哈密顿正则方程

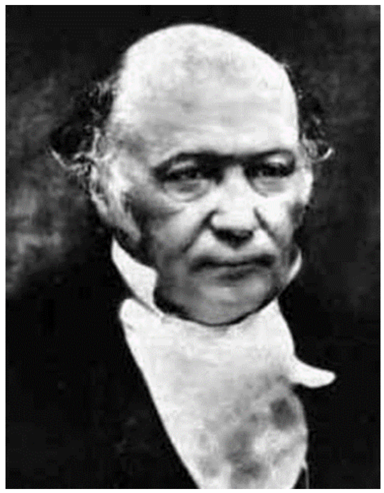

图 1: 哈密顿

我们已经知道，求解s个自由度的力学系统需要s个运动积分，而一般情况下我们只有7个运动积分：能量、动量、角动量。因此，如何一般的寻求s个运动积分是哈密顿当时所面临的主要问题。哈密顿基于对最小作用量原理的理解，得到了在相空间（广义坐标与广义动量张成的空间）的运动方程（哈密顿正则方程），以及一种求解运动积分的方法（哈密顿-雅可比理论)。

1 哈密顿正则方程

在拉格朗日力学中，$L(q,\dot{q},t)$定义广义坐标与广义速度的函数。利用广义动量$p=\partial L/\partial\dot{q}$，可以将广义速度表示为$\dot{q}(q,p,t)$。进而

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L(q,p,t)}{\partial q} &= \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q}+\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}(q,p,t)}{\partial q}=\dot{p}+\frac{\partial (p\dot{q})}{\partial q}\\
\frac{\partial L(q,p,t)}{\partial p} &= \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}(q,p,t)}{\partial p}=p\frac{\partial \dot{q}}{\partial p}=-\dot{q}+\frac{\partial (p\dot{q})}{\partial p}
\end{aligned} \tag{1}$$

从而，我们得到哈密顿正则方程

$$\boxed{\frac{\partial H(q,p,t)}{\partial q}=-\dot{p},\quad \frac{\partial H(q,p,t)}{\partial p}=\dot{q}} \tag{2}$$

- 勒让德变换。根据

$$\mathrm{d}L=\frac{\partial L}{\partial q}\mathrm{d}q+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\mathrm{d}\dot{q}+\frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \tag{3}$$

两边同时减去$\mathrm{d}(p\dot{q})$，得

$$\mathrm{d}(L-p\dot{q})=\dot{p}\mathrm{d}q-\dot{q}\mathrm{d}p+\frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \tag{4}$$

即

$$\boxed{\mathrm{d}H=-\dot{p}\mathrm{d}q+\dot{q}\mathrm{d}p-\frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t} \tag{5}$$

从中，我们可以直接读出哈密顿正则方程。

式3和4可以分别看成是拉格朗日方程和哈密顿正则方程的母函数表达。当然，我们也可以类似的引入$(\dot{p},q,t)$和$(\dot{p},p,t)$为变量的母函数，只不过不那么有用罢了。

- 再根据$\mathrm{d}H/\mathrm{d}t=-\partial L/\partial t$，得

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial t} \tag{6}$$

可以看到，如果H不含时，则H本身为守恒量。

- 如果q_i为可遗坐标，p_i为守恒量，未知数减少一个。这一点与拉格朗日力学不同。比如对于对称刚体，如果ψ为可遗坐标，则$p_\psi=I_3(\dot{\psi}+\dot{\varphi}\cos\theta)$为守恒量，但$\dot{p}_\psi$并不能完全确定，因此$\psi$这个自由度并未被完全消除。而哈密顿力学则不同，如果ψ为可遗坐标，则p_ψ守恒，其他的运动方程中出现的p_ψ可作为常量处理，因此ψ这个自由度被完全消除。

- 辛结构。哈密顿正则方程可以简单的写为

$$\dot{\xi}_i=J_{ij}\frac{\partial H}{\partial \xi_j} \tag{7}$$

其中$\xi=[q_1,\cdots,q_s,p_1,\cdots,p_s]^t$，

$$J=\begin{bmatrix}0 & I\\ -I & 0\end{bmatrix} \tag{8}$$

这被称为哈密顿力学的辛结构。它表明在相空间中，代表点(q,p)沿着一种推广的梯度（辛梯度）的方向运动。

- 例：向心力问题。

$$H=\frac{p_\rho^2}{2m}+\frac{p_\varphi^2}{2m\rho^2}+V(\rho) \tag{9}$$

- 例：微振动问题。

$$H=\frac{1}{2}(m^{-1})_{ij}p_ip_j+\frac{1}{2}k_{ij}x_ix_j \tag{10}$$

- 例：拉格朗日陀螺。

$$H = \frac{p_\theta^2}{2I_1} + \frac{(p_\varphi - p_\psi \cos\theta)^2}{2I_1 \sin^2\theta} + \frac{p_\psi^2}{2I_3} + mgh\cos\theta \tag{11}$$

事实上，这个哈密顿可以通过写出$L_{1,2,3} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{e}_{1,2,3}$得到。因为$p_\varphi = \mathbf{L}\cdot\mathbf{e}_\varphi$，$p_\theta = \mathbf{L}\cdot\mathbf{e}_\theta$，$p_\psi = \mathbf{L}\cdot\mathbf{e}_\psi$，而$\mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\psi$可以用$\mathbf{e}_{1,2,3}$表示出来。从而

$$\begin{aligned} p_\varphi &= \sin\theta\sin\psi L_1 + \sin\theta\cos\psi L_2 + \cos\theta L_3 \\ p_\theta &= \cos\psi L_1 - \sin\psi L_2 \\ p_\psi &= L_3 \end{aligned} \tag{12}$$

反解出$L_{1,2,3}$，代入$H = \sum_i L_i^2/2I_i + mgh\cos\theta$，即得到上面哈密顿量的表达式。

2 泊松括号

图 2: 泊松

利用哈密顿正则方程，我们可以将一个一般的物理量$A(q,p,t)$的时间微分表示为

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial \xi_i}\dot{\xi}_i = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial \xi_i} J_{ij} \frac{\partial H}{\partial \xi_j} = \frac{\partial A}{\partial t} + [A, H] \tag{13}$$

这里，我们定义了一种运算，称为泊松括号

$$[a, b] = J_{ij} \frac{\partial a}{\xi_i} \frac{\partial b}{\xi_j} \tag{14}$$

或具体写出来

$$\boxed{[a, b] = \frac{\partial a}{\partial q_i}\frac{\partial b}{\partial p_i} - \frac{\partial a}{\partial p_i}\frac{\partial b}{\partial q_i}} \tag{15}$$

可以验证，泊松括号的运算$[a,b]$与叉乘$a \times b$和矩阵运算$ab - ba$相似。下面列出几个重要的性质：

$$[a, b] = -[b, a] \tag{16}$$

$$[a, b + \lambda c] = [a, b] + \lambda[a, c] \tag{17}$$

$$[a, bc] = [a, b]c + b[a, c] \tag{18}$$

以及下面三个基本的关系：（请大家自行验证这些关系）

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0, \quad [q_i, p_j] = \delta_{ij} \tag{19}$$

在具体计算其他物理量的泊松括号时，往往可以直接应用上述的关系，而不必每次都代入定义式进行计算。

- 证明$[L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk} L_k$和$L^2, L_i] = 0$。

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y = xp_y - yp_x = L_z \tag{20}$$

  指标轮换可得其他关系。

$$[L^2, L_x] = [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] = 2L_y[L_y, L_x] + 2L_z[L_z, L_x] = -2L_yL_z + 2L_yL_z = 0 \tag{21}$$

- 判定守恒量。如果一个物理量A不含时，且$[A, H] = 0$，则有$\dot{A} = 0$。这一点往往被用来判定A是否是一个守恒量。
  - 例：$\mathbf{p}$，$\mathbf{L}$。
- 运动方程。如果$[A, H] \neq 0$，我们就得到了A的时间变化率。
  - 例：电磁场中的带电粒子。

$$H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} - e\phi \tag{22}$$

    可以通过计算$[\mathbf{r}, H]$和$[\mathbf{p}, H]$得到粒子的运动方程。作业。
- 判定对称性。通过对泊松括号的计算，可以给出系统的对称性的信息。
  - 例：二维空间谐振子。

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2) \tag{23}$$

    可以找到如下三个守恒量：

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{1}{2\sqrt{mk}} p_x p_y + \frac{1}{2}\sqrt{mk}xy \\ S_2 &= \frac{1}{2}(xp_y - yp_x) \\ S_3 &= \frac{1}{4\sqrt{mk}}(p_x^2 - p_y^2) + \frac{1}{4}\sqrt{mk}(x^2 - y^2) \end{aligned} \tag{24}$$

    满足$[S_i, S_j] = \varepsilon_{ijk} S_k$。因此二维空间谐振子具有一种类似于角动量的对称性，对应于“三维空间”中的某种转动。(严格来说，这对应于SU(2)对称性。)
  - 例：Kepler问题。利用LRL矢量和角动量，可以证明$[L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk} L_k$，$[A_i, L_j] = \varepsilon_{ijk} A_k$，$[A_i, A_j] = -2mH\varepsilon_{ijk} L_k$。这表明Kepler问题具有一种更高的对称性。

2.1 泊松定理与刘维尔可积

利用定义，可以直接证明下面的雅可比恒等式

$$[a,[b,c]]+[b,[c,a]]+[c,[a,b]]=0 \tag{25}$$

证明：

$$\begin{aligned}
&[a,[b,c]]+[b,[c,a]]+[c,[a,b]]\\
=&J_{kl}J_{ij}\frac{\partial a}{\partial \xi_k}\frac{\partial}{\partial \xi_l}\left(\frac{\partial b}{\partial \xi_i}\frac{\partial c}{\partial \xi_j}\right)+J_{kl}J_{ij}\frac{\partial b}{\partial \xi_k}\frac{\partial}{\partial \xi_l}\left(\frac{\partial c}{\partial \xi_i}\frac{\partial a}{\partial \xi_j}\right)+J_{kl}J_{ij}\frac{\partial c}{\partial \xi_k}\frac{\partial}{\partial \xi_l}\left(\frac{\partial a}{\partial \xi_i}\frac{\partial b}{\partial \xi_j}\right)\\
=&J_{kl}J_{ij}\frac{\partial a}{\partial \xi_k}\frac{\partial^2 b}{\partial \xi_l\partial \xi_i}\frac{\partial c}{\partial \xi_j}+J_{kl}J_{ij}\frac{\partial b}{\partial \xi_k}\frac{\partial^2 c}{\partial \xi_l\partial \xi_i}\frac{\partial a}{\partial \xi_j}+J_{kl}J_{ij}\frac{\partial c}{\partial \xi_k}\frac{\partial^2 a}{\partial \xi_l\partial \xi_i}\frac{\partial b}{\partial \xi_j}\\
+&J_{kl}J_{ij}\frac{\partial a}{\partial \xi_k}\frac{\partial b}{\partial \xi_i}\frac{\partial^2 c}{\partial \xi_l\partial \xi_j}+J_{kl}J_{ij}\frac{\partial b}{\partial \xi_k}\frac{\partial c}{\partial \xi_i}\frac{\partial^2 a}{\partial \xi_l\partial \xi_j}+J_{kl}J_{ij}\frac{\partial c}{\partial \xi_k}\frac{\partial a}{\partial \xi_i}\frac{\partial^2 b}{\partial \xi_l\partial \xi_j}\\
=&(J_{ij}+J_{ji})J_{kl}\frac{\partial a}{\partial \xi_k}\frac{\partial c}{\partial \xi_i}\frac{\partial^2 b}{\partial \xi_j\partial \xi_l}+\text{(other two terms)}\\
=&0
\end{aligned} \tag{26}$$

因此，如果取$c=H$，则

$$[a,[b,H]]+[b,[H,a]]+[H,[a,b]]=0 \tag{27}$$

如果a和b为守恒量，则$[a,b]$也是守恒量，这被称为泊松定理，即

$$[[a,b],H]=[a,[b,H]]+[b,[H,a]]=[a,-\frac{\partial b}{\partial t}]+[b,\frac{\partial a}{\partial t}]=-\frac{\partial}{\partial t}[a,b] \tag{28}$$

比如：如果L_x,L_y为守恒量，那么直接根据泊松定理可知$[L_x,L_y]=L_z$也是守恒量。回到哈密顿所面临的基本问题，对于s个自由度的力学系统，如果我们已经找到了s个运动积分，那么是不是该问题就一定可积（严格求解）呢？在上面的例子中，我们看到，如果L_x,L_y为守恒量，我们自然得到L_z守恒量，这仅仅来源于运动方程本身而并不需要求解运动方程，因此我们说此时L_z的守恒对我们求解运动方程并无作用。这也就提示我们，只有那些彼此泊松括号为零（称为对合）的守恒量才是对求解运动方程真正有用的。这就是刘维尔可积定理：对于s个自由度的力学系统，如果存在s个彼此对合的守恒量，则该系统可积。

- 可积系统：两体问题，谐振动问题，特定陀螺（欧拉、拉格朗日、Kovalevskaya），特定的三体问题，特定滑轮（Atwood机）等。
- 不可积系统：双摆，摆动滑轮（Atwood机），一般的陀螺，一般的三体及多体问题等。不可积系统就会表现出混沌行为。