

Formalisms of Classical Mechanics

PNS Lecture Note

Lecturer: 22057 윤명

Date: 21 June 2023

Contents

I	LAGRANGIAN FORMALISM	1
1	The Lagrangian	1
1.1	Calculus of Variations	1
1.2	Principle of Least Action	2
1.3	Lagrangian in Various Systems	3
1.4	Coupled Oscillation	4
2	Constraints and Lagrange Multipliers	5
2.1	Holonomic Constraints	5
2.2	Lagrange Multipliers	5
3	Symmetries and Noether's Theorem	5
II	HAMILTONIAN FORMALISM	8
4	The Hamiltonian	8
4.1	Legendre Transform	8
4.2	Hamilton's Canonical Equations	9
4.3	Adiabatic Invariants	10
5	Liouville Theorem	11
5.1	Jacobian	11
5.2	Liouville's Theorem	12
5.3	Liouville's Equation	14
5.4	Poincaré Recurrence Theorem	14
6	Canonical Transformations	15
6.1	Poisson Brackets	15
6.2	Further Discussion: Laplace–Runge–Lenz Vector	16
6.3	Canonical Transformation	17
6.4	Generating Functions	18
6.5	Symplectic Condition	19
6.6	Infinitesimal Canonical Transformations	20
7	Hamilton–Jacobi Theory and Canonical Variables	20
7.1	Hamilton–Jacobi Equation	20
7.2	Action-Angle Variables	22
7.3	Further Discussion: Bohr–Sommerfeld Quantisation	23

Prerequisites

Integration by Substitution

$$\int uv' dt = uv - \int u' v dt$$

Einstein Summation Convention

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = (v_i \mathbf{e}_i) \cdot (w_j \mathbf{e}_j) = \delta_{ij} v_i w_j = v_i w_i$$

$$\mathbf{v} \times \mathbf{w} = (v_i \mathbf{e}_i) \times (w_j \mathbf{e}_j) = \varepsilon_{ijk} v_i w_j \mathbf{e}_k$$

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}$$

$$f(x_1, \dots, x_n) = f(\mathbf{x})$$

$$\frac{df}{d\mathbf{x}} = \frac{df}{dx_i} \mathbf{e}_i$$

Partial Derivatives

$$\partial_i f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n) = \frac{\partial f}{\partial x_i} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(x_1, \dots, x_i + \epsilon, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\epsilon}$$

Total Differentials

$$df(x_1, \dots, x_n) = \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i$$

Chain Rule

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt}, \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t}$$

Triple Product Rule

If three variables x , y and z are related as $\psi(x, y, z) = \text{const.}$, then x , y and z can be treated as a function $x(y, z)$, $y(z, x)$, $z(x, y)$. Thus, the relation

$$\begin{aligned} dx &= \frac{\partial x}{\partial y} dy + \frac{\partial x}{\partial z} dz \\ &= \frac{\partial x}{\partial y} \left(\frac{\partial y}{\partial z} dz + \frac{\partial y}{\partial x} dx \right) + \frac{\partial x}{\partial z} dz \end{aligned}$$

is valid. Since z remains constant in both cases $\partial x / \partial y$ and $\partial x / \partial y$, the expression reduces to the case of univariate calculus, i.e., $(\partial x / \partial y)(\partial y / \partial x) = dx / dy \, dy / dx = 1$. Thus the coefficient of dx is equal to 0, one obtains

$$\frac{\partial x}{\partial z} + \frac{\partial x}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial z} = 0.$$

Or, equivalently,

$$\frac{\partial x}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} = -1.$$

Part I

LAGRANGIAN FORMALISM

“NEWTON WAS THE GREATEST GENIUS THAT EVER EXISTED, AND THE MOST FORTUNATE, FOR WE CANNOT FIND MORE THAN ONCE A SYSTEM OF THE WORLD TO ESTABLISH.” — Joseph-Louis Lagrange

1 The Lagrangian

1.1 Calculus of Variations

$t - \mathbf{x}$ ($\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$) 공간 위의 곡선의 집합을 정의역으로 하는 범함수(functional) S 를

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t) dt \quad (1)$$

와 같이 정의하자.

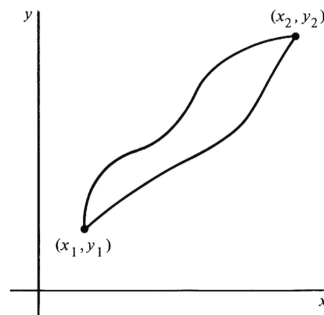


Figure 1: $\delta x_i(t_0) = \delta x_i(t_1) = 0$ 인 경로의 변화

$\delta x_i(t_0) = \delta x_i(t_1) = 0$ 을 만족하는 작은 경로의 변화 $\delta \mathbf{x}(t)$ 를 고려하자(fig. 1):

$$x_i'(t) = x_i(t) + \delta x_i(t).$$

연쇄 법칙(chain rule)을 적용하면, 작은 경로의 변화 $\delta \mathbf{x}$ 하에 S 의 변화는 다음과 같이 쓸

수 있다:

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_{t_0}^{t_1} \delta L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t) dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} \delta x_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \delta \dot{x}_i \right) dt.\end{aligned}$$

$\delta \dot{x}_i = (d/dt)\delta x_i$ 임을 고려하여 두 번째 항을 부분적분하면,

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \delta x_i dt + \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \delta x_i \right|_{t_0}^{t_1} \quad (2)$$

을 얻는다.

Fundamental Lemma of Calculus of Variations 구간 (t_0, t_1) 에서 연속인 함수 $f(t)$ 가 모든 연속함수 $h(t)$ 에 대하여

$$\int_{t_0}^{t_1} f(t)h(t)dt = 0$$

을 만족한다면, $f(t)$ 는 항등적으로 0이다.

변분법의 기본 보조정리와 경로 변화의 경계조건 $\delta x_i(t_0) = \delta x_i(t_1) = 0$ 로부터, S 가 극값을 취할 조건인 Euler-Lagrange 방정식을 얻는다:

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0. \quad (3)$$

1.2 Principle of Least Action

Hamilton의 최소 작용의 원리란,

$$S \equiv \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt$$

꼴의 범함수 S 에 대하여 자연계가 언제나 S 가 극값을 가지는 경로를 택한다는 원리이다. 여기서 운동의 궤적을 취해 실수를 내놓는 범함수 S 를 작용(action)이라 한다. 운동방정식을 얻어내기 위해 이러한 방식을 채택하면, 더 이상 물리계를 해석할 때 복잡한 그림이나 기계적인 추론을 도입할 필요가 없다. 특정한 계에 대하여, Hamilton의 최소 작용의 원리가 그 계의 운동방정식을 만들어내도록 하는 함수 L 을 lagrangian이라 한다.

작용은 극값을 가질 조건만 유지한다면 무엇이든 선택할 수 있으므로, 한 계를 설명하는 lagrangian은 유일하지 않다. 이를테면, 아래의 두 변환은 운동 법칙을 바꾸지 않는다:

$$L \mapsto \alpha L, \quad L \mapsto L + \dot{f}.$$

1.3 Lagrangian in Various Systems

보존력만 작용하는 관성계에서, lagrangian은

$$L = T - U \quad (4)$$

로 주어진다. 여기서 T 와 U 는 각각 운동에너지와 퍼텐셜에너지이다. Cartesian 좌표계에서,

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \frac{1}{2}m\dot{x}_i^2 + U(x)$$

를 Euler–Lagrange 방정식에 대입하면, Newton의 운동방정식

$$m\ddot{x}_i = -\frac{\partial U}{\partial x_i}$$

이 얻어짐을 검증할 수 있다. eq. (4)은 일반적인 lagrangian의 정의가 아님에 유의하라. 보존력만 작용하는 관성계라는 특정한 물리계를 기술하기 위한 lagrangian일 뿐이다. Lagrangian formalism의 의미는 ‘적당한 lagrangian을 선택하여, 최소 작용의 원리가 기술하고자 하는 물리계의 운동방정식을 내놓도록 하자’는 데에 있다.

EXERCISE. 2체 계의 lagrangian은 두 입자의 질량중심 \mathbf{r}_{cm} 과 상대 위치 $\mathbf{r}_{21} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ 에 대하여 언제나 $L = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{\mathbf{r}}_{\text{cm}}^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{r}}_{21}^2 - U(|\mathbf{r}_{21}|)$ 의 꼴로 쓸 수 있음을 설명하라. 이 결과는 물리적으로 어떤 의미를 갖는가?

EXERCISE. 관성계 R 에 대하여 상대적으로 속도 $\mathbf{V}(t)$, 각속도 $\boldsymbol{\Omega}(t)$ 로 운동하는 좌표계 R' 에서 질량 m 인 입자의 lagrangian을 얻고, 운동방정식에 나타나는 각 항이 물리적으로 어떤 의미를 가지는지 말하라.

EXERCISE. 스칼라퍼텐셜 ϕ 와 벡터퍼텐셜 \mathbf{A} 에 대하여, 전하 e 인 입자의 lagrangian은 $L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 - e(\phi - \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A})$ 로 주어진다. 로렌츠 힘 $m\ddot{\mathbf{r}} = e(\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B})$ 를 유도하라. 또, $\phi \mapsto \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t}$, $\mathbf{A} \mapsto \mathbf{A} + \nabla \chi$ 로 정의되는 변환 하에 입자의 운동방정식이 불변임을 보이라.

Lagrangian을 다른 좌표의 함수로 쓸 수 있다면, 좌표 변환 후에도 Euler–Lagrange 방정식으로부터 운동방정식을 얻을 수 있다. 이는 Lagrange 역학의 큰 이점 중 하나이다. 어떤 좌표 q_i 가 Lagrangian에 명시적으로 등장하지 않을 때, 이 좌표를 순환 좌표(cyclic coordinate)라 한다.

EXERCISE. 순환 좌표 q_i 에 대하여, 켈레 운동량 $\partial L / \partial \dot{q}_i$ 는 보존량이 됨을 보이라.

1.4 Coupled Oscillation

운동방정식

$$M\ddot{\mathbf{q}} = -K\mathbf{q} \quad (5)$$

로 기술되는 자유도 n 의 진동계를 상정하자. M 과 K 는 모두 $n \times n$ 행렬이다. 일반적으로, 이는 coupling 되어있는 진동계를 나타낸다. 하지만 만약 어떤 $\mathbf{q} = \boldsymbol{\eta}$ 에 대하여

$$\ddot{\boldsymbol{\eta}} = -\omega^2 \boldsymbol{\eta}$$

가 성립한다면, 이때 계의 일반화 좌표로 구성된 벡터 $\boldsymbol{\eta}$ 는 가상의 공간(일반화 좌표로 구성된 벡터가 존재하는 이 공간을 configuration space라고 부른다.) \mathbb{R}^n 위에서 각진동수 ω 의 단진동을 하게 될 것이다. 만일 이러한 조건을 만족하는 벡터 $\boldsymbol{\eta}$ 들로 configuration space의 기저를 정할 수 있다면, 이렇게 설계된 새로운 일반화 좌표에서는 진동이 uncoupled된다는 놀라운 결론을 얻는다. 이렇게 선택된 좌표를 normal coordinates라 부른다.

이러한 $\boldsymbol{\eta}$ 를 찾는 것은 어렵지 않다. eq. (5)에 $\boldsymbol{\eta}$ 를 대입하면

$$(K - \omega^2 M)\boldsymbol{\eta}(t) = 0$$

이 된다. 비자명한 $\boldsymbol{\eta}$ 는 ω^2 를 eigenvalue로 취하는 $M^{-1}K$ 의 eigenvector만이 허용된다는 것을 알 수 있다. 이러한 벡터가 표현하는 진동 mode를 normal mode라 부르고, 이때 양수 ω 를 eigenfrequency라 한다. 여기서 $M^{-1}K$ 는 두 대칭 행렬의 곱이므로 대각화 가능성이 보장된다. 즉, normal mode들은 일반해를 span한다.

EXERCISE. 운동방정식 $M\ddot{\mathbf{q}} = -K\mathbf{q}$ 의 lagrangian이 $L = \frac{1}{2}\dot{\mathbf{q}}^\top M \dot{\mathbf{q}} - \frac{1}{2}\mathbf{q}^\top K \mathbf{q} + \mathcal{O}(\mathbf{q}^2)$ 로 주어짐을 보이라.

EXERCISE. 길이 l , 질량 m 의 균일한 얇은 막대 2개를 이어붙여 만든 이중 진자의 normal mode를 평형점 근방에서 구하라.

2 Constraints and Lagrange Multipliers

2.1 Holonomic Constraints

홀로노믹 구속(holonomic constraint)이란,

$$f(\mathbf{q}, t) = 0 \quad (6)$$

의 꼴로 표현되는 구속을 말한다. 예를 들어, $x^2 + y^2 \geq 0$ 은 홀로노믹 구속이 아니다.

2.2 Lagrange Multipliers

$\int_{t=t_0}^{t=t_1} f(\mathbf{q}, t) dt$ 의 극값을 찾기 위한 Euler-Lagrange 방정식은

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

으로 주어진다. 따라서, 항 $f(\mathbf{q}, t)$ 의 추가는 기존의 Euler-Lagrangian을 유지한 채로 새로운 lagrangian을 고려할 수 있게 해준다. 즉, 기존의 lagrangian과 홀로노믹 구속조건 f_α 과 적당히 선형결합하면, 최소 작용의 원리가 운동방정식과 구속조건이 동시에 만족되는 것과 동치가 되도록 만들 수 있다:

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = L_0(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) + \lambda_\alpha f_\alpha(\mathbf{q}, t). \quad (7)$$

선형결합 과정에서 등장한 변수 λ_α 들은 새로운 변수이므로, 이에 대한 Euler-Lagrange 방정식을 함께 고려해야 하고, 따라서 홀로노믹 구속 조건의 수만큼 계의 자유도는 줄어든다. 이 변수 λ_α 를 Lagrange 승수(Lagrange multiplier)라고 부른다. eq. (7)의 lagrangian을 Euler-Lagrange 방정식에 대입하면, $\lambda_\alpha(\partial f_\alpha / \partial q_i)$ 항이 $-\partial U / \partial q_i$ 항에 더해지는 꼴이 된다. 즉, $\lambda_\alpha(\partial f_\alpha / \partial q_i)$ 은 물리적으로 구속력의 의미를 가진다.

EXERCISE. 연직 방향으로 세워진 포물면 $r^2 = az$ 내에서 운동하는 입자가 있다. 이 포물면이 입자에 작용하는 힘이 $(1 + 4r^2/a^2)^{-3/2}$ 에 비례함을 보이라.

3 Symmetries and Noether's Theorem

Noether 정리는 ‘물리계의 미분 가능한 대칭성(symmetry)에는 언제나 대응되는 보존 법칙(conservation law)이 존재한다’는 정리로, 이론물리학의 위대한 업적 중 하나이다. 잘 알려진 여러가지 보존 법칙들은 면밀히 살펴보면 많은 경우 계의 대칭성에 기인한다는 사실을

알 수 있다. 에너지와 운동량 보존, 나아가 전하량 보존 역시 모두 Noether 정리의 예시로 이해할 수 있다. 이 단락에서는 가장 단순하고 쉬운 형태의 Noether 정리를 살펴볼 것이다.

일반화 좌표 q_i 에 대하여, 다음과 같은 미분 가능한 좌표 변환을 고려하자:

$$\phi_s : q_i(t) \mapsto Q_i^s(t), \quad s \in \mathbb{R}. \quad (8)$$

단, $q_i^0 = q_i$ 이다. 만약 계의 lagrangian L 이

$$\frac{\partial}{\partial s} L(\mathbf{Q}(t), \dot{\mathbf{Q}}(t), t) = 0 \quad (9)$$

을 만족한다면, lagrangian이 이 변환에 대칭이라고 말한다. 만일 계에 어떤 대칭성이 존재한다면,

$$\begin{aligned} 0 &= \left. \frac{\partial L}{\partial s} \right|_{s=0} \\ &= \left. \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \frac{\partial Q_i}{\partial s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{Q}_i}{\partial s} \right) \right|_{s=0} \\ &= \left. \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \frac{\partial Q_i}{\partial s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial Q_i}{\partial s} \right) \right) \right|_{s=0} \\ &= \frac{d}{dt} \left(\left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0} \right). \end{aligned}$$

즉, 물리량

$$\left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0} \quad (10)$$

은 보존된다.

Homogeneity of Space

$$\mathbf{x}(t) \mapsto \mathbf{x}(t) + s\mathbf{n} \Leftrightarrow \phi_s : x_i(t) \mapsto x_i(t) + sn_i$$

에 lagrangian이 불변이라면 공간이 병진(translation)대칭성을 가진다고 한다. 공간의 병진대칭성에 대응되는 보존량으로,

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}}$$

을 얻는다. Cartesian 좌표계에서, 이는 선운동량이다.

Isotropy of Space

$$\mathbf{x}(t) \mapsto \mathbf{x}(t) + s\mathbf{n} \times \mathbf{x} \Leftrightarrow \phi_s : x_i(t) \mapsto x_i(t) + s\epsilon_{jki}n_jx_k$$

에 lagrangian이 불변이라면 공간이 회전(rotation)대칭성을 가진다고 한다. 공간의 회전(rotation)대칭성에 대응되는 보존량으로,

$$\epsilon_{jki} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} n_j x_k = \mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{x} \times \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right)$$

을 얻는다. Cartesian 좌표계에서, 이는 각운동량이다.

지금까지의 논의에서는, 서술의 간편함을 위해 ‘미분 가능한 변환’에서 시간에 대한 변환은 고려하지 않았다. 따라서 action의 불변이 lagrangian의 불변과 동치가 되고, 이로부터 Noether 정리를 유도하였다. 시간에 대한 변환을 고려하기 위해서는, 4차원에서의 부피 적분으로 action을 정의하고—이 경우 피적분함수(integrand)는 lagrangian density라 부른다.—, action의 변화를 직접 고려해야 한다. 이러한 방식으로 시간의 병진대칭성에 대응되는 보존량을 얻어낼 수 있고, 이 물리량을 에너지 또는 hamiltonian이라 칭한다:

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

Part II

HAMILTONIAN FORMALISM

“TO ADMIRE IS, TO ME, QUESTIONLESS, THE HIGHEST PLEASURE OF LIFE.” — Sir William Rowan Hamilton

4 The Hamiltonian

4.1 Legendre Transform

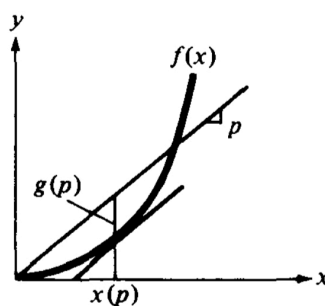


Figure 2: Legendre 변환

볼록함수 $f(x)$ 를 생각하자. 새로운 변수 p 에 대하여, 함수 $g(x, p) = px - f(x)$ 로 정의한다. 즉, $g(x, p)$ 는 기울기가 p 이고 원점을 지나는 직선과 $f(x)$ 의 함숫값 차이이다. 만약

$$p = \frac{\partial f}{\partial x}$$

의 제약 조건을 상정한다면, 전미분

$$dg = \frac{\partial g}{\partial x}dx + \frac{\partial g}{\partial p}dp = xdp$$

에 dx 가 등장하지 않으므로, g 는 p 만을 변수로 갖는 함수가 된다. 즉, $g(p)$ 란, f 의 접선의 기울기가 p 가 되는 x 값에 대하여, $px - f(x)$ 의 값을 함숫값으로 갖는 함수이다(fig. 2). 여기서 이러한 변환이 잘 정의되기 위해서는 f 가 정의역 전체에서 볼록(convex)하거나 오목(concave)해야 한다는 사실을 확인할 수 있다. 이때 g 가 f 를 x 에 대하여 Legendre 변환한 결과라고 말한다.

EXERCISE. 볼록함수의 Legendre 변환은 볼록함수임을 보이라.

Legendre 변환은 원래 함수를 정보의 손실 없이 다른 변수에 대한 함수로 바꾸는 변환이다. 정보의 손실이 없으므로 변환된 함수를 되돌릴 수 있고, 이는 공교롭게도 Legendre 변환을 다시 한 번 취해주면 된다.

EXERCISE. $g(p)$ 는, 고정된 p 값에 대한 $px - f(x)$ 의 최댓값이다. 이를 참고하여, $g(p)$ 를 Legendre 변환한 결과가 다시 $f(x)$ 가 됨을 $f(x)$ 의 그래프로부터 기하적으로 보이라.

4.2 Hamilton's Canonical Equations

Lagrangian $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ 를 \dot{q}_i 들에 대해 Legendre 변환해보자. 단일변수일 때의 직선 px 를 원뿔면으로 대체해서 생각한다면, 그 결과는 자연스럽게 q_i, t 와 새로운 변수 p_i 의 함수

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \equiv p_i \dot{q}_i - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) \quad (11)$$

가 됨을 알 수 있다. 여기서 $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$ 의 관계가 성립하고, 이 물리량 H 를 hamiltonian이라 한다. 여기서 좌표 q_i 와 켈레 운동량 p_i 로 구성된 좌표를 정준 좌표(canonical coordinates)라 부른다.

Hamiltonian을 Legendre transformation한 결과가 lagrangian이므로, 다음과 같이 최소 작용의 원리를 적용할 수 있다.

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta \int_{t_0}^{t_1} (p_i \dot{q}_i - H) dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left(p_i \delta \dot{q}_i + \dot{q}_i \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right) dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left(- \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i + \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i \right) dt + p_i \delta q_i \Big|_{t_0}^{t_1} \\ &= 0 \end{aligned}$$

q_i 와 p_i 가 모두 각각 독립변수이므로, 변분법의 기본 보조정리에 의해 Hamilton의 정준 방정식

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (12)$$

을 얻는다. 이는 $2n$ 개의 1계 미분방정식으로, n 개의 2계 미분방정식을 얻었던 lagrange 역학의 결과(Euler-Lagrange 방정식)와 대비된다.

EXERCISE. $H = p_i \dot{q}_i - L$ 의 양변에 전미분을 취하여 Hamilton 방정식을 유도하라. $\partial L/\partial t$ 와 $\partial H/\partial t$ 사이에는 어떤 관계가 있는가?

EXERCISE. 시간에 명시적으로 의존하지 않는 Hamiltonian은 보존량이 됨을 보이라.

Hamilton 역학에서 계의 상태(state)는 q_i 와 p_i 로 구성된 $2n$ 차원 공간 위의 한 점으로 나타낼 수 있다. 이 공간을 위상 공간(phase space)이라 하고, Hamilton 방정식에 따라 결정되는 상태(위상 공간 위의 한 점)의 변화를 흐름(flow)이라 부른다.

EXERCISE. 위상 공간에서 점의 궤적(위상 곡선, phase curve)은 교차하지 않음을 보이라. 즉, 한 점의 흐름을 시간에 대한 함수로 볼 때, 역함수를 정의할 수 있다.

4.3 Adiabatic Invariants

주기를 가진 1차원 계가 어떤 매개변수 λ 에 의존적으로 변화한다고 하자. λ 가 시간의 함수로 주어졌다면, 시간에 따른 계의 에너지 변화를

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial t} \quad (13)$$

로 얻을 수 있다.(물론, $\partial \lambda/\partial t$ 는 단순히 $\lambda'(t)$ 이다.) 여기서 λ 가 매우 천천히 변화하는 상황을 생각하자. 여기서 매우 천천히 변화한다는 것은, 계의 주기 T 에 대하여 $(d\lambda/dt)T \ll \lambda$ 라는 뜻이다. Hamilton 방정식 $\dot{q} = \partial H/\partial p$ 로부터, 주기를

$$T = \int_0^T dt = \oint \frac{dq}{\partial H/\partial p}$$

로 표현할 수 있으므로, eq. (13)의 양변을 한 주기에 대해 평균하면

$$\overline{\frac{dH}{dt}} = \overline{\frac{\partial H}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt}} = \frac{\oint \frac{\partial H/\partial \lambda dq}{\partial H/\partial p}}{\oint \frac{dq}{\partial H/\partial p}} \frac{d\lambda}{dt}$$

을 얻는다.

적분 구간은 $H(q, p, \lambda) = E$ 의 폐곡선임에 주목하자. 이 구간에서 E 는 상수로 간주할 수 있다. 주어진 q 값에 대하여, H, p, λ 에 의한 triplet product rule

$$\frac{\partial H}{\partial \lambda} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \lambda} = 0$$

에서

$$\frac{d\overline{H}}{dt} = - \frac{\oint (\partial p / \partial \lambda) dq}{\oint (\partial p / \partial H) dq} \frac{d\lambda}{dt}$$

을 얻는다. 식을 정리하면

$$\oint \left(\frac{\partial p}{\partial H} \frac{d\overline{H}}{dt} + \frac{\partial p}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt} \right) dq = \oint \frac{d\overline{p}}{dt} dq = 0 \quad (14)$$

을 얻는다. 따라서

$$I \equiv \frac{1}{2\pi} \oint p dq \quad (15)$$

는 보존되고, 이러한 성질을 단열 불변성(adiabatic invariance)이라 부른다.

EXERCISE. 주기 운동의 에너지가 E_0 일 때 $2\pi \partial I / \partial E \big|_{E=E_0}$ 가 운동의 주기가 됨을 보이라.

EXERCISE. 지면으로부터 α 만큼 기울어진 경사면 위에서 질량 m 인 구슬이 길이 l 인 실에 매달려 작은 각진폭 θ_0 로 진동하고 있다. α 가 천천히 변화하여 $\sin \alpha$ 의 값이 절반으로 감소했을 때 진자의 각진폭은 몇 배가 되는가?

5 Liouville Theorem

5.1 Jacobian

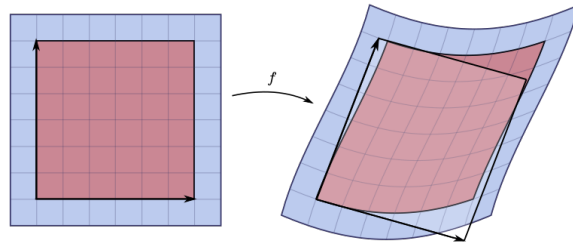


Figure 3: 한 점의 주위에서는 비선형 좌표 변환도 선형 변환으로 근사할 수 있다.

\mathbb{R}^n 에서, $f_i : x_i \mapsto x'_i$ 로 주어진 좌표 변환을 생각하자. 미분을 이용하여 f_i 를 선형 근사하면,

$$dx'_i = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} dx_j$$

을 얻고, 이를 행렬 꼴로 쓰면 \mathbb{R}^n 위 점 \mathbf{p} 에서

$$\begin{pmatrix} dx'_1 \\ \vdots \\ dx'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{p}} & \cdots & \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{p}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left. \frac{\partial f_n}{\partial x_1} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{p}} & \cdots & \left. \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx_1 \\ \vdots \\ dx_n \end{pmatrix}.$$

와 같이 쓸 수 있다. 여기서 행렬

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad (16)$$

을 Jacobi 행렬이라 하고, 이 행렬의 determinant에 대해 관계식

$$\prod_i dx'_i = (\det \mathcal{J}) \prod_i dx_i \quad (17)$$

이 성립한다. 여기서 Jacobi 행렬의 determinant인 $\det \mathcal{J}$ 를 Jacobian determinant 또는 간단히 Jacobian이라 부른다.

5.2 Liouville's Theorem

Liouville 정리란, 위상 공간에서의 영역은 시간에 따라 그 부피가 변하지 않는다는 정리이다.



Figure 4: 위상 공간에서 흘러가는 영역은 그 부피를 유지한다.

미소 시간 dt 이후 q_i 가 \tilde{q}_i 가 되었다고 하자. Hamilton 방정식 eq. (12)으로부터, 두 좌표 사이의 변환을 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\begin{cases} q_i \mapsto \tilde{q}_i = q_i + \dot{q}_i dt = q_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dt \\ p_i \mapsto \tilde{p}_i = p_i + \dot{p}_i dt = p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} dt \end{cases}$$

따라서 이 변환의 Jacobian은

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} \partial \tilde{q}_i / \partial q_j & \partial \tilde{q}_i / \partial p_j \\ \partial \tilde{p}_i / \partial q_j & \partial \tilde{p}_i / \partial p_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{ij} + (\partial^2 H / \partial p_i \partial q_j) dt & (\partial^2 H / \partial p_i \partial p_j) dt \\ -(\partial^2 H / \partial q_i \partial q_j) dt & \delta_{ij} - (\partial^2 H / \partial q_i \partial p_j) dt \end{pmatrix}$$

단, δ_{ij} 는 Kronecker 델타이다. 4개의 원소는 각각이 $n \times n$ 행렬을 축약해 쓴 표현임에 유의하라.

위상 공간에서의 미소 부피는

$$d\Gamma = \prod_i dq_i dp_i \quad (\text{no sum})$$

로 쓸 수 있고, 미소 시간 dt 가 흐른 뒤에는

$$d\tilde{\Gamma} = \prod_i d\tilde{q}_i d\tilde{p}_i = (\det J) \prod_i dq_i dp_i \quad (\text{no sum})$$

가 될 것이다. $\det \mathcal{J}$ 를 계산하기 위해서는 다음의 근사식이 필요하다.

$\det(I + \epsilon M)$ 근사식 Determinant의 정의

$$\det A = \sum_{\sigma \in S_n} \left(\text{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n a_{i, \sigma_i} \right)$$

를 이용하면, 다음의 근사식을 얻는다.

$$\begin{aligned} \det(I + \epsilon M) &= \det \begin{pmatrix} 1 + \epsilon M_{11} & \cdots & \epsilon M_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \epsilon M_{n1} & \cdots & 1 + \epsilon M_{nn} \end{pmatrix} \\ &= 1 + \epsilon \text{tr } M + \mathcal{O}(\epsilon^2) \end{aligned} \tag{18}$$

이 근사식을 적용하면,

$$\begin{aligned}
 \det \mathcal{J} &= \det \begin{pmatrix} \delta_{ij} + (\partial^2 H / \partial p_i \partial q_j) dt & (\partial^2 H / \partial p_i \partial p_j) dt \\ -(\partial^2 H / \partial q_i \partial q_j) dt & \delta_{ij} - (\partial^2 H / \partial q_i \partial p_j) dt \end{pmatrix} \\
 &= \det \left(\begin{pmatrix} \delta_{ij} & 0 \\ 0 & \delta_{ij} \end{pmatrix} + dt \begin{pmatrix} \partial^2 H / \partial p_i \partial q_j & \partial^2 H / \partial p_i \partial p_j \\ -(\partial^2 H / \partial q_i \partial q_j) & -\partial^2 H / \partial q_i \partial p_j \end{pmatrix} \right) \\
 &= 1 + dt \operatorname{tr} \left(\begin{pmatrix} \partial^2 H / \partial p_i \partial q_j & \partial^2 H / \partial p_i \partial p_j \\ -(\partial^2 H / \partial q_i \partial q_j) & -\partial^2 H / \partial q_i \partial p_j \end{pmatrix} \right) \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

$\frac{d}{dt}(\det \mathcal{J}) = 0$ 이므로, 위상 공간에서 미소 영역의 부피 $d\Gamma$ 는 시간이 흘러도 변하지 않는다.

5.3 Liouville's Equation

한 입자의 상태가 확률적으로 결정되거나, 충분히 많은 수의 입자로 구성된 계에서 입자의 분포는 위상 공간에서의 확률밀도함수 ρ 로 나타낼 수 있다:

$$\int \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \prod_i dq_i dp_i = 1 \quad (\text{no sum}). \quad (19)$$

입자가 새롭게 생겨나거나 사라지지 않는다면, 미소 부피에 존재하는 입자의 수(또는 확률) $\rho d\Gamma$ 은 시간에 따라 변하지 않을 것이다. Liouville 정리가 $d\Gamma$, 즉 해당 입자계의 위상 공간에서의 부피 역시 시간에 따라 변하지 않는다는 것을 보장하므로, 확률 ρ 역시 보존량이 된다. 즉 $d\rho/dt = 0$ 이고, Liouville 방정식

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} - \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (20)$$

을 얻는다.

5.4 Poincaré Recurrence Theorem

강철 용기에 담긴 특정한 온도의 기체는 위상 공간에서 존재할 수 있는 영역이 유계(bounded)이다. 이처럼 계에서 허용된 위상 공간의 부피가 유한한 경우, 임의의 영역 U 내에 있는 점은 대부분 유한 시간 내에 다시 영역 U 안으로 돌아온다는 Poincaré 회귀 정리가 성립한다.—이 결과는 매우 비직관적이다. 현실적인 스케일에서, 이런 사건이 발생하기까지의 시간은 무한대로 간주할 수 있을만큼 매우 큰 시간이기 때문이다.—

U 는 유한한 시간 t 동안 흘러가 gU 가 된다고 하자. 위상 공간의 부피가 유한하므로,

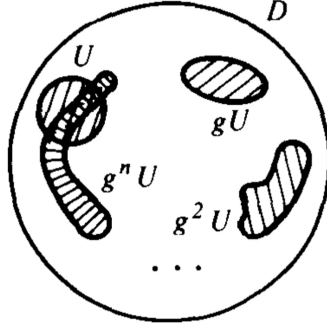


Figure 5: Poincaré 회귀 정리

어떤 $k > l \geq 0$ 이 존재해서,

$$g^k U \cap g^l U \neq \emptyset$$

이 될 것이다. 그렇다면

$$g^{-l}(g^k U \cap g^l U) = g^{k-l} U \cap U \neq \emptyset$$

이므로, U 에 속하는 적어도 하나의 점은 유한 시간 $(k-l)$ 내에 다시 U 로 돌아온다. 이번에는 영역 U 중 유한 시간 내에 다시 U 내부로 돌아오지 않는 부분을 U' 이라고 하자. 그러나 U' 역시 위상 공간의 영역이므로, U' 에 속하는 적어도 하나의 점은 유한 시간 내에 다시 U' 으로 돌아올 것이다. $U' \subseteq U$ 이므로 가정에 모순이고, 따라서 이러한 영역 U' 은 존재하지 않는다.

참고) ‘대부분의 점이 유한 시간 내에 돌아온다’는 것은 돌아오지 않는 영역의 부피가 0이라는 뜻이다. 부피가 0인 부분집합은, 위상 공간의 부피가 유한하더라도 겹치지 않고 무한한 시간동안 위치를 바꿀 수 있다.

6 Canonical Transformations

6.1 Poisson Brackets

위상 공간에서 정의된 두 함수 $f(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, $g(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ 를 생각하자. Poisson 괄호는

$$\{f, g\} \equiv \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \quad (21)$$

로 정의된다. Poisson 괄호는 다음 성질들을 만족한다.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Anticommutativity: } \{f, g\} = -\{g, f\} \\ \text{Linearity: } \{\alpha f + \beta g, h\} = \alpha\{f, g\} + \beta\{g, h\} \\ \text{Leibniz rule: } \{fg, h\} = f\{g, h\} + \{f, h\}g \\ \text{Jacobi identity: } \{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \end{array} \right. \quad (22)$$

$\{f, g\} = \{g, f\} = 0$ 일 때, f 와 g 는 Poisson 교환(Poisson commute)한다고 부른다.

함수 $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ 의 시간에 대한 변화를 고려하자. Hamilton 방정식과 Poisson 괄호의 표기법을 이용하면,

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial f}{\partial t} \\ &= \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t} \end{aligned} \quad (23)$$

임을 알 수 있다. 즉, 어떤 물리량 I 가 보존된다는 것은 계의 hamiltonian과 Poisson 교환한다는 것과 동치이다.

EXERCISE. $\{q_i, q_j\} = 0$, $\{p_i, p_j\} = 0$, $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ 임을 보이라.

EXERCISE. I 와 J 가 보존량이라면, $\{I, J\}$ 역시 보존량이 됨을 보이라.

6.2 Further Discussion: Laplace–Runge–Lenz Vector

Hamiltonian이 $H = \mathbf{p}^2/2m - k/r$ 로 주어진 계에서는 에너지, 운동량, 각운동량 이외에 새로운 보존량이 존재한다. $\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - mk\hat{\mathbf{r}}$ 로 정의되는 이 벡터를 Laplace–Runge–Lenz 벡터라 부른다. Laplace–Runge–Lenz 벡터는 시간과 공간의 병진/회전대칭성에 기인하는 보존량(에너지, 운동량, 각운동량) 외에 새롭게 찾아낸 보존량이다. 여기서 ‘LRL 벡터 역시 어떤 대칭성에 기인하는 보존량인가?’라는 질문을 던질 수 있다. 정답은 ‘그렇다’이다.

Kepler 문제에서 속도벡터의 자취는 원이라는 사실이 잘 알려져 있다:

$$d\mathbf{v} = -(GM/r^2)\hat{\mathbf{r}}dt = -(GMm/L)\hat{\mathbf{r}}d\theta = (GMm/L)d\hat{\boldsymbol{\theta}}.$$

따라서, 특정한 에너지를 가지는 궤도들의 운동량 공간에서의 자취를 inverse stereographic projection하여 3차원 구면 위로 올릴 수 있다. 즉 Kepler 문제는 4차원 회전대칭성을 가진다고 할 수 있다. 이것을 기술하는 군 $SO(4)$ 의 차원이 6이므로 3차원 회전대칭성에 대응되는

각운동량의 세 성분 외에도 추가로 3개의 보존량이 존재해야 하고, 이 세 보존량이 LRL 벡터의 성분들이다.

대수적으로 Kepler 문제의 대수적 구조가 $SO(4)$ 라는 것은 아래의 Poisson bracket 관계식으로부터 알 수 있다:

$$\{M_i, M_j\} = \varepsilon_{ijk} M_k, \quad \{N_i, N_j\} = \varepsilon_{ijk} N_k, \quad \{M_i, N_j\} = 0$$

EXERCISE. $\mathbf{M} = (\mathbf{L} + \mathbf{A}/\sqrt{-2mH})/2$, $\mathbf{N} = (\mathbf{L} - \mathbf{A}/\sqrt{-2mH})/2$ 일 때 위 관계식을 확인하라.

6.3 Canonical Transformation

Lagrange 역학에서 일반화 좌표

$$q_i \mapsto Q_i(q, t) \quad (24)$$

를 사용할 수 있었던 이유는 무엇인가? 작용 S 의 정의역이 \mathbb{R}^n 위에서 정의된 곡선의 집합이므로, 곡선을 유지하면서 원하는 좌표계를 선택할 수 있는 자유가 있었기 때문이다. 이러한 좌표 변환 하에 lagrangian 자체가 불변이지는 않으나, 운동방정식 $\partial L / \partial q_i - (d/dt)(\partial L / \partial \dot{q}_i) = 0$ 이 불변이라고 할 수 있다.

Hamilton 역학에서는 q_i 와 p_i 를 서로 동등한 독립변수로 간주하므로, \mathbb{R}^{2n} 상에서의 좌표 변환을 고려하는 것은 자연스럽다:

$$q_i \mapsto Q_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), \quad p_i \mapsto P_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t). \quad (25)$$

만약 이 좌표 변환 하에 Hamilton 방정식 eq. (12)이 불변이라면, 즉 새로운 Hamiltonian $\mathcal{H}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}, t)$ 가 존재하여

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_i}$$

를 만족한다면 보다 Lagrange 역학에서의 일반화 좌표보다 더욱 다양한 형태의 좌표 변환을 생각할 수 있을 것이다.

좌표 변환 전후 모두 최소 작용의 원리가 만족한다면, 즉

$$\delta \int (p_i \dot{q}_i - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)) dt = \delta \int (P_i \dot{Q}_i - \mathcal{H}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}, t)) dt = 0$$

이라면 둘 사이에는

$$\lambda(p_i \dot{q}_i - H) = P_i \dot{Q}_i - \mathcal{H} + \dot{F} \quad (26)$$

의 관계가 성립할 것이다. $\lambda = 1$ 일 때 이러한 좌표 변환을 정준 변환(canonical transformation)이라 한다.

6.4 Generating Functions

$F = F_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$ 인 경우를 상정하자. 이때 eq. (26)은

$$p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - \mathcal{H} + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

로 쓰여지고, q_i 와 Q_i 를 독립 변수로 취급하고 있으므로 양변의 계수 비교에서

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}, \quad \mathcal{H} = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

를 얻는다. 이를 제1종 생성 함수(generating function of the first kind)라 부른다. 이 경우, \dot{q}_i 와 \dot{Q}_i 의 계수 비교를 통해 정준 변환의 구체적인 형태를 얻어냈다. 이와 유사하게 \dot{q} 와 \dot{P}_i 의 계수 비교로부터 정준 변환을 얻어내기 위해서,

$$F = F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) - Q_i P_i$$

를 생각할 수 있다. 이러한 방식으로 정준 변환을 ‘생성’해내는 총 4가지 종류의 함수를 기본 생성 함수(basic generating function)라 부르고, 그 형태는 다음과 같다.

Basic Generating Functions	Transformations	Trivial Cases
$F = F_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$	$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}$	$F_1 = q_i Q_i, \quad Q_i = p_i, \quad P_i = -q_i$
$F = F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) - Q_i P_i$	$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}$	$F_2 = q_i P_i, \quad Q_i = q_i, \quad P_i = p_i$
$F = F_3(\mathbf{p}, \mathbf{Q}, t) + q_i p_i$	$q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i}, \quad P_i = \frac{\partial F_3}{\partial Q_i}$	$F_1 = p_i Q_i, \quad Q_i = -q_i, \quad P_i = -p_i$
$F = F_4(\mathbf{p}, \mathbf{P}, t) + q_i p_i - Q_i P_i$	$q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i}$	$F_4 = p_i P_i, \quad Q_i = p_i, \quad P_i = -q_i$

Table 1: 기본 생성 함수와 그의 자명한 형태들

모든 종류의 정준 변환이 기본 생성 함수의 결합으로서 표현될 수는 없음에 유의하라.

EXERCISE. 4가지 종류의 기본 생성 함수로 정의되는 정준 변환에 대하여, $\mathcal{H} = H + \partial F_i / \partial t$ 임을 확인하라.

6.5 Symplectic Condition

변환이 시간에 명시적으로 의존하지 않는 경우(생성 함수에 의해 정의되는 변환의 경우 $\partial F_i/\partial t = 0$ 인 경우), $\mathcal{H} = H$ 가 되고, 이를 제한된 정준 변환(restricted canonical transformation)이라 부른다.

$2n$ 차원 벡터 $\boldsymbol{\eta} = (\mathbf{q}^\top, \mathbf{p}^\top)^\top$ 와 $2n \times 2n$ 반대칭 행렬

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix}$$

에 대하여, Hamilton 방정식은 다음과 같이 쓸 수 있다:

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

좌표 변환

$$\eta_i \mapsto \zeta_i$$

에 대해

$$\dot{\zeta}_i = \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j} \dot{\eta}_j = \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j} J_{jk} \frac{\partial H}{\partial \eta_k} = \frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j} J_{jk} \frac{\partial H}{\partial \zeta_l} \frac{\partial \zeta_l}{\partial \eta_k} = \left(\frac{\partial \zeta_i}{\partial \eta_j} J_{jk} \frac{\partial \zeta_l}{\partial \eta_k} \right) \frac{\partial H}{\partial \zeta_l}$$

라고 쓸 수 있다. 여기서, 괄호 안의 값이 $(\mathcal{J}J\mathcal{J}^\top)_{il}$ 임을 확인한다면, 이 좌표 변환이 정준 변환일 조건은

$$\mathcal{J}J\mathcal{J}^\top = J \quad (27)$$

로 쓸 수 있다. eq. (27)가 만족될 때, Jacobian 행렬이 심플렉틱(symplectic) 하다고 한다.

Poisson 괄호는 정준 변환과 밀접한 연관이 있다. 먼저, Poisson 괄호를 행렬 J 를 이용하여

$$\{f, g\}_\eta = J_{ij} \frac{\partial f}{\partial \eta_i} \frac{\partial g}{\partial \eta_j}$$

로 쓸 수 있음에 주목하자. $\boldsymbol{\eta}$ 좌표계에서 정의된 Poisson 괄호를 불변으로 하는 변환은 정준 변환이다:

$$\{\zeta_k, \zeta_l\}_\eta = J_{ij} \frac{\partial \zeta_k}{\partial \eta_i} \frac{\partial \zeta_l}{\partial \eta_j} = (\mathcal{J}J\mathcal{J}^\top)_{kl}$$

또한, 각 좌표계에서의 Poisson 괄호는 정준 변환에 불변이다:

$$\{f, g\}_\eta = J_{ij} \frac{\partial f}{\partial \eta_i} \frac{\partial g}{\partial \eta_j} = J_{ij} \left(\mathcal{J}_{ki} \frac{\partial f}{\partial \zeta_k} \right) \left(\mathcal{J}_{lj} \frac{\partial g}{\partial \zeta_l} \right) = J_{kl} \frac{\partial f}{\partial \zeta_k} \frac{\partial g}{\partial \zeta_l} = \{f, g\}_\zeta. \quad (28)$$

6.6 Infinitesimal Canonical Transformations

One-parameter 좌표 변환을 고려할 때는 제2종 생성함수를 이용하는 것이 자연스럽다. 미소 좌표 변환을 생성하는 제2종 생성 함수

$$F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = q_i P_i + \epsilon G(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)$$

를 생각하자. $|\epsilon| \ll 1$ 이고, $\epsilon = 0$ 일 때 이 변환은 단순히 항등 변환이 된다. 이 변환을

$$q_i \mapsto q_i + \delta q_i, \quad p_i \mapsto p_i + \delta p_i$$

라고 할 때,

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

가 됨을 알 수 있다.

생성자(generator) G 가 생성하는 미소 변환 하에 Hamiltonian의 변화는

$$\delta H = \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i = \epsilon \{H, G\}$$

로 쓸 수 있다. 생성자 G 가 시간에 명시적으로 의존하지 않는다면, $\delta H = \epsilon \partial G / \partial t = 0$ 이므로 계는 이 미소 변환에 대칭이다. 이때 $\delta H = \epsilon \{H, G\} = 0$ 으로부터 G 가 보존량이 되고, 이 결과는 Noether 정리와 합치한다.

EXERCISE. 병진 변환과 회전 변환의 생성자를 각각 제시하라.

$G = H$ 인 경우는 유심히 살펴볼 만하다. 이는 생성자가 곧 Hamiltonian인 경우로, $\epsilon = dt$ 로 선택할 때 G 는 계의 시간 진화(time evolution)을 생성한다. Hamilton 방정식이 시간 진화를 active한 형태로 기술한 것에 대조적으로, H 를 생성자로 하는 정준 변환은 passive하게 시간 진화를 기술했다고 볼 수 있다.

7 Hamilton–Jacobi Theory and Canonical Variables

7.1 Hamilton–Jacobi Equation

Lagrange 역학과 Hamilton 역학에서는, 작용

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt$$

을 경로의 함수로 보고, 경로의 양끝을 고정한 상태로(i.e., $\delta q_i(t_0) = \delta q_i(t_1) = 0$) 극값을 가질 조건을 고려하였다.

이번에는 관점을 조금 바꾸어서, 경로의 끝점을 변화시키며(i.e., $\delta q_i(t_0) = 0, \delta q_i(t_1) \neq 0$) 최소 작용의 원리를 적용하고자 한다, 즉, 작용을 적분 구간의 끝 t 와 경로의 끝점 $\mathbf{q}(t)$ 의 함수로 간주하고자 한다:

$$S(\mathbf{q}(t), t) = \min \left(\int_{t_0}^t L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t') dt' \right).$$

최소 작용의 원리가 만족할 때, 그 경로를 $\mathcal{C}(\mathbf{q}(t), t)$ 라 하자. 최소 작용의 원리로부터

$$dS(\mathbf{q}, t) = d \int_{\mathcal{C}} (p_i dq_i - H dt) = p_i dq_i - H dt = 0$$

을 얻는다. 여기서 $dS = (\partial S / \partial q_i) dq_i + (\partial S / \partial t) dt$ 와 dq_i 의 계수를 비교하여 $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$ 를 얻는다. 즉, Hamiltonian은 \mathbf{q} 와 t 만의 함수가 되고, dt 의 계수 비교로부터 Hamilton–Jacobi 방정식

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

을 얻는다. 이 결과는 Lagrange 역학이나 Hamilton 역학과 같이 독립된 하나의 역학 체계를 제공한다.

Formalism	Plays on	Equation of Motion
Lagrangian	Configuration space	n copies of 2 nd order ODE
Hamiltonian	Phase space	$2n$ copies of 1 st order ODE
Hamilton–Jacobi	Configuration space	1 st order PDE

Table 2: Various formalisms of classical mechanics

Hamilton–Jacobi 방정식은 $n + 1$ 개의 변수를 가진 1계 미분방정식이다. 모든 좌표 q_i 가 순환 좌표인 경우, $p_i = \alpha_i$ 는 보존량이 되고, 이 경우 작용

$$S = S(\mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha}, t)$$

를 Hamilton’s principal function이라 부른다.

이때 Hamilton–Jacobi 방정식

$$H(\mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha}, t) + \frac{\partial S(\mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha}, t)}{\partial t} = 0$$

의 형태에 주목하자. S 는 새로운 Hamiltonian $\mathcal{H} = 0$ 을 생성하는 제2종 생성함수로 볼 수 있다.

Hamiltonian이 시간에 명시적으로 의존하지 않는다면, Hamilton's principle function은

$$S(\mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha}, t) = W(\mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha}) - Et$$

의 꼴로 분리할 수 있다. 여기서, 시간에 의존하지 않는(time-independent) Hamilton–Jacobi equation

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

를 얻는다. W 는 Hamilton's characteristic function이라 불린다.

7.2 Action-Angle Variables

정준 좌표 (q_i, p_i) 로 기술된 주기 어떤 운동을 새로운 좌표계 (ω_i, J_i) 를 도입하여 해석하고자 한다. Hamilton's characteristic function W 를 생성 함수로 하는 제2종 정준 변환을 이용해 J 가 보존량이 되도록 할 수 있다.

운동이 주기적이라는 점을 고려하면,

$$J_i \equiv \oint p_i dq_i \quad (\text{no sum})$$

는 명백히 보존량이다. 따라서 이를 일반화 운동량으로 삼으면, 그에 대응되는 일반화 좌표

$$\omega_i = \frac{\partial W}{\partial J_i}$$

를 얻는다. 변환 후의 새로운 hamiltonian \mathcal{H} 은 Hamilton 방정식

$$0 = \dot{J}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \omega_i}$$

을 만족하므로 \mathcal{H} 가 시간에 명시적으로 의존하지 않을 때 이는 \mathbf{J} 만의 함수가 된다. 따라서

$$\dot{\omega}_i = \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{J})}{\partial J_i} \equiv \nu_i(\mathbf{J})$$

는 보존량이고, 일반적으로

$$\omega_i = \nu_i(\mathbf{J})t + \beta_i$$

의 꼴로 쓸 수 있다. 이러한 정준 좌표에서 J_i 를 작용 변수(action variable)라 하고, ω_i 를 각도 변수(angle variable)라 한다. 우리는 앞서 J_i 가 단일 불변량이 됨을 보였다.

EXERCISE. 한 주기동안 $\Delta\omega_i = 1$ 임을 보이라. 즉, ν_i 는 진동수의 의미를 갖는다.

7.3 Further Discussion: Bohr–Sommerfeld Quantisation

양자역학이 태동하기 시작하던 20세기 초반, 각운동량 양자화 가설의 보다 일반적인 형태로 작용 변수(또는 단열 불변량) J 를 플랑크 상수 h 의 정수배로 양자화하는 Bohr–Sommerfeld 양자화 규칙이 제안되었다:

$$\oint p_i dq_i = nh.$$

러더퍼드 모형에서 일반화 좌표 $q = \theta$ 를 도입하면, 이 규칙으로부터 Bohr의 각운동량 양자화 가설

$$2\pi L = nh, \quad L_n = n\hbar$$

를 얻는다.

이 규칙을 단순 조화 진동자(simple harmonic oscillator)에 적용해보자. 고전적인 1차원 조화 진동자는 다음의 hamiltonian으로 정의되는 계이다:

$$H(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

진폭이 A 인 조화 진동자에 Bohr–Sommerfeld 양자화 규칙을 적용하면

$$\oint p dx = 2 \int_{-A}^A m\omega \sqrt{A^2 - x^2} dx = \pi m\omega A^2$$

에서 진폭의 양자화

$$A_n^2 = \frac{2n\hbar}{m\omega}$$

를 얻는다. 이를 계의 hamiltonian에 대입하면, 에너지의 양자화

$$E_n = n\hbar\omega$$

를 얻는다. 이 결과에서 조화 진동자의 에너지 준위 간격을 양자역학의 결과와 동일하게 예측하였지만, 바닥 상태 에너지의 존재는 고려하지 못한다는 것을 알 수 있다. 실제 양자 조화 진동자(quantum harmonic oscillator)의 에너지 준위는

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

로 주어진다.