

第 6 章 哈密顿力学

在拥有拉格朗日力学这样有力的理论工具之后，之所以有必要学习哈密顿理论，主要有两个原因：

- (1) 拉格朗日方程是二次常微分方程组，我们希望引入中间变量把方程组降阶，并且让降阶后的运动方程更加对称，方便在理论研究中应用；
- (2) 哈密顿力学与量子力学有更直接的对应关系。

一、 哈密顿方程

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，

$$q_\alpha, \dot{q}_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, n.$$

在哈密顿力学中，自变量取为广义坐标 q_α 和广义动量

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

把变量 $\{q_\alpha, p_\alpha | \alpha = 1, 2, \dots, n\}$ 看成是 $2n$ 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. 勒让德变换

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

设函数 $f = f(x_1, \dots, x_n)$ ，记梯度为

$$y_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial f}{\partial x_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

引进函数

$$g(y_1, \dots, y_n) \stackrel{\text{def}}{=} y_\alpha x_\alpha - f(x_1, \dots, x_n)$$

注意等式右边的 x_α ，必须通过求解方程组

$$y_\alpha = \frac{\partial f}{\partial x_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

得到 $x_\alpha = x_\alpha(y_1, \dots, y_n)$ 之后代入，以完成变量代换。

这个方程组可解等价于

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

这是作勒让德变换的前提。

推论 勒让德变换是对合的 (involutive)，即对 $g(p)$ 进行勒让德变换，可得 $f(x)$ 。

3. 哈密顿函数

对拉格朗日函数 $L = L(t, q, \dot{q})$ 作勒让德变换，

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

首先写出广义能量函数，

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

为了表明这是不同于 $H(t, q, p)$ 的函数，这里换了一个符号。

从方程组

$$p_\alpha = \frac{\partial L(t, q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

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

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

称 $H(t, q, p)$ 为哈密顿量 (Hamiltonian)、哈密顿函数或者正则函数。

根据勒让德变换的对合性，哈密顿函数与拉格朗日函数等价，因此哈密顿函数也可以完全描述系统的动力学性质。

4. 哈密顿方程

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

对广义能量函数微分，得

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

我们已经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

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

所以有恒等式

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

现在把拉格朗日方程

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

代入第二式得

$$p_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$$

物理运动满足

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

此即哈密顿方程¹，又称为正则方程（因为方程很对称）。

推论 哈密顿函数 H 不显含时间 $\Leftrightarrow$ 拉氏函数 L 不显含时间 $\Leftrightarrow H$ 是守恒量。

非保守系统的拉氏方程是

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

即

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - Q_\alpha^{\text{nc}}$$

代入勒让德变换关系式，得到非保守系统的哈密顿方程，

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

¹ William Rowan Hamilton, *On a General Method in Dynamics; by which the Study of the Motions of all free Systems of attracting or repelling Points is reduced to the Search and Differentiation of one central Relation, or characteristic Function*, Philosophical Transactions of the Royal Society, part II for 1834, pp. 247–308.; *Second Essay on a General Method in Dynamics*, ibid., part I for 1835, pp. 95–144.

例 用哈密顿力学的方法，写出单摆的运动方程。

解： 设单摆与垂直向下方向的夹角为 θ ，

$$T = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2, \quad V = -mgl \cos \theta$$

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

正则动量与广义速度之间的变换关系是

$$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = ml^2\dot{\theta} \Rightarrow \dot{\theta} = \frac{p_\theta}{ml^2}$$

作勒让德变换得哈密顿函数，

$$H(t, q, p) = p_\theta \dot{\theta} - L = \frac{p_\theta^2}{2ml^2} - mgl \cos \theta$$

据此写出正则方程，

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{ml^2}, \quad \dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = -mgl \sin \theta$$

在哈密顿力学框架下，求解牛顿力学问题的一般步骤为：

①建立坐标系；

②写出拉格朗日函数 $L = T - V$ ；

③写出广义动量并反解，利用勒让德变换写出哈密顿量（也可跳过写拉氏量这一步，直接写出 $H = T_2 - T_0 + V$ ）；

④写出正则方程；

⑤求解方程。

例 中心势中的质点

解： 在平面极坐标下，拉氏函数为

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

广义动量为

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

解出广义速度，

$$\dot{r} = \frac{p_r}{m}, \quad \dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2}$$

作勒让德变换，的哈密顿函数，

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

正则方程是

$$\begin{cases} \dot{r} = \frac{p_r}{m}, & \dot{p}_r = -\frac{p_\theta^2}{mr^3} - \frac{dV}{dr} \\ \dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2}, & \dot{p}_\theta = 0. \end{cases}$$

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

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

拉氏函数是

$$L = pq - H = pq - \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2}mq^2 - \frac{1}{2}kq^2$$

5. 正则方程的首次积分

从哈密顿函数 $H(t, q, p)$ 的表达式，能够直接看出是否依赖某些变量，得出运动方程的一

些首次积分。

(1) 哈密顿函数不显含时间，则哈密顿量守恒。

(2) 哈密顿函数不含某个坐标 q_α ，则共轭的正则动量 p_α 守恒：

$$p_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = 0 \Rightarrow p_\alpha = \text{constant}$$

这时我们可以在哈密顿中把 p_α 用常数替代，坐标 q_α 不再体现为系统的一个自由度，可以遗弃²。

(3) 哈密顿函数不含某个正则动量 p_α ，那么正则坐标守恒：

$$q_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = 0 \Rightarrow q_\alpha = \text{constant}$$

这个首次积分，在拉格朗日力学框架中不能直接看出来。

6. 奇异性

变量代换

$$\{q_\alpha, q_\alpha | \alpha = 1, 2, \dots, n\} \rightarrow \{q_\alpha, p_\alpha | \alpha = 1, 2, \dots, n\}$$

可行的条件是

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

即拉氏函数非奇异。

我们需要先检验牛顿力学和相对论力学系统，是否为非奇异系统。

定理 在牛顿力学的问题中，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：对牛顿力学问题，

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

质点组的动能为

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 = T_2 + T_1 + T_0 \\ T_2 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial q_\beta} q_\alpha q_\beta \\ T_1 &= \sum_{i=1}^N m_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial t} q_\alpha \\ T_0 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \frac{\partial x_i}{\partial t} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial t} \end{aligned}$$

所以海斯矩阵是

$$\frac{\partial^2 L}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} = \frac{\partial^2 T_2}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} = \sum_{i=1}^N m_i \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial q_\beta}$$

于是，对任意 n 维矢量 δq_α ，二次型

$$\frac{\partial^2 L}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} \delta q_\alpha \delta q_\beta = \sum_{i=1}^N m_i \delta x_i^2 \geq 0$$

是半正定的；多项式的系数，即海斯矩阵，是半正定矩阵。

又因为

$$m_i > 0, \quad \delta x_i^2 \geq 0$$

二次型取零的等价条件是

$$\delta x_i = 0, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}$$

当所有质点的虚位移都是零时，必然期望

$$\delta q_\alpha = 0, \quad \forall \alpha \in \{1, 2, \dots, n\}$$

否则就有

$$\delta x_i = \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha \Rightarrow \text{rank} \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} < n$$

即广义坐标有变动，但是所有的质点位移 x_i 都没有变化——这种情况只能说明广义坐标

² 基于这个原因，拉格朗日力学中定义的循环坐标，又称为可遗坐标

$\{q_\alpha | \alpha = 1, 2, \dots, n\}$ 不独立，或者不是恰当定义的（well-defined），理应重新选取一组合适的参数作为广义坐标。

我们同样可以证明，相对论质点组是非奇异系统。

电磁耦合的广义势函数是广义速度的一次多项式，不改变海森矩阵。当质点之间存在电磁作用时，系统也是非奇异的。

需要注意，当拉格朗日理论被应用到非力学系统时，拉氏函数可以是奇异的。受限于学时，本章不讨论奇异系统。

二、哈密顿力学的一些应用

1. 劳斯变换

当拉氏系统中存在循环坐标（可遗坐标）时，对应的广义动量守恒。劳斯（Edward John Routh）引进了一种消去可遗坐标，写出降维后的等效拉氏函数的简单方法。

只对后 $n - k$ 个自由度作勒让德变换，利用方程组

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}, \quad \alpha = k+1, \dots, n$$

解出

$$q_\alpha = q_\alpha(t, q_1, \dots, q_k, q_1, \dots, q_k, p_{k+1}, \dots, p_n)$$

定义劳斯-拉格朗日函数（或称劳斯函数 Routhian）为

$$R(t, q_1, \dots, q_k, q_1, \dots, q_k, q_{k+1}, \dots, q_n, p_{k+1}, \dots, p_n) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\alpha=k+1}^n p_\alpha q_\alpha - L(t, q_1, \dots, q_n, q_1, \dots, q_n)$$

定义式的右边，需要把 q_α 的代入，以消去这些变量。

将劳斯函数定义式的两边取微分，

$$\begin{aligned} \text{L. H. S.} &= dR(t, q_1, \dots, q_k, q_1, \dots, q_k, q_{k+1}, \dots, q_n, p_{k+1}, \dots, p_n) \\ &= \frac{\partial R}{\partial t} dt + \sum_{i=1}^k \frac{\partial R}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^k \frac{\partial R}{\partial q_i} dq_i + \sum_{\alpha=k+1}^n \frac{\partial R}{\partial q_\alpha} dq_\alpha + \sum_{\alpha=k+1}^n \frac{\partial R}{\partial p_\alpha} dp_\alpha \\ \text{R. H. S.} &= d \left\{ \sum_{\alpha=k+1}^n p_\alpha q_\alpha - L(t, q_1, \dots, q_n, q_1, \dots, q_n) \right\} \\ &= \sum_{\alpha=k+1}^n p_\alpha dq_\alpha + \sum_{\alpha=k+1}^n q_\alpha dp_\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt - \sum_{i=1}^k \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \sum_{\alpha=k+1}^n \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha - \sum_{\beta=1}^n \frac{\partial L}{\partial q_\beta} dq_\beta \\ &= \sum_{\alpha=k+1}^n q_\alpha dp_\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt - \sum_{i=1}^k \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \sum_{\alpha=k+1}^n \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha - \sum_{i=1}^k \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i \end{aligned}$$

得到一组恒等式，

$$\begin{cases} \frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \\ \frac{\partial R}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i}, & i = 1, 2, \dots, k. \\ \frac{\partial R}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i}, & i = 1, 2, \dots, k. \\ \frac{\partial R}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}, & \alpha = k+1, \dots, n. \\ \frac{\partial R}{\partial p_\alpha} = q_\alpha, & \alpha = k+1, \dots, n. \end{cases}$$

把拉格朗日方程

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial q_\beta} = \frac{\partial L}{\partial q_\beta}, \quad \beta = 1, 2, \dots, n$$

代入恒等式，有

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \frac{\partial R}{\partial q_i} = \frac{\partial R}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, k \\ q_\alpha = \frac{\partial R}{\partial p_\alpha} \\ p_\alpha = -\frac{\partial R}{\partial q_\alpha} \end{array} \right\}, \quad \alpha = k+1, \dots, n$$

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

前面的三个等式称为**劳斯方程**。

现在设拉氏函数中的后 $n-k$ 个广义坐标为循环坐标，

$$L = L(t, q_1, q_2, \dots, q_k, q_1, q_2, \dots, q_n), \quad k < n$$

只对可遗坐标的自由度作勒让德变换，得劳斯函数

$$R = R(t, q_1, \dots, q_k, q_1, \dots, q_k, p_{k+1}, \dots, p_n)$$

劳斯方程是

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \frac{\partial R}{\partial q_i} = \frac{\partial R}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, k \\ q_\alpha = \frac{\partial R}{\partial p_\alpha} \\ p_\alpha = 0 \Rightarrow p_\alpha = J_\alpha \end{array} \right\}, \quad \alpha = k+1, \dots, n$$

在广义坐标 q_i 满足的方程中，全都没有可遗坐标，而守恒量 p_α 可代之以常数 J_α 。

舍弃可遗坐标，剩下的 k 个广义坐标满足拉格朗日方程。定义**等效拉氏函数**为

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

降维后运动方程是

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L_{\text{eff}}}{\partial q_i} - \frac{\partial L_{\text{eff}}}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, \dots, k$$

需要指出的是，如果我们直接把守恒的广义动量代入原拉氏量，所得的新“拉氏函数”不能给出正确的拉氏方程。

例 在中心力场中运动的粒子，拉氏函数是

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

θ 是循环坐标，广义动量 p_θ 守恒，

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

等效拉氏函数定义为

$$L_{\text{eff}}(r, r) \stackrel{\text{def}}{=} L - p_\theta \dot{\theta} = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 - \frac{J^2}{2mr^2} - V(r)$$

是等效动能和等效势能之差，

$$T_{\text{eff}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} m\dot{r}^2, \quad V_{\text{eff}}(r) \stackrel{\text{def}}{=} V(r) + \frac{J^2}{2mr^2}$$

即有心力场质点的运动，等价于等效势场中的一维运动， $J^2/2mr^2$ 是离心势。

由于循环坐标及对应的广义动量均已被消去，剩下的变量满足拉格朗日方程，

$$m\ddot{r} - \frac{J^2}{mr^3} = -\frac{dV}{dr} = F_r(r)$$

作为对比，如果直接将 $\dot{\theta} = J/mr^2$ 代入拉氏量 $L(r, \theta, r, \dot{\theta})$ ，

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

这个错误的拉氏函数中，离心势的正负号不正确。

2. 哈密顿系统的位力定理

由于

$$\frac{d}{dt} p_\alpha q_\alpha = p_\alpha \dot{q}_\alpha + \dot{p}_\alpha q_\alpha$$

对等式两边取时间平均，左边为

$$\left\langle \frac{d}{dt} p_\alpha q_\alpha \right\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{1}{\tau} p_\alpha q_\alpha \Big|_0^\tau$$

当系统的正则坐标取值范围有界时，式子左边是零，因此

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{1}{\tau} p_\alpha q_\alpha \Big|_0^\tau = 0$$

于是

$$\langle p_\alpha \dot{q}_\alpha \rangle + \langle \dot{p}_\alpha q_\alpha \rangle = 0$$

最后，把正则方程代入上式，得

$$\left\langle p_\alpha \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \right\rangle = \left\langle q_\alpha \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \right\rangle$$

3. 电磁场中的带电粒子

(1) 相对论带电粒子

电磁场中的相对论带电粒子的拉氏函数（光速 $c = 1$ ）是

$$L(x, \dot{x}) = -m_0 \sqrt{1 - \dot{x}^2} - q\phi + qA \cdot \dot{x}$$

作勒让德变换得哈密顿函数，

$$p = \frac{m_0 \dot{x}}{\sqrt{1 - \dot{x}^2}} + qA, \quad x = \frac{p - qA}{\sqrt{(p - qA)^2 + m_0^2}}$$

$$H(t, x, p) = p \cdot \dot{x} - L = \sqrt{(p - qA)^2 + m_0^2} + q\phi$$

正则方程是

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{p - qA}{\sqrt{(p - qA)^2 + m_0^2}} \\ \dot{p} = \frac{q}{\sqrt{(p - qA)^2 + m_0^2}} (p_j - qA_j) \nabla A_j - q \nabla \phi \end{cases}$$

(2) 低速近似

拉氏量是

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - q\phi + qA \cdot \dot{x}$$

作勒让德变换

$$p = m\dot{x} + qA, \quad x = \frac{p - qA}{m}$$

$$H(t, x, p) = p \cdot \dot{x} - L = \frac{1}{2m} (p - qA)^2 + q\phi$$

运动方程为

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{p - qA}{m} \\ \dot{p} = \frac{p_j - qA_j}{m} q \nabla A_j - q \nabla \phi \end{cases}$$

(3) 原子的磁矩

原子中的核外电子，电荷为

$$q = -e$$

把原子放在外磁场中。原子核几乎固定不动，系统的哈密顿函数是

$$H = \frac{1}{2m_e} (p + eA)^2 + V(r) = \frac{p^2}{2m_e} + V(r) + \frac{e}{m_e} p \cdot A + \frac{e^2}{2m_e} A^2$$

其中 $V(r)$ 是库仑势或平均场, A 是外部磁场矢量势。

哈密顿量可以写成两部分之和,

$$H = H_0 + H'$$

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,

$$H_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{p^2}{2m_e} + V(r), \quad H' \stackrel{\text{def}}{=} \frac{e}{m_e} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2}{2m_e} A^2$$

在原子尺寸大小的范围内, 外磁场近似为均匀磁场, 磁矢势为

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

微扰项可写成

$$H' = \frac{e}{2m_e} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) + \frac{e^2}{2m_e} A^2 = \frac{e}{2m_e} \mathbf{r} \times \mathbf{p} \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{2m_e} A^2$$

上式中的矢量 μ 正比于电子的轨道角动量,

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

μ 的物理意义是电子的轨道磁矩。

电子绕封闭轨道运动, 可以看成是一个电流环。电流环的磁矩是电流 i 与面积 dS 的乘积,

$$\mu = \oint i dS = \oint i \frac{1}{2} \mathbf{r} \times d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \oint \frac{dq}{dt} \mathbf{r} \times d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \oint d\mathbf{q} \times \frac{d\mathbf{x}}{dt}$$

再利用

$$\mathbf{p}_{\text{mech}} = m_e \frac{d\mathbf{x}}{dt}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}_{\text{mech}}$$

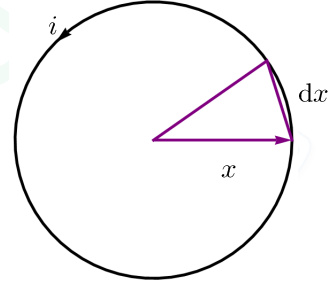
得

$$\mu = \frac{\mathbf{L}}{2m_e} \oint dq = \frac{\mathbf{L}}{2m_e} (-e) = -\frac{e}{2m_e} \mathbf{L}$$

机械动量和正则动量的差异是小量, 可忽略不计。微扰项 H' 中的 $(-\mu \cdot \mathbf{B})$ 是电子轨道磁矩的磁能。

实际上 μ 应该是各个价电子的自旋磁矩、轨道磁矩之和。

当原子的总磁矩 $\vec{\mu} \neq \vec{0}$ 时, 二阶小量 A^2 可以忽略, 原子表现出顺磁性(paramagnetism); 当总磁矩 $\vec{\mu} = \vec{0}$ 时, 最后一项 A^2 导致原子表现出抗磁性(diamagnetism)。



4. 哈密顿光学

几何光学的拉氏函数可取为

$$L(\lambda, x, \dot{x}) = \frac{1}{2} n^2 \dot{x}^2, \quad \dot{x} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dx}{d\lambda}$$

广义动量是

$$p = n^2 \dot{x}$$

解出速度,

$$\dot{x} = \frac{p}{n^2}$$

得哈密顿函数

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

光线满足的哈密顿方程是

$$\dot{x} = \frac{p}{n^2}, \quad \dot{p} = -\frac{p^2}{n^3} \nabla n$$

5. 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

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

广义能量的表达式是

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

为了作勒让德变换，引入新的坐标

$$q'_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} q_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

广义能量需要写成

$$E = p_\alpha q_\alpha + p'_\alpha q'_\alpha - L(t, q, q')$$

这种形式。为此 $2n$ 个广义坐标 q, q' 对应的广义动量必须定义成

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

称之为雅可比-奥斯特格拉斯基 (Jacobi-Ostrogradsky) 动量。

由正则坐标和正则动量的定义

$$\begin{cases} p'_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_\alpha} \\ q_\alpha = q'_\alpha \end{cases}$$

解出

$$q_\alpha = q'_\alpha(t, q, q', p, p')$$

代入广义能量表达式，完成勒让德变换，得到哈密顿函数 $H(t, q, q', p, p')$ 。

哈密顿函数和广义能量描述的是同一个量，只是自变量不同，它们的微分相等。先计算广义能量的微分，

$$\begin{aligned} dE &= d\{p_\alpha q_\alpha + p'_\alpha q'_\alpha - L(t, q, q')\} \\ &= p_\alpha dq_\alpha + q_\alpha dp_\alpha + p'_\alpha dq'_\alpha + q'_\alpha dp'_\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha - \frac{\partial L}{\partial q'_\alpha} dq'_\alpha - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} d\dot{q}_\alpha \end{aligned}$$

利用广义动量 p_α 和 p'_α 的定义，

$$\begin{aligned} dE &= \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) dq_\alpha + q_\alpha dp_\alpha + q'_\alpha dp'_\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha \\ &= -p'_\alpha dq'_\alpha + q_\alpha dp_\alpha + q'_\alpha dp'_\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha \end{aligned}$$

与哈密顿函数的微分对比，

$$\begin{aligned} dE &= dH(t, q, q', p, p') \\ &= -\frac{\partial L}{\partial t} dt - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} dq_\alpha - p'_\alpha dq'_\alpha + q_\alpha dp_\alpha + q'_\alpha dp'_\alpha \\ &= \frac{\partial H}{\partial t} dt + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} dq_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q'_\alpha} dq'_\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} dp_\alpha + \frac{\partial H}{\partial p'_\alpha} dp'_\alpha \end{aligned}$$

方程的左右两边，5 个独立的微分 $dt, dq_\alpha, dq'_\alpha, dp_\alpha, dp'_\alpha$ 前的系数相等，

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial t} &= -\frac{\partial H}{\partial t} \\ \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} &= -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}, \quad p'_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q'_\alpha}, \quad q_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad q'_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p'_\alpha} \end{aligned}$$

这五个恒等式是勒让德变换关系式。第一个式子是 Beltrami 恒等式，后四个等式将给出正则方程。

最后把欧拉-拉格朗日方程代入第二个勒让德变换关系式，得到哈密顿正则方程：

$$\begin{cases} q_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, & p_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}; \\ q'_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p'_\alpha}, & p'_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q'_\alpha}. \end{cases}$$

三、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,

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

作分部积分, 然后利用固定边值条件

$$\delta q_\alpha|_{t_1} = \delta q_\alpha|_{t_2} = 0$$

得

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

上式中的变分 δp_α 与 δq_α 不独立。

为了推导正则方程, 需要用到勒让德变换给出的关系式

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

从而 δp_α 的系数为0, 于是

$$\delta S[q] = 0 \Rightarrow p_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = 0$$

这种推导方式不够简洁, 并且没有从相空间的角度讨论问题。

2. 相空间中的哈密顿原理

变分原理能够推广理论的适用范围, 应用到其它学科, 并且方便我们洞察系统的对称性。我们需要一个相空间的最小作用量原理。

已知对真实的物理运动, 正则方程成立, 所以有

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

假设变分 δp_α 与 δq_α 独立, 则上式与正则方程等价。

现在引进函数 p_α , 它与 q_α 无关, 是独立变化的可微函数。 p_α 无需满足运动方程, 也无需满足定义式 $p_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$; 其变分 δp_α (虚动量) 独立于虚位移 δq_α 。

定义相空间的拉氏函数和相空间的作用量为³

$$\begin{aligned} \Lambda(t, q, p, q, p) &\stackrel{\text{def}}{=} p_\alpha q_\alpha - H(t, q, p) \\ S[q, p] &\stackrel{\text{def}}{=} \int_{t_1}^{t_2} \Lambda(t, q, p, q, p) dt \end{aligned}$$

取固定边界条件⁴

$$\delta q_\alpha|_{t_1} = \delta q_\alpha|_{t_2} = 0$$

的哈密顿变分, 那么真实运动的相轨道必满足

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

这称为相空间的哈密顿原理, 或者修正的哈密顿原理 (Modified Hamilton Principle)、广义哈密顿原理 (Generalized Hamilton Principle、Extended Hamilton Principle)。

相空间的哈密顿原理是新的第一性原理, 它不是第三章采用广义坐标 q_α 作为宗量的哈密顿原理的推论。

3. 欧拉方程

记相空间的坐标 (即正则变量) 为

$$\eta = q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n$$

按相空间哈密顿原理, 相空间拉氏函数是

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

对应的相空间广义动量是

³ 注意这与 $S[q]$ 不是同一个泛函。

⁴ 我们不能、也不需要假设 $\delta p_\alpha(t_1) = \delta p_\alpha(t_2) = 0$ 。

$$\pi_j \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \Lambda}{\partial \eta_j} = \begin{cases} p_{\alpha=j}, & j = 1, 2, \dots, n; \\ 0, & j = n+1, n+2, \dots, 2n. \end{cases}$$

相空间广义能量为

$$\pi_j \eta_j - \Lambda(t, \eta, \eta) = H(t, \eta)$$

与拉格朗日力学中的广义能量相等。

最小作用量原理 $\delta S[\eta] = 0$ 给出的相空间欧拉方程，正好就是哈密顿正则方程：

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \frac{\partial \Lambda}{\partial q_\alpha} - \frac{\partial \Lambda}{\partial q_\alpha} = 0 \Rightarrow p_\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = 0 \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial \Lambda}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial \Lambda}{\partial p_\alpha} = 0 \Rightarrow 0 - \left(q_\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \right) = 0 \end{cases}$$

在这个意义上，哈密顿力学其实是拉格朗日力学的特例。由于奇异拉氏函数 Λ 仅含相空间广义速度 η_j 的一次项，欧拉方程退化为一阶常微分方程，即正则方程。

4. 规范项

对哈密顿原理

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

拉氏量改变一个时空坐标的函数 $f(t, q)$ 对时间的全微商，

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

不会改变运动方程。

从相空间的哈密顿原理来看，

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

在不改变运动方程的前提下，允许相空间的拉氏量相差一个规范项，

$$\Lambda' = \Lambda - \frac{dF(t, \eta)}{dt}$$

这个规范项与我们后面将要讨论的正则变换有关。

5. 相空间中的莫培督原理*

对自治系统，相空间的拉氏函数是

$$\Lambda = \Lambda(\eta, \eta) = p_\alpha q_\alpha - H(q, p)$$

对约化作用量变分（利用第三章的结论），

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

在等能变分下，

$$\Delta H = 0, \quad \Delta q_\alpha \Big|_{t_1}^{t_2} = \Delta q_\alpha \Big|_{t_2}^{t_1} = 0 \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

真实路径满足相空间的莫培督原理，

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

在积分限为坐标或形式参数时，可以写成简单变分，

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

相空间的莫培督原理与广义坐标空间的莫培督原理，虽然表达式相同，但是泛函宗量不同，是不同的变分原理。

相空间的变分原理可以给出相轨道满足的方程。

应用莫培督原理求相空间的轨道时，需注意能量守恒

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

是约束条件，会消去一个独立变分。

例 推导有心力场中的粒子的相轨道。

取平面极坐标，哈密顿函数是

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

以 θ 为参数，

$$r = r(\theta), \quad p_r = p_r(\theta), \quad p_\theta = p_\theta(\theta)$$

莫培督原理给出

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

其中“'”表示对 θ 求导。

由等能约束条件

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

解出

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

代入莫培督原理，

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

得到两个欧拉方程，

$$\begin{aligned} L(\theta, r, p_r, r', p_r') &= p_r r' \pm r \sqrt{2m[E - V(r)] - p_r^2} \\ \begin{cases} \frac{d}{d\theta} \frac{\partial L}{\partial r'} = \frac{\partial L}{\partial r} \\ \frac{d}{d\theta} \frac{\partial L}{\partial p_r'} = \frac{\partial L}{\partial p_r} \end{cases} \\ \Rightarrow \begin{cases} \pm p_r' = \sqrt{2m[E - V(r)] - p_r^2} - \frac{mrV'(r)}{\sqrt{2m[E - V(r)] - p_r^2}} \\ 0 = r' \mp \frac{rp_r}{\sqrt{2m[E - V(r)] - p_r^2}} \end{cases} \end{aligned}$$

拉氏函数 L 不显含 θ ，广义能量是常数，

$$\begin{aligned} \pi_r r' + \pi_{p_r} p_r' - (p_r r' \pm r \sqrt{2m[E - V(r)] - p_r^2}) \\ = p_r r' + 0 \cdot p_r' - (p_r r' \pm r \sqrt{2m[E - V(r)] - p_r^2}) = \alpha \end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned} \mp r \sqrt{2m[E - V(r)] - p_r^2} &= \alpha \\ \Rightarrow p_r^2 &= 2m[E - V(r)] - \frac{\alpha^2}{r^2} \end{aligned}$$

代入第二个欧拉方程，得

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

积分得到

$$\theta = \theta(r)$$

可用拉格朗日反演定理解出 $r = r(\theta)$ ，代入广义能量积分求得 $p_r(\theta)$ ，再代入等能约束 $H(r, \theta, p_r, p_\theta) = E$ 求出 $p_\theta(\theta)$ ，得到整个相轨道。

6. 相空间中的诺特定理

把前面章节的讨论结果，直接应用到相空间的作用量 $S[\eta]$ 上，就得到了相空间的诺特定理。

定理 如果作用量 $S[\eta]$ 在 $2n+1$ 维无穷小变换

$$\begin{aligned}t' &= t + \Delta t \\q'_\alpha &= q_\alpha + \Delta q_\alpha \\p'_\alpha &= p_\alpha + \Delta p_\alpha\end{aligned}$$

之下满足（准确到一阶）

$$\begin{aligned}\delta S \epsilon &= \delta S_0 + \mathcal{O} \epsilon^2 \\&\Leftrightarrow \Delta \Lambda dt = \Lambda \left(t', \eta' t', \frac{d\eta' t'}{dt'} \right) dt' - \Lambda \left(t, \eta t, \frac{d\eta t}{dt} \right) dt = d\Delta \varphi \\&\Leftrightarrow d\Delta \Lambda dt = 0\end{aligned}$$

则称之为相空间的**准对称变换**，并且

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

是无穷小诺特守恒量。

这个定理对于第四章的诺特定理有所推广：之前定义的准对称变换 ξ_α 只能是 t, q 函数；而这里允许变换与动量有关，即可以依赖于速度。依赖广义速度的对称变换，在一些文献中被称为**隐藏对称**（hidden symmetry）。

例 平面谐振子

$$\begin{aligned}H(x, p) &= \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2) \\ \Lambda &= p \cdot x - H(x, p)\end{aligned}$$

考虑如下的无穷小变换，

$$\begin{aligned}\Delta t &= 0 \\ \Delta x &= -\epsilon y, & \Delta y &= \epsilon x \\ \Delta p_x &= -\epsilon p_y, & \Delta p_y &= \epsilon p_x\end{aligned}$$

这个变换把 Λdt 变换为

$$\begin{aligned}\Lambda' dt' &= (p + \Delta p) \cdot (dx + \Delta x) - H(x + \Delta x, p + \Delta p) dt \\ \Lambda' dt' &= \Lambda dt + p \cdot d\Delta x + \Delta p \cdot dx = \Lambda dt + (-\epsilon p_x dy + \epsilon p_y dx) + (-\epsilon p_y dx + \epsilon p_x dy) = \Lambda dt \\ \Delta \Lambda dt &= \Lambda' dt' - \Lambda dt = 0\end{aligned}$$

是对称变换，守恒量为 $L_z = xp_y - yp_x$ 。

例 采用平面极坐标系，粒子在势场

$$V = \alpha \frac{\cos \theta}{r^2}$$

中运动。

系统的哈密顿函数是

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

于是相空间的拉格朗日函数为

$$\Lambda = p_r r + p_\theta \theta - H$$

在无穷小的相空间变换

$$\Delta t = 0, \quad \Delta r = 0, \quad \Delta p_r = 0, \quad \Delta \theta = 2\epsilon p_\theta, \quad \Delta p_\theta = 2\epsilon m \alpha \sin \theta$$

下，

$$\begin{aligned}\Delta \Lambda dt &= p'_r dr' + p'_\theta d\theta' - H' dt' - (p_r dr + p_\theta d\theta - H dt) \\ &= p'_r dr' - p_r dr + p'_\theta d\theta' - p_\theta d\theta - H' dt' + H dt \\ &= 0 + \Delta p_\theta d\theta + p_\theta d\Delta \theta - \Delta H dt \\ \Delta H &= \Delta \left\{ \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) + \alpha \frac{\cos \theta}{r^2} \right\} = \frac{1}{m} p_\theta \Delta p_\theta - \frac{\alpha}{r^2} \sin \theta \Delta \theta = 0 \\ \Delta \Lambda dt &= \Delta p_\theta d\theta + p_\theta d\Delta \theta = 2\epsilon m \alpha \sin \theta d\theta + 2\epsilon p_\theta dp_\theta \\ &= \epsilon d(-2m\alpha \cos \theta + p_\theta^2)\end{aligned}$$

$\Delta \Lambda dt$ 可积，该变换是相空间的准对称变换，且变换后的规范项是

$$\Delta \varphi = \epsilon (-2m\alpha \cos \theta + p_\theta^2)$$

因此

$$\begin{aligned}-H\Delta t + p_\alpha \Delta q_\alpha - \Delta \varphi \\ = p_\theta \Delta \theta - \Delta \varphi\end{aligned}$$

$$= 2\epsilon p_\theta^2 - -2m\alpha \cos \theta + p_\theta^2 \epsilon$$

$$= (p_\theta^2 + 2m\alpha \cos \theta)\epsilon$$

诺特守恒量是

$$A = p_\theta^2 + 2m\alpha \cos \theta$$

利用哈密顿方程，读者可以检验确实有 $dA/dt = 0$ 。

四、泊松代数

1. 泊松括号

考虑力学量 $A(t, q, p)$ 随时间的变化，

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} \dot{p}_\alpha$$

将正则方程代入上式，

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial q_\alpha} \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \frac{\partial A}{\partial p_\alpha}$$

引进记号

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

于是

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

一般的泊松括号（Siméon Denis Poisson）定义为

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

不同文献中的定义可能差一个负号。在不引起混淆时，泊松括号的下标 q, p 可以略去。

泊松定理 1 力学量 $A(t, q, p)$ 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。

利用泊松括号，我们可以无需借助于运动方程，直接检验一个物理量是否守恒。

例 检验前一节中的结果是否确实是守恒量：

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= [A, H] = \left[p_\theta^2 + 2m\alpha \cos \theta, \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) + \alpha \frac{\cos \theta}{r^2} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial \theta} 2m\alpha \cos \theta \frac{\partial}{\partial p_\theta} \left(\frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) \right) - \frac{\partial}{\partial p_\theta} p_\theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\alpha \frac{\cos \theta}{r^2} \right) \\ &= -2m\alpha \sin \theta \cdot \frac{1}{mr^2} p_\theta - 2p_\theta \alpha \frac{-\sin \theta}{r^2} = 0 \end{aligned}$$

确实是守恒量。

例 中心势场中的粒子，

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

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

证明：把角动量写成分量形式，

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

计算得

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



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

角动量的三个分量均为守恒量。

2. 泊松代数

设 A, B, C 是任意三个力学量, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, 容易验证泊松括号满足以下形式规则:

(1) 双线性和分配律

$$\begin{aligned} [A, \alpha B + \beta C] &= \alpha[A, B] + \beta[A, C] \\ [\alpha A + \beta B, C] &= \alpha[A, C] + \beta[B, C] \end{aligned}$$

(2) 反对称、幂零

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

(3) 雅可比恒等式

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

(4) 导数规则 (或乘积规则)

$$\begin{aligned} [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B \\ [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C] \end{aligned}$$

一个线性空间 (“矢量”构成的集合, 且定义了矢量加法和数乘), 如果有封闭的矢量乘法 (两个矢量的相乘仍是矢量), 且满足条件 (1), 称为**线性代数**。

满足条件 (2) 和 (3) 的线性代数, 称为**李代数**。

作为李代数的一个例子, 同时满足以上四条规则的力学量集合和两种二元运算 (李积和普通乘法), 构成**泊松代数**。

(5) 基本泊松括号

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

推论 力学量与坐标、动量的泊松括号:

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

例 在引力场中运动的粒子, 哈密顿量是

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

验证拉普拉斯-龙格-楞次 (Laplace-Runge-Lenz) 矢量

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

是守恒量。

证明 1:

$$\begin{aligned} [A_i, H] &= \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A_i}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial x_j} \\ &= \left\{ p^2 \delta_{ij} - p_j p_i - m\alpha \frac{1}{r} \delta_{ij} - m\alpha x_i \left(-\frac{x_j}{r^3} \right) \right\} \frac{p_j}{m} - \{ 2p_j x_i - p \cdot x \delta_{ij} - x_j p_i \} \left\{ -\alpha \left(-\frac{x_j}{r^3} \right) \right\} \\ &= \left\{ -\alpha \frac{p_i}{r} + \frac{\alpha}{r^3} p \cdot x x_i \right\} - \left\{ \frac{\alpha}{r^3} p \cdot x x_i - \frac{\alpha}{r} p_i \right\} = 0 \end{aligned}$$

证明 2: 用形式运算规则, 计算龙格-楞次矢量与哈密顿量的泊松括号,

$$\begin{aligned} [A_i, H] &= \left[p^2 x_i - p \cdot x p_i - m\alpha \frac{x_i}{r}, \frac{p^2}{2m} - \frac{\alpha}{r} \right] \\ &= \left[p^2 x_i, \frac{p^2}{2m} \right] + \left[-p \cdot x p_i, \frac{p^2}{2m} \right] + \left[-m\alpha \frac{x_i}{r}, \frac{p^2}{2m} \right] - \left[p^2 x_i - p \cdot x p_i - m\alpha \frac{x_i}{r}, \frac{\alpha}{r} \right] \\ &= p^2 \left[x_i, \frac{p^2}{2m} \right] - p_i p_j \left[x_j, \frac{p^2}{2m} \right] - \alpha p_j \left[\frac{x_i}{r}, p_j \right] - \left[p^2, \frac{\alpha}{r} \right] x_i + \left[p_j p_i, \frac{\alpha}{r} \right] x_j \\ &= \frac{p^2}{m} p_i - p_i p_j \frac{p_j}{m} - \alpha p_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{x_i}{r} \right) + 2x_i p_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\alpha}{r} \right) - x_j \left(p_i \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\alpha}{r} + p_j \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\alpha}{r} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\alpha p_i \frac{1}{r} + \alpha p_j x_i \frac{x_j}{r^3} - 2x_i p_j \frac{\alpha x_j}{r^3} + x_j p_i \frac{\alpha x_j}{r^3} + x_j p_j \frac{\alpha x_i}{r^3} \\
&= -\frac{\alpha}{r} p_i + \frac{\alpha}{r^3} p \cdot x x_i - 2\frac{\alpha}{r^3} p \cdot x x_i + \frac{\alpha}{r} p_i + \frac{\alpha}{r^3} p \cdot x x_i = 0
\end{aligned}$$

所以是守恒量。

泊松代数的四条运算规则，在量子理论中仍然成立。这些规则足以确定物理量的演化和相互关系，无需借助于泊松括号的具体定义。运算规则是更基本的物理规律。

注 例题的这个守恒量是拉普拉斯在 1799 年从牛顿方程推出的，

$$F_r = \frac{dp}{dt}, \quad F_r = -\frac{\alpha x}{r^2}$$

方程的两边叉乘角动量 $\vec{L}$ ，

$$F_r \times \vec{L} = \frac{dp}{dt} \times \vec{L}$$

利用角动量 $\vec{L} = x \times p$ 守恒，

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}(p \times \vec{L}) = \frac{dp}{dt} \times \vec{L}$$

于是

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

利用拉普拉斯-龙格-楞次矢量，可以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 $A \cdot \vec{L} = 0$ ，所以 A 在轨道平面内，约定 A 的方向为平面极坐标系的极轴方向，

$$x \cdot A = Ar \cos \theta$$

计算得

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

所以

$$r = \frac{\frac{L^2}{m\alpha}}{1 + \frac{A}{m\alpha} \cos \theta}$$

中心力场中具有 $SO(3)$ 转动对称性，角动量 $\vec{L}$ 是诺特守恒量。仅当中心力是平方反比力时，拉普拉斯-龙格-楞次矢量 A 是守恒量。

额外的守恒量，对应更高的对称性。例如氢原子系统具有 $SO(4)$ 对称性。这种与势系统的动力学有关的对称性，称为动力学对称或偶然对称。

泊松定理 2

$$(1) \quad \frac{d}{dt}[A, B] = \left[\frac{dA}{dt}, B\right] + \left[A, \frac{dB}{dt}\right]$$

(2) 两个守恒量的泊松括号仍然是守恒量。

证明：计算 $[A, B]$ 的导数，

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

其中

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}[A, B] &= \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial A}{\partial q_\alpha} \frac{\partial B}{\partial p_\alpha}\right) - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial B}{\partial q_\alpha} \frac{\partial A}{\partial p_\alpha}\right) \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{\partial A}{\partial t}\right) \frac{\partial B}{\partial p_\alpha} + \frac{\partial A}{\partial q_\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial p_\alpha} \frac{\partial B}{\partial t}\right) - \left(\frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{\partial B}{\partial t}\right) \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial B}{\partial q_\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial p_\alpha} \frac{\partial A}{\partial t}\right) \\
&= \left[\frac{\partial}{\partial t} A, B\right] + \left[A, \frac{\partial}{\partial t} B\right]
\end{aligned}$$

再利用雅可比恒等式，

$$[[A, B], H] = -[[H, A], B] - [[B, H], A] = [[A, H], B] + [A, [B, H]]$$

于是

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}[A, B] &= \left[\frac{\partial}{\partial t} A, B\right] + \left[A, \frac{\partial}{\partial t} B\right] + [[A, H], B] + [A, [B, H]] \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial t} A + [A, H], B\right] + \left[A, \frac{\partial}{\partial t} B + [B, H]\right] \\ &= \left[\frac{dA}{dt}, B\right] + \left[A, \frac{dB}{dt}\right]\end{aligned}$$

如果A和B守恒,

$$\frac{dA}{dt} = \frac{dB}{dt} = 0$$

那么

$$\frac{d}{dt}[A, B] = [0, B] + [A, 0] = 0$$

根据泊松定理 1, $[A, B]$ 也是守恒量。

例 对于一个哈密顿系统, 如果角动量的两个分量

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z$$

守恒, 那么

$$[L_x, L_y] = L_z$$

也是守恒量。

泊松定理一般不会给出无穷多的守恒量, 通常会在几步计算后会封闭。

推论 一个哈密顿系统的所有线性无关守恒量 $\{I_j, j = 1, 2, \dots, N\}$, 构成一个封闭的李代数,

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

3. 应用

泊松括号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 $H = \frac{1}{2m}p^2 + mgz$, 求运动规律 $x = x(t)$ 。

解: 利用级数展开。

求泊松括号, 可得

$$\begin{aligned}x &= [x, H] = \frac{p_x}{m}, & x &= [x, H] = 0 \Rightarrow x(t) = x_0 + \frac{p_{x0}}{m}t \\ y &= [y, H] = \frac{p_y}{m}, & y &= [y, H] = 0 \Rightarrow y(t) = y_0 + \frac{p_{y0}}{m}t \\ z &= [z, H] = \frac{p_z}{m}, & z &= [z, H] = -g, & z &= [z, H] = 0 \Rightarrow z(t) = z_0 + \frac{p_{z0}}{m}t + \frac{1}{2}gt^2\end{aligned}$$

例 谐振子的哈密顿函数是

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

求力学量

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

满足的微分方程, 并解出 $a(t)$ 。这两个算符是量子力学中的湮灭算符和产生算符。

解: 写出逆变换,

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

代入哈密顿量,

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

产生、湮灭算符之间的对易关系是

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

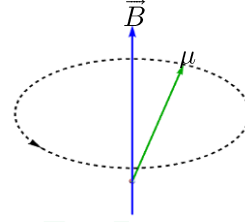
利用上式, 得

$$\begin{aligned}\frac{da}{dt} &= [a, H] = -i\omega a \Rightarrow a(t) = a_0 e^{-i\omega t} \\ \frac{da^*}{dt} &= [a^*, H] = i\omega a^* \Rightarrow a^*(t) = a_0^* e^{i\omega t}\end{aligned}$$

例（拉莫进动 Larmor precession）原子核外电子的哈密顿量和磁矩为

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

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



磁矩的运动方程为

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

与原子内部的相互作用相比，外磁场是小量。忽略二阶无穷小量，得

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

写成矩阵形式，

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

其中的矩阵定义为

$$\vec{B} \cdot \vec{X} \stackrel{\text{def}}{=} B_1 X_1 + B_2 X_2 + B_3 X_3, \quad X_{ijk} \stackrel{\text{def}}{=} -\epsilon_{ijk}$$

满足

$$(\vec{B} \cdot \vec{X}) \mu = \vec{B} \times \mu$$

解出

$$\mu = \exp\left(t \frac{e\vec{B}}{2m} \cdot \vec{X}\right) \mu_0$$

与转动矩阵

$$R(\psi) = \exp(\psi \cdot \vec{X})$$

对比（见刚体力学一章），可知角位移是

$$\psi = \frac{e\vec{B}}{2m} t$$

即在外磁场中磁矩以角速度

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

绕磁场方向匀速进动。

4. 力学量与相空间的变换*

考虑函数的平移

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

展开为幂级数，

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

在哈密顿系统中，

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

定义线性变换算子（伴随表示）

$$H = [\#, H]$$

那么对自治系统 $H = H(q, p)$ ，任意力学量 $A(t, q, p)$ 满足

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

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

不含时的物理量 $A(q, p)$ 满足

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

时间演化算符是

$$U(\tau, 0) = \exp\{\tau H\}$$

哈密顿量是时间平移生成元。

例 利用泊松代数，求解一维谐振子的运动。

解：先计算各阶导数，

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} k x^2 \\ x &= Hx = [x, H] = \frac{p}{m} \\ x &= H^2 x = \frac{1}{m} H p = -\frac{k}{m} x \\ &\dots \\ x^{2n} &= H^{2n} x = \left(-\frac{k}{m}\right)^n x \\ x^{2n+1} &= H^{2n+1} x = H H^{2n} x = \left(-\frac{k}{m}\right)^n H x = \left(-\frac{k}{m}\right)^n \frac{p}{m} \end{aligned}$$

利用泰勒展开式，

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \frac{p_0}{m} t - \frac{1}{2!} \frac{k}{m} x_0 t^2 - \frac{1}{3!} \frac{k}{m} \frac{p_0}{m} t^3 + \frac{1}{4!} \left(\frac{k}{m}\right)^2 x_0 t^4 - \dots \\ &= x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t \end{aligned}$$

其中

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

力学量的其它变换，也可以用泊松括号表示。

例 三维空间的平移

$$\begin{aligned} p_x f &\stackrel{\text{def}}{=} [f, p_x] = \frac{\partial}{\partial x} f \\ p_y f &\stackrel{\text{def}}{=} [f, p_y] = \frac{\partial}{\partial y} f \\ p_z f &\stackrel{\text{def}}{=} [f, p_z] = \frac{\partial}{\partial z} f \\ e^{p_x a + p_y b + p_z c} f(x, y, z) &= f(x+a, y+b, z+c) \end{aligned}$$

动量是空间平移变换的生成元。

例 旋转

$$\begin{aligned} L_z f &\stackrel{\text{def}}{=} [f, L_z] \\ e^{\theta \hat{L}_z} f(x, y, z) &= f(x \cos \theta - y \sin \theta, x \sin \theta + y \cos \theta, z) \end{aligned}$$

角动量是空间转动的生成元。

5. 正则量子化

把泊松括号替换为量子对易关系，

$$[A, B]_{\text{PB}} \mapsto \frac{1}{i\hbar} [A, \hat{B}]_{\text{QM}}, \quad [A, \hat{B}]_{\text{QM}} \stackrel{\text{def}}{=} A\hat{B} - \hat{B}A$$

同时经典力学中的基本泊松括号替换为量子对易关系，

$$\begin{cases} [x_j, p_k]_{\text{PB}} = \delta_{jk} \\ [x_j, x_k]_{\text{PB}} = [p_j, p_k]_{\text{PB}} = 0 \end{cases} \mapsto \begin{cases} [x_j, p_k]_{\text{QM}} = i\hbar \delta_{jk} \\ [x_j, x_k]_{\text{QM}} = [p_j, p_k]_{\text{QM}} = 0 \end{cases}$$

而经典力学的正则方程，则映射为量子理论中的海森堡方程，

$$\frac{dx_j}{dt} = [x_j, H]_{\text{QM}}, \quad \frac{dp_j}{dt} = [p_j, H]_{\text{QM}}$$

这样的步骤称为正则量子化。

正则量子化步骤，将经典物理学过渡到量子理论——海森堡的矩阵力学。

在经典理论和量子理论中，虽然对易子的定义不同，但是泊松代数和海森堡代数的基本运算规则是完全一致的。

五、 正则变换和辛条件

出于化简运动方程或寻找首次积分和对称性等目的，我们需要进行相空间的变量代换，同时希望保留运动方程的正则形式。

1. 正则变换的定义

设可微的相空间变换为

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

如果对于任何哈密顿系统，

$$\begin{aligned} \forall H &= H(t, q, p) \\ q_\alpha &= \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad p_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \end{aligned}$$

都存在新的哈密顿函数 $K = K(t, Q, P)$ ，使得

$$Q_\alpha = \frac{\partial K}{\partial P_\alpha}, \quad P_\alpha = -\frac{\partial K}{\partial Q_\alpha}$$

这样的变换称为**正则变换**⁵ (canonical transformation)。

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

例 尺度变换

$$Q_\alpha(t) = c(t) q_\alpha(t), \quad P_\alpha(t) = \frac{1}{c(t)} p_\alpha(t), \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

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

$$\begin{aligned} Q_\alpha &= c \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} + c q_\alpha \\ P_\alpha &= -\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} - \frac{c}{c^2} p_\alpha \end{aligned}$$

这是哈密顿函数

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

对应的哈密顿方程，

$$\begin{aligned} Q_\alpha &= \frac{\partial K}{\partial P_\alpha} = c \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} + \frac{c}{c} Q_\alpha \\ P_\alpha &= -\frac{\partial K}{\partial Q_\alpha} = -\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} - \frac{c}{c} P_\alpha \end{aligned}$$

2. 正则方程的辛形式

把正则变量的微商合并为 $2n$ 个分量的矢量，运动方程成为

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

定义上式中的常数矩阵

$$J \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{n \times n} & \mathbf{1}_{n \times n} \\ -\mathbf{1}_{n \times n} & \mathbf{0}_{n \times n} \end{pmatrix}$$

为**辛单位矩阵** (symplectic identity, 又称为辛度规)，同时把哈密顿函数的梯度写成列矢量，

⁵ 按定义，一个变换是否正则变换，与哈密顿函数 $H(t, q, p)$ 的具体表达式无关。

$$\nabla_{\eta} H = \partial_i H = \begin{pmatrix} \partial H / \partial q_1 \\ \vdots \\ \partial H / \partial q_n \\ \partial H / \partial p_1 \\ \vdots \\ \partial H / \partial p_n \end{pmatrix}$$

就得到了辛形式的正则方程，

$$\eta_i = J_{ij} \partial_j H$$

隐去下标，写成矩阵形式就是

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

上式说明，哈密顿系统的运动，是相空间的梯度流。

推论 辛单位矩阵满足

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

利用辛单位矩阵，可以把泊松括号写成

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

而基本泊松括号则是

$$[\eta_j, \eta_k] = J_{jk}, \quad j, k = 1, 2, \dots, 2n$$

3. 正则变换的辛条件

检验一个变换是否为正则变换，需要判断新哈密顿量 $K(t, Q, P)$ 的存在性。

考虑正则变换

$$Q_{\alpha} = Q_{\alpha}(t, q, p), \quad P_{\alpha} = P_{\alpha}(t, q, p), \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

把新老正则坐标和正则动量合并成相空间的正则变量一个符号来表示，

$$\begin{aligned} \{\eta_i | i = 1, 2, \dots, 2n\} &\stackrel{\text{def}}{=} \{q_{\alpha}, p_{\alpha} | \alpha = 1, 2, \dots, n\} \\ \{\xi_i | i = 1, 2, \dots, 2n\} &\stackrel{\text{def}}{=} \{Q_{\alpha}, P_{\alpha} | \alpha = 1, 2, \dots, n\} \\ \xi_i &= \xi_i(t, \eta), \quad i = 1, 2, \dots, 2n \end{aligned}$$

记此变换的雅可比矩阵为

$$M_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \xi_i}{\partial \eta_j}, \quad i, j = 1, 2, \dots, 2n$$

那么

$$\xi_i = \partial_t \xi_i + \frac{\partial \xi_i}{\partial \eta_j} \eta_j = \partial_t \xi_i + M_{ij} J_{jk} \frac{\partial H}{\partial \eta_k} = \partial_t \xi_i + M_{ij} J_{jk} \frac{\partial H}{\partial \xi_l} \frac{\partial \xi_l}{\partial \eta_k} = \partial_t \xi_i + M_{ij} J_{jk} M_{lk} \frac{\partial H}{\partial \xi_l}$$

由于这是正则变换， ξ_i 必须满足新的正则方程，

$$\xi_i = J_{ij} \frac{\partial K}{\partial \xi_j}$$

所以

$$\begin{aligned} J_{ij} \frac{\partial K}{\partial \xi_j} &= \partial_t \xi_i + M_{ij} J_{jk} M_{lk} \frac{\partial H}{\partial \xi_l} \\ \Leftrightarrow \frac{\partial K}{\partial \xi_i} &= -J_{ij} \partial_t \xi_j - J_{ij} M_{jk} J_{kl} M_{ml} \frac{\partial H}{\partial \xi_m} \end{aligned}$$

上式中把时间 t 看成参数， η 是自变量，得 1-形式

$$dK = \frac{\partial K}{\partial \xi_i} d\xi_i = \left(-J_{ij} \partial_t \xi_j - J_{ij} M_{jk} J_{kl} M_{ml} \frac{\partial H}{\partial \xi_m} \right) d\xi_i$$

于是有如下引理：

引理 $\xi_i = \xi_i(t, \eta)$ 是正则变换的等价条件是，对任意可微函数 $H(t, \eta)$ ，1-形式

$$\omega = \left(-J_{ij} \partial_t \xi_j - J_{ij} M_{jk} J_{kl} M_{ml} \frac{\partial H}{\partial \xi_m} \right) d\xi_i$$

强可积。

作为引理的特例，对正则变换 $\xi(t, \eta)$ ， $H = 0$ 时的 1-形式

$$\omega = -J_{ij}\partial_t\xi_j d\xi_i$$

必须是强可积的,

$$\begin{aligned} d\omega &= d(-J_{ij}\partial_t\xi_j d\xi_i) = -J_{ij}(\partial_t M_{jk})d\eta_k \wedge M_{il}d\eta_l = J_{ji}(\partial_t M_{jk})M_{il}d\eta_k \wedge d\eta_l \\ &= \frac{1}{2}[J_{ji}(\partial_t M_{jk})M_{il} - J_{ji}(\partial_t M_{jl})M_{ik}]d\eta_k \wedge d\eta_l = 0 \\ \Rightarrow J_{ji}(\partial_t M_{jk})M_{il} + J_{ij}(\partial_t M_{jl})M_{ik} &= 0 \Rightarrow \partial_t M^T JM + M^T J \partial_t M = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} M^T JM &= 0 \end{aligned}$$

★1

现在正则变换必须要满足, 对任意 H , ω 中的第二项

$$\left(-J_{ij}M_{jk}J_{kl}M_{ml}\frac{\partial H}{\partial \xi_m}\right)d\xi_i \stackrel{\text{def}}{=} A_{im}\frac{\partial H}{\partial \xi_m}d\xi_i$$

强可积, 其中的系数矩阵 A_{im} 定义为

$$A = -JMJM^T$$

取 $H = \xi_m$,

$$\begin{aligned} d A_{im} d\xi_i &= \frac{\partial A_{im}}{\partial \xi_j} d\xi_j \wedge d\xi_i = 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial A_{im}}{\partial \xi_j} &= \frac{\partial A_{jm}}{\partial \xi_i} \end{aligned}$$

取 $H = \frac{1}{2}\xi_m^2$ (m 不求和),

$$\begin{aligned} d A_{im} \xi_m d\xi_i &= A_{im} \delta_{mj} d\xi_j \wedge d\xi_i + \xi_m \frac{\partial A_{im}}{\partial \xi_j} d\xi_j \wedge d\xi_i = A_{im} \delta_{mj} d\xi_j \wedge d\xi_i = 0 \quad (m \text{ 不求和}) \\ \Rightarrow A_{im} \delta_{mj} &= A_{jm} \delta_{mi} \quad (m \text{ 不求和}) \xrightarrow{\text{取 } m=j \neq i} A_{ij} = 0 \quad i \neq j \Rightarrow A_{ij} = a_i \xi_i \delta_{ij} \quad (i \text{ 不求和}) \end{aligned}$$

代入

$$\frac{\partial A_{im}}{\partial \xi_j} = \frac{\partial A_{jm}}{\partial \xi_i} \xrightarrow{\text{取 } m=i \neq j} \frac{\partial a_i}{\partial \xi_j} = 0 \quad i \neq j \Rightarrow A_{ij} = a_i \xi_i \delta_{ij} \quad (i \text{ 不求和})$$

再代入

$$\begin{aligned} d \left(A_{ij} \frac{\partial H}{\partial \xi_j} d\xi_i \right) &= 0 \Rightarrow d \left(\sum_i a_i \xi_i \frac{\partial H}{\partial \xi_i} d\xi_i \right) = \sum_i \frac{\partial}{\partial \xi_k} \left(a_i \xi_i \frac{\partial H}{\partial \xi_i} \right) d\xi_k \wedge d\xi_i = 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \xi_k} \left(a_i \xi_i \frac{\partial H}{\partial \xi_i} \right) &= \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(a_k \xi_k \frac{\partial H}{\partial \xi_k} \right) \quad (i, k \text{ 不求和}) \xrightarrow{\text{取 } i \neq k} a_i \xi_i = a_k \xi_k = a \quad (\text{常数}) \end{aligned}$$

也就是有

$$\begin{aligned} A &= a \mathbf{1}_{2n \times 2n} \\ MJM^T &= aJ \end{aligned}$$

不考虑扩展正则变换 (extended canonical transformation), 令 $a = 1$, 则有

$$MJM^T = J$$

★2

满足

$$MJM^T = J, \quad M \in \mathbb{R}^{2n \times 2n}$$

的矩阵称为**辛矩阵**, 雅可比矩阵是辛矩阵的变换 $\xi_i = \xi_i t, \eta$ 称为**辛变换**。

推论 辛矩阵的转置仍然是辛矩阵,

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

证明:

$$MJM^T = J \xLeftrightarrow{\cdot M^T^{-1}} MJ = J M^T^{-1} \xLeftrightarrow{J \cdots -J} JM = M^T^{-1} J \xLeftrightarrow{M^T} M^T JM = J$$

综合前面的讨论, 我们得到了正则变换的必要条件:

定理 哈密顿系统的正则变换都是辛变换⁶。

注: 扩展正则变换不提供新的物理或几何内容。

只要定义

⁶ M.S. Lie, *Störungstheorie und die Berührungstransformationen der Mechanik*, Leipzig, 1889.

$$\begin{aligned} P'_\alpha &= \frac{1}{a} P_\alpha, & Q'_\alpha &= Q_\alpha, & K' &= \frac{1}{a} K \\ \Rightarrow Q'_\alpha &= \frac{\partial K'}{\partial P'_\alpha}, & P'_\alpha &= -\frac{\partial K'}{\partial Q'_\alpha} \end{aligned}$$

即可消去辛条件中的因子 a ,

$$M = \frac{\partial Q, P}{\partial q, p} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \rightarrow M' = \frac{\partial Q', P'}{\partial q, p} = \begin{pmatrix} A & \frac{1}{a} B \\ C & \frac{1}{a} D \end{pmatrix}$$

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

我们后面所说的正则变换, 不再包括扩展正则变换。

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。

即辛矩阵构成群, 称为实辛群 (symplectic group)

$$\text{Sp } 2n, \mathbb{R} \stackrel{\text{def}}{=} \{M | M J M^T = J, M \in \mathbb{R}^{2n \times 2n}\}$$

推论 辛矩阵的行列式为 1。

证明 为了求行列式, 利用恒等式

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

两边同乘以 $J_{a_1 a_{n+1}} \cdots J_{a_n a_{2n}}$, 求和得

$$\begin{aligned} \det M \sum_{a_1, \dots, a_{2n}} \varepsilon_{a_1 \cdots a_{2n}} J_{a_1 a_{n+1}} \cdots J_{a_n a_{2n}} \\ &= \sum_{a_1, \dots, a_{2n}} J_{a_1 a_{n+1}} \cdots J_{a_n a_{2n}} \sum_{b_1 \cdots b_{2n}} M_{a_1 b_1} \cdots M_{a_{2n} b_{2n}} \varepsilon_{b_1 \cdots b_{2n}} \\ &= \sum_{b_1, \dots, b_{2n}} \varepsilon_{b_1 \cdots b_{2n}} (J_{a_1 a_{n+1}} M_{a_1 b_1} M_{a_{n+1} b_{n+1}}) \cdots (J_{a_n a_{2n}} M_{a_n b_n} M_{a_{2n} b_{2n}}) \\ &= \sum_{b_1 \cdots b_{2n}} \varepsilon_{b_1 \cdots b_{2n}} M^T J M_{b_1 b_{n+1}} \cdots M^T J M_{b_n b_{2n}} = \sum_{b_1 \cdots b_{2n}} \varepsilon_{b_1 \cdots b_{2n}} J_{b_1 b_{n+1}} \cdots J_{b_n b_{2n}} \end{aligned}$$

又由于⁷

$$\sum_{a_1, \dots, a_{2n}} \varepsilon_{a_1 \cdots a_{2n}} J_{a_1 a_{n+1}} \cdots J_{a_n a_{2n}} \neq 0$$

所以

$$\det M = 1$$

请注意这一推论的逆命题并不成立。

推论 $M \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, 则 $M J M^T = J \Leftrightarrow \det M = 1$ 。

证明: 这是一个特例, 只有在二维相空间中才会有

$$\text{Sp } 2, \mathbb{R} = \text{SL } 2, \mathbb{R}$$

设

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

那么

⁷ 可以证明

$$\sum_{a_1, \dots, a_{2n}} \varepsilon_{a_1 \cdots a_{2n}} J_{a_1 a_{n+1}} \cdots J_{a_n a_{2n}} = 2^n n!$$

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

$$MJM^T = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & d \\ -a & -c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & ad-bc \\ bc-ad & 0 \end{pmatrix}$$

$$MJM^T = J \iff ad-bc = 1 \iff \det M = 1$$

5. 辛变换是正则变换

定理 辛变换一定是正则变换。

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

$$\begin{aligned} \xi_i &= \partial_t \xi_i + M_{ij} \eta_j = \partial_t \xi_i + M_{ij} J_{jk} \frac{\partial H}{\partial \eta_k} = \partial_t \xi_i + M_{ij} J_{jk} M_{lk} \frac{\partial H}{\partial \xi_l} = \partial_t \xi_i + J_{il} \frac{\partial H}{\partial \xi_l} \\ &= J_{ij} \left(-J_{jk} \partial_t \xi_k + \frac{\partial H}{\partial \xi_j} \right) \end{aligned}$$

记

$$Z_j \stackrel{\text{def}}{=} -J_{jk} \partial_t \xi_k + \frac{\partial H}{\partial \xi_j}$$

我们需要证明存在函数 $K(t, \xi)$ ，使得

$$dK = Z_j d\xi_j$$

即 1-形式 $Z_j d\xi_j$ 强可积。

把 t 看作参数，计算外微分，

$$\begin{aligned} d(Z_j d\xi_j) &= d(-J_{jk} \partial_t \xi_k d\xi_j + dH) = d(-J_{jk} \partial_t \xi_k) \\ &= -J_{jk} \left(\partial_t \frac{\partial \xi_k}{\partial \eta_l} \right) \frac{\partial \eta_l}{\partial \xi_m} d\xi_m \wedge d\xi_j = -J_{jk} \partial_t M_{kl} M_{lm}^{-1} d\xi_m \wedge d\xi_j \\ &= [J \partial_t M M^{-1}]_{jm} d\xi_j \wedge d\xi_m \end{aligned}$$

系数对指标 j, m 反对称的部分才有贡献，于是

$$\begin{aligned} d(Z_j d\xi_j) &= \frac{1}{2} \{ J \partial_t M M^{-1} - [J \partial_t M M^{-1}]^T \}_{jm} d\xi_j \wedge d\xi_m \\ &= \frac{1}{2} \{ J \partial_t M M^{-1} + M^{-1 T} \partial_t M^T J \}_{jm} d\xi_j \wedge d\xi_m \\ &= \frac{1}{2} \left\{ M^{-1 T} \left[\frac{\partial}{\partial t} M^T J M \right] M^{-1} \right\}_{jm} d\xi_j \wedge d\xi_m \\ &= \frac{1}{2} \left\{ M^{-1 T} \left[\frac{d}{dt} J \right] M^{-1} \right\}_{jm} d\xi_j \wedge d\xi_m = 0 \end{aligned}$$

所以存在函数 $K(t, \xi)$ ，使得

$$Z = \nabla_\xi K, \quad \xi = JZ = J\nabla_\xi K$$

仍保持正则方程的形式。

由这个定理，再结合前面的结论知，

辛变换是正则变换的等价条件。

推论 在受限正则变换下，哈密顿量不变。

证明：

$$\left. \begin{aligned} \xi &= \xi(\eta), M \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \xi}{\partial \eta} \implies \xi = M\eta \\ \eta &= J \frac{\partial H}{\partial \eta} \end{aligned} \right\} \implies \xi = MJ \frac{\partial H}{\partial \eta} = MJM^T \frac{\partial H}{\partial \xi} \left\{ \begin{aligned} \implies \xi &= J \frac{\partial H}{\partial \xi} \\ \xi &= J \frac{\partial K}{\partial \xi} \end{aligned} \right\} \implies \frac{\partial H}{\partial \xi}$$

$$\text{正则变换} \implies MJM^T = J$$

$$= \frac{\partial K}{\partial \xi}$$

$$\implies \frac{\partial H}{\partial \xi_i} d\xi_i = \frac{\partial K}{\partial \xi_i} d\xi_i \implies K = H + f(t)$$

舍弃没有动力学效应的纯规范项 $f(t)$ ，哈密顿量不变，

$$K = H$$

6. 泊松括号是正则变换的不变量

定理 辛变换 $\Leftrightarrow$ 基本泊松括号不变。

证明 由于

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

$$MJM^T = \begin{pmatrix} AB^T - BA^T & AD^T - BC^T \\ CB^T - DA^T & CD^T - DC^T \end{pmatrix}$$

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

即

$$MJM^T = J \Leftrightarrow \begin{pmatrix} [Q_\alpha, Q_\beta]_{q,p} & [Q_\alpha, P_{\beta'}]_{q,p} \\ [P_{\alpha'}, Q_\beta]_{q,p} & [P_{\alpha'}, P_{\beta'}]_{q,p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \delta_{\alpha\beta'} \\ -\delta_{\alpha'\beta} & 0 \end{pmatrix}$$

推论 泊松括号在正则变换下不变。

证明：计算新变量下的泊松括号，

$$[A, B]_\xi = \frac{\partial A}{\partial \xi_j} J_{jk} \frac{\partial B}{\partial \xi_k} = \frac{\partial A}{\partial \eta_l} \frac{\partial \eta_l}{\partial \xi_j} J_{jk} \frac{\partial B}{\partial \eta_m} \frac{\partial \eta_m}{\partial \xi_k} = \frac{\partial A}{\partial \eta_l} M_{lj}^{-1} J_{jk} \frac{\partial B}{\partial \eta_m} M_{mk}^{-1}$$

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

因此泊松括号是正则变换的不变量，括号右下角的标记可省略。

7. 哈密顿系统的演化

定理 哈密顿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

$$\eta_0 = q_1 t_0 = q_{01}, \dots, q_n t_0 = q_{0n}, p_1 t_0 = p_{01}, \dots, p_n t_0 = p_{0n}$$

则 t 时刻的正则变量为

$$\eta = \eta t, \eta_0$$

这是相空间的变换，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

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

我们需要检查 $M^T J M$ 是否为常数。求导得

$$\frac{d}{dt} M^T J M = \frac{dM^T}{dt} J M + M^T J \frac{dM}{dt}$$

下面需要计算 dM/dt 。由正则方程

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

两边对 η_0 求偏导，

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

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

现在有

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} M^T J M &= \frac{dM^T}{dt} J M + M^T J \frac{dM}{dt} = M^T \frac{\partial^2 H}{\partial \eta \partial \eta} - J J M + M^T J J \frac{\partial^2 H}{\partial \eta \partial \eta} M \\ &= M^T \frac{\partial^2 H}{\partial \eta \partial \eta} M - M^T \frac{\partial^2 H}{\partial \eta \partial \eta} M = 0\end{aligned}$$

积分得

$$M^T J M = J$$

是辛变换。

8. 保辛算法

求解常微分方程组的传统算法，不可避免的带有离散化误差和舍入误差等人为耗散性，这些耗散性扭曲了哈密顿体系的辛几何特征。

冯康开创的保辛积分（Symplectic integrators），在国际上有重要影响，目前在计算数学中有保几何积分（Geometric Numerical Integration）这个研究方向⁸。

保辛算法能够保持体系的辛结构，在相空间结构、对称性和守恒量方面优于传统算法，具有长期稳定性和跟踪能力，大大推进了动力学长期预测。保辛积分在多种学科中有应用，如计算等离子体、分子动力学和雷达探矿等。

例 用欧拉法求解正则方程

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

$$\begin{aligned}q(t + \Delta t) &= q(t) + \frac{\partial H}{\partial p}(q(t), p(t)) \Delta t \\ p(t + \Delta t) &= p(t) - \frac{\partial H}{\partial q}(q(t), p(t)) \Delta t\end{aligned}$$

雅可比矩阵是

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

雅可比行列式不是 1，

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

例如谐振子的哈密顿量是

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

得正则方程

$$\dot{q} = p, \quad \dot{p} = -q$$

于是一阶欧拉差分法的迭代方程是

$$\begin{aligned}p(t + \Delta t) &= p(t) + p(t) \Delta t = p(t) - q(t) \Delta t \\ q(t + \Delta t) &= q(t) + q(t) \Delta t = q(t) + p(t) \Delta t\end{aligned}$$

雅可比行列式为

$$\det M = \det \begin{pmatrix} 1 & \Delta t \\ -\Delta t & 1 \end{pmatrix} = 1 + \Delta t^2 \neq 1$$

⁸ 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

因此不是欧拉法的迭代公式不是辛变换。

若改成一阶保辛欧拉法 (symplectic Euler method) ,

$$p\ t + \Delta t = p\ t + p\ t\ \Delta t = p\ t - q\ t\ \Delta t$$

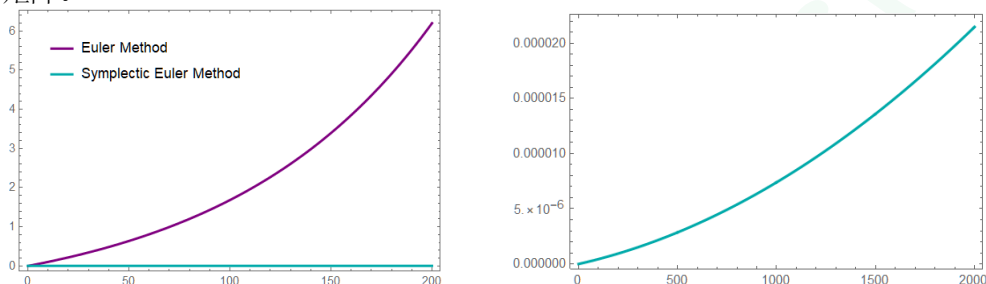
$$q\ t + \Delta t = q\ t + q\ t\ \Delta t = q\ t + p\ t + \Delta t\ \Delta t = \{1 - \Delta t^2\}q\ t + p\ t\ \Delta t$$

此迭代关系的雅可比矩阵

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

$$\det M = 1$$

是辛矩阵。



Euler 法的误差和 Symplectic Euler 法的误差比较。横轴是时间，单位为周期；竖轴是相对误差，单位为 100%；两种算法采用的迭代步长同为 1/2000 周期。

9. 刘维尔定理

正则方程

$$\eta = J \nabla_{\eta} H\ t, \eta$$

表明，哈密顿系统的代表点 $\eta = q_{\alpha}, p_{\alpha}$ 在 $2n$ 维相空间中的移动速度 η ，正比于哈密顿函数的梯度。梯度流 $J \nabla_{\eta} H\ t, \eta$ 称为相流 (phase flux)。

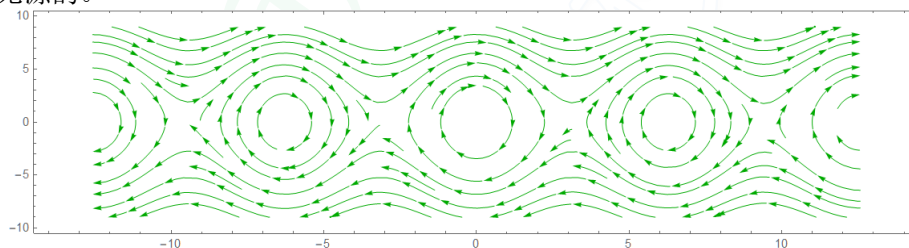
哈密顿系统演化，是代表点跟随相流的漂移；相点漂移形成的轨迹是相轨道。

由运动方程解的唯一性，不同的相轨道没有交点。

并且

$$\nabla_{\eta} \cdot J \nabla_{\eta} H\ t, \eta = J_{kl} \partial_j \partial_k H\ t, \eta = 0$$

相流是无源的。



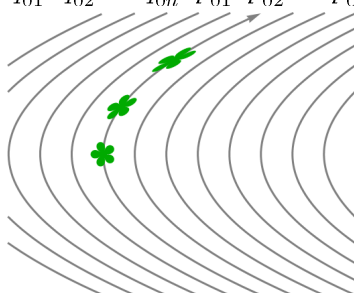
单摆系统的相流

推论 相空间体积元在运动中不变，相流是不可压缩流体。

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

$$dq_1 dq_2 \cdots dq_n dp_1 dp_2 \cdots dp_n = \det \frac{\partial \eta}{\partial \eta_0} dq_{01} dq_{02} \cdots dq_{0n} dp_{01} dp_{02} \cdots dp_{0n}$$

$$= dq_{01} dq_{02} \cdots dq_{0n} dp_{01} dp_{02} \cdots dp_{0n}.$$



抛物运动的相空间体积元变化

在统计物理中，具有相同性质的大量系统的集合，称为**系综**（ensemble）。系综中的每个系统的状态，用相空间的一个点表示，称为**代表点**。当时间演进时，代表点跟随相流运动，可以类比于水面上随波逐流的落叶。

刘维尔定理（Liouville）代表点密度（又称系综密度）在运动中不变。

证明：体积元随相流运动，体积元中的代表点数目不会增减，同时体积元也不变，所以其比值 $\rho(t, \eta)$ 是常数，

$$\frac{d\rho(t, \eta)}{dt} = 0$$

推论 系综密度满足连续方程。

证明：利用运动方程得

$$0 = \frac{d\rho(t, \eta)}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \eta \cdot \nabla_{\eta} \rho = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\eta} \cdot (\rho \eta) - \rho \nabla_{\eta} \cdot \eta = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\eta} \cdot (\rho \eta) - \rho \nabla_{\eta} \cdot (J \nabla_{\eta} H)$$

最后一项是零，

$$\nabla_{\eta} \cdot (J \nabla_{\eta} H) = J_{jk} \frac{\partial}{\partial \eta_j} \frac{\partial}{\partial \eta_k} H = 0$$

所以连续方程成立，

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\eta} \cdot (\rho \eta) = 0$$

即 $(\rho, \rho \eta)$ 是相空间的守恒流。

六、 正则变换的生成函数

1. 规范项和正则变换

哈密顿系统的运动方程可以从相空间的哈密顿原理 $\delta S[\eta] = 0$ 导出。在保证欧拉方程不变的前提下，相空间的拉格朗日函数可以相差规范项，

$$\begin{aligned} \Lambda' &= \Lambda - \frac{dF(t, \eta)}{dt} \\ &= p_{\alpha} q_{\alpha} - H(t, q, p) - \frac{\partial F(t, q, p)}{\partial t} - \frac{\partial F(t, q, p)}{\partial q_{\alpha}} q_{\alpha} - \frac{\partial F(t, q, p)}{\partial p_{\alpha}} p_{\alpha} \\ &= \left(p_{\alpha} - \frac{\partial F(t, q, p)}{\partial q_{\alpha}} \right) q_{\alpha} - \left(H(t, q, p) + \frac{\partial F(t, q, p)}{\partial t} \right) - \frac{\partial F(t, q, p)}{\partial p_{\alpha}} p_{\alpha} \end{aligned}$$

由于上式中存在 p_{α} 项，我们需要重新定义正则变量 $\{Q_{\alpha}, P_{\alpha}\}$ 和正则函数 $K(t, Q, P)$ ，以保持哈密顿力学相空间拉氏函数的固有特征（拉氏函数是正则坐标导数的线性函数，且不依赖于正则动量），

$$\Lambda' = P_{\alpha} Q_{\alpha} - K(t, Q, P)$$

实际上这是在作正则变换，正则变换与规范函数的关系是

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

我们称满足上式的正则变换为**变分不变的相空间变换**（variational invariant）。

当需要考虑扩展正则变换时，只需允许作用量相差一个倍数 λ 即可，

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

2. 生成函数和可积条件

变分不变条件可以写成

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

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

比较上式左右两边，得

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

最后一个方程无需求解，直接给出了新哈密顿量。如果指定函数 $F(t, q, p)$ ，由前两组 $2n$ 个偏微分方程，原则上可以解出正则变换关系

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

因此, 规范函数 $F(t, q, p)$ 被称为正则变换的生成函数 (generating function) 或母函数。

变分不变的相空间变换, 是否穷尽了所有的正则变换? 这还需要进一步验证。

定理 变分不变的相空间变换 $\iff$ 正则变换。

证明: 已知变换的生成函数 $F(t, q, p)$, 可直接验算辛条件是否成立,

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

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 $\frac{\partial}{\partial p_\beta}$,

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

这些等式代入后得

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha} \frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial q_\alpha} \frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial q_\beta} & \frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha} \frac{\partial P_\gamma}{\partial p_{\beta'}} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial q_\alpha} \frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial p_{\beta'}} \\ \frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_{\alpha'}} \frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial p_{\alpha'}} \frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial q_\beta} & \frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_{\alpha'}} \frac{\partial P_\gamma}{\partial p_{\beta'}} - \frac{\partial P_{\gamma'}}{\partial p_{\alpha'}} \frac{\partial Q_{\gamma'}}{\partial p_{\beta'}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \delta_{\alpha\beta'} \\ -\delta_{\alpha'\beta} & 0 \end{pmatrix} \iff M^T J M = J$$

故 M 是辛矩阵。变分不变的相空间变换, 是正则变换。

反之, 正则变换的雅可比矩阵 M 是辛矩阵, 定义法夫形式

$$\omega \stackrel{\text{def}}{=} \left(p_\alpha - P_\beta \frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha} \right) dq_\alpha + \left(-P_\beta \frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha} \right) dp_\alpha$$

计算外微分, 得

$$\begin{aligned} d\omega &= dp_\alpha \wedge dq_\alpha - \frac{\partial P_\beta}{\partial p_\gamma} \frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha} dp_\gamma \wedge dq_\alpha - P_\beta \frac{\partial^2 Q_\beta}{\partial q_\alpha \partial p_\gamma} dp_\gamma \wedge dq_\alpha - \frac{\partial P_\beta}{\partial q_\gamma} \frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha} dq_\gamma \wedge dp_\alpha \\ &\quad - P_\beta \frac{\partial^2 Q_\beta}{\partial p_\alpha \partial q_\gamma} dq_\gamma \wedge dp_\alpha \\ &= dp_\alpha \wedge dq_\alpha - \frac{\partial P_\beta}{\partial p_\gamma} \frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha} dp_\gamma \wedge dq_\alpha - \frac{\partial P_\beta}{\partial q_\gamma} \frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha} dq_\gamma \wedge dp_\alpha \\ &= dp_\alpha \wedge dq_\alpha + \frac{\partial P_\beta}{\partial p_\gamma} \frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha} dq_\alpha \wedge dp_\gamma - \frac{\partial P_\beta}{\partial q_\gamma} \frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha} dq_\gamma \wedge dp_\alpha \\ &= dp_\alpha \wedge dq_\alpha + \left(\frac{\partial P_\beta}{\partial p_\gamma} \frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha} - \frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha} \frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\gamma} \right) dq_\alpha \wedge dp_\gamma = dp_\alpha \wedge dq_\alpha + \delta_{\alpha\gamma} dq_\alpha \wedge dp_\gamma = 0 \end{aligned}$$

所以 ω 强可积（视 t 为参数），即存在原函数 $F(t, q, p)$ ，满足

$$\omega = dF(t, q, p)$$

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

因此 $Q_\alpha(t, q, p), P_\alpha(t, q, p)$ 是变分不变的变换。

推论 $dp_\alpha \wedge dq_\alpha = dP_\alpha \wedge dQ_\alpha$ 是正则变换的等价条件。（可积条件）

证明：变分不变条件是

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

可以将 K 取为

$$K = H + \frac{\partial F}{\partial t} + P_\alpha \frac{\partial Q_\alpha}{\partial t}$$

于是 dt 项对方程左边的1-形式是否可积，没有实质限制。

可以视 t 为参数，

$$dt = 0$$

变分不变条件成为

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

即 $p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha$ 可积，也就是要求

$$d(p_\alpha dq_\alpha - P_\alpha dQ_\alpha) = dp_\alpha \wedge dq_\alpha - dP_\alpha \wedge dQ_\alpha = 0$$

例 对尺度变换

$$Q_\alpha(t) = c t q_\alpha(t), \quad P_\alpha(t) = \frac{1}{c t} p_\alpha(t), \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

有

$$dP_\alpha \wedge dQ_\alpha = \frac{1}{c} dp_\alpha \wedge c dq_\alpha = dp_\alpha \wedge dq_\alpha$$

满足可积条件，是正则变换。

定理（庞加莱积分不变量）对相空间的任一回路 C ，

$$I(t) \stackrel{\text{def}}{=} \oint_{C(t)} p_\alpha dq_\alpha$$

是常数，不随时间变化。

证明：分两步证明。

（1）正则变换是变分不变的变换，

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

于是

$$\oint_{q,p \in C} p_\alpha dq_\alpha - \oint_{q,p \in C} P_\alpha dQ_\alpha = \oint_{q,p \in C} dF(t, q, p) = 0$$

$$\Rightarrow \oint_{q,p \in C} p_\alpha dq_\alpha = \oint_{q,p \in C} P_\alpha dQ_\alpha$$

（2） $I(t)$ 的变化，来自闭合曲线 C 随相流的移动， $C(t_1) \rightarrow C(t_2)$ 。

由于哈密顿系统的随时间的演化是正则变换，

$$Q_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} q_\alpha(t_2) = Q_\alpha(t_2, q(t_1), p(t_1)), \quad P_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} p_\alpha(t_2) = P_\alpha(t_2, q(t_1), p(t_1))$$

所以

$$\oint_{q,p \in C(t_1)} p_\alpha dq_\alpha = \oint_{q,p \in C(t_1)} P_\alpha dQ_\alpha = \oint_{Q,P \in C(t_2)} P_\alpha dQ_\alpha = \oint_{q,p \in C(t_2)} p_\alpha dq_\alpha$$

$$I(t_1) = I(t_2)$$

3. 总结：正则变换的等价条件

我们从运动方程、辛几何、变分和泊松括号等几个角度讨论了正则变换，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 $dp_\alpha \wedge dq_\alpha = dP_\alpha \wedge dQ_\alpha$ ；
 ③该变换是辛变换；
 ④该变换保持经典对易关系（基本 Poisson 括号）不变。

4. 生成函数的四类常用形式

以正则变量 $\{q_\alpha, p_\alpha | \alpha = 1, 2, \dots, n\}$ 作为自变量的生成函数 F ，需要解偏微分方程组求得变换关系，不方便使用。

如果从 $\{q_\alpha, p_\alpha | \alpha = 1, 2, \dots, n\}$ 中选取 n 个独立变量，再从 $\{Q_\alpha, P_\alpha | \alpha = 1, 2, \dots, n\}$ 中选取其余 n 个独立变量，在每一对共轭的正则变量中，新、老变量各取一个，则有可能避开这个麻烦。

- (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

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

得法夫方程

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

即

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

前两组等式都是代数方程，比偏微分方程更易求解。

一个已知的正则变换，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。

反过来看，如果已知生成函数 $F_1(t, q, Q)$ ，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。行列式

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

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

$$p_\alpha dq_\alpha - dP_\alpha Q_\alpha + Q_\alpha dP_\alpha + K - H dt = dF$$

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

正则变换为

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

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。

反之，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；行列式

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

非奇异、不发散时，才能求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 $F_3 = F_3(t, Q, p)$ ，变换关系是

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

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

(4) 选择 p_α, P_α 为独立变量，得第四类生成函数 $F_4 = F_4(t, p, P)$ ，变换关系是

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

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

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

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

例 恒等变换

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

对应的正则变换是

$$Q_\alpha = q_\alpha, \quad P_\alpha = p_\alpha$$

例 交替变换

$$F_1(t, q, Q) = q_\alpha Q_\alpha$$

$$\Rightarrow Q_\alpha = p_\alpha, \quad P_\alpha = -q_\alpha$$

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

由于

$$\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta} = 0 \Rightarrow \det\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\right) = 0$$

不满足第二类生成函数的存在条件，交替变换没有第二类生成函数。

例 相空间的平移变换

$$F_2 = q_\alpha + a_\alpha P_\alpha - b_\alpha$$

$$\Rightarrow Q_\alpha = q_\alpha + a_\alpha, \quad p_\alpha = P_\alpha - b_\alpha$$

例 尺度变换

$$\begin{aligned} F_2(t, q, P) &= c t q_\alpha P_\alpha \\ \Rightarrow Q_\alpha &= c t q_\alpha, \quad p_\alpha = c t P_\alpha \\ K(t, Q, P) &= H(t, q, p) + c q_\alpha P_\alpha = H\left(t, \frac{Q}{c}, cP\right) + \frac{c}{c} Q_\alpha P_\alpha \end{aligned}$$

例 正则坐标的变换

$$\begin{aligned} F_2(t, Q, P) &= f_\alpha(t, q) P_\alpha + g(t, q) \\ \Rightarrow Q_\alpha &= f_\alpha(t, q), \quad p_\alpha = \frac{\partial f_\beta(t, q)}{\partial q_\alpha} P_\beta + \frac{\partial g(t, q)}{\partial q_\alpha} \end{aligned}$$

这个例子说明，拉氏框架下广义坐标的任意变换，均可在配以合适的动量变换关系后，成为相空间的正则变换。

例 时间平移

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

保留至一阶无穷小，得正则变换关系

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

这一变换即哈密顿系统在无穷小时间内的演化，

$$\begin{aligned} q_\alpha t \rightarrow Q_\alpha t &= q_\alpha + \epsilon \frac{\partial H(t, q, p)}{\partial p_\alpha} = q_\alpha t + \epsilon q_\alpha = q_\alpha t + \epsilon \\ p_\alpha t \rightarrow P_\alpha t &= p_\alpha t - \epsilon \frac{\partial H(t, q, p)}{\partial q_\alpha} = p_\alpha t + \epsilon p_\alpha t = p_\alpha t + \epsilon \end{aligned}$$

5. 应用：利用正则变换化简哈密顿方程

例 谐振子 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 q^2$ ，利用母函数 $F_1 = \frac{m}{2} \omega q^2 \cot Q$ 求解。

解：①写出变换关系

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

②反解出老变量

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

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

$$\begin{aligned} P &= -\frac{\partial K}{\partial Q} = 0 \Rightarrow P = \text{常数} = \frac{E}{\omega} \\ Q &= \frac{\partial K}{\partial P} = \omega \Rightarrow Q = \omega t + \varphi_0 \end{aligned}$$

⑤代入变换关系

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

利用生成函数求解力学问题，困难在于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猜想在变换后，哈密顿量成为

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

要求正则变换关系是

$$q = \sqrt{2cP} \cos Q, \quad p = \sqrt{2cP} \sin Q \\ \Rightarrow Q = \arctan q/p, \quad P = \frac{1}{2c} p^2 + q^2$$

②检验是否为正则变换

$$dP \wedge dQ = \frac{1}{c} p dp + q dq \wedge \frac{-pdq + qdp}{q^2 + p^2} = \frac{1}{c} \frac{1}{q^2 + p^2} -p^2 dp \wedge dq + q^2 dq \wedge dp = -\frac{1}{c} dp \wedge dq$$

仅当 $c = -1$ 时，是正则变换。

③确定生成函数

先求规范函数，

$$pdq - PdQ = pdq + \frac{1}{2} p^2 + q^2 \frac{-pdq + qdp}{q^2 + p^2} = \frac{1}{2} pdq + qdp = dF \\ F = \frac{1}{2} qp$$

第二类生成函数是

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

需要上式中的消去 p, Q ，因此我们从变换关系

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

解出

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

代入 $F_2(q, P)$ 得

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

④正则方程

$$K = -P \\ \Rightarrow Q = -1, P = 0$$

6. 连续正则变换和连续对称变换

正则变换与对称变换，都与规范项有关。两者之间有什么关联？

设某个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， $\lambda = \lambda_0$ 表示恒等变换，

$$F_2(t, q, P, \lambda_0) = q_\alpha P_\alpha$$

无穷小正则变换的生成函数是

$$F_2(t, q, P, \lambda_0 + \epsilon) = q_\alpha P_\alpha + \epsilon G(t, q, P)$$

这里 G 是连续正则变换的生成元，

$$G \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial F_2}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=\lambda_0}$$

引理 在第二类母函数

$$F_2(t, q, P, \lambda_0 + \epsilon) = q_\alpha P_\alpha + \epsilon G(t, q, P)$$

给出的无穷小正则变换 (Infinitesimal Canonical Transformation) 之下，物理量 $A(t, q, p)$ 的变化是

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

证明：保留到一阶小量，

$$\begin{aligned} Q_\alpha &= \frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha} = q_\alpha + \epsilon \frac{\partial G}{\partial P_\alpha} = q_\alpha + \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \Rightarrow \delta q_\alpha = Q_\alpha - q_\alpha = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_\alpha}, \\ p_\alpha &= \frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha} = P_\alpha + \epsilon \frac{\partial G}{\partial q_\alpha} \Rightarrow \delta p_\alpha = P_\alpha - p_\alpha = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_\alpha} \\ t' &= t, \quad \Delta t = 0 \end{aligned}$$

于是

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

证毕。

定理 设无穷小连续正则变换的第二类生成函数为

$$F_2(t, q, P, \lambda_0) + \epsilon = q_\alpha P_\alpha + \epsilon G(t, q, P)$$

则此变换为准对称变换的等价条件是

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

仅为时间的函数。对应的诺特守恒量为

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

证明：

①这个无穷小正则变换对应的规范函数是

$$\begin{aligned} F(t, q, p) &= F_2 - P_\alpha Q_\alpha = q_\alpha P_\alpha + \epsilon G(t, q, P) - P_\alpha Q_\alpha = -P_\alpha \delta q_\alpha + \epsilon G(t, q, P) \\ &= -p_\alpha \delta q_\alpha + \epsilon G(t, q, p) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \end{aligned}$$

在此变换下，新哈密顿函数是

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

于是

$$\begin{aligned} P_\alpha dQ_\alpha - p_\alpha dq_\alpha &= -dF(t, q, p) + (K - H) dt \\ \Rightarrow P_\alpha dQ_\alpha - p_\alpha dq_\alpha &= d\{p_\alpha \delta q_\alpha - \epsilon G(t, q, p)\} + \epsilon \frac{\partial G(t, q, p)}{\partial t} dt \end{aligned}$$

②如果这一正则变换同时也是**准对称变换**，那么

$$d\Delta \Lambda dt = 0$$

而

$$\begin{aligned} \Delta \Lambda dt &= \{P_\alpha dQ_\alpha - H(t, Q, P) dt\} - \{p_\alpha dq_\alpha - H(t, q, p) dt\} \\ &= -\{H(t, Q, P) - H(t, q, p)\} dt + \{P_\alpha dQ_\alpha - p_\alpha dq_\alpha\} \\ &= -\delta H dt + \{P_\alpha dQ_\alpha - p_\alpha dq_\alpha\} \end{aligned}$$

把上面的等式代入，

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

上式强可积，即

$$\omega \stackrel{\text{def}}{=} -\delta H dt + \epsilon \frac{\partial G(t, q, p)}{\partial t} dt$$

强可积。

③利用引理，

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

所以

$$\omega = \epsilon \left\{ -[H, G] + \frac{\partial G}{\partial t} \right\} dt = \epsilon \left\{ [G, H] + \frac{\partial G}{\partial t} \right\} dt$$

上式强可积等价于

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

也就是满足

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

仅为时间 t 的函数。

④现在由泊松定理的推论， $G(t, q, p) - \int f(t) dt$ 是守恒量。证毕。

这一定理表明，

准对称变换可以是正则变换；
正则变换未必是准对称变换。

上面的定理还说明，生成元就是守恒量。

反之，从已知守恒量也可以求出对称变换——这是诺特定理的逆定理：

定理 若 $G(t, q, p)$ 是守恒量，那么生成函数

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

给出的正则变换

$$\delta q_\alpha = [q_\alpha, \epsilon G(t, q, p)] = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_\alpha}, \quad \delta p_\alpha = [p_\alpha, \epsilon G(t, q, p)] = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_\alpha}, \quad \Delta t = 0$$

是无穷小准对称变换，变换的规范项是

$$\Delta \varphi = p_\alpha \delta q_\alpha - \epsilon G$$

例 求龙格-楞次矢量对应的对称变换，以及此变换的第二类生成函数。

解 已知守恒量

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

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

于是生成函数为

$$F_2 = \vec{x} \cdot \vec{p}' + \epsilon \cdot A = \vec{x} \cdot \vec{p}' + \epsilon \cdot \left(\vec{p}' \times \vec{x} \times \vec{p}' - m\alpha \frac{\vec{x}}{r} \right)$$

$$= x_i p'_i + \epsilon_i \left(x_i p'^2 - p'_i \vec{p}' \cdot \vec{x} - m\alpha \frac{x_i}{r} \right)$$

保留到一阶无穷小，正则变换为

$$p_j = \frac{\partial F_2}{\partial x_j} = p'_j + p'^2 \epsilon_j - \epsilon \cdot \vec{p} p_j - \frac{m\alpha}{r} \epsilon_j + \frac{m\alpha}{r^3} \epsilon \cdot \vec{x} x_j$$

$$x'_j = \frac{\partial F_2}{\partial p'_j} = x_j + 2 \epsilon \cdot \vec{x} p_j - \vec{p} \cdot \vec{x} \epsilon_j - \epsilon \cdot \vec{p} x_j$$

守恒量对应的无穷小准对称变换为

$$\Delta t = 0$$

$$\Delta x = 2 \epsilon \cdot \vec{x} \vec{p} - \epsilon \cdot \vec{p} \vec{x} - \vec{p} \cdot \vec{x} \epsilon$$

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

$$\Delta \varphi = -p_i \delta x_i + \epsilon_i A_i = p_i \Delta x_i - \epsilon_i A_i$$

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

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

定理 如果生成函数

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

给出的无穷小受限正则变换

$$\delta q_\alpha = \epsilon [q_\alpha, G], \quad \delta p_\alpha = \epsilon [p_\alpha, G]$$

保持哈密顿量不变，

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

那么生成元 $G(q, p)$ 是守恒量。

证明：如果哈密顿量不变，由引理知

$$H(t, q + \delta q, p + \delta p) - H(t, q, p) = \delta H = \epsilon[H, G] = 0$$

$$[H, G] = 0$$

于是

$$\frac{dG}{dt} = \frac{\partial G}{\partial t} + [G, H] = 0 - [H, G] = 0$$

G 是守恒量。

七、 哈密顿-雅可比理论

1. 哈密顿-雅可比方程

利用正则变换化简哈密顿函数，可以使得运动方程变得容易求解。

什么样的哈密顿函数最简单？如果能找到**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）是零，

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

表达式最简单。这时正则变量 Q_α, P_α 都是守恒量，

$$Q_\alpha = \frac{\partial K}{\partial P_\alpha} = 0, \quad P_\alpha = -\frac{\partial K}{\partial Q_\alpha} = 0$$

无需再求积微分方程。

利用第二类生成函数生成的正则变换关系，

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

可见化零正则变换必须满足

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

换个符号，定义**哈密顿主函数**为

$$S(t, q) \stackrel{\text{def}}{=} F_2(t, q, P)$$

满足哈密顿-雅可比方程：

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

自治系统的哈密顿函数不含时，是守恒量，

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

哈密顿-雅可比方程成为

$$E + \frac{\partial S(t, q)}{\partial t} = 0$$

对时间 t 积分，

$$S(t, q) = -Et + W(q)$$

$W(q)$ 称为**哈密顿特征函数**。

最后，利用

$$p_\alpha = \frac{\partial S}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial W}{\partial q_\alpha}, \quad H = E$$

得到

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

称为**受限哈密顿-雅可比方程**（restricted Hamilton-Jacobi equation）。这是 n 个自变量的一阶偏微分方程。

哈密顿-雅可比理论把 $2n$ 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 (P_α 是常数),

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial q_\alpha} q_\alpha + \frac{\partial S}{\partial t}$$

把哈密顿-雅可比方程以及变换关系

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

代入, 得

$$\frac{dS}{dt} = p_\alpha q_\alpha - H = \Lambda$$

对时间 t 积分,

$$S = \int \Lambda dt$$

这表明哈密顿主函数是积分限可变的哈密顿作用量, 因此又称为哈密顿作用函数。

对自治系统,

$$\begin{aligned} -Et + W = S &= \int p_\alpha q_\alpha - E dt = \int p_\alpha q_\alpha dt - Et \\ \Rightarrow W &= \int p_\alpha dq_\alpha \end{aligned}$$

哈密顿特征函数是积分限可变的约化作用量。

3. 利用哈密顿-雅可比方程求解力学问题

分离变量法解偏微分方程是《数理方程》课程的内容。偏微分方程只有选用了合适的变量, 才能够分离变量。下面只讨论能够分离变量的情形。

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

解: ①写出哈密顿-雅可比方程。

哈密顿量不含时, 受限哈密顿-雅可比方程是

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

②选择合适的坐标系, 分离变量, 并求出作用函数。

在这个问题中, 哈密顿-雅可比方程在直角坐标系中就可以分离变量。

设

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

方程成为

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

方程左边不含 y , 右边不含 x , 可见 E_1 不依赖于 x, y , 是常数 (守恒量),

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

解出

$$\begin{cases} W_1 = \pm \int \sqrt{2mE_1 - m^2\omega^2 x^2} dx \\ W_2 = \pm \int \sqrt{2m(E - E_1) - m^2\omega^2 y^2} dy \end{cases}$$

这里的积分不需要求出,

$$\begin{aligned} W(x, y, E, E_1) &= W_1 + W_2 \\ S(t, x, y, E, E_1) &= -Et + W(x, y, E, E_1) \end{aligned}$$

③写出变换关系

令积分常数 E, E_1 为新的正则动量 P_1, P_2 。

根据生成函数

$$F_2 \stackrel{\text{def}}{=} S(t, x, y, E, E_1)$$

得

$$p_x = \frac{\partial S}{\partial x} = \pm \sqrt{2mE_1 - m^2\omega^2 x^2}$$

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

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

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

④反解出广义坐标、广义动量的变化规律

由后两个式子得

$$\begin{aligned} y &= \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2(E - E_1)}{m}} \sin \omega t + \varphi_2 \\ \arcsin \left(\sqrt{\frac{m}{2E_1}} \omega x \right) &= \pm \arcsin \left(\sqrt{\frac{m}{2(E - E_1)}} \omega y \right) + \varphi \end{aligned}$$

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 $x(t)$ ，

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

例 把球坐标系下的受限哈密顿-雅可比方程分离变量。

解：系统的哈密顿量是

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

设势函数的形式，刚好使得受限哈密顿-雅可比方程在球坐标系能够分离变量，

$$\begin{aligned} S(t, r, \theta, \varphi) &= -Et + W_1(r) + W_2(\theta) + W_3(\varphi) \\ \frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{dW_1}{dr} r \right)^2 + 2mV_1(r) \right\} &+ \frac{1}{2mr^2} \left\{ \left(\frac{dW_2}{d\theta} \theta \right)^2 + 2mV_2(\theta) \right\} \\ &+ \frac{1}{2mr^2 \sin^2 \theta} \left\{ \left(\frac{dW_3}{d\varphi} \varphi \right)^2 + 2mV_3(\varphi) \right\} = E \end{aligned}$$

这相当于要求势能的表达式是

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

方程中含 φ 的部分必为常数，

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

代回方程，得

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

从上式中分离出含 θ 的部分，有

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

最后剩下含 r 的部分，满足

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

在这个例子中，通过两次分离变量，我们找到了2个守恒量 c_2 和 c_3 。

4. 几何光学的哈密顿特征函数

在各向同性介质中，几何光学的哈密顿函数

$$H(\lambda, x, p) = \frac{p^2}{2n^2}$$

所以哈密顿雅可比方程是

$$\frac{1}{2n^2} \nabla S^2 + \frac{\partial S}{\partial \lambda} = 0$$

引入哈密顿特征函数

$$S(\lambda, x, \lambda) = -E\lambda + W(x, \lambda) = -\frac{1}{2}\lambda + W(x, \lambda)$$

得受限哈密顿雅可比方程

$$\frac{1}{n^2} \nabla W^2 = 1, \quad \nabla W^2 = n^2$$

在历史上，哈密顿先研究了光学系统，提出特征函数的概念，然后把这一方法推广到一般的动力学系统⁹。

在光学中，哈密顿特征函数又称为程函，描述相位的变化。哈密顿-雅可比方程联系了物理系统的粒子性与波动性，预示了波动力学（量子力学）的存在。

5. 正则微扰论

设系统的哈密顿量可分离，即形式为

$$H = H_0 + H'$$

其中 H' 为微扰相互作用，是小量。 H_0 描述的系统相对简单，容易求解（可积）； H 描述的系统比较复杂，无法求出闭式解。

先找出一个正则变换。由哈密顿-雅可比方程

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

解出没有微扰时的哈密顿主函数 $S(t, q)$ ，作为第二类生成函数 F_2 ，给出的正则变换是

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

在没有微扰项 H' 时，新的正则变量 Q_α, P_α 是常数，反解可得

$$q_\alpha = q_\alpha(t, Q, P), \quad p_\alpha = p_\alpha(t, Q, P)$$

再用求得的变换化简哈密顿函数。对有微扰作用的系统作正则变换，

$$K = H + \frac{\partial S}{\partial t} = H_0 + H' - H_0 = H'$$

新的正则方程称为微扰方程，

$$Q_\alpha = \frac{\partial H'}{\partial P_\alpha}, \quad P_\alpha = -\frac{\partial H'}{\partial Q_\alpha}$$

由于 H' 是小量， $Q_\alpha(t), P_\alpha(t)$ 会随时间缓慢改变。

求解微扰方程，一般需要用级数展开的方法得到 $Q_\alpha(t), P_\alpha(t)$ 。最后代回正则变换的关系式，求得

$$q_\alpha = q_\alpha(t, Q(t), P(t)), \quad p_\alpha = p_\alpha(t, Q(t), P(t))$$

例 一维非线性振动

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \frac{1}{4}\lambda x^4, \quad \lambda \rightarrow 0$$

解 哈密顿量为

$$H = H_0 + H'$$

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

先取 $H = H_0$ ，求解零阶近似的 HJ 方程，

⁹ W. R. Hamilton, *Trans. Roy. Irish. Acad.*, **15**(1830),1; *ibid.*, **16**(1831), 93; *ibid.*, **17**(1837), 1; *On the Application to Dynamics of a General Mathematical Method previously applied to Optics*, Meeting of the British Association for the Advancement of Science, Edinburgh, 1834.

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

求得母函数

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

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

所以正则变换是

$$C = \frac{\partial S}{\partial E} = -t + \frac{\partial W}{\partial E} = -t \pm \int \frac{m dx}{\sqrt{2mE - m^2 \omega_0^2 x^2}} = -t \pm \frac{1}{\omega} \arcsin \left(\sqrt{\frac{m}{2E}} \omega x \right)$$

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} = \pm \sqrt{2mE - m^2 \omega_0^2 x^2}$$

解得

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

其中的正负号已吸收到常数 C 中，只要取 $C \rightarrow C + \pi/\omega_0$ 即可。

现在作正则变换，

$$x, p \rightarrow C, E$$

$$K = H + \frac{\partial S}{\partial t} = H'$$

得微扰哈密顿量

$$H' = \frac{1}{4} \lambda x^4 = \frac{\lambda E^2}{m\omega_0^2} \sin^4 \omega_0 t + C$$

$$= \frac{\lambda E^2}{8m\omega_0^2} \{ 3 - 4 \cos 2\omega_0 t + C + \cos 4\omega_0 t + C \}$$

和微扰方程

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

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

可用按 λ 的幂级数展开求解 C, E 。若保留到一阶无穷小，

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

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

一阶微扰方程是

$$\begin{cases} C_1 t = \frac{E_0}{4m\omega_0^2} \{ 3 - 4 \cos 2\omega_0 t + C_0 + \cos 4\omega_0 t + C_0 \} \\ E_1 t = \frac{E_0^2}{2m\omega_0} \{ 2 \sin 2\omega_0 t + C_0 - \sin 4\omega_0 t + C_0 \} \end{cases}$$

直接积分得到

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

把求得的 C, E 代回正则变换关系式可得 $x(t)$ 。

忽略振幅的缓变项以及相位的振荡（这两项都是一阶无穷小，后者较长时间后与 $\omega_0 t$ 相比不重要），则系统仍近似为简谐振动，

$$x(t) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} \sin \omega_0 t + C \approx \sqrt{\frac{2E_0}{m\omega_0^2}} \sin \left[\omega_0 \left(1 + \frac{3\lambda E_0}{4m\omega_0^2} \right) t + \omega_0 C_0 \right]$$

修正后的圆频率是

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

6. 作用变量和角变量

考虑自治系统 $H = H(q, p)$ 的周期运动。

我们希望找到一组性质比较好的正则变量来描述周期运动，最好把每个自由度都映射成多维圆周运动，正则坐标取为幅角，正则动量取为对应的角动量。

假设我们选取的广义坐标比较好，使得受限哈密顿-雅可比方程能够分离变量，求得哈密顿特征函数

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

其中 $P_1, P_2, \dots, P_n$ 是求解过程中给出的积分常数，不随时间变化。

如果直接以此为第二类生成函数，

$$F_2(q, P) \stackrel{\text{def}}{=} W(q, P)$$

那么

$$p_\alpha = \frac{\partial W}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial W_\alpha(q_\alpha, P)}{\partial q_\alpha}, \quad Q_\alpha = \frac{\partial W}{\partial P_\alpha} = \frac{\partial W_\alpha(q_\alpha, P)}{\partial P_\alpha}$$

$$K(Q, P) = H(q, p) = E$$

其中能量仅为正则动量的函数，

$$\frac{\partial E}{\partial Q_\alpha} = -P_\alpha = 0$$

$$E = E(P)$$

广义坐标满足正则方程，

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial E}{\partial P_\alpha}$$

随时间线性变化，不过未必每个周期刚好变化 2π 。

定义作用变量

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

$$J_\alpha = J_\alpha(P)$$

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 $P_\alpha = P_\alpha(J)$ ，代入哈密顿特征函数，

$$W = W(q, P(J))$$

$$F_2(q, J) \stackrel{\text{def}}{=} W(q, P(J))$$

现在以 $F_2(q, J)$ 为第二类生成函数作正则变换，

$$q, p \rightarrow \Theta, J$$

其中角变量为

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

新的哈密顿函数是

$$E(t, \Theta, J) = H(q, p)$$

由于 $F_2(q, J)$ 不含时，有

$$\Theta_\alpha = \Theta_\alpha(q, p), \quad J_\alpha = J_\alpha(q, p)$$

必然有

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

$$E = E(\Theta, J)$$

另外作用变量 $J_\alpha = J_\alpha(P)$ 是常数，因此

$$J_\alpha = -\frac{\partial E}{\partial \Theta_\alpha} = 0$$

$$E = E(J)$$

于是新变量的正则方程为

$$\Theta_\alpha = \frac{\partial E(J)}{\partial J_\alpha} = \text{constant}, \quad J_\alpha = -\frac{\partial E(J)}{\partial \Theta_\alpha} = 0$$

作用变量 J_α 守恒，而角变量则随时间线性变化。

计算角变量在一个周期中的变化，得

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

利用作用变量，我们可以不求解运动方程，直接求得圆频率：

$$\omega_\alpha = \Theta_\alpha = \frac{\partial E(J)}{\partial J_\alpha}$$

例 引力场中质点的运动周期

解：取平面极坐标，哈密顿函数是

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

令

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

受限哈密顿-雅可比方程是

$$\begin{aligned} H\left(r, \theta, \frac{\partial W}{\partial r}, \frac{\partial W}{\partial \theta}\right) &= E \\ \frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{dW_1}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{dW_2}{d\theta} \right)^2 \right\} - \frac{\alpha}{r} &= E \end{aligned}$$

解出 $W_2(\theta)$ ，

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

$W_1(r)$ 满足方程

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

从近心点向远心点运动时，

$$p_r > 0 \Rightarrow \frac{dW_1}{dr} > 0$$

积分得

$$W_1(r) = \int_{r_{\min}}^r \left(2mE + \frac{2m\alpha}{s} - \frac{p_\theta^2}{s^2} \right)^{\frac{1}{2}} ds$$

从远心点向近心点运动，

$$p_r < 0 \Rightarrow \frac{dW_1}{dr} < 0$$

积分得

$$\begin{aligned} W_1(r) &= c - \int_{r_{\max}}^r \left(2mE + \frac{2m\alpha}{s} - \frac{p_\theta^2}{s^2} \right)^{\frac{1}{2}} ds \\ c &\stackrel{\text{def}}{=} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \left(2mE + \frac{2m\alpha}{s} - \frac{p_\theta^2}{s^2} \right)^{\frac{1}{2}} ds \end{aligned}$$

作用变量为

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

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

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出了 r 的取值范围）。

积分后得到

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

把 $p_\theta = J_\theta$ 代入 J_r 的表达式，解出

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

上式取负号的原因是，只有 $E < 0$ 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，

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

两个圆频率之比为1，是有理数，故引力场中的周期运动轨道封闭。

7. 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 考虑一个无量纲外部参数 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

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

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哈密顿量 $H = H(q, p, \lambda(t))$ 中，有缓慢变化的参数 $\lambda(t)$ ，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 $\lambda(t)$ ，

$$\lambda(t), \lambda(t) \rightarrow 0$$

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，

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

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，

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

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

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

考虑作用变量变化 J_α 在一个周期内的平均值,

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

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

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

也是 Θ_α 的周期函数, 所以

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

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

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 变长度单摆

解: 单摆的拉氏量

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

广义动量

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

广义能量守恒,

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

其中 θ_0 是振幅。解出

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

于是作用变量是

$$J_\theta = \frac{1}{2\pi} \oint p_\theta d\theta = \frac{2}{\pi} \int_0^{\theta_0} \sqrt{2m^2 gl^3 (\cos \theta - \cos \theta_0)} d\theta = \frac{4m}{\pi} \sqrt{gl^3} \int_0^{\theta_0} \sqrt{\sin^2 \frac{\theta_0}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta$$

令

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

微分得

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

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

同时被积函数化简为

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

$$J_\theta = \frac{8m}{\pi} \sqrt{gl^3} \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos^2 \varphi}{\cos \frac{\theta}{2}} d\varphi = \frac{8m}{\pi} \sqrt{gl^3} \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos^2 \varphi}{\sqrt{1 - \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \sin^2 \varphi}} d\varphi$$

$$= \frac{8m}{\pi} \sqrt{gl^3} \cos \frac{\theta_0}{2} \left(E \left(-\tan^2 \frac{\theta_0}{2} \right) - K \left(-\tan^2 \frac{\theta_0}{2} \right) \right)$$

其中 K 是第一类完全椭圆积分, E 是第二类完全椭圆积分。绝热不变量 J 的一个有理逼近是

$$J_\theta \approx \frac{1}{2} mg^{1/2} l^{3/2} \theta_0^2 \frac{1 - 0.042935 \theta_0^2}{1 + 0.009128 \theta_0^2}$$

泰勒展开式为

$$J_\theta \approx \frac{1}{2} mg^{1/2} l^{3/2} \left(\theta_0^2 - \frac{5}{96} \theta_0^4 + \frac{23}{46080} \theta_0^6 \dots \right)$$

如果开始时振幅很小, 我们也可以直接求领头项而无需处理椭圆积分,

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

$$J_\theta \approx \frac{1}{2} mg^{1/2} l^{3/2} \theta_0^2$$

如果始终只考虑单摆的微振动, 利用量纲分析, 可简单得出绝热不变量:

$$J_\theta = \frac{1}{2\pi} \oint p_\theta d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_{t=0}^{t=T} p_\theta \dot{\theta} dt \propto \int_{t=0}^{t=T} K dt$$

$$\int_{t=0}^{t=T} K dt \approx \int_{t=0}^{t=T} V dt$$

$$J_\theta \propto \int_{t=0}^{t=T} K + V dt = \int_{t=0}^{t=T} E dt = ET$$

对单摆, 机械能为

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

周期是

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

于是

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

总之有

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

当绳长减半时, 振幅 $\theta_0 \rightarrow 2^{3/4} \theta_0$

例 关在盒子里的分子

一维自由运动, 缓慢改变盒子的宽度 l , 绝热不变量为

$$\oint m v dx = m v \cdot 2l \propto \sqrt{E} l$$

三维运动

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

即理想气体¹⁰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

¹⁰ 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。

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

一致。

理想气体压强的绝热变化

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

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

绝热不变量在多个学科中有应用。例如考虑带电粒子沿着磁力线的螺旋运动，在垂直于磁力线的平面内，粒子的磁通（轨道面积乘以磁场强度）不变，利用这一绝热不变量可设计磁透镜。磁透镜被用来聚焦托克马克装置中等离子体，汇聚粒子加速器中的束流。绝热不变量还被用于控制温飘等环境因素对系统的影响。

量子力学中的绝热不变量 Berry 相位

八、 经典力学与量子力学的关系*

1. 从波动光学推导几何光学

在各向同性非均匀介质中，由麦克斯韦方程可得（M. Born 《光学原理》），电磁波满足

$$\nabla^2 E - \frac{\mu\epsilon}{c^2} E + \nabla \ln \mu \times \nabla E + \nabla(E \cdot \nabla \ln \epsilon) = 0$$

$$\nabla^2 \vec{H} - \frac{\mu\epsilon}{c^2} \vec{H} + \nabla \ln \epsilon \times \nabla \vec{H} + \nabla(\vec{H} \cdot \nabla \ln \mu) = 0$$

当介质比较均匀时，满足

$$\nabla \ln \mu \ll k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}, \quad \nabla \ln \epsilon \ll \frac{2\pi}{\lambda_0}$$

其中 λ_0 是近似单色波的平均波长（短波近似），方程可化简为

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{v^2} \psi = 0, \quad v \stackrel{\text{def}}{=} c / \sqrt{\mu\epsilon}$$

方程对电磁场的每个分量都成立。

采用自然单位制，

$$\nabla^2 \psi - n^2 \psi = 0, \quad n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c}{v}$$

机械波和声波有类似的波动方程。

对单色波（非单色波有色散，光线弥散），令复波函数为

$$\psi \equiv e^{-i\omega t} A(x) e^{ik_0 W(x)} = A(x) e^{ik_0 S(t, x)}$$

这里记

$$S(t, x) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\omega}{k_0} t + W(x) = -ct + W(x)$$

对平面波，

$$W = \frac{1}{k_0} k \cdot x, \quad S = \frac{1}{k_0} (-\omega t + k \cdot x)$$

计算得

$$\nabla \psi = e^{ik_0 S} \nabla A + A e^{ik_0 S} i k_0 \nabla S$$

$$\nabla^2 \psi = e^{ik_0 S} \nabla^2 A + e^{ik_0 S} i k_0 \nabla S \cdot \nabla A + e^{ik_0 S} i k_0 \nabla A \cdot \nabla S + A e^{ik_0 S} i k_0 \nabla S^2 + A e^{ik_0 S} i k_0 \nabla^2 S$$

$$= e^{ik_0 S} \nabla^2 A + 2i k_0 e^{ik_0 S} \nabla A \cdot \nabla S + A e^{ik_0 S} i k_0 \nabla S^2 + i k_0 A e^{ik_0 S} \nabla^2 S$$

$$\psi = i k_0 A e^{ik_0 S} S$$

$$\psi = i k_0^2 A e^{ik_0 S} S^2 + i k_0 A e^{ik_0 S} S$$

代入波动方程得

$$e^{ik_0 S} \nabla^2 A + 2i k_0 e^{ik_0 S} \nabla A \cdot \nabla S + A e^{ik_0 S} i k_0 \nabla S^2 + i k_0 A e^{ik_0 S} \nabla^2 S$$

$$= n^2 i k_0^2 A e^{ik_0 S} S^2 + n^2 i k_0 A e^{ik_0 S} S$$

$$\nabla^2 A + 2i k_0 \nabla A \cdot \nabla S + A i k_0 \nabla S^2 + i k_0 A \nabla^2 S = n^2 i k_0^2 A S^2 + n^2 i k_0 A S$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \nabla^2 A + [n^2 S^2 - \nabla S^2] k_0^2 A = 0 \\ 2\nabla A \cdot \nabla S + A \nabla^2 S = n^2 A S \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} n^2 S^2 - \nabla S^2 + \frac{1}{k_0^2} \frac{\nabla^2 A}{A} = 0 \\ n^2 S - \nabla^2 S - 2\nabla S \cdot \nabla \ln A = 0 \end{cases}$$

短波极限下，

$$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} \rightarrow +\infty, \quad \frac{1}{k_0^2} \frac{\nabla^2 A}{A} \rightarrow 0$$

实部方程是哈密顿-雅可比方程（程函方程），

$$n^2 S^2 - \nabla S^2 = 0$$

特征函数满足

$$\begin{aligned} \omega^2 n^2 - k_0^2 \nabla W^2 &= 0 \\ \nabla W^2 &= \frac{\omega^2 n^2}{k_0^2} \end{aligned}$$

与前节几何光学的哈密顿特征方程相比，只相差常数因子

$$\frac{\omega^2}{k_0^2} = c^2$$

可重定义特征函数 W 吸收这个因子。

按定义， W 是波的相位（正比），相同 W 的点构成等相面。相位传播的方向即光线的方向，是等相面的法向，

$$\tau = \frac{\nabla W}{|\nabla W|} = \frac{1}{n} \nabla W$$

把法向量相连得到几何光线

$$x = x(s), \quad ds^2 \stackrel{\text{def}}{=} dx^2 + dy^2 + dz^2$$

光线方向是

$$\tau = \frac{dx}{ds}$$

求导，

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} n\tau &= \frac{d}{ds} \nabla W = \left(\frac{dx}{ds} \cdot \frac{d}{dx} \right) \nabla W = \tau \cdot \nabla \nabla W = \frac{1}{n} \nabla W \cdot \nabla \nabla W \\ \frac{d}{ds} n\tau_i &= \frac{1}{n} (\partial_j W) (\partial_j \partial_i W) = \frac{1}{2n} \partial_i [(\partial_j W) (\partial_j W)] \\ \frac{d}{ds} n\tau &= \frac{1}{2n} \nabla \nabla W^2 = \frac{1}{2n} \nabla n^2 = \nabla n \end{aligned}$$

得到射线方程

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{dx}{ds} \right) = \nabla n$$

射线方程是光线追踪的基础。

2. 光学与力学的类比

几何光学与经典力学系统一样，满足哈密顿特征方程。

几何光学有对应的波动光学，那么经典力学是否也有对应的波动力学？哈密顿曾提出这一问题，但因当时的物理学没有这个需求而未深究。

1900年普朗克为了解释黑体辐射，假设原子的能量是量子化的，只能取最小单位 $h\nu$ 的整数倍，这里

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$$

是普朗克常数， ν 是原子振动频率。1905年爱因斯坦为了解释光电效应提出光子说，认为光波的是由光子组成，光子的能量和动量满足 Planck-Einstein 关系

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad p = \hbar k$$

其中 $\hbar \stackrel{\text{def}}{=} h/2\pi$ 是约化普朗克常数。受此启发，德布罗意认为任何粒子都是波动，在1923年提出物质波的概念，并用驻波条件推导出玻尔的角动量量子化假设。不久之后，Bell实验室的戴维逊观测到了电子在镍单晶上的衍射图样。1926年初，德拜建议薛定谔去寻找物质波的波动方程。

与光学类比，几何光学满足程函方程

$$n^2 S^2 - \nabla S^2 = 0$$

波动光学满足波动方程

$$n^2 \psi - \nabla^2 \psi = 0$$

我们只需要把非线性的程函方程线性化，

$$\psi = A e^{ik_0 S}$$

就能对应为波动方程，程函方程是波动方程的短波极限。

经典力学可类比于几何光学，哈密顿-雅可比方程是

$$\frac{\partial}{\partial t} S + H(t, x, \nabla S) = 0$$

哈密顿主函数 $S(t, x)$ 是波函数的相因子，

$$\psi(t, x) = A e^{iS/\hbar}$$

对应的线性波动方程（薛定谔方程）为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H(t, x, -i\hbar \nabla \psi)$$

3. 从量子力学推导哈密顿-雅可比方程

令单粒子波函数

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

代入薛定谔方程

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

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

分开实部和虚部，得两个方程，

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

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。

当 $\hbar \rightarrow 0$ 时（本质上是短波近似），第一个方程成为哈密顿-雅可比方程

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

第二个方程即

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \frac{1}{m} \nabla S \right) &= 0 \\ j \stackrel{\text{def}}{=} \rho \frac{1}{m} \nabla S, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j &= 0 \end{aligned}$$

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