理论力学（二）

哈密顿力学

拉格朗日方程的降阶

- 拉格朗日函数是以广义坐标和广义速度描述系统的。通过拉格朗日方程，可以得到二阶微分方程组。这与牛顿力学通过力的各个分量的分析，得到运动的加速度满足的方程具有类似的形式。
- 可以用广义速度为中间变量v_i，把二阶微分方程变为一阶微分方程，代价是变量个数加倍。

拉格朗日方程的降阶

- 方程组为：

$$\dot{q}_i = v_i, \quad \frac{d}{dt}\frac{\partial L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{v},t)}{\partial v_i} = \frac{\partial L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{v},t)}{\partial q_i}$$

- 这 $2s$ 个方程中，计算 q_i 的时间微商太简单，而计算 v_i 的时间微商太复杂。中间变量取 v_i 并不合适。从拉格朗日方程看，直接可以计算广义动量 p_i ，因而把它取为中间变量是合适的。

广义动量作为中间变量

- 但是，拉格朗日函数中，自变量含有广义速度，而不含有广义动量。需要反解出广义速度用广义动量来表达：

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \Rightarrow \dot{q}_i = \dot{q}_i(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$$

- 哈密顿力学的理论研究了如何取自变量和系统函数来描述力学体系，使所得方程更加简单易解： $\dot{p}_i = \frac{\partial L(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)}{\partial q_i}$

系统函数自变量的共轭变量

- 若系统函数 f 以 x,y 为自变量，则它的全微分 df 就写成这些自变量 x 和 y 的微分 dx 和 dy 之线性和。反之，若

$$df = udx + vdy = \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy$$

则系统函数 f 以 x,y为自变量，即 $f = f(x,y)$

- 系数 u,v 称为对应自变量 x,y 的共轭变量。且满足

$$u = \frac{\partial f}{\partial x}，\ v = \frac{\partial f}{\partial y}$$

勒让德变换

- 勒让德变换可以将系统函数的某个自变量（如下例的x）换为它的共轭变量（u），同时，系统函数也有相应变化。由于：

$$df(x,y) = udx + vdy = d(ux) - xdu + vdy$$

则定义另一个系统函数 $g = \pm(ux - f)$，如取+号有

$$dg(u,y) = d(ux - f) = xdu - vdy$$

- 这里g的全微分是du和dy线性和，因而它以 u, y 为自变量，即 $g = g(u,y)$。
- 由系统$f(x,y)$经勒让德变换成新的系统$g(u,y)$。

拉格朗日函数变换为哈密顿函数

- 拉格朗日函数为系统函数时，广义速度和广义动量是共轭坐标。

$$dL(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)=\sum_{i=1}^{s}(p_i d\dot{q}_i+\frac{\partial L}{\partial q_i}dq_i)+\frac{\partial L}{\partial t}dt$$

- 若以 $\dot{q}_i$ 的共轭变量 p_i 为自变量，进行勒让德变换，得到新的系统函数 $H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$

$$H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=\sum^{s}p_i\dot{q}_i-L(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)$$

拉格朗日函数变换为哈密顿函数

- 新的系统函数H的自变量以p_i替换$\dot{q}_i$，全微分 dH 应表达为这些自变量微分的线性和：

$$dH(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=\sum_{i=1}^{s}(p_i d\dot{q}_i+\dot{q}_i dp_i)-dL(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}},t)$$

$$=\sum_{i=1}^{s}\left(\dot{q}_i dp_i-\frac{\partial L}{\partial q_i}dq_i\right)-\frac{\partial L}{\partial t}dt$$

- 这个新的系统函数 H 称为哈密顿函数。

哈密顿函数

- 哈密顿函数 $H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 数值上等于广义能量积分，但广义动量必须为自变量。由于

$$dH=\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}dp_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}dq_i\right)+\frac{\partial H}{\partial t}dt$$

- 比较 dH 的两个表达式，则对应有：

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i},\quad -\frac{\partial L}{\partial q_i}=\frac{\partial H}{\partial q_i},\quad -\frac{\partial L}{\partial t}=\frac{\partial H}{\partial t}$$

哈密顿正则方程

- 利用拉格朗日方程，有：

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

- p_i 和 q_i 称为正则共轭变量。完整的方程组有$2s$个方程：

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}，\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

- 称为哈密顿正则方程。此方程组具有对称形式。

哈密顿正则方程

- 方程给出了 $2s$ 个变量随时间的变化率。可由当前时刻各变量的值，利用方程求出各变量随时间的变化率，再数值积分求出下个时刻各变量的值，逐个时间步向后推进，求解整个系统的演化过程。
- 方程组中前 s 个给出广义速度和广义动量之间的关系，后 s 个等价于原来的 s 个拉格朗日方程。整个方程组方程数量是拉格朗日方程组的2倍，但微分方程都是一阶的。

哈密顿正则方程中的循环坐标

- 如果拉格朗日函数不显含某个广义坐标，即存在某循环坐标，则对应的广义动量守恒。从哈密顿正则方程可知，哈密顿函数也不显含该广义坐标，同时，守恒的广义动量可取为常数，因而可相当于系统中没有这个自由度（可遗坐标）。
- 包括广义动量在内的 $2s$ 个正则变量只要其中一个在哈密顿函数中不显含，它对应的正则共轭变量就是常数，系统就可以减去该自由度（可遗）。

哈密顿量守恒的条件

- 利用正则方程可得：

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{i=1}^{s}(\frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i) + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

- 因此若哈密顿函数不显含时间，广义能量积分或哈密顿量守恒。由于$-\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$，可知此时拉格朗日函数也不显含时间，也同样得到广义能量积分或哈密顿量守恒的结论。
- 由此可知哈密顿函数$H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$若缺少任何自变量都有对应的守恒量。

哈密顿正则方程与拉格朗日方程比较

- 拉格朗日函数及方程可以直接得到。而哈密顿函数需要通过广义动量代替广义速度之后，从拉格朗日函数经过变换得到。
- 拉格朗日方程是二阶的微分方程，而哈密顿方程是一阶的。但哈密顿方程的变量个数增大了一倍。
- 对于循环坐标，哈密顿正则方程处理起来方便很多，无论哈密顿函数缺少任意一个q，p，t，都可以找到它相应的守恒量。
- 拉格朗日方程和哈密顿方程本质上是等价的。

劳斯函数

- 经过对比得知，哈密顿正则方程擅长对循环坐标处理，而拉格朗日方程对普通坐标处理较为简便。若只对部分坐标采用勒让德变换，使其处理用哈密顿正则方程，而对其余不做变换，即得为劳斯函数。设对 $\dot{q}_1 \sim \dot{q}_m$ 做变换，其余不变，则劳斯函数为

$$R(q_1, \ldots, q_s; p_1, \ldots, p_m, \dot{q}_{m+1}, \ldots, \dot{q}_s; t) = \sum_{i=1}^{m} p_i \dot{q}_i - L$$

劳斯函数

- 对于 $q_1 \sim q_m$ 和 $p_1 \sim p_m$ 满足的方程为：
$$\dot{q}_i = \frac{\partial R}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial R}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, m$$
- 而对于 $q_{m+1} \sim q_s$ 和 $p_{m+1} \sim p_s$ 满足的方程为：
$$\frac{d}{dt}\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial R}{\partial q_i} = 0, \quad i = m+1, \dots, s$$
- 若劳斯函数不显含时间，同样可得 H 守恒。

哈密顿函数及正则方程举例

- 一维弹簧谐振子问题。

拉格朗日函数 $L=\frac{1}{2}m\dot{q}^2-\frac{1}{2}kq^2$，故 $p=m\dot{q}$，

哈密顿函数为：$H=p\dot{q}-L=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}kq^2$

由于 H 不显含时间 t，是守恒量。正则方程为：

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

消去 p 可得 $m\ddot{q}+kq=0$，等同拉格朗日方程。

哈密顿函数及正则方程举例

- 相对论带电粒子在电磁场中运动。

拉格朗日函数为：

$$L = -mc^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} + q\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v} - q\varphi$$

广义动量 $\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial v} = m\gamma\boldsymbol{v} + q\boldsymbol{A}$，$\gamma = \left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$

哈密顿函数为：$H = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v} - L = m\gamma c^2 + q\varphi$

$$= c\sqrt{(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2 + m^2c^2} + q\varphi$$

哈密顿函数及正则方程举例

- 若标势和矢势均不显含时间 t，则 H 守恒。

正则方程为：$\dot{\boldsymbol{q}}=\boldsymbol{v}=\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}=\frac{\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}}{m\gamma}$,

$$\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial x_i}=q\frac{\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}}{m\gamma}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial x_i}-q\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}$$
$$=q\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial x_i}-q\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}$$

由于 $p_i=qA_i+m\gamma v_i$，可带入进一步推导：

哈密顿函数及正则方程举例

- $$\dot{p}_x=\frac{d}{dt}(m\gamma v_x)+q(\frac{\partial A_x}{\partial t}+q\boldsymbol{v}\cdot\nabla A_x)$$

令 $E_x=-\frac{\partial A_x}{\partial t}-\frac{\partial \varphi}{\partial x}$ 为电场，$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 为磁场，方程即化为

$$\frac{d}{dt}(m\gamma v_x)=qE_x+q\boldsymbol{v}\cdot\ (\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial x}-\nabla A_x)$$
$$=qE_x+q\left(v_yB_z-v_zB_y\right)$$

- 矢量式为：$\frac{d}{dt}(m\gamma\boldsymbol{v})=q(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$

哈密顿函数及正则方程举例

- $$\dot{p}_x = \frac{d}{dt}(m\gamma v_x) + q(\frac{\partial A_x}{\partial t} + q\boldsymbol{v} \cdot \nabla A_x)$$
  $$= q\boldsymbol{v} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial x} - q\frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

令 $E_x = -\frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial x}$ 为电场，$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ 为磁场，方程即化为

$$\frac{d}{dt}(m\gamma v_x) = qE_x + q\boldsymbol{v} \cdot \left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial x} - \nabla A_x\right)$$
$$= qE_x + q\left(v_y B_z - v_z B_y\right)$$

哈密顿正则方程举例

- 平方反比有心力场中的运动。
- 拉格朗日函数为：

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

- 广义动量：$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$，$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}$
- 哈密顿函数：

$$H = p_r\dot{r} + p_\theta\dot{\theta} - L = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{k}{r}$$

因哈密顿函数不含时间，故守恒。

哈密顿正则方程举例

- 正则方程为

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m}, \quad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\theta^2}{mr^3} + \frac{k}{r^2}$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2}, \quad \dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = 0$$

- 可得 $p_\theta = mr^2\dot{\theta}$ 也是守恒量。消去p_r得：

$$m\ddot{r} = \frac{p_\theta^2}{mr^3} + \frac{k}{r^2}$$

系统由于有循环坐标，可简化为1维运动。

哈密顿正则方程解题步骤

- 用哈密顿正则方程解题的步骤大致有
  - 确定系统的自由度，选取广义坐标。
  - 写出系统的拉格朗日函数。
  - 计算广义动量，并用广义动量来表示广义速度。
  - 通过勒让德变换计算哈密顿函数H。得到的H表达式中的广义速度用广义动量替换。
  - 列出哈密顿正则方程。
  - 求解方程，得到广义坐标随时间的变化关系。并结合初始条件确定积分常数。

由哈密顿原理推导哈密顿正则方程

- 由哈密顿原理出发，将 $\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{q}$ 都看成是独立变量，变分之后能得到哈密顿正则方程。

$$\delta S=\delta\int_A^B L dt=\delta\int_A^B \left(\sum_{i=1}^{s} p_i\dot{q}_i-H\right)dt$$

$$=\sum_{i=1}^{s} p_i\delta q_i\Big|_A^B+\int_A^B\left[\left(\dot{q}_i-\frac{\partial H}{\partial p_i}\right)\delta p_i-\left(\dot{p}_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)\delta q_i\right]dt$$

- 在 A，B 两点变分为0，因δp_i和δq_i的任意性，得正则方程 $\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}$，$\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$

泊松括号

- 泊松括号定义为

$$[f,g]=\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right)$$

- 对于只含单个p,q的情况是雅克比行列式

$$[f,g]=\left|\frac{\partial(f,g)}{\partial(q,p)^T}\right|=\begin{vmatrix}\frac{\partial f}{\partial q} & \frac{\partial g}{\partial q}\\ \frac{\partial f}{\partial p} & \frac{\partial g}{\partial p}\end{vmatrix}$$

泊松括号

- 利用正则方程，任意函数 f 全微分可表示为：

$$\frac{df}{dt}=\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial f}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)+\frac{\partial f}{\partial t}$$

$$=\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)+\frac{\partial f}{\partial t}=[f,H]+\frac{\partial f}{\partial t}$$

- 如果 f 不显含时间 t，且 $[f,H]=0$，则可判断该物理量 f 是守恒的。特别取 f 为 q_i，p_i 得

$$\dot{q}_i=[q_i,H]，\dot{p}_i=[p_i,H]$$

泊松括号基本性质

- 反对称性 $[f,g]=-[g,f]$，$[f,f]=0$
- 是否配对
  $[q_i,p_j]=\delta_{i,j}$，$[q_i,q_j]=0$，$[p_i,p_j]=0$
- 全微分 $\frac{d}{dt}[f,g]=\left[\frac{df}{dt},g\right]+\left[f,\frac{dg}{dt}\right]$
- 偏微分 $\frac{\partial}{\partial x}[f,g]=\left[\frac{\partial f}{\partial x},g\right]+\left[f,\frac{\partial g}{\partial x}\right]$
- 分配律 $[f,u+v]=[f,u]+[f,v]$
- 结合律 $[f,uv]=[f,u]v+[f,v]u$
- 泊松恒等式
  $[f,[u,v]]+[u,[v,f]]+[v,[f,u]]=0$

泊松定理

- 如果 $f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 和 $g(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ 是守恒量，则由他们组成的泊松括号也是守恒量。利用全微分算符和偏微分算符可交换的性质，有
$$\frac{d}{dt}[f,g]=\left[\frac{df}{dt},g\right]+\left[f,\frac{dg}{dt}\right]=0$$
- 即可得证。由泊松定理，可以从两个已知的守恒量推导出更多的守恒量，但大多得到的是常数或原来运动积分的组合。

泊松括号例题

- J_x，J_y，J_z和J分别是相对原点的角动量的三个分量和总角动量。求$[J_x，J_y]$，$[J_x，J]$，说明J_x，J_y不能同时成为广义动量，若他们两个都是运动积分，则J_z也是运动积分。

证：$\left[J_x, J_y\right] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z]$

$$= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - \left[zp_y, zp_x\right] + [zp_y, xp_z]$$

$$= [p_z, z]yp_x - [p_z, p_z]yx - 0 + [z, p_z]xp_y$$

$$= -yp_x + xp_y = J_z$$

泊松括号例题

- 同样有：$[J_y, J_z] = J_x$，$[J_z, J_x] = J_y$。则
$$[J_x, J^2] = [J_x, J_x^2 + J_y^2 + J_z^2] = [J_x, J_y^2 + J_z^2]$$
$$= 2[J_x, J_y]J_y + 2[J_x, J_z]J_z = 2J_zJ_y - 2J_yJ_z = 0$$
- 如果以J_x, J_y同时成为广义动量，必然总有
$$[J_x, J_y] = 0$$
- 但以上结果显示$[J_x, J_y] = J_z \neq 0$，因此矛盾。
- 如果J_x, J_y都是运动积分，由于$[J_x, J_y] = J_z$，由泊松定理，则J_z也是运动积分。

泊松括号例题

- 哈密顿函数$H=p_1p_2+q_1q_2$，证明$p_1^2+q_2^2$和$p_2^2+q_1^2$是守恒量，并导出其他守恒量。

证：$[p_1^2+q_2^2,H]=2[p_1,H]p_1+2[q_2,H]q_2$

$$=2[p_1,q_1q_2]p_1+2[q_2,p_1p_2]q_2$$

$$=2[p_1,q_1]q_2p_1+2[q_2,p_2]p_1q_2$$

$$=-2q_2p_1+2p_1q_2=0$$

- 由对称性，同样有 $[p_2^2+q_1^2,H]=0$。
- 而$[p_1^2+q_2^2,p_2^2+q_1^2]=[p_1^2,q_1^2]+[q_2^2,p_2^2]$

$=-2p_1q_1+2q_2p_2$，因前两个量守恒它也守恒。

正则变换

- 通过对拉格朗日函数做勒让德变换，以广义动量为自变量替换了广义速度，得到哈密顿正则方程。进一步，考虑用一组新的自变量$Q_i(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$，$P_i(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$和新的系统函数$K(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t)$所得的方程组来描述力学体系的演化，有可能使得方程组求解更加简便。
- 如果新的变量和函数之间仍然满足正则方程，则从 $\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, H$ 到 $\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, K$ 的变换为正则变换。

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t)}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t)}{\partial Q_i}$$

正则变换的等价条件

- 如果到 $\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, K$ 的变换为正则变换，则有

$$\delta \int_A^B \sum_{i=1}^{s} (P_i dQ_i - K dt) = 0$$

反之，将 $\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}$ 视为独立变量，也可以得到正则方程，因而是正则变换。进一步，如果有

$$df = \sum_{i=1}^{s} p_i dq_i - H dt - \left(\sum_{i=1}^{s} P_i dQ_i - K dt \right)$$

- 其中 f 是任意函数。此时，由于以 $\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, H$ 计算的作用量变分为 0，而全微分 df 积分后变分为 0（只与端点有关），显然 $\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, K$ 计算的作用量变分也为 0，即

正则变换的等价条件

- 因此，正则变换的等价条件为：存在函数 f 使

$$df(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t)=\sum_{i=1}^{s}(p_i dq_i-P_i dQ_i)+(K-H)dt$$

- 等式右端是微分dq_i，dQ_i，dt的线性表达式。按照其全微分应该写为各个变量微分的线性组合的原则，函数 f 的自变量是$(q_1,\ldots,q_s;Q_1,\ldots,Q_s;t)$。
- 这里函数 f 称为生成函数。它的自变量除了时间 t 之外，一部分$q_1,\ldots,q_s$来自原系统，另一部分$Q_1,\ldots,Q_s$来自新系统，生成函数是新旧系统联系的纽带。

正则变换的生成函数

- 通过勒让德变换，生成函数 f 中的自变量 $\boldsymbol{q}$ 可置换为共轭变量 $\boldsymbol{p}$ ，或置换自变量 $\boldsymbol{Q}$ 为共轭变量 $\boldsymbol{P}$ 。我们称未置换时的生成函数为第一类生成函数 $f=f_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t)$。因此

$$df_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t)=\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial f_1}{\partial q_i}dq_i+\frac{\partial f_1}{\partial Q_i}dQ_i\right)+\frac{\partial f_1}{\partial t}dt$$

- 对应两个 df 表达式的各项系数相等，有

$$p_i=\frac{\partial f_1}{\partial q_i},\ \ P_i=-\frac{\partial f_1}{\partial Q_i},\ \ K=H+\frac{\partial f_1}{\partial t}$$

正则变换的第 2 种类型

- 通过勒让德变换，用 $\boldsymbol{p}$ 或 $\boldsymbol{P}$ 作为 f 的自变量，能得到其他 3 种类型的正则变换。

$$df_2(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t) = d\left[f_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t) + \sum_{i=1}^{s} P_i Q_i\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial f_2}{\partial q_i}dq_i + \frac{\partial f_2}{\partial P_i}dP_i\right) + \frac{\partial f_2}{\partial t}dt$$

- 系数对应相等，可得

$$p_i = \frac{\partial f_2}{\partial q_i},\ \ Q_i = \frac{\partial f_2}{\partial P_i},\ \ K = H + \frac{\partial f_2}{\partial t}$$

正则变换的 3 种类型

- 第 3 种类型的正则变换的生成函数和系数对应关系为:

$$f_3(\boldsymbol{p},\boldsymbol{Q},t)=f_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t)-\sum_{i=1}^{s}p_iq_i$$

- 做全微分之后，对应系数相等，可得

$$q_i=-\frac{\partial f_3}{\partial p_i},\ P_i=-\frac{\partial f_3}{\partial Q_i},\ K=H+\frac{\partial f_3}{\partial t}$$

正则变换的 4 种类型

- 第 4 种类型的正则变换的生成函数和系数对应关系为：

$$f_4(\boldsymbol{p},\boldsymbol{P},t)=f_1(\boldsymbol{q},\boldsymbol{Q},t)+\sum_{i=1}^{s}(P_iQ_i-p_iq_i)$$

- 做全微分之后，对应系数相等，可得

$$q_i=-\frac{\partial f_4}{\partial p_i}，\ Q_i=\frac{\partial f_4}{\partial P_i}，\ K=H+\frac{\partial f_4}{\partial t}$$

- 这四种类型都有 $K=H+\frac{\partial f}{\partial t}$

几个简单的正则变换

- 广义坐标和广义动量互换，生成函数为

$$f_1=\sum_{i=1}^{s}q_iQ_i \Rightarrow p_i=\frac{\partial f_1}{\partial q_i}=Q_i，\ P_i=-\frac{\partial f_1}{\partial Q_i}=-q_i$$

- 相空间平移（$Q_i=q_i+c_i$，$P_i=p_i+d_i$）：

$$f_2=\sum_{i=1}^{s}(q_i+c_i)(P_i-d_i)\Rightarrow$$

$$p_i=\frac{\partial f_2}{\partial q_i}=P_i-d_i，\ Q_i=\frac{\partial f_1}{\partial P_i}=q_i+c_i$$

正则变换实例

- 有些给定$\boldsymbol{P}$，$\boldsymbol{Q}$表达式，求证其变换是否为正则变换的问题，可将表达式带入下式左边，看能否化为形如等式右端来判断：

$$\sum_{i=1}^{s}(p_i dq_i - P_i dQ_i) = df + l\,dt$$

这里函数 l 的这部分不必处理，总会有系统函数 $K=H-l$，而 K 也不需求出 。也就是说，求全微分 df 判断变换是否为正则变换时，不必管 dt 的部分。

正则变换实例

- 例：证明$Q=\ln\frac{\sin p}{q}$， $P=q\cot p$ 为正则变换。

证：$pdq-PdQ=pdq-q\cot p\,d\ln\frac{\sin p}{q}$

$$
\begin{aligned}
&=pdq-q\cot p\frac{q}{\sin p}d\frac{\sin p}{q}\\
&=pdq-q\cot^2 p\,dp+\cot p\,dq\\
&=d[(p+\cot p)q]
\end{aligned}
$$

故变换是正则的。

一维正则变换的充要条件

- 在一维情况下，$P=P(q,p)$，$Q=Q(q,p)$ 可证明该变换是正则变换的充分必要条件为

$$\frac{\partial Q}{\partial q}\cdot\frac{\partial P}{\partial p}-\frac{\partial Q}{\partial p}\cdot\frac{\partial P}{\partial q}=1$$

- 证：若 $pdq-PdQ=pdq-P(\frac{\partial Q}{\partial p}dp+\frac{\partial Q}{\partial q}dq)$

$$=(p-P\frac{\partial Q}{\partial q})dq-P\frac{\partial Q}{\partial p}dp$$

而 $$pdq-PdQ=df=\frac{\partial f}{\partial q}dq+\frac{\partial f}{\partial p}dp$$

一维正则变换的充要条件

- 由于 $\frac{\partial f}{\partial q}=p-P\frac{\partial Q}{\partial q}$， $\frac{\partial f}{\partial p}=-P\frac{\partial Q}{\partial p}$， 自然会满足:

$$\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial f}{\partial q}=\frac{\partial^2 f}{\partial p\partial q}=\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial f}{\partial p}$$

- 因此必须有: $\frac{\partial}{\partial p}\left(p-P\frac{\partial Q}{\partial q}\right)=\frac{\partial}{\partial q}\left(-P\frac{\partial Q}{\partial p}\right)$
- 即 $\frac{\partial Q}{\partial q}\cdot\frac{\partial P}{\partial p}-\frac{\partial Q}{\partial p}\cdot\frac{\partial P}{\partial q}=1$
- 反之若上式成立，逆推可知(数学证明从略)存在函数 f 使 $pdq-PdQ=df$ ，变换是正则的。

雅克比行列式

- 以上一维正则变换的充要条件可写为雅可比行列式：

$$|J|=\left|\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)^T}\right|=\frac{\partial Q}{\partial q}\cdot\frac{\partial P}{\partial p}-\frac{\partial Q}{\partial p}\cdot\frac{\partial P}{\partial q}=[Q,P]=1$$

- 在多维情况下，这个充要条件也是成立的。
- 泊松括号的正则不变性：若 q,p 到 Q,P 的变换是正则的，则有$[f,g]=[f,g]_{Q,P}$，这里

$$[f,g]_{Q,P}=\frac{\partial f}{\partial Q}\cdot\frac{\partial g}{\partial P}-\frac{\partial f}{\partial P}\cdot\frac{\partial g}{\partial Q}$$

雅克比行列式

- 证明：

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial q} \\ \dfrac{\partial}{\partial p} \end{pmatrix}(f,g) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial Q}{\partial q} & \dfrac{\partial P}{\partial q} \\ \dfrac{\partial Q}{\partial p} & \dfrac{\partial P}{\partial p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial Q} \\ \dfrac{\partial}{\partial P} \end{pmatrix}(f,g)$$

- 取行列式后即得：$[f,g] = \left|\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)^T}\right| [f,g]_{Q,P}$

若 q,p 到 Q,P 的变换是正则的，则$\left|\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)}\right| = 1$，泊松括号的正则不变性得证。

正则变换实例

- 给出变换求生成函数。
- 已知变换$Q = q^n\cos(mp)$，$P = q^n\sin(mp)$，其中 m, n 是常数。求(1)该变换为正则变换时 m, n 的值。(2)正则变换时的第3类生成函数。
- 解：$pdq - PdQ$

$$= pdq - q^n \sin(mp)\, d(q^n\cos(mp))$$
$$= (p - nq^{2n-1}\sin(mp)\cos(mp))dq$$
$$+ mq^{2n} \sin^2(mp)\, dp$$

正则变换实例

- 需满足：
$$\frac{\partial}{\partial p}\left(p-\frac{1}{2}nq^{2n-1}\sin(2mp)\right)=\frac{\partial}{\partial q}(mq^{2n}\sin^2(mp))$$
- 即 $1=mnq^{2n-1}$，得$n=\frac{1}{2}$，$m=2$，则
$$pdq-PdQ=(p-\frac{1}{4}\sin(4p))\,dq+2q\sin^2(2p)\,dp$$
$$=d\left(pq-\frac{q}{4}\sin(4p)\right)$$
- 第3类生成函数$f_3(p,Q)=f_1(q,Q)-pq$，有
$$f_3(p,Q)=-\frac{q}{4}\sin(4p)=-\frac{Q^2}{2}\tan(2p)$$

正则变换实例

- 给出生成函数求变换并求解。
- 对谐振子哈密顿函数 $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2q^2$ 进行正则变换 $f_1=\frac{1}{2}m\omega q^2\cot Q$ ，求解系统运动。
- 解：$df_1=m\omega q\cot Q\,dq-\frac{1}{2}m\omega q^2\csc^2 Q\,dQ$
- $p=m\omega q\cot Q$，$P=\frac{1}{2}m\omega q^2\csc^2 Q$，$K=H$

$$=\frac{(m\omega q\cot Q)^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2q^2=\frac{1}{2}m\omega^2q^2\csc^2 Q$$

$$=\omega P$$

正则变换实例

- 正则方程为： $\dot{Q} = \omega$，$\dot{P} = 0$
- 在新系统中很容易求解系统运动：

$$Q = \omega t + \alpha，\ P = \frac{E}{\omega}$$

其中α是初相位，E是总能量。

- 如果再求原系统的解，利用 P 的表达式可得：

$$q = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin(\omega t + \alpha)$$

正则变换实例

- 给出生成函数求变换并求解。
- 已知生成函数 $f_1 = mg(\frac{1}{6}gQ^3 + qQ)$，给出相应的正则变换，并求解垂直运动的抛体问题。
- 解：抛体垂直运动时，$H = \frac{p^2}{2m} + mgq$
- $df_1 = mg(\frac{1}{2}gQ^2 + q)dQ + mgQdq$
- $p = mgQ$，$-P = mg(\frac{1}{2}gQ^2 + q)$，则

$$K = H = \frac{(mgQ)^2}{2m} + mgq = -P$$

正则变换实例

- 正则方程为： $\dot{Q} = -1$，$\dot{P} = 0$
- 在新系统中很容易求解系统运动：

  $Q = t_0 - t$，$-P = E$ 为常数（总能量）
- 如果再求原系统的解，利用 P 的表达式可得：

$$q = \frac{E}{mg} - \frac{1}{2} g (t - t_0)^2$$

正则变换与数值计算

- 选择第2类生成函数：

$$F_2(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t)=\sum_{i=1}^{s} q_i P_i+\varepsilon G(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t)$$

则有：

$$P_i-p_i=-\varepsilon\frac{\partial G}{\partial q_i},\ \ Q_i-q_i=\varepsilon\frac{\partial G}{\partial P_i},\ \ K=H+\varepsilon\frac{\partial G}{\partial t}$$

- 这里 ε 为很小的常量，在数值计算中可取为 Δt，G 取为 H 并把其中 $\boldsymbol{p}$ 置换为 $\boldsymbol{P}$。这样，所得的 $\boldsymbol{P}$，$\boldsymbol{Q}$ 是经过时间 Δt 后的动量和坐标，可通过数值计算逐个 Δt 时间步推进。

正则变换与数值计算

- 正则变换可用于对算法的设计和合理性检验。
- 举例来说，对于弹簧谐振子，取

$$\varepsilon = \Delta t，\ G = \frac{P^2}{2m} + \frac{k}{2} q^2$$

- 则有：

$$P = p - \Delta t \cdot k\, q，\ Q = q + \Delta t \cdot \frac{P}{m}，\ K = H$$

- 由于正则变换也可以反向进行，计算的可逆性说明这种数值计算方案是可靠的。

无限小正则变换

- 如果取 ε 为无穷小的 $d\lambda$，此时有

$$dp = P_i - p_i = -d\lambda\frac{\partial G}{\partial q_i}，\ dq = Q_i - q_i = d\lambda\frac{\partial G}{\partial P_i}$$

- 即：

$$\dot{q}_i = \dot{\lambda}\frac{\partial G}{\partial P_i} = \frac{\partial H}{\partial p_i},\ \dot{p}_i = -\dot{\lambda}\frac{\partial G}{\partial q_i} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

- 在无限小近似时，函数 G 中的 $\boldsymbol{P}$ 与 $\boldsymbol{p}$ 趋同，可取 $G(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P},t) = H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$，$\lambda = t$，即得正则方程。

无限小正则变换

- 若将无限小正则变换的新系统各个量与原系统的差值视为变分，则有：

$$\delta q_i = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i}, \quad \delta p_i = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}, \quad \delta H = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial t}$$

又因变分

$$\delta H = \sum_{i=1}^{s} (\frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial H}{\partial p_i}\delta p_i) = \sum_{i=1}^{s} (\dot{\lambda}\frac{\partial G}{\partial q_i}\delta q_i + \dot{\lambda}\frac{\partial G}{\partial P_i}\delta p_i)$$

$$= \sum_{i=1}^{s} \dot{\lambda}\varepsilon (\frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial P_i} - \frac{\partial G}{\partial P_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}) = 0$$

- 故$\frac{\partial G}{\partial t} = 0$，函数 G 不显含时间 t。

矩阵形式的正则方程组

- 记 $\boldsymbol{\eta} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})^T$ ，则哈密顿正则方程可写为矩阵形式

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

- 这里：

$$\boldsymbol{J} = \begin{bmatrix} & \boldsymbol{I}_s \\ -\boldsymbol{I}_s & \end{bmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{I}_s$ 是 s 阶单位矩阵，矩阵 $\boldsymbol{J}$ 有如下性质：

$$\boldsymbol{J}^2 = -\boldsymbol{I}_{2s}, \quad \boldsymbol{J}^T = \boldsymbol{J}^{-1} = -\boldsymbol{J}, \quad \det \boldsymbol{J} = 1$$

正则变换的矩阵形式

- 再设 $\xi = (\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P})^T$ 且矩阵 $\boldsymbol{M} = \frac{\partial \xi}{\partial \eta^T}$。若 η 到 ξ 是正则变换，则 ξ 满足

$$\dot{\xi} = \boldsymbol{J}\frac{\partial H}{\partial \xi}$$

- 另有

$$\dot{\xi} = \frac{\partial \xi}{\partial \eta^T}\dot{\eta} = \frac{\partial \xi}{\partial \eta^T}\boldsymbol{J}\frac{\partial H}{\partial \eta} = \frac{\partial \xi}{\partial \eta^T}\boldsymbol{J}\frac{\partial \xi^T}{\partial \eta}\frac{\partial H}{\partial \xi}$$

两式比较有： $\boldsymbol{M}\,\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M}^T = \boldsymbol{J}$

矩阵 $\boldsymbol{M}$ 满足此式则称为辛矩阵。若不满足，可判断变换不是正则的。

系统演化和辛矩阵

- 辛矩阵 $\boldsymbol{M}$ 具有如下性质：

$$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M} = -\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M}^{-1}\,(\boldsymbol{M}\,\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M}^T)\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M} = -\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M}$$

$$= \boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{J}，\ \det\boldsymbol{M} = 1$$

$$\boldsymbol{M}^n\,\boldsymbol{J}\,(\boldsymbol{M}^n)^T = \boldsymbol{J}，\ \boldsymbol{M}_1\boldsymbol{M}_2\,\boldsymbol{J}\,(\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{M}_2)^T = \boldsymbol{J}$$

- 特别取η和ξ分别是t_0和t时刻的变量，仍有：

$$\boldsymbol{M}\,\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M}^T = \boldsymbol{J}，\ \boldsymbol{M} = \frac{\partial\xi}{\partial\eta^T}$$

- 求解系统演化问题时，所用的数值算法如果能证明矩阵 $\boldsymbol{M}$ 一直是辛矩阵，则说明该算法稳定性好，可保持 $\boldsymbol{M}$ 的性质不变。

哈密顿-雅可比方程的由来

- 取适当的生成函数，正则变换之后，有可能使得系统函数特别简单，从而方程的求解也很简单。最简单的情况是系统函数变为 0，这时，由$\boldsymbol{Q}$、$\boldsymbol{P}$满足的正则方程可得：

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial p_i}，\ \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial q_i}$$

- 因此，$\boldsymbol{Q}$、$\boldsymbol{P}$ 均为常数。同时，若是第 2 类生成函数，则有

$$K = H + \frac{\partial f_2}{\partial t} = 0，\ Q_i = \frac{\partial f_2}{\partial P_i}，\ p_i = \frac{\partial f_2}{\partial q_i}$$

哈密顿-雅可比方程

- 这样，牛顿力学中求解方程的问题，转化为如何寻找适合的生成函数的问题。设生成函数（主函数）是 S，则有

$$H\left(q_1,\dots,q_s;\frac{\partial S}{\partial q_1},\dots,\frac{\partial S}{\partial q_s};t\right)+\frac{\partial S}{\partial t}=0$$

- 这就是哈密顿-雅可比方程。通过求解此方程，可以得到包含s+1个积分常数（记为P_0，P_1，…，P_S）的生成函数 S。

$$S=S(q_1,\dots,q_s;P_1,\dots,P_s;t)+P_0$$

哈密顿主函数中的积分常数

- 这s+1个积分常数，正是哈密顿-雅可比方程中s+1个自变量的偏微分经过积分得到的。其中，P_0不起任何作用，也没有物理意义，可以舍去或取为0。其余s个，取作生成函数中的P，即正则变换的新广义动量。
- 由正则变换，可以得到s个运动积分$\boldsymbol{Q}$：

$$Q_i = \frac{\partial S(q_1, \dots, q_s; P_1, \dots, P_s; t)}{\partial P_i}, \quad i = 1,2, \dots, s$$

- 上式偏微分过程中，要把常量 P_i 当作变量。

哈密顿主函数的物理意义

- 哈密顿主函数S其实正是作用量函数，这可以从下式中看出：

$$\frac{dS}{dt}=\sum_{i=1}^{s}\frac{\partial S}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial S}{\partial t}=\sum_{i=1}^{s}p_i\dot{q}_i-H=L$$

- 哈密顿主函数S也被称为哈密顿作用量函数。
- 哈密顿函数如果不显含时间 t，则它为守恒量，从而主函数可以积分得到如：

$$H=-\frac{\partial S}{\partial t}=E \qquad \Rightarrow S=W(\boldsymbol{q},\boldsymbol{P})-Et+P_0$$

- 其中 W 不含时间，称为哈密顿特征函数。

哈密顿-雅可比方程的解法

- 求解偏微分的哈密顿-雅可比方程，一般常用分离变量法。如前面对哈密顿函数不含时间 t 的处理，即是分离变量 t。
- 一般来说，如果哈密顿函数中只含有某个坐标 q_k 和 p_k 的组合 $g(q_k, p_k)$，则在哈密顿-雅可比方程中，可以令

$$g\left(q_k, \frac{\partial S}{\partial q_k}\right) = \text{constant}$$

- 而在哈密顿-雅可比出现这个组合的地方用这个常数代替，使方程中减少了这个变量。

哈密顿-雅可比方程实例

- 用哈密顿-雅可比方程求解一维简谐振荡。
- 解：$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kq^2$，由于不显含时间 t，可令$-\frac{\partial S}{\partial t}=H=E$，则有$S=W-Et$，特征函数 W 满足 $\frac{1}{2m}(\frac{\partial W}{\partial q})^2+\frac{1}{2}kq^2=E$，解得

$$W=\pm\int\sqrt{2mE-mkq^2}dq$$

- 这里W中的积分常数E作为广义动量P，则有积分常数 $Q=\frac{\partial S}{\partial E}=\frac{\partial W}{\partial E}-t$

哈密顿-雅可比方程实例

- $$Q = -t \pm \int \frac{m\,dq}{\sqrt{2mE - mkq^2}} = -t \pm \sqrt{\frac{m}{k}} \arcsin(\sqrt{\frac{k}{2E}}q)$$
- 可化为：$q = \pm\sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t+Q)\right)$
- 可见，$P = E$ 是总能量， Q 是初始时间的平移。

哈密顿-雅可比方程解开普勒问题

- 行星在太阳引力下运动可化为有心力场问题。
- 解：$H=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_\theta^2}{r^2}\right)-\frac{a}{r}$，因不显含时间，

  $S=W(r,\theta)-Et$，满足方程

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial r}\right)^2+\frac{1}{2mr^2}\left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)^2-\frac{a}{r}=E$$

  可分离θ，令$\frac{\partial w}{\partial \theta}=J$，有$W=J\theta+W_r(r)$，则

$$\left(\frac{\partial W_r}{\partial r}\right)^2=2m\left(E+\frac{a}{r}\right)-\frac{J^2}{r^2}$$

哈密顿-雅可比方程解开普勒问题

-
- 可得：$W_r = \pm\int dr\sqrt{2m\left(E+\frac{a}{r}\right)-\frac{J^2}{r^2}}$
- 其中常量 J 和 E 作为新系统的广义动量，有

$Q_1 = \frac{\partial S}{\partial J} = \theta + \frac{\partial W_r}{\partial J}$，记 $u = \frac{1}{r}$，有

$$Q_1 = \theta \pm \int \frac{Jdu}{\sqrt{2m(E+au)-J^2u^2}}$$

$$= \theta \pm \arccos\frac{J^2u - am}{\sqrt{2mEJ^2 + a^2m^2}}$$

哈密顿-雅可比方程解开普勒问题

- 可得轨道方程：
  $$u = J^{-2}\left[am + \sqrt{2mEJ^2 + a^2m^2}\cos(\theta - Q_1)\right]$$
- 若总能量 $E < 0$，则这个轨道方程是椭圆，
  若 $E = 0$ 则为抛物线，若 $E > 0$ 则为双曲线。
- 另一个常数为：
  $$Q_2 = \frac{\partial W_r}{\partial E} - t = \pm\int \frac{mrdr}{\sqrt{2m(Er^2 + ar) - J^2}} - t$$
- 这个等式给出了 r 与 t 之间的关系。

哈密顿-雅可比方程分离变量实例

- 用哈密顿-雅可比方程求解，哈密顿函数为：

$$H=\frac{f_1(q_1,p_1)+\cdots+f_s(q_s,p_s)}{g_1(q_1,p_1)+\cdots+g_s(q_s,p_s)}$$

- 解：取$H=E$，$S=W-Et$，则有

$$f_1\left(q_1,\frac{\partial W}{\partial q_1}\right)-Eg_1\left(q_1,\frac{\partial W}{\partial q_1}\right)+\cdots$$
$$+f_s\left(q_s,\frac{\partial W}{\partial q_s}\right)-E\left(q_s,\frac{\partial W}{\partial q_s}\right)=0$$

- 下面将一对对$\left(q_s,\frac{\partial W}{\partial q_s}\right)$分离。

哈密顿-雅可比方程分离变量实例

- 令：$W=W_1(q_1)+\cdots+W_s(q_s)$，且有
$$f_i\left(q_i,\frac{\partial W_i}{\partial q_i}\right)-E\left(q_i,\frac{\partial W_i}{\partial q_i}\right)=C_i$$
- C_i是常数，从式中解出$W_i(q_i;C_i)$，最后有
$$S=W_1(q_1;C_1)+\cdots+W_s(q_s;C_s)-Et$$
- 又由于$C_1+\cdots+C_s=0$，C_i只有s−1个独立。再加上 E，构成 s 个广义动量常数。

哈密顿-雅克比方法的相关讨论

- 从哈密顿-雅克比方程解出主函数 S，取之为第 2 类正则变换生成函数。其中的积分常数换为新广义动量P
- 这 $s+1$个“积分常数”并不一定是在积分过程中产生的，反而常常是在分离变量中出现的，其中主函数S 表达式所加的那个常数无意义，有意义的常数有 s 个。
- 这些积分常数 P_i

哈密顿-雅克比方法的相关讨论

- 在正则变换时积分常数 P_i 被视为自变量，用来求偏导：

$$Q_i = \frac{\partial S}{\partial P_i}$$

- 哈密顿-雅克比主函数 S 虽然就是作用量函数，但直接通过 Ldt 积分求出的 S 却缺乏 s 个积分常数 P_i，不能用做正则变换的母函数。
- 哈密顿函数 H 描述了系统的性质，而哈密顿-雅克比主函数 S 描述的系统进一步是具有相同的多个守恒量 P_i 的状态。

经典力学向量子力学过渡

- 考虑在自由空间中运动的质点，有

$$S = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r} - Et$$

- 这代表一类动量为$\boldsymbol{p}$、能量为E质点的哈密顿-雅可比主函数。在微观领域，德布罗意提出物质波的概念，质点运动时有波粒二象性，描述其波动的复函数 ψ 为

$$\psi = \psi_0 e^{i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)}$$

- 这里实数ψ_0是复数ψ的模，ψ_0^2代表概率。

德布罗意波的动量算符

- 由德布罗意公式 $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$，$E = \hbar\omega$ 有

$$\psi = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)} = \psi_0 e^{\frac{iS}{\hbar}}$$

- 在经典情况下，$\boldsymbol{p} = \nabla S$，而

$$\nabla\psi = \psi_0 e^{\frac{iS}{\hbar}} \frac{i}{\hbar}\nabla S = \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\psi$$

- 因此微观情况下，动量成为算符：

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$$

薛定谔方程

- 由于$\frac{\partial S}{\partial t}\psi = -i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}$，为求解$S$或波函数$\psi$，由哈密顿-雅可比方程过渡到薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

- 这里哈密顿算符

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

- 薛定谔方程是量子力学中的重要方程。

一维谐振子的解

- 一维谐振子问题：薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi$$

- 类似分离变量法，可令 $\psi=\psi_1(t)\,\psi_2(x)$，有

$$\frac{i\hbar}{\psi_1(t)}\frac{\partial\psi_1(t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m\psi_2(x)}\frac{\partial^2\psi_2(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

- 方程左边是 t 的函数，右边是 x 的函数，故都为常数 E，解得 $\psi_1(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$。

一维谐振子的解

- 令$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$，$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$，另一式简化为

$$\frac{d^2\psi_2}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi_2 = 0$$

- 再令 $\psi_2(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$，有

$$H'' - 2H'\xi + (\lambda - 1)H = 0$$

- 设$H = \sum a_n\xi^n$是多项式，系数递推关系为

$$a_{n+2}(n+2)(n+1) - 2a_n n + (\lambda - 1)a_n = 0$$

- 由于ψ在无穷远处趋于0的边界条件，H只能是有限项（设为n次）多项式。

一维谐振子的解

- 由于$a_{n+2}=0$以保证H最高项为n，从而 $\lambda=2n+1$，即有

$$E=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$$

对于 $n=0$，E也不为0，此时有归一化的波函数

$$\psi=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}-i\frac{\omega}{2}t}$$

对于 $n=1$，归一化的波函数为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{m\omega}{\hbar}xe^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}-i\frac{3\omega}{2}t}$$

薛定谔方程求解氢原子

- 对于氢原子，定态的薛定谔方程为：

$$\hat{H}\psi = E\psi，\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V，V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

- 在球坐标下分离变量，从方程求本征值E为（过程从略）：

$$E = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2n^2}，n = 1,2,\ldots$$

- n 为能级，这样很自然地得到量子化的能量。

半经典的氢原子模型

- 在玻尔的氢原子模型中，量子化的角动量为
$$mrv = n\hbar$$
- 假如电子在静电力作用下做圆周运动，有
$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$
- 由以上两式，解得半径 r，则能量
$$E = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0(2r)} = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2}$$
- 这个结果与薛定谔的定量结果一致。

薛定谔对作用量函数的代换

- 薛定谔的波动量子力学从哈密顿-雅可比方程入手，对经典的作用量函数（特征函数）作变量代换：

$$W = \hbar \ln \psi$$

- 这个代换，从数学上讲没有任何问题，但这里很自然地引入了普朗克常数作为作用量函数的单位，而这个常数与玻尔的氢原子理论中的量子化常数是相同的。

对氢原子模型的处理

- 对于氢原子模型，实际上就是经典力学中的开普勒问题，用经典力学的结果解释不了实际的氢原子。以氢原子为例，可以让我们了解如何从经典力学过渡到量子力学的。哈密顿-雅可比方程变为：

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2-\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+E\right)\psi^2=0$$

薛定谔对方程的假设

- 事实上，薛定谔并不是直接求解此方程，而是认为该方程左端的空间积分的变分为0：

$$\delta \int \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 r} + E \right) \psi^2 \right] dV = 0$$

- 这么做可能是因为波函数是分布于空间各处的，不像经典力学有确切位置和轨道，故需要对空间积分，之后变分取极值。

薛定谔对方程的假设

- 利用对于连续体系积分的变分处理，可得到：
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi=E\psi$$
- 方程可改写为：

$$\hat{H}\psi=E\psi，\ \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V$$

- 薛定谔方程的导出虽不严格，但通过与经典力学对应，物理量成为了算符，所得结果与实验能比经典力学结果更好地吻合。

从经典力学到热力学统计物理
——刘维尔定理

- 相空间。由多个粒子构成的体系中，以广义坐标和广义动量为自变量构成的空间。又称为「 空间，自变量$q($
- 代表点。系统处于某个初始坐标和动量，可用在相空间中一个代表点来表示。
- 统计系综。对于相空间中的一群代表点作统计平均。
- 刘维尔定理：相空间的代表点的统计系综的分布密度在运动过程中保持不变。

相空间的连续性方程

- 考虑在相空间Γ的一个小的方体积元$\Delta V_i = \Delta q_i \Delta S_i$内，单位时间内流出这个侧面和进入体积的一个侧面相对的另一个侧面的粒子个数之差为：

$$(\rho \dot{q}_i \Delta S_i)\Big|_{q_i+\Delta q_i} - (\rho \dot{q}_i \Delta S_i)\Big|_{q_i} = \frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} \Delta q_i \Delta S_i$$

- 这些净流出的粒子使小体积元内密度减小，即得相空间的连续性方程。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{s} [\frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} + \frac{\partial(\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i}] = 0$$

刘维尔定理的证明

- 由于相空间的内粒子满足正则方程，则：

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_{i=1}^{s}[\frac{\partial(\rho\dot{q}_i)}{\partial q_i}+\frac{\partial(\rho\dot{p}_i)}{\partial p_i}]$$

$$=\frac{d\rho}{dt}+\sum_{i=1}^{s}\rho[\frac{\partial\dot{q}_i}{\partial q_i}+\rho\frac{\partial\dot{p}_i}{\partial p_i}]$$

$$=\frac{d\rho}{dt}+\sum_{i=1}^{s}\rho[\frac{\partial}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\rho\frac{\partial}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}]=\frac{d\rho}{dt}=0$$

- 即在相空间的代表点的密度在运动过程中不改变。

刘维尔定理的应用

- 在真实的物理状态所对应的代表点的附近，人为地设置一些个代表点（对应初始条件相差不大的设想的物理状态），则由刘维尔定理，代表点的密度不变，说明在以后演化过程中，这些人为设置的代表点仍然在真实物理状态对应的代表点附近，即初始条件的误差不变，不会持续增加。这为数值计算的可靠性提供了依据。
- 另一方面，若以单个粒子为考察对象，在 6 维相空间中，每个真实粒子对应 6 维相空间的一个代表点，则代表点的密度 ρ 即为相空间的密度，即分布函数 $f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v},t)$。

刘维尔定理的应用

- 由于相空间密度 f 的变化可以表示为：

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + [f, H] = 0$$

- 在系统达到了平衡时，各处的密度将不再随时间变化，即

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

- 因此有$[f, H] = 0$。由此可推导各种平衡态的分布函数（即相空间的密度 f），特别是当分布函数是以H为自变量的函数时，显然满足条件 $[f, H] = 0$，可作为平衡时的分布函数。

刘维尔定理的应用

- 例如，平衡状态的气体的速度分布为：

$$f = n_0\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}}$$

- 描述等离子体状态的动力论方程，即为刘维尔定理的又一个应用：

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla f + \frac{\boldsymbol{F}}{m}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} = 0$$

- 其中，f 是分布函数，也即相空间的粒子密度，$\boldsymbol{F}$ 是粒子受力，m是粒子质量，二者相除得到的加速度是速度变量（代替广义动量）的时间全导数。

位力定理

- 如果一个系统，其中所有粒子所处的区域和其动量都是有限的，可定义有限量：

$$S \triangleq \sum_i \boldsymbol{r}_i \cdot \boldsymbol{p}_i$$

它随着时间的变化为：

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i (\dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot \boldsymbol{p}_i + \boldsymbol{r}_i \cdot \dot{\boldsymbol{p}}_i) = 2T + \sum_i \boldsymbol{r}_i \cdot \boldsymbol{F}_i$$

- 其中，右式的第二项称为系统的位力。

位力定理

- 做长时间的平均，得：

$$\left\langle \frac{dS}{dt} \right\rangle = 2\langle T\rangle + \left\langle \sum_i \boldsymbol{r}_i \cdot \boldsymbol{F}_i \right\rangle = \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau} \int \frac{dS}{dt} dt = \lim_{\tau\to\infty} \frac{S(\tau) - S(0)}{\tau}$$

$$= 0$$

- 这样可以求出动能的平均值：

$$\langle T\rangle = -\frac{1}{2} \left\langle \sum_i \boldsymbol{r}_i \cdot \boldsymbol{F}_i \right\rangle$$

- 若在保守力场中，则 $\boldsymbol{F}_i = -\nabla_i V$

位力定理

- 特别地，当保守力是距离的n次方时，有：

$$\langle T\rangle=\frac{1}{2}\left\langle\sum_i \boldsymbol{r}_i\cdot\frac{\partial V}{\partial \boldsymbol{r}_i}\right\rangle=\frac{n+1}{2}\langle V\rangle$$

对于平方反比力 $n=-2$，有：$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle$

这是对于椭圆轨道成立。对于双曲线和抛物线，由于位置不是有限的，结果不成立。

对于谐振子 $n=1$，有：$\langle T\rangle=\langle V\rangle$

理想气体状态方程

- 位力定理可应用于理想气体。假设在长方体空间中密封有N个分子的气体，平均每个分子在3维空间的每维的动能为$\frac{1}{2}kT$，则有

$$\langle T\rangle = \frac{3}{2}NkT = -\frac{1}{2}\left\langle \sum_i \boldsymbol{r}_i \cdot \boldsymbol{F}_i \right\rangle$$

- 其中的两分子之间的碰撞作用力，它们$\boldsymbol{r}$相同，$\boldsymbol{F}$相反，求和位力时相互抵消。

理想气体状态方程

- 因此，位力计算只需考虑边界对分子的作用力。设最左边的边界为平面$x = x_0$，分子所受作用力都沿 x 方向，单个分子的位力 $\boldsymbol{r}_i \cdot \boldsymbol{F}_i = x_0 F_{ix}$，多个分子求和后为$x_0 PS$，其中$S$是左边界面积，$P$是压强。
- 同样处理右边界 $x = x_1$ 平面，面上分子的位力之和为 $-x_1 PS$，左右两者之和为 $-PV$，其中V是长方体体积。6个面的总位力为 $-3PV$ ，带入位力定理即得：

$$PV = NkT$$

对一些周期运动的处理

- 在用哈密顿-雅可比方程解力学问题的过程中，我们常用分离变量法。
- 若一个系统满足如下三个条件：

1. 哈密顿函数不显含时间
2. 广义坐标具有周期的性质
3. 哈密顿特征函数中，能将各坐标分离变量

- 则可应用作用变量和角变量的方法进行求解。下面对该方法做简介。

对一些周期运动的处理

- 此时，取第二类正则变换的母函数为不含时的特征函数：

$$f_2 = W = \sum_{i=1}^{s} W_i(q_i)$$

- 要求经过正则变换之后，系统函数K为常数：

$$K = \frac{\partial f_2}{\partial t} + H = H(\boldsymbol{q}, \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{q}}) = E$$

- 相应的有：

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i} = \frac{\partial W_i}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial W}{\partial P_i}$$

特征函数的方程解法

- 应用分离变量法，可以求出每个W_i，由于并产生相应的积分常数$c_i\ (i = 1, 2, \ldots, s)$，因为特征函数 W 本身可加任一常数，不妨设它是 c_1，此常数无意义，我们取用 E 代替 c_1，与 $c_2, c_3, \ldots, c_s$ 共有 s 个常数作为函数W_i的自变量，即有

$$W_i = W_i(q_i, E, c_2, c_3, \ldots, c_s)$$

- 这里并不使用这些常数作为新的广义动量。

作用变量

- 广义动量 $P_1, P_2, \ldots, P_s$ 重新定义为

$$J_i = \oint p_i dq_i = \oint \frac{\partial W_i(q_i, E, c_2, c_3, \ldots, c_s)}{\partial q_i} dq_i$$

- 这些量又称为作用变量，原因是它具有作用量的量纲。这里的带圈积分符号的意义是做一个周期的积分。
- 反解积分常数 $E, c_2, c_3, \ldots, c_s$ 可得他们作为新的广义动量 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{J} = (J_1, J_2, \ldots, J_s)$ 的函数：

$$E = E(\boldsymbol{J}), \quad c_i = c_i(\boldsymbol{J})$$

作用变量和角变量

- 应用正则变换的公式，有：

$$Q_i = \frac{\partial W}{\partial J_i}，\ j = 1,2,\ldots,s$$

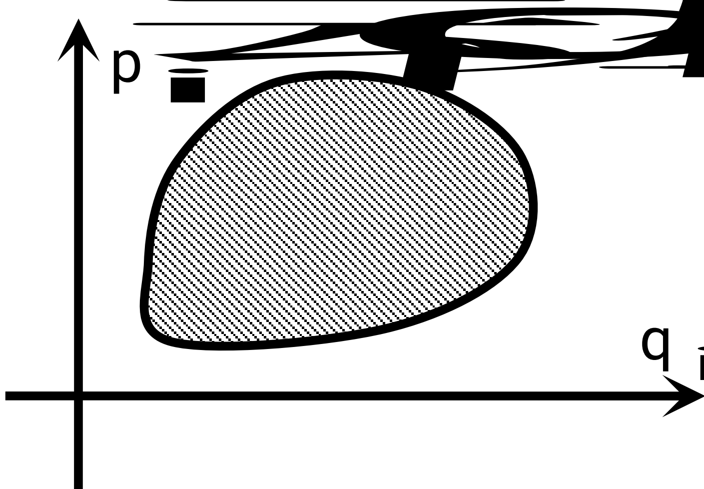
- 新的广义坐标 Q_i 称为角变量，对新系统注意到$K = E(\boldsymbol{J}) = E(\boldsymbol{P})$，则有

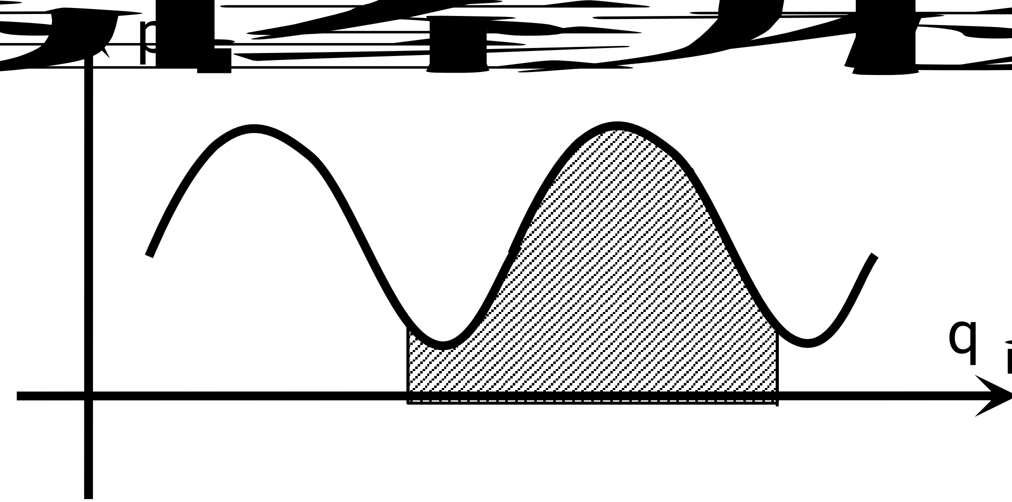
$$\dot{J}_i = \dot{P}_j = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = -\frac{\partial E}{\partial Q_i} = 0$$

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = \frac{\partial E}{\partial J_i} = \mathrm{const} = \nu_i$$

作用变量的意义

- 可知新的广义动量（作用变量）J_i





角变量的意义

- 新的广义坐标（角变量） Q_i 是随时间线性变化的量，比例系数 ν_i 是常数，为考察其意义，设 q_j 变化一个周期，则 Q_i 的变化为：

$$\Delta Q_i=\oint\frac{\partial Q_i}{\partial q_j}dq_j=\oint\frac{\partial^2 W}{\partial q_j\partial J_i}dq_i=\oint\frac{\partial p_j}{\partial J_i}dq_j$$

$$=\frac{\partial}{\partial J_i}\oint p_j dq_j=\frac{\partial J_j}{\partial J_i}=\delta_{i,j}$$

- 即q_i每经过一个周期，角变量 Q_i 增加1；而其他 $q_j\ (j\neq i)$ 经一个周期后角变量 Q_i 不变。

角变量的意义

- 若 q_i 经过一个周期所需的时间是 T_i，由
$$\dot{Q}_i = \nu_i$$
- 积分后则有
$$Q_i = \nu_i t + c \ \Rightarrow \Delta Q_i = \nu_i T_i$$
- 而前面已证明$\Delta Q_i = 1$，可见 ν_i 是周期 T_i 的倒数，其意义是频率。

周期运动——一维谐振子

- 一维谐振子的振动是周期的运动，由于一维情况无需分离变量问题，满足3个前提条件。其哈密顿函数为

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

- J是相空间 (q, p) 中轨迹构成的椭圆面积：

$$J = \pi\sqrt{2mE} \cdot \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \frac{2\pi E}{\omega}$$

周期运动——一维谐振子

- 系统函数

$$H = E = \frac{\omega J}{2\pi}$$

- 由正则方程知

$$\dot{Q} = \frac{\partial E}{\partial J} = \frac{\omega}{2\pi} = \nu$$

- 即振动的频率为$\frac{\omega}{2\pi}$

周期运动——氢原子能级问题

- 用经典理论处理氢原子，简化为电子在核的静电有心力场中运动问题。哈密顿函数为：

$$H=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{p_\theta^2}{2mr^2}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=E$$

- 分离p_θ，令$p_\theta=\frac{\partial W_\theta}{\partial\theta}=c_\theta$，得$W_\theta=c_\theta\theta$，$J_\theta=\oint c_\theta d\theta=2\pi c_\theta$。对于 W_r 有

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W_r}{\partial r}\right)^2+\frac{c_\theta^2}{2mr^2}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=E$$

周期运动——氢原子能级问题

- 即得：

$$W_r = \pm \int dr \sqrt{2mE + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{c_\theta^2}{r^2}}$$

- 则 $p_r = \frac{\partial W_r}{\partial r}$ 正是上式的被积函数。而

$$J_r = 2\int_{r_1}^{r_2} p_r dr = \frac{e^2}{2\varepsilon_0}\sqrt{\frac{m}{2(-E)}} - 2\pi c_\theta$$

- 这里 r_1和 r_2分别为最近和最远点（具体积分过程附于后面）。

周期运动——氢原子能级问题

- 经典方法结合量子化条件

$$J_r + J_\theta = nh$$

- 这里 n 是能级数，h 是普朗克常数。有

$$E = -\frac{m}{2}\left(\frac{e^2}{2\varepsilon_0 nh}\right)^2 = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2n^2}$$

- 这个结果与前面给出的相同。

周期运动——氢原子能级问题

- 具体积分计算时，记
- $p_r = \sqrt{2mE + \frac{me^2}{2\pi\varepsilon_0 r} - \frac{c_\theta^2}{r^2}} = \sqrt{A^2 - \left(\frac{c_\theta}{r} - B\right)^2}$
- 其中$A^2 = 2mE + B^2$，$B = \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0 c_\theta}$，令

$\frac{c_\theta}{r} - B = A\cos u$，则$p_r = A\sin u$，在$r_1$和$r_2$点处，$p_r = 0$，相当于$u = 0$和$u = \pi$，积分

$$\frac{J_r}{2} = \int_{r_1}^{r_2} p_r dr = -\int_{r_1}^{r_2} r dp_r = -A\int_0^{\pi} r\cos u\, du$$

周期运动——氢原子能级问题

- 再令$w=\tan\frac{u}{2}$，则有 $dw=\frac{du}{2}\cdot\csc^2\frac{u}{2}$

$$\frac{J_r}{2c_\theta}=\int_0^\pi\frac{-A\cos u}{B+A\cos u}du=\int_0^\pi\frac{Bdu}{B+A\cos u}-\pi$$

$$=\int_0^\infty\frac{2Bdw}{B(1+w^2)+A(1-w^2)}-\pi$$

$$=\frac{2B}{\sqrt{B^2-A^2}}\arctan\left(w\sqrt{\frac{B+A}{B-A}}\right)\Bigg|_0^\infty-\pi=\frac{\pi B}{\sqrt{-2mE}}-\pi$$

- 因此，$J_r+2\pi c_\theta=\frac{e^2}{2\varepsilon_0}\sqrt{\frac{m}{2(-E)}}$

微扰近似

- 力学体系的哈密顿函数H可分为未扰动运动的部分H_0和微扰的部分H_1：$H = H_0 + H_1$
- 对于未扰动时的系统运动，从哈密顿-雅可比方程求出作用量函数S_0，以及以S_0为母函数的正则变换得到的新的广义动量P_i和广义坐标$Q_i\ (i=1,2,\ldots,s)$，它们在未扰动时均是常量。
- 从而，从这些守恒量的表达式可反解出未扰动的运动：

$$q_i = q_i(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t),\quad p_i = p_i(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P}, t)$$

微扰近似

- 存在扰动时，仍然用S_0为母函数做同样的正则变换，系统新的哈密顿量为

$$K(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t)=H_0+H_1+\frac{\partial S}{\partial t}=H_1(\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t),\boldsymbol{p}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t),t)$$

- 此时，新的广义动量P_i和广义坐标Q_i(i=1,2,…,s)不再为常数，它们满足正则方程：

$$\dot{Q}_i=\frac{\partial K}{\partial P_i},\ \dot{P}_i=-\frac{\partial K}{\partial Q_i},\ K=H_1(\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t),\boldsymbol{p}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P},t),t)$$

- 从这个正则方程中可以解出新广义变量随时间的变化：$Q_i=Q_i\left(\boldsymbol{Q}^{(0)},\boldsymbol{P}^{(0)},t\right)$，$P_i=Q_i\left(\boldsymbol{Q}^{(0)},\boldsymbol{P}^{(0)},t\right)$

微扰近似

- 由于使用了同样的母函数做正则变换，用新的广义变量表达原广义变量的公式依然成立。
- 从而给出有存在扰动时，系统的运动有：

$$q_i = q_i\left(\boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{Q}^{(0)}, \boldsymbol{P}^{(0)}, t\right), \boldsymbol{P}\left(\boldsymbol{Q}^{(0)}, \boldsymbol{P}^{(0)}, t\right), t\right)$$

$$p_i = p_i\left(\boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{Q}^{(0)}, \boldsymbol{P}^{(0)}, t\right), \boldsymbol{P}\left(\boldsymbol{Q}^{(0)}, \boldsymbol{P}^{(0)}, t\right), t\right)$$

- 有时，对于复杂的系统还可以用微扰处理的方法逐级求解。如行星运行过程中受到其他行星的引力扰动，就可以用微扰法来处理。

单摆的微扰近似

- 单摆的哈密顿函数为

$$H = \frac{P_\theta^2}{2ml^2} + ml^2\omega_0^2(1-\cos\theta) \approx H_0 + H_1$$

$$H_0 = \frac{P_\theta^2}{2ml^2} + \frac{1}{2}ml^2\omega_0^2\theta^2，\ H_1 = -\frac{1}{24}ml^2\omega_0^2\theta^4$$

- 用H_0求得母函数S_0，做正则变换有$Q = \frac{\partial S_0}{\partial E}$，得

$$\theta = \theta_0\cos\tau，\ \theta_0 = \sqrt{\frac{2E}{ml^2\omega_0^2}}，\ \tau = \omega_0(t+Q)$$

$$K = H_1 = -\frac{E^2}{6ml^2\omega_0^2}\cos^4(\omega_0(t+Q))$$

单摆的微扰近似

- 由新的正则方程，得到

$$\dot{E} = -\frac{\partial K}{\partial Q} = \frac{2E^2}{3ml^2\omega_0}\cos^3\big(\omega_0(t+Q)\big)\sin\big(\omega_0(t+Q)\big)$$

$$\dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial E} = -\frac{E}{3ml^2\omega_0^2}\cos^4(\omega_0(t+Q))$$

- 考虑长期变化，忽略振荡项，有

$$\langle\dot{E}\rangle = 0,\ \langle\dot{Q}\rangle = -\frac{E}{8ml^2\omega_0^2} = -\frac{\theta_0^2}{16}$$

- 故角频率相对减小量为 $-\frac{\theta_0^2}{16}$，与以前结果一致。