Hamilton-Jacobi Equation

Probfia

Dec. 20, 2018

1 哈密顿-雅可比方程的回顾

以积分上限和时间作为自变量的作用量 S(q,t) 满足方程

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(p, q, t) = 0 \tag{1}$$

和

$$\frac{\partial S}{\partial q} = p \tag{2}$$

我们约定¹,在不特别指明下(上)标时,p 和 q 都表征含 s 维矢量,并约定函数 f 对一个矢量 v 求偏导的结果为以 $\frac{\partial f}{\partial v_i}$ 为第 i 个分量的矢量。因此,(2) 包含 s 个方程,其中的第 i 个方程为

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i \tag{3}$$

将(2)带入(1),就得到了所谓的哈密顿-雅可比方程

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(\frac{\partial S}{\partial a}, q, t) = 0 \tag{4}$$

(4) 为一阶偏微分方程,中含有 s+1 个独立变量,因此通解含有 s+1 个任意常数。但含 S 的项并仅以一阶偏导数的形式出现,因此,若 f(q,t) 为 (4) 的解,那么,相差一个常数的

$$S' = S(q, t) + C \tag{5}$$

¹这个约定大概是我自己编的,它的意义在于,推导多自由度系统的力学规律时,通常可以当成只有一个自由度来推导,最后用这个约定直接外推到多个自由度的情况。

2 分离变量 2

也是 (4) 的解。那么,我们仅仅对包含 s 个任意常数的 S(q,t) 感兴趣。设 这 s 个常数为 α_i ,将它们看成变量,记

$$f(q, t, \alpha) \equiv S(q, t) \tag{6}$$

并将 f 看成一个正则变换的生成函数,视 α 为变换后的广义动量。正则变换后的哈密顿函数为

$$H' = H + \frac{\partial f}{\partial t} \tag{7}$$

由于 f 满足 (1), 恰好有

$$H' \equiv 0 \tag{8}$$

那么,根据正则方程,变换后的广义动量 α 和广义动量 β 都为常数!于是我们就找到了 f 中缺失的 s 个常数,他们正是 f 表征的正则变换对应的正则动量。并且, α 和 β 正好给出系统的 2s 个运动积分。

2 分离变量

解哈密顿-雅可比方程的一个通用技巧就是分离变量,它的思想是这样的:将(4)写成如下形式:

$$\Phi(\frac{\partial S}{\partial t}, \frac{\partial S}{\partial q}, q, t) \equiv \frac{\partial S}{\partial t} + H(\frac{\partial S}{\partial q}, q, t) = 0$$
(9)

可以发现,时间 t 和坐标 q 似乎拥有某种对等的关系,因此我们不如将他们合在一起,记为 $\xi = (t,q)$,容易看出 ξ 有 s+1 个分量(s 个坐标维度加一个时间维度),约定 ξ_i 中的 i 取遍 $0,1,2,\cdots,s$,但 ξ_0 不一定代指时间分量²。总之,在这种约定下,哈密顿-雅可比方程可以写成下面这个非常简洁的形式:

$$\Phi(\frac{\partial S}{\partial \xi}, \xi) = 0 \tag{10}$$

不妨把这里的 Φ 称为体系的 Phimiltonian³(或许中文叫 Φ 密顿函数?)。我们发现,HJ 方程就是说,体系的 Φ 密顿函数恒等于 0!

分离变量的关键思想是, ξ 的某个分量(不妨设为 ξ_0)在 (10) 中仅以某种组合 $\varphi_0(\frac{\partial S}{\partial \xi_0}, \xi_0)$ 的形式出现(例如 $\Phi = (\frac{\partial S}{\partial t} + t) \frac{\partial S}{\partial q} + aq^2$ 中,时间 t

²这个记号是我自己编的。

³这个名字也是我自己编的,不过灵感来源于二班的讲义中的咔密顿函数。

2 分离变量 3

对应的 $\varphi_t = \frac{\partial S}{\partial t} + t$,坐标 q 则不可分离)。那么,(10) 可以写为

$$\Phi(\frac{\partial S}{\partial \xi_i}, \xi_i; \varphi_0(\frac{\partial S}{\partial \xi_0}, \xi_0)) = 0, i = 1, 2, \cdots, s$$
(11)

我们寻求以下形式的分量变量解4:

$$S(\xi) = S_0(\xi_0) + S^0(\xi_i) , i = 1, 2, \cdots, s$$
 (12)

于是有

$$\Phi(\frac{\partial S^0(\xi_i)}{\partial \xi_i}, \xi_i; \varphi_0(\frac{\partial S_0}{\partial \xi_0}, \xi_0)) = 0, i = 1, 2, \dots, s$$
(13)

现在让我们做这样的讨论: 固定各 ξ_i 不变, 改变 ξ_0 的值, Φ 却不发生变化, 始终等于 0, 因此, 必须有

$$\varphi_0(\frac{\partial S_0}{\partial \xi_0}, \xi_0) = C_0 \tag{14}$$

为一个常量。这一点确立后,就可以立刻推关于出剩下的 s 个 ξ 分量的未知函数 $S^0(\xi)$ 满足的方程

$$\Phi(\frac{\partial S^0(\xi)}{\partial \xi}, \xi; C_0) = 0, i = 1, 2, \cdots, s$$
(15)

假如下一个分量 ξ_1 在 Φ 密顿函数中也以 $\varphi_1(\frac{\partial S}{\partial \xi_1}, \xi_1)$ 的形式出现,则可以继续设 $S^0(\xi) = S^{01}(\xi_i) + S_1(\xi_1)$ $, i = 2, 3, \cdots, s$,从而将 Φ 密顿函数写成

$$\Phi(\frac{\partial S^{01}(\xi_i)}{\partial \xi_i}, \xi_i; \varphi_1(\frac{\partial S_1}{\partial \xi_1}, \xi_1); C_0) = 0, i = 2, 3, \dots, s$$
(16)

那么定有

$$\varphi_1(\frac{\partial S_1}{\partial \xi_1}, \xi_1) = C_1 \tag{17}$$

$$\Phi(\frac{\partial S^{01}(\xi_i)}{\partial \xi_i}, \xi_i; C_0, C_1) = 0 , i = 2, 3, \dots, s$$
(18)

假设 ξ 的前 s 个分量都在 Φ 密顿函数中以组合 $\varphi_i(\frac{\partial S}{\partial \xi_i}, \xi_i)$ 的形式出现的话,上述操作就可以一直进行下去,直到将 ξ_{s-1} 按照 $S^{0,1,\cdots,s-2}(\xi_{s-1}, \xi_s)$ =

 $^{^4}$ 我们以上标表示 S 中已经被剥离的变量。

 $S^{0,1,\cdots,s-1}(\xi_s)+S_{s-1}(\xi_{s-1})$ 的形式成功分离,不妨记 $S^{0,1,\cdots,s-1}(\xi_s)=S_s(\xi_s)$ 这时,最后一个剩余的坐标 ξ_s 满足方程

$$\Phi(\frac{\partial S_s(\xi_s)}{\partial \xi_s}, \xi_s; C_0, C_1, \cdots, C_{s-1}) = 0$$
(19)

于是我们看到, ξ_s 原本能不能从 Φ 密顿函数里分离已经不重要了。我们一定从这个方程解出的 S_s ,但它将不含独立的任意常数 5 ,而是依赖于其他 s 个常数 C_0,C_1,\cdots,C_{s-1} ,这与之前讨论的一致。因此,该体系的 HJ 方程的解就为

$$S(\xi) = S_0(\xi_0) + S_1(\xi_1) + \dots + S_s(\xi_s)$$
(20)

或者,更加准确地,将每个 S_i 包含的任意常数纳入考虑

$$S(\xi; C_0, C_1, \dots, C_{s-1})$$

$$= S_0(\xi_0; C_0) + S_1(\xi_1; C_1) + \dots + S_{s-1}(\xi_{s-1}; C_{s-1}) + S_s(\xi_s; C_0, C_1, \dots, C_{s-1})$$
(21)

3 分离变量解告诉我们什么

我们发现,我们已经成功解出含有 s 个独立常数的 $S(\xi) \equiv S(t,q,C)$,但从第一节的讨论可知,S 事实上也可以表征一个正则变换,它使变换后的哈密顿函数 6 为 0,使得变换后的坐标和动量都守恒。那么,不如就钦定这 s 个常数 C_0,C_1,\cdots,C_{s-1} 为变换后的动量 7 ,而其对应的坐标由正则变换公式

$$B_i = \frac{\partial f}{\partial C_i} \tag{22}$$

给出,它们也是守恒量。将已经得到的分离变量解(21)带入(22)得到

$$\frac{\partial S_i(\xi_i; C_i)}{\partial C_i} + \frac{\partial S_s(\xi_s; C_0, C_1, \cdots, C_i, \cdots, C_{s-1})}{\partial C_i} = B_i$$
 (23)

上式第一项为 ξ_i 的函数,第二项为 ξ_s 的函数,于是,我们就可以将每个 ξ_i 都用 ξ_s 连同 s+1 个常数表达出来!

$$\xi_i = \xi_i(\xi_s; C_0, C_1, \dots, C_{s-1}; B_i), i = 0, 1, 2, \dots, s - 1$$
 (24)

 $^{^{5}}$ 会含一个积分常数,但它的作用在于使得最后求出的 S 相差一个常数,我们已经谈到,我们对这种常数不感兴趣。

 $^{^{6}}$ 其实变换后的哈密顿函数就是 Φ 密顿函数。

⁷其实你钦定它们是坐标也可以,因为哈密顿力学里坐标和动量本来就没太大区别。

上式的神奇之处在于,它事实上可以被看成一个参数方程,随着 ξ_s 的变动,其余的 ξ_i 一同变动,在时空中划出一条曲线!(如果你不能理解这一点,考虑三维空间 $\{x,y,z\}$,那么,方程组 y=y(x),z=z(x) 表征的就是一条曲线。)

假如 $\xi_s = t$,那么 (24) 给出各个坐标的时间演化 $q_i \equiv \xi_{i-1}(t;C)$;假如系统的自由度 s=2,即质点的平面运动,并令 $(\xi_0,\xi_1,\xi_2)=(t,x,y)$,那么 (24) 在 i=1 时给出

$$x(y) = x(y; C_0, C_1; B_1)$$
(25)

它正好是质点在这个平面内运动的轨迹方程! 当然,上述讨论也可以自然推广到高维空间,因此我们发现, HJ 方程可以非常方便地求解粒子的空间轨迹。

4 循环坐标和时间的分离变量

假设体系的哈密顿函数不显含 ξ_i ,那么,对应的 Φ 密顿函数也不显含 ξ_i ,因此,HJ 方程中与 ξ_i 有关的项只剩下 $\varphi_i = \frac{\partial S}{\partial \xi_i}$,带入 (14) 就得到

$$\frac{dS_i}{d\xi_i} = C_i \tag{26}$$

即

$$S_i(\xi_i) = C_i \xi_i \tag{27}$$

假如 ξ_i 不是时间,那么从前面的讨论可以得知, C_i 就是 ξ_i 的广义动量。

所有的循环坐标都可以这样分离变量,并且方便起见,循环坐标的分离 应该优先进行(避免它成为最后一个 ξ ,否则上面的讨论就失效了)。

一个特别的情况是保守体系,此时的哈密顿函数不显含时间,于是 Phi 密顿函数也不显含时间,尝试将 HJ 方程的解 S(q,t) 对时间 t 的分离变量为以下形式:

$$S(q,t) = S_t(t) + W(q) \tag{28}$$

根据 (27) 得知

$$S_t(t) = C_t t \tag{29}$$

有必要讨论常数 C_t 的物理意义: 将分离变量解带入 Phi 密顿函数的表达式,得到

$$\frac{\partial C_t t}{\partial t} + H = 0 \tag{30}$$

即

$$H \equiv -C_t \tag{31}$$

这说明,保守体系的哈密顿函数守恒 (废话),我们知道这个守恒量就是能量 E,于是

$$C_t = -E \tag{32}$$

这在某种意义上说明,在经典力学的框架下,时间对应的广义动量事实上是-E。

5 例子: 带电粒子在偶极子场中的运动

我们来求解一个带电量为 e 的粒子在偶极子场 $u(r,\theta) = \frac{p\cos\theta}{r^2}$ 中的运动轨迹。简单起见,我们将粒子的轨迹限定在平面内,并记粒子的势能为

$$V(r,\theta) = eu \equiv \frac{\alpha \cos \theta}{r^2}$$
 (33)

于是, 粒子的哈密顿函数为

$$H = \frac{1}{2m}(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}) + \frac{\alpha \cos \theta}{r^2}$$
 (34)

对于的 Phi 密顿函数就是

$$\Phi = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right] + \frac{\alpha \cos \theta}{r^2} = 0 \tag{35}$$

为了分离变量,将其写成一个更加紧凑的形式

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\frac{\partial S}{\partial r})^2 + \frac{1}{2mr^2} [(\frac{\partial S}{\partial \theta})^2 + 2m\alpha \cos \theta] = 0$$
 (36)

很明显,第一个可以分离的变量是时间 t,记 $S(t,r,\theta)=S_t(t)+W(r,\theta)=-Et+W(r,\theta)$,就有

$$-E + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{2mr^2} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)^2 + 2m\alpha \cos \theta \right] = 0$$
 (37)

而 θ 在这里又仅以组合 $(\frac{\partial W}{\partial \theta})^2 + 2m\alpha\cos\theta$ 出现了,于是根据分离变量法的原则,该组合必定等于一个常数 J

$$\left(\frac{dlW_{\theta}}{d\theta}\right)^2 + 2m\alpha\cos\theta = J\tag{38}$$

6 注记 7

它的解 (原函数不存在) 为

$$W_{\theta}(\theta) = \int \sqrt{J - 2m\alpha \cos \theta} d\theta \tag{39}$$

最后剩下变量 r, 它满足

$$-E + \frac{J}{2mr^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{dW_r(r)}{dr}\right)^2 = 0 \tag{40}$$

解得(感谢 Mathematica, 其实不需要把它积出来)

$$W_r(r) = \int \sqrt{2mE - \frac{J}{r^2}} dr$$

$$= \sqrt{2mEr^2 - J} + \sqrt{J} \arctan \frac{\sqrt{J}}{\sqrt{2mEr^2 - J}}$$
(41)

于是,对于这个粒子, HJ 方程的解就是

$$S = -Et + \int \sqrt{J - 2m\alpha \cos \theta} d\theta + \sqrt{2mEr^2 - J} + \sqrt{J} \arctan \frac{\sqrt{J}}{\sqrt{2mEr^2 - J}}$$
(42)

由 (25), 这里 $x = \theta$, y = r, 于是

$$B_{\theta} = \frac{\partial S}{\partial J} \tag{43}$$

求导后再从上式中反解出 θ ,就得到了 $\theta(r)$ 的表达式。结果过于冗长,所以就不写了。不过我们已经看到,HJ 方程确实能够给出一个二维空间上粒子的轨迹方程。并且我们看到了一个值得注意的点:我们处理的最后一个变量在 Φ 密顿函数中不需要具有可分离变量的形式,这在之前已经讨论过了。

6 注记

这个讲稿本来是抄朗道,但后来发现了一点新东西和新理解,主要在于将坐标和时间合写在矢量 ξ 里可以让我们对 HJ 方程的数学结构有更深刻的认识,也表明了在经典力学中其实已经出现了时间空间对等的雏形。很多记号是我走路的时候想出来的,所以可能有部分不妥。

值得提的一点是,若一个势的 HJ 方程可以完全分离变量,则这个势对应的薛定谔方程也可以分离变量。在 HJ 方程中我们用加法分离变量,而在薛定谔方程中我们用乘法(如学过的其他数理方程一样)分离变量,这其实是因为,S 和波函数 ψ 的关系大概就是 $S=\hbar\ln\psi$,对数将一个乘法变成了加法。