Lecture notes on theoretical mechanics

Scientific LAN

2024 年 12 月 16 日

前言

这里是某科学的懒羊羊，该课程笔记为本人大二上于中国科学技术大学潘海俊老师的理论力学课程的学习笔记，并以潘海俊老师编著的理论力学导论为参考书籍编纂，用于本人学习巩固课程知识并在此公开分享与各位共同学习。如有错误之处还请谅解。

Scientific LAN

2024 年 12 月 16 日

目录

第一章　运动学

1.1　坐标变换

1.1.1　符号

求和约定: 在某一单项式中同一指标重复出现，则意味着对其求和。

$$(AB)_{ij} = \sum_{k}^{n} A_{ik}B_{kj} \Leftrightarrow (AB)_{ij} = A_{ik}B_{kj}$$

求和指标称为哑指标，若无特殊说明则均使用求和约定。如：$A_{ii} = trA$

kronecker 符号:

$$\delta_{ij} \equiv \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

因此有

$$\delta_{ii} = 3 \qquad (i = 1, 2, 3)$$

$$A_{ik}\delta_{kj} = A_{ij}$$

$$A_{ik}\delta_{ki} = trA$$

$$A_{ij}B_{ji} = trAB$$

levi-civita(排列) 符号

$$\varepsilon_{ijk} \equiv \begin{vmatrix} \delta_{i1} & \delta_{i2} & \delta_{i3} \\ \delta_{j1} & \delta_{j1} & \delta_{j1} \\ \delta_{k1} & \delta_{k1} & \delta_{k1} \end{vmatrix}$$

因此有

$$\varepsilon_{ijk} A_{i1} A_{j2} A_{k3} = detA$$

$$\varepsilon_{ijk} A_{il} A_{jm} A_{kn} = \varepsilon_{lmn} detA$$

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{mnk} = \delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm}$$

1.1.2 右手直角坐标系

右手直角坐标系中的基矢满足

$$\hat{x_i} \cdot \hat{x_j} = \delta_{ij}$$

$$(\hat{x_i} \times \hat{x_j}) \cdot \hat{x_k} = \varepsilon_{ijk}$$

在右手直角坐标系中的任意一个向量表示为：

$$\overrightarrow{r} = r_i \hat{x_i} = (\overrightarrow{r} \cdot \hat{x_i})\hat{x_i}$$

1.1.3 坐标变换

旋转变换矩阵:

$$\lambda_{ij} \equiv \hat{x_i}' \hat{x_j}$$

该矩阵第 i 行是 $\hat{x_i}'$ 轴在原坐标系中的三个方向余弦，第 j 列是 $\hat{x_j}$ 轴在新坐标系中的三个方向余弦

$$\hat{x_i}' = (\hat{x_i}' \cdot \hat{x_j})\hat{x_j} = \lambda_{ij}\hat{x_j}$$

故

$$x_i^{'} = \lambda_{ij} x_j$$

同理有逆变换

$$\hat{x_i} = \lambda_{ji}\hat{x_j}'$$

$$x_i = \lambda_{ji} x_j^{'}$$

旋转变换矩阵为特殊正交阵，即

$$\lambda\lambda^T = I$$

$$det\lambda = 1$$

定义正交变换 $\hat{x_i}' = \lambda_{ij}\hat{x_j}$，$det\lambda = 1$ 的变换为旋转变换，$det\lambda = -1$ 的变换为反演旋转变换

变换 λ 具有主动观点及被动观点：主动观点将变换视为作用于空间各点上的；被动观点将变换视为作用于坐标系上的。

1.1.4　转动公式

转动公式:

$$\overrightarrow{r}' = \overrightarrow{r}\cos\theta + \hat{n}(\hat{n}\cdot\overrightarrow{r})(1-\cos\theta) + \hat{n}\times\overrightarrow{r}\sin\theta$$

转动矩阵：

$$\lambda_{ij} = \delta_{ij}\cos\theta + n_i n_j(1 - cos\theta) - \varepsilon_{ijk} n_k \sin\theta$$

通过转动矩阵，转动公式分类表示为 $\hat{x_i}' = \lambda_{ij} x_j$

转动角度 θ 为：$\cos\theta = \frac{tr\lambda-1}{2}$, 转动矩阵的转轴 $\hat{n}$ 为其特征向量:$\lambda\cdot\hat{n} = \hat{n}$ 即转动矩阵这一代数特征与其对应转动的几何特征相互推导。

无限小转动：

$$d\overrightarrow{\theta} \equiv \overrightarrow{n} d\theta$$

故

$$d\overrightarrow{r} = d\overrightarrow{\theta} \times \overrightarrow{r}$$

$$\frac{d\overrightarrow{r}}{dt} = \overrightarrow{\omega} \times \overrightarrow{r}$$

$$|\overrightarrow{r}(t)| = const \Leftrightarrow \frac{d\overrightarrow{r}}{dt} = \overrightarrow{\omega} \times \overrightarrow{r}$$

1.1.5　正交曲线坐标系

球坐标系：

$$\overrightarrow{r} = r\hat{r}$$

由

$$d\overrightarrow{\Theta} = d\theta\hat{\varphi} + d\varphi\hat{z} = d\varphi\cos\theta\hat{r} - d\varphi\sin\theta\hat{\theta} + d\theta\hat{\varphi}$$

得

$$\overrightarrow{v} = \dot{r}\hat{r} + r\dot{\theta}\hat{\theta} + r\sin\theta\dot{\varphi}\hat{\varphi}$$

$$\frac{\partial\overrightarrow{r}}{\partial r} = \hat{r} \quad \frac{\partial\overrightarrow{r}}{\partial\theta} = \hat{\phi} \times \overrightarrow{r} \quad \frac{\partial\overrightarrow{r}}{\partial\phi} = \hat{z} \times \overrightarrow{r}$$

柱坐标系：

$$\overrightarrow{r} = s\hat{s} + z\hat{z}$$

$$\overrightarrow{v} = \dot{s}\hat{s} + s\dot{\varphi}\hat{\varphi} + \dot{z}\hat{z}$$

1.1.6 相对运动

$$\frac{d\vec{G}}{dt} = (\frac{d\vec{G}}{dt})_{rot} + \vec{\omega} \times \vec{G}$$

$$\vec{v} = \vec{v}_0 + \vec{v}' + \vec{\omega} \times \vec{r}'$$

$$\vec{a} = \vec{a}_0 + \vec{a}' + \vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}') + 2\vec{\omega} \times \vec{v}' + \dot{\vec{\omega}} \times \vec{r}'$$

其中 $\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}')$ 为向心加速度，$2\vec{\omega} \times \vec{v}'$ 为科里奥利加速度，$\dot{\vec{\omega}} \times \vec{r}'$ 为横向加速度。

1.2 张量

1.2.1 定义

n 阶张量 $\overleftrightarrow{T}$ 满足变化：

$$T'_{i_1 \cdots i_n} = \lambda_{i_1 j_1 \cdots i_n j_n} T_{j_1 \cdots j_n}$$

赝张量：$T'_{i_1 \cdots i_n} = det\lambda \cdot \lambda_{i_1 j_1 \cdots i_n j_n} T_{j_1 \cdots j_n}$

二者在旋转变换下无区别，但在反演（宇称）变换下不同。

一阶张量 (矢量)$\vec{A}$ **：**

$$A'_i = \lambda_{ij} A_j$$

$$\vec{A} \cdot \vec{B} \equiv A_i B_i$$

$$(\vec{A} \times \vec{B})_i \equiv \varepsilon_{ijk} A_j B_k$$

二阶张量 $\overleftrightarrow{T}$:

$$T'_{ij} = \lambda_{ik} \lambda_{jl} T_{kl}$$

或写为矩阵形式

$$T' = \lambda T \lambda^T$$

并矢：

$$(\overrightarrow{A}\overrightarrow{B})_{ij} \equiv A_i B_j$$

九个张量 $\hat{x}_i\hat{x}_j$ 构成了二阶张量空间的一组基

$$\overleftrightarrow{T} = T_{ij}\hat{x}_i\hat{x}_j$$

1.2.2　张量代数运算

张量积：

$$R^{m+n\text{阶}} = T^{m\text{阶}} \otimes S^{n\text{阶}}$$

$$R_{i_1\cdots i_{m+n}} = T_{i_1\cdots i_m} R_{i_1\cdots i_n}$$

并矢也为张量积。**张量不变性**

$$T'_{ij}\hat{x}_i{}'\hat{x}_j{}' = T_{ij}\hat{x}_i\hat{x}_j$$

点乘: 张量与矢量点乘满足 1、就近原则 2、$\hat{x}_i \cdot \hat{x}_j = \delta_{ij}$

故

$$\overleftrightarrow{T} \cdot \overrightarrow{A} = (T_{ik}A_k)\hat{x}_i$$

$$\overrightarrow{A} \cdot \overleftrightarrow{T} = (A_k T_{kj})\hat{x}_j$$

$$\overrightarrow{A} \cdot \overleftrightarrow{T}\overrightarrow{B} = T_{ij}A_i B_j$$

矩阵表示:

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}$$

和

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix}$$

叉乘: 张量与矢量叉乘满足 1、就近原则 2、$\hat{x}_i \times \hat{x}_j = \varepsilon_{ijk}\hat{x}_k$

$$\overrightarrow{A} \times \overrightarrow{B} = (\varepsilon_{ijk}A_jB_k)\hat{x}_i$$

轴矢量之间的叉乘得到的是极矢量.

1.3　场的导数

1.3.1　梯度算子

梯度算子 ∇ ：

$$\nabla \equiv \hat{x}_i \frac{\partial}{\partial x_i} = \hat{x}_i \partial_i$$

$$\nabla\varphi = (\partial_i\varphi)\hat{x}_i$$

$$d\varphi = \nabla\varphi \cdot d\overrightarrow{r}$$

$$\nabla \cdot \overrightarrow{F} = \partial_i F_i$$

$$\nabla\overrightarrow{F} = (\partial_i F_j)\hat{x}_i\hat{x}_j$$

$$\nabla \times \overrightarrow{F} = (\varepsilon_{ijk}\partial_j F_k)\hat{x}_i$$

$$\nabla \cdot \overleftrightarrow{T} = (\partial_k T_{ki})\hat{x}_i$$

定理:

$$\nabla \times (\overrightarrow{f} \times \overrightarrow{g}) = (\nabla \cdot \overrightarrow{g} + \overrightarrow{g} \cdot \nabla)\overrightarrow{f} - (\nabla \cdot \overrightarrow{f} + \overrightarrow{f} \cdot \nabla)\overrightarrow{g}$$

$$\nabla \times \nabla\varphi \equiv 0$$

$$\nabla \cdot (\nabla \times \overrightarrow{A}) \equiv 0$$

$$\partial_i F_j = \partial_j F_i \Leftrightarrow \nabla \times \overrightarrow{F} = 0 \Rightarrow \overrightarrow{F} = \nabla\varphi$$

$$\nabla \cdot \overrightarrow{F} = 0 \Rightarrow \overrightarrow{F} = \nabla \times \overrightarrow{A}$$

1.3.2 场的变换

在两个坐标系中的同一个标量场满足:

$$\varphi^{'}(x_1^{'}, x_2^{'}, x_2^{'}) = \varphi(x_1, x_2, x_3)$$

1.3.3 求导约定

对矢量求导：

$$\frac{\partial f}{\partial \overrightarrow{A}} \equiv \frac{\partial f}{\partial A_i}\hat{x}_i \equiv (\frac{\partial f}{\partial A_1}, \frac{\partial f}{\partial A_2}, \frac{\partial f}{\partial A_3})^T$$

若 $f = f(\overrightarrow{r}, \dot{\overrightarrow{r}}, t)$，则其对 t 全导数：

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \overrightarrow{r}}\dot{\overrightarrow{r}} + \frac{\partial f}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}\ddot{\overrightarrow{r}} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

对一组变量求导：

$$f = f(q_1 \cdots q_n)$$

$$\frac{\partial f}{\partial q} = (\frac{\partial f}{\partial q_1}, \frac{\partial f}{\partial q_2}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial q_n})^T$$

1.4 约束

1.4.1 自由体系

N 个质点的质点组，状态参量为 $(\overrightarrow{r}, \dot{\overrightarrow{r}}) = (\overrightarrow{r_1}, \cdots, \overrightarrow{r_n}, \dot{\overrightarrow{r_1}}, \cdots, \dot{\overrightarrow{r_n}})$

1.4.2 完整约束体系

一般约束

$$f(\overrightarrow{r}, \dot{\overrightarrow{r}}, t) = 0$$

完整约束

$$f(\overrightarrow{r}, t) = 0$$

一个 N 个质点 K 个完整约束的体系：

自由度 n=3N-k，构成 n 维位形曲面，法向量：

$$\overrightarrow{n_\alpha} = \frac{\partial f_\alpha}{\partial \overrightarrow{r}}$$

n 维广义坐标 q，有

$$\overrightarrow{r} = \overrightarrow{r}(q,t)$$

切向量 $\overrightarrow{\tau_k} = \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}$

同理有 n 维广义速度 $\dot{q}$，得

$$\dot{\overrightarrow{r}} = \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial t}$$

定理:

$$\frac{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}{\partial q_k} = \frac{d}{dt}\frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}$$

$$\frac{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}$$

1.4.3　理想约束假设

约束 $f\alpha(\overrightarrow{r},t) = 0$ 提供的约束力：

$$\overrightarrow{N}^\alpha = (\overrightarrow{N}_1^\alpha, \overrightarrow{N}_2^\alpha, \cdots, \overrightarrow{N}_N^\alpha)$$

理想约束假设:

$$\overrightarrow{N} = \lambda_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial \overrightarrow{r}}$$

即约束力与位型曲面垂直。

1.4.4　动能

$$T = \frac{1}{2} m_a \dot{\overrightarrow{r}}^2$$

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}} = \overrightarrow{p}$$

广义动能：

$$T \equiv T(\dot{\overrightarrow{r}}(q, \dot{q}, t))$$

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q_k}} = \overrightarrow{p} \cdot \overrightarrow{\tau_k}$$

1.4.5　势能

$$U(\overrightarrow{r}, t) = U^{外}(\overrightarrow{r}, t) + \frac{1}{2}\sum_{a \neq b} U_{ab}(r_{ab})$$

粒子 a 受到的力：

$$\overrightarrow{F}_a = -\frac{U^{外}}{\partial \overrightarrow{r}_a} - \sum_{a \neq b} \frac{\partial U_{ab}}{\partial \overrightarrow{r_a}}$$

故体系受力：

$$\overrightarrow{F} = -\frac{\partial U}{\partial \overrightarrow{r}}$$

广义力:

$$Q_k \equiv \overrightarrow{F} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = -\frac{\partial U}{\partial q_k}$$

第二章　Lagrange 力学

2.1　Hamilton 原理

Hamilton 原理：在满足约束，且有相同端点的所有可能路径中，真实运动是使得作用量 $S = \int_{t_1}^{t_2} Ldt$ 取得最小值的路径。其中 $L = L(\overrightarrow{r}, \dot{\overrightarrow{r}}, t) = T - U$ 为 Lagrange 函数.

Lagrange 函数中的动能 T 为体系总动能，势能 U 为主动力所贡献的势能之和.

2.1.1　泛函

泛函:

$$I[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t)$$

路径变分 $\delta q(t)$

速度变分 $\delta \dot{q} \equiv \frac{d}{dt}\delta q$

加速度变分 $\delta \ddot{q} \equiv \frac{d}{dt}\delta \dot{q}$

$$\delta L(q, \dot{q}, t) = \frac{\partial L}{\partial q_k}\delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\delta \dot{q}_k$$

泛函变分：

$$\delta I[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \delta L dt$$

即变分与积分、导数均可换序。Leibniz formula:

$$\delta(fg) = g(\delta f) + f(\delta g)$$

链式法则：

$$\delta g(f) = \frac{\partial g}{\partial f}\delta f$$

若对于任意函数 $\eta_1(x), \eta_2(x), \cdots, \eta_n(x)$, 有

$$\int_a^b [\sum_{k=1}^n G_k(x)\eta_k(x)]dx = 0$$

则 $G_1(x) = G_2(x) = \cdots = G_n(x) = 0$

驻值路径

$$\delta I[q(t)] = 0 \Leftrightarrow \frac{\delta L}{\delta q_k} \equiv \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q_k}} = 0$$

Eular-Lagrange 方程

推论：

若 L 不显含 q_k，则 $\frac{\partial L}{\partial \dot{q_k}} = const$

Jacob 积分:

$$h(q, \dot{q}, t) \equiv \dot{q_k}\frac{\partial L}{\partial \dot{q_k}} - L$$

Lagrange 方程等价于

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

当 L 不显含 t 时，则 $h = const$，且此时 $h = T + U = E$.

2.1.2 Hamilton 原理的证明

证明：[1]

[1]本人认为这段证明很 cool，遂记录

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = \frac{\partial L}{\partial \overrightarrow{r}} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}} \cdot \frac{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}{\partial q_k}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q_k}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}} \cdot \frac{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}{\dot{q_k}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{q_k}$$

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q_k}}) = \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{q_k}) = (\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}) \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{q_k} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}} \cdot \frac{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}{q_k}$$

故 $\frac{\delta L}{\delta q_k}$ 可改写为：

$$\frac{\delta L}{\delta q_k} = \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q_k}} = (\frac{\partial L}{\partial \overrightarrow{r}} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}) \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}$$

对于 Lagrange 函数

$$L = T(\dot{\overrightarrow{r}}, t) - U(\overrightarrow{r}, t)$$

将 T 和 U 代入改写后的 $\frac{\delta L}{\delta q_k}$

$$\frac{\delta T}{\delta q_k} = (\frac{\partial T}{\partial \overrightarrow{r}} - \frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}) \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = -\dot{\overrightarrow{p}} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}$$

$$\frac{\delta T}{\delta q_k} = (\frac{\partial T}{\partial \overrightarrow{r}} - \frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}) \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = -\overrightarrow{F} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}$$

故 Eular-Lagrange 方程可改写为

$$\frac{\delta L}{\delta q_k} = (\overrightarrow{F} - \dot{\overrightarrow{q}}) \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = 0$$

这就是理想约束假设下的牛顿第二定律。

2.1.3　推论

广义动量:

$$p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q_k}}$$

故 Jacob 积分

$$h(q, \dot{q}, t) \equiv \dot{q_k}\frac{\partial L}{\partial \dot{q_k}} - L = p_k\dot{q_k} - L$$

满足 $\frac{dh}{dt}=-\frac{\partial L}{\partial t}$

若 L 不显含 q_k，则 $p_k=const.$

若 L 不显含 t，则 h=const.

广义力：

$$Q_k \equiv \overrightarrow{F} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = -\frac{\partial U}{\partial q_k}$$

即广义力是势能对广义坐标的导数。体系的平衡位置即是使广义力 $Q_k=0$ 的位置。

2.1.4 Lagrange 函数的性质

惯性系: Lagrange 函数的动能与势能是在惯性系下观测得到的，若在非惯性系中，则 Lagrange 函数的动能为非惯性系中的动能，势能则除了主动力还需考虑惯性力的贡献。

一般不采用非惯性系中的 Lagrange 函数，只需在惯性系中写出 L 函数，并利用下面的规范变换化简即可得到相同结果。

Lagrange 函数的不确定性（规范变换）:

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

规范变换前后的 Lagrange 函数满足相同的拉格朗日方程，故可描述同一体系, 其中不依赖于 $\dot{q}$ 的 $F(q,t)$ 称为规范函数。

可加性：对于一个体系的 A，B 两部分，若两部分之间相互作用的势能可忽略，则

$$L_{A+B} = L_A(q_A,\dot{q_A}) + L_B(q_B,\dot{q_B})$$

即此时二者可视为孤立体系处理。

通常情况下，我们反向使用该性质：即对于一个体系，可以通过选取合适的广义坐标 q_A 和 q_B，将对应的 Lagrange 函数化简为分别只和 q_A,q_B 相关的两部分，即可将耦合的体系拆分成了孤立的研究对象。

2.2　拉格朗日乘子法

2.2.1　约束力 $f(\overrightarrow{r},t)=0$

对于自由度为 s 的体系，为求解约束力 $f(\overrightarrow{r},t)=0$，

1、设想将该约束解除,则体系由 s+1 个不独立的广义坐标 $q=(q_1,\cdots,q_{s+1})$ 描述。

通过变换方程将约束方程写为

$$f(q,t)=0$$

2、**广义约束力**：

$$Q_k^{'}=\overrightarrow{N}\cdot\frac{\partial\overrightarrow{r}}{\partial q_k}=\lambda\frac{\partial f}{\partial q_k}$$

其中 λ 称为拉格朗日乘子，若将 $Q_k^{'}$ 排列为矢量 $\overrightarrow{Q}^{'}$，则在广义坐标 q 构成的空间中，$\overrightarrow{Q}^{'}$ 与超曲面 f=0 垂直。

将牛顿方程 $\overrightarrow{F}+\overrightarrow{N}-\dot{\overrightarrow{P}}=0$ 在方向 $\frac{\partial\overrightarrow{r}}{\partial q_k}$ 上作投影。

得到：

$$\frac{\delta L}{\delta q_k}+Q_k^{'}=0$$

即在求解约束力问题时有 q,λ 这 s+2 个未知量及如下 s+2 个方程：

$$\begin{cases}\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q_k}}-\frac{\partial L}{\partial q_k}=\lambda\frac{\partial f}{\partial q_k}\\ f(q,t)=0\end{cases}$$

注意写出上式第一个方程（也叫带乘子的拉格朗日方程）时不可提前代入约束条件，否则将会化为广义坐标相互独立的情况。

由这 s+2 个方程就可以确定体系的位形 q_k 以及广义约束力 $\lambda\frac{\partial f}{\partial q_k}$。

2.2.2　几点说明

若将 λ 视为广义坐标，则可定义如下拉格朗日函数：

$$\widetilde{L}\triangleq L(q,\dot{q},t)+\lambda f(q,t)=\widetilde{L}(q,\lambda,\dot{q},t)$$

拉格朗日方程则化为

$$\begin{cases} \frac{\delta \widetilde{L}}{\delta q_k} = \frac{\delta L}{\delta q_k} + \lambda \frac{\partial f}{\partial q_k} = 0 \\ \frac{\delta \widetilde{L}}{\delta \lambda} = f = 0 \end{cases}$$

即对应了 2.2.1 中求解约束力问题的 s+2 个方程。

同样的定义了新的 Jacob 积分：

$$\widetilde{h} \triangleq \widetilde{P_k}\dot{q}_k + \widetilde{P_\lambda}\dot{\lambda} - \widetilde{L} = h - \lambda f$$

与不含约束方程的雅可比积分有相同结论，若 $\widetilde{L}$ 不显含 t，则 $\widetilde{h} = const$

而对于多个约束的情况，只需将 λf 用 $\lambda_\alpha f_\alpha$ 替换即可。

静力学问题:

前面提到，若仅需求解平衡位置，则使广义力为 0 即可求解：

$$\frac{\partial U}{\partial q_k} = 0$$

若要得到体系平衡位置的约束力，则使用拉格朗日乘子法：

$$\frac{\partial U}{\partial q_k} = \lambda \frac{\partial f}{\partial q_k}$$

即

$$Q_k' + Q_k = 0$$

2.3 更一般的相互作用下的拉格朗日力学

2.3.1 有势力与广义势能

若主动力 $\overrightarrow{F}(\overrightarrow{q}, \dot{\overrightarrow{q}}, t)$ 可以被**广义势能** $U(\overrightarrow{q}, \dot{\overrightarrow{q}}, t)$ 描述如下

$$\overrightarrow{F} = -\frac{\delta U}{\delta \overrightarrow{r}} = -\frac{\partial U}{\partial \overrightarrow{r}} + \frac{d}{dt}\frac{\partial U}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}}$$

广义主动力

$$Q_k \triangleq \overrightarrow{F} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = -\frac{\delta U}{\delta q_k}$$

此时拉格朗日方程 $\frac{\delta L}{\delta q_k}$ 仍然成立。通常的势能只是广义势能的特例。

与拉格朗日函数类似，广义势能也具有不确定性，即：

$$U^{'} = U + \frac{dF(q,t)}{dt}$$

其中 $U^{'}$ 与 U 描述相同的主动力，且对应相同拉格朗日方程，故可描述同一体系。

惯性力也可被广义势能描述：在平动的非惯性系中 $\overrightarrow{v} = \overrightarrow{v_0}(t) + \overrightarrow{v^{'}}$，体系拉格朗日函数可化简为

$$L^{'} = T^{'} - U - U^{'}$$

其中 $T^{'} = \frac{1}{2}m\overrightarrow{v^{'}}^2$ 为体系在非惯性系中的动能，$U^{'} = m\overrightarrow{a_0} \cdot \overrightarrow{r^{'}}$。

同样的转动非惯性系中也有 $L^{'} = T^{'} - U - U^{'}$

因而建议在惯性系中写出体系拉格朗日函数 L，化简后可得到非惯性系中的物理解读。

2.3.2 非势力

主动力可以表示为两部分

$$\overrightarrow{F} = \overrightarrow{F^P} + \overrightarrow{F^D}$$

其中 $\overrightarrow{F^P} = -\frac{\partial U}{\partial \overrightarrow{r}}$ 为可被广义势能描述的主动力，而 $\overrightarrow{F^D}$ 则不可被广义势能描述。

由于牛顿方程为 $\overrightarrow{F^P} + \overrightarrow{F^D} - \dot{\overrightarrow{P}} = 0$ 和 $\frac{\delta L}{\delta q_k} = (\overrightarrow{F^P} - \dot{\overrightarrow{P}}) \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}$

因此此时拉格朗日方程应拓展为更一般的形式：

$$\frac{\delta L}{\delta q_k} + D_k = 0$$

其中广义力 $D_k \triangleq \overrightarrow{F^D} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}$

耗散力：若 $\overrightarrow{F^D}$ 具有如下形式

$$\overrightarrow{F^D} = -g(v)\hat{v} \quad (g > 0)$$

, 则称之为耗散力。

广义耗散力

$$D_k \triangleq \overrightarrow{F^D} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = -g(v)\frac{\partial v}{\partial \dot{q_k}} = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{q_k}}$$

即广义耗散力被耗散函数描述, 耗散函数定义为：

$$\mathcal{F} \triangleq \int_0^v g(z)dz = \mathcal{F}(v) = \mathcal{F}(q, \dot{q}, t)$$

故在耗散力的作用下拉格朗日方程可写为：

$$\frac{\delta L}{\delta q_k} + D_k = \frac{\delta L}{\delta q_k} - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{q_k}} = 0$$

2.3.3　d'Alembert 原理

定义虚位移 $\delta \overrightarrow{r} \triangleq \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k}\delta q_k$ ，根据虚位移定义知，虚位移应满足约束与位形曲面相切。

则牛顿方程可写为：

$$(\overrightarrow{F} - \dot{\overrightarrow{P}}) \cdot \delta \overrightarrow{r} = 0$$

借助虚位移，理想约束假设有等价表述：

$$Q_k^{'} = \overrightarrow{N} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = 0 \Leftrightarrow Q_k^{'}\delta q_k = \overrightarrow{N} \cdot \delta \overrightarrow{r} = 0$$

即约束力与虚位移垂直

2.3.4　平衡问题

体系平衡时

$$Q_k \triangleq \overrightarrow{F} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{r}}{\partial q_k} = 0$$

由于 $\overrightarrow{F}$ 无法表示为 $-\frac{\partial U}{\partial \overrightarrow{r}}$，故此时不可用 $\frac{\partial U}{\partial \overrightarrow{r}}=0$

虚功原理：

$$Q_k\delta q_k=\overrightarrow{F}\cdot\delta\overrightarrow{r}=0$$

当体系受到多个主动力时，只需满足 $\overrightarrow{F_\alpha}\cdot\delta\overrightarrow{r_\alpha}=0$ 即可。

2.3.5 冲击力问题

冲击力问题是指作用时间 $\Delta t\to 0$ 的一类问题，可认为作用前后体系位形不变。

对牛顿方程 $\frac{\delta T}{\delta q_k}+Q_k=0$ 积分得到冲击力问题的运动方程：

$$\left.\frac{\partial T}{\partial \dot{q_k}}\right|_0^{\Delta t}=I_k\triangleq I_\alpha\frac{\partial\overrightarrow{r_\alpha}}{\partial q_k}$$

2.4 对称与守恒

2.4.1 守恒量

状态参量的函数 $\Gamma(q,\hat{q},t)$ 称为力学量，如果体系运动过程中有 $\frac{d\Gamma}{dt}=0$ 则称该力学量是守恒的。

一个自由度为 n 的系统，至多有 2n 个独立的守恒量，至多有 2n-1 个不显含时间 t 的独立的守恒量。

对于不同的守恒量 f_α，可通过下面的方法判断其是否相互独立：构造矩阵 M：

$$M=\begin{pmatrix}\frac{\partial f_1}{\partial q} & \frac{\partial f_1}{\partial \dot{q}}\\ \vdots & \vdots\\ \frac{\partial f_n}{\partial q} & \frac{\partial f_n}{\partial \dot{q}}\end{pmatrix}$$

若矩阵 M 的行列式 det(M)=n，则这 n 个守恒量相互独立。

2.4.2 对称性

对于坐标 X 及标量函数 $\varphi(X)$，变换将 $X \to X'$，同时将 X 处的函数值 φ 带到了 X' 处并由此定义了一个新的函数 φ'，即 $\varphi'(X') = \varphi(X)$。

如果有 $\varphi'(X') = \varphi(X')$ 即 $\varphi(X') = \varphi(X)$，则称变换 $X \to X'$ 是 $\varphi(X)$ 的对称变换。

2.4.3 动力学对称性

单参数点变换：将位形空间中依赖于一个参数 ε 的坐标变换称为单参数点变换，数学表示为：

$$q_k \to Q_k = Q_k(q, t; \varepsilon)$$

且 $\varepsilon = 0$ 时该变换为恒等变换, 广义速度在此变换下变为：

$$\dot{q}_k \to \dot{Q}_k(q, \dot{q}, t; \varepsilon) = \frac{\partial Q_k}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial Q_k}{\partial t}$$

无穷小变换：在 $\varepsilon \to 0$ 时，变换为无穷小变换，仅保留 ε 的一阶项：

$$q_k \to Q_k = q_k + \varepsilon s_k$$

其中

$$s_k = \left.\frac{\partial Q_k}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}$$

$$\dot{q}_k \to \dot{Q}_k = \dot{q}_k + \varepsilon \dot{s}_k$$

对于如上变换，**定义**：

$$L_\varepsilon(q, \dot{q}, t) \triangleq L(Q, \dot{Q}, t)$$

应当注意式中 $L(Q, \dot{Q}, t)$ 不为以 Q 为广义坐标的拉格朗日函数，仅是将 Q 直接替换 $L(q, \dot{q}, t)$ 的 q 中得到的。

我们称 $L(q,\dot{q},t)$ 在变换下是**不变**的，如果

$$L_\varepsilon(q,\dot{q},t) = L(q,\dot{q},t)$$

我们称 $L(q,\dot{q},t)$ 在变换下是**规范不变**的，如果

$$L_\varepsilon(q,\dot{q},t) = L(q,\dot{q},t) + \frac{dF(q,t;\varepsilon)}{dt}$$

显然，“不变”是“规范不变”的一种特殊情况，此时我们称该变换为 $L(q,\dot{q},t)$ 的对称变换。

在无穷小变换下，保留 ε 的一阶项：

$$L_\varepsilon = L + \varepsilon\frac{dG}{dt}$$

其中

$$G \triangleq \left.\frac{\partial F}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}$$

2.4.4 Noether' theorem

如果变换 $q_k \to Q_k(q,t;\varepsilon)$ 是体系 $L(q,\dot{q},t)$ 的对称变换，即

$$L_\varepsilon(q,\dot{q},t) = L(q,\dot{q},t) + \frac{dF(q,t)}{dt}$$

则

$$\Gamma = p_k s_k - G$$

为守恒量，其中 k 满足求和约定，$p_k = \frac{\partial L}{\partial q_k}$ 为广义动量，$s_k = \left.\frac{\partial Q_k}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}$，$G \triangleq \left.\frac{\partial F}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}$

诺特定理的另一种表述：

如果变换 $q_k \to Q_k = q_k + \delta q_k$ 是体系 $L(q,\dot{q},t)$ 的对称变换，即

$$L_\varepsilon(q,\dot{q},t) = \frac{d}{dt}\delta F(q,t)$$

则

$$\Gamma = p_k \cdot \delta q_k - \delta F$$

为守恒量。

2.4.5　三维空间的诺特定理

三维空间中无穷小变换为：

$$\overrightarrow{r}(q,t) \to \overrightarrow{R}(q,t;\varepsilon) = \overrightarrow{r} + \varepsilon\overrightarrow{\eta}$$

若 $\overrightarrow{r}(q,t) \to \overrightarrow{R}(q,t;\varepsilon)$ 是体系 $L(\overrightarrow{r}, \dot{\overrightarrow{r}}, t)$ 的对称变换，即

$$L_\varepsilon(\overrightarrow{r}, \dot{\overrightarrow{r}}, t) \triangleq L(\overrightarrow{R}, \dot{\overrightarrow{R}}, t) = L(\overrightarrow{r}, \dot{\overrightarrow{r}}, t) + \frac{dF(\overrightarrow{r}, t)}{dt}$$

则

$$\Gamma = \frac{\partial L}{\partial \dot{\overrightarrow{r}}} \cdot \overrightarrow{\eta} - G$$

为守恒量，其中 $\overrightarrow{\eta} = \frac{\partial \overrightarrow{R}}{\partial \varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0}$

2.4.6　孤立体系

孤立体系中：

$$L = T - U = \frac{1}{2}m_a\dot{\overrightarrow{r_a}}^2 - U_{ab}(r_{ab})$$

$$\Gamma = \overrightarrow{p_a} \cdot \overrightarrow{\eta_a} - G$$

1、空间平移

$$\overrightarrow{r_a} \to \overrightarrow{R_a} = \overrightarrow{r_a} + \varepsilon\hat{n}$$

L 不变，$\overrightarrow{P} = m_a v_a^2$ 为守恒量

2、空间转动

$$\overrightarrow{r_a} \to \overrightarrow{R_a} = \overrightarrow{r_a} + \varepsilon\hat{n} \times \overrightarrow{r_a}$$

L 不变，$\overrightarrow{L} = \overrightarrow{r_a} \times \overrightarrow{P_a}$ 为守恒量。

3、速度变换（推动）

$$\overrightarrow{r_a} \to \overrightarrow{R_a} = \overrightarrow{r_a} + \varepsilon \hat{n} t$$

$$\Rightarrow \dot{\overrightarrow{r_a}} \to \dot{\overrightarrow{R_a}} = \dot{\overrightarrow{r_a}} + \varepsilon \hat{n}$$

L 规范不变，$\ddot{\overrightarrow{R_c}} = 0$，即质心作匀速直线运动。

2.4.7　非孤立体系的动量与角动量

外场中的体系拉格朗日函数为：

$$L = \frac{1}{2} m_a v_a^2 - \frac{1}{2} U_{ab}(r_{ab}) - U^{外}(\overrightarrow{r}, t)$$

其中 $U^{外}(\overrightarrow{r}, t)$ 是外场贡献的势能。

由于 2.4.6 的讨论，体系的动能及体系内部相互作用的势能在空间平移和空间转动下是不变的，因此拉格朗日函数是否具有对称性完全由外场决定。

对于处在外场中的体系，为了判断其动量和角动量的分量是否守恒，只需考察产生外场的“荷”是否具有相应的平移或转动对称性。特别的，对于均匀分布的“荷”，其对称性即为其几何对称性。

例如：

对于 XOY 平面上的无限大的均匀荷分布，由于沿 x、y 方向的空间平移对称性，动量的 x、y 分量为守恒量；由于以 z 为转轴的空间转动对称性，z 方向的角动量为守恒量。

对于圆心位于圆点处于 x、y 平面的均匀圆盘，由于以 z 为转轴的空间转动对称性，z 方向的角动量为守恒量。

对于两个点荷的场，沿点荷连线方向的角动量分量为守恒量。

对于无限长圆柱螺旋线场，可以通过空间平移荷转动的组合得到对称性。

2.4.8 有关时间的变换

将 t 视为广义坐标，以 σ 为自变量，则 $t = t(\sigma)$，$q = q[t(\sigma)]$，记 $t' \triangleq \frac{dt}{d\sigma}$, 则 $\dot{q} = \frac{dq}{dt} = \frac{q'}{t'}$ 作用量 $S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t)dt = \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} \widetilde{L}(q, t, q', t')d\sigma$ 其中 $\widetilde{L} \triangleq t' L(q, \frac{q'}{t'}, t)$，同时有：

$$\widetilde{P_k} \triangleq \frac{\partial \widetilde{L}}{\partial q_k'} = P_k, \widetilde{P}_t \triangleq \frac{\partial \widetilde{L}}{\partial t'} = -h$$

以时间 t 作为广义坐标时诺特定理为：

对于变换 $q_k \to Q_k(q, t; \varepsilon)$,$s_k = \frac{\partial Q_k}{\partial \varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0}$ 或 $t \to \tau(q, t; \varepsilon), s_t = \frac{\partial \tau}{\partial \varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0}$

若上述变换为对称变换，即 $\frac{d\tau}{dt} L_\varepsilon(q, \dot{q}, t) \triangleq \frac{d\tau}{dt} L(Q, \frac{Q'}{\tau'}, \tau) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{dF(q,t;\varepsilon)}{dt}$, 则 $\Gamma = P_k s_k - h s_t - G$ 为守恒量。

第三章　微振动

3.1　简谐近似

3.1.1　体系描述

关于微振动体系的假设有以下两点：

首先，体系外部约束和外场稳定：坐标变换方程不显含时间 t，即 $\overrightarrow{r} = \overrightarrow{r}(q)$。外场稳定则势能函数也不显含时间 t，即 $U = U(q)$。

此时动能为广义速度的二次齐次函数

$$T = \frac{1}{2} m_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j$$

其次，体系存在稳定平衡位置记作 $q^{(0)} = (q_1^{(0)}, \cdot, q_n^{(0)})$。因此有：

$$\frac{\partial U}{\partial q_k}\Big|_{q=q^{(0)}} = 0$$

即微小偏移引起的体系势能变化为广义坐标偏离的二阶小量。

3.1.2　简谐近似

将广义坐标与平衡位置的偏离量 $\xi_i \triangleq q_i - q_i^{(0)}$ 作为新的广义坐标。

仅考虑二阶项系数不为零的简谐近似。由于动能 T 中的 $\dot{\xi}_i \dot{\xi}_j = \dot{q}_i \dot{q}_j$ 为二阶小量，故只需保留 m_{ij} 的常数项，取 $M_{ij} \triangleq m_{ij}(q = q^{(0)})$，有

$$T = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{\xi}_i \dot{\xi}_j$$

对于势能的近似，可以将常数项略去（因为拉格朗日函数的规范变换），得到

$$U = \frac{1}{2}K_{ij}\xi_i\xi_j$$

因此简谐近似下体系的动能和势能分别为广义速度和广义坐标的二次齐次且正定的函数。

拉格朗日函数为：

$$L = T - U = \frac{1}{2}M_{ij}\dot{\xi}_i\dot{\xi}_j - \frac{1}{2}K_{ij}\xi_i\xi_j$$

拉格朗日方程为：

$$-\frac{\delta L}{\delta \xi_k} = M_{kj}\ddot{\xi}_j + K_{kj}\xi_j = 0$$

将拉格朗日方程写成矩阵形式即为：

$$M\ddot{\xi} + K\xi = 0$$

其中 M、K 均为对称正定矩阵。

在解决实际问题时，可以直接写出保留二阶项的拉格朗日函数，并通过下式求得 M，K：

$$M_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial\dot{\xi}_i\partial\dot{\xi}_j}$$

$$K_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial\xi_i\xi_j}$$

3.2　简正坐标与简正模

3.2.1　简正坐标

在简谐近似下的拉格朗日方程为 $M\ddot{\xi} + K\xi = 0$，下面的思路即是通过对该方程解耦来进行处理。

而**简正坐标** η 便是方程解耦后新的自变量。设变换 $\xi = A\eta$，其中 A 为可逆矩阵且元素为常数。

拉格朗日方程变为

$$MA\ddot{\eta} + KA\eta = 0$$

令 ξ与η 的变换矩阵 A 满足：

$$KA = MA\Omega_d$$

其中 $\Omega_d = diag(\omega_1^2, \cdots, \omega_n^2)$。则由拉格朗日方程可得：

$$\ddot{\eta} + \Omega_d\eta = 0$$

或者写为分量式

$$\ddot{\eta}_i + \omega_i^2\eta_i = 0 \quad \text{（不求和）}$$

也就是我们通过将 ξ 变为简正坐标 η 使得拉格朗日方程解耦。

3.2.2 特征值与特征向量

将 A 以列向量排列 $A = (A^{(1)}, \cdots, A^{(n)})$ 即 $A_{ij} = A_i^{(j)}$，则 A 所满足的方程写为：

$$KA^{(i)} = \omega_i^2 MA^{(i)}$$

用列向量 X 表示 A 的列向量，则求矩阵 A 的问题变为求解下面的方程：

$$KX = \omega^2 MX$$

该方程称为矩阵 K 关于对称正定矩阵 M 的特征向量方程，方程的非零解 X 称为特征值 ω^2 的特征向量。

对于该特征向量方程，若方程有非零解，则

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

将由该特征值方程（久期方程）得到的 n 个 ω^2（且可以证明 $\omega^2 > 0$）代回特征向量方程 $KX = \omega^2 MX$，此时特征向量方程为实系数线性齐次方程组，便可求得实的特征向量 X，也就求得了变换矩阵 A。

3.2.3 简正模

通过变换 $\xi = A\eta$ 解耦后的拉格朗日方程为

$$\ddot{\eta}_i + \omega_i^2 \eta_i = 0 \quad \text{（不求和）}$$

即每一个简正坐标满足简谐振动方程，有

$$\eta_i(t) = \lambda_i cos(\omega_i t + \varphi) = a_i cos(\omega_i t) + b_i sin(\omega_i t)$$

通过变换公式即可求得广义坐标：

$$\xi = A\eta = A^{(1)}\eta_1(t) + \cdots + A^{(n)}\eta_n(t)$$

我们将每一个频率为 ω_i 的简谐振动 $A^{(i)}\eta_i(t)$ 称为一个简正模，记作

$$\omega_k \leftrightarrow A^{(k)}$$

故真实运动即为简正模的线性组合。

3.2.4 试探特解

对于关于 ξ 的方程

$$M\ddot{\xi} + K\xi = 0$$

我们可以通过试探特解的方法求解。即将试探解 $\xi = X\cos(\omega t + \varphi)$ 代入方程 $M\ddot{\xi} + K\xi = 0$ 中，得到特征向量方程，从而解得 ω 及对应的 X，该方法的本质仍然是通过简正模的线性组合得到真实运动。

3.2.5 只与粒子径向距离有关的力

若有势力仅与体系中粒子的径向距离有关，如引力、弹性力、静电力等，因而他们的势能也仅与体系中粒子的径向距离有关，记势能为：

$$U(r) = U(|\overrightarrow{r}|) = U(|\overrightarrow{R} + \overrightarrow{u}|)$$

其中，记 $\overrightarrow{r}$ 在坐标轴的投影为 x_i，记平衡位置 $\overrightarrow{R}$ 在坐标轴的投影为 X_i，微小偏离量 $\overrightarrow{u}$ 在坐标轴的投影为 u_i。

由泰勒展开得：

$$\begin{aligned} U(r) &= U(R) + \left.\frac{\partial U}{\partial x_i}\right|_R u_i + \left.\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j}\right|_R u_i u_j \\ &= U(R) + (\hat{R}\cdot\overrightarrow{u})U'(R) + \frac{1}{2}(\hat{R}\cdot\overrightarrow{u})^2 U''(R) + \frac{u^2 - (\hat{R}\cdot\overrightarrow{u})^2}{2R}U'(R) \end{aligned}$$

其中第二个等号即是将分量的泰勒展开式整理为了矢量式。

3.2.6 分子振动

对于 n 个粒子构成的三维空间中的孤立体系，体系势能仅与体系中粒子的径向距离有关，体系整体的平动和转动各需要三个广义坐标，故体系的振动自由度为 3n-6。同样的，在二维空间中，体系振动自由度为 2n-3。

对于这种分子振动的问题，我们有两种解决方法：

方法一：剔除平动、转动自由度

由于我们只关心体系的振动，故可以假设体系没有平动和转动自由度，进一步，我们可假设体系的总动量和总角动量为 0。由此我们可以得到如下约束：

$$\sum m_a \overrightarrow{u_a} = 0$$

及

$$\sum \overrightarrow{R_a} \times m_a \overrightarrow{u_a} = 0$$

通过上式对粒子偏离量的约束剔除了体系的平动转动自由度，使我们的研究仅限于体系的振动上。

方法二：零模

当体系整体作平动或转动时，体系的势能并不改变，也就意味着矩阵 K 此时并不正定（仍保持非负），因而 K 有 0 特征值，其对应的模称为零模：

$$\omega_i \leftrightarrow A^{(i)}$$

零模对应的简正坐标的运动为

$$\eta_i = \lambda t + \varphi$$

零模所对应的简正运动即为体系整体的平动与转动，此时体系的真实运动仍为简正模的线性组合 $\xi = \eta_i A^{(i)}$

若选择用试探特解求解，仍然可以将试探解 $\xi = X\cos(\omega t + \varphi)$ 代入 $M\ddot{\xi} + K\xi = 0$, 只需将 $\omega = 0$ 的试探解改为 $\xi = X(\lambda t + \varphi)$ 即可。

例：对于一个正三角形分子，将坐标系原点 o 设立在三角形中心，o 到三个顶点平衡位置的矢量分别记为 $\overrightarrow{R_1}$、$\overrightarrow{R_2}$、$\overrightarrow{R_3}$，记三个顶点与各自平衡位置的微小偏离量为 $\overrightarrow{u_1}$、$\overrightarrow{u_2}$、$\overrightarrow{u_3}$，体系势能 $U = V(r_{12}) + V(R_{23}) + V(R_{31})$，则可以得到体系势能为：

$$U \approx \frac{1}{2}k[(\hat{R_{12}} \cdot \overrightarrow{u_{12}})^2 + (\hat{R_{23}} \cdot \overrightarrow{u_{23}})^2 + (\hat{R_{31}} \cdot \overrightarrow{u_{31}})^2]$$

其中，$k \triangleq V''(R)$。

故将 K 写作势能对 $\overrightarrow{u_1}$、$\overrightarrow{u_2}$、$\overrightarrow{u_3}$ 的二阶偏导，即

$$K = \frac{\partial^2 U}{\partial \overrightarrow{u_i} \partial \overrightarrow{u_j}} = k \begin{pmatrix} \hat{R_{12}}\hat{R_{12}} + \hat{R_{31}}\hat{R_{31}} & -\hat{R_{12}}\hat{R_{12}} & -\hat{R_{31}}\hat{R_{31}} \\ -\hat{R_{12}}\hat{R_{12}} & \hat{R_{12}}\hat{R_{12}} + \hat{R_{23}}\hat{R_{23}} & -\hat{R_{23}}\hat{R_{23}} \\ -\hat{R_{31}}\hat{R_{31}} & -\hat{R_{23}}\hat{R_{23}} & \hat{R_{23}}\hat{R_{23}} + \hat{R_{31}}\hat{R_{31}} \end{pmatrix}$$

下面采用猜解的方式解决：

首先猜测零解。猜测零模分别为体系整体沿两个垂直坐标轴方向的平动和绕中心的转动；猜测非零解分别为三个粒子沿径向扩张为更大的等边三角形、保持质心不变成以 2、3 或 1、2 粒子为底边的等腰三角形。将对应的 $\begin{pmatrix} \overrightarrow{u_1} \\ \overrightarrow{u_2} \\ \overrightarrow{u_3} \end{pmatrix}$ 代入

$$\omega^2 MX = KX$$

进行验证，得到体系的六个简正模。

3.3　一维链的振动

3.3.1　简谐近似

讨论由 n 个质量相同为 m 的粒子构成的体系。相邻粒子间由原长 d_0 弹性系数 K_0 的橡皮筋链接。且平衡时每段橡皮筋长度为 d，记一维链方向为 x 轴。第 a 个粒子相对于平衡位置的偏离量在 x 轴及垂直方向的投影分别为 φ_a, ψ_a。

体系势能略去常数项后为：

$$U = \frac{1}{2}K_0 \sum_{a=0}^{n} (\varphi_{a+1} - \varphi_a)^2 + \frac{1}{2}K \sum_{a=0}^{n} (\psi_{a+1} - \psi_a)^2$$

其中 $K \triangleq K_0(1 - d_0/d)$。于是平衡位置附近的一维链的拉格朗日函数为：

$$L = [\frac{1}{2}m \sum \dot{\varphi_a}^2 - \frac{1}{2}K_0 \sum (\varphi_{a+1} - \varphi_a)^2] + [\frac{1}{2}m \sum \dot{\psi_a}^2 - \frac{1}{2}K \sum (\psi_{a+1} - \psi_a)^2]$$

可见一维链中 φ 描述的纵向运动和 ψ 描述的横向运动互不影响。且二者只有 K 和 K_0 的区别。

3.3.2 横向运动

横向运动拉格朗日函数为：

$$L=\frac{1}{2}m\sum_a \dot{\psi}_a{}^2-\frac{1}{2}K\sum_a(\psi_{a+1}-\psi_a)^2$$

拉格朗日方程为：

$$\ddot{\psi}_a=-\omega_0^2(2\psi_a-\psi_{a+1}-\psi_{a-1})\qquad a=1,\cdots,n$$

其中，$\omega_0=\sqrt{K/m}$。下面采用猜解的方式处理横向运动（纯数学的方式较为繁琐）：

由于一维链的的两端都为固定端，猜测简正模为驻波。对于左右两端长度为 D 的驻波，若一共含有 k 个半波长，则 $\lambda_k=\frac{2D}{k}$，驻波的振动方程为：

$$\psi=C\sin\frac{2\pi x}{\lambda_k}\cos(\omega t+\varphi)$$

对于第 a 个粒子，$x_a=ad$，将含有 k 个半波长的驻波视为其试探解，则将 x_a,λ_k 代入驻波振动方程有：

$$\psi_a=C\sin\frac{ka\pi}{n+1}\cos(\omega_k t+\varphi)$$

将试探解代入拉格朗日方程验证成立，同时解得:

$$\omega_k=2\omega_0\sin\frac{k\pi}{2(n+1)}$$

3.4 场论初步

3.4.1 连续极限

下面通过将一维链问题取极限过渡至一维场的问题，即从离散过渡至连续：

将一维链横向运动问题中的粒子数 n 变为 sn，即每个粒子拓展为 s 个粒子。则质量 $m \to \Delta m = \frac{m}{s}$, 相邻粒子距离 $d \to \Delta x = \frac{d}{s}$ 每段橡皮筋弹性系数 $K \to sK$。

在这种拓展下有不变量：线密度 $\rho = \frac{m}{d} = \frac{\Delta m}{\Delta x}$ 和具有力的量纲的 $Y \triangleq Kd = (sK)(\frac{d}{s})$。于是

$$\omega_0^2 = \frac{K}{m} \to \frac{sk}{\Delta m} = \frac{Y}{\rho(\Delta x)^2} = \frac{v^2}{(\Delta x)^2}$$

其中 $v \triangleq \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$，将第 a 个粒子的广义坐标 ψ_a 变为关于位置的函数 $\psi(x)$。

将以上改变代入拉格朗日方程中并取极限 $s \to \infty$，便可得到连续的一维场。

将拉格朗日函数用拉格朗日密度表示：$L = \int \mathscr{L} dx$。场对应的拉格朗日密度为：

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\rho[(\frac{\partial \psi}{\partial t})^2 - v^2(\frac{\partial \psi}{\partial x})^2]$$

拉格朗日方程变为：

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

该式即为一维的波动方程。

所以与离散情况相比，我们是将拉格朗日函数变为拉格朗日密度 $L \to \mathscr{L}$，将广义坐标变为场 $q \to \psi$，将时间坐标变为时空坐标 $t \to t, x$。

离散的拉格朗日方程 $\frac{\delta L}{\delta q_k} = \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0$，变为了场的拉格朗日方程：

$$\frac{\delta \mathscr{L}}{\delta \psi} \triangleq \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \psi} - \partial_t \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial \psi / \partial t)} - \partial_x \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial \psi / \partial x)} = 0$$

3.4.2 场及其变分

首先对符号进行一些规定：用 x 代表时空坐标

$$x \triangleq (x_0, x_1, x_2, x_3) = (t, \overrightarrow{r})$$

约定希腊字母指标表示时空坐标，小写字母指标表示空间指标。并假设场 ψ 有 N 个分量：$\psi_I \quad (I=1,\cdots,N)$。用 $\partial\psi$ 表示 4N 个导数 $\partial_\alpha\psi_I$ 的集合。

故拉格朗日密度 $\mathscr{L}=\mathscr{L}(\psi,\partial\psi,x)$。

也就是说，在连续体系中，四个时空坐标 x 相当于离散体系的时间 t，场及其导数相当于广义坐标广义速度。作用量为：

$$S=\int_R \mathscr{L} d^4x$$

其中 R 是四维时空中的区域。

对于场的变分：

$$\psi_I \to \psi_I+\delta\psi_I$$

$$\delta(\partial_\alpha\psi_I)=\partial_\alpha\delta\psi_I$$

第四章　哈密顿力学

4.1　勒让德变换

4.1.1　相空间

对于一个 n 个自由度的体系，我们用 $(q, \dot{q})$ 这 2n 个状态参量生成的速度像空间来描述体系的运动状态，这是因为在 $(q, \dot{q}, t)$ 确定时，体系的 $\ddot{q}$ 由体系的拉格朗日方程所确定，即体系的真实运动被相点位置决定。

下面我们考虑用另一组变量 (q,p) 作为体系状态参量描述体系状态，where p 是与 q 共轭的广义动量。可以证明 (q,p) 相空间中的相点位置同样可以决定体系的运动状态，即 (q,p) 确实可以作为体系的一组状态参量（此处不给出详细的数学上的证明）。

与速度相空间类似，在 (q,p) **相空间**中不同轨迹不可能在同一时刻相交。在后面的问题处理时，我们将 (q,p) 视作一组对称的**状态参量**（这是由其性质决定的），这种对称性带来了极大便利。

4.1.2　Legendre transformation

在较为几何的观点上看，勒让德变换是将图像用切线与截距所作为坐标进行描述，当满足海斯条件时，二者所包含的信息是相同的。下面详细讲述这种变换：

对于多变量函数 $f(x,y)=f(x_1,\cdots,x_n,y_1,\cdots,y_m)$，定义

$$u_i=\frac{\partial f}{\partial x_i}$$

则 f(x,y) 对 x 的**勒让德变换**为：

$$g(u,y)\triangleq u_i x_i - f(x,y)$$

由勒让德变换的定义，我们可以得到以下性质：

$$u_k=\frac{\partial f}{\partial x_k},\quad x_k=\frac{\partial g}{\partial u_k}$$

而对于 f,g 二者共同的自变量 y，有：

$$\frac{\partial f}{\partial y_k}=-\frac{\partial g}{\partial y_k}$$

在哈密顿力学中，我们关注的是勒让德变换将 Lagrangian 和 Hamiltonian 联系。

4.2 哈密顿方程

4.2.1 哈密顿函数

我们对拉格朗日函数作勒让德变换，并定义变换后的函数为**哈密顿函数**：

$$H(q,p,t)\triangleq p_k\dot{q}_k - L$$

变换的结果 H 应通过 $p_k=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$ 的反变换写作 $H=H(q,p,t)$，由于勒让德变换不丢失体系信息，故哈密顿函数也包含了体系全部动力学信息。

哈密顿函数与拉格朗日力学中的雅可比积分拥有同样的数值，因此

$$\frac{dH}{dt}=\frac{dh}{dt}$$

但是由于二者自变量不同，故对 t 的依赖关系一般也不同：

$$\frac{\partial H}{\partial t}\neq\frac{\partial h}{\partial t}$$

4.2.2　哈密顿方程

我们将勒让德变换的性质应用于哈密顿函数的定义这一具体的变换，便得到：

$$\dot{q_k} = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p_k} = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

前一方程为勒让德变换的性质（也就是广义动量的定义），而后一方程则结合了拉格朗日方程。这 2n 个微分方程描述了体系状态参量 (q,p) 随时间的演化，称为**哈密顿方程**。

由于哈密顿方程的对称性，故也称为 **Canonical equation**。

计算哈密顿量对时间 t 的全导数，可以得到：

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

因此，当 H 不显含 t 时，H 为体系的运动常数。

4.2.3　Rowth 方法

对于一个 n 自由度体系，将 H 的循环坐标区分开，设 $(q_1, \cdots, q_s)$ 为非循环坐标 q_k，$(q_{s+1}, \cdots, q_n)$ 为循环坐标 q_a

由于哈密顿方程，$H = H(q_k, p_k, p_a, t)$ 中的循环坐标共轭的广义动量 p_a 为运动常数处理较为简便，故有下面的劳斯方法：

仅对循环坐标 q_a 进行勒让德变换，即

$$R \triangleq p_a \dot{q_a} - L = R(q_k, \dot{q_k}, p_a, t)$$

对应的方程为拉格朗日方程和哈密顿方程：

$$\dot{q_a} = \frac{\partial R}{\partial p_a}, \quad p_a = const, \quad \frac{\partial R}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\frac{\partial R}{\partial \dot{q_k}} = 0$$

4.3 哈密顿体系

4.3.1 Canonical variables

由于正则方程的对称性，我们将广义坐标 q 和广义动量 p 称为**正则变量** (**Canonical variables**)。

采用 ξ 描述正则变量，$\xi_K = q_k, \xi_{n+K} = p_k$，即：

$$\xi = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

由此，正则方程可以写为：

$$\dot{\xi} = \Omega \frac{\partial H}{\partial \xi}$$

where $\Omega = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$，关于矩阵 Ω，其是一个反对称正交矩阵，即 $\Omega^T = -\Omega, \Omega^T \Omega = I$。

4.3.2 Hamiltonian system

定义：

$$\Delta_H(\xi, t) = \Omega \frac{\partial H}{\partial \xi}$$

为哈密顿量 $H(\xi, t)$ 生成的矢量场。

根据正则方程 $\dot{\xi} = \Delta_H$ 知，Δ_H 为 ξ 的速度场，这样的体系称为哈密顿量 H 生成的**哈密顿体系**。

当给定一个体系的速度场 $\dot{\xi} = X(\xi, t)$ 时，可以通过下面的方法判定其是否为哈密顿体系。

即判断是否存在哈密顿函数 $H(\xi, t)$，使得 $X = \Omega \frac{\partial H}{\partial \xi}$, 对等式两边同时乘以矩阵 Ω，得 $-\Omega X = \frac{\partial H}{\partial \xi}$，

注意到等式右侧为哈密顿量的梯度,故 H 存在的充要条件为场 $Y=\Omega X$ 无旋，即

$$\partial_\alpha Y_\beta=\partial_\beta Y_\alpha$$

4.3.3 相空间中的哈密顿原理

定义相空间中的 Lagrangian：

$$\widetilde{L}(\xi,\dot{\xi},t)=p_k\dot{q}_k-H(q,p,t)$$

应注意 $\widetilde{L}$ 并不是 H 的勒让德变换即并不是拉格朗日函数，这是因为 $\widetilde{L}$ 的定义式中并不将广义动量 p 变换为 $\dot{q}$，故其自变量为 $(\xi,\dot{\xi},t)$。

而相空间中的哈密顿原理是指：

对于 $H(\xi,t)$ 生成的哈密顿体系，如果相点在 t_1 时刻和 t_2 时刻在相空间中的位置固定，则具有相同端点的所有可能路径中，真实运动是使得作用量

$$\widetilde{S}=\int_{t_1}^{t_2}\widetilde{L}dt$$

取驻值的路径。

事实上，我们可以将可能路径的范围放宽至：相点在 t_1 时刻和 t_2 时刻具有相同的广义坐标，则真实运动仍然是所有可能路径中使作用量取驻值的路径。

4.4 泊松括号

4.4.1 definition

定义相空间中的函数 $f(\xi,t)$ 为力学量。下面定义一种数学运算 **poisson bracket**：

$$[f,g]\triangleq\frac{\partial f}{\partial\xi_\rho}\Omega_{\rho\sigma}\frac{\partial g}{\partial\xi_\sigma}=\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k}-\frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k}$$

还可在 [ ] 右下角标出状态参量来对其进行强调：$[f,g]_\xi$

4.4.2 数学性质

1、反对称性

$$[f,g]=-[g,f]$$

因而 [f,f]=0

2、双线性性

$$[a_i f_i, b_j g_j]=a_i b_j[f_i,g_j]$$

3、雅可比恒等式

$$[f,[g,h]]+[h,[f,g]]+[g,[h,f]]=0$$

这一恒等式可与叉乘类比记忆。

4、莱布尼兹法则

由于导数运算的莱布尼兹法则：

$$[f,gh]=[f,g]h+g[f,h]$$

将等式右端写成保持 gh 相乘顺序不变是为了与量子力学对应。

5、链式法则由于导数运算的链式法则：

$$[f,g(h)]=[f,h]\frac{\partial g}{\partial h}$$

故 $[f,g(f)]=0$

6、基本泊松括号

$$[\xi_\alpha,\xi_\beta]_\xi=\Omega_{\alpha\beta}$$

特别的，

$$[q_i,q_j]=[p_i,p_j]=0,\quad [q_i,p_j]=\delta_{ij}=-[p_i,p_j]$$
$$[q_i,f]=\frac{\partial f}{\partial p_i},\quad [p_i,f]=-\frac{\partial f}{\partial q_i}$$

之所以将状态参量的泊松括号称为基本泊松括号，是因为对于任意力学量 f,g，应用链式法则有

$$[f,g]_\xi = \frac{\partial f}{\partial \xi_\alpha}[\xi_\alpha, \xi_\beta]_\xi \frac{\partial g}{\partial \xi_\beta}$$

7、对参数 t 的偏导数

$$\partial_t[f,g] = [\partial f_t, g] + [f, \partial_t g]$$

值得一提的是，在我们仅将泊松括号作为一种数学运算时，t 仅仅是一个参数，只有当我们考虑物理问题时，我们才赋予 t 时间的含义。

4.4.3 泊松括号在哈密顿体系的应用

在上面我们只是定义了一种数学运算或者说是记号，下面我们将这种记号运用于哈密顿体系。

正则方程即为：

$$\dot{\xi_\alpha} = [\xi_\alpha, H]$$

对任一力学量 $f(\xi,t)$，其对时间的全导数为：

$$\dot{f} = [f,H] + \frac{\partial f}{\partial t}$$

因此相空间中的力学量 $\dot{f}$ 对时间的全导数仍然可以写作状态参量的函数 $\dot{f}(\xi,t)$，即力学量对时间的全导数仍为力学量。

泊松定理：在哈密顿体系中，对于力学量 f,g，其泊松括号 [f,g] 仍为力学量，其对时间导数为：

$$\frac{d}{dt}[f,g] = [\frac{d}{dt}f, g] + [f, \frac{d}{dt}g]$$

因此力学量泊松括号的导数可类比莱布尼兹法则，于是高阶导数有：

$$\frac{d^n}{dt^n}[f,g] = \Sigma C_n^i [f^{(i)}, g^{(n-i)}]$$

由此知，如果 f,g 为运动常数，所以 [f,g] 的 n 阶导数也为运动常数，也就是我们可以通过两个运动常数利用泊松括号构造出任意多运动常数，不过我们知道 n 自由度体系的独立运动常数只有 2n 个。

4.4.4 泊松括号判断哈密顿体系

利用泊松括号，哈密顿体系有以下两个充分条件：

1、如果对于任意力学量 f,g，泊松定理成立即 $\frac{d}{dt}[f,g]=[\frac{d}{dt}f,g]+[f,\frac{d}{dt}g]$，则体系为哈密顿体系。

2、如果 $[\dot{\xi_\alpha},\xi_\beta]_\xi+[\xi_\alpha,\dot{\xi_\beta}]_\xi=0$，则体系为哈密顿体系。

显然充分条件 1、2 是等价的，实际使用时 2 显然要较为便利。充分条件 2 中的 $\dot{\xi}$ 应是通过速度场 $\dot{\xi}=X(\xi,t)$ 写为状态参量的函数，且充分条件 2 中只有 C_n^2 个方程是独立的，也就是只需验证 $1\leqslant\alpha\leqslant\beta\leqslant n$ 的情况即可。

4.5 Canonical Transformation

4.5.1 一般正则变换定义与条件

称变换 $\xi\to\eta=\eta(\xi,t)$ 为类正则的 (canonoid)，如果 $H(\xi,t)$ 生成的哈密顿体系以 η 作为状态参量时仍为哈密顿体系。如果变换 $\xi\to\eta=\eta(\xi,t)$ 对任意 $H(\xi,t)$ 都为类正则的，则称变换为**正则变换 (Canonical Transformation)**。

可以证明，正则变换的充要条件为：

$$[\xi_\alpha,\xi_\beta]_\eta=a\Omega_{\alpha\beta}$$

where $a\neq 0$，因此其等价的充要条件为：对于任意的力学量 f,g，有

$$[f,g]_\eta=a[f,g]_\xi$$

4.5.2 受限正则变换

受限正则变换是指上面正则变换的充要条件中 a=1 的正则变换，后面的正则变换均为受限正则变换的简称。

受限正则变换有如下四个等价判据：

1、poisson 括号不变性

$$[f,g]_\eta = [f,g]_\xi \quad \forall f,g$$

2、基本 poisson 括号不变性

$$[\xi_\alpha, \xi_\beta]_\eta = \Omega_{\alpha\beta}$$

3、辛矩阵条件

设变换的雅可比矩阵为 $M_{\alpha\beta} = \frac{\partial\eta_\alpha}{\partial\xi_\beta}$，则可以证明 M 为辛矩阵，即满足条件：

$$M\Omega M^T = \Omega \quad \text{或者} \quad M^T\Omega M = \Omega$$

4、可积条件

存在**生成函数** F(q,p,t)，

$$st. \quad p_k\delta q_k - P_i\delta Q_i = \delta F$$

因此，如果 F' 也为生成函数，则二者只能相差 t 的函数即

$$F' = F + f(t)$$

通常直接令 f(t) 取 0.

通过将 F,Q 对参数的变分展开，得到如下偏微分方程组：

$$\frac{\partial F}{\partial q_k} = p_k - \frac{\partial Q_i}{\partial q_k}P_i$$

$$\frac{\partial F}{\partial p_k} = -\frac{\partial Q_i}{\partial p_k}P_i$$

下面介绍两种特殊的正则变换：

当 $q_k \to Q_k(q,t)$ 时，若 F=0，则称其为点变换，有 $P_i = p_k\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}$

当 $Q_i = q_i$ 时，称之为规范变换，则有 $P_i = p_i - \frac{\partial F(q,t)}{\partial q_i}$。

4.5.3 辛矩阵

正则变换的雅可比矩阵 M 为辛矩阵，而辛矩阵具有如下性质。

detM=1

且辛矩阵的几何具有群的结构，也就意味着：

辛矩阵的乘法运算具有封闭性，M_1, M_2 为辛矩阵，则 $M = M_1M_2$ 也为辛矩阵。对应物理含义为正则变换的复合变换也为正则变换。

辛矩阵满足乘法结合律，$M_1(M_2M_3) = (M_1M_2)M_3$，对应物理含义为正则变换的复合顺序不改变复合后得到的正则变换。

辛矩阵的集合存在单位元 I，使得 MI=IM=I。即恒等变换为正则变换。

辛矩阵的集合存在逆元，即 M^{-1} 也为辛矩阵，正则变换的逆变换为正则变换。

4.5.4 刘维尔定理

首先说明，哈密顿体系随时间的演化在被动观点下为正则变换：

状态参量的演化由正则方程和初始状态决定，即：

$$\xi_\alpha(t) = \Sigma_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\frac{d^n\xi_\alpha(t)}{dt^n}$$

从被动观点上，上式表示变换

$$\eta_\alpha(t) = \Sigma_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\frac{d^n\xi_\alpha(t)}{dt^n}$$

，通过验证基本泊松括号不变性可以证明其为正则变换。

由于正则变换的雅可比矩阵 M 有 detM=1，故正则变换不改变相空间的体积。又因为哈密顿体系的演化在被动观点上确实为正则变换，故哈密顿体系的演化过程中，相空间中的任意区域体积不变，这就是**刘维尔体积定理**。

若相空间中一共有 N 个相点，则定义一个区域的数密度 $n=\frac{\Delta N}{\Delta\Gamma}$，通过归一化引入态密度函数：

$$\rho \triangleq \frac{n}{N}=\rho(\xi,t)$$

因为任意区域的相点数不变（这是由相轨迹不能相交得出的），又刘维尔体积定理，故 $\rho(\xi,t)$ 不随时间改变为常数，这就是**刘维尔定理**。也就是说，t 时刻 ξ 处的态密度函数，与 t=0 时刻 $\xi_0(t=0)$ 处的态密度时相同的。

4.5.5 新哈密顿函数

对于正则变换 $\xi\to\eta=\eta(\xi,t)$，尝试寻找变换后的状态参量所对应的哈密顿函数 $K(\eta,t)$，即能够满足正则方程 $\frac{d\eta_\alpha}{dt}=[\eta_\alpha,K]_\eta$。

若 K' 也为新哈密顿函数，则二者只能相差 t 的函数即 $K'=K+f(t)$，通常将 f(t) 取 0.

若正则变换不显含 t，即 $\eta=\eta(\xi)$，则 $K(\eta,t)=H(\xi(\eta),t)$

对最一般的正则变换，其新哈密顿函数有：

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

最终，可积条件以及新旧哈密顿函数的关系可以合并至一个式子：

$$p_k dq_k-P_k dQ_k+(K-H)dt=dF$$

通过 F，Q 对 q,p,t 的展开式即可得到可积条件以及新旧哈密顿函数的关系

4.6 正则变换的分类

4.6.1 正则变换的分类

正则变换中，$\xi=(q,p)$ 和 $\eta=(Q,P)$ 均为 2n 个独立变量，尝试寻找新的独立变量组合如 (q,Q)，以此为依据对正则变换分类。

如果 $det(\frac{\partial Q_i}{\partial p_j}) \neq 0$，则意味着存在反变换 $p_i = p_i(Q,q,t)$，故 q,p,Q,P 均可由 q,Q 表示，即 q,Q 为独立的状态参量，这种正则变换称为第一类正则变换。如下为正则变换的分类：

第一类正则变换	（q,Q）独立
第二类正则变换	（q,P）独立
第三类正则变换	（p,Q）独立
第四类正则变换	（p,P）独立

4.6.2 第一类正则变换

第一类正则变换将 q,Q 作为状态参量。故此时生成函数变为第一类生成函数

$$F_1(q,Q,t) = F(q,p(q,Q,t),t)$$

由于 $p_k dq_k - P_k dQ_k + (K-H)dt = dF_1$，得：

$$p_k(q,Q,t) = \frac{\partial F_1}{\partial q_k}$$

$$P_k(q,Q,t) = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_k}$$

$$K(q,Q,t) = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

若正则变换已知，则将 q,p,Q,P 均用 q,Q 表示，通过上面两式求解生成函数 F_1，利用第三式解得 K 并变换为 $K(Q,P,t)$，通过正则方程解得 Q，P 的演化，反变换得到 q,p 的演化。

若已知生成函数，则可以由上述两式求得 p(q,Q,t),P(q,Q,t)，通过变换为 P(q,p,t),Q(q,p,t) 确定唯一正则变换。

将第一式代入 $det(\frac{\partial Q_i}{\partial p_j}) \neq 0$ 则得到海斯条件：

$$det(\frac{\partial^2 F_1}{\partial q_i \partial Q_j})$$

4.6.3 第二类正则变换

第二类正则变换将 q,P 作为状态参量，第二类生成函数：

$$F_2(q,P,t)=F+P_kQ_k$$

由于 $p_kdq_k+Q_kdP_k+(K-H)dt=dF$，得

$$p_k(q,P,t)=\frac{\partial F_2}{\partial q_k}$$

$$Q_k(q,P,t)=\frac{\partial F_2}{\partial P_k}$$

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

同理，第三类正则变换的生成函数为 $F_3(p,Q,t)=F-p_kq_k$，第四类正则变换的生成函数为 $F_4(p,P,t)=F+P_kQ_k-p_kq_k$

4.7 哈密顿-雅可比理论

4.7.1 哈密顿-雅可比方程

我们希望寻找到一个正则变换，使得在变换后的状态参量 P,Q 生成的相空间中，相点是保持不随时间变化的，即使变换后的新哈密顿量 K=0.

下面仅讨论第二类正则变换，并定义第二类生成函数为**哈密顿主函数 S(q,P,t)**。故哈密顿主函数 S 应满足的海斯条件为：

$$det(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i\partial P_j})\neq 0$$

由于新哈密顿函数 K=0，即

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

又 $p=\frac{\partial S}{\partial q}$，故得到**哈密顿-雅可比方程**：

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=H(q,\frac{\partial S}{\partial q},t)$$

也就是说，如果我们找到一个主函数 S 的解，则对应正则变换使得变换后的状态参量 Q，P=const。

4.7.2 哈密顿特征函数

首先明确一些数学方法：哈密顿-雅可比方程为偏微分方程，而我们只需寻找方程的“特解”，也就是被称为**完全积分**的解。我们可以将完全积分解中的积分常数视为新的广义动量 P。如果对于两个独立的变量组 x,y，有 $f(x) = g(y)$ 对任意 xy 取值成立，则 f(x)=g(y)=const。

下面讨论哈密顿量不显含时间 t 的哈密顿体系。不妨设主函数具有如下形式：

$$S(q,t) = W(q) + T(t)$$

where, W(q) 被称为**特征函数**。则哈密顿方程变为：

$$-\frac{\partial T}{\partial t} = H(q, \frac{\partial W}{\partial q})$$

由于 H 为常数，故不妨设广义动量 $P_1 = H$，则分别得到 W，T 满足的方程：

$$-\frac{\partial T}{\partial t} = P_1$$

$$H(q, \frac{\partial W}{\partial q}) = P_1$$

得到 $T = -P_1 t$ 以及特征函数满足的偏微分方程，故主函数为：

$$S(q,t) = W(q) - P_1 t$$

4.7.3 分离变量

设 $\overline{q} = (q_1, \cdots, q_{n-1})$，希望将特征函数 W 中的 q_n 与其他广义坐标解耦，即 $W(q) = \overline{W}(\overline{q}) + W_n(q_n)$。于是有下面几种可简化我们处理的情况：

1、若 q_n 为 H 的循环坐标，即 H 不显含 q_n，则 p_n 为运动常数，故可设 $P_n = p_n$，则有

$$\frac{\partial W_n}{\partial q_n} = P_n$$

得到 $W = \overline{W}(\overline{q}) + P_n q_n$

2、若 $H(q,p) = \overline{H}(\overline{q},\overline{p}) + H_n(q_n,p_n)$ 又 H 为常数，则

$$H_n = P_n, \quad \overline{H}(\overline{q}, \frac{\partial \overline{W}}{\partial \overline{q}}) = P_1 - P_n$$

3、若 $f(\overline{q})H(q,p) = \overline{H}(\overline{q},\overline{p}) + H_n(q_n,p_n)$，则

$$H_{q_n} = P_n, \quad \overline{H}(\overline{q}, \frac{\partial \overline{W}}{\partial \overline{q}}) = f(\overline{q})P_1 - P_n$$

4.7.4　完全可分离体系

如果特征函数的全部广义坐标都可以解耦，即

$$W = \sum W_k(q_k)$$

则称相应的哈密顿体系为**完全可分离体系**，相应的正则变换为：

$$p_k = \frac{\partial W_k}{\partial q_k} = p_{q_k,P}$$

$$Q_k = \frac{\partial S}{\partial P_k} = Q(q,P,t)$$

第二式中仅当 k=1 时 Q 表达式才显含时间 t。第一式的反变换及第二式给出了 2n 个运动常数。