Mechanism

Noir

June 2025

目录

基本概念

质点

. 给定粒子，位矢 $\boldsymbol{r}$，那么其速度为

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \tag{1}$$

动量的定义是

$$\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$$

而牛顿第二定律

$$\boldsymbol{F}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}$$

加速度

$$\boldsymbol{a}=\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}$$

物理学中守恒律是重要的，我们可以通过??得到第一个守恒律：动量守恒定律：

Theorem 1. 若外力 $\boldsymbol{F}=0$，那么 $\dot{\boldsymbol{p}}=0$ 即动量守恒。

点粒子关于某点 O 的角动量，定义为

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 是从点 O 出发确定的位矢，同样可以定义力矩如下

$$\boldsymbol{N}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}$$

不难看出

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{L}}&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\\&=\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{p}+\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}\\&=\boldsymbol{N}\end{aligned}$$

于是我们可以得到第二个守恒定律

Theorem 2. 当点粒子关于某点的外力矩为零时，粒子的角动量 $\boldsymbol{L}$ 守恒。

对于粒子所受外力对其所做的功，我们有 *(不变质量物体)*

$$W_{12}=\int_1^2\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=m\int_1^2\dot{\boldsymbol{v}}\mathrm{d}\boldsymbol{s}=m\int_1^2\boldsymbol{v}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=\frac{1}{2}mv_2^2-\frac{1}{2}mv_1^2$$

不妨令 $\frac{1}{2}mv^2$ 为点粒子的动能，用 T 表示，如果力是保守的，那么所做的功也可以表示为 V_1-V_2，即得

$$V_1-V_2=T_2-T_1\Rightarrow T_1+V_1=T_2+V_2$$

即得第三个守恒律

Theorem 3. 如果粒子所受的力是保守力，那么能量 $(T+V)$ 守恒。

质点系

. 现在考虑质点系的情况。对于质点系中的每一个质点，其受到的力可以被区分为外力和内力，我们将第 i 个质点所受到的外力记为 $\boldsymbol{F}_i^{(e)}$，将第 j 个质点施加给 i 的力记为 $\boldsymbol{F}_{ji}$，自然地 $\boldsymbol{F}_{ii}=0$，那么对于第 i 个质点，其运动方程为

$$\boldsymbol{F}_i^{(e)}+\sum_{j\neq i}\boldsymbol{F}_{ji}=\dot{\boldsymbol{p}}_i$$

将上面这个式子对 i 求和，定义系统的总动量为 $\sum_i \dot{\boldsymbol{p}}_i$，那么我们有

$$\sum_i\boldsymbol{F}_i^{(e)}+\sum_i\sum_{j\neq i}\boldsymbol{F}_{ji}=\dot{\boldsymbol{p}}$$

注意到 $\boldsymbol{F}_{ji}=-\boldsymbol{F}_{ij}$，这是牛顿第三定律的弱形式，即只要求作用力和反作用力大小相等，方向相反，没有其必须作用在一条直线上的限制，于是可知

$$\sum_i\boldsymbol{F}_i^{(e)}=\dot{\boldsymbol{p}}$$

即系统所受的合外力改变系统总动量，与内力无关。我们可以具体算一算总动量的形式

$$\boldsymbol{p}=\sum_i\boldsymbol{p}_i=\sum_i m_i\boldsymbol{v}_i$$

我们不妨令质心位矢为

$$\boldsymbol{R}=\frac{\sum m_i\boldsymbol{r}_i}{\sum m_i}=\frac{\sum m_i\boldsymbol{r}_i}{M}$$

那么我们可知

$$\boldsymbol{p}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(M\boldsymbol{R})=M\dot{R}$$

也就是说，质点系的总动量，相当于全部质量集中于质心处时质心的动量。于是我们可知质点系的动量守恒定律

Theorem 4. 当质点系所受外力为零时，质点系的总动量守恒。

接下来是质点系的角动量守恒定律，考虑到 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，那么质点系的总角动量为

$$\boldsymbol{L}=\sum_i\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{p}_i$$

对单个质点写出角动量定律，即得

$$\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_i^{(e)}+\sum_{j\neq i}\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_{ji}=\dot{\boldsymbol{L}}_i$$

对其求和，可知

$$\sum_i\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_i^{(e)}+\sum_i\sum_{j\neq i}\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_{ji}=\dot{\boldsymbol{L}}$$

对于第二项求和，注意到在承认牛顿第三定律的强形式成立的情况下，即作用力和反作用力都是有心力，作用在同一条直线上，那么可知

$$(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j) \times \boldsymbol{F}_{ji} = 0$$

于是可知

$$\sum_i \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i^{(e)} = \dot{\boldsymbol{L}}$$

即合外力矩改变质点系的总角动量，与内力矩无关，于是得到质点系的角动量守恒定律

Theorem 5. 如果质点系关于某点的外力矩为零，那么质点系关于此点的角动量守恒。

现在我们来推导一下质点系角动量的具体形式，令参考点为 O，质心关于 O 的位矢是 $\boldsymbol{R}$，质点系中某质点关于 O 点的位矢是 $\boldsymbol{r}_i$，质点关于质心的位矢是 $\boldsymbol{r}_i'$，于是可得

$$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{R} + \boldsymbol{r}_i'$$

微分则知速度关系为 $\boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{V} + \boldsymbol{v}_i'$，这些速度的含义都显然，略去不表。那么系统的总角动量可以表示为

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L} &= \sum_i \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{p}_i \\
&= \left(\sum_i m_i \boldsymbol{r}_i'\right) \times \boldsymbol{V} + \left(\sum_i m_i\right) \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{V} + \sum_i m_i \boldsymbol{r}_i' \times \boldsymbol{v}_i' + \sum_i m_i \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{v}_i'
\end{aligned}$$

可以看出，第一项中 $\sum\limits_i m_i \boldsymbol{r}_i' = 0$，第二项就是质量全部集中在质心处时质心关于参考点 O 的角动量，第三项就是质点关于质心的角动量，第四项可以作变换

$$\sum_i m_i \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{v}_i' = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_i m_i \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{r}_i'\right) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_i m_i \boldsymbol{r}_i' \times \boldsymbol{R}\right) = 0$$

于是可知

Theorem 6. 质点系关于点 O 的总角动量等于全部质量集中于质心处时的质心关于 O 的角动量与质点关于质心的角动量之和。

值得注意的是，质点系的动量守恒定律和角动量守恒定律成立的条件对牛顿第三定律要求不同，前者要求弱形式，后者要求强形式，在受运动电荷所施加的力时，很容易破坏牛顿第三定律的强形式，此时角动量守恒定律不成立，但是可以构造其他满足要求的角动量，例如在运动电荷情形，一并考虑粒子机械运动的动量和角动量与电磁场的动量和角动量，即可使动量和角动量重新守恒。

下面是能量守恒定律的推导。太长不推，直接结论

Theorem 7. 当外力和内力都是保守力时，质点系的能量守恒。

Theorem 8. 质点系的动能等于质心的动能与质点关于质心的动能之和。

约束

. 似乎所有的力学问题可以通过列出牛顿第二定律来解决，但这是不现实的。考虑到有约束的情况，等价于施加了一个未知的约束力，此时牛顿运动方程的解变得异常困难甚至无法解出。此处我们先讨论各种约束的情形，然后考虑如何在约束下求解运动方程。

如果系统的约束可以表达为质点位矢和时间的函数，即

$$f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n,t)=0$$

的形式，那么称此约束为完整 (holonomic) 约束，例如刚体中的约束就是一个完整约束，即 $|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|^2=c_{ij}^2$，不能表达为上述形式的约束被称为非完整约束。约束可以进一步按是否显含时间来分类，显含时间的约束被称为非定常约束，不显含时间的约束被称为定常约束。

关于定常约束与非定常约束，有一点值得注意。并非是随时间变化的约束一定是非定常约束，关键是能否被写成不显含 t 的形式。例如一个珠子在一条杆上运动，若由于珠子与杆的相互作用，导致杆在珠子运动时也开始运动，这种由于内部动力学因素而导致的约束运动，不是非定常约束，设珠子坐标为 $\boldsymbol{r}$，杆的位形为 $\boldsymbol{q}$，那么约束就可以表示为 $f(\boldsymbol{r}(t),\boldsymbol{q}(t))$ 的隐式形式，所以这是定常约束。相反，如果杆是在外力作用下做运动，例如旋转，这种情况下的约束就是非定常约束。

有约束的运动面临两点困难，其一是坐标耦合，其二是约束力未知。可以通过引入广义坐标来解决坐标耦合的问题。例如有 N 个质点的质点系，那么其自由度是 $3N$，先考虑只含完整约束的情形，若存在 k 个完整约束，那么质点系实际上的自由度为 $3N-k$，选定 $3N-k$ 个广义坐标 $q_1,q_2,\cdots,q_{3N-k}$，可以将原有的 N 个位矢表达为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_1&=\boldsymbol{r}_1(q_1,q_2,\cdots,q_{3N-k},t)\\&\cdots\\\boldsymbol{r}_N&=\boldsymbol{r}_N(q_1,q_2,\cdots,q_{3N-k},t)\end{aligned}$$

可以看做是对原位矢的参数化，达到了将其解耦的目的。

接下来考虑非完整约束的情况。可能出现速度即更高阶项的约束关系，也可能是以不等式形式出现的约束关系。最经典的例子莫过于一个圆盘在平面上做纯滚动。

达朗贝尔原理与拉格朗日方程

. 现在我们的目的是消去约束力的作用。我们将采取由 Bernoulli 提出，达朗贝尔完善的方法。首先定义虚位移如下

Definition 1. 虚位移是指在系统此刻的位形下满足约束条件的无穷小位移。

虚位移不同于一般的位移，虚位移的发生不需要时间，也就是说，虚位移是对某时刻 t 系统的位形的等时变分。举个例子，物体被限制在一个平面上移动，那么虚位移必然是沿着平面的切向，如果这个平面处于运动之中，那么虚位移的朝向就是该平面在该瞬间的切向。考虑质点系中的一个质点，有

$$\boldsymbol{F}_i=\dot{\boldsymbol{p}}_i\Rightarrow\boldsymbol{F}_i-\dot{\boldsymbol{p}}_i=0$$

那么对于虚位移 $\delta\boldsymbol{r}_i$，容易得到

$$\sum_i(\boldsymbol{F}_i-\dot{\boldsymbol{p}}_i)\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0$$

我们将外力 $\boldsymbol{F}_i$ 区分为主动力 $\boldsymbol{F}_i^{(a)}$ 和约束力 $\mathbf{f}$，那么可以将上式写为

$$\sum_i(\boldsymbol{F}_i^{(a)}-\dot{\boldsymbol{p}}_i)\cdot\delta\boldsymbol{r}_i+\sum_i\mathbf{f}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0$$

现在，我们做出第一个限制，即约束力的虚功为零。这个要求是合理的，在大多数情况下约束力和虚位移是垂直的，自然有虚功为零，而例外情况在现代物理的范畴下不是关注的重点。于是我们就得到了达朗贝尔的虚功原理

$$\sum_i(\boldsymbol{F}_i^{(a)}-\dot{\boldsymbol{p}}_i)\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0$$

正如有约束体系的位矢不一定是独立的，虚位移也不一定是独立的，即虚位移不是线性无关的，那么就无法得到 $\boldsymbol{F}_i^{(a)}=\dot{\boldsymbol{p}}_i$ 的结论，而我们期望得到一个非求和式，且与虚位移无关。这时就轮到广义坐标发挥作用了，假设该体系是一个具有 n 个自由度的体系，有关系

$$\boldsymbol{r}_k=\boldsymbol{r}_k(q_1,q_2,\cdots,q_n,t)$$

那么速度的表达式就是

$$\boldsymbol{v}_k=\sum_{i=1}^n\frac{\partial\boldsymbol{r}_k}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial\boldsymbol{r}_k}{\partial t}$$

关于虚位移，同样由链式法则可知

$$\delta\boldsymbol{r}_i=\sum_{j=1}^n\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}\delta q_j$$

那么对于虚功原理中的两项，可知

$$\sum_i\boldsymbol{F}_i^{(a)}\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=\sum_i\sum_{j=1}^n\boldsymbol{F}_i^{(a)}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}\delta q_j=\sum_{j=1}^nQ_j\delta q_j$$

式中的 Q_j 被称为广义力，定义为

$$Q_j=\sum_i\boldsymbol{F}_i^{(a)}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}$$

继续考虑第二项

$$\begin{aligned}\sum_i\dot{\boldsymbol{p}}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i&=\sum_i\sum_{j=1}^nm_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}\delta q_j\\&=\sum_i\sum_{j=1}^n\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}\right)-m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}\right)\right]\delta q_j\end{aligned}$$

对于第二项可知

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}\right)=\frac{\partial\dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_j}=\sum_k\frac{\partial^2\boldsymbol{r}_i}{\partial q_k\partial q_j}\dot{q}_j+\frac{\partial^2\boldsymbol{r}_i}{\partial t\partial q_j}$$

而我们又注意到

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i=\sum_{k=1}^n\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_k}\dot{q}_k+\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial t}$$

$$\frac{\partial\dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial\dot{q}_j}=\sum_{k=1}^n\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_k}\frac{\partial\dot{q}_k}{\partial\dot{q}_j}=\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}$$

在第二式的推导中，因为 $\partial_{q_k}\boldsymbol{r}_i$ 是广义坐标 q 和时间的函数，不显含 $\dot{q}$，所以对其求偏导为常数，于是我们得到了一重要关系式

$$\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}=\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_j}$$

于是可知

$$\begin{aligned}\sum_i \dot{\boldsymbol{p}}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i &= \sum_i\sum_{j=1}^{n}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{v}_i}{\partial \dot{q}_j}\right)-m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\left(\frac{\partial \boldsymbol{v}_i}{\partial q_j}\right)\right]\delta q_j\\ &= \sum_i\sum_{j=1}^{n}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_j}\left(\frac{1}{2}m_iv_i^2\right)-\frac{\partial}{\partial q_j}\left(\frac{1}{2}m_iv_i^2\right)\right]\delta q_j\end{aligned}$$

记 $\dfrac{1}{2}m_iv_i^2=T$ 为动能，那么虚功原理的展开式可以整理为

$$\sum_{j=1}^{n}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j}\right)-\frac{\partial T}{\partial q_j}-Q_j\right]\delta q_j=0$$

到现在为止，我们认为约束是完整的，在这种情况下，δq_j 是独立的，是线性无关的，那么这个等式要等于零，只可能

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j}\right)-\frac{\partial T}{\partial q_j}=Q_j$$

现在一样假设外力能够被写成某种势函数的负梯度，即

$$Q_j=\sum_i \boldsymbol{F}_i^{(a)}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}=\sum_i -\nabla V_i^{(a)}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_j}=-\frac{\partial V}{\partial q_j}$$

这里可以不必是一个保守系统，保守系统要求势能不能与时间显式相关，而此处我们只规定 V 与 $\dot{q}_j$ 不显式相关，那么我们可以得到熟悉的拉格朗日方程如下

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_j}=0 \tag{2}$$

式中 $L=T-V$ 被称为拉格朗日量，一个体系的拉格朗日量并不唯一，若有函数 $F(q,t)$，可以验证

$$L'=L+\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}$$

依然是该体系的一个拉格朗日量。

速度相关势与耗散函数

. 即使广义力并不能被表示成一个与广义速度无关的势函数形式，只要能够表示成

$$Q_j=-\frac{\partial U}{\partial q_j}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j}\right)$$

令拉格朗日量为 $L=T-U$，那么依然有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_j}=0$$

这里举个例子，在电动力学中，我们有一个带电量为 q，速度为 $\boldsymbol{v}$，质量为 m 的粒子，在一无电荷无电流的区域内运动，外加电场强度 $\boldsymbol{E}$，磁感应强度为 $\boldsymbol{B}$，我们知道电场和磁场强度可以通过一个标势 $\phi(x,y,z,t)$ 和矢势 $\boldsymbol{A}(x,y,z,t)$ 表示，即

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$$
$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$$

现在速度相关势为

$$U = q\phi - q\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v}$$

那么这个体系的拉格朗日量为

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - q\phi + q\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v}$$

可以列出一个方向上的拉格朗日方程，以 x 方向为例

Example 1. 这里来详细推导这个拉格朗日方程，首先最重要的一点是认识到拉格朗日函数是一个以 $q,\dot{q},t$ 为变量的函数，在这种情况下即为 $L = L(x,y,z,\dot{x},\dot{y},\dot{z},t)$，现在来计算

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -q\frac{\partial \phi}{\partial x} + q\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial x}\cdot\boldsymbol{v}$$

以及

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + q\boldsymbol{A}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + q\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{x}} = m\dot{x} + qA_x$$

再对其求时间的全导数

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = m\ddot{x} + q\frac{\mathrm{d}A_x}{\mathrm{d}t}$$

整理就得到 x 方向上的拉格朗日方程为

$$m\ddot{x} = q\left(v_x\frac{\partial A_x}{\partial x} + v_y\frac{\partial A_y}{\partial x} + v_z\frac{\partial A_z}{\partial x}\right) - q\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\mathrm{d}A_x}{\mathrm{d}t}\right)$$

不难看出

$$m\ddot{x} = qE_x + q(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})_x$$

同理计算其他方向的拉格朗日方程，就可以看出洛伦兹力公式

$$\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$$

现在讨论势函数也不能表达成上述表示的情况，一般是发生在体系有摩擦力的情况，简单来说，我们可以把广义力中的保守部分表达成势函数的形式，而非保守部分保持不变，这样便得到了如下的拉格朗日方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = Q_j$$

右侧的 Q_j 就是广义力中的非保守部分，但是考虑到摩擦力一般都可以表示成速度的线性函数，例如 $f_x = -k_x\dot{x}$，于是我们引入耗散函数

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2}(k_x\dot{x}^2 + k_y\dot{y}^2 + k_z\dot{z}^2)$$

也即

$$f_x = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{x}}$$

或者可以更紧凑的写为

$$\boldsymbol{F}_f = -\nabla_v \mathcal{F}$$

那么对于摩擦力这一项所对应的广义力，我们就有

$$Q_f = -\sum \nabla_v \mathcal{F} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_j} = -\sum \nabla_v \mathcal{F} \cdot \frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_j} = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{q}_j}$$

那么拉格朗日方程变为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{q}_j} = 0$$

只要预先确定了拉格朗日量和耗散函数的形式，这样的系统就是可解的。

变分法初步

. 在上一章节中，我们采用了分析一个又一个瞬态的方法，并结合虚功原理，推导出了拉格朗日方程。但是更常用的方法是分析这个运动整体，例如粒子从 A 走到 B，通过对运动全局的分析来确定运动方程是现代物理中更常见的方法，这就是最小作用量原理。

我们需要首先明确“在 t_1 到 t_2 之间的运动”到底是怎么回事，一个自由度为 n 的系统，其全部信息被包含在 n 个广义坐标 $q_1, \cdots, q_n$ 之中，在某个给定的时间 t，$(q_1, \cdots, q_n)$ 就是一个由广义坐标张成的 $n-$ 维笛卡尔坐标系中的一个点 (广义坐标是正交的)，在 t_1, t_2 之间的运动就是指这样的一条以时间作为参数的曲线，这个 $n-$ 维笛卡尔空间被称为构型空间。

我们称一个物理系统是 monogenic 的，如果这些力学的力可以被一个标势所导出，这个标势可以是坐标，速度和时间的函数。特别地，如果这个标势只显式地与位置坐标相关，那么这个系统是保守的。

Principle 1. 从 t_1 到 t_2 的实际运动路径是使得线积分

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L \mathrm{d}t \tag{3}$$

取得极值的路径。

这样做的优点主要来自于线积分对广义坐标的不变性，即变换广义坐标，线积分的值是不变的。

变分的具体技术

. 考虑一个函数

$$F(x, y, \dot{y}) = \int_{x_1}^{x_2} f(x, y, \dot{y}) \mathrm{d}x$$

其中流数记号 $\dot{y}$ 表示 y 对 x 的导数，且对于函数有 $y(x_1)=y_1, y(x_2)=y_2$，那么作变分

$$\begin{aligned}\delta F(x,y,\dot{y}) &= \delta\int_{x_1}^{x_2} f(x,y,\dot{y})\mathrm{d}x \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \delta f(x,y,\dot{y})\mathrm{d}x \\ &= \int_{x_1}^{x_2}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\delta y+\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\delta\dot{y}\right)\mathrm{d}x\end{aligned}$$

因为变分和微分是可对易的，则有

$$\delta\dot{y}\mathrm{d}x=\delta\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\delta y)\mathrm{d}x=\mathrm{d}(\delta y)$$

那么

$$\begin{aligned}\delta F(x,y,\dot{y}) &= \int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial f}{\partial y}\delta y\mathrm{d}x+\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\mathrm{d}(\delta y) \\ &= \int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial f}{\partial y}\delta y\mathrm{d}x+\left.\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\delta y\right|_{x_1}^{x_2}-\int_{x_1}^{x_2}\delta y\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\right)\mathrm{d}x \\ &= \int_{x_1}^{x_2}\delta y\mathrm{d}x\left[\frac{\partial f}{\partial y}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\right)\right]\end{aligned}$$

于是得到第一类欧拉-拉格朗日方程

$$\frac{\partial f}{\partial y}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\right)=0$$

有时候使用第二类欧拉-拉格朗日方程更方便，考虑 f 对 x 的全微分，那么

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}=\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial y}\dot{y}+\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\ddot{y}$$

$\ddot{y}$ 是不方便考虑的，那么考虑

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\dot{y}\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\right)\dot{y}+\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\ddot{y}$$

那么得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} &= \frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial y}\dot{y}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\dot{y}\right)-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\right)\dot{y} \\ &= \frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\dot{y}\right)\end{aligned}$$

如果 f 中不显含 x，那么就得到了第二类欧拉-拉格朗日方程

$$f-\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}\dot{y}=C$$

Example 2. 最速降线问题。

最速降线的背景已经非常熟悉，这里直接开始计算

$$t=\int_{x_1}^{x_2}\frac{\sqrt{1+\dot{y}^2}}{\sqrt{2gy}}\mathrm{d}x$$

于是 $f(y,\dot{y})=\dfrac{\sqrt{1+\dot{y}^2}}{\sqrt{2gy}}$ 与 x 不显式相关，于是用第二类欧拉-拉格朗日方程可知

$$\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}=\frac{\dot{y}}{\sqrt{2gy}\sqrt{1+\dot{y}^2}}$$

代入方程可知

$$y(1+\dot{y}^2)=C$$

这个方程可以被分离变量为

$$\sqrt{\frac{y}{C-y}}\mathrm{d}y=\mathrm{d}x$$

常用的技巧是参数方程法，可以令 $y=C\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos\phi\right)$，可以解出

$$x=\frac{C}{2}\left(\phi+\sin\phi\right)$$

记 $a=C/2$，那么最速降线就是

$$\begin{cases} x=a(\phi+\sin\phi) \\ y=a(1-\cos\phi) \end{cases}$$

即摆线的一部分。

推导拉格朗日方程

. 略.

有约束系统

. 哈密顿原理可以解决完整约束系统甚至某些不完整约束系统的问题。在之前我们的推导中，对于某受完整约束的自由度为 n 的系统，我们总可以选取出 n 个相互独立的广义坐标，使得在变分后最后一步中 δq_i 相互独立，得到最终的拉格朗日方程。但是如果不选取 n 个独立的广义坐标，假设有 n 个变量和 m 个完整约束，每一个完整约束具有形式

$$f_\alpha=f_\alpha(q_1,\cdots,q_n,t)$$

注意到在这 n 个广义坐标中，m 个约束的信息并没有被包含其中，也就是说这 n 个变分 δq_i 并不独立，无法得到其每个系数都为零的结论，为解决此问题，我们采用拉格朗日乘数法。

将作用量改写成

$$I=\int_1^2\left(L+\sum_{\alpha=1}^{m}\lambda_\alpha f_\alpha\right)\mathrm{d}t$$

将 q_k,λ_α 视作独立变元分别作变分，易知对 λ_α 的变分就是约束方程，对 q_k 的变分为

$$\delta I=\int_1^2\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_k}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_k}+\sum_{\alpha=1}^{m}\lambda_\alpha\frac{\partial f_\alpha}{\partial q_k}\right]\delta q_k\mathrm{d}t$$

我们要如何解决 δq_k 之间不独立的问题呢？指定 λ_α，使得其对于前 m 个方程，不论 δq_k 的取值为何，都有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_k}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_k}+\sum_{\alpha=1}^{m}\lambda_\alpha\frac{\partial f_\alpha}{\partial q_k}=0$$

而对于后 $n-m$ 个方程，因为约束已经在前 m 个方程中消去，也可以得到上述方程，于是 n 个上述方程和 m 个约束方程结合起来就可以解出整个体系的运动。

关于 λ_α 的物理意义，对上面这个方程进行移项

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_k}=Q_k=-\sum_{\alpha=1}^{m}\lambda_\alpha\frac{\partial f_\alpha}{\partial q_k}$$

λ_α 可以看做是一个广义力的“强度量”，决定其方向。

Example 3. 一个半球半径为 a，底面置于地面，一个放置于顶的小球受到微小扰动开始下落，试问这个小球何时离开球面？牛顿力学也可以很轻松的解决这个问题，但我们采用拉格朗日乘数法。建立坐标系，使得 z 轴沿着垂直于底面的方向，xy 平面为底面，且小球的初速度位于 Oxz 平面，使用朴素笛卡尔坐标，那么拉格朗日量可以被写为

$$L=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{z}^2)-mgz$$

且在球面上时的约束关系为 $\sqrt{x^2+z^2}-a=0$，换元 $x=a\sin\theta, z=a\cos\theta$，那么

非力学系统

. 哈密顿的原理的优点还体现于可以拓展至非力学体系，下面以电路为例说明。

考虑 RL 串联电路，电源电压为 V，取电荷 q 作为动力学参量，电感类似于动能项，因为其依赖于电荷的变化；电阻类似于耗散项，电源类似于势能项，写出

$$T=\frac{1}{2}L\dot{q}^2,\quad \mathcal{F}=\frac{1}{2}R\dot{q}^2,\quad U=-qV$$

所以由带耗散函数的拉格朗日方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)-\frac{\partial L}{\partial q}+\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{q}}=0$$

可知

$$L\ddot{q}+R\dot{q}=V$$

解出这个方程就知道系统的动力学特性。对于带有电容的电路，电容相当于一个势能项，为 $V=\dfrac{q^2}{2C}$，一般地，电路的拉格朗日函数为

$$L=\frac{1}{2}\sum_j L_j\dot{q}_j^2+\sum_{j,k}M_{jk}\dot{q}_j\dot{q}_k-\sum_j\frac{q_j^2}{2C_j}+\sum_j e_j(t)q_j$$

耗散函数为

$$\mathcal{F}=\frac{1}{2}\sum_j R_j\dot{q}_j^2$$

守恒律与对称性

诺特定理

. 诺特定理在其他的笔记中已经证明过了，这里给出另一种证明方法。

首先需要说明的是对称性。什么是对称性？简单的说，广义坐标 $q(t)$ 在变换 $\bar{q}(t)=F(q(t))$ 下保持作用量不变，即

$$S[q(t)]=S[\bar{q}(t)]$$

即对称性就是作用量的不变性。对称性有离散和连续之分，离散对称性如镜面对称，是只含有限个不同操作的对称性，含无穷多个不同操作的对称性被称为连续对称性，如旋转对称性。诺特定理陈述如下

Theorem 9. 每一个连续对称性都对应一个守恒量。

为简化考虑，在以下的证明中认为对称操作不作用在时间上。

• 证明：假设系统具有某连续对称性，记作 $G(\theta)$，θ 是对称操作所依赖的参数，$\theta=0$ 时意味着对称操作尚未进行，假设进行了 $G(\epsilon)$ 的无穷小对称操作，其中 ϵ 是某无穷小量，那么 $\bar{q}(t)$ 可以表示为

$$\bar{q}(t)=q(t)+\epsilon F(q(t))$$

其中 $F(q(t))$ 是某个依赖于 $q(t)$ 具体形式的函数，那么作用的变换可以写为

$$\delta S=\int_1^2 L(\bar{q},\dot{\bar{q}},t)\mathrm{d}t-\int_1^2 L(q,\dot{q},t)\mathrm{d}t$$

下面是本证明最重要的一个技巧，不妨将 ϵ 看做某个时间的函数 $\epsilon(t)$，函数值为无穷小量，且在变分的两端时间上有 $\epsilon(1)=\epsilon(2)=0$，于是现在的变换形式为

$$\begin{aligned}\bar{q}(t)&=q(t)+\epsilon(t)F(q(t))\\ \delta q&=\epsilon(t)F(q(t))\end{aligned}$$

但是现在 $\epsilon(t)$ 失去了作为对称操作参数的物理意义，所以这个并不是一个对称变换操作，不能保持作用量不变，但是当 $\epsilon(t)$ 变成一个常数的时候，作用量一定会变成零，于是我们考虑

$$\delta S=\int_1^2 L(\bar{q},\dot{\bar{q}},t)-L(q,\dot{q},t)\mathrm{d}t=\int_1^2 Q(q,\dot{q},t)\dot{\epsilon}(t)\mathrm{d}t$$

解释一下为什么作用量的变分一定会具有右边的形式，有以下几点原因：第一，作用量是某个函数对时间积分的形式，故作用量的变分也一定会具有相同形式；第二：拉格朗日量中只有 q 的一阶导数，故在作用量的变分中至多只有 ϵ 的一阶导数；第三，如果在右边含有 $\epsilon(t)$，那么在保留到一阶项的情况下，当 $\epsilon(t)$ 取常数时将不能使作用量的变分为零。综上所述，作用量具有上式右边的形式。

因为 $q(t)$ 是任意路径，δS 不一定为零，现在取 $q(t)$ 为真实路径，其必有 $\delta S=0$，利用分部积分

$$\delta S=\int_1^2 Q(q,\dot{q},t)\dot{\epsilon}(t)\mathrm{d}t=\int_1^2 Q(q,\dot{q},t)\mathrm{d}(\epsilon(t))=-\int_1^2\epsilon(t)\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t=0$$

因为 $\epsilon(t)$ 退化为常数时，要满足积分式为零的条件，必然有

$$\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}=0$$

即 $Q(q,\dot{q},t)$ 就是该连续对称性所对应的守恒量。$\square$.

动量守恒

. 上面的证明过程实际上给出了从对称性构造守恒量的方法。我们考虑空间平移对称性，对于一个多粒子系统，设其拉格朗日量可以表示为 $L = L(\boldsymbol{x}_j, \dot{\boldsymbol{x}}_j)$，考虑对称变换

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{x}}_j &= \boldsymbol{x}_j + \boldsymbol{a} \\ \delta \boldsymbol{x}_j &= \boldsymbol{a}\end{aligned}$$

于是作用量的变分为

$$\delta S = \int_1^2 L(\bar{\boldsymbol{x}}_j, \dot{\bar{\boldsymbol{x}}}_j, t) - L(\boldsymbol{x}_j, \dot{\boldsymbol{x}}_j, t)\mathrm{d}t$$

不妨令 $\boldsymbol{a} = \epsilon(t)$，那么

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_1^2 L(\boldsymbol{x}_j + \epsilon(t), \dot{\boldsymbol{x}}_j + \dot{\epsilon}(t), t) - L(\boldsymbol{x}_j, \dot{\boldsymbol{x}}_j, t)\mathrm{d}t \\ &= \int_1^2 \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}_j}\epsilon(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}_j}\dot{\epsilon}(t)\mathrm{d}t\end{aligned}$$

在此情况下，作用量不变相当于拉格朗日量不变那么有

$$L(\boldsymbol{x}_j + \epsilon, \dot{\boldsymbol{x}}_j, t) - L(\boldsymbol{x}_j, \dot{\boldsymbol{x}}_j, t) = \epsilon \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}_j} = 0$$

那么可知

$$\delta S = \int_1^2 \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}_j}\dot{\epsilon}(t)\mathrm{d}t$$

于是空间平移对称性所对应的守恒量是

$$\boldsymbol{p}_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}_j}$$

角动量守恒

. 空间旋转对称性带来了角动量守恒。考虑一个单粒子系统 (推广到多粒子系统是自然的)，假设这个粒子处于一个 d 维空间中，其坐标记为 $(x^1, x^2, \cdots, x^d)$，且令 $\alpha = 1, 2, \cdots, d$。对于无穷小旋转，每一个坐标分量的变分显然应该是原坐标的线性组合，不妨记为

$$\delta x_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta} x^\beta$$

这里使用了求和约定，其中 $\epsilon_{\alpha\beta}$ 是表征无穷小旋转的一个小量，注意到旋转不会改变矢量的长度，即 $\delta(\boldsymbol{x}^2) = 0$，那么可以知道

$$0 = \delta(\boldsymbol{x}^2)/2 = \boldsymbol{x}\delta\boldsymbol{x} = x^\alpha \delta x_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta} x^\alpha x^\beta$$

因为 $x^\alpha x^\beta$ 关于指标是对称的，那么必然有 $\epsilon_{\alpha\beta} = -\epsilon_{\beta\alpha}$，否则上式不可能为零，即 $\epsilon_{\alpha\beta}$ 是一个反对称 $\begin{pmatrix}0\\2\end{pmatrix}$ 张量。这也说明了在 d 维空间中独立的旋转操作只有 $\dfrac{d(d-1)}{2}$ 种，因为自然的 $\epsilon_{\alpha\alpha} = 0$，例如在三维空间中有三种独立的旋转方式。

因为有 $\delta x_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta} x^\beta$，那么

$$\delta \dot{x}_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta} \dot{x}^\beta$$

现在将 $\epsilon_{\alpha\beta}$ 变成一个无穷小函数 $\epsilon_{\alpha\beta}(t)$，那么

$$\delta\dot{x}_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta}\dot{x}^\beta + \dot{\epsilon}_{\alpha\beta}x^\beta$$

于是作用量的变分为

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_1^2 L(x_\alpha + \epsilon_{\alpha\beta}x^\beta, \dot{x}_\alpha + \epsilon_{\alpha\beta}\dot{x}^\beta + \dot{\epsilon}_{\alpha\beta}x^\beta, t) - L(x_\alpha, \dot{x}_\alpha, t)\mathrm{d}t \\ &= \int_1^2 \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\alpha} x^\beta \dot{\epsilon}_{\alpha\beta}\mathrm{d}t\end{aligned}$$

(技巧：不含 $\dot{\epsilon}$ 直接丢掉就好了，因为要保证 ϵ 为常数时拉格朗日量不变)。整理上式

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_1^2 \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\alpha} x^\beta \dot{\epsilon}_{\alpha\beta}\mathrm{d}t = \int_1^2 p^\alpha x^\beta \dot{\epsilon}_{\alpha\beta}\mathrm{d}t = \int_1^2 p_\alpha x_\beta \dot{\epsilon}^{\alpha\beta}\mathrm{d}t \\ &= \int_1^2 -\frac{1}{2}(x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha)\dot{\epsilon}_{\alpha\beta}\mathrm{d}t\end{aligned}$$

根据前面的讨论，空间旋转对称性所带来的守恒量就是 *(忽略系数 $-1/2$)*

$$J_{\alpha\beta} = x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha$$

也就是说 d 维空间中的旋转对称性会带来 $\dfrac{d(d-1)}{2}$ 个守恒量，以三维空间为例，三个角动量就是

$$J_{12} = x_1 p_2 - x_2 p_1, \quad J_{31} = x_3 p_1 - x_1 p_3, \quad J_{23} = x_2 p_3 - x_3 p_2$$

习惯上会将这几个角动量分别称为 J_3, J_2, J_1，但是在更高维空间中的角动量只能使用 $J_{\alpha\beta}$ 表示。

能量守恒

- 能量守恒是由时间平移对称性带来的。一般来说，如果拉格朗日量中不显含时间，那么这个系统的能量就是守恒的。为说明这一点，考虑一个时间平移操作 $\bar{t} = t + a$，相当于将整个系统向过去移动了 a 的时间，导致系统的时间坐标增加了 a，现在考虑作用量 *(假定拉格朗日量不显含时间)*，因为 q 可能依赖于时间，进行时间平移操作的结果是 $\bar{q}(t) = q(\bar{t})$，那么

$$\begin{aligned}S[q(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t))\mathrm{d}t \\ S[\bar{q}(t)] &= \int_{t_1-a}^{t_2-a} L(\bar{q}(t), \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{q}(t))\mathrm{d}t \\ &= \int_{t_1}^{t_2} L(q(\bar{t}), \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{t}}q(\bar{t}))\mathrm{d}\bar{t} = S[q(t)]\end{aligned}$$

即进行时间平移不会改变系统的作用量。现在考虑无穷小的时间平移 $\bar{t} = t + \epsilon(t)$，可以知道 $\delta t = \epsilon(t)$，考虑变换后的作用量

$$\begin{aligned}S[\bar{q}(t)] &= \int \mathrm{d}t L(\bar{q}(t), \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{q}(t)) \\ &= \int \mathrm{d}\bar{t}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\bar{t}} L(q(\bar{t}), \frac{\mathrm{d}\bar{t}}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{t}}q(\bar{t})) \\ &= \int \mathrm{d}\bar{t}\frac{1}{1+\dot{\epsilon}} L(q(\bar{t}), (1+\dot{\epsilon})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{t}}q(\bar{t})) \\ &= \int \mathrm{d}t\frac{1}{1+\dot{\epsilon}} L(q(t), (1+\dot{\epsilon})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}q(t))\end{aligned}$$

在最后一步中，我们重命名 $\bar{t}$ 为 t。注意到，我们并没有区分 $\epsilon(t)$ 和 $\epsilon(\bar{t})$，因为 ϵ 本身便是一个一阶小量，而 δt 也是一个一阶小量，在保留到一阶的情况下可以忽略差异。现在对其进行泰勒展开，得到

$$\begin{aligned}S[\bar{q}(t)] &= \int \mathrm{d}t \frac{1}{1+\dot{\epsilon}}\left[L(q(t),\dot{q}(t)) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{\epsilon}\dot{q}\right] \\ &= \int \mathrm{d}t L(q(t),\dot{q}(t)) - \int \mathrm{d}t\dot{\epsilon}(t)L(q(t),\dot{q}(t)) + \int \mathrm{d}t\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{q}\dot{\epsilon}\end{aligned}$$

于是作用量的变分为

$$\delta S = \int \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{q} - L\right)\dot{\epsilon}\mathrm{d}t$$

即知时间平移操作所对应的守恒量，这也是将要引入的哈密顿量

$$H = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{q} - L$$

对应着能量守恒。

伽利略不变性

. 众所周知，伽利略对称性指作变换 $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{v}t$ 后，系统保持不变。那么伽利略对称性所对应的守恒量是什么呢？可以作计算如下：

先构造一个该多粒子系统的作用量如下

$$S[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2}m_j\dot{\boldsymbol{x}}_j^2 - \sum_{j<k} V(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_k)\mathrm{d}t$$

在经过伽利略变换后，上式变为

$$\begin{aligned}S[\bar{q}(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2}m_j(\dot{\boldsymbol{x}}_j + \boldsymbol{v})^2 - \sum_{j<k} V(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_k)\mathrm{d}t \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2}m_j\dot{\boldsymbol{x}}_j^2 - \sum_{j<k} V(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_k)\mathrm{d}t + \sum_{j=1}^{n}\int_{t_1}^{t_2}\frac{1}{2}m_j\boldsymbol{v}^2\mathrm{d}t + \sum_{j=1}^{n}\int_{t_1}^{t_2} m_j\dot{\boldsymbol{x}}_j\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}t \\ &= S[q(t)] + \sum_{j=1}^{n}\frac{1}{2}m_j\boldsymbol{v}^2(t_2-t_1) + \sum_{j=1}^{n}\int_{t_1}^{t_2} m_j\boldsymbol{v}\cdot\mathrm{d}(\boldsymbol{x}_j) \\ &= S[q(t)] + \sum_{j=1}^{n}\frac{1}{2}m_j\boldsymbol{v}^2(t_2-t_1) + \sum_{j=1}^{n} m_j\boldsymbol{v}\cdot[\boldsymbol{x}_j(t_2) - \boldsymbol{x}_j(t_1)]\end{aligned}$$

虽然经变换后的作用量与变换前不同，但是注意到后面两项只与端点处相关，即在变分下不变。所以可以认为上面这个就是作用量，现在我们令 $\bar{\boldsymbol{x}}_j = \boldsymbol{x}_j + \epsilon(t)t$，那么可知

$$\dot{\bar{\boldsymbol{x}}}_j = \dot{\boldsymbol{x}}_j + \dot{\epsilon}(t)t + \epsilon(t)$$

将其代入 $S[\bar{q}(t)]$ 的表达式，那么可知

$$\begin{aligned} S[\bar{q}(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2} m_j (\dot{\boldsymbol{x}}_j + \epsilon + \dot{\epsilon} t)^2 - \sum_{j<k} V(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_k) \mathrm{d}t \\ &= S[q(t)] + \int_{t_1}^{t_2} \sum_{j=1}^{n} m_j \dot{\boldsymbol{x}}_j \epsilon(t) \mathrm{d}t + \int_{t_1}^{t_2} \sum_{j=1}^{n} m_j \dot{\boldsymbol{x}}_j \dot{\epsilon} t \mathrm{d}t \\ &= S[q(t)] + \int_{t_1}^{t_2} \sum_{j=1}^{n} \left[m_j \dot{\boldsymbol{x}}_j t - m_j \boldsymbol{x}_j \right] \dot{\epsilon} \mathrm{d}t \end{aligned}$$

也就是说守恒量是

$$\boldsymbol{K} = \sum_{j=1}^{n} m_j \dot{\boldsymbol{x}}_j t - m_j \boldsymbol{x}_j$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{K}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\boldsymbol{p} t - M \boldsymbol{x}_C \right)$$

后者在牛顿力学范畴下是显然的，上述推导只是说明了该守恒量与伽利略对称性之间的关系。

相对论不变性

. 先学一部分哈密顿力学再来说。

哈密顿力学初步

哈密顿正则方程

. 从牛顿定律就可以推知哈密顿正则方程。记哈密顿量为 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}$ 两个独立变量的函数，那么有

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} = \dot{\boldsymbol{x}} \quad \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}} = -\dot{\boldsymbol{p}}$$

其中哈密顿量被定义为

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

从哈密顿正则方程可以轻松得到

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = 0$$

即哈密顿量是一个守恒量，代表粒子的能量。推广到多粒子情形是自然的，略去。

势能曲线

. 散射和束缚运动。

根据哈密顿正则方程的精神，我们可以将粒子的位置和动量看做两个独立参数，这样张成的空间被称作粒子的相空间。粒子在相空间中依据哈密顿正则方程演化，形成的轨迹被称为相空间轨道。在势能曲线的例子中，相空间轨道显然由能量守恒方程给出，即

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

容易看出，束缚运动对应的轨道是闭合的，而散射所对应的轨道是不闭合的。

利用相空间轨道，我们可以很轻易的得到粒子束缚运动的周期表达式，记周期为 T，显然其依赖于守恒能量 E，不妨将其记为 $T(E)$，那么由哈密顿正则方程

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

那么周期为

$$T = \oint_E \mathrm{d}t = \oint_E \frac{m}{p}\mathrm{d}x$$

式中的积分沿着闭合的能量为 E 的相空间轨道进行，或者直接代入相空间方程，得到

$$T(E) = \oint_E \frac{m}{\sqrt{2m(E - V(x))}}\mathrm{d}x$$

另一方面，我们很容易计算闭合相空间轨道的面积，一般将其记作 $2\pi I(E)$，那么有

$$2\pi I(E) = \oint_E p\mathrm{d}x = \oint_E \sqrt{2m(E - V(x))}\mathrm{d}x$$

因为粒子总是沿着相空间轨道演化，相空间轨道在时间平移下是不变的，因此 $I(E)$ 是一个守恒量。从这个式子出发，我们可以知道

$$\frac{\partial I}{\partial E} = \frac{1}{2\pi}\int \frac{\partial}{\partial E}\sqrt{2m(E - V(x))}\mathrm{d}x = \frac{T(E)}{2\pi}$$

也可以将 E 看做是 I 的函数，得到结论

$$\frac{\partial E}{\partial I} = \omega(I)$$

在量子力学中，上式起到了重要的作用。简单介绍如下：

在波尔模型中，不妨令粒子处于第 n 个能级的能量是 E_n，在其跃迁到第 $n-1$ 个能级上时，放出角频率为 ω 的光子，那么由能量守恒有

$$E_n - E_{n-1} = \hbar\omega$$

在 n 足够大时，上式可以近似为

$$\frac{\partial E}{\partial n} = \hbar\omega$$

对比可知 $I = n\hbar$，这就是波尔-索末菲量子化条件。接着考虑一维谐振子，令 $\omega = \sqrt{\dfrac{k}{m}}$，那么能量可以被表达为

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \Rightarrow \frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{\frac{2E}{m\omega^2}} = 1$$

即相空间轨道是一个椭圆，于是可以得到其面积为

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

即知

$$E = I\omega$$

代入前面 $I = n\hbar$ 的结论，就可以知道一维量子谐振子的能量可以表达为

$$E = n\hbar\omega$$

微分形式

引入

. 微分形式可以追溯到二重积分换元的时候。考虑二重积分

$$A=\iint_D f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

作换元

$$\begin{cases} x=x(x',y') \\ y=y(x',y') \end{cases}$$

即将 (x,y) 替换为 (x',y')，二重积分将变为

$$A=\iint f(x',y')\frac{\partial(x,y)}{\partial(x',y')}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$

其中 $\dfrac{\partial(x,y)}{\partial(x',y')}$ 表示雅可比行列式。实际上可以通过引入另一种代数方法来计算得到上面的换元公式，我们将 $\mathrm{d}x\mathrm{d}y$ 重写为 $\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y$，称之为外积，相应的代数称为外代数，这种代数乘法满足

$$\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y=-\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}x$$

即外积是反交换的，利用该性质，显然有 $\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}x=\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}y=0$，那么换元公式可以重新推导如下

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y&=(\partial_{x'}x\mathrm{d}x'+\partial_{y'}x\mathrm{d}y')\wedge(\partial_{x'}y\mathrm{d}x'+\partial_{y'}y\mathrm{d}y')\\
&=\partial_{x'}x\partial_{y'}y\mathrm{d}x'\wedge\mathrm{d}y'+\partial_{y'}x\partial_{x'}y\mathrm{d}y'\wedge\mathrm{d}x'\\
&=(\partial_{x'}x\partial_{y'}y-\partial_{y'}x\partial_{x'}y)\mathrm{d}x'\wedge\mathrm{d}y'\\
&=\frac{\partial(x,y)}{\partial(x',y')}\mathrm{d}x'\wedge\mathrm{d}y'
\end{aligned}$$

可以看出，上面我们引入的雅可比行列式在这里自然出现了。

以上结果可以自然的推广到 n 元微积分，只需要将 $\mathrm{d}x^1\mathrm{d}x^2\cdots\mathrm{d}x^n$ 理解为 $\mathrm{d}x^1\wedge\mathrm{d}x^2\wedge\cdots\wedge\mathrm{d}x^n$ 就好了，两两之间同样满足反交换律

$$\mathrm{d}x^i\wedge\mathrm{d}x^j=-\mathrm{d}x^j\wedge\mathrm{d}x^i$$

我们定义一个 n 重微分形式，简称 $n-$ 形式如下所示

Definition 2. 我们将被积函数 $f(x^1,x^2,\cdots,x^n)$ 和外积 $\mathrm{d}x^1\wedge\cdots\wedge\mathrm{d}x^n$ 相乘的结果称作一个 n 重微分形式，简称 n 形式，记作 ω，即有

$$\omega=f(x^1,x^2,\cdots,x^n)\mathrm{d}x^1\wedge\mathrm{d}x^2\wedge\cdots\wedge\mathrm{d}x^n$$

相应的 n 重积分记作

$$A=\int\omega$$

Definition 3. 对于 n 个变量的情形，我们可以推广 n 形式的概念，定义 k 形式，$0 \le k \le n$，即 k 重微分形式 α

$$\alpha = \frac{1}{k!}\alpha_{j_1 j_2 \cdots j_k}\mathrm{d}x^{j_1} \wedge \mathrm{d}x^{j_2} \wedge \cdots \wedge \mathrm{d}x^{j_k}$$

上式使用了求和约定。

由于外积的反对称性，指标 $\{j_k\}$ 必须两两不同，否则为零。由此也可知道 n 形式是最大的 k 形式。由外积的反对称性也可知道，$\alpha_{j_1 j_2 \cdots j_k}$ 的指标必然两两反对称，否则整个 k-形式为零，即全反对称。

具体一点，我们来看看三维空间中的各种 k 形式。

Example 4. 三维空间的各种可能的 k 形式分别是 $0, 1, 2, 3$-形式。

首先是 0 形式，其实就是一个标量函数 $f(x, y, z)$，而 3 形式只有一个分量，可以表示为 $f(x, y, z)\mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}y \wedge \mathrm{d}z$，容易看出 0 形式和 3 形式之间有等价关系。

然后考虑 1 形式，1 形式按定义写出为

$$\alpha = \alpha_1 \mathrm{d}x + \alpha_2 \mathrm{d}y + \alpha_3 \mathrm{d}z$$

显然这可以写作 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), \mathrm{d}\boldsymbol{x} = (\mathrm{d}x, \mathrm{d}y, \mathrm{d}z)$，有

$$\alpha = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

这就是三维空间的 1-形式，三维空间的 2 形式按照定义可以写为

$$\alpha = \frac{1}{2}\alpha_{jk}\mathrm{d}x^j \wedge \mathrm{d}x^k = \alpha_{12}\mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}y + \alpha_{23}\mathrm{d}y \wedge \mathrm{d}z + \alpha_{31}\mathrm{d}z \wedge \mathrm{d}x$$

构建映射关系 $(\alpha_{12}, \alpha_{23}, \alpha_{31}) \to (b_1, b_2, b_3) = \boldsymbol{b}, \mathrm{d}\boldsymbol{S} = (\mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}y, \mathrm{d}y \wedge \mathrm{d}z, \mathrm{d}z \wedge \mathrm{d}x) \to (\mathrm{d}z, \mathrm{d}x, \mathrm{d}y)$，那么在 1 形式和 2 形式之间有一一对应关系，且三维空间中的 2 形式可以表达为

$$\alpha = \boldsymbol{b} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

我们看到对于三维空间中 0 形式和 3 形式有对应关系，1 形式和 2 形式之间有对应关系，这种一一对应关系实际能够推广到更高维的空间，即对于 n 维空间中的 k 形式，k 形式与 $n-k$ 形式之间有对偶关系，这种关系在数学上被称为 Hodge 对偶。

外微分与 Stokes 公式

.

Definition 4. 定义 2 维空间中的 1 形式 $\alpha = \alpha_x \mathrm{d}x + \alpha_y \mathrm{d}y$ 的外微分为

$$\mathrm{d}\alpha = \mathrm{d}\alpha_x \wedge \mathrm{d}x + \mathrm{d}\alpha_y \wedge \mathrm{d}y$$

可以来计算一下这样定义的外微分到底是什么，因为 α_x, α_y 都是 x, y 的函数，那么

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}\alpha &= (\partial_x \alpha_x \mathrm{d}x + \partial_y \alpha_x \mathrm{d}y) \wedge \mathrm{d}x + (\partial_x \alpha_y \mathrm{d}x + \partial_y \alpha_y \mathrm{d}y) \wedge \mathrm{d}y \\
&= \partial_y \alpha_x \mathrm{d}y \wedge \mathrm{d}x + \partial_x \alpha_y \mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}y \\
&= (\partial_x \alpha_y - \partial_y \alpha_x)\mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}y
\end{aligned}$$

于是可以看出 $\mathrm{d}\alpha$ 只有一个分量，联系二维空间中的格林公式

$$\oint_{\partial D} \alpha_x \mathrm{d}x + \alpha_y \mathrm{d}y = \int_D \partial_x \alpha_y - \partial_y \alpha_x \mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

利用上面的外微分，可以知道格林公式可以改写为

$$\oint_{\partial D} \alpha = \int_D \mathrm{d}\alpha$$

接下来考虑三维空间的 1-形式 $\alpha = \alpha_x \mathrm{d}x + \alpha_y \mathrm{d}y + \alpha_z \mathrm{d}z$，那么外微分是

$$\mathrm{d}\alpha = \mathrm{d}\alpha_x \wedge \mathrm{d}x + \mathrm{d}\alpha_y \wedge \mathrm{d}y + \mathrm{d}\alpha_z \wedge \mathrm{d}z$$

展开得到

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}\alpha &= (\partial_x \alpha_x \mathrm{d}x + \partial_y \alpha_x \mathrm{d}y + \partial_z \alpha_x \mathrm{d}z) \wedge \mathrm{d}x + \cdots \\
&= (\partial_x \alpha_y - \partial_y \alpha_x)\mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}y + (\partial_z \alpha_x - \partial_x \alpha_z)\mathrm{d}z \wedge \mathrm{d}x + (\partial_y \alpha_z - \partial_z \alpha_y)\mathrm{d}y \wedge \mathrm{d}z \\
&= (\nabla \times \alpha) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}
\end{aligned}$$

联系 Stokes 公式

$$\iint_D (\nabla \times \boldsymbol{a}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \int_{\partial D} \boldsymbol{a} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

那么斯托克斯公式也可以写为

$$\int_{\partial D} \alpha = \int_D \mathrm{d}\alpha$$

同理高斯公式也可以通过考虑三维空间的 2-形式得到，此处不再赘述。

对于上面这个公式，可以进行推广，α 是一个三维空间中的 $k-1$ 形式，∂D 是 $k-1$ 维的，而 $\mathrm{d}\alpha$ 是一个 k-形式。

不仅如此，外微分的概念还可以推广到 n 维空间，对于一般的 n 维空间中的 $k-1$-形式

$$\alpha = \frac{1}{(k-1)!} \alpha_{j_1 j_2 \cdots j_{k-1}} \mathrm{d}x^{j_1} \mathrm{d}x^{j_2} \cdots \mathrm{d}x^{j_{k-1}}$$

其外微分被定义为

$$\mathrm{d}\alpha = \frac{1}{(k-1)!} (\partial_j \alpha_{j_1 j_2 \cdots j_{k-1}}) \mathrm{d}x^j \wedge \mathrm{d}x^{j_1} \wedge \mathrm{d}x^{j_2} \wedge \cdots \wedge \mathrm{d}x^{j_{k-1}}$$

依然满足

$$\int_{\partial D} \alpha = \int_D \mathrm{d}\alpha$$

只不过不再局限于三维空间，上式被称为广义的斯托克斯公式，有时候也直接被称为斯托克斯公式。

外微分有个非常优雅的性质，即对一个外微分再进行一次外微分，得到的结果总是零，可以表达为

$$\mathrm{d}^2 = 0$$

证明是容易的，只需注意到

$$\mathrm{d}(\mathrm{d}\alpha) = \frac{1}{(k-1)!} (\partial_j \partial_k \alpha_{j_1 j_2 \cdots j_{k-1}}) \mathrm{d}x^j \mathrm{d}x^k \mathrm{d}x^{j_1} \wedge \cdots \wedge \mathrm{d}x^{j_{k-1}}$$

因为其关于指标 j,k 是对称的，那么根据之前的讨论，这个表达式必然为零。

还需引入两个概念。如果一个微分形式 α 的外微分为零，即 $\mathrm{d}\alpha = 0$，那么称该微分形式为闭形式，如果某微分形式能够表达为另一微分形式的外微分，那么称这样的微分形式为恰当形式，显然任何恰当形式都是闭形式，反之却不一定成立，这与空间的拓扑有关，属于 de Rham 上同调的研究内容，显然已经超出了本笔记的范围。

再谈保守力

. 我们之前定义保守力是可以表达为某势函数梯度的力，即有

$$\boldsymbol{F}_j \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}_j = -\mathrm{d}V(\boldsymbol{x}_j)$$

可以将其改写为

$$F_\mu \mathrm{d}x^\mu = -\mathrm{d}V$$

我们可以称 $F_\mu \mathrm{d}x^\mu$ 是一个力 1-形式，简记为 F，那么可知 F 是 V 势 0-形式的恰当形式，因为恰当形式必然为闭形式，那么可知

$$\mathrm{d}F = 0$$

根据外微分的定义不难将其展开为

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}(F_\mu \mathrm{d}x^\mu) &= (\partial_\nu F_\mu)\mathrm{d}x^\nu \wedge \mathrm{d}x^\mu \\
&= \left[\frac{1}{2}(\partial_\nu F_\mu - \partial_\mu F_\nu) + \frac{1}{2}(\partial_\nu F_\mu + \partial_\mu F_\nu)\right]\mathrm{d}x^\nu \wedge \mathrm{d}x^\mu \\
&= \frac{1}{2}(\partial_\nu F_\mu - \partial_\mu F_\nu)\mathrm{d}x^\nu \wedge \mathrm{d}x^\mu
\end{aligned}$$

最后一步是因为第二项中关于指标 μ,ν 对称，根据在外微分中指标对称项必消失的结论，就可以推出最后一式，因为 F 是闭形式，所以必有 $\partial_\nu F_\mu - \partial_\mu F_\nu = 0$，在三维空间中，此式等价于

$$\nabla \times \boldsymbol{F} = 0$$

即我们通过外微分的方法再次得到了保守力场的旋度必然为零的结论。再注意到 F 是一个 1 形式，那么对于一个 1 维回路 ∂D 与其所包围的区域 D，有

$$\int_{\partial D} F = \int_D \mathrm{d}F = 0$$

即保守力沿闭合回路所做的功必然为零。

再谈变分法

. 这一章的主要目的是从哈密顿力学的角度引入拉格朗日力学。

全局与局域

. 我们之前已经得到了哈密顿正则方程

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} = \dot{\boldsymbol{x}} \quad \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}} = -\dot{\boldsymbol{p}}$$

哈密顿正则方程实际上从局域上描述了粒子在相空间中的运动规律，正如之前已经看到的那样，我们还可以从全局的角度看待粒子在相空间的运动规律，即相空间的最小作用量原理

Principle 2. 粒子在相空间中的运动轨迹使得

$$S[\boldsymbol{x}(t),\boldsymbol{p}(t)]=\int_1^2(\boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{x}}-H)\mathrm{d}t$$

取得极值。

这种局部视角和全局视角也可以拓展到量子力学中，局部视角对应着算符描述，全局视角对应着路径积分描述。

相空间的最小作用量原理

. 我们可以由相空间的最小作用量原理出发推导出哈密顿正则方程，与推导拉格朗日方程不同的是，在后者的推导中我们可以简单的使起点和终点固定，而前者如果同时固定 x,p 的起始值和终止值，将会无解，因为哈密顿正则方程是一个一阶微分方程组，只能要么确定初始值，要么确定终止值。在推导中，我们认为 $\boldsymbol{x}$ 的起点和终点固定，而不对 $\boldsymbol{p}$ 添加限制，那么有

$$\begin{aligned}\delta S[x(t),p(t)]&=\int\left[\delta\boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{p}\cdot\delta\dot{\boldsymbol{x}}-\delta H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})\right]\mathrm{d}t\\&=\int\left[\delta\boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{x}}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{p}\cdot\delta\boldsymbol{x})-\dot{\boldsymbol{p}}\cdot\delta\boldsymbol{x}-\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{x}}\delta\boldsymbol{x}-\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{p}}\delta\boldsymbol{p}\right]\mathrm{d}t\\&=\int-\delta\boldsymbol{x}\cdot\left(\dot{\boldsymbol{p}}+\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{x}}\right)+\delta\boldsymbol{p}\cdot\left(\dot{\boldsymbol{x}}-\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{p}}\right)\mathrm{d}t\end{aligned}$$

由 x,p 的独立性，可知

$$\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{p}}=\dot{\boldsymbol{x}}\quad\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{x}}=-\dot{\boldsymbol{p}}$$

也即证明了哈密顿正则方程可以由相空间最小作用量原理推出。

坐标空间的最小作用量原理

.

广义坐标和广义动量

相空间出发

. 为定义广义动量，我们首先注意到一个 N 粒子体系的作用量

$$\begin{aligned}S&=\int_1^2p_\mu\dot{x}^\mu-H(x,p)\mathrm{d}t\\&=\int_1^2p_\mu\mathrm{d}x^\mu-\int H(x,p)\mathrm{d}t\end{aligned}$$

可以注意到上式的第二项就是哈密顿量对时间的积分，而第一项是一个 1 形式 $p_\mu\mathrm{d}x^\mu$ 对时间的积分，显然这个 1 形式对决定哈密顿方程是至关重要的，它有一个专门的名称，即辛势，用符号 Θ 表示，即

$$\Theta=p_\mu\mathrm{d}x^\mu$$

以上是在通常坐标系中表达问题，即 $\mu = 1, 2, \cdots, 3N$，但是在有约束问题中，各坐标相互之间不独立，因此不存在相应的哈密顿正则方程，此时依体系的自由度指定相应的广义坐标 $q^\alpha, \alpha = 1, 2, \cdots, s$，且我们要求辛势在广义坐标下也要有和通常坐标下相同的形式，即

$$\Theta = p_\mu \mathrm{d}x^\mu = p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha$$

这里的 p_α 是广义动量，广义动量可以由

$$p_\alpha = p_\mu \frac{\partial x^\mu}{\partial q^\alpha}$$

计算。显然利用广义坐标，我们可以将系统的作用量写作

$$S = \int [p_\alpha \dot{q}^\alpha - H(x, p)] \mathrm{d}t$$

采用相同程序可知一般的相空间哈密顿正则方程

$$\frac{\partial H}{\partial q^\alpha} = -\dot{p}_\alpha \quad \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \dot{q}_\alpha$$

如果没有约束，广义坐标和通常坐标是平权的，但是在有约束情形，由于通常坐标之间不独立，就无法构成相空间。

Example 5. 举个例子，约束在圆环 $x^2 + y^2 = R^2$ 的粒子，选取通常坐标 x, y，以及广义坐标 θ，那么根据辛势在两种坐标下相同，可以列出

$$\Theta = p_x \mathrm{d}x + p_y \mathrm{d}y = p_\theta \mathrm{d}\theta$$

以及两个坐标之间的变换关系

$$x = R\cos\theta \quad y = R\sin\theta$$

那么可知

$$p_\theta \mathrm{d}\theta = -p_x R \sin\theta \mathrm{d}\theta + p_y R\cos\theta \mathrm{d}\theta$$
$$p_\theta = [-p_x \sin\theta + p_y \cos\theta] R$$

以及约束关系-法向动量为零

$$p_x \cos\theta + p_y \sin\theta = 0$$

于是可知

$$p_\theta^2 = R^2 \boldsymbol{p}^2$$

于是可知广义动量 p_θ 实际上是粒子的角动量，粒子的哈密顿量为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(x) = \frac{p_\theta^2}{2mR^2} + V(\theta)$$

进而可以写出这个体系的哈密顿正则方程

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{mR^2}$$
$$\dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = -\frac{\partial V}{\partial \theta}$$

来考虑一下这个系统的相空间是什么，首先相空间是由 θ, p_θ 组成的，而 θ 的取值范围是 $[0, 2\pi]$，可以记作 $\mathbb{S}^1$，而 p_θ 可以取遍 $\mathbb{R}^1$，那么这个相空间就是 $\mathbb{S}^1 \times \mathbb{R}^1$，可以将 $\mathbb{S}^1$ 画在平面上，$\mathbb{R}^1$ 垂直于该圆，那么相空间就是一个无限长的圆柱面。

位形空间出发

.

再谈哈密顿力学

辛结构

. 在前面的章节中，我们已经知道了哈密顿正则方程

$$\frac{\partial H}{\partial p_a}=\dot{q}^a \quad \frac{\partial H}{\partial q^a}=-\dot{p}_a$$

可以看到在哈密顿正则方程中，广义坐标和广义动量的地位是非常平等的，正因为如此，也称广义动量和广义坐标为一对正则变量，其中广义坐标被称为正则坐标，广义动量被称为正则动量，但是，我们可以发现，在这一组正则方程之间差了一个负号，这个负号来源于哪里？

哈密顿正则方程是由作用量推出的，在作用量的第二项是哈密顿量对时间的积分，显然这里不可能导致一个负号的差异，那么这个负号只可能来自于辛势 $\Theta=p_a\mathrm{d}q^a$，注意到在辛势中，正则动量和正则坐标的地位并不平等，为此，我们取辛势 Θ 的外微分

$$\omega=\mathrm{d}\Theta=\mathrm{d}p_a\wedge\mathrm{d}q^a$$

显然 ω 是一个恰当形式，也因此是一个闭形式，即有 $\mathrm{d}\omega=0$，ω 被称为辛形式，正则方程中的负号实际上来自于外积的反对称性，即 $\mathrm{d}p_a\wedge\mathrm{d}q^a=-\mathrm{d}q^a\wedge\mathrm{d}p_a$。辛形式对于哈密顿正则系统非常重要，是相空间的基本结构，因此带有辛形式 ω 的相空间就被称为是带有辛结构的相空间。

既然我们认为 q,p 的地位平等，不妨将它们写得更平等一点，记 $\boldsymbol{x}=(q^1,\cdots,q^n,p_1,\cdots,p_n)^T$ 为相空间坐标，$\boldsymbol{x}$ 的各分量我们记作 $x^j, j=1,2,\cdots,2n$，其中前 n 个分量指正则坐标，后 n 个分量指正则动量。下面的推导将默认采用爱因斯坦求和约定，其中 a 指标默认对 $1\sim n$ 求和，j,k 等默认对 $1\sim 2n$ 求和。

在约定了记号 $\boldsymbol{x}$ 之后，辛形式可以重新表达为

$$\omega=\frac{1}{2}\omega_{jk}\mathrm{d}x^j\wedge\mathrm{d}x^k$$

其中 ω_{jk} 可以表达为矩阵的形式

$$(J)^{-1}=\omega_{jk}=\begin{pmatrix}0_{n\times n} & -1_{n\times n}\\ 1_{n\times n} & 0_{n\times n}\end{pmatrix}$$

其中 $1_{n\times n}$ 代表 $n\times n$ 阶单位矩阵，即对角元全是 1，这是一个反对称矩阵，有 $\omega_{jk}=-\omega_{kj}$，其逆矩阵记为 J，满足 $J=-J^{-1}$，为

$$J=\omega^{jk}=\begin{pmatrix}0_{n\times n} & 1_{n\times n}\\ -1_{n\times n} & 0_{n\times n}\end{pmatrix}$$

容易验证

$$\omega_{jk}\omega^{kl}=\delta_j^l \quad \omega^{jk}\omega_{kl}=\delta_l^j$$

有了上面的结论，我们可以将哈密顿正则方程重写为

$$\dot{x}^j=\omega^{jk}\partial_k H$$

其中 $\partial_k = \dfrac{\partial}{\partial x^k}$。$\star$: 值得注意的是，这里的上下指标关系，当 $k = n+1, \cdots, 2n$ 时，$x^j = p_{j-n}$，上下指标的关系是相反的！

或者将上式写成矩阵形式

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

将对 $\boldsymbol{x}$ 的求导理解为对其各分量求导形成的 $(2n \times 1)$ 矩阵。这种形式的哈密顿正则方程完美解释了负号来自于相空间本身的辛结构。

泊松括号

. 哈密顿力学如何刻画物理量呢，在哈密顿力学的框架下，物理量都是相空间中的函数，即任意物理量 A 都可以写成 $A(p,q)$ 的形式，或者更抽象的 $A(\boldsymbol{x})$ 形式，在相空间中，物理量如何演化？先假设 A 不显含时间，那么可知

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial A}{\partial q^a}\dot{q}^a + \frac{\partial A}{\partial p_a}\dot{p}_a \\ &= \frac{\partial A}{\partial q^a}\frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial A}{\partial p_a}\frac{\partial H}{\partial q^a}\end{aligned}$$

通常我们将等式右侧的部分记作 $[A, H]$，其中 $[,]$ 是泊松括号，其定义为

$$[A, B] = \frac{\partial A}{\partial q^a}\frac{\partial B}{\partial p_a} - \frac{\partial A}{\partial p_a}\frac{\partial B}{\partial q^a}$$

那么演化规律就是

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = [A, H]$$

利用之前引入的 ω^{jk} 以及 $\boldsymbol{x}$，也可以将泊松括号的定义式写作

$$[A, B] = (\partial_j A)\omega^{jk}(\partial_k B)$$

特别地，哈密顿正则方程可以写为

$$\dot{q}^a = [q^a, H] \quad \dot{p}_a = [p_a, H]$$

或者更简洁的

$$\dot{\boldsymbol{x}} = [\boldsymbol{x}, H]$$

如果物理量 A 本身显含时间，那么上式需要表达为

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

按照泊松括号的定义，可以很轻易的算出

$$[q^a, q^b] = [p_a, p_b] = 0, \quad [q^a, p_b] = \delta^a_b$$

或者使用更抽象的 x 坐标

$$[x^j, x^k] = \omega^{jk}$$

Theorem 10. 可以证明，泊松括号有以下性质

- 反对称性：$[A,B]=-[B,A]$.
- 线性性：$[A,c_1B_1+c_2B_2]=c_1[A,B_1]+c_2[A,B_2]$.
- 莱布尼茨法则：$[A,BC]=B[A,C]+[A,B]C$.
- 雅可比恒等式：$[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]]=0$.
- 整体求导：$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[A,B]=[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A,B]+[A,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}B]$.
- 泊松对易：如果两个物理量的泊松括号是零，则称两个物理量泊松对易，不显含时间的物理量是守恒量的充分必要条件是其与哈密顿量泊松对易。

证明繁而不难，略。

Example 6. 对于角动量，有

$$[J_j,J_k]=\epsilon_{jkl}J_l\quad[\boldsymbol{J}^2,J_k]=0$$

正则变换

. 正则变换是一种保持相空间辛结构的数学变换。关于正则变换，有两种不同的观点，其一是将其看做同一物理系统的两组不同相空间坐标，即看成相空间的一组保持辛结构的坐标变换。其二是将其看做是相空间到自身的一对一映射 *(*数学上称微分同胚*)*，这种映射会将一个相空间点映射为另一个相空间中的点，因此会将系统的一个物理状态映射为另一个物理状态，类似地，这种映射也要保持辛结构。在数学上，这两种观点完全等价，但是它们之间有不同的物理内涵，因此分别作讨论。

正则变换作为相空间坐标变换

. 首先讨论第一种观点。我们看到，相空间坐标可以写成 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}(q,p)$ 的形式，自然地想到可以对相空间作一个坐标变换，得到新的坐标 $\boldsymbol{x}'$，但如果这个坐标变换过于随意，可能会使得 $\boldsymbol{x}'$ 不能被表达为 $\boldsymbol{x}'(q,p)$ 的形式，即正则动量和正则坐标失去意义。所谓正则变换，就是说对坐标变换进行某种限制，使得变换后的相空间坐标依然具有正则动量和正则坐标的形式，即保持相空间辛结构的变换。

具体来说，辛形式作为微分形式，在不同的坐标系中保持形式一致，即有

$$\omega=\frac{1}{2}\omega_{jk}\mathrm{d}x^j\wedge\mathrm{d}x^k=\frac{1}{2}\omega'_{mn}\mathrm{d}x'^m\wedge\mathrm{d}x'^n$$

于是可以知道辛矩阵元素的变换关系

$$\omega'_{mn}=\frac{\partial x^j}{\partial x'^m}\frac{\partial x^k}{\partial x'^n}\omega_{jk}$$

即形式上与 $\begin{pmatrix}0\\2\end{pmatrix}$ 张量的变换规律相同。

关键的一步，我们需要知道，正则动量和正则坐标的存在导致了矩阵 J 的具体分块形式，在上面的变换中 ω_{jk} 是矩阵 J^{-1} 的某位置上的元素，如果坐标变换过于随意，将不能保证 ω'_{mn} 依然是矩阵 J^{-1} 的第 m 行第 n 列元素，于是为使相空间的辛结构得以保持，我们令 $\omega_{mn}=\omega'_{mn}$，即得

$$\omega_{mn}=\frac{\partial x^j}{\partial x'^m}\frac{\partial x^k}{\partial x'^n}\omega_{jk}$$

记矩阵 D 的第 j 行第 m 列为 $\dfrac{\partial x^j}{\partial x'^m}$，那么上面的方程可以转换成一个矩阵方程，即

$$D^T J^{-1} D = J^{-1}$$

两边取逆可知

$$D^{-1} J (D^{-1})^T = J$$

注意到 $\dfrac{\partial x^j}{\partial x'^m}\dfrac{\partial x'^m}{\partial x^k} = \delta^j_k$，可知 D^{-1} 的第 m 行第 k 列元素应该为 $\dfrac{\partial x'^m}{\partial x^k}$，于是矩阵方程可以重写为

$$\frac{\partial x'^m}{\partial x^k}\omega^{kj}\frac{\partial x'^n}{\partial x^j} = \omega^{mn} = (\partial_k x'^m)\omega^{kj}(\partial_j x'^n)$$

写成泊松括号的形式为

$$[x'^m, x'^n]_{\boldsymbol{x}} = \omega^{mn}$$

添加下角标 $\boldsymbol{x}$ 的意思是强调泊松括号是用变换前坐标定义的。而利用新坐标也显然会有 $[x'^m, x'^n]_{\boldsymbol{x}'} = \omega^{mn}$，也就是说

$$[x'^m, x'^n]_{\boldsymbol{x}} = [x'^m, x'^n]_{\boldsymbol{x}'} = \omega^{mn}$$

也就是说坐标变换保持辛结构不变等价于保持基本泊松括号不变。

进一步地，由泊松括号的性质可知，如果基本泊松括号在两种坐标下不变，那么任意的物理量在两种坐标下的泊松括号都不会发生变化，即

$$[A, B]_{\boldsymbol{x}} = [A, B]_{\boldsymbol{x}'}$$

即是说物理量的泊松括号在正则变换下是不变的，特别的，我们有

$$\dot{\boldsymbol{x}}' = [\boldsymbol{x}', H]_{\boldsymbol{x}} = [\boldsymbol{x}', H]_{\boldsymbol{x}'} = J\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}'}$$

也就是说在正则变换下哈密顿正则方程的形式保持一致。

但是，值得强调的是，正则变换实际上改变了哈密顿函数的函数形式，因此，正则变换并不能被视作是一种对称性。

正则变换作为相空间的微分同胚映射

. 现在来讨论正则变换的第二种观点，这种观点将正则变换看做是相空间到自身的微分同胚映射，不妨将这种映射记为 g，它将原相空间中的点 $\boldsymbol{x}$ 映射为 $\boldsymbol{x}'$，即 $g : \boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}'$，在这一映射的作用下，原来 $\boldsymbol{x}$ 点的物理状态就变换到 $\boldsymbol{x}'$ 的物理状态，于是函数 $A(\boldsymbol{x})$ 也会发生变换，将这个变换记为 $g_* : A(\boldsymbol{x}) \to A'(\boldsymbol{x})$，因为 $\boldsymbol{x}'$ 点变换前在 $\boldsymbol{x}$ 处，那么

$$A'(\boldsymbol{x}') = A(x)$$

特别地 $H'(\boldsymbol{x}') = H(x)$。这样的微分映射不能是随意的，必须满足保持辛结构的要求，考虑辛形式 ω，在微分映射下，有 $g^* : \omega \to \omega'$，而 $\omega = \frac{1}{2}\omega_{jk}\mathrm{d}x^j \wedge \mathrm{d}x^k$，$\omega_{jk}$ 是常数不会在微分映射下变换，那么有

$$g^* : \omega \to \omega' = \frac{1}{2}\omega_{mn}\mathrm{d}x'^m\mathrm{d}x'^n$$

所谓保持辛结构，即辛形式在变换前后不变，即 $\omega = \omega'$，那么又得到

$$\omega'_{mn} = \frac{\partial x^j}{\partial x'^m}\frac{\partial x^k}{\partial x'^n}\omega_{jk}$$

是上一节中已经得到过的结论，如此，虽然两种观点看起来不同，但它们在数学上是等价的。

写得更物理一点的话，考虑 $\omega = \mathrm{d}p_\alpha \wedge \mathrm{d}q^\alpha$，那么 $\omega = \omega'$ 意味着

$$\mathrm{d}p_\alpha \wedge \mathrm{d}q^\alpha = \mathrm{d}p'_\alpha \wedge \mathrm{d}q'^\alpha \Rightarrow \mathrm{d}\Theta = \mathrm{d}\Theta' \Rightarrow \mathrm{d}(\Theta - \Theta') = 0$$

即知 $\Theta - \Theta'$ 是一个闭形式，前面我们已经知道，一个恰当形式必然是一个闭形式，但反之不一定成立，依赖于空间的拓扑结构。但是如果只关注空间的局部而不关心整体，那么根据庞加莱引理，闭形式在局部上也一定是恰当形式。甚至在理论力学的应用中，这一局部甚至通常能够推广到整个相空间，因此，我们有

$$\Theta - \Theta' = \mathrm{d}F \Longleftrightarrow p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha - p'_\alpha \mathrm{d}q'^\alpha = \mathrm{d}F$$

这告诉我们，如果相空间中的微分同胚映射满足上式，那么它必然是一个正则变换，反之亦然。

再谈诺特定理

无穷小正则变换

. 如果正则变换将相空间中的 $\boldsymbol{x}$ 点变换到某邻近的 $\boldsymbol{x}'$ 点，它们之间的距离相差无穷小，则称这是一个无穷小正则变换。为了考察无穷小正则变换，不妨设有变换

$$q^\alpha \to q'^\alpha = q^\alpha + \epsilon Q^\alpha(q,p), \quad p_\alpha \to p'_\alpha = p_\alpha + \epsilon P_\alpha(q,p)$$

如果要使得这个变换是一个正则变换，需要满足

$$\mathrm{d}p_\alpha \wedge \mathrm{d}q^\alpha - \mathrm{d}p'_\alpha \wedge \mathrm{d}q'^\alpha = 0$$

现在来计算

$$\begin{aligned}\mathrm{d}q'^\alpha &= \mathrm{d}q^\alpha + \epsilon \mathrm{d}Q^\alpha(q,p)\\ \mathrm{d}p'_\alpha &= \mathrm{d}p_\alpha + \epsilon \mathrm{d}P_\alpha(q,p)\end{aligned}$$

于是可知

$$(\mathrm{d}q^\alpha + \epsilon \mathrm{d}Q^\alpha(q,p)) \wedge (\mathrm{d}p_\alpha + \epsilon \mathrm{d}P_\alpha(q,p)) - \mathrm{d}p_\alpha \wedge \mathrm{d}q^\alpha = \epsilon(\mathrm{d}Q^\alpha \wedge \mathrm{d}p_\alpha + \mathrm{d}q^\alpha \wedge \mathrm{d}P_\alpha) = 0$$

因为 $\epsilon \neq 0$，那么

$$\mathrm{d}Q^\alpha \wedge \mathrm{d}p_\alpha + \mathrm{d}q^\alpha \wedge \mathrm{d}P_\alpha = 0$$

展开可知

$$\begin{aligned}0 &= \frac{\partial Q^\alpha}{\partial q^\beta}\mathrm{d}q^\beta \wedge \mathrm{d}p_\alpha + \frac{\partial Q^\alpha}{\partial p_\beta}\mathrm{d}p_\beta \wedge \mathrm{d}p_\alpha + \frac{\partial P_\alpha}{\partial q^\beta}\mathrm{d}q^\alpha \wedge \mathrm{d}q^\beta + \frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\mathrm{d}q^\alpha \wedge \mathrm{d}p_\beta\\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial q^\beta} - \frac{\partial P_\beta}{\partial q^\alpha}\right)\mathrm{d}q^\alpha \wedge \mathrm{d}q^\beta + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial Q^\alpha}{\partial p_\beta} - \frac{\partial Q^\beta}{\partial p_\alpha}\right)\mathrm{d}p_\beta \wedge \mathrm{d}p_\alpha + \left(\frac{\partial Q^\alpha}{\partial q_\beta} + \frac{\partial P_\beta}{\partial p_\alpha}\right)\mathrm{d}q^\beta \wedge \mathrm{d}p_\alpha\end{aligned}$$

要满足这个关系必有

$$\frac{\partial P_\alpha}{\partial q^\beta} - \frac{\partial P_\beta}{\partial q^\alpha} = 0$$
$$\frac{\partial Q^\alpha}{\partial p_\beta} - \frac{\partial Q^\beta}{\partial p_\alpha} = 0$$
$$\frac{\partial Q^\alpha}{\partial q_\beta} + \frac{\partial P_\beta}{\partial p_\alpha} = 0$$

容易验证，这个偏微分方程组的通解是

$$Q^\alpha = \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} \quad P_\alpha = -\frac{\partial G}{\partial q^\alpha}$$

其中 G 是某定义在相空间上的函数 $G(q,p)$，即无穷小变换如果满足如上的关系，那么该无穷小变换就是一个正则变换，具体一点就是由 G 生成的无穷小正则变换。

举个例子

Example 7. 令 $G = p_c$，于是可知

$$Q^\alpha = \frac{\partial p_c}{\partial p_\alpha} = \delta^c_\alpha \quad P_\alpha = 0$$

相应的无穷小正则变换就是

$$q'^\alpha = q^\alpha + \epsilon\delta^c_\alpha, \quad p'_\alpha = p_\alpha$$

即 c 方向上的动量生成了 c 方向的无穷小正则平移。

常记无穷小正则变换中正则坐标和正则动量的改变量为 $\delta q^\alpha, \delta p_\alpha$，易知

$$\delta q^\alpha = \epsilon Q^\alpha(q,p) = \epsilon\frac{\partial G}{\partial p_\alpha}$$
$$\delta p_\alpha = \epsilon P_\alpha(q,p) = -\epsilon\frac{\partial G}{\partial q^\alpha}$$

那么物理量在变换前后的变换就是

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

上面的讨论驱使我们考虑一个正则变换的单参簇，即

$$q^\alpha \to q'^\alpha(q,p,\lambda), \quad p_\alpha \to p'_\alpha(q,p,\lambda)$$

λ 是这个正则变换的参数，当 $\lambda = 0$ 时，正则变换没有发生，随着参数 λ 的连续变动，在相空间中就形成了一条以 λ 为参数的连续曲线，任何相差 $\mathrm{d}\lambda$ 的点都是以无穷小正则变换连接的，于是可知

$$\frac{\mathrm{d}q^\alpha}{\mathrm{d}\lambda} = \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} \quad \frac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}\lambda} = -\frac{\partial G}{\partial q^\alpha}$$

其中函数 $G(q,p,\lambda)$ 称为该无穷小正则变换的生成元。常把 $\left(\dfrac{\mathrm{d}q^\alpha}{\mathrm{d}\lambda},\dfrac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}\lambda}\right)$ 看作是某种流场，称为由 G 生成的相流，使用抽象相空间坐标上式可写为

$$\frac{\mathrm{d}x^j}{\mathrm{d}\lambda}=\omega^{jk}\partial_k G$$

也将 $\dfrac{\mathrm{d}x^j}{\mathrm{d}\lambda}$ 记为 v_G^j.

特别地，我们可以取 $G=H,\lambda=t$，那么上面的方程就变成了标准哈密顿正则方程，正因为如此哈密顿量也被称为时间演化的生成元，因此这就给出了物理系统能量的一般定义

Definition 5. 能量是系统时间演化的生成元。

实际上，相空间的时间演化就是以时间为参数的连续的正则变换，换言之，时间演化保持了相空间的辛结构。

还有一个重要的结果，考虑两个正则变换的单参簇，生成元分别为 G_1,G_2，参数分别为 λ_1,λ_2，那么可知

$$\omega_{jk}v_{G_1}^j v_{G_2}^k=\omega_{jk}\omega^{jm}\partial_m G_1\omega^{kn}\partial_n G_2=(\partial_m G_1)\omega^{nm}(\partial_n G_2)=[G_2,G_1]$$

诺特定理

. 原则上正则变换可以是任意保持辛结构的变换，不过，对于一个物理系统进行一个物理操作常常在相空间中诱导出一个正则变换。进一步地，如果该物理操作依赖于一个连续参数，那么就会有一个正则变换的单参簇，于是称这个单参簇的生成元为该物理操作的生成元。比如，前面我们已经看到，正则动量就是对应正则坐标平移的生成元。

再比如说，对于一个在 xy 平面上运动的粒子，关于原点作旋转的生成元就是 $J_3=xp_y-yp_x$，可以说明如下

$$\begin{aligned}\delta x&=\epsilon[x,xp_y-yp_x]=-\epsilon y\\ \delta y&=\epsilon[y,xp_y-yp_x]=\epsilon x\\ \delta p_x&=\epsilon[p_x,xp_y-yp_x]=-\epsilon p_y\\ \delta p_y&=\epsilon[p_y,xp_y-yp_x]=\epsilon p_x\end{aligned}$$

很显然，这就是一个绕 z 轴的旋转，ϵ 对应角度。所以角动量是旋转操作的生成元。

现在我们又可以重新表述诺特定理

Theorem 11. 任意对称操作的生成元必是守恒量。

证明. 因为要保持哈密顿方程不变，因此哈密顿量不会发生变化，根据

$$0=\delta H=\epsilon[H,G]\Rightarrow\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t}=0$$

可知生成元是守恒量。(上述论证假设了对称操作不显含时间。) □

刘维尔定理

.

Theorem 12. $t=0$ 时刻相空间有区域 D_0，经过时间 t 演化后原 D_0 中的相点演化到 D_t，那么有

$$\operatorname{Vol} D_0 = \operatorname{Vol} D_t$$

证明. 证明思路是先给出相空间中体积微元的表达式，易知

$$\mathrm{d}V = \mathrm{d}p_1 \wedge \mathrm{d}q^1 \wedge \cdots \wedge \mathrm{d}p_n \wedge \mathrm{d}q^n$$

$n=2$ 时:

此时 $\mathrm{d}V = \mathrm{d}p_1 \wedge \mathrm{d}q^1 \wedge \mathrm{d}p_2 \wedge \mathrm{d}q^2$，容易验证

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}V &= \mathrm{d}p_1 \wedge \mathrm{d}q^1 \wedge \mathrm{d}p_2 \wedge \mathrm{d}q^2 \\
&= \frac{1}{2}(\mathrm{d}p_1 \wedge \mathrm{d}q^1 + \mathrm{d}p_2 \wedge \mathrm{d}q^2) \wedge (\mathrm{d}p_1 \wedge \mathrm{d}q^1 + \mathrm{d}p_2 \wedge \mathrm{d}q^2) \\
&= \frac{1}{2!}\omega^{\wedge 2}
\end{aligned}$$

式中 $\omega^{\wedge 2}$ 表示与自身外积两次，即 $\omega^{\wedge 2} = \omega \wedge \omega$。

假设 $n=k$ 时有结论

$$\mathrm{d}V = \frac{1}{k!}\omega^{\wedge k}$$

$n=k+1$ 时

此时有

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}V &= (\mathrm{d}p_1 \wedge \mathrm{d}q^1 \wedge \cdots \wedge \mathrm{d}p_k \wedge \mathrm{d}q^k) \wedge \mathrm{d}p_{k+1} \wedge \mathrm{d}q^{k+1} \\
&= \frac{1}{k!}\omega^{\wedge k} \wedge \mathrm{d}p_{k+1} \wedge \mathrm{d}q^{k+1} \\
&= \frac{1}{(k+1)!}\omega^{\wedge (k+1)}
\end{aligned}$$

可见不论是多少维的相空间，其体积微元都只与辛形式有关，而正则变换不改变相空间的辛形式，随时间的演化是一种正则变换，至此刘维尔定理得证。 □

庞加莱回归定理

.

Theorem 13. 对于一个相空间有限的哈密顿正则系统，任意取定一个初始点 $\boldsymbol{x}_0$，对于它的任意领域 D_0，必然存在另一点 $\boldsymbol{x}' \in D_0$，它将在有限时间内回归 D_0。

庞加莱回归定理实际上表明，只要等待的时间足够长，系统总可以回归到与初始状态任意接近的状态。

证明使用了一些微分同胚的性质，略去。

生成函数

. 这一小节的目的主要是推广一下前面讲的正则变换，并讲述如何构造具体的正则变换。

先来看看如何构造具体的正则变换，如前所述，一个变换是正则变换需要满足

$$p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha - p'_\alpha \mathrm{d}q'^\alpha = \mathrm{d}F$$

现在我们假设 F 取某种特定的函数形式，首先假设 $F=F(q,q')$，那么我们可知

$$p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha - p'_\alpha \mathrm{d}q'^\alpha = \frac{\partial F}{\partial q^\alpha}\mathrm{d}q^\alpha + \frac{\partial F}{\partial q'^\alpha}\mathrm{d}q'^\alpha$$

于是自然的有

$$p_\alpha = \frac{\partial F}{\partial q^\alpha} \quad p'_\alpha = -\frac{\partial F}{\partial q'^\alpha}\mathrm{d}q'^\alpha$$

于是就能得到一组正则变换关系 $(q,p)\to(q',p')$，给定一个函数 $F(q,q')$，就能根据上式确定一个正则变换的形式，于是 F 也被称为第一类生成函数。

Example 8. 一个简单的例子，一个单自由度系统，相空间的维数是 2，可以用 q,p 完全描述，那么下面的变换是一个正则变换

$$q'=p, \quad p'=-q$$

这个变换的生成函数显然是 $F=qq'$，可以验证如下，即

$$p=\frac{\partial F}{\partial q}=q' \quad p'=-\frac{\partial F}{\partial q'}=-q$$

像在热力学中那样，我们可以进一步构造

$$p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha - p'_\alpha \mathrm{d}q'^\alpha + \mathrm{d}(p'_\alpha q'^\alpha) = p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha + q'^\alpha \mathrm{d}p'_\alpha = \mathrm{d}(F+p'_\alpha q'^\alpha) = \mathrm{d}F_2(q,p')$$

于是可以选择第二类生成函数 $F_2(q,p')$，满足

$$p_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial q^\alpha} \quad q'^\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial p'_\alpha}$$

很显然，我们也可以构造第三类，第四类生成函数 $F_3(q',p), F_4(p,p')$，分别满足

$$F_3 : q^\alpha = -\frac{\partial F_3}{\partial p_\alpha} \quad p'_\alpha = -\frac{\partial F_3}{\partial q'^\alpha}$$
$$F_4 : q^\alpha = -\frac{\partial F_4}{\partial p_\alpha} \quad q'^\alpha = \frac{\partial F_4}{\partial p'_\alpha}$$

要注意的是，上述四类生成函数并没有包含所有的情况，例如一个维度为 4 的相空间中正则变换

$$q'^1=q^1, p'_1=p_1, q'^2=p_2, p'_2=-q^2$$

就不能用上述四种生成函数生成，实际上它由一种复合形式生成，即 $F=q^1p'_1+q^2q'^2$.

到目前为止，我们讨论的都是不含时的正则变换，即 $\boldsymbol{x'}=\boldsymbol{x'}(\boldsymbol{x})$，如果正则变换中包含了时间，即应用到 $\boldsymbol{x}'=\boldsymbol{x}'(\boldsymbol{x},t)$ 情形，那么上面所有的微分表达式应该被认为是瞬时进行的，即不对 t 进行微分，但是在这种情况下就不能证明变换后的系统满足同样的哈密顿正则方程了，但是可以证明，只要选取一个合适的新的哈密顿量 K，就能在形式上依然满足哈密顿正则方程。简单证明如下

证明：根据式 $p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha - p'_\alpha \mathrm{d}q'^\alpha = \mathrm{d}F$，引入函数 K 满足

$$p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha - H\mathrm{d}t = p'_\alpha \mathrm{d}q'^\alpha - K\mathrm{d}t + \mathrm{d}F$$

这里的 d 也对时间起作用，也就是说我们应该这样选择 K，使得其抵消全部的关于 t 的偏微分，在选取第一类生成函数的情况下，即 $F=F(q,q',t)$，函数 K 的取值应该是

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

此后利用相空间的最小作用量原理，就可以得到以 K 作为新哈密顿量的哈密顿正则方程。□

哈密顿-雅可比方程

. 这里来推导一下哈密顿-雅可比方程。

首先在相空间固定起点 (q_0,t_0) 和终点 (q,t)，那么这个起点和终点就在相空间中确定了一条路径，这条路径的作用量为

$$S(q_0,q,t)=\int_{t_0}^{t}p_\alpha \mathrm{d}q^\alpha-H\mathrm{d}t$$

那么对这条路径的终点进行无穷小变换 $(q,t)\to(q+\delta q,t+\delta t)$，那么相应的作用量也会产生无穷小变化

$$\delta S=p_\alpha\delta q^\alpha-H\delta t$$

由此就可以得到

$$p_\alpha=\frac{\partial S}{\partial q^\alpha}\quad H=-\frac{\partial S}{\partial t}$$

将 p_α 的新表达式代入 $H(q,p,t)$ 中，就可以得到哈密顿-雅可比方程

$$H(q_1,\cdots,q_n,\partial_{q^1}S,\cdots,\partial_{q^n}S,t)+\frac{\partial S}{\partial t}=0$$

这就是所谓函数 S 所满足的偏微分方程，但是哈密顿-雅可比方程并不能完全确定其形式，总是会相差一个常数，但这并不重要，下面的讨论中会忽略这一点。

把上面的推导过程反过来，可以发现，如果物理路径可以解析求解，即允许用积分表达，我们就可以构造出形如 $S(q,q_0,t)$ 的函数。

但是 $S(q_0,q,t)$ 只是方程的一类解，而且实际上通常无法求出其解析形式。进一步，对于一个 n 个自由度的系统，如果能找到一系列解 $S(\alpha,q,t)$，其中 $\alpha=(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$，$\alpha$ 的地位类似于 q_0，这样的系统被称为可积系统。可以证明，这 n 个 α_k 是一组两两泊松对易的独立守恒量。反过来，如果哈密顿系统有 n 个泊松对易的独立守恒量，那我们就可以构造出 n 个形式为 $S(\alpha,q,t)$ 的解，也就是说，存在 n 个泊松对易的独立守恒量是哈密顿系统是可积系统的充分必要条件。

一般地，在找到一个解 $S(q,t)$ 之后，根据 $p_\alpha=\partial_{q^\alpha}S$，可以得到正则动量关于正则坐标的函数关系，再代入哈密顿正则方程的其中一式

$$\dot{q}^\alpha=\left.\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\right|_{p_\alpha=\partial_{q^\alpha}S}$$

就可以解出粒子在相空间中的运动路径，在拉格朗日力学中需要解 n 个二阶偏微分方程，而在哈密顿力学的框架中只需要求解 n 个一阶微分方程组，大大简化了求解计算。

但是这样计算出的路径真的是粒子的经典路径吗，我们需要验证哈密顿正则方程的另外一式是成立的。可以证明如下

证明：我们对 p_α 对时间求导

$$\dot{p}_\alpha=\frac{\partial^2 S}{\partial t\partial q^\alpha}+\frac{\partial^2 S}{\partial q^\beta\partial q^\alpha}\dot{q}^\beta$$

再注意到哈密顿-雅可比方程 $\partial_t S+H=0$，将其对 H 求偏导，并代入 $p=\partial_q S$，有

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q^\alpha\partial t}+\frac{\partial H}{\partial q^\alpha}+\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\frac{\partial^2 S}{\partial q^\alpha\partial q^\beta}=0$$

于是对比可知

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

可知这样求出的路径确实是粒子的经典路径。□.

现在，如果哈密顿量中不限含时间，即能量守恒，那么哈密顿-雅可比方程显然有关于这个守恒量的解，记作 $S(E,q,t)$，定义

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

其中 $W(E,q)$ 被称为哈密顿主函数，在这种情况下，哈密顿-雅可比方程变成

$$H(q, \partial_q W) = E$$

我们只需求解这个微分方程，就能得到原哈密顿-雅可比方程的一类解，此类解的特点是，用它反解出来的粒子路径都具有相同的能量 E.

可积系统

. 上一节我们说过如果系统有一个守恒量 α,那么就有一个依赖于这个守恒量的函数 $S(\alpha,q,t)$，如果 n 自由度系统有 n 个泊松对易的守恒量，相应的也能找到有 n 个积分常数的哈密顿-雅可比方程的解，这样的系统就被称为可积系统，因为粒子的路径可以被积分和隐函数表达出来，可以证明如下：

证明：如果存在 n 个守恒量，我们有函数 $S(\alpha,q,t), \alpha = (\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$，考虑一个正则变换 $(q,p) \to (\alpha,\beta)$，即 α 是变换后的正则坐标，而 β 是变换后的正则动量，那么这个函数 S 就是第一类生成函数，因为 S 含时，前面论述已知，变换后的哈密顿量是

$$K = H + \frac{\partial S}{\partial t}$$

根据哈密顿-雅可比方程可知 $K = 0$，那么有

$$\dot{\alpha} = 0, \dot{\beta} = 0$$

即变换后的 α 确实是守恒量，又因为 α 是正则坐标，之间是相互正交的，即有泊松对易。β 也是守恒量，但是因为正则动量和正则坐标之间并不泊松对易，所以只有 n 个泊松对易的独立守恒量，利用上面两式，以及哈密顿正则方程和生成函数的性质就可以确定原相空间坐标 q,p 随 α,β 的变换关系。可见，可积系统粒子的解析解是可以得到的。□

规则与混沌

最规则的系统-可积系统

. 如前所述，一个自由度为 n 的哈密顿系统是可积系统的充分必要条件是有 n 个泊松对易的独立守恒量，不妨记这些守恒量是 $G_\alpha, \alpha = 1,2,\cdots,n$，那么它们满足 $[G_\alpha, H] = 0$，以及

$$[G_\alpha, G_\beta] = 0$$

而所谓的独立性是指

$$\mathrm{d}G_1 \wedge \mathrm{d}G_2 \wedge \cdots \wedge \mathrm{d}G_n \neq 0$$

对于 $2n$ 维相空间，不可能有超过 n 个相互独立且泊松对易的守恒量，因为 H 本身也是一个守恒量，所以 H 必然是 G_α 的函数，后面将会看到，H 将完全被 G_α 决定，不再依赖其他变量。

不变环面

. 因为 G_α 是守恒量,所以系统的运动一定会被限制在 G_α 取某常数的超曲面上,不同的取值就将使得哈密顿系统在不同的环面上。不妨记 $G_\alpha = g_\alpha$ 的那一层超曲面为 $\mathscr{M}_g$，可以证明，如果 $\mathscr{M}_g$ 连通且有限 (数学上说是紧致的)，那么它一定可以参数化为 n 维环面 $\mathbb{T}^n = \mathbb{S}^1 \times \cdots \times \mathbb{S}^1$，即 $\mathbb{T}^n = \mathscr{M}_g$，称为相空间的不变环面，不变是指这个系统一直在这个环面上运动。

振动

小振动

. 我们将证明，小振动是可积的，只要合适的选取 n 个广义坐标，任意小振动都可以化为 n 个独立简谐运动的叠加。n 就是系统的自由度数。

小振动的拉格朗日量

. 我们假设小振动的动能可以写成

$$T = \frac{1}{2} m_{ab}(q) \dot{q}^a \dot{q}^b$$

其中 q^a 是系统的广义坐标，采用爱因斯坦求和规则，且 $m_{ab}(q)$ 是一个对称矩阵的分量，即 $m_{ab} = m_{ba}$，那么小振动的拉格朗日量可以写为

$$L = \frac{1}{2} m_{ab}(q) \dot{q}^a \dot{q}^b - V(q)$$

我们不妨将 $q^a = 0$ 令为系统的平衡位置，那么将拉格朗日量在 $q^a = 0$ 处展开，并保留到二阶小量，那么

$$L = \frac{1}{2} m_{ab}(0) \dot{q}^a \dot{q}^b - V(0) - \left.\frac{\partial V}{\partial q^a}\right|_{q=0} q^a - \frac{1}{2} \left.\frac{\partial^2}{\partial q^a \partial q^b}\right|_{q=0} q^a q^b$$

因为系统的动能必须大于零，所以 m_{ab} 是一个正定对称矩阵的分量，相应的矩阵记为 M，$V(0)$ 是常数在拉格朗日量中可以忽略，因为平衡条件 $\left.\frac{\partial V}{\partial q^a}\right|_{q=0}$ 必定为零，而由于极小值，导致 $\left.\frac{\partial^2 V}{\partial q^a \partial q^b}\right|_{q=0}$ 是对称正定的，我们将其记作 k_{ab}，相应的矩阵记为 K，那么我们最终可以将拉格朗日量写为

$$L = \frac{1}{2} m_{ab} \dot{q}^a \dot{q}^b - \frac{1}{2} k_{ab} q^a q^b$$

我们记 $\boldsymbol{q} = (q_1, \cdots, q_n)^T$，那么可以写为

$$L = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{q}}^T M \dot{\boldsymbol{q}} - \frac{1}{2} \boldsymbol{q}^T K \boldsymbol{q}$$

简正坐标的存在性

.

Lemma 1. 任何一个实对称矩阵 M，存在正交矩阵 R，使得

$$M = R^T D R$$

其中 D 是对角阵，对角线上的元素是 M 的本征值，如果 M 同时为正定矩阵，那么对角线元素都大于零。

Corollary 1. 任意正定的实对称矩阵 M，存在可逆矩阵 R，使得

$$M = C^T C$$

现在考虑

$$L=\frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{q}}^TM\dot{\boldsymbol{q}}-\frac{1}{2}\boldsymbol{q}^TK\boldsymbol{q}$$

将正定实对称矩阵 M 写为 C^TC，那么

$$L=\frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{q}}^TC^TC\dot{\boldsymbol{q}}-\frac{1}{2}\boldsymbol{q}^TK\boldsymbol{q}$$

定义新的广义坐标

$$\boldsymbol{q}'=C\boldsymbol{q},\quad \boldsymbol{q}=C^{-1}\boldsymbol{q}'$$

于是

$$L=\frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{q}}'^T\dot{\boldsymbol{q}}'-\frac{1}{2}\boldsymbol{q}'^T(C^{-1})^TKC^{-1}\boldsymbol{q}'$$

因为 K 也是正定的实对称矩阵，所以 $(C^{-1})^TKC^{-1}$ 也是正定实对称的，那么可知存在正交矩阵 R 使得 $(C^{-1})^TKC^{-1}=R^TDR$，那么代入

$$L=\frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{q}}'^T\dot{\boldsymbol{q}}'-\frac{1}{2}\boldsymbol{q}'^TR^TDR\boldsymbol{q}'$$

再令新的广义坐标

$$\boldsymbol{Q}=R\boldsymbol{q}',\quad \boldsymbol{q}'=R^T\boldsymbol{Q}$$

即得

$$L=\frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{Q}}^TRR^T\dot{\boldsymbol{Q}}-\frac{1}{2}\boldsymbol{Q}^TD\boldsymbol{Q}$$

最终把两个矩阵全部对角化，即

$$\boxed{L=\frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{Q}}^T\dot{\boldsymbol{Q}}-\frac{1}{2}\boldsymbol{Q}^TD\boldsymbol{Q}}$$

其中 $\boldsymbol{Q}=RCq$，不妨将 $D=\mathrm{diag}(\omega_1^2,\cdots,\omega_n^2)$，那么拉格朗日量也可以写成

$$\boxed{L=\sum_\alpha\frac{1}{2}\dot{Q}_\alpha^2-\frac{1}{2}\omega_\alpha^2Q_\alpha^2}$$

显然，这正是 n 个独立简谐振动的叠加。

Definition 6. 我们称 Q_α 是简正坐标，ω_α 为简正频率。

定义与简正坐标相对应的简正动量，可以算出其哈密顿量

$$\boxed{H=\sum_\alpha\frac{1}{2}P_\alpha^2+\frac{1}{2}\omega_\alpha^2Q_\alpha^2}$$

显然 $H_\alpha=\dfrac{1}{2}P_\alpha^2+\dfrac{1}{2}\omega_\alpha^2Q_\alpha^2$ 就是 n 个相互对易的守恒量，所以小振动系统是可积系统。

简正坐标的求法

. 此时我们回到拉格朗日量

$$L=\frac{1}{2}m_{ab}\dot{q}^a\dot{q}^b-\frac{1}{2}k_{ab}q^aq^b$$

那么可以写出其拉格朗日方程

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^a}=\frac{1}{2}m_{ab}\dot{q}^b+\frac{1}{2}m_{ab}\dot{q}^a\delta_a^b=m_{ab}\dot{q}^b$$

最终得到

$$m_{ab}\ddot{q}^b+k_{ab}q^b=0$$

写成矩阵形式为

$$M\ddot{\boldsymbol{q}}+K\boldsymbol{q}=0$$

我们想要得到 n 个简谐振动叠加的结果，不妨令

$$\boldsymbol{q}(t)=\boldsymbol{a}\cos(\omega t+\phi)$$

其中 $\boldsymbol{a}$ 是一个常数列矢量，那么代入方程可以得到

$$(-\omega^2M+K)\boldsymbol{a}=0$$

因为 $\boldsymbol{a}$ 要是一个非平凡解，那么可知 $\ker(-\omega^2M+K)\neq\{0\}$，即该矩阵对应的算符不单，也就是说不可逆，对应于矩阵，这正说明了

$$\det\bigl(-\omega^2M+K\bigr)=0$$

这是一个多项式方程，我们令这些方程的解为 $\omega_\alpha^2,\alpha=1,\cdots,n$，与 ω_α^2 相应的列矢量为 $\boldsymbol{a}_\alpha$，那么

$$(-\omega_\alpha^2M+K)\boldsymbol{a}_\alpha=0$$

可以证明 $\omega_\alpha^2>0$，从而 $\omega_\alpha\in\mathbb{R}$，不难看出

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}_\alpha^T(-\omega_\alpha^2M+K)\boldsymbol{a}_\alpha=0\\ \Rightarrow\omega_\alpha^2=\frac{\boldsymbol{a}_\alpha^TK\boldsymbol{a}_\alpha}{\boldsymbol{a}_\alpha^TM\boldsymbol{a}_\alpha}\end{aligned}$$

因为 K,M 都是正定矩阵，根据定义可知 $\omega_\alpha^2>0$，证毕。

为了简化说明，我们假设 n 个 ω_α^2 两两不同，那么

$$\begin{aligned}-\omega_\alpha^2M\boldsymbol{a}_\alpha+K\boldsymbol{a}_\alpha=0\Rightarrow-\omega_\alpha^2\boldsymbol{a}_\beta^TM\boldsymbol{a}_\alpha+\boldsymbol{a}_\beta^TK\boldsymbol{a}_\alpha=0\\ -\omega_\alpha^2\boldsymbol{a}_\alpha^TM+\boldsymbol{a}_\alpha^TK=0\Rightarrow-\omega_\beta^2\boldsymbol{a}_\beta^TM\boldsymbol{a}_\alpha+\boldsymbol{a}_\beta^TK\boldsymbol{a}_\alpha=0\end{aligned}$$

所以可知

$$(\omega_\beta^2-\omega_\alpha^2)\boldsymbol{a}_\beta^T(M)\boldsymbol{a}_\alpha=0$$

若记 $\boldsymbol{a}_\alpha^T M \boldsymbol{a}_\alpha = m_\alpha$，那么可知

$$\boldsymbol{a}_\beta^T M \boldsymbol{a}_\alpha = m_\alpha \delta_{\alpha\beta}$$

同理分析可知

$$\boldsymbol{a}_\beta^T K \boldsymbol{a}_\alpha = m_\alpha \omega_\alpha^2 \delta_{\alpha\beta}$$

那么我们令正则坐标为

$$\boldsymbol{q} = \sum_\alpha \boldsymbol{a}_\alpha Q_\alpha$$

那么代入拉格朗日量可知

$$\begin{aligned}
L &= \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{q}}^T M \boldsymbol{q} - \frac{1}{2}\boldsymbol{q}^T K \boldsymbol{q} \\
&= \sum_\alpha \frac{1}{2}\dot{Q}_\alpha^2 \boldsymbol{a}_\alpha^T M \boldsymbol{a}_\alpha - \frac{1}{2} Q_\alpha^2 \boldsymbol{a}_\alpha^T K \boldsymbol{a}_\alpha \\
&= \sum_\alpha \frac{1}{2}(m_\alpha \dot{Q}_\alpha^2 - m_\alpha \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2)
\end{aligned}$$

这正是上一节中的结果。在解出这 n 个简谐振动的解之后，可以将

$$\boldsymbol{q} = \sum_\alpha \boldsymbol{a}_\alpha Q_\alpha$$

得到原坐标的表达式。

我们将 $\boldsymbol{a}_\alpha$ 列矢量合成一个 n 阶方阵，记为 A，这通常被称为模态矩阵，其联系了通常坐标和简正坐标，关系为

$$\boldsymbol{q} = A\boldsymbol{Q}, \quad \boldsymbol{Q} = A^{-1}\boldsymbol{q}$$

双摆

. 双摆的拉格朗日量为

$$L = \frac{1}{2}(m_1+m_2)l_1^2\dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2}m_2 l_2^2 \dot{\theta}_2^2 + m_2 l_1 l_2 \cos(\theta_1-\theta_2)\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2 + (m_1+m_2) g l_1 \cos\theta_1 + m_2 g l_2 \cos\theta_2$$

简化问题，假设 $m_1 = m_2, l_1 = l_2$，那么拉格朗日量简化为

$$L = ml^2\dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}_2^2 + ml^2\cos(\theta_1-\theta_2)\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2 + 2mgl\cos\theta_1 + mgl\cos\theta_2$$

显然 $\theta_1 = \theta_2 = 0$ 是稳定平衡位置，那么在此处对其进行小量展开，可知

$$L = ml^2\dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}_2^2 + ml^2\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2 - mgl\theta_1^2 - \frac{1}{2}mgl\theta_2^2$$

于是可以令

$$\theta_1 = a_1\cos(\omega t+\phi), \quad \theta_2 = a_2\cos(\omega t+\phi)$$

所以可知拉格朗日方程

$$\begin{aligned}
2\ddot{\theta}_1 + \ddot{\theta}_2 + 2\frac{g}{l}\theta_1 &= 0 \\
\ddot{\theta}_1 + \ddot{\theta}_2 + \frac{g}{l}\theta_2 &= 0
\end{aligned}$$

于是这组方程可以写为

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{\theta}_1 \\ \ddot{\theta}_2 \end{pmatrix} + \frac{g}{l} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix} = 0$$

所以求

$$\det \left[-\omega^2 \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{g}{l} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = 0$$

解得

$$\omega_1^2 = \frac{g}{l} \left(2 - \sqrt{2} \right), \quad \omega_2^2 = \frac{g}{l} (2 + \sqrt{2})$$

相应的矢量 $\boldsymbol{a}_\alpha$ 分别为

$$\boldsymbol{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

于是模态矩阵为

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

所以令新广义坐标

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{4} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix}$$

中心力场

两体问题

. 对于两体问题，其拉格朗日量为

$$L=\frac{1}{2}m_1\dot{\boldsymbol{x}}_1^2+\frac{1}{2}m_2\dot{\boldsymbol{x}}_2^2-V(|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|)$$

显然，这个系统具有平移对称性，所以是动量守恒的，即质心作匀速直线运动，于是不妨设 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2$ 是质心系中的位矢，那么可知

$$m_1\boldsymbol{x}_1+m_2\boldsymbol{x}_2=0$$

定义相对位矢为

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2$$

那么可以解出

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_1&=\frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{x}=\frac{m}{m_1}\boldsymbol{x}\\ \boldsymbol{x}_2&=\frac{-m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{x}=\frac{-m}{m_2}\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

代回拉格朗日量的表达可知

$$L=\frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2-V(|\boldsymbol{x}|)$$

其中 m 是约化质量

$$\frac{1}{m}=\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}$$

因为拉格朗日量不含时间，所以必然能量守恒，又因为在空间旋转下保持不变，所以必然是叫动量守恒，不妨令 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$，因为角动量守恒，所以必然有 $\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{J}$，所以必然是平面运动。

这样就把两体运动约化成了单体问题，其中位矢是相对位矢，质量是约化质量。

于是可以取极坐标，使得

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

可知

$$J=\frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}}=mr^2\dot{\phi}$$

于是拉格朗日量变成

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

中心力场

. 中心力场的能量也是守恒的，即

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

开普勒第二定律和角动量守恒定律是等价的，因为掠面速度

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\boldsymbol{x}\times\mathrm{d}\boldsymbol{x}|=\frac{1}{2}|\boldsymbol{x}\times\mathbf{v}|=\frac{J}{2m}$$

所以对于中心力场，只需要关心径向运动，定义等效势能 $V_{\mathrm{eff}}(r)=V(r)+\dfrac{J^2}{2mr^2}$，那么能量为

$$E=\frac{1}{2}m\dot{r}^2+V_{\mathrm{eff}}(r)$$

于是可知

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}=\sqrt{\frac{2}{m}(E-V_{\mathrm{eff}}(r))}\Rightarrow r(t)=\int_0^t\sqrt{\frac{2}{m}(E-V_{\mathrm{eff}}(r))}\mathrm{d}t$$

根据角动量守恒又有

$$\dot{\phi}=\frac{J}{mr^2}$$

于是积分就得到了 $\phi(t)$，但很多时候，我们更关心轨道的形状 $r(\phi)$，那么可以换元得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\phi}&=\frac{mr^2}{J}\sqrt{\frac{2}{m}(E-V_{\mathrm{eff}}(r))}\\ \Rightarrow\phi&=\phi_0+\int^r\frac{J}{r^2\sqrt{2m(E-V_{\mathrm{eff}}(r))}}\mathrm{d}r\end{aligned}$$

从中可以知道，当粒子的径矢从 $r_{\min}\to r_{\max}\to r_{\min}$ 周期性变化时，其转过的角度（进动角）为

$$\Delta\phi=2\int_{r_{\min}}^{r_{\max}}\frac{J/r^2}{\sqrt{2m(E-V_{\mathrm{eff}}(r))}}\mathrm{d}r$$

有心力场中，粒子的轨道关于力心到近心点的直线对称。

开普勒问题

吸引力

- 此时有效势能为 $V_{\mathrm{eff}}=-\dfrac{k}{r}+\dfrac{J^2}{2mr^2}$，那么代入积分得到

$$\phi=\phi_0+\int^r\frac{J/r^2}{\sqrt{2m}(E+\frac{k}{r}-\frac{J^2}{2mr^2})}\mathrm{d}r$$

换元 $u=\dfrac{1}{r}$，那么 $\mathrm{d}u=-\dfrac{1}{r^2}\mathrm{d}r$

$$\phi=\phi_0-\int^{\frac{1}{r}}\frac{J}{\sqrt{2m(E+ku-(J^2/2m)u^2)}}\mathrm{d}u$$

因为积分

$$\begin{aligned}a>0,\int\frac{1}{\sqrt{-a^2x^2+bx+c}}\mathrm{d}x&=\frac{1}{a}\arcsin\frac{ax-\frac{b}{2a}}{\sqrt{c+\frac{b^2}{4a^2}}}+C\\ \text{or}&=\frac{-1}{a}\arccos\frac{ax-\frac{b}{2a}}{\sqrt{c+\frac{b^2}{4a^2}}}+C\end{aligned}$$

所以上面这个积分中 $a^2=1\Rightarrow a=1,b=2mk/J^2,c=2mE/J^2$，那么积分结果为

$$\phi=\phi_0+\arccos\frac{1/r-mk/J^2}{\sqrt{2mE/J^2+m^2k^2/J^4}}$$

于是得到

$$\phi=\phi_0+\arccos\left[\frac{1}{\mathrm{e}}\left(\frac{p}{r}-1\right)\right]$$

其中 e 为离心率

$$\mathrm{e}=\sqrt{\frac{2EJ^2}{mk^2}+1},\quad p=\frac{J^2}{mk}$$

所以有

$$\frac{p}{r}=1+\mathrm{e}\cos(\phi-\phi_0)$$

$E>0=0<0$ 分别是双曲线，抛物线，椭圆。以力心到近日点的方向为极轴，那么简化为

$$\frac{p}{r}=1+\mathrm{e}\cos\phi$$

还可进一步求出椭圆轨道的半长轴，半短轴，以及证明开普勒第三定律 (椭圆面积除以掠面速度得到周期)

排斥力

. 此时等效势能为

$$V_{\text{eff}}=\frac{k}{r}+\frac{J^2}{2mr^2},k>0$$

一样解出轨道为

$$\frac{p}{r}=-1+\mathrm{e}\cos\phi$$

其中

$$\mathrm{e}=\sqrt{\frac{2EJ^2}{mk^2}+1},\quad p=\frac{J^2}{mk}$$

因为 $E>0$ 恒成立，所以始终是双曲线轨道。

拉普拉斯-龙格-楞次矢量

. 定义为

$$\boldsymbol{R}=\mathbf{v}\times\boldsymbol{J}-\frac{k\boldsymbol{x}}{r}$$

证明如下

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\mathbf{v}\times\boldsymbol{J})&=\dot{\mathbf{v}}\times\boldsymbol{J}\\
&=-\frac{k}{m}\frac{\boldsymbol{x}}{r^3}\times\boldsymbol{J}=-k\frac{\boldsymbol{x}}{r^3}\times(\boldsymbol{x}\times\dot{\boldsymbol{x}})\\
&=-\frac{k}{r^3}[\boldsymbol{x}(\boldsymbol{x}\cdot\dot{\boldsymbol{x}})-r^2\dot{\boldsymbol{x}}]\\
&=-\frac{k}{r^3}[\boldsymbol{x}r\dot{r}-r^2\dot{\boldsymbol{x}}]\\
&=-k\left(\frac{\boldsymbol{x}\dot{r}}{r^2}-\frac{\dot{\boldsymbol{x}}}{r}\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(k\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)
\end{aligned}$$

即证是一个守恒量。可以证明，龙格-楞次矢量的大小是

$$|\boldsymbol{R}| = k\mathrm{e}$$

这是因为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}^2 &= \left(\mathbf{v}\times\boldsymbol{J} - k\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)^2 \\ &= (\mathbf{v}\times\boldsymbol{J})^2 + k^2 - 2\frac{k}{r}\boldsymbol{x}\cdot(\mathbf{v}\times\boldsymbol{J}) \\ &= m^2k^2 + 2mEJ^2\end{aligned}$$

详细证明过程:

$$\text{记}\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}, \qquad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}, \qquad r = |\boldsymbol{x}|,$$

$$\text{定义 } \textit{Runge–Lenz} \text{ 向量} \qquad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - mk\frac{\boldsymbol{x}}{r}.$$

我们计算 $|\boldsymbol{A}|^2 = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}$：

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{A}|^2 &= |\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}|^2 - 2mk\frac{(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{x}}{r} + m^2k^2\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}}{r^2} \\ &= |\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}|^2 - 2mk\frac{(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{x}}{r} + m^2k^2.\end{aligned}$$

下面分别简化两项。首先应用向量恒等式

$$|\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{w}|^2 = |\boldsymbol{u}|^2|\boldsymbol{w}|^2 - (\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{w})^2,$$

于 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{L}$，得到

$$|\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}|^2 = p^2L^2 - (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{L})^2.$$

但 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{L} = \boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x} = 0$，故

$$|\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}|^2 = p^2L^2.$$

再计算混合项。利用标量三重乘积恒等式

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{L} = L^2.$$

（因为 $\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p} = \boldsymbol{L}$。）

将这些代入 $|\boldsymbol{A}|^2$ 的表达式，得到

$$|\boldsymbol{A}|^2 = p^2L^2 - 2mk\frac{L^2}{r} + m^2k^2 = L^2\left(p^2 - \frac{2mk}{r}\right) + m^2k^2.$$

最后用能量守恒关系把 p^2 消去:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{k}{r} \quad\Longrightarrow\quad p^2 = 2m\left(E + \frac{k}{r}\right).$$

因此

$$p^2 - \frac{2mk}{r} = 2mE.$$

代回上式得

$$\boxed{|\boldsymbol{A}|^2 = m^2k^2 + 2mEL^2}.$$

从而可以定义轨道离心率 e:

$$\mathrm{e} = \frac{|\boldsymbol{A}|}{mk},$$

并得到常用的关系

$$\mathrm{e}^2 = 1 + \frac{2EL^2}{mk^2}.$$

（当 $E<0$ 时 $0 \le \mathrm{e} < 1$ 对应椭圆；$E=0$ 时 $\mathrm{e}=1$ 抛物线；$E>0$ 时 $\mathrm{e}>1$ 双曲线。）

备注. 若你使用的是向量 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{J} - \dfrac{k\boldsymbol{x}}{r}$（即不含动量因子 m），则 $\boldsymbol{A} = m\boldsymbol{R}$，从上式可得等价形式

$$m^2|\boldsymbol{R}|^2 = m^2k^2 + 2mEJ^2,$$

或写成

$$|\boldsymbol{R}|^2 = k^2 + \frac{2E}{m}J^2,$$

两者等价，只是记号上有因子 m 的不同。

事实上 $\boldsymbol{R}$ 始终从力心指向近日点，注意到

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{R} = r|\boldsymbol{R}|\cos\phi$$

又因为

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{R} &= \boldsymbol{x} \cdot (\mathbf{v} \times \boldsymbol{J} - k\boldsymbol{x}/r) \\
&= \boldsymbol{J} \cdot (\boldsymbol{x} \times \mathbf{v}) - kr \\
&= \frac{J^2}{m} - kr
\end{aligned}$$

于是可知

$$\frac{J^2}{m} - kr = r|\boldsymbol{R}|\cos\phi \Rightarrow \frac{p}{r} = 1 + \mathrm{e}\cos\phi$$

可以看出确实如此。

散射

- 散射也有能量守恒和角动量守恒，不妨令瞄准距离为 b，初速度为 v_0，那么

$$E = \frac{1}{2}m\mathrm{v}_0^2, \quad J = m\mathrm{v}_0 b$$

因为中心力场中粒子的运动轨迹关于力心到近日点的直线对称，若记轨迹的渐近线与力心与近日点的连线夹角为 ϕ_0，那么可知散射角为

$$\theta = \pi - 2\phi_0$$

显然 ϕ_0 可以由

$$\begin{aligned}
\phi_0 &= \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{J/r^2}{\sqrt{2m(E - V_{\text{eff}})}}\mathrm{d}r \\
&= \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{m\mathrm{v}_0 b/r^2}{\sqrt{2m(\frac{1}{2}m\mathrm{v}_0^2 - V(r) - J^2/2mr^2)}}\mathrm{d}r \\
&= \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{b/r^2\mathrm{d}r}{\sqrt{1 - 2V(r)/(m\mathrm{v}_0^2) - b^2/r^2}}
\end{aligned}$$

微分散射截面

. 假设 $[b,b+\mathrm{d}b]$ 入射的粒子被散射到 θ 处的立体角 $\mathrm{d}\Omega=2\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta$ 之间，那么可知微分散射截面为

$$\mathrm{d}\sigma=\frac{\mathrm{d}N}{I}=\frac{2\pi b\mathrm{d}b\cdot I}{I}=2\pi b\mathrm{d}b=2\pi b\left|\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta}\right|\mathrm{d}\theta$$

所以

$$\boxed{\mathrm{d}\sigma=\frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta}\right|\mathrm{d}\Omega}$$

卢瑟福公式

. 此时

$$V(r)=\frac{k}{r},k>0$$

那么，积分

$$\begin{aligned}\phi_0&=\int_{r_{\min}}^{\infty}\frac{b/r^2\mathrm{d}r}{\sqrt{1-2k/(m\mathrm{v}_0^2r)-b^2/r^2}}\\&=\int_0^{1/r_{\min}}\frac{b\mathrm{d}u}{\sqrt{1-(2k/m\mathrm{v}_0^2)u-b^2u^2}}\\&=\int_0^{1/r_{\min}}\frac{\mathrm{d}u}{\sqrt{1/b^2-(2k/m\mathrm{v}_0^2b^2)u-u^2}}\end{aligned}$$

式中作换元 $u=1/t$，积分得到

$$\phi_0=\arccos\frac{\frac{k}{m\mathrm{v}_0^2b}}{\sqrt{1+\left(\frac{k}{m\mathrm{v}_0^2b}\right)^2}}$$

于是可得

$$(\tan\phi)^{-1}=\frac{k}{m\mathrm{v}_0^2b}\Rightarrow b=\frac{k}{m\mathrm{v}_0^2}\tan\phi$$

根据角度关系可知

$$b^2=\left(\frac{k}{m\mathrm{v}_0^2}\right)^2\cot^2\frac{\theta}{2}$$

于是可知

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\sigma&=\frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta}\right|\mathrm{d}\Omega\\&=\boxed{\left(\frac{k}{2m\mathrm{v}_0^2}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\mathrm{d}\Omega}\end{aligned}$$