\right)\nabla A_j-q\nabla\phi\end{cases}$$

（2）低速近似

拉氏量

$$L=\frac{1}{2}m\dot{\vec r}^2-q\phi+q\vec A\cdot\dot{\vec r}$$

$$\vec p=m\dot{\vec r}+q\vec A,\qquad \dot{\vec r}=\frac{\vec p-q\vec A}{m}$$

哈密顿量

$$H(t,\vec r,\vec p)=\vec p\cdot\dot{\vec r}-L=\frac{1}{2m}\left(\vec p-q\vec A\right)^2+q\phi$$

运动方程

$$\begin{cases}\dot{\vec{r}} = \dfrac{\vec{p} - q\vec{A}}{m} \\ \dot{\vec{p}} = \dfrac{p_j - qA_j}{m} q\nabla A_j - q\nabla\phi\end{cases}$$

（3）原子磁矩

外磁场中核外电子

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2m_e}\left(\vec{p} + e\vec{A}\right)^2 + V(r) \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{e}{m_e}\vec{p}\cdot\vec{A} + \frac{e^2}{2m_e}\vec{A}^2 = H_0 + H'\end{aligned}$$

$$H_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + V(r)$$

$$H' \stackrel{\text{def}}{=} \frac{e}{m_e}\vec{p}\cdot\vec{A} + \frac{e^2}{2m_e}\vec{A}^2$$

其中$V(r)$是库伦势或平均场，$\vec{A}$是外部磁场矢量势，H_0是原子无微扰时的哈密顿函数，H'是外磁场贡献的微扰作用。

若外磁场（在原子尺寸的小范围内）为均匀磁场，

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}$$

$$\begin{aligned}H' &= \frac{e}{2m_e}\vec{p}\cdot\left(\vec{B}\times\vec{r}\right) + \frac{e^2}{2m_e}\vec{A}^2 \\ &= \frac{e}{2m_e}(\vec{r}\times\vec{p})\cdot\vec{B} + \frac{e^2}{8m_e}\left(\vec{B}^2\vec{r}^2 - \left(\vec{B}\cdot\vec{r}\right)^2\right) \\ &= -\vec{\mu}\cdot\vec{B} + \frac{e^2}{2m_e}\vec{A}^2\end{aligned}$$

上式中

$$\vec{\mu} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{-e}{2m_e}\vec{L} = \frac{-e}{2m_e}\vec{r}\times\vec{p}$$

是电子轨道磁矩；$-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$是磁矩的磁能，体现原子的顺磁性；最后一项$\vec{A}^2$贡献原子的抗磁性。

11. 哈密顿光学

几何光学的拉氏量可取为

$$L\left(\lambda, \vec{r}, \dot{\vec{r}}\right) = \frac{1}{2}n^2(\vec{r})\dot{\vec{r}}^2, \qquad \vec{r} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\vec{r}}{d\lambda}$$

广义动量

$$\vec{p} = n^2\dot{\vec{r}}, \qquad \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{n^2}$$

哈密顿函数

$$H(\lambda, \vec{r}, \vec{p}) = \vec{p}\cdot\dot{\vec{r}} - L = \frac{\vec{p}^2}{n^2} - \frac{1}{2}n^2(\vec{r})\left(\frac{\vec{p}}{n^2}\right)^2 = \frac{\vec{p}^2}{2n^2}$$

哈密顿方程

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{n^2}, \qquad \dot{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{n^3}\nabla n$$

12. 广义经典力学的正则方程

以含二阶导数的拉格朗日系统为例，

$$L = L(t, q, \dot{q}, \ddot{q})$$

拉格朗日方程为

$$\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} + \frac{d^2}{dt^2}\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_\alpha} = 0$$

广义能量

$$H = \ddot{q}_\alpha\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_\alpha} - \dot{q}_\alpha\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - L$$

为作勒让德变换，引入新的坐标

$$q'_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \dot{q}_\alpha$$

现在$2n$个广义坐标(q, q')对应的雅可比-奥斯特格拉斯基（Jacobi-Ostrogradsky）动量分别为

$$p_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_\alpha}, \qquad p'_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_\alpha}$$

广义能量成为

$$H = \dot{q}'_\alpha p'_\alpha + \dot{q}_\alpha p_\alpha - L$$

由广义动量

$$p'_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_\alpha}$$

解出$\ddot{q}$，与$\dot{q}_\alpha = q'_\alpha$一起代入广义能量表达式完成勒让德变换，得到哈密顿函数$H(t, q, q', p, p')$。

二、　相空间中的变分原理

1. 用哈密顿原理推导正则方程

按哈密顿原理，

$$\delta S[q]=\delta\int_{t_1}^{t_2}(p_\alpha\dot{q}_\alpha-H)dt$$
$$=\int_{t_1}^{t_2}\left(\dot{q}_\alpha\delta p_\alpha+p_\alpha\delta\dot{q}_\alpha-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\delta p_\alpha-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha\right)dt\xleftrightarrow{\text{分部积分，}\delta q_\alpha(t_0)=\delta q_\alpha(t_1)=0}$$
$$=\int_{t_1}^{t_2}\left(\left(\dot{q}_\alpha-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\right)\delta p_\alpha-\left(\dot{p}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha\right)dt=0$$

$\delta p_\alpha,\delta q_\alpha$不独立，为了导出正则方程，需要用到勒让德变换给出的关系式$\dot{q}_\alpha=\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}$，从而$\delta p_\alpha$的系数为 0，于是$\dot{p}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}=0$. 这种推导方式不直接。

2. 相空间的哈密顿原理

现在我们已知对真实的物理运动，正则方程成立，所以有

$$\delta S[q]=\int_{t_1}^{t_2}\left(\left(\dot{q}_\alpha-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\right)\delta p_\alpha-\left(\dot{p}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha\right)dt=0$$

引进“虚动量”$p_\alpha(t)$，它是独立变化的可微函数，无需满足运动方程，也无需满足定义式$p_\alpha\stackrel{\text{def}}{=}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_\alpha}$，$\delta p_\alpha(t)$独立于虚位移$\delta q_\alpha(t)$。分别定义相空间的拉氏量和作用量[1]为

$$\Lambda(t,q,p,\dot{q},\dot{p})\stackrel{\text{def}}{=}p_\alpha\dot{q}_\alpha-H(t,q,p)$$
$$S[q,p]\stackrel{\text{def}}{=}\int_{t_1}^{t_2}\Lambda(t,q,p,\dot{q},\dot{p})dt$$

取固定边界条件

$$\delta_H q_\alpha(t_1)=\delta_H q_\alpha(t_2)=0$$

的哈密顿变分（后面省去下标字母 H），真实运动必满足

$$\delta S[q,p]=0$$

称为**相空间的哈密顿原理**（有些文献称之为广义哈密顿原理 Modified Hamilton Principle、Liven 原理）。

相空间的哈密顿原理是独立的、新的第一原理，不是采用广义坐标的哈密顿原理的推论。

---

[1] 这与S$[q]$不是同一个泛函。

3. 相空间的欧拉-拉格朗日方程

记相空间的坐标（即正则变量）为

$$\eta = (q_1, q_2, \cdots, q_n, p_1, p_2, \cdots, p_n)$$

按相空间哈密顿原理，相空间拉氏函数是

$$\Lambda(t, \eta, \dot{\eta}) \stackrel{\text{def}}{=} p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(t, \eta)$$

对应的相空间广义动量是

$$\pi_j = \begin{cases} p_{\alpha=j}, & j = 1,2, \cdots, n; \\ 0, & j = n+1, n+2, \cdots, 2n. \end{cases}$$

相空间广义能量为

$$\pi_j \dot{\eta}_j - \Lambda(t, \eta, \dot{\eta}) = H(t, \eta)$$

与拉格朗日力学中的广义能量相等。

相空间哈密顿原理$\delta S[\eta] = 0$给出的欧拉方程，正好就是哈密顿正则方程：

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial \Lambda}{\partial q_\alpha} = 0 \Rightarrow \dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = 0$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{p}_\alpha} - \frac{\partial \Lambda}{\partial p_\alpha} = 0 \Rightarrow 0 - \left(\dot{q}_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\right) = 0$$

4. 相空间的 VOSS 原理和 MAUPERTUIS 原理

类似地，Voss 原理可以推广到相空间，

$$S[\eta] = \int_{t_1}^{t_2} \Lambda(t, \eta, \dot{\eta}) dt = \int_{t_1}^{t_2} \{p_\alpha \dot{q}_\alpha - H(t, q, p)\} dt$$

$$\Delta S = (p_\alpha \Delta q_\alpha - H \Delta t)\Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left\{\frac{\partial \Lambda}{\partial \eta_j} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{\eta}_j}\right)\right\} \delta \eta_j dt$$

令

$$\Delta t|_{t=t_1,t_2} = 0, \qquad \Delta q_\alpha|_{t=t_1,t_2} = 0$$

真实路径满足

$$\Delta S[\eta] = 0$$

在相空间，对不含时的系统

$$\Lambda=\Lambda(\eta,\dot{\eta})=p_\alpha\dot{q}_\alpha-H(q,p)$$

有恒等式

$$\Delta\int_{t_1}^{t_2}\pi_j\dot{\eta}_j dt\equiv\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial\Lambda}{\partial\eta_j}-\frac{d}{dt}\frac{\partial\Lambda}{\partial\dot{\eta}_j}\right)\Delta\eta_j dt+\int_{t_1}^{t_2}\Delta H dt+\pi_j\Delta\eta_j\Big|_{t_1}^{t_2}$$

在等能变分下，

$$\Delta H=0,\qquad \Delta q_\alpha(t_1)=\Delta q_\alpha(t_2)=0(\alpha=1,2,\cdots,n)$$

真实路径满足相空间的莫培督原理，

$$\Delta\int_{t_1}^{t_2}\pi_j d\eta_j=\Delta\int_{t_1}^{t_2}p_\alpha dq_\alpha=0$$

积分限为坐标或形式参数时成为

$$\delta\int_A^B p_\alpha dq_\alpha=0$$

应用莫培督原理求相空间轨道时，需注意能量守恒

$$H(q,p)=E$$

可消去一个变分。

例：推导有心力场中的粒子的相轨道。

取平面极坐标，

$$H(r,\theta,p_r,p_\theta)=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{1}{r^2}p_\theta^2\right)+V(r)=E$$

以θ为参数，莫培督原理给出

$$\delta\int_A^B(p_r r'+p_\theta)d\theta=0$$

等能约束

$$H(r,\theta,p_r,p_\theta)=E$$

$$p_\theta=\pm r\sqrt{2m[E-V(r)]-p_r^2}$$

代入莫培督原理，

$$\delta\int_A^B\left(p_r r'\pm r\sqrt{2m[E-V(r)]-p_r^2}\right)d\theta=0$$

得到两个欧拉方程，

$$\begin{cases} \pm p_r' = \sqrt{2m[E-V(r)]-p_r^2} - \dfrac{mrV'(r)}{\sqrt{2m[E-V(r)]-p_r^2}} \\ 0 = r' \mp \dfrac{rp_r}{\sqrt{2m[E-V(r)]-p_r^2}} \end{cases}$$

另有广义能量积分，

$$\alpha = \mp r\sqrt{2m[E-V(r)]-p_r^2}$$

$$p_r^2 = 2m[E-V(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2}$$

代入第二个方程，

$$\begin{aligned} r' &= \pm\frac{rp_r}{\sqrt{2m[E-V(r)]-p_r^2}} = -\frac{1}{\alpha}r^2p_r = \pm\frac{1}{\alpha}r^2\sqrt{2m[E-V(r)]-\frac{\alpha^2}{r^2}} \\ &= \pm\frac{1}{\alpha}\sqrt{2mr^4[E-V(r)]-\alpha^2r^2} \end{aligned}$$

$$d\theta = \pm\frac{\alpha dr}{\sqrt{2mr^4[E-V(r)]-\alpha^2r^2}}$$

积分后可用 Lagrange 反演定理解出$r=r(\theta)$，代入广义能量积分求得$p_r(\theta)$，最后代入等能约束$H(r,\theta,p_r,p_\theta)=E$求出$p_\theta(\theta)$，得到相轨道。

5. 相空间的规范项

对于哈密顿原理

$$\delta S[q] = \delta\int_{t_1}^{t_2} L(t,q,\dot{q})dt = 0$$

若采用新的广义坐标$Q_\alpha = Q_\alpha(t,q)$（点变换需要可微且非奇异），新坐标仍然满足一组欧拉方程，拉氏量改变一个函数$\varphi(t,q)$对时间的全微商，不会改变变分和运动方程，

$$L'\left(t,Q,\dot{Q}\right) = L(t,q,\dot{q}) + \frac{df(t,q)}{dt}$$

从相空间的哈密顿原理来看，

$$\delta S[\eta] = \delta\int_{t_1}^{t_2} \Lambda(t,\eta,\dot{\eta})dt = 0$$

不改变变分的前提下，允许相空间的拉氏量相差一个规范项，

$$\Lambda' = \Lambda - dF(t,\eta)/dt$$

这与我们后面讨论的正则变换有关。

6. 相空间的 NOETHER 定理

直接把前面的结果用到相空间中。若作用量S$[\eta]$在无穷小（准）对称变换

$$t' = t + \Delta t$$
$$q'_\alpha(t') = q_\alpha(t) + \Delta q_\alpha(t)$$
$$p'_\alpha(t') = p_\alpha(t) + \Delta p_\alpha(t)$$

下满足（准确到一阶）

$$\delta S(\epsilon) = \delta S(0) + O(\epsilon^2) \Leftrightarrow \Lambda\left(t', \eta'(t'), \frac{d\eta'(t')}{dt'}\right) dt' = \Lambda\left(t, \eta(t), \frac{d\eta(t)}{dt}\right) dt + d\varphi(t, \eta, \epsilon)$$

则

$$-H\Delta t + \pi_j \Delta\eta_j - \Delta\varphi \ = -H\Delta t + p_\alpha \Delta q_\alpha - \Delta\varphi$$

是守恒量。

例 平面谐振子

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2)$$

无穷小变换

$$\Delta t = 0$$

$$\Delta x = -\epsilon y, \qquad \Delta y = \epsilon x$$

$$\Delta p_x = -\epsilon p_y, \qquad \Delta p_y = \epsilon p_x$$

把Λdt变换为

$$\begin{aligned}(\vec{p} + \Delta\vec{p}) \cdot d(\vec{r} + \Delta\vec{r}) - H(\vec{r} + \Delta\vec{r}, \vec{p} + \Delta\vec{p})dt &= \Lambda dt + \vec{p} \cdot \Delta\vec{r} + \Delta\vec{p} \cdot d\vec{r} + O(\epsilon^2) \\ &= \Lambda dt + \left(-\epsilon p_x dy + \epsilon p_y dx\right) + \left(-\epsilon p_y dx + \epsilon p_x dy\right) + O(\epsilon^2) = \Lambda dt + O(\epsilon^2)\end{aligned}$$

是对称变换，守恒量为$L_z = xp_y - yp_x$。

例 引力场中的粒子，

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\alpha}{r}$$

$$\Lambda = \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} - H = \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} - \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\alpha}{r}$$

在变换

$$\Delta t = 0$$

$$\Delta\vec{r} = \delta\vec{r} = 2(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{p} - (\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})\vec{r} - (\vec{p}\cdot\vec{r})\vec{\epsilon}$$

$$\Delta\vec{p} = \delta\vec{p} = \left(\frac{m\alpha}{r} - \vec{p}^2\right)\vec{\epsilon} - \frac{m\alpha}{r^3}(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{r} + (\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})\vec{p}$$

下有

$$\begin{aligned}\{\vec{p}'\cdot\dot{\vec{r}}' - H(t',\vec{r}',\vec{p}')\}dt' &= \vec{p}'\cdot d\vec{r}' - H(t,\vec{r}',\vec{p}')dt \\ &= \{\vec{p}\cdot\dot{\vec{r}} - H\}dt + \vec{p}\cdot d\delta\vec{r} + \delta\vec{p}\cdot d\vec{r} - \left(\frac{\partial H}{\partial\vec{r}}\cdot\delta\vec{r} + \frac{\partial H}{\partial\vec{p}}\cdot\delta\vec{p}\right)dt \\ &= \{\vec{p}\cdot\dot{\vec{r}} - H\}dt + d\left\{(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{p}^2 - (\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})(\vec{p}\cdot\vec{r}) + \frac{m\alpha}{r}(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\right\}\end{aligned}$$

$$\varphi = (\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{p}^2 - (\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})(\vec{p}\cdot\vec{r}) + \frac{m\alpha}{r}(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})$$

是准对称变换，并且

$$-H\Delta t + \vec{p}\cdot\Delta\vec{r} - \Delta\varphi = (\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{p}^2 - (\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})(\vec{p}\cdot\vec{r}) - \frac{m\alpha}{r}(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \vec{\epsilon}\cdot\vec{A}$$

即拉普拉斯-龙格-楞次(Laplace-Runge-Lenz)矢量

$$\vec{A} = \vec{p}^2\vec{r} - (\vec{p}\cdot\vec{r})\vec{p} - m\alpha\frac{\vec{r}}{r} = \vec{p}\times\vec{L} - m\alpha\frac{\vec{r}}{r}$$

是守恒量。

注：这个守恒量最早是 1799 年 Laplace 从 Newton 方程推出，

$$\vec{F}_r = \frac{d\vec{p}}{dt}, \qquad \vec{F}_r = -\frac{\alpha}{r^2}\frac{\vec{r}}{r}$$

$$\vec{F}_r\times\vec{L} = \frac{d\vec{p}}{dt}\times\vec{L}$$

利用角动量$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$守恒，

$$\frac{d\vec{p}}{dt}\times\vec{L} = \frac{d}{dt}(\vec{p}\times\vec{L})$$

于是

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\vec{p}\times\vec{L}) = \vec{F}_r\times\vec{L} = F_r\frac{\vec{r}}{r}\times(\vec{r}\times m\dot{\vec{r}}) = mF_r\{\dot{r}\vec{r} - r\dot{\vec{r}}\} = -mF_r r^2\frac{d}{dt}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) = m\alpha\frac{d}{dt}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) \\ \Rightarrow \frac{d}{dt}\left\{\vec{p}\times\vec{L} - m\alpha\frac{\vec{r}}{r}\right\} = \vec{0}\end{aligned}$$

利用可很方便地求得轨道方程：轨道平面的法向为角动量$\vec{L}$，由于$\vec{A}\cdot\vec{L} = 0$，所以$\vec{A}$在轨道平面内，取为平面极坐标系的极轴，

$$\vec{r}\cdot\vec{A}=Ar\cos\theta=L^2-m\alpha r\Rightarrow r=\frac{\frac{L^2}{m\alpha}}{1+\frac{A}{m\alpha}\cos\theta}$$

三、 POISSON 代数

1. 引入 POISSON BRACKET

考虑物理量$f(t,q,p)$随时间的变化，

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha\xrightarrow{\text{正则方程}}\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$$

引进记号

$$[f,H]_{q,p}\stackrel{\text{def}}{=}\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}$$

于是

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+[f,H]_{q,p}$$

一般的泊松括号（Siméon Denis Poisson）定义为

$$[f,g]_{q,p}\stackrel{\text{def}}{=}\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}\frac{\partial g}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial g}{\partial q_\alpha}\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}$$

不同文献中的定义可能差一个负号。下标q,p可以略去。

泊松定理 1 物理量$A(t,q,p)$守恒的等价条件是

$$\frac{\partial A}{\partial t}+[A,H]=0$$

推论 如果

$$\frac{\partial A}{\partial t}+[A,H]=f(t)$$

则$A-\int f(t)dt$是守恒量。

2. 运算规则

设A,B,C是任意力学量，$\alpha,\beta\in\mathbf{R}$，有

（1）双线性和分配律

$$[A, \alpha B+\beta C]=\alpha[A, B]+\beta[A, C]$$

$$[\alpha A+\beta B, C]=\alpha[A, C]+\beta[B, C]$$

（2）反对称、幂零

$$[A, B]=-[A, B] \Leftrightarrow [A, A]=0$$

（3）雅可比恒等式

$$\big[A,[B, C]\big]+\big[C,[A, B]\big]+\big[B,[C, A]\big]=0$$

（4）Leibniz 规则（或乘积规则）

$$[AB, C]=A[B, C]+[A, C]B$$

$$[A, BC]=[A, B]C+B[A, C]$$

满足以上四条规则的力学量全体和二元运算，构成**泊松代数**。

基本性质：

（1） 基本泊松括号

$$\big[q_\alpha, p_\beta\big]=\delta_{\alpha\beta}, \qquad \big[q_\alpha, q_\beta\big]=0, \qquad \big[p_\alpha, p_\beta\big]=0$$

（2） 物理量与坐标、动量的泊松括号（偏导）

$$[q_\alpha, f(q, p, t)]=\frac{\partial f}{\partial p_\alpha}$$

$$[p_\alpha, f(q, p, t)]=-\frac{\partial f}{\partial q_\alpha}$$

例 中心势场中的粒子，

$$H=\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(r)$$

利用泊松括号验证角动量$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$是守恒量。

证明 把角动量写成分量形式，

$$L_j=\varepsilon_{jkl} r_k p_l$$

再计算得

$$[L_j, H] = \varepsilon_{jkl}\left[r_k p_l, \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)\right] = \frac{1}{2m}\varepsilon_{jkl}[r_k p_l, \vec{p}^2] + \varepsilon_{jkl}[r_k p_l, V(r)]$$
$$= \frac{1}{2m}\varepsilon_{jkl}[r_k, \vec{p}^2]p_l + \varepsilon_{jkl}r_k[p_l, V(r)] = \frac{1}{2m}\varepsilon_{jkl}\cdot 2p_k p_l + \varepsilon_{jkl}r_k\left(-\frac{dV(r)}{dr}\frac{r_l}{r}\right) = 0$$

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{\partial\vec{L}}{\partial t} + [\vec{L}, H] = 0$$

泊松定理 2 两个守恒量的泊松括号仍然是守恒量。

证明：设f和g守恒，

$$\frac{df}{dt} = \frac{dg}{dt} = 0$$

计算得

$$\frac{d}{dt}[f,g] = \frac{\partial}{\partial t}[f,g] + [[f,g],H] = \left[\frac{\partial f}{\partial t}, g\right] + \left[f, \frac{\partial g}{\partial t}\right] + [[f,g],H]$$
$$= \left[\frac{df}{dt}, g\right] + \left[f, \frac{dg}{dt}\right] - [[f,H],g] - [f,[g,H]] + [[f,g],H]$$
$$= \left[\frac{df}{dt}, g\right] + \left[f, \frac{dg}{dt}\right] - [[f,H],g] - [[H,g],f] - [[g,f],H] = \left[\frac{df}{dt}, g\right] + \left[f, \frac{dg}{dt}\right] = 0$$

$[f,g]$也是守恒量。

例 $L_x = yp_z - zp_y, L_y = zp_x - xp_z$守恒，可得

$$[L_x, L_y] = \cdots = L_z$$

也是守恒量。

Poisson 定理不会给出无穷多的守恒量，一般在几步后会封闭。

推论 一个哈密顿系统的所有独立守恒量（线性无关）$\{I_j | j = 1,2,\cdots,N\}$,g 构成一个封闭的李代数，

$$[I_j, I_k] = c_{jk}^{\ \ l} I_l$$

3. 利用泊松括号求解力学量

利用 Poisson 括号，哈密顿方程可以写成

$$\dot{q}_\alpha = [q_\alpha, H], \qquad \dot{p}_\alpha = [p_\alpha, H].$$

对一般的力学量

$$\frac{dA}{dt}=\frac{\partial A}{\partial t}+[A,H]$$

这提供了一种无需求解哈密顿方程，直接求力学量的方法。

例 抛物运动$H=\frac{1}{2m}\vec{p}^2-mgz$，求运动规律$\vec{r}(t)=\vec{r}(t)$.

解：求泊松括号，可得

$$\dot{x}=[x,H]=\frac{p_x}{m},\ddot{x}=[\dot{x},H]=0\Longrightarrow x(t)=x_0+\frac{p_{x0}}{m}t$$

$$\dot{y}=[y,H]=\frac{p_y}{m},\ddot{y}=[\dot{y},H]=0\Longrightarrow y(t)=y_0+\frac{p_{y0}}{m}t$$

$$\dot{z}=[z,H]=\frac{p_z}{m},\ddot{z}=[\dot{z},H]=g\Longrightarrow z(t)=z_0+\frac{p_{z0}}{m}t+\frac{1}{2}gt^2.$$

例 求谐振子问题中，

$$H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}kx^2$$

求力学量

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{m\omega}x+i\frac{p}{\sqrt{m\omega}}\right),\qquad a^*=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{m\omega}x-i\frac{p}{\sqrt{m\omega}}\right)$$

满足的微分方程，并求解。

解：

$$x=\frac{1}{\sqrt{2m\omega}}(a^*+a),\qquad p=i\sqrt{\frac{m\omega}{2}}(a^*-a)$$

$$H=-\frac{\omega}{4}(a^*-a)^2+\frac{\omega}{4}(a^*+a)^2=\omega a^*a$$

$$[a,a^*]=\frac{1}{2}\left[\sqrt{m\omega}x+i\frac{p}{\sqrt{m\omega}},\sqrt{m\omega}x-i\frac{p}{\sqrt{m\omega}}\right]=-i$$

$$\frac{da}{dt}=[a,H]=-i\omega a\Longrightarrow a(t)=a_0e^{-i\omega t}$$

$$\frac{da^*}{dt}=[a^*,H]=i\omega a^*\Longrightarrow a^*(t)=a_0^*e^{i\omega t}$$

例 拉莫进动

原子核外电子的拉氏量和磁矩为

$$H=\frac{\vec{p}^2}{2m_e}+V(r)-\vec{\mu}\cdot\vec{B}+\frac{e^2}{8m_e}\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)^2$$

$$\vec{\mu}=\frac{e}{2m_e}\vec{L}$$

磁矩的运动方程为

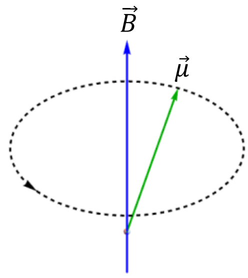
$$\frac{d\vec{\mu}}{dt}=[\vec{\mu},H]=\left[\vec{\mu},-\vec{\mu}\cdot\vec{B}+\frac{e^2}{8m_e}\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)^2\right]\approx[\vec{\mu},-\vec{\mu}\cdot\vec{B}]=-\left(\frac{e}{2m_e}\right)^2\vec{B}\times\vec{L}=\frac{e}{2m_e}\vec{B}\times\vec{\mu}$$

写成矩阵形式，

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt}=\frac{e}{2m_e}(\vec{B}\cdot\vec{X})\vec{\mu}$$

解出

$$\vec{\mu}=\exp\left(t\frac{e\vec{B}}{2m}\cdot\vec{X}\right)\vec{\mu}_0=R(\vec{\omega}t)\vec{\mu}_0$$



即电子磁矩在外磁场中匀速进动（Larmor precession），进动角速度为

$$\vec{\omega}=\frac{e\vec{B}}{2m_e}$$

4. 时间演化算符*

考虑函数的平移

$$f(t)\to f(t+\tau)$$

展开为幂级数

$$f(t+\tau)=f(t)+\frac{df}{dt}\tau+\frac{1}{2!}\frac{d^2f}{dt^2}\tau^2+\cdots=e^{\tau\frac{d}{dt}}f(t)$$

在哈密顿系统中，

$$\frac{d}{dt}=\frac{\partial}{\partial t}+[\cdot,H]$$

定义线性变换算子（伴随表示）

$$\widehat{H}=[\cdot,H]$$

则对对自治系统$H=H(q,p)$，任意力学量$A(t,q,p)$满足

$$A\big(t+\tau,q(t+\tau),p(t+\tau)\big)=\exp\left\{\tau\left(\frac{\partial}{\partial t}+\widehat{H}\right)\right\}A\big(t,q(t),p(t)\big)$$

不含时的物理量$A(q,p)$的时间演化为

$$A\big(q(t+\tau),p(t+\tau)\big)=\exp\{\tau\hat{H}\}A\big(q(t),p(t)\big)$$

$\exp\{\tau\hat{H}\},\exp\{\tau(\partial/\partial t+\hat{H})\}$称为**时间演化算符**。

例 一维谐振子

解：

$$H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}kx^2$$

$$\hat{H}x=[x,H]=\frac{p}{m},\qquad \hat{H}^2x=\frac{1}{m}\hat{H}p=-\frac{k}{m}x$$

$$\hat{H}^{2n}x=\left(-\frac{k}{m}\right)^n x,\qquad \hat{H}^{2n+1}x=\hat{H}\hat{H}^{2n}x=\left(-\frac{k}{m}\right)^n\hat{H}x=\left(-\frac{k}{m}\right)^n\frac{p}{m}$$

$$x(t)=x_0+\frac{p_0}{m}t-\frac{1}{2!}\frac{k}{m}x_0t^2-\frac{1}{3!}\frac{k}{m}\frac{p_0}{m}t^3+\frac{1}{4!}\left(\frac{k}{m}\right)^2x_0t^4-\cdots=x_0\cos\omega t+\frac{p_0}{m\omega}\sin\omega t$$

其中

$$\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$$

5. 力学量的变换*

可用泊松括号表示。

例 两维平面上的平移和旋转

$$e^{\hat{p}_xa+\hat{p}_yb}f(x,y)=f(x+a,y+b)$$

$$\hat{p}_xf\stackrel{\text{def}}{=}[f,p_x]$$

6. 正则量子化

只要把泊松括号替换为量子对易关系

$$[\hat{A},\hat{B}]\stackrel{\text{def}}{=}\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$$

$$[A,B]_{PB}\rightarrow\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{B}]$$

于是基本对易关系替换为

$$[q_\alpha,p_\beta]_{PB}=\delta_{\alpha\beta},\qquad [q_\alpha,q_\beta]_{PB}=[p_\alpha,p_\beta]_{PB}=0$$

$$\to \left[\hat{q}_\alpha, \hat{p}_\beta\right]_{PB} = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \qquad \left[\hat{q}_\alpha, \hat{q}_\beta\right]_{PB} = \left[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta\right]_{PB} = 0$$

正则方程成为量子理论中的海森堡方程

$$\frac{d\hat{q}_\alpha}{dt} = \left[\hat{q}_\alpha, \hat{H}\right], \qquad \frac{d\hat{p}_\alpha}{dt} = \left[\hat{p}_\alpha, \hat{H}\right]$$

这样就从经典力学理论过渡到量子力学理论——海森堡矩阵力学。

在经典理论和量子理论中，虽然对易子的定义不同，但是基本运算规则（即代数）是完全一致的。

四、 正则变换的辛条件

1. 正则变换的定义

为了寻找化简运动方程或寻找首次积分，需要对正则方程进行变量代换，同时希望保留正则方程的对称形式。

可微的相空间点变换为

$$Q_\alpha = Q_\alpha(t, q, p), \qquad P_\alpha = P_\alpha(t, q, p),$$

如果对任何哈密顿系统

$$H = H(t, q, p)$$

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \qquad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$$

都存在新的哈密顿函数$K = K(t, Q, P)$，使得

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial K}{\partial P_\alpha}, \qquad \dot{P}_\alpha = -\frac{\partial K}{\partial Q_\alpha}$$

这样的变换称为**正则变换**（canonical transformation）。

不含时的正则变换，称为**受限正则变换**（ restricted canonical transformation）。

注：按定义，一个变换是否正则变换，与哈密顿函数的具体形式无关。

例 尺度变换

$$Q_\alpha(t) = c(t)q_\alpha(t), \qquad P_\alpha(t) = \frac{1}{c(t)}p_\alpha(t), \qquad \alpha = 1,2,\cdots,s$$

是正则变换。其中$c(t)$是可微非零函数。

证明 设原正则变量的哈密顿函数为$H(t,q,p)$，那么新正则变量满足

$$\dot{Q}_\alpha = c\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} + \dot{c}q_\alpha$$

$$\dot{P}_\alpha = -\frac{1}{c}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} - \frac{\dot{c}}{c^2}p_\alpha$$

这是哈密顿函数

$$K(t,Q,P) \stackrel{\text{def}}{=} H\left(t,\frac{Q}{c},cP\right) + \frac{\dot{c}}{c}Q_\alpha P_\alpha$$

对应的哈密顿方程。

例 不含时的坐标变换

$$Q_\alpha = Q_\alpha(q)$$

这时

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta \stackrel{\text{def}}{=} A_{\alpha\beta}\dot{q}_\beta, \qquad \dot{Q} = A\dot{q}$$

拉氏函数不变，动量变换为

$$P_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta}\frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{Q}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta}A^{-1}_{\beta\alpha} = A^{-1}_{\beta\alpha}p_\beta, \qquad P = (A^{-1})^T p$$

同时哈密顿函数成为

$$K(t,Q,P) = P_\alpha \dot{Q}_\alpha - L(t,q,\dot{q}) = p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(t,q,\dot{q}) = H(t,q,p) = H\big(t,q(Q),A^T\big(q(Q)\big)P\big)$$

则新的哈密顿方程成立，

$$\dot{Q} = A\dot{q} = \frac{\partial K}{\partial P}$$

$$\dot{P} = \frac{d}{dt}\{(A^{-1})^T p\} = -\frac{\partial K}{\partial Q}$$

直接利用定义判断是否为正则变换，需要构造哈密顿量，不方便应用。

2. 正则方程的辛形式

正则变换保持运动方程的正则形式，

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

方程可写成

$$\begin{pmatrix}\dot{q}\\ \dot{p}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbf{0} & \mathbf{1}\\ -\mathbf{1} & \mathbf{0}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\partial H/\partial q\\ \partial H/\partial p\end{pmatrix}$$

记

$$J\stackrel{\text{def}}{=}\begin{pmatrix}\mathbf{0}_{s\times s} & \mathbf{1}_{s\times s}\\ -\mathbf{1}_{s\times s} & \mathbf{0}_{s\times s}\end{pmatrix},\ \ \nabla_\eta H=\frac{\partial H}{\partial \eta}=\begin{pmatrix}\partial H/\partial q\\ \partial H/\partial p\end{pmatrix}$$

正则方程成为

$$\dot{\eta}=J\frac{\partial H}{\partial \eta}$$

$$\dot{\eta}=J\nabla_\eta H.$$

这里的辛单位矩阵J（symplectic identity）满足

$$J^2=-\mathbf{1},\qquad J^T=-J,\qquad \det J=1$$

在此记号下，泊松括号可写成

$$[A,B]_\eta=[A,B]_{q,p}=\frac{\partial A}{\partial q_\alpha}\frac{\partial B}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial A}{\partial q_\alpha}\frac{\partial B}{\partial p_\alpha}\equiv J_{lm}\frac{\partial A}{\partial \eta_l}\frac{\partial A}{\partial \eta_m}=\left(\nabla_\eta A\right)^T J\left(\nabla_\eta A\right)$$

$$\left[\eta_j,\eta_k\right]=J_{jk}$$

3. 自治系统的辛变换

对任意的自治系统

$$H=H(\eta)$$

在不含时的变换$\xi=\xi(\eta)$之下，有

$$\dot{\xi}=\frac{\partial \xi}{\partial \eta}\dot{\eta}\stackrel{\text{def}}{=}M\dot{\eta}=MJ\nabla_\eta H(\eta)=MJM^T\nabla_\xi H\big(\eta(\xi)\big)$$

其中M为雅可比矩阵。

如果雅可比矩阵为**辛矩阵**（symplectic matrix），

$$MJM^T=J$$

则可以令

$$K(\xi)\stackrel{\text{def}}{=}H\big(\eta(\xi)\big)$$

那么有正则方程

$$\dot{\xi} = J\nabla_{\xi}K(\xi)$$

雅可比矩阵是辛矩阵的变换称为**辛变换**。

推论 自治系统的不含时辛变换是正则变换。

4. 辛矩阵的性质

定理：

（1）辛矩阵的乘法封闭，两个辛矩阵的乘积仍是辛矩阵。

（2）辛矩阵的乘法满足结合律。

（3）单位矩阵是辛矩阵。

（4）任意辛矩阵的逆矩阵仍是辛矩阵。

即辛矩阵构成成群，称为实辛群（symplectic group）

$$Sp(2s, \mathbf{R}) \overset{\text{def}}{=} \{M | MJM^T = J, M \in M(2s, \mathbf{R})\}$$

推论 $MJM^T = J \Leftrightarrow M^TJM = J.$

证明

$$MJM^T = J \overset{\cdot(M^T)^{-1}}{\Longleftrightarrow} MJ = J(M^T)^{-1} \overset{J\cdots(-J)}{\Longleftrightarrow} JM = (M^T)^{-1}J \overset{\text{transpose}, J^T=-J}{\Longleftrightarrow} M^TJ = JM^{-1} \overset{\cdot M}{\Leftrightarrow} M^TJM = J.$$

推论 $MJM^T = J \Longrightarrow \det M = 1$

证明 为了求行列式，利用恒等式

$$\varepsilon_{a_1\cdots a_{2s}} \det M = \sum_{b_1\cdots b_{2s}} M_{a_1b_1} \cdots M_{a_{2s}b_{2s}} \varepsilon_{b_1\cdots b_{2s}}$$

两边同乘以$J_{a_1a_{s+1}} \cdots J_{a_la_{2s}}$，求和得

$$\begin{aligned}
&\det M \sum_{a_1,\cdots,a_{2s}} \varepsilon_{a_1\cdots a_{2s}} J_{a_1a_{s+1}} \cdots J_{a_sa_{2s}} \\
&= \sum_{a_1,\cdots,a_{2s}} J_{a_1a_{s+1}} \cdots J_{a_sa_{2s}} \sum_{b_1\cdots b_{2s}} M_{a_1b_1} \cdots M_{a_{2s}b_{2s}} \varepsilon_{b_1\cdots b_{2s}} \\
&= \sum_{b_1,\cdots,b_{2s}} \varepsilon_{b_1\cdots b_{2s}} \left(J_{a_1a_{s+1}} M_{a_1b_1} M_{a_{s+1}b_{s+1}}\right) \cdots \left(J_{a_sa_{2s}} M_{a_sb_s} M_{a_{2s}b_{2s}}\right)
\end{aligned}$$

$$= \sum_{b_1 \cdots b_{2s}} \varepsilon_{b_1 \cdots b_{2s}} (M^T J M)_{b_1 b_{s+1}} \cdots (M^T J M)_{b_s b_{2s}} = \sum_{b_1 \cdots b_{2s}} \varepsilon_{b_1 \cdots b_{2s}} J_{b_1 b_{s+1}} \cdots J_{b_s b_{2s}}$$

又由于[2]

$$\sum_{a_1, \cdots, a_{2s}} \varepsilon_{a_1 \cdots a_{2s}} J_{a_1 a_{s+1}} \cdots J_{a_s a_{2s}} \neq 0$$

所以

$$\det M = 1.$$

此推论的逆定理一般来说不成立。

推论：对 1 自由度的系统（相空间为 2 维），$MJM^T = J \Leftrightarrow \det M = 1$

5. 正则变换的辛条件

定理 哈密顿系统的正则变换都是辛变换[3]。

证明

Step 1 在正则变换$\xi = \xi(t, \eta)$下，

$$\forall H(t, \eta), \exists K(t, \xi), \hookrightarrow \dot{\xi} = J \nabla_\xi K$$

新的正则变量还满足

$$\dot{\xi} = \frac{\partial \xi}{\partial t} + M \dot{\eta} = \frac{\partial \xi}{\partial t} + M J \nabla_\eta H$$

相减得

---

[2] 可以证明

$$\sum_{a_1, \cdots, a_{2s}} \varepsilon_{a_1 \cdots a_{2s}} J_{a_1 a_{s+1}} \cdots J_{a_s a_{2s}} = 2^s s!$$

上式中的求和项当$(a_1, a_2, \cdots, a_{2s}) = (1,2, \cdots, 2s)$时为 1；其余非零项是通过交换$J$的一对下标或者重排$\{(a_1, a_{s+1}), (a_2, a_{s+2}), \cdots, (a_s, a_{2s})\}$而得，有$2^s s!$项，均为 1。

[3] M.S. Lie, *Störungstheorie und die Berührungstransormationen der Mechanik*, Leipzig, 1889.

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = J\nabla_\xi K - MJ\nabla_\eta H$$

此变换对任意正则函数$H(t,\eta)$成立，比如取特例

$$H(t,\eta) = 0$$

则必存在函数$K_0(t,\xi)$，使得

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = J\nabla_\xi K_0 - 0$$

从而

$$J\nabla_\xi K_0 = J\nabla_\xi K - MJ\nabla_\eta H$$

$$\nabla_\xi (K - K_0) = -JMJ\nabla_\eta H = -JMJM^T\nabla_\xi H\big(t,\eta(t,\xi)\big)$$

左边是函数的梯度，所以无旋，于是右式也无旋。记

$$A \stackrel{\text{def}}{=} -JMJM^T$$

再由H的任意性，对任何正则函数$\widetilde{H}(t,\xi) \stackrel{\text{def}}{=} H\big(t,\eta(t,\xi)\big)$，$A\nabla_\xi \widetilde{H}(t,\xi)$无旋，

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i}\left(A_{jk}\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \xi_k}\right) = \frac{\partial}{\partial \xi_j}\left(A_{ik}\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \xi_k}\right)$$

上面的推导步骤可逆，上式是正则变换的等价条件。

Step 2　由上式，我们进一步可以证明A一定正比于单位矩阵。

取$\widetilde{H} = \xi_m$知

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i}A_{jm} = \frac{\partial}{\partial \xi_j}A_{im}, \qquad \forall i,j,m$$

再另取$\widetilde{H} = \frac{1}{2}\xi_m^2$知

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i}\big(A_{jm}\xi_m\big) = \frac{\partial}{\partial \xi_j}(A_{im}\xi_m), \qquad \forall i,j,m.\ (m\text{不求和})$$

把前一式子代入上式，得

$$A_{jm}\delta_{im} = A_{im}\delta_{jm}\quad (m\text{不求和})$$

考虑$m = j \neq i$的情形，得出$A_{ij} = 0$，从而只有对角元非零，

$$A_{ij} = a_i\delta_{ij}$$

代入前面的结果

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i}A_{jm} = \frac{\partial}{\partial \xi_j}A_{im} \xrightarrow{\text{取}m=i\neq j} \frac{\partial a_i}{\partial \xi_j} = 0, for\ i \neq j \Longrightarrow a_i = a_i(t,\xi_i)$$

最后把A代回

$$\frac{\partial}{\partial\xi_i}\left(A_{jk}\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\xi_k}\right)=\frac{\partial}{\partial\xi_j}\left(A_{ik}\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\xi_k}\right)\Longrightarrow\frac{\partial}{\partial\xi_i}\left(a_j\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\xi_j}\right)=\frac{\partial}{\partial\xi_j}\left(a_i\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\xi_k}\right)\xrightarrow{\text{取}i\neq j}a_j\frac{\partial}{\partial\xi_i}\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\xi_j}=a_i\frac{\partial}{\partial\xi_j}\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\xi_k}\Longrightarrow a_j=a_i, for\ i\neq j$$

总之

$$A=a(t)\mathbf{1}，\ JMJM^T=a(t)\mathbf{1}$$

逆命题显然成立，这个等式也是正则变换的等价条件。

Step 3 最后再利用正则方程，

$$\frac{\partial\xi}{\partial t}=J\nabla_\xi K_0\Longrightarrow\frac{\partial}{\partial\xi_k}\frac{\partial\xi_j\big(t,\eta(t,\xi)\big)}{\partial t}=J_{jl}\frac{\partial^2K_0}{\partial\xi_l\partial\xi_k}\xRightarrow{J\cdot\text{,转置}}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial t}\right)^TJ+J\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial t}\right)=\mathbf{0}$$

又

$$\frac{\partial}{\partial\xi_k}\frac{\partial\xi_j\big(t,\eta(t,\xi)\big)}{\partial t}=\frac{\partial^2\xi_j\big(t,\eta(t,\xi)\big)}{\partial t\partial\eta_l}\frac{\partial\eta_l}{\partial\xi_k}=\left(\frac{\partial M}{\partial t}M^{-1}\right)_{jk}\Longrightarrow\left(\frac{\partial M}{\partial t}M^{-1}\right)^TJ+J\left(\frac{\partial M}{\partial t}M^{-1}\right)=\mathbf{0}$$
$$\Longleftrightarrow\frac{d}{dt}(M^TJM)=0$$

利用之前的结论，

$$\left.\begin{array}{r}JMJM^T=a(t)\mathbf{1}\Longleftrightarrow MJM^T=a(t)J\Longleftrightarrow M^TJM=a(t)J\\ \dfrac{d}{dt}(M^TJM)=\mathbf{0}\end{array}\right\}\Longrightarrow M^TJM=aJ$$

若不考虑**扩展正则变换**，令$a=1$，则有

$$M^TJM=J$$

注：扩展正则变换不提供新的物理或几何内容。只要定义

$$P'_\alpha=\frac{1}{a}P_\alpha,\qquad Q'_\alpha=Q_\alpha,\qquad K'=\frac{1}{a}K$$
$$\Longrightarrow\dot{Q}'_\alpha=\frac{\partial K'}{\partial P'_\alpha},\qquad\dot{P}'_\alpha=-\frac{\partial K'}{\partial Q'_\alpha}$$

即可消去辛条件中的因子a，

$$M\overset{\text{def}}{=}\begin{pmatrix}A&B\\C&D\end{pmatrix}\to M'=\begin{pmatrix}A&\frac{1}{a}B\\C&\frac{1}{a}D\end{pmatrix}$$

$$MJM^T=\begin{pmatrix}A&B\\C&D\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{0}&\mathbf{1}\\-\mathbf{1}&\mathbf{0}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A^T&C^T\\B^T&D^T\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}AB^T-BA^T&AD^T-BC^T\\CB^T-DA^T&CD^T-DC^T\end{pmatrix}=aJ$$

$$M'JM'^T=\frac{1}{a}MJM^T=J$$

我们后面所说的正则变换，不再包括**扩展正则变换**（extended canonical transformation）。

定理 辛变换是正则变换。

证明 设变换$\xi(t,\eta)$的雅可比矩阵$M=\frac{\partial\xi}{\partial\eta}$是辛矩阵，$MJM^T=J$，则

$$\dot{\xi}=\partial_t\xi+\frac{\partial\xi}{\partial\eta}\dot{\eta}=\partial_t\xi+MJ\frac{\partial H}{\partial\eta}=\partial_t\xi+MJM^T\frac{\partial H}{\partial\xi}=\partial_t\xi+J\frac{\partial H}{\partial\xi}=J\left(-J\partial_t\xi+\frac{\partial H}{\partial\xi}\right)\overset{\text{def}}{=}JZ$$

计算旋度，

$$\nabla_\xi\times Z\sim\frac{\partial}{\partial\xi_k}Z_j-\frac{\partial}{\partial\xi_j}Z_k=\frac{\partial}{\partial\xi_k}(-J\partial_t\xi)_j-\frac{\partial}{\partial\xi_j}(-J\partial_t\xi)_k$$

$$\frac{\partial(\partial_t\xi_l)}{\partial\xi_k}=\frac{\partial\left(\partial_t\xi_l\big(t,\eta(t,\xi)\big)\right)}{\partial\xi_k}=\frac{\partial^2\xi_l}{\partial t\partial\eta_m}\frac{\partial\eta_m}{\partial\xi_k}=(\partial_tM_{lm})M_{mk}^{-1}$$

$$\frac{\partial(J\partial_t\xi)}{\partial\xi}=J(\partial_tM)M^{-1}$$

$$\nabla_\xi\times Z=-J(\partial_tM)M^{-1}-\{-J(\partial_tM)M^{-1}\}^T=\{J(\partial_tM)M^{-1}\}^T-J(\partial_tM)M^{-1}$$

$$\begin{aligned}M^TJM=J\overset{\partial/\partial t}{\Longrightarrow}(\partial_tM^T)JM+M^TJ(\partial_tM)=\mathbf{0}\overset{\text{移项}}{\Longleftrightarrow}M^TJ(\partial_tM)=-(\partial_tM^T)JM\xLeftrightarrow{(M^T)^{-1}\cdots M^{-1}}J(\partial_tM)M^{-1}\\=-(M^{-1})^T(\partial_tM^T)J=(J(\partial_tM)M^{-1})^T\end{aligned}$$

于是

$$\nabla_\xi\times Z=\vec{0}$$

Z无旋，存在函数$K(t,\xi)$，使得

$$Z=\nabla_\xi K,\qquad \dot{\xi}=JZ=J\nabla_\xi K$$

仍保持正则方程的形式。

推论：在受限正则变换下，哈密顿量不变。

证明：

$$
\left.\begin{array}{r}
\left.\begin{array}{r}
\left.\begin{array}{r}
\xi=\xi(\eta), M \stackrel{\text{def}}{=} \dfrac{\partial \xi}{\partial \eta} \Rightarrow \dot{\xi}=M\dot{\eta} \\
\dot{\eta}=J\dfrac{\partial H}{\partial \eta}
\end{array}\right\} \Rightarrow \dot{\xi}=MJ\dfrac{\partial H}{\partial \eta}=MJM^{T}\dfrac{\partial H}{\partial \xi} \\
\text{正则变换} \Rightarrow MJM^{T}=J
\end{array}\right\} \Rightarrow \dot{\xi}=J\dfrac{\partial H}{\partial \xi} \\
\dot{\xi}=J\dfrac{\partial K}{\partial \xi}
\end{array}\right\} \Rightarrow K=H
$$

6. 泊松括号是正则变换的不变量

定理 辛变换⟺基本泊松括号不变。

证明 由 Lie 定理，正则变换等价于雅可比矩阵为辛矩阵，

$$M^{T}JM=J \Leftrightarrow MJM^{T}=J$$

由于

$$M=\frac{\partial(Q_{\alpha},P_{\alpha'})}{\partial(q_{\beta},p_{\beta'})}=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial Q_{\alpha}}{\partial q_{\beta}} & \dfrac{\partial Q_{\alpha}}{\partial p_{\beta'}} \\ \dfrac{\partial P_{\alpha'}}{\partial q_{\beta}} & \dfrac{\partial P_{\alpha'}}{\partial p_{\beta'}}\end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix}A_{\alpha\beta} & B_{\alpha\beta'} \\ C_{\alpha'\beta} & D_{\alpha'\beta'}\end{pmatrix}$$

$$MJM^{T}=\begin{pmatrix}AB^{T}-BA^{T} & AD^{T}-BC^{T} \\ CB^{T}-DA^{T} & CD^{T}-DC^{T}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial Q_{\alpha}}{\partial q_{\gamma}}\dfrac{\partial Q_{\beta}}{\partial p_{\gamma}}-\dfrac{\partial Q_{\beta}}{\partial q_{\gamma}}\dfrac{\partial Q_{\alpha}}{\partial p_{\gamma}} & \dfrac{\partial Q_{\alpha}}{\partial q_{\gamma}}\dfrac{\partial P_{\beta'}}{\partial p_{\gamma}}-\dfrac{\partial P_{\beta'}}{\partial q_{\gamma}}\dfrac{\partial Q_{\alpha}}{\partial p_{\gamma}} \\ \dfrac{\partial P_{\alpha'}}{\partial q_{\gamma}}\dfrac{\partial Q_{\beta}}{\partial p_{\gamma}}-\dfrac{\partial Q_{\beta}}{\partial q_{\gamma}}\dfrac{\partial P_{\alpha'}}{\partial p_{\gamma}} & \dfrac{\partial P_{\alpha'}}{\partial q_{\gamma}}\dfrac{\partial P_{\beta'}}{\partial p_{\gamma}}-\dfrac{\partial P_{\beta'}}{\partial q_{\gamma}}\dfrac{\partial P_{\alpha'}}{\partial p_{\gamma}}\end{pmatrix}$$

即

$$\begin{pmatrix}[Q_{\alpha},Q_{\beta}]_{q,p} & [Q_{\alpha},P_{\beta'}]_{q,p} \\ [P_{\alpha'},Q_{\beta}]_{q,p} & [P_{\alpha'},P_{\beta'}]_{q,p}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & \delta_{\alpha\beta'} \\ -\delta_{\alpha'\beta} & 0\end{pmatrix}$$

推论 Poisson 括号在正则变换下不变。

证明

$$[f,g]_{\eta}=[f,g]_{q,p}=\frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}}\frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}}-\frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}}\frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial \eta}\right)^{T} J\left(\frac{\partial g}{\partial \eta}\right)$$

$$[f,g]_\zeta=[f,g]_{Q,P}=\left(\frac{\partial f}{\partial \zeta}\right)^T J\left(\frac{\partial g}{\partial \zeta}\right)=\frac{\partial f}{\partial \zeta_j}J_{jk}\frac{\partial g}{\partial \zeta_k}=\frac{\partial f}{\partial \eta_l}\frac{\partial \eta_l}{\partial \zeta_j}J_{jk}\frac{\partial g}{\partial \eta_m}\frac{\partial \eta_m}{\partial \zeta_k}=\frac{\partial f}{\partial \eta_l}M_{lj}^{-1}J_{jk}\frac{\partial g}{\partial \eta_m}M_{mk}^{-1}$$

$$=\left(\frac{\partial f}{\partial \eta}\right)^T M^{-1}J(M^T)^{-1}\left(\frac{\partial g}{\partial \eta}\right)=\left(\frac{\partial f}{\partial \eta}\right)^T J\left(\frac{\partial g}{\partial \eta}\right)=[f,g]_\eta$$

因此泊松括号是正则变换的不变量，括号的下标可省略。

7. HAMILTON 系统的演化

定理 Hamilton 系统随时间的演化是辛变换。

证明：记t_0时刻的正则变量为

$$\eta_0=(q_1(t_0)=q_{01},\cdots,q_s(t_0)=q_{0s},p_1(t_0)=p_{01},\cdots,p_s(t_0)=p_{0s})$$

则t时刻的正则变量为

$$\eta=\eta(t,\eta_0)$$

这是是相空间点变换，其雅可比矩阵为

$$M_{jk}(t)\stackrel{\text{def}}{=}\frac{\partial \eta_j}{\partial \eta_{0k}}$$

$t=t_0$时$M_{jk}=\delta_{jk}$，满足辛条件

$$M^TJM|_{t=t_0}=J$$

我们需要检查$\frac{d}{dt}(M^TJM)$是否为零。求导，

$$\frac{d}{dt}(M^TJM)=\frac{dM^T}{dt}JM+M^TJ\frac{dM}{dt}$$

下面需要计算$\frac{dM}{dt}$。由正则方程

$$\dot\eta=J\frac{\partial H}{\partial \eta}.$$

两边对η_0求偏导，

$$\frac{dM_{jk}}{dt}=\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \eta_{0k}}\eta_j=\frac{\partial}{\partial \eta_{0k}}\dot\eta_j=J_{jl}\frac{\partial}{\partial \eta_{0k}}\frac{\partial H}{\partial \eta_l}=J_{jl}\frac{\partial^2 H}{\partial \eta_l\partial \eta_m}\frac{\partial \eta_m}{\partial \eta_{0k}}=J_{jl}\frac{\partial^2 H}{\partial \eta_l\partial \eta_m}M_{mk}$$

$$\Rightarrow\frac{d}{dt}M_{jk}=J\frac{\partial^2 H}{\partial \eta_l\partial \eta_m}M_{mk}\Leftrightarrow\frac{d}{dt}M=J\frac{\partial^2 H}{\partial \eta\partial \eta}M$$

现在有

$$\frac{d}{dt}(M^TJM)=\frac{dM^T}{dt}JM+M^TJ\frac{dM}{dt}=M^T\frac{\partial^2 H}{\partial \eta\partial \eta}(-J)JM+M^TJJ\frac{\partial^2 H}{\partial \eta\partial \eta}M$$

$$= M^T \frac{\partial^2 H}{\partial\eta\partial\eta} M - M^T \frac{\partial^2 H}{\partial\eta\partial\eta} M = 0$$

积分得

$$M^T J M = J$$

是辛变换。

8. 保辛算法

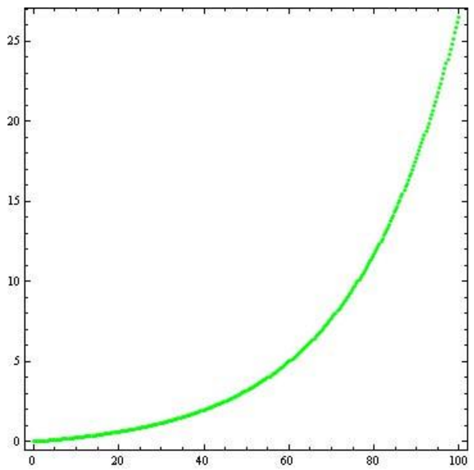
一般的算法，误差（步长以及计算机字长造成）会随步数指数增加。减小步长会造成迭代次数的增加。如果保证在积分的每一步都作辛变换，则可以显著控制误差的积累。

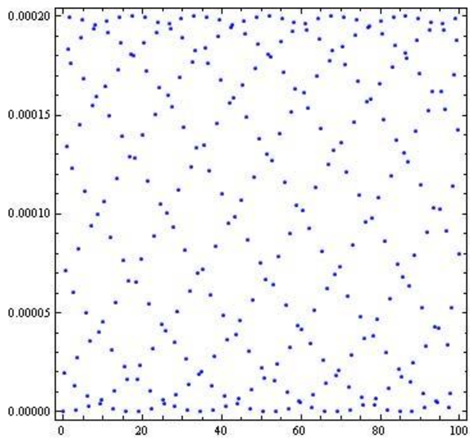
G. Benettin and A. Giorgilli, "On the Hamiltonian interpolation of near to the identity symplectic mappings with application to symplectic integration algorithms". J. Stat. Phys. **74**, 1994, 1117-1143.

E. Hairer and Ch. Lubich, "The life-span of backward error analysis for numerical integrators". Numer. Math. **76**, 1997, 441-462. Erratum: http://www.unige.ch/math/folks/hairer.

S. Reich, "Backward error analysis for numerical integrators". SIAM J. Num. Anal., **36**, 1999, 1549-1570.

The symplectic methods for the computation of hamiltonian equations, Kang Feng, Meng-zhao Qin, Numerical Methods for Partial Differential Equations, Lecture Notes in Mathematics Volume 1297, 1987, pp 1-37





Euler 法的误差和 Symplectic Partitioned Runge-Kutta 法的误差比较，横轴为时间。

例 Euler 法求解正则方程

$$\begin{cases} \dot{q} = \dfrac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\dfrac{\partial H}{\partial q} \end{cases}$$

$$q(t+\Delta t) = q(t) + \dot{q}(t)\Delta t = q(t) + \frac{\partial H}{\partial p}\Delta t$$

$$p(t+\Delta t) = p(t) + \dot{p}(t)\Delta t = p(t) - \frac{\partial H}{\partial q}\Delta t$$

雅可比矩阵

$$M = \begin{pmatrix} 1 + \dfrac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}\Delta t & \dfrac{\partial^2 H}{\partial p^2}\Delta t \\ -\dfrac{\partial^2 H}{\partial q^2}\Delta t & 1 - \dfrac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}\Delta t \end{pmatrix}$$

$$\det M = 1 + \left\{ \frac{\partial^2 H}{\partial q^2}\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} - \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} \right)^2 \right\} (\Delta t)^2 = 1 + \mathcal{O}(\Delta t)^2$$

例如谐振子

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

$$\det M = 1 + (\Delta t)^2 \neq 1$$

不是辛变换。减小步长Δt，会使迭代步数增加，太小的步长反而增大误差。

若改成一阶 symplectic Euler method

$$p(t+\Delta t) = p(t) + \dot{p}(t)\Delta t = p(t) - q(t)\Delta t$$

$$q(t+\Delta t) = q(t) + \dot{q}(t)\Delta t = q(t) + p(t+\Delta t)\Delta t$$

此隐式代的雅可比矩阵

$$M = \begin{pmatrix} 1 - (\Delta t)^2 & \Delta t \\ -\Delta t & 1 \end{pmatrix}$$

$$\det M = 1$$

是辛变换。

SPRK

9. LIOUVILLE 定理

定理 相空间体积在运动中不变（Liouville 定理）

前面已经证明了辛变换$\det M=1$，即$\det\frac{\partial\eta}{\partial\eta_0}=1$，于是

$$\begin{aligned}dq_1dq_2\cdots dq_ndp_1dp_2\cdots dp_n&=\det\frac{\partial\eta}{\partial\eta_0}dq_{01}dq_{02}\cdots dq_{0n}dp_{01}dp_{02}\cdots dp_{0n}\\&=dq_{01}dq_{02}\cdots dq_{0n}dp_{01}dp_{02}\cdots dp_{0n}.\end{aligned}$$

相空间：以正则变量为坐标的$2s$维笛卡尔空间。

相点：相空间中的点。

力学系统任意时刻的状态，可以用一个相点表示。

相轨道：系统状态在相空间的轨迹

定理 （运动唯一性⇒）不同的相轨道没有交点。

系综，代表点（类比水面上的浮尘。每个代表点表示一个系统的状态）

相流 phase flux 一维周期运动的相流沿顺时针方向

例 一维谐振子的相流（椭圆）

推论 不稳定平衡点附近的相流不是闭环。

定理 代表点的密度$\frac{d\rho}{dt}=0$ （不可压缩流体 刘维尔方程，统计物理的基础）

证明 $(\rho,\rho\dot{q}_\alpha,\rho\dot{p}_\alpha)$是守恒流，所以满足连续方程，

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial(\rho\dot{q}_\alpha)}{\partial q_\alpha}+\frac{\partial(\rho\dot{p}_\alpha)}{\partial p_\alpha}=0$$

而

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial(\rho\dot{q}_\alpha)}{\partial q_\alpha}+\frac{\partial(\rho\dot{p}_\alpha)}{\partial p_\alpha}&=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial\rho}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\rho\frac{\partial^2H}{\partial q_\alpha\partial p_\alpha}+\frac{\partial\rho}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha-\rho\frac{\partial^2H}{\partial q_\alpha\partial p_\alpha}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial\rho}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial\rho}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha\\&=\frac{d\rho(t,q,p)}{dt}\end{aligned}$$

所以

$$\frac{d\rho(t,q,p)}{dt}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+[\rho,H]=0$$

Poincaré重现定理 自治哈密顿系统会回到与初态任意接近的状态

五、 正则变换的生成函数

怎样方便的给出正则变换？

1. 从变分的观点看正则变换

哈密顿方程等价于相空间的哈密顿原理，

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\{p_\alpha\dot{q}_\alpha-H(t,q,p)\}dt=0\Leftrightarrow\dot{q}_\alpha=\frac{\partial H}{\partial p_\alpha},\dot{p}_\alpha=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$$

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\{P_\alpha\dot{Q}_\alpha-K(t,Q,P)\}dt=0\Leftrightarrow\dot{Q}_\alpha=\frac{\partial K}{\partial P_\alpha},\dot{P}_\alpha=-\frac{\partial H}{\partial Q_\alpha}$$

对任意小的时间区间$[t_1,t_2]$，要求两组正则方程同时成立，即

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\left\{p_\alpha\dot{q}_\alpha-H(t,q,p)-\frac{dF}{dt}\right\}dt\equiv\lambda\delta\int_{t_1}^{t_2}\{P_\alpha\dot{Q}_\alpha-K(t,Q,P)\}dt$$

$$p_\alpha dq_\alpha-H(t,q,p)dt-dF(t,q,p)=\lambda P_\alpha dQ_\alpha-\lambda K(t,Q,P)dt$$

不考虑扩展正则变换，那么

$$p_\alpha dq_\alpha-H(t,q,p)dt-dF(t,q,p)=P_\alpha dQ_\alpha-K(t,Q,P)dt$$

2. 生成函数和可积条件

正则变换的等价条件改写为

$$p_\alpha dq_\alpha-P_\alpha dQ_\alpha+(K-H)dt=dF(t,q,p)$$

$$p_\alpha dq_\alpha-P_\alpha\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}dq_\beta+\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}dp_\beta+\frac{\partial Q_\alpha}{\partial t}dt\right)+(K-H)dt=\frac{\partial F}{\partial q_\alpha}dq_\alpha+\frac{\partial F}{\partial p_\alpha}dp_\alpha+\frac{\partial F}{\partial t}dt$$

比较左右两边，得

$$P_\beta \frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha} = p_\alpha - \frac{\partial F}{\partial q_\alpha}, \qquad P_\beta \frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha} = -\frac{\partial F}{\partial p_\alpha}, \qquad K = H + \frac{\partial F}{\partial t} + P_\alpha \frac{\partial Q_\alpha}{\partial t}$$

由前两组偏微分方程，如果给定函数$F(t,q,p)$，解方程可得正则变换$Q_\alpha = Q_\alpha(t,q,p), P_\alpha = P_\alpha(t,q,p)$，因此$F(t,q,p)$被称为正则变换的**生成函数**（generating function）或**母函数**。

生成函数给出的正则变换，又称为**变分不变的相空间点变换**。

定理 变分不变的相空间点变换⟺雅可比矩阵是辛矩阵。

证明* 直接计算，

$$M^T J M = \begin{pmatrix} A^T & C^T \\ B^T & D^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^T C - C^T A & A^T D - C^T B \\ B^T C - D^T A & B^T D - D^T B \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial q_\alpha}\frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial q_\beta} & \frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_{\beta'}} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial q_\alpha}\frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial p_{\beta'}} \\ \frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_{\alpha'}}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial p_{\alpha'}}\frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial q_\beta} & \frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_{\alpha'}}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_{\beta'}} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial p_{\alpha'}}\frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial p_{\beta'}} \end{pmatrix}$$

对$P_\gamma \frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha} = p_\alpha - \frac{\partial F}{\partial q_\alpha}$两边求$\frac{\partial}{\partial q_\beta}$，

$$\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta} = -\frac{\partial^2 F}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} - P_\gamma \frac{\partial^2 Q_\gamma}{\partial q_\alpha \partial q_\beta}$$

对$P_\gamma \frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha} = p_\alpha - \frac{\partial F}{\partial q_\alpha}$两边求$\frac{\partial}{\partial p_\beta}$，

$$\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \frac{\partial^2 F}{\partial q_\alpha \partial p_\beta} - P_\gamma \frac{\partial^2 Q_\gamma}{\partial q_\alpha \partial p_\beta}$$

对$P_\gamma \frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha} = -\frac{\partial F}{\partial p_\alpha}$两边求$\frac{\partial}{\partial q_\beta}$，

$$\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta} = -\frac{\partial^2 F}{\partial p_\alpha \partial q_\beta} - P_\gamma \frac{\partial^2 Q_\gamma}{\partial p_\alpha \partial q_\beta}$$

对$P_\gamma \frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha} = -\frac{\partial F}{\partial p_\alpha}$两边求$\frac{\partial}{\partial p_\beta}$，

$$\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta} = -\frac{\partial^2 F}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} - P_\gamma \frac{\partial^2 Q_\gamma}{\partial p_\alpha \partial p_\beta}$$

代入得[4]

---

[4] 其中拉格朗日括号定义为$\{f,g\}_{q,p} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial q_\alpha}{\partial f}\frac{\partial p_\alpha}{\partial g} - \frac{\partial p_\alpha}{\partial f}\frac{\partial q_\alpha}{\partial g}$

$$\begin{pmatrix} \{q_\alpha, q_\beta\}_{Q,P} & \{q_\alpha, p_{\beta'}\}_{Q,P} \\ \{p_{\alpha'}, q_\beta\}_{Q,P} & \{p_{\alpha'}, p_{\beta'}\}_{Q,P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial q_\alpha}\frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial q_\beta} & \frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_{\beta'}} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial q_\alpha}\frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial p_{\beta'}} \\ \frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_{\alpha'}}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial p_{\alpha'}}\frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial q_\beta} & \frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_{\alpha'}}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_{\beta'}} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial p_{\alpha'}}\frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial p_{\beta'}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & \delta_{\alpha\beta'} \\ -\delta_{\alpha'\beta} & 0 \end{pmatrix} = J$$

故M是辛矩阵。

反之，若M是辛矩阵，逆推可得$\left(p_\alpha - P_\beta \frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha}\right) dq_\alpha + \left(-P_\beta \frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha}\right) dp_\alpha$可积（视$t$为参数），存在原函数$F(t,q,p)$，满足

$$\frac{\partial F}{\partial q_\alpha} = p_\alpha - P_\beta \frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha}, \qquad \frac{\partial F}{\partial p_\alpha} = -P_\beta \frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha}$$

所以$Q_\alpha(t,q,p), P_\alpha(t,q,p)$是正则变换。

利用

$$P_\alpha dQ_\alpha - K(t,Q,P)dt = p_\alpha dq_\alpha - H(t,q,p)dt - dF(t,q,p)$$

$$p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha + (K - H)dt = dF$$

考虑到正则函数K可以自由选取，方程的dt项对判别是否正则变换没有限制。为去掉此项，取变分（即视t为参数，$\delta t = 0$），

$$p_\alpha \delta q_\alpha - P_\alpha \delta Q_\alpha = \delta F(t,q,p)$$

定理 $p_\alpha \delta q_\alpha - P_\alpha \delta Q_\alpha$可积，是正则变换的等价条件。

例 变换

$$Q_\alpha(t) = c(t) q_\alpha(t), \qquad P_\alpha(t) = \frac{1}{c(t)} p_\alpha(t), \qquad \alpha = 1,2,\cdots,s$$

有

$$p_\alpha \delta q_\alpha - P_\alpha \delta Q_\alpha = 0$$

可积，所以是正则变换。

3. 总结：正则变换的等价条件

我们从运动方程、辛几何、作用量的变分、泊松括号等几个角度讨论了正则变换

$$Q_\alpha = Q_\alpha(t.q,p), P_\alpha = P_\alpha(t,q,p)$$

有如下几个等价的定义：

①该变换保持正则方程的形式不变（哈密顿量可以改变）；

②该变换存在生成函数$F(t,q,p)$，即满足可积条件；（外微分：$p_\alpha dq_\alpha - Hdt = P_\alpha dQ_\alpha - Kdt + dF \xrightarrow{\text{外微分，取参数}dt=0} dp_\alpha \wedge dq_\alpha = dP_\alpha \wedge dQ_\alpha$）

③该变换的是辛变换；

④该变换保持经典对易关系（基本 Poisson 括号）不变，

$$[Q_\alpha, P_\beta]_{q,p} = \delta_{\alpha\beta}, \qquad [Q_\alpha, Q_\beta]_{q,p} = 0, \qquad [P_\alpha, P_\beta]_{q,p} = 0$$

⑤该变换保持基本拉格朗日括号不变，

$$\{q_\alpha, p_\beta\}_{q,p} = \delta_{\alpha\beta}, \qquad \{q_\alpha, q_\beta\}_{q,p} = 0, \quad \{p_\alpha, p_\beta\}_{q,p} = 0$$

4. 生成函数的四类常用形式

以原正则变量q_α, p_α作为自变量的生成函数F不方便使用，需要求解偏微分方程组。如果从q_α, p_α中选取s个独立变量，再从Q_α, P_α选取其余s个独立变量，新老变量各占一半，则可以避免求解偏微分方程组。

（1）如果选择独立变量为q_α, Q_α，可以定义**第一类生成函数**为

$$F_1(t,q,Q) \stackrel{\text{def}}{=} F\big(t,q,p(q,Q,t)\big)$$

得 Pfaff 方程

$$p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha + (K-H)dt = dF_1(t,q,Q) = \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha}dq_\alpha + \frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha}dQ_\alpha + \frac{\partial F_1}{\partial t}dt$$

即

$$p_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha}, \qquad P_\alpha = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha}, \qquad K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

前两组等式都是代数方程，比偏微分方程更易求解。

给定一个正则变换，存在对应的第一类生成函数的条件是，存在非奇异变换$p_\alpha = p_\alpha(t,q,Q)$及其逆变换$Q_\alpha = Q_\alpha(t,q,p)$，即

$$\det\left(\frac{\partial(q,Q)}{\partial(q,p)}\right) = \det\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}\right) \neq 0$$

且不发散。

如果先给定生成函数$F_1(t,q,Q)$，我们需要从

$$p_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha}$$

解出$Q_\alpha = Q_\alpha(t,q,p)$，然后代入

$$P_\alpha = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha}$$

才能得到新老正则变量的显式变换关系，而且此变换关系可逆。行列式

$$\det\left(\frac{\partial p_\alpha}{\partial Q_\beta}\right) = \det\left(\frac{\partial^2 F_1(t,q,Q)}{\partial q_\alpha \partial Q_\beta}\right)$$

非奇异、不发散时，才能给出正向和逆向的变换，我们称这种生成函数是**自由**（free）的。

（2）如果选择q_α, P_α为独立变量，得**第二类生成函数**$F_2(t,q,P)$：

$$p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha + (K-H)dt = dF$$

可以改写为

$$p_\alpha dq_\alpha - d(P_\alpha Q_\alpha) + Q_\alpha dP_\alpha + (K-H)dt = dF$$

$$p_\alpha dq_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha + (K-H)dt = d(F + P_\alpha Q_\alpha) \stackrel{\text{def}}{=} dF_2(t,q,P)$$

正则变换为

$$p_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}, \qquad Q_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha}, \qquad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}.$$

给定一个正则变换，存在对应的第二类生成函数的条件是，存在非奇异变换$P_\alpha = P_\alpha(t,q,p)$及其逆变换$p_\alpha = p_\alpha(t,q,P)$，即

$$\det\left(\frac{\partial(q,P)}{\partial(q,p)}\right) = \det\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\right) \neq 0$$

且不发散。

如果先给定生成函数$F_2(t,q,P)$，我们需要从

$$p_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}$$

解出$P_\alpha = P_\alpha(t,q,p)$，然后代入

$$Q_\alpha = -\frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha}$$

才能得到新老正则坐标的显式变换关系；新老正则变量的变换关系可逆，即行列式

$$\det\left(\frac{\partial p_\alpha}{\partial P_\beta}\right) = \det\left(\frac{\partial^2 F_2(t,q,P)}{\partial q_\alpha \partial P_\beta}\right)$$

非奇异、不发散时，才能给出正向和逆向的变换。

（3）选择p_α, Q_α为独立变量，得**第三类生成函数**$F_3(t,Q,p)$：

$$-q_\alpha dp_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha + (K-H)dt = d(F - p_\alpha q_\alpha) \stackrel{\text{def}}{=} dF_3(t,Q,p)$$

$$q_\alpha = -\frac{\partial F_3}{\partial p_\alpha}, \qquad P_\alpha = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_\alpha}, \qquad K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}.$$

（4）选择p_α, P_α为独立变量，得**第四类生成函数**$F_4 = F_4(t,p,P)$：

$$-q_\alpha dp_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha + (K-H)dt = d(F - p_\alpha q_\alpha + P_\alpha Q_\alpha) = dF_4(t,p,P)$$

$$q_\alpha = -\frac{\partial F_4}{\partial p_\alpha}, \qquad Q_\alpha = \frac{\partial F_4}{\partial P_\alpha}, \qquad K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t}.$$

生成函数	存在条件	自由条件	正则变量和密顿量
$F = F_1(t,q,Q)$	$\det\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}\right) \neq 0$ 且不发散	$\det\left(\frac{\partial^2 F_1}{\partial q_\alpha \partial Q_\beta}\right) \neq 0$ 且不发散	$p_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha}, \quad P_\alpha = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha}$ $K(t,Q,P) = H(t,q,p) + \frac{\partial F_1}{\partial t}$
$F = F_2(t,q,P) - Q_\alpha P_\alpha$	$\det\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\right) \neq 0$ 且不发散	$\det\left(\frac{\partial^2 F_2}{\partial q_\alpha \partial P_\beta}\right) \neq 0$ 且不发散	$p_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}, \quad Q_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha}$ $K(t,Q,P) = H(t,q,p) + \frac{\partial F_2}{\partial t}$
$F = F_3(t,p,Q) + q_\alpha p_\alpha$	$\det\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}\right) \neq 0$ 且不发散	$\det\left(\frac{\partial^2 F_3}{\partial p_\alpha \partial Q_\beta}\right) \neq 0$ 且不发散	$q_\alpha = -\frac{\partial F_3}{\partial p_\alpha}, \quad P_\alpha = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_\alpha}$ $K(t,Q,P) = H(t,q,p) + \frac{\partial F_3}{\partial t}$
$F = F_4(t,p,P) + q_\alpha p_\alpha - Q_\alpha P_\alpha$	$\det\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial q_\beta}\right) \neq 0$ 且不发散	$\det\left(\frac{\partial^2 F_4}{\partial p_\alpha \partial P_\beta}\right) \neq 0$ 且不发散	$q_\alpha = -\frac{\partial F_4}{\partial p_\alpha}, \quad Q_\alpha = \frac{\partial F_4}{\partial P_\alpha}$ $K(t,Q,P) = H(t,q,p) + \frac{\partial F_4}{\partial t}$

对给定的正则变换，对应的各类生成函数有可能都存在，也可能只存在部分类型的生成函数。

例 恒等变换$F_2(t,q,P)=q_\alpha P_\alpha$

例 交替变换$F_1(t,q,Q)=q_\alpha Q_\alpha \Rightarrow Q_\alpha=p_\alpha, P_\alpha=-q_\alpha$

由这个例子可见“正则坐标”和“正则动量”是相对的概念，它们的地位等同，只能说是一对共轭的正则变量。

例 平移变换$F_2=(q_\alpha+a_\alpha)(P_\alpha-b_\alpha) \Longrightarrow Q_\alpha=q_\alpha+a_\alpha, p_\alpha=P_\alpha-b_\alpha$

例 尺度变换$F_2(t,q,P)=c(t)q_\alpha P_\alpha$

$$Q_\alpha=c(t)q_\alpha, \qquad p_\alpha=c(t)P_\alpha$$

$$K(t,Q,P)=H(t,q,p)+\dot{c}q_\alpha P_\alpha=H\left(t,\frac{Q}{c},cP\right)+\frac{\dot{c}}{c}Q_\alpha P_\alpha$$

例 坐标变换$F_2=f_\alpha(t,q)P_\alpha+g(t,q)$

$$Q_\alpha=f_\alpha(t,q), \qquad p_\alpha=\frac{\partial f_\beta(t,q)}{\partial q_\alpha}P_\beta+\frac{\partial g(t,q)}{\partial q_\alpha}$$

例 时间平移$F_2=q_\alpha P_\alpha+\epsilon H(t,q,P)$，保留至一阶无穷小，得正则变换关系

$$Q_\alpha=\frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha}=q_\alpha+\epsilon\frac{\partial H(t,q,P)}{\partial P_\alpha}=q_\alpha+\epsilon\frac{\partial H(t,q,p)}{\partial p_\alpha}$$

$$p_\alpha=\frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}=P_\alpha+\epsilon\frac{\partial H(t,q,P)}{\partial q_\alpha}=P_\alpha+\epsilon\frac{\partial H(t,q,p)}{\partial q_\alpha}$$

即哈密顿系统在无穷小时间内的演化

$$q_\alpha(t)\to Q_\alpha(t)=q_\alpha(t+\epsilon)=q_\alpha(t)+\epsilon\dot{q}_\alpha=q_\alpha+\epsilon\frac{\partial H(t,q,p)}{\partial p_\alpha}$$

$$p_\alpha(t)\to P_\alpha(t)=p_\alpha(t+\epsilon)=p_\alpha(t)+\epsilon\dot{p}_\alpha(t)=p_\alpha(t)-\epsilon\frac{\partial H(t,q,p)}{\partial q_\alpha}$$

是正则变换。

5. 利用正则变换化简哈密顿方程

例 谐振子$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m}{2}\omega^2q^2$，正则变换的母函数$F_1=\frac{m}{2}\omega q^2\cot Q$，求解。

解： ①写出变换关系

$$p=\frac{\partial F_1}{\partial q}=m\omega q\cot Q$$
$$P=-\frac{\partial F_1}{\partial Q}=\frac{m}{2}\omega q^2\frac{1}{\sin^2 Q}$$

②反解出老变量

$$q=\sqrt{\frac{2P}{m\omega}}\sin Q\,,\qquad p=\sqrt{2m\omega P}\cos Q$$

③写出新哈密顿量

$$K=H+\frac{\partial F_1}{\partial t}=H=\omega P$$

④写出新变量下的正则方程，求解

$$\dot{P}=-\frac{\partial K}{\partial Q}=0\Rightarrow P=\text{常数}=\frac{E}{\omega}$$

$$\dot{Q}=\frac{\partial K}{\partial P}=\omega\Rightarrow Q=\omega t+\varphi_0$$

⑤代入变换关系

$$q=\frac{1}{m\omega}\sqrt{2mE}\sin(\omega t+\varphi_0)\,,\qquad p=\sqrt{2mE}\cos(\omega t+\varphi_0)$$

利用生成函数求解力学问题，难在找到合适的生成函数。

例 寻找合适的生成函数，以化简谐振子$H=\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}q^2$的正则方程。

①猜想变换后成为

$$\frac{p^2}{2}\to cP\sin^2 Q\,,\qquad \frac{1}{2}q^2\to cP\cos^2 Q\,,\qquad K=H=cP$$

即变换关系为

$$q=\sqrt{2cP}\cos Q\,,\qquad p=\sqrt{2cP}\sin Q$$

$$Q=\arctan(q,p)\,,\qquad P=\frac{p^2}{2c}+\frac{1}{2c}q^2$$

②检验是否为正则变换

$$p\delta q-P\delta Q=p\delta q-\left(\frac{p^2}{2c}+\frac{1}{2c}q^2\right)\frac{-p\delta q+q\delta p}{q^2+p^2}=p\delta q-\frac{1}{2c}(-p\delta q+q\delta p)$$
$$=\left(1+\frac{1}{2c}\right)p\delta q-\frac{1}{2c}q\delta p$$

当$c=-1$时

$$p\delta q-P\delta Q=\delta\left(\frac{1}{2}qp\right)$$

可积，是正则变换。

③确定生成函数

$$F = \frac{1}{2}qp$$

若选择使用第二类生成函数，

$$F_2(q, P) = F + QP = \frac{1}{2}qp + QP$$

需要消去p, Q，故从变换关系

$$q = \sqrt{-2P}\cos Q\,, \qquad p = \sqrt{-2P}\sin Q$$

解出

$$Q = \arccos\frac{q}{\sqrt{-2P}}$$

$$p = \sqrt{-2P}\sin Q = \sqrt{-2P}\sqrt{1 + \frac{q^2}{2P}} = \sqrt{-2P - q^2}$$

$$F_2(q, P) = \frac{1}{2}q\sqrt{-2P - q^2} + P\arccos\frac{q}{\sqrt{-2P}}$$

练习：用例题的生成函数，求解谐振子问题。

6. 连续正则变换和连续对称变换

某连续正则变换可以用第二类生成函数表示

$$F_2 = F_2(t, q, P, \lambda)$$

λ是变换的参数。其无穷小形式为

$$F_2(t, q, P, \epsilon) = q_\alpha P_\alpha + \epsilon G(t, q, P)$$

这里G是连续正则变换的**生成元**。

定理 在第二类母函数

$$F_2(t, q, P, \epsilon) = q_\alpha P_\alpha + \epsilon G(t, q, P)$$

给出无穷小正则变换（ICT，infinitival canonical transformation）下，物理量的改变为

$$\delta A = A(t, q + \delta q, p + \delta p) - A(t, q, p) = \epsilon[A, G]$$

证明：保留到一阶小量，

$$Q_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha} = q_\alpha + \epsilon\frac{\partial G}{\partial P_\alpha} = q_\alpha + \epsilon\frac{\partial G}{\partial p_\alpha} \Rightarrow \delta q_\alpha = Q_\alpha - q_\alpha = \epsilon\frac{\partial G}{\partial p_\alpha},$$

$$p_\alpha=\frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}=P_\alpha+\epsilon\frac{\partial G}{\partial q_\alpha}\Longrightarrow\delta p_\alpha=P_\alpha-p_\alpha=-\epsilon\frac{\partial G}{\partial q_\alpha}$$

$$t'=t,\qquad \Delta t=0$$

于是

$$\begin{aligned}A(t,q+\delta q,p+\delta p)&=A(t,q,p)+\frac{\partial A}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha+\frac{\partial A}{\partial p_\alpha}\delta p_\alpha=A(t,q,p)+\epsilon\frac{\partial A}{\partial q_\alpha}\frac{\partial G}{\partial p_\alpha}-\epsilon\frac{\partial A}{\partial p_\alpha}\frac{\partial G}{\partial q_\alpha}\\&=A(t,q,p)+\epsilon[A,G]\end{aligned}$$

$$\delta A=\epsilon[A,G]$$

证毕。

下面考虑连续正则变换与守恒量的关系。

定理 设无穷小连续正则变换的第二类生成函数为

$$F_2(t,q,P,\epsilon)=q_\alpha P_\alpha+\epsilon G(t,q,P)$$

则此变换为准对称变换的等价条件为

$$\frac{\partial G}{\partial t}+[G,H]\equiv f(t)$$

仅为时间的函数。对应的守恒量为

$$G(t,q,p)-\int f(t)dt$$

证明：记此正则变换的生成函数为

$$\begin{aligned}F(t,q,p)=F_2-P_\alpha Q_\alpha=q_\alpha P_\alpha+\epsilon G(t,q,P)-P_\alpha Q_\alpha&=-P_\alpha\delta q_\alpha+\epsilon G(t,q,P)\\&=-p_\alpha\delta q_\alpha+\epsilon G(t,q,p)\end{aligned}$$

在此变换下，哈密顿函数的变换为

$$K(t,Q,P)=H(t,q,p)+\frac{\partial F_2}{\partial t}=H(t,q,p)+\epsilon\frac{\partial G(t,q,P)}{\partial t}=H(t,q,p)+\epsilon\frac{\partial G(t,q,p)}{\partial t}+\mathcal{O}(\epsilon^2)$$

于是有恒等式

$$P_\alpha dQ_\alpha-\left(H(t,q,p)+\epsilon\frac{\partial G(t,q,p)}{\partial t}\right)dt\equiv p_\alpha dq_\alpha-H(t,q,p)dt-d(-p_\alpha\delta q_\alpha+\epsilon G(t,q,p))$$

如果这一**正则变换**同时也是**准对称变换**，则应存在函数$\varphi(t,q,p,\epsilon)$，使得

$$P_\alpha dQ_\alpha-H(t,Q,P)dt=p_\alpha dq_\alpha-H(t,q,p)dt+d\varphi(t,q,p,\epsilon)$$

与上面得恒等式相减，得

$$\{H(t,q,p)-H(t,Q,P)\}dt+\epsilon\frac{\partial G(t,q,p)}{\partial t}dt=d\{\varphi(t,q,p,\epsilon)-p_\alpha\delta q_\alpha+\epsilon G(t,q,p)\}$$

即

$$\epsilon\left\{[G,H]+\frac{\partial G}{\partial t}\right\}dt+\sum_\alpha 0dq_\alpha+\sum_\alpha 0dp_\alpha=d\{\varphi(t,q,p,\epsilon)-p_\alpha\delta q_\alpha+\epsilon G(t,q,p)\}$$

故左边的表达式应该是全微分，满足

$$\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\left\{[G,H]+\frac{\partial G}{\partial t}\right\}=\frac{\partial 0}{\partial t}=0,\qquad \frac{\partial}{\partial p_\alpha}\left\{[G,H]+\frac{\partial G}{\partial t}\right\}=0$$

即

$$\frac{\partial G}{\partial t}+[G,H]\equiv f(t)$$

仅为时间t的函数。

现在由泊松定理，$G(t,q,p)-\int f(t)dt$是守恒量。

我们也可以利用诺特定理来求守恒量，

$$\varphi(t,q,p,\epsilon)=-\big(-p_\alpha\delta q_\alpha+\epsilon G(t,q,p)\big)+\epsilon\int f(t)dt=\epsilon\left(p_\alpha\frac{\partial G}{\partial p_\alpha}-G(t,q,p)\right)+\epsilon\int f(t)dt$$

$$\Delta\varphi=\varphi(t,q,p,\epsilon)-\varphi(t,q,p,0)=\varphi(t,q,p,\epsilon)$$

$$-H\Delta t+p_\alpha\Delta q_\alpha-\Delta\varphi=p_\alpha\delta q_\alpha-\Delta\varphi=\epsilon G(t,q,p)-\epsilon\int f(t)dt$$

结果相同。证毕。

这一结论可以帮助我们解决诺特定理的逆问题：已知守恒量，寻找它对应的对称变换。

定理 （诺特定理的逆定理）若$G(t,q,p)$是守恒量，那么

$$\delta q_\alpha=[q_\alpha,\epsilon G(t,q,p)]=\epsilon\frac{\partial G}{\partial p_\alpha},\qquad \delta p_\alpha=[p_\alpha,\epsilon G(t,q,p)]=-\epsilon\frac{\partial G}{\partial q_\alpha}$$

是无穷小对称变换。

例 求龙格-楞次矢量对应的对称变换

解 已知守恒量

$$\vec{A}=\vec{p}\times\vec{L}-m\alpha\frac{\vec{r}}{r}$$

$$A_i=r_i\vec{p}^2-p_i(\vec{p}\cdot\vec{r})-m\alpha\frac{r_i}{r}$$

$$\frac{\partial\left(\vec{\epsilon}\cdot\vec{A}\right)}{\partial t}+\left[\vec{\epsilon}\cdot\vec{A},H\right]=0$$

于是生成函数为

$$F_2=\vec{r}\cdot\vec{p}'+\vec{\epsilon}\cdot\vec{A}=\vec{r}\cdot\vec{p}'+\vec{\epsilon}\cdot\left(\vec{p}'\times(\vec{r}\times\vec{p}')-m\alpha\frac{\vec{r}}{r}\right)=r_ip_i'+\epsilon_i\left(r_i\vec{p}'^2-p_i'(\vec{p}'\cdot\vec{r})-m\alpha\frac{r_i}{r}\right)$$

保留到一阶无穷小，正则变换为

$$p_j=\frac{\partial F_2}{\partial r_j}=p_j'+\vec{p}^2\epsilon_j-(\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})p_j-\frac{m\alpha}{r}\epsilon_j+\frac{m\alpha}{r^3}(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})r_j$$

$$r_j'=\frac{\partial F_2}{\partial p_j'}=r_j+2(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})p_j-(\vec{p}\cdot\vec{r})\epsilon_j-(\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})r_j$$

守恒量对应的无穷小准对称变换为

$$\Delta t=0$$

$$\Delta\vec{r}=2(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{p}-(\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})\vec{r}-(\vec{p}\cdot\vec{r})\vec{\epsilon}$$

$$\Delta\vec{p}=\left(\frac{m\alpha}{r}-\vec{p}^2\right)\vec{\epsilon}-\frac{m\alpha}{r^3}(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{r}+(\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})\vec{p}$$

$$\begin{aligned}\Delta\varphi&=-(-p_i\delta r_i+\epsilon_iA_i)=p_i\Delta r_i-\epsilon_iA_i\\&=2(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{p}^2-2(\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})(\vec{p}\cdot\vec{r})-(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{p}^2+(\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})(\vec{p}\cdot\vec{r})+m\alpha\frac{(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})}{r}\\&=(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\vec{p}^2-(\vec{\epsilon}\cdot\vec{p})(\vec{p}\cdot\vec{r})+\frac{m\alpha}{r}(\vec{\epsilon}\cdot\vec{r})\end{aligned}$$

例 质点系的伽利略推动变换的生成元。

$$H=\sum_i\frac{\vec{p}_i^2}{2m_i}+V(t,\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)$$

$$\Lambda=\sum_{\mathrm{i}}\vec{p}_i\cdot\dot{\vec{r}}_i-H(t,\vec{r}_i,\vec{p}_i)$$

在伽利略推动变换下，

$$\Delta t=0,\qquad\Delta\vec{r}_i=\vec{\epsilon}t,\qquad\Delta\vec{p}_i=m_i\vec{\epsilon}$$

$$\Lambda dt\to\Lambda'dt'=\sum_{\mathrm{i}}(\vec{p}_i+m_i\vec{\epsilon})\cdot\left(\dot{\vec{r}}_i+\vec{\epsilon}\right)dt-\left\{\sum_i\frac{(\vec{p}_i+m_i\vec{\epsilon})^2}{2m_i}+V(t,\vec{r}_i+\vec{\epsilon}t)\right\}dt$$

$$
\begin{aligned}
&= \Lambda dt + \vec{\epsilon}\cdot\sum_i\left(\vec{p}_i + m_i\dot{\vec{r}}_i\right)dt + \vec{\epsilon}^2\sum_i m_i\,dt - \left\{\vec{\epsilon}\cdot\sum_i\vec{p}_i + \frac{1}{2}\vec{\epsilon}^2\sum_i m_i + t\vec{\epsilon}\cdot\sum_i\frac{\partial V}{\partial\vec{r}_i}\right\}dt \\
&= \Lambda dt + \vec{\epsilon}\cdot\sum_i m_i\dot{\vec{r}}_i\,dt + \frac{1}{2}\vec{\epsilon}^2\sum_i m_i\,dt - t\vec{\epsilon}\cdot\sum_i\frac{\partial V}{\partial\vec{r}_i}dt
\end{aligned}
$$

若合外力为零，

$$\sum_i\frac{\partial V}{\partial\vec{r}_i} = \vec{0}$$

则

$$\Lambda' dt' = \Lambda dt + \vec{\epsilon}\cdot\sum_i m_i\dot{\vec{r}}_i\,dt + \frac{1}{2}\vec{\epsilon}^2\sum_i m_i\,dt = \Lambda dt + d\left(\vec{\epsilon}\cdot\sum_i m_i\vec{r}_i - \frac{1}{2}\vec{\epsilon}^2 t\sum_i m_i\right)$$

是准对称变换[5]，

$$-H\Delta t + \sum_i\vec{p}_i\cdot\Delta\vec{r}_i - \Delta\varphi = t\sum_i\vec{p}_i\cdot\vec{\epsilon} - \vec{\epsilon}\cdot\sum_i m_i\vec{r}_i = \epsilon\cdot\left(\vec{P}t - M\vec{r}_C\right)$$

$$\vec{P} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i\vec{p}_i\,,\qquad M \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i m_i\,,\qquad \vec{r}_C \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{M}\sum_i m_i\vec{r}_i$$

守恒量是

$$\vec{K} = \vec{P}t - M\vec{r}_C$$

此即质点系的伽利略推动生成元。

推论 无穷小受限正则变换

$$F_2 = q_\alpha P_\alpha + \epsilon G(q,P)$$

保持哈密顿量不变，则生成元$G(q,p)$是守恒量。

证明 在这个无穷小准对称变换下，

$$H(t,q+\delta q,p+\delta p) = H(t,q,p) + \epsilon[H,G]$$

如果哈密顿量不变，

$$H(t,q+\delta q,p+\delta p) = H(t,q,p)$$

则必有$[H,G] = 0$。于是

[5] 合外力$\vec{F}(t)$仅为时间的函数，与坐标无关时，也是准对称变换。

$$\frac{dG}{dt}=0$$

G是守恒量。

推论 （无穷小）准对称变换是连续正则变换，但反之不一定成立。

六、 HAMILTON-JACOBI 理论

1. HAMILTON-JACOBI 方程

如果找到**化零正则变换**，使得新的哈密顿函数（不妨选用第二类生成函数）

$$K=H+\frac{\partial F_2}{\partial t}=0$$

这时所有正则变量Q_α, P_α都是守恒量，

$$\dot{Q}_\alpha=\frac{\partial K}{\partial P_\alpha}=0, \qquad \dot{P}_\alpha=-\frac{\partial K}{\partial Q_\alpha}=0$$

利用第二类生成函数生成的正则变换，

$$F=F_2(t,q,P), \qquad p_\alpha=\frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha}, \qquad Q_\alpha=\frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha}$$

化零正则变换满足

$$H\left(t,q,\frac{\partial F_2}{\partial q}\right)+\frac{\partial F_2}{\partial t}=0$$

这是$s+1$个变量$(q_1,\cdots,q_s,t)$的一阶 PDE，解F_2中含有s个积分常数$(\eta_1,\cdots,\eta_s)$。F_2以偏导数的形式出现在方程中，于是F_2+c必然仍是方程的解。

换个符号，定义 **Hamilton 主函数**

$$S(t,q,\eta)\overset{\text{def}}{=}F_2(t,q,\eta)+\eta_0$$

约定新的正则动量为

$$P_1=\eta_1,\cdots,P_s=\eta_s$$

哈密顿主函数满足 Hamilton-Jacobi 方程，

$$\boxed{H\left(t,q,\frac{\partial S}{\partial q}\right)+\frac{\partial S}{\partial t}=0}$$

对自治系统，

$$\frac{\partial H}{\partial t}=0, \qquad H(q,p)=E$$

HJE 成为

$$E+\frac{\partial S(t,q,\eta)}{\partial t}=0 \Rightarrow S(t,q,\eta)=-Et+W(q,\eta)$$

$W(q,\eta)$称为 **Hamilton 特征函数**，满足

$$\boxed{H\left(q,\frac{\partial W}{\partial q}\right)=E}$$

称为受限哈密顿-雅可比方程（restricted Hamilton-Jacobi equation）. 这是s个变量的一阶偏微分方程。

Hamilton-Jacobi 理论把$2s$个正则方程转化为 1 个非线性偏微分方程，虽然没有达到完全简化问题、寻找首次积分的目的，但提供了解决力学问题的另一种理论途径。其推广形式 Hamilton-Jacobi-Bellman 方程在连续动态规划、定价理论（Black-Scholes 方程, 1997 年诺贝尔经济学奖）中有重要应用。

2. 哈密顿主函数和特征函数的物理意义

把哈密顿主函数对时间求导，

$$\frac{dS}{dt}=\frac{\partial S}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial S}{\partial t}=p_\alpha\dot{q}_\alpha-H=\Lambda \Leftrightarrow S=\int \Lambda dt$$

是积分限可变的哈密顿作用量，因此又称**哈密顿作用函数**。

对自治系统，

$$-Et+W=S=\int(p_\alpha\dot{q}_\alpha-E)dt=\int p_\alpha\dot{q}_\alpha dt-Et$$

$$W=\int p_\alpha dq_\alpha$$

即积分限可变的约化作用量。

我们可以把作用函数定义为相空间拉氏量沿极值路径（满足哈密顿方程的路径）的积分，即从初态$\big(t_0,q(t_0)\big)$沿最经济路径到达末态$\big(t,q(t)\big)$的极小代价，

$$S\big(t_0,q(t_0);t,q(t)\big)=\int_{t_0}^{t}\big\{p_\alpha(\tau)\dot{q}_\alpha(\tau)-H\big(\tau,q(\tau),p(\tau)\big)\big\}d\tau$$

其中$q(t)$满足状态方程

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}$$

$p_\alpha(t)$是控制变量。

若固定初态，则作用函数是末态的函数，

$$S\big(t,q(t)\big) = \int_{t_0}^{t} \big\{p_\alpha(\tau)\dot{q}_\alpha(\tau) - H\big(\tau,q(\tau),p(\tau)\big)\big\} d\tau$$

对末态的任意变动，

$$t, q_\alpha(t) \to t' = t + \Delta t, \qquad q'_\alpha(t') = q_\alpha(t) + \Delta q_\alpha(t)$$

作用函数的改变为

$$\begin{aligned}
&\Delta S\big(t,q(t)\big) = \frac{\partial S}{\partial t}\Delta t + \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}\Delta q_\alpha \\
&\equiv \Delta \int_{t_0}^{t} \big\{p_\alpha(\tau)\dot{q}_\alpha(\tau) - H\big(\tau,q(\tau),p(\tau)\big)\big\} d\tau \\
&= \big\{p_\alpha(t)\dot{q}_\alpha(t) - H\big(t,q(t),p(t)\big)\big\}\Delta t + p_\alpha \delta q_\alpha \big|_{t_1}^{t} + \int_{t_i}^{t} \left\{\left(\dot{q}_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\right)\delta p_\alpha - \left(\dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha\right\} d\tau \\
&\xrightarrow{\text{状态方程}} = p_\alpha(t)\Delta q_\alpha(t) - H\big(t,q(t),p(t)\big)\Delta t - \int_{t_i}^{t} \left(\dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha d\tau
\end{aligned}$$

最优控制p_α使泛函取极值，所以

$$\dot{p}_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = 0$$

于是

$$\Delta S\big(t,q(t)\big) = p_\alpha(t)\Delta q_\alpha(t) - H\big(t,q(t),p(t)\big)\Delta t$$

即

$$\frac{\partial S}{\partial t}\Delta t + \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}\Delta q_\alpha \equiv p_\alpha(t)\Delta q_\alpha(t) - H\big(t,q(t),p(t)\big)\Delta t$$

所以有

$$p_\alpha(t) = \frac{\partial S(t,q)}{\partial q_\alpha}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(t,q,\frac{\partial S}{\partial q_\alpha}\right) = 0$$

3. 利用 HAMILTON-JACOBI 方程求解力学问题

下面只讨论能够分离变量的情形。分离变量法解 PDE 是《数理方程》课程的内容。

例 平面谐振子$H=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)$

解：

①写出 HJ 方程。

Hamiltonian 不含时，受限 HJ 方程

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right\}+\left\{\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega^2y^2\right\}=E$$

②选择合适的坐标系，分离变量，并求出作用函数。

在这个问题里，方程在直角坐标系中就可以分离变量。设

$$W(x,y)=W_1(x)+W_2(y)$$

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W_1}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right\}=E-\left\{\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W_2}{\partial y}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega^2y^2\right\}=E_1$$

左边不含y，右边不含x，可见E_1不依赖于x,y，是常数（守恒量），

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W_1}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E_1$$

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W_2}{\partial y}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega^2y^2=E-E_1$$

解出

$$W_1=\pm\int\sqrt{2mE_1-m^2\omega^2x^2}dx$$

$$W_2=\pm\int\sqrt{2m(E-E_1)-m^2\omega^2y^2}dy$$

$$W(x,y,E,E_1)=W_1+W_2$$

$$S(t,x,y,E,E_1)=-Et+W(x,y,E,E_1)$$

令积分常数E,E_1为新的正则动量P_1,P_2。

③根据$S=F_2(t,q,P)$，写出变换关系

$$p_x=\frac{\partial S}{\partial x}=\pm\sqrt{2mE_1-m^2\omega^2x^2}$$
$$p_y=\frac{\partial S}{\partial y}=\pm\sqrt{2m(E-E_1)-m^2\omega^2y^2}$$

$$\frac{\varphi_2}{\omega}=Q_1=\frac{\partial S}{\partial E}=-t\pm\int\frac{m}{\sqrt{2m(E-E_1)-m^2\omega^2y^2}}dy=-t\pm\frac{1}{\omega}\arcsin\left(\sqrt{\frac{m}{2(E-E_1)}}\omega y\right)$$

$$\frac{\varphi}{\omega}=Q_2=\frac{\partial S}{\partial E_1}=\pm\int\frac{m}{\sqrt{2mE_1-m^2\omega^2x^2}}dx\pm\int\frac{m}{\sqrt{2m(E-E_1)-m^2\omega^2y^2}}dy$$
$$=\pm\frac{1}{\omega}\arcsin\left(\sqrt{\frac{m}{2E_1}}\omega x\right)\pm\frac{1}{\omega}\arcsin\left(\sqrt{\frac{m}{2(E-E_1)}}\omega y\right)$$

④反解出广义坐标、广义动量的变化规律

由后两个式子得

$$y=\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2(E-E_1)}{m}}\sin(\omega t+\varphi_2)$$

$$\arcsin\left(\sqrt{\frac{m}{2E_1}}\omega x\right)=\pm\arcsin\left(\sqrt{\frac{m}{2(E-E_1)}}\omega y\right)+\varphi$$

第一个式子中的正负号可通过重定义相位φ_2吸收。

第二个式子是轨道方程，取正弦函数，化简后可得椭圆方程。

将第一个式子代入第二个式子，可得$x(t)$，

$$\arcsin\left(\sqrt{\frac{m}{2E_1}}\omega x\right)=\pm(\omega t+\varphi_2)+\varphi\Rightarrow x=\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E_1}{m}}\sin(\omega t+\varphi_1)$$

我们可以利用分离变量法寻找哈密顿系统的守恒量。

例 球坐标系的 HJE

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_\theta^2}{r^2}+\frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\theta}\right)+V(r,\theta,\varphi)$$

其中势能的形式为

$$V(r,\theta,\varphi)=V_1(r)+\frac{V_2(\theta)}{r^2}+\frac{V_3(\varphi)}{r^2\sin^2\theta}$$

时可分离变量，

$$S=-Et+W_1(r)+W_2(\theta)+W_3(\varphi)$$

Restricted HJE

$$\frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{dW_1(r)}{dr}\right)^2+2mV_1(r)\right\}+\frac{1}{2mr^2}\left\{\left(\frac{dW_2(\theta)}{d\theta}\right)^2+2mV_2(\theta)\right\}$$
$$+\frac{1}{2mr^2\sin^2\theta}\left\{\left(\frac{dW_3(\varphi)}{d\varphi}\right)^2+2mV_3(\varphi)\right\}=E$$

含φ的部分必为常数，

$$\left(\frac{dW_3(\varphi)}{d\varphi}\right)^2+2mV_3(\varphi)=c_3$$

代回 Restricted HJE，

$$\frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{dW_1(r)}{dr}\right)^2+2mV_1(r)\right\}+\frac{1}{2mr^2}\left\{\left(\frac{dW_2(\theta)}{d\theta}\right)^2+2mV_2(\theta)+\frac{c_3}{\sin^2\theta}\right\}=E$$

分离出含θ的部分，

$$\left(\frac{dW_2(\theta)}{d\theta}\right)^2+2mV_2(\theta)+\frac{c_3}{\sin^2\theta}=c_2$$

最后剩下含r的部分，

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dW_1(r)}{dr}\right)^2+V_1(r)+\frac{c_2}{2mr^2}=E$$

在这个例子中，通过分离变量，我们找到了三个守恒量。

4. 正则微扰论

对复杂问题，设系统的哈密顿量为

$$H=H_0+H'$$

其中H'为微扰相互作用。H_0描述的系统相对简单，容易求解（可积）。

先由

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H_0\left(t,q,\frac{\partial S}{\partial q}\right)=0$$

解出没有微扰时的 Hamilton 主函数$S(t,q,\eta)$，这是是第二类生成函数F_2，给出化零正则变换，

$$p_\alpha=\frac{\partial S(t,q,\eta)}{\partial q_\alpha},\qquad \xi_\alpha=\frac{\partial S(t,q,\eta)}{\partial \eta_\alpha}$$

没有微扰项H'时，新的正则变量ξ_α,η_α是常数，$q_\alpha=q_\alpha(t,\xi,\eta),p_\alpha=p_\alpha(t,\xi,\eta)$

现在对有微扰的情形$H=H_0+H'$，仍然以原来的$S(t,q,\eta)$为F_2，作同样的正则变换。这时正则变量为$\xi_\alpha(t),\eta_\alpha(t)$，哈密顿量为$K=H+\frac{\partial S}{\partial t}=(H_0+H')-H_0=H'$。新的正则方程称为**微扰方程**，

$$\dot{\xi}_\alpha=\frac{\partial H'}{\partial \eta_\alpha},\qquad \dot{\eta}_\alpha=-\frac{\partial H'}{\partial \xi_\alpha}$$

由于H'是小量，$\xi_\alpha(t),\eta_\alpha(t)$随时间缓慢改变。求解微扰方程（一般需要用级数展开的方法），得到$\xi(t),\eta(t)$，代入新老坐标的变换关系得解

$$q_\alpha = q_\alpha\big(t,\xi(t),\eta(t)\big),\qquad p_\alpha = p_\alpha\big(t,\xi(t),\eta(t)\big)$$

例 一维非线性振动$V(x)=\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2+\frac{1}{4}\lambda x^4$，$\lambda\to 0$

解 哈密顿量为

$$H = H_0 + H'$$

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2,\qquad H'=\frac{1}{4}\lambda x^4$$

先取$H=H_0$，求解 0 阶近似的 H-J 方程，

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2=0$$

得化零变换的第二类生成函数，

$$S(t,x,E)=-Et+W(x,E)$$

$$W(x,E)=\pm\int\sqrt{2mE-m^2\omega_0^2x^2}dx$$

$$C=\frac{\partial S}{\partial E}=-t+\frac{\partial W}{\partial E}=-t\pm\int\frac{mdx}{\sqrt{2mE-m^2\omega_0^2x^2}}$$

解得

$$x=\sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}\sin\omega_0(t+C),\qquad p=\sqrt{2mE}\cos\omega_0(t+C)$$

其中的正负号可以吸收到常数C中，只要取$C\to C+\pi/\omega_0$即可。

现在取$H=H_0+H'$，然后作正则变换，

$$x,p\to C,E$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H_0=0\Longrightarrow H=H_0+H'\to K=H+\frac{\partial S}{\partial t}=H'$$

得微扰方程和哈密顿量，

$$\dot{C}=\frac{\partial H'}{\partial E},\qquad \dot{E}=-\frac{\partial H'}{\partial C}$$

$$H'=\frac{1}{4}\lambda x^4=\frac{\lambda E^2}{m\omega_0^2}\sin^4\omega_0(t+C)=\frac{\lambda E^2}{8m\omega_0^2}\{3-4\cos 2\omega_0(t+C)+\cos 4\omega_0(t+C)\}$$

即

$$\begin{cases}\dot{C}=\dfrac{\lambda E}{4m\omega_0^2}\{3-4\cos 2\omega_0(t+C)+\cos 4\omega_0(t+C)\}\\ \dot{E}=\dfrac{\lambda E^2}{2m\omega_0}\{2\sin 2\omega_0(t+C)-\sin 4\omega_0(t+C)\}\end{cases}$$

可用按λ的幂级数展开求解。若保留到一阶，

$$C(\lambda,t)=C_0+C_1(t)\lambda+\mathcal{O}(\lambda^2),\qquad E(\lambda)=E_0+E_1(t)\lambda+\mathcal{O}(\lambda^2)$$

$$\begin{cases}\dot{C}_1(t)=\dfrac{E_0}{4m\omega_0^2}\{3-4\cos 2\omega_0(t+C_0)+\cos 4\omega_0(t+C_0)\}\\ \dot{E}_1(t)=\dfrac{E_0^2}{2m\omega_0}\{2\sin 2\omega_0(t+C_0)-\sin 4\omega_0(t+C_0)\}\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}C_1(t)=\dfrac{E_0}{4m\omega_0^2}\left\{3t-\dfrac{2}{\omega_0}\sin 2\omega_0(t+C_0)+\dfrac{1}{4\omega_0}\sin 4\omega_0(t+C_0)\right\}\\ E_1(t)=\dfrac{E_0^2}{2m\omega_0}\left\{-\dfrac{1}{\omega_0}\cos 2\omega_0(t+C_0)+\dfrac{1}{4\omega_0}\cos 4\omega_0(t+C_0)\right\}\end{cases}$$

这时仍可近似看成是简谐振动，

$$x=\sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}\sin\omega_0(t+C)\approx\sqrt{\frac{2E_0}{m\omega_0^2}}\sin\left(\omega_0\left(1+\frac{3\lambda E_0}{4m\omega_0^2}\right)t+\omega_0C_0\right)$$

$$\omega=\omega_0\left(1+\frac{3\lambda E_0}{4m\omega_0^2}\right)$$

5. 作用变量和角变量

我们讨论自治系统的周期运动，

$$H=H(q,p)$$

我们希望找到一组好用的正则变量（辐角和角动量），来描述周期运动。

先选取合适的坐标（类似简正坐标），把哈密顿特征函数分离变量，

$$W(q,\eta)=W_1(q_1,\eta)+W_2(q_2,\eta)+\cdots+W_n(q_n,\eta)$$

定义**作用变量**

$$J_\alpha\stackrel{\text{def}}{=}\frac{1}{2\pi}\oint p_\alpha dq_\alpha=\frac{1}{2\pi}\oint\frac{\partial W(q,\eta)}{\partial q_\alpha}dq_\alpha=\frac{1}{2\pi}\oint\frac{\partial W_\alpha(q_\alpha,\eta)}{\partial q_\alpha}dq_\alpha=J_\alpha(\eta)\ \ (\text{指标}\alpha\text{不求和})$$

$$J_\alpha=J_\alpha(\eta)$$

这里的积分对一个周期进行。J_α具有角动量（或作用量）的量纲。

反解出$\eta_\alpha = \eta_\alpha(J)$，代入哈密顿特征函数，

$$W = W\big(q, \eta(J)\big)$$

现在以$W(q,J)$为第二类生成函数

$$F_2(q,J) \overset{\text{def}}{=} W\big(q, \eta(J)\big)$$

作正则变换，

$$q, p \to \Theta, J$$

$$K(\Theta, J) = H(q,p) + \frac{\partial W(q,J)}{\partial t} = H(q,p) = E\big(\eta(J)\big) \overset{\text{def}}{=} E(J)$$

其中**角变量**为

$$\Theta_\alpha = \Theta_\alpha(q) \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial W(q,J)}{\partial J_\alpha}$$

新的正则方程为

$$\dot{\Theta}_\alpha = \frac{\partial E(J)}{\partial J_\alpha}, \qquad \dot{J}_\alpha = -\frac{\partial E(J)}{\partial \Theta_\alpha} = 0$$

作用变量J_α守恒，而角变量则随时间线性变化，

$$\Theta_\alpha(t) = \frac{\partial E(J)}{\partial J_\alpha} t + \Theta_{0\alpha}$$

且在一个周期内增加2π，

$$\int_T d\Theta_\alpha(t) = \int_T d\frac{\partial W(q,J)}{\partial J_\alpha} = \int_T \frac{\partial^2 W(q,J)}{\partial q_\beta \partial J_\alpha} dq_\beta = \oint \frac{\partial^2 W(q,\eta)}{\partial q_\beta \partial J_\alpha} dq_\beta = \frac{\partial}{\partial J_\alpha} \oint \frac{\partial W(q,\eta)}{\partial q_\alpha} dq_\alpha$$
$$= \frac{\partial}{\partial J_\alpha} \sum_{\beta=1}^{n} 2\pi J_\beta = 2\pi \ (\text{指标}\alpha\text{不求和})$$

可以不求解运动方程，直接求得圆频率：

$$\omega_\alpha = \dot{\Theta}_\alpha = \frac{\partial E(J)}{\partial J_\alpha}$$

例 引力场中的质点

取平面极坐标，

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}\right) - \frac{\alpha}{r}$$

可分离变量，令

$$W = W_1(r) + W_2(\theta)$$

RHJE:

$$H\left(r, \theta, \frac{\partial W}{\partial r}, \frac{\partial W}{\partial \theta}\right) = E$$

$$\frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{dW_1}{dr}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\left(\frac{dW_2}{d\theta}\right)^2\right\} - \frac{\alpha}{r} = E$$

$$\Rightarrow \frac{dW_2}{d\theta} = p_\theta \text{ (constant)} \Rightarrow W_2 = p_\theta \theta$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{dW_1}{dr}\right)^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}\right\} - \frac{\alpha}{r} = E \Rightarrow \frac{dW_1}{dr} = \pm\left(2mE + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{p_\theta^2}{r^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

约定取正号（从近心点向远心点运动，$p_r > 0$），积分得

$$W = p_\theta \theta + \int \left(2mE + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{p_\theta^2}{r^2}\right)^{\frac{1}{2}} dr$$

作用变量为

$$J_\theta = \frac{1}{2\pi}\oint p_\theta d\theta = p_\theta$$

$$J_r = \frac{1}{2\pi}\oint p_r dr = 2 \times \frac{1}{2\pi}\int_{r_{min}}^{r_{max}} \left(2mE + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{p_\theta^2}{r^2}\right)^{\frac{1}{2}} dr$$

上式中积分限是二次方程

$$2mE + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{p_\theta^2}{r^2} = 0$$

的根（被积函数中的二次函数非负给定了r的取值范围）。积分得

$$J_r = -p_\theta + \alpha\sqrt{\frac{m}{2|E|}}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{m\alpha^2}{2(J_r + J_\theta)^2}$$

上式取负号的原因是，只有$\mathrm{E} < 0$才是周期运动。否则轨迹可以到达无穷远，是散射。

现在可计算圆频率，

$$\omega_r = \frac{\partial E}{\partial J_r} = \frac{m\alpha^2}{(J_r + J_\theta)^3} = \sqrt{\frac{8|E|^3}{m\alpha^2}}, \qquad \omega_\theta = \frac{\partial E}{\partial J_\theta} = \omega_r$$

两个圆频率之比为 1，是有理数，故周期运动的轨道封闭。

6. 绝热不变量

例 单摆作微振动，缓慢拉绳到一半长度，求振幅变化。（Erenfest, Einstein，1911，第一次 Solvay 会议）

定义：考虑一个外部参数λ缓慢变化的哈密顿系统$H(q,p,\lambda)$，如果物理量$A(q,p,\lambda)$满足

$$\forall\epsilon>0,\exists\delta>0,\text{if } 0<\dot{\lambda}<\delta \;\&\; 0<t<\frac{1}{\dot{\lambda}},|A(q(t),p(t),\lambda)-A(q(0),p(0),\lambda=0)|<\epsilon$$

则称$A(q(t),p(t),\lambda)$是**绝热不变量**（adiabatic invariants）。

定理：作周期运动的系统的 Hamiltonian 中有缓慢变化的参数，则作用变量是绝热不变量。

证明 可参考 Goldstein 3ed. p549 阿诺德 p232

设系统的缓变参数为$\lambda(t)$，

$$H=H\big(q,p,\lambda(t)\big),\qquad \dot{\lambda}(t),\ddot{\lambda}(t)\to 0$$

先把λ看成常数，由受限哈密顿-雅可比方程

$$H\left(q,\frac{\partial W}{\partial q},\lambda\right)=E$$

求得的第二类生成函数$F_2(q,J,\lambda)=W(q,\eta(J),\lambda)$，确定了一个正则变换，

$$q,p,H\to\Theta,J,K=E(J,\lambda)$$

现在考虑$\lambda=\lambda(t)$不是常数，但仍利用这个正则变换，变成以作用变量和角变量为正则变量，选用第一类生成函数表示此变换，有

$$F_1(q,\Theta,\lambda)=W(q,J,\lambda)-J_\alpha\Theta_\alpha$$

$$q_\alpha,p_\alpha,H\xrightarrow{F_1=W(q,J,\lambda)-J_\alpha\Theta_\alpha}\Theta_\alpha,J_\alpha,K(J,\lambda)$$

新哈密顿量应该为

$$K(\Theta,J,\lambda)=E(J,\lambda)+\frac{\partial F_1(q,\Theta,\lambda)}{\partial t}=E(J,\lambda)+\frac{\partial F_1(q,\Theta,\lambda)}{\partial\lambda}\dot{\lambda}$$

写出正则方程，

$$\dot{\Theta}_\alpha=\frac{\partial K(\Theta,J,\lambda)}{\partial J_\alpha}=\frac{\partial\big(E(J,\lambda)\big)}{\partial J_\alpha}+\frac{\partial^2F_1(q,\Theta,\lambda)}{\partial\lambda\partial q_\beta}\dot{\lambda}\frac{\partial q_\beta(\Theta,J,\lambda)}{\partial J_\alpha}$$

$$\dot{J}_\alpha = -\frac{\partial K(\Theta,J,\lambda)}{\partial \Theta_\alpha} = -\frac{\partial\left\{\frac{\partial F_1(q(\Theta,J,\lambda),\Theta,\lambda)}{\partial\lambda}\dot{\lambda}\right\}}{\bar{\partial}\Theta_\alpha} = -\dot{\lambda}\frac{\partial^2 F_1(q(\Theta,J,\lambda),\Theta,\lambda)}{\bar{\partial}\Theta_\alpha\partial\lambda}$$

其中$\bar{\partial}\Theta_\alpha$表示要用链式法则对$\Theta_\alpha$求全偏导。

考虑作用变量变化$\dot{J}_\alpha$在一个周期内的平均值，

$$\langle \dot{J}_\alpha \rangle_{t_0} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\tau}\int_{t_0}^{t_0+\tau} \dot{J}_\alpha dt = -\langle \dot{\lambda}\frac{\partial^2 F_1(q,\Theta,\lambda)}{\partial\Theta_\alpha\partial\lambda}\rangle_{t_0} \xrightarrow{\ddot{\lambda}\approx 0} -\dot{\lambda}(t_0)\langle\frac{\partial^2 F_1(q,\Theta,\lambda)}{\partial\Theta_\alpha\partial\lambda}\rangle_{t_0}$$

可证$F_1(q(\Theta,J,\lambda),\Theta,\lambda)$是$\Theta_\alpha$的周期函数，从而

$$\frac{\partial F_1}{\partial\lambda}(\Theta,J,\lambda), \qquad \frac{\partial^2 F_1(q,\Theta,\lambda)}{\partial\Theta_\alpha\partial\lambda}$$

也是Θ_α的周期函数，所以

$$\langle \dot{J}_\alpha \rangle_{t_0} \approx -\dot{\lambda}(t_0)\left\langle\frac{\partial^2 F_1(q,\Theta,\lambda)}{\partial\Theta_\alpha\partial\lambda}\right\rangle_{t_0} = 0 + \mathcal{O}(\dot{\lambda}^2)$$

$$J_\alpha = \text{constant} + \mathcal{O}(\dot{\lambda}^2)$$

是绝热不变量。

注：（1）F_2不是周期函数，周期函数在一个周期的变化为零，但是

$$\int_T dF_2(q,J,\lambda) = \oint dW(q,J,\lambda) = \oint \frac{\partial W(q,J,\lambda)}{\partial q_\alpha} dq_\alpha = 2\pi\sum_\alpha J_\alpha \neq 0$$

（2）但相应的生成函数F_1是周期函数，

$$\int_T dF_1(q,J,\lambda) = \oint \frac{\partial W(q,J,\lambda)}{\partial q_\alpha} dq_\alpha - J_\alpha \oint d\Theta_\alpha = 2\pi\sum_\alpha J_\alpha - 2\pi\sum_\alpha J_\alpha = 0$$

即$F_1(q,J,\lambda)$是角变量Θ_α的周期函数，可以作 Fourier 展开。

例 单摆

解：单摆的拉氏量

$$L = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2 + mgl\cos\theta$$

$$p_\theta = ml^2\dot{\theta}$$

广义能量守恒，

$$\frac{p_\theta^2}{2ml^2} - mgl\cos\theta = -mgl\cos\theta_0$$

$$p_\theta = \pm\sqrt{2m^2gl^3(\cos\theta - \cos\theta_0)}$$

$$J = \oint p_\theta d\theta = 4\int_0^{\theta_0} \sqrt{2m^2gl^3(\cos\theta - \cos\theta_0)}d\theta = 8m\sqrt{gl^3}\int_0^{\theta_0} \sqrt{\sin^2\frac{\theta_0}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}}d\theta$$

令

$$\sin\frac{\theta}{2} \stackrel{\text{def}}{=} \sin\frac{\theta_0}{2}\sin\varphi\,, \qquad \varphi \in [0,\frac{\pi}{2}]$$

微分得

$$\frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}d\theta = \sin\frac{\theta_0}{2}\cos\varphi\, d\varphi$$

$$d\theta = 2\sin\frac{\theta_0}{2}\frac{\cos\varphi}{\cos\frac{\theta}{2}}d\varphi$$

于是

$$\sqrt{\sin^2\frac{\theta_0}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}} = \sin\frac{\theta_0}{2}\cos\varphi$$

$$J = 16m\sqrt{gl^3}\sin^2\frac{\theta_0}{2}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{\cos^2\varphi}{\cos\frac{\theta}{2}}d\varphi = 16m\sqrt{gl^3}\sin^2\frac{\theta_0}{2}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{\cos^2\varphi}{\sqrt{1-\sin^2\frac{\theta_0}{2}\sin^2\varphi}}d\varphi$$

$$= 16m\sqrt{gl^3}\cos\frac{\theta_0}{2}\left(E\left(-\tan^2\frac{\theta_0}{2}\right) - K\left(-\tan^2\frac{\theta_0}{2}\right)\right)$$

其中$K(x)$是第一类完全椭圆积分，$E(x)$是的第二类完全椭圆积分。绝热不变量J的一个有理逼近

$$J \approx \pi m g^{1/2} l^{3/2}\theta_0^2\frac{1-0.042935\theta_0^2}{1+0.009128\theta_0^2}$$

泰勒展开式为

$$J \approx \pi m g^{1/2} l^{3/2}\left(\theta_0^2 - \frac{5}{96}\theta_0^4 + \frac{23}{46080}\theta_0^6\cdots\right)$$

可以直接求领头项，

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{\cos^2\varphi}{\sqrt{1-\sin^2\frac{\theta_0}{2}\sin^2\varphi}}d\varphi \approx \int_0^{\frac{\pi}{2}}\cos^2\varphi\, d\varphi = \frac{\pi}{4}$$

$$J \approx \pi m g^{1/2} l^{3/2}\theta_0^2$$

或者考虑单摆的微振动，并利用量纲分析，可简单得出绝热不变量：

$$[J] = [ET]$$

$$E = mgl(1 - \cos\theta_0) \approx \frac{1}{2}mgl\theta_0^2$$

$$T \approx 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$$

$$ET \propto \theta_0^2 l^{3/2}$$

绝热不变，

$$\theta_0 \propto l^{-3/4}$$

$l \to \frac{1}{2}l$时，振幅$\theta_0 \to 2^{3/4}\theta_0$

例 关在盒子里的分子

一维自由运动，缓慢改变l，绝热不变量为

$$\oint m\dot{x}dx = mv \cdot 2l \propto \sqrt{E}l$$

三维运动

$$\sqrt{E}l = \sqrt{E}V^{1/3}$$

即理想气体[6]的温度在绝热压缩下

$$T \propto \langle E \rangle \propto V^{-\frac{2}{3}}$$

$$TV^{\frac{2}{3}} = \text{constant}$$

与热学中绝热过程

$$TV^{\frac{1}{\alpha}} = \text{constant}, \qquad \alpha = \frac{\text{DOF}}{2} = \frac{3}{2}$$

一致。

理想气体压强的绝热变化

$$PV = nRT \propto V^{-\frac{2}{3}}$$

$$PV^{\frac{5}{3}} = \text{constant}$$

[6] 无内部自由度的单原子分子，双原子常温下可以激发转动能级，多两个自由度。

等离子体 磁通不变 磁力透镜

粒子加速器 缓变电磁场，温漂

量子力学中的绝热不变量 Berry 相位

7. 程函近似和薛定谔方程

光学问题：

波动光学→几何光学 Born P98

光波的波函数$\vec{\mathrm{E}}\mathrm{e}^{\frac{i2\pi}{\lambda_0}\int nds}$，满足麦克斯韦方程

短波近似（eikonal approximation）得几何光学的费马原理，

$$\delta\int nds = 0$$

力学问题：物质波→经典粒子

$$\delta S = \delta\int Ldt = 0$$

物质波的相位为$\mathrm{e}^{\frac{iS}{\hbar}}$，单粒子波函数

$$\psi(t,\vec{r}) = \sqrt{\rho(t,\vec{r})}e^{\frac{iS(t,\vec{r})}{\hbar}}$$

代入薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(t,\vec{r})\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t} - \sqrt{\rho}\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\sqrt{\rho} - \frac{i\hbar}{m}\left(\nabla\sqrt{\rho}\cdot\nabla S\right) + \frac{1}{2m}\sqrt{\rho}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\sqrt{\rho}\nabla^2 S + V\sqrt{\rho}$$

分开实部和虚部，得两个方程，

$$\begin{cases}\dfrac{\partial S}{\partial t} = \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{1}{\sqrt{\rho}}\nabla^2\sqrt{\rho} - \dfrac{1}{2m}(\nabla S)^2 - V \\ \dfrac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t} = -\dfrac{1}{m}\left(\nabla\sqrt{\rho}\cdot\nabla S\right) - \dfrac{1}{2m}\sqrt{\rho}\nabla^2 S\end{cases}$$

第一个方程

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{\rho}}\nabla^2\sqrt{\rho} = 0$$

其中左边最后一项玻姆（David Joseph Bohm）称之为“量子势”、“信息势”，包含全部的量子效应。$\hbar \to 0$时成为哈密顿-雅克比方程

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V = 0$$

第二个方程即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \frac{1}{m} \nabla S\right) = 0$$

$$\vec{j} \stackrel{\text{def}}{=} \rho \frac{1}{m} \nabla S, \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

按玻恩统计解释，ρ是几率密度，$\vec{j}$是几率流密度，这一连续方程意味着几率守恒。