分析力学笔记

臧亦驰

目录

1 拉格朗日力学

1.1 拉格朗日函数

1.1.1 广义坐标

通常，唯一地确定（完整）系统位置所需的独立变量数目称为系统的**自由度**，N 个自由质点组成的系统自由度为 $3N$。

对于 s 个自由度的系统，可以完全刻画其位置的任意 s 个变量 $q_1, q_2, \cdots, q_s$ 称为该系统的**广义坐标**，其导数 $\dot{q}_i$ 称为**广义速度**。同时给定系统的所有广义坐标和速度就可以确定系统的状态，并且原则上也可以预测以后的运动。

1.1.2 拉格朗日函数

每个力学系统都可以用一个确定的函数 $L(q, \dot{q}, t)$ 来表征，这个函数称为**拉格朗日函数**。在 t_1 和 t_2 两个时刻之间对拉格朗日函数的积分

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) \mathrm{d}t$$

称为**作用量**。系统的运动应满足在两个时刻间的作用量取极小值，这称作**最小作用量原理**。

1.1.3 拉格朗日方程

由积分取极小值的条件，利用变分法可以得到一个微分方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$$

对于有 s 个自由度的系统，每个自由度独立地变分可以得到 s 个方程，这就是系统应满足的运动微分方程（组），称为**拉格朗日方程**。当系统中出现非保守力时，拉格朗日方程化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = Q$$

其中 Q 为非保守力的广义力（即未写进拉格朗日量的项）。

1.1.4 广义动量和广义力

拉格朗日函数对广义速度的导数称为**广义动量**

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

一般情况下广义动量是广义速度的齐次函数。

拉格朗日函数对广义坐标的导数称为**广义力**

$$Q_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

通过广义坐标和广义力，可以将拉格朗日方程写为

$$\dot{p}_i = Q_i$$

1.1.5 可遗坐标

在拉格朗日函数中不显含的坐标称为**可遗坐标**

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

可遗坐标对应的广义动量是守恒量。

1.1.6 拉格朗日函数的不确定性

假设两个拉格朗日函数之间相差某个坐标和时间的函数对时间的全导数

$$L'(q, \dot{q}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(q, t)$$

计算这两个拉格朗日函数对应的作用量积分

$$\begin{aligned} S' = \int_{t_1}^{t_2} L'(q, \dot{q}, t)\mathrm{d}t &= \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t)\mathrm{d}t + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(q, t)\mathrm{d}t \\ = S + f(q, t)\Big|_1^2 \end{aligned}$$

即 S 和 S' 之间相差一个附加项，该附加项在变分时消失，因而运动微分方程完全相同。

1.1.7 广义能量函数

定义以下函数为**广义能量函数**

$$H_q = \sum_\alpha \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}\alpha - L(q, \dot{q}, t)$$

后文可以看到，这在拉格朗日量不含时间的系统中对应传统力学中的机械能。

1.1.8 广义功能定理

广义能量随时间的变化量满足

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \sum_i Q_i \dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t}$$

其中 Q_i 表示非保守广义力。当系统中不含有非保守力时，上式化为

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

这个式子被称为**广义功能定理**，它和拉格朗日方程之间不独立。

1.2 约束

1.2.1 约束

对于有 n 个质点的系统有 $3n$ 个坐标描述，由于系统存在的约束条件，质点的坐标和速度可能需要满足某些限制

$$f(u_1 u_2, \cdots, u_{3n}; \dot{u}_1, \dot{u}_2, \cdots, \dot{u}_{3n}; t) = 0$$

这些方程称为**约束方程**。坐标和速度满足的条件称为**约束条件**。

如果约束只包含位形，则称为**几何约束**，如果对速度也有限制则称为**运动约束**。如果运动约束可以积分转化成几何约束，那么它们就没有区别，统称为**完整约束**，不可积的运动约束称为**非完整约束**。对于非完整约束，除了运动方程外还需加上广义坐标的约束方程。

根据约束方程是否显含时间还可以区分**定常约束**和**非定常约束**。

1.2.2 虚位移

将符合某一瞬间（时间保持不变）的约束条件的一切可能无限小位移 δq 称为**虚位移**。对于定常约束，真实位移是虚位移中的一个。

1.2.3 虚功原理

经过一个虚位移时力对物体做功之和称为**虚功**

$$\delta W = \sum_i Q_i \delta q_i = \sum_i (F_i + R_i)\delta q_i$$

其中 F_i 为主动力，R_i 为约束力。如果系统中约束力做的虚功之和为零

$$\sum_i R_i \delta q_i = 0$$

则称这样的约束为**理想约束**。

如果一个系统处于平衡状态，那么它主动力的虚功为零

$$\sum_i F_i \delta q_i = 0$$

这称为**虚功原理**。对于完整约束，可以认为这些 δq_i 是相互独立的，即可以得到

$$F_i = 0$$

1.2.4 拉格朗日乘子法

若为了计算约束力，可在选取广义坐标时暂时不考虑相应的约束条件，此时得到的广义坐标个数将超过系统自由度，得到虚功原理

$$\delta W = \sum_{i=1}^{s} F_i \delta q_i = 0$$

和约束方程

$$f_j(q_1, q_2, \cdots, q_s, t) = 0, \quad (j = 1, 2, \cdots, l)$$

它的微分形式是

$$\sum_{i=1}^{s} \frac{\partial f_j}{\partial q_i} \delta q_i = 0$$

其中不含 t 是因为虚位移不是时间中的过程。将它分别乘待定系数 λ_i 后与虚功原理方程合并，可得

$$\sum_{i=1}^{s} (F_i + \sum_{j=1}^{l} \lambda_j \frac{\partial f_j}{\partial q_i}) \delta q_i = 0$$

可以认为这些 f_j 的偏导数项决定了各个约束条件造成的约束力的方向，而大小则受到待求的乘子 λ_j 调整。于是项 $\lambda_j\dfrac{\partial f_j}{\partial q_i}$ 就表示第 j 个约束方程产生的沿 i 方向的约束力。与虚功原理的情况不同的是，这其中的 δq_i 只有 $s-l$ 个相互独立，然而通过选取合适的乘子，总可以使得 l 个括号中的项为零，而剩下的 $s-l$ 项可以认为对应的 δq_i 是独立的，于是括号中的项也为零。由此我们可以得到

$$F_i+\sum_{j=1}^{l}\lambda_j\frac{\partial f_j}{\partial q_i}=0$$

即主动力和约束力分量之和为零。由这个方程和约束方程联立即可以解出 q_i 和**拉格朗日乘子** λ_j。这个方法称为**拉格朗日乘子法**。

1.3 系统的拉格朗日量

1.3.1 自由质点与质点系

在惯性系中自由运动的质点，其拉格朗日函数为

$$L=\frac{1}{2}mv^2$$

对于一个内部有相互作用而不与外部相互作用的质点系，我们称其为封闭质点系，则拉格朗日函数为

$$L=\sum_i\frac{1}{2}m_iv_i^2-U(\vec{r}_i)$$

其中下标 i 表示第 i 个质点，函数 U 称为质点系的**势能**，而第一项

$$T=\sum_i\frac{1}{2}m_iv_i^2$$

称为质点系**动能**。根据拉格朗日函数的不确定性，势能可以增减任意常数而不改变运动方程，一般来说选择这个常数使得无限增大质点间距离时势能趋向于零。

将以上拉格朗日函数带入运动方程可以得到第 i 个质点满足

$$m_i\frac{\mathrm{d}\vec{v}_i}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial U}{\partial\vec{r}_i}$$

这种形式的运动方程称为牛顿方程，方程右端的矢量

$$\vec{F}_i=-\frac{\partial U}{\partial\vec{r}_i}$$

称为作用在第 i 个质点上的**力**。

1.3.2 非封闭质点系

假设非封闭的质点系 A，它与完全已知的质点系 B 相互作用，这种情况下称 A 在（由 B 产生的）给定的外场中运动。假定 $A+B$ 是封闭的，则质点系 A 的拉格朗日函数为

$$L_A=T_A(q_A,\dot{q}_A)-U(q_A,q_B(t))=T_A(q_A,\dot{q}_A)-U(q_A,t)$$

可以看到其差别在于势能中可能显含时间。

1.3.3 拉格朗日函数的推导*

对于在惯性参考系中的自由质点，由于时间和空间的均匀性意味着拉格朗日函数不显含质点的位矢和时间，同时由于空间各向同性，拉格朗日函数也不依赖于速度的方向，即

$$L = L(v^2)$$

如果惯性参考系 K 以无穷小的速度 $\delta\vec{v}$ 相对另一惯性系 K' 运动，则有 $\vec{v'} = \vec{v} + \delta\vec{v}$，则两个参考系中的自由质点的拉格朗日函数

$$L' = L(v'^2) = L(v^2 + 2\vec{v}\cdot\delta\vec{v} + \delta v^2)$$

将其展开为 $\delta\vec{v}$ 的幂级数并忽略高阶小量，得

$$L(v'^2) = L(v^2) + 2\frac{\partial L}{\partial v^2}\vec{v}\cdot\delta\vec{v}$$

只有等式右边第二项与速度呈线性关系时，他才能是时间的全导数，因此 $\frac{\partial L}{\partial v^2}$ 不依赖于速度，即该情况下拉格朗日函数与速度的平方成正比

$$L = \frac{1}{2}mv^2$$

其中 m 是一个常数，称为质点的**质量**。

1.3.4 电磁学中的拉格朗日量

在电磁学中，带电粒子的拉格朗日量为

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - |q\Phi(\vec{r},t) - q\vec{v}\cdot\vec{A}(\vec{r},t)|$$

可以看出与经典力学中的拉格朗日量相比，其“势能”项的自变量多了一个速度，这是为了解决电磁学中的非保守力问题。写成广义坐标的形式即

$$L(s,\dot{s},t) = T(s,\dot{s}) - U^{(vel)}(s,\dot{s},t)$$

1.4 时间作为广义坐标

1.4.1 新的坐标

将时间作为一个新的广义坐标，记为 $q_0 = t$，将质点的运动轨迹拓展为了 $s+1$ 维位形空间中的轨迹。为了描绘曲线引入一个单调的新参量 β，于是曲线可写为

$$q_k = q_k(\beta), k = 0, 1, \cdots, s$$

因为时间总是单调的，所以要求 $\dfrac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\beta} \neq 0$，对于传统拉格朗日力学，这个参量最终可以取牛顿时间 t，对于狭义相对论，这个参量可选为固有时。

1.4.2 扩展广义速度

仿照传统广义速度，将以下物理量定义为广义速度

$$\dot{q}_k = \frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}\beta}$$

同时为了后文讨论，广义坐标对时间的导数记为

$$q'_k = \frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}t} = \frac{\dot{q}_k}{\dot{q}_0}$$

另外，记 $q_{[k]}$ 为除了 q_k 外的广义坐标。

1.4.3 扩展的拉格朗日量

为了将变分原理写为

$$S = \int_A^B \mathcal{L}(q, \dot{q})\mathrm{d}\beta$$

定义扩展的拉格朗日量为

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \dot{t}L(q_{[0]}, q'_{[0]}, t) = \dot{q}_0 L(q_{[0]}, \dot{q}_{[0]}, q_0)$$

可以注意到，扩展拉格朗日量是广义速度的齐一次函数。

1.4.4 扩展广义动量

与传统广义动量类似，定义拉格朗日量对广义速度的导数为广义动量

$$\begin{aligned} p_k &= \frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_k} \\ &= \frac{\partial L(q_{[0]}, q'_{[0]}, q_0)}{\partial q'_k} \end{aligned}$$

其中 $k \neq 0$ 时广义动量与传统广义动量相等，而 $k = 0$ 时广义动量是传统广义能量函数的负值。扩展后的广义动量是广义速度的齐零次函数。

1.4.5 扩展的拉格朗日方程

扩展后的拉格朗日方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q})}{\partial q_k} = \mathcal{Q}_k$$

其中拓展后的（非保守）广义力为

$$\mathcal{Q}_k = \begin{cases} \dot{q}_0 Q_k, & k = 1, 2, \cdots, s \\ -\displaystyle\sum_{l=1}^{s} \dot{q}_l Q_l, & k = 0 \end{cases}$$

1.4.6 方程的独立性

在扩展的拉格朗日方程中，共有 $s+1$ 个方程，但这其中只有 s 个是独立的，这可以通过齐次函数的性质

$$\mathcal{L}(q,\dot{q})=\sum_k \frac{\partial \mathcal{L}(q,\dot{q})}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k$$

两边对 β 求全导数得到。

1.5 对称与守恒

1.5.1 运动积分

关于 $q_i,\dot{q}_i$ 的某些函数在运动过程中保持不变，仅由初始条件决定，这样的函数称为**运动积分**。对于一个有 s 个自由度的封闭力学系统，有 $2s-1$ 个独立的运动积分。

1.5.2 诺特定理

对于任意一种在坐标连续变换下系统的作用量的不变性都有相应的运动积分，也即对称性和守恒量之间存在对应关系，这称为**诺特定理**。

在扩展后的位形空间中，对于已经满足最小作用量原理的曲线做一个微小变化

$$\delta q_k=\epsilon\eta_k(\beta),\quad k=0,1,\cdots,D$$

其中 ϵ 是一个无穷小参数，如果这个路线微变使得至少一个端点也发生变化，且这个微变满足驻值原理，就有以下这个量为运动积分

$$J=\sum_k p_k(q,\dot{q})\delta q_k(\beta)=\epsilon\sum_k p_k(q,\dot{q})\eta_k(\beta)$$

这个证明可以以拉格朗日函数的不确定性，或者在此背景下，以拓展的拉格朗日量不变作为基础。

1.5.3 能量守恒定律

由于时间的均匀性，封闭系统的拉格朗日函数不显含时间，因此，拉格朗日函数对时间的全导数可以写成

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}=\sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i}\dot{q}_i+\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i$$

结合拉格朗日方程可以得到

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

由此可知

$$E=\sum_i \dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-L$$

在封闭系统运动中保持不变，是运动积分。这称为系统的**能量**。可以注意到这实际上就是系统的广义能量函数。

以上推导仅利用了拉格朗日函数不显含时间的性质，所以对于定常外场中的系统能量守恒定律同样成立。能量守恒的力学系统称为**保守系统**。

封闭或位于定常外场中的系统拉格朗日函数如下

$$L = T(q, \dot{q}) - U(q)$$

其中动能 T 是速度的二次函数，利用齐次函数的欧拉定理可得

$$\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = 2T$$

由此可得

$$E = T + U$$

1.5.4 动量守恒定律

根据空间均匀性，封闭系统在空间中整体平移时，其性质保持不变，也即对于任意的小位移拉格朗日函数的变化量都为零，即

$$\sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \vec{r}_\alpha} = 0$$

根据拉格朗日方程得

$$\sum_\alpha \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \vec{v}_\alpha} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \vec{v}_\alpha} = 0$$

由此可知，矢量

$$\vec{P} = \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \vec{v}_\alpha}$$

在封闭系统运动中保持不变，这称为系统的**动量**。

没有外场时，动量的三个分量全部守恒，若外场的势能不显含某个笛卡尔坐标，则相应方向的动量分量守恒。

由于 $\dfrac{\partial L}{\partial \vec{r}_\alpha} = -\dfrac{\partial U}{\partial \vec{r}_\alpha}$ 就是作用在第 α 个质点上的力，我们可以得到

$$\sum_\alpha \vec{F}_\alpha = 0$$

即作用在封闭系统的所有质点上的力之和为零。这是牛顿第三定律的一般化情况。

1.5.5 力学相似性

若势能函数是坐标的 k 次齐次函数，即对于任意常数 α，

$$U(\alpha \vec{r}_i) = \alpha^k U(\vec{r}_i)$$

引入变换，使得坐标都变为 α 倍，而时间变为 β 倍

$$\vec{r} \to \alpha \vec{r}, \quad t \to \beta t$$

这时候速度变为 $\dfrac{\alpha}{\beta}$ 倍，动能变为 $\dfrac{\alpha^2}{\beta^2}$ 倍，势能变为 α^k 倍，若满足

$$\frac{\alpha^2}{\beta^2} = \alpha^k$$

即

$$\beta = \alpha^{1-k/2}$$

则变换结果是拉格朗日函数乘以常数 α^k，运动方程保持不变。

质点坐标改变相同倍数代表运动轨迹相似，由此可知，势能为（笛卡尔）坐标的 k 次齐次函数时，运动方程的解为一系列相似的轨迹，不同轨迹上运动时间之比满足

$$\frac{t'}{t} = \left(\frac{l'}{l}\right)^{1-k/2}$$

同理，对于速度和能量分别有

$$\frac{v'}{v} = \left(\frac{l'}{l}\right)^{k/2}, \quad \frac{E'}{E} = \left(\frac{l'}{l}\right)^{k}$$

由此可以得出诸如简谐振动周期与振幅无关或开普勒第三定律这样的结论。

1.5.6 位力定理

如果力学系统在有限的空间中运动，并且势能是坐标的 k 次齐次函数，定义函数 $f(t)$ 对时间的平均为

$$\overline{f} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau}\int_0^\tau f(t)\mathrm{d}t$$

则有

$$2\overline{T} = k\overline{U}$$

即

$$\overline{U} = \frac{2}{k+2}E, \quad \overline{T} = \frac{k}{k+2}E$$

2 哈密顿力学

2.1 哈密顿函数

2.1.1 哈密顿函数

对拉格朗日函数做全微分得到

$$\mathrm{d}L = \sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}q_i + \sum_i p_i \mathrm{d}\dot{q}_i$$

通过构造全微分得到一个新的函数，其微分为

$$\mathrm{d}H = -\sum \dot{p}_i \mathrm{d}q_i + \sum \dot{q}_i \mathrm{d}p_i$$

被微分的即是系统的能量，称为**哈密顿函数**

$$H(p,q,t)=\sum_i p_i\dot{q}_i-L$$

关于哈密顿函数和拉格朗日函数之间的关系，有

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial t}=-\frac{\partial L}{\partial t}$$

2.1.2 正则方程

由哈密顿函数的微分可以得出方程组

$$\begin{cases}\dot{q}_i=\dfrac{\partial H}{\partial p_i}\\ \dot{p}_i=-\dfrac{\partial H}{\partial q_i}\end{cases}$$

这个方程（组）称为**哈密顿方程**或**正则方程**。

2.1.3 罗斯函数

假设只将系统的部分广义速度用动量替换，即对于 s 个广义坐标 $(q_1,\cdots,q_n,\xi_1,\cdots,\xi_m)$ 的系统定义如下函数为**罗斯函数**

$$R(q,p,\xi,\dot{\xi})=\sum_{i=1}^{n}p_i\dot{q}_i-L$$

则可以得到系统运动方程

$$\begin{cases}\dot{q}_i=\dfrac{\partial R}{\partial p_i}\\ \dot{p}_i=-\dfrac{\partial R}{\partial q_i}\\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\dfrac{\partial R}{\partial\dot{\xi}_j}-\dfrac{\partial R}{\partial\xi_j}=0\end{cases}$$

可以看出，罗斯函数对于坐标 q 是哈密顿函数，对于坐标 ξ 是拉格朗日函数。能量用罗斯函数表示为

$$E=R-\sum_j\dot{\xi}_j\frac{\partial R}{\partial\dot{\xi}_j}$$

2.1.4 泊松括号

对于一个坐标、动量和时间的两个函数 $f(q,p,t),g(q,p,t)$，引入记号

$$\{f,g\}=\sum_i\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right)$$

称为量 f 和 g 的**泊松括号**。有

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial f}{\partial t}+\{f,H\}$$

2.1.5 泊松括号的性质

如果两个函数对调，则泊松括号改变符号

$$\{f,g\}=-\{g,f\}$$

对时间求全导数和偏导分别有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{f,g\}=\{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t},g\}+\{f,\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}t}\}$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\{f,g\}=\{\frac{\partial f}{\partial t},g\}+\{f,\frac{\partial g}{\partial t}\}$$

如果其中之一是广义坐标或广义动量，则

$$\{q_k,f\}=\frac{\partial f}{\partial p_k}$$
$$\{p_k,f\}=-\frac{\partial f}{\partial q_k}$$

在三个函数组成的泊松括号之间，有

$$\{f,\{g,h\}\}+\{g,\{h,f\}\}+\{h,\{f,g\}\}=0$$

这称为**雅可比恒等式**。

如果 f,g 是两个运动积分，则他们的泊松括号也是运动积分

$$\{f,g\}=const$$

这就是**泊松定理**。

2.2 正则变换

2.2.1 正则变换

这样一组变换

$$Q_i=Q_i(p,q,t),\quad P_i=P_i(p,q,t)$$

如果满足关系

$$\sum_i p_i\mathrm{d}q_i-H\mathrm{d}t=\sum_i P_i\mathrm{d}Q_i-H'\mathrm{d}t+\mathrm{d}U$$

则称之为**正则变换**。其中函数 $U(q,Q,t)$ 称为正则变换的（第一类）**生成函数**。正则变化后的哈密顿方程依然是正则的。根据变换的规则可以得到

$$\begin{cases}p_i=\dfrac{\partial U}{\partial q_i}\\ P_i=-\dfrac{\partial U}{\partial Q_i}\\ H'=H+\dfrac{\partial U}{\partial t}\end{cases}$$

以力学系统的 s 个广义坐标 q 和广义动量 p 为坐标轴的 $2s$ 维空间称为**相空间**。系统运动时表示系统状态的相点在相空间中画出的曲线称为**相轨道**。可以看出，哈密顿力学下广义坐标和广义动量的概念丧失其原始含义，仅仅变成相空间中的坐标，而正则变化就是相空间中的坐标变换。

在运动中 p 和 q 的变化可以看作正则变换。

2.2.2 生成函数

通过构造全微分可以从第一类生成函数出发构造**第二类生成函数**

$$\mathrm{d}U_2(q,P,t)=\mathrm{d}U_1+\mathrm{d}\sum_i P_iQ_i=\sum_i p_i\mathrm{d}q_i+\sum_i Q_i\mathrm{d}P_i+(H'-H)\mathrm{d}t$$

对应正则变换

$$\begin{cases} p_i=\dfrac{\partial U_2}{\partial q_i} \\ Q_i=\dfrac{\partial U_2}{\partial P_i} \\ H'=H+\dfrac{\partial U_2}{\partial t} \end{cases}$$

与之类似可得**第三类生成函数**和**第四类生成函数**

$$\begin{aligned} \mathrm{d}U_3(p,Q,t)&=\mathrm{d}U_1-\mathrm{d}\sum_i p_iq_i=-\sum_i q_i\mathrm{d}p_i-\sum_i P_i\mathrm{d}Q_i+(H'-H)\mathrm{d}t \\ \mathrm{d}U_4(p,P,t)&=\mathrm{d}U_1+\mathrm{d}\sum_i P_iQ_i-\mathrm{d}\sum_i p_iq_i=-\sum_i q_i\mathrm{d}p_i+\sum_i Q_i\mathrm{d}P_i+(H'-H)\mathrm{d}t \end{aligned}$$

其中较常用的是第二类生成函数。

2.2.3 正则共轭变量

变量 p 和 q 在哈密顿力学中被称为**正则共轭变量**，泊松括号相对正则变换保持不变，即在正则变换下

$$\{f,g\}_{q,p}=\{f,g\}_{Q,P}$$

由此可以得到，正则变换必须满足的条件

$$\{Q_i,Q_k\}_{q,p}=0,\quad \{P_i,P_k\}_{q,p}=0,\quad \{Q_i,P_k\}_{q,p}=\delta_{ik}$$

2.2.4 无穷小正则变换

通过在恒等变换 $U_2=\sum\limits_i q_iP_i$ 的基础上添加一个无穷小微变，可以得到变换

$$U_2(q,P,t)=\sum_i q_iP_i+\epsilon G(q,P,t)$$

其中 ϵ 为无穷小量，$G(q,P,t)$ 称为无穷小变换的**生成元**。由此得到的变换为

$$\begin{cases} p_k=P_k+\epsilon\dfrac{\partial G(q,P,t)}{\partial q_k}\approx P_k+\epsilon\dfrac{\partial G(q,p,t)}{\partial q_k} \\ Q_k=q_k+\epsilon\dfrac{\partial G(q,P,t)}{\partial P_k}\approx P_k+\epsilon\dfrac{\partial G(q,p,t)}{\partial p_k} \end{cases}$$

如果不把正则变换作为坐标系的变换，而是物理量坐标的变化，也即物理量在坐标系中的“运动”，那么就可以发现无穷小正则变换与运动方程之间的联系。

设以哈密顿函数 H 作为无穷小变换的生成元，同时把 ϵ 作为时间微元 $\mathrm{d}t$，则根据哈密顿方程

$$\begin{cases} Q_k = q_k + \epsilon\dfrac{\partial G(q,p,t)}{\partial q_k} = q_k + \dfrac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}t = q_k + \dot{q}_k\mathrm{d}t \\ P_k = p_k - \epsilon\dfrac{\partial G(q,p,t)}{\partial p_k} = q_k - \dfrac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}t = q_k + \dot{p}_k\mathrm{d}t \end{cases}$$

我们发现得到的无穷小正则变换就是系统按照力学规律运行 $\mathrm{d}t$ 时间后坐标的变化。

2.3 相空间

2.3.1 辛形式

由于广义坐标和广义动量在哈密顿力学中地位相当，可以把它们同看作相空间中的坐标，不妨记

$$\gamma_k = q_k, \quad \gamma_{s+k} = p_k$$

γ_k 称为相空间中的**辛坐标**。相应的变换后的坐标记为 Γ_k。定义**雅可比矩阵**为

$$J_{ij} = \frac{\partial \Gamma_i(\gamma)}{\partial \gamma_j}$$

则有

$$J[\dot{\gamma}] = [\dot{\Gamma}]$$
$$J^T\left[\frac{\partial f}{\partial \Gamma}\right] = \left[\frac{\partial f}{\partial \gamma}\right]$$

2.3.2 辛形式下哈密顿方程

定义矩阵

$$s = \begin{pmatrix} O & I_D \\ -I_D & O \end{pmatrix}$$

为**辛矩阵**。这是一个反对称正交矩阵。通过辛形式可以将哈密顿方程写成简单的矩阵形式

$$[\dot{\gamma}] = s\left[\frac{\partial H}{\partial \gamma}\right]$$

泊松括号则可以写为

$$\{f,g\}_{q,p} = \left[\frac{\partial f}{\partial \gamma}\right]^T s\left[\frac{\partial g}{\partial \gamma}\right]$$

于是正则变换的泊松括号判据、直接判据和拉格朗日括号判据可以用辛形式写为

$$JsJ^T = s$$
$$J^{-1} = -sJ^Ts$$
$$J^TsJ = s$$

2.3.3 刘维尔定理

相空间中的“体积微元”

$$\mathrm{d}\gamma = \mathrm{d}\gamma_1 \cdots \mathrm{d}\gamma_2 s$$

在某个区域的积分在正则变换下保持不变，即

$$\int \mathrm{d}\gamma = \int \mathrm{d}\Gamma$$

这被称为**刘维尔定理**。

2.4 作为坐标函数的作用量

2.4.1 作为坐标函数的作用量

将真实轨道的作用量分别写为末位置和运动时间的函数，根据拉格朗日方程可得

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i$$
$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H$$

可以得到作用量的全微分表达式

$$\mathrm{d}S = \sum_i p_i \mathrm{d}q_i - H\mathrm{d}t$$

若运动的起点和终点都在变化，则作用量的全微分变为

$$\mathrm{d}S = \sum_i p_i^{(2)} \mathrm{d}q_i^{(2)} - H\mathrm{d}t^{(2)} - \sum_i p_i^{(1)} \mathrm{d}q_i^{(1)} + H\mathrm{d}t^{(1)}$$

这表明只有当右端表达式是一个全微分时这样的运动才是可能的，即运动的末态不可能是初态的任意函数。

2.4.2 莫培督原理

假设运动的始末坐标不变，而允许时间变化，且满足能量守恒，则通过对作用量的全微分做积分可得

$$S = \int \sum_i p_i \mathrm{d}q_i - E(t - t_0)$$

将第一项记为 S_0，称作**简约作用量**。对于真实运动有

$$\delta S = -H\delta t = -E\delta t$$

两式对比可得

$$\delta S_0 = \delta \int \sum_i p_i \mathrm{d}q_i = 0$$

这被称为**莫培督原理**，这样的到的变分可以确定系统的轨道。

2.4.3 哈密顿-雅可比方程

将作用量写成坐标和时间的函数，并将广义动量替换为 $\dfrac{\partial S}{\partial q}$，可以得到作用量满足的方程

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H(q_i.\frac{\partial S}{\partial q_i},t)=0$$

这个方程称为**哈密顿-雅可比方程**。从另一个角度来看哈雅方程，可以把作用量 S 看作一个正则变换的生成函数，则经过这个正则变换得到的哈密顿量为零，根据哈密顿方程可知其 P 和 Q 均为常数，随后再根据生成函数求得原来的 p,q 即可。由此可以得到哈雅方程的解法。

2.4.4 哈密顿-雅可比方程的解法

解法一：首先求出方程包含 $s+1$ 个任意常数的全积分

$$S=f(t,q_i,\alpha_i)+A$$

然后以 $f(t,q,\alpha)$ 为母函数，α_i 为新的动量构建正则变换。新的坐标记为 β_i。可以看出，新的哈密顿函数为零

$$H'=H+\frac{\partial S}{\partial t}=0$$

由哈密顿方程可知

$$\alpha_i=const,\quad \beta_i=const$$

而利用方程

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha_i}=\beta_i$$

可以将坐标用时间和常数 α,β 表示出来，即得到通积分。

解法二：分离变量。假设某一坐标 q_1 与其相应导数 $\dfrac{\partial S}{\partial q_1}$ 在方程中仅以组合 $\phi\left(q_1,\dfrac{\partial S}{\partial q_1}\right)$ 的形式出现，即方程形式为

$$\Phi\left[q_{[1]},t,\frac{\partial S}{\partial q_{[1]}},\frac{\partial S}{\partial t},\phi\left(q_1,\frac{\partial S}{\partial q_1}\right)\right]=0$$

则寻找如下形式的解

$$S=S'(q_{[1]},t)+S(q_1)$$

带入表达式可得

$$\Phi\left[q_{[1]},t,\frac{\partial S'}{\partial q_{[1]}},\frac{\partial S'}{\partial t},\phi\left(q_1,\frac{\partial S}{\partial q_1}\right)\right]=0$$

这个解应当对于 q_1 任意值都成立，于是可以得到

$$\phi\left(q_1,\frac{\partial S_1}{\partial q_1}\right)=\alpha_1$$

$$\Phi\left[q_{[1]},t,\frac{\partial S'}{\partial q_{[1]}},\frac{\partial S'}{\partial t},\alpha_1\right]=0$$

其中 α_1 是任意常数。上述第一个方程是常微分方程，而第二个方程中独立变量数减少了一个，通过这个方法可以相继分离所有坐标和时间，即可求解。

2.5 浸渐不变量

2.5.1 浸渐不变量

假设一个作一维有限运动的力学系统由某个参数 λ 表征，当 λ 为常数时，系统是封闭的且具有确定的能量 E，并以周期 $T(E)$ 作周期运动。如果参数 λ 随时间缓慢变化，即

$$T\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \ll \lambda$$

则系统不再封闭，但能量的变化率同样很小。将能量的变化率按周期平均，所确定的 $\dot{E}$ 与参数的变化率 $\dot{\lambda}$ 成正比。即这种意义上所取的缓慢变化的能量和参数的某种组合等于一个常数。这个不变的量称为**浸渐不变量**。

在一定的近似条件下我们可以求得这样一个浸渐不变量

$$I = \frac{1}{2\pi}\oint p\mathrm{d}q$$

可以看出这是相空间中相轨道所包围的面积（乘以某个系数）。

2.5.2 正则变量

将参数 λ 设为常数，选取 I 作为新的动量，以简约作用量 $S_0(q,E;\lambda) = S_0(q,I;\lambda)$ 为母函数，可以通过正则变换得到新的坐标

$$w = \frac{\partial S_0}{\partial I}$$

变量 I 和 w 称作**正则变量**，其中 I 称为作用量变量，w 称为角变量。

由于母函数不显含时间，新的哈密顿函数等于旧的哈密顿函数。由哈密顿方程可得

$$w = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}t + const = \omega(I)t + const$$

这是振动相位。

根据 S_0 和 I 的定义可知，每经过一个周期，简约作用量有增量

$$\Delta S_0 = 2\pi I$$

则角变量的增量

$$\Delta w = \Delta\frac{\partial S_0}{\partial I} = \frac{\partial}{\partial I}\Delta S_0 = 2\pi$$

相反，如果用正则变量表示任何单值函数 $F(q,p)$，则它是 w 周期为 2π 的周期函数。