# 理论力学

## 第 10 讲

陆晓铭

2024-2025-2

lxm@hdu.edu.cn

# Outline

多自由度系统的简谐振动 ..... 2
非谐效应（非线性振子） ..... 16

# 多自由度系统的简谐振动

# 多自由度的简谐振动

无耗散，无驱动，多自由度小振动:

$$L = \frac{1}{2} M_{ij}(\vec{q}) \dot{q}_i \dot{q}_j - V(\vec{q})$$

$$\approx \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j - \frac{1}{2} K_{ij} q_i q_j$$

- 平衡位置的势能取零
- 坐标原点放在平衡位置
- $M_{ij}$ 和 $K_{ij}$ 都和坐标无关

矩阵乘法表示

$$L = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{M} \dot{\vec{q}} - \frac{1}{2} \vec{q}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{K} \vec{q}$$

- $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{K}$ 为实数对称矩阵。为什么对称?

# 多自由度的简谐振动

**运动方程**

$$M_{ij}\ddot{q}_j + K_{ij}q_j = 0 \quad \forall\, i$$

$$\Longleftrightarrow \boldsymbol{M}\ddot{\vec{q}} + \boldsymbol{K}\vec{q} = 0$$

试探解 $\vec{q}(t) = \vec{\eta}e^{i\omega t}$

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

- 问题：如何找到满足要求的 $\omega$ 和 $\vec{\eta}$?
- 线性方程组 $(\boldsymbol{K} - \omega^2 \boldsymbol{M})\vec{\eta} = 0$ 有解的条件为

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

- 被称为久期方程，从中解出 $\omega^2$，然后再从线性方程组解出 $\vec{\eta}$
- 这是线性代数中的本征值和本征矢量的问题，求得 $\omega^2$ 和 $\vec{\eta}$ 的值。
- 本征频率、简正模式的意义。

# 从简正模式到简正坐标

最简单的多自由度简谐振动是

$$L = \sum_i \left( \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2 - \frac{1}{2} k_i x_i^2 \right).$$

特点：没有耦合

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & & \\ & m_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} k_1 & & \\ & k_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}.$$

久期方程

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

满足条件的本征频率为 $\omega_i = \sqrt{k_i/m_i}$，此时简正模式非常简单，为标准基:

$$\vec{\eta}_i = \vec{e}_i$$

# 从简正模式到简正坐标

简正模式各坐标同频率一起振动；简正坐标是单个坐标在振动。

对于多自由度简谐振动的拉格朗日量 $L = \frac{1}{2}\dot{\vec{q}}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{M}\dot{\vec{q}} - \frac{1}{2}\vec{q}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{K}\vec{q}$, 找到一组广义坐标 $\vec{q} = A\vec{Q}$ 使得拉格朗日量“解耦”为

$$L = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}\left(\dot{Q}_i^2 - \omega_i^2 Q_i^2\right)$$

- 矩阵 $A$ 不依赖于动力学变量是时间 $t$，完全由 $M$ 和 $K$ 决定. 因此，广义速度为

$$\dot{\vec{q}} = A\dot{\vec{Q}}$$

- 代入拉氏量得

$$L = \frac{1}{2}\dot{\vec{Q}}^{\mathsf{T}}\underbrace{A^{\mathsf{T}}\boldsymbol{M}A}_{M'}\dot{\vec{Q}} - \frac{1}{2}\vec{Q}^{\mathsf{T}}\underbrace{A^{\mathsf{T}}\boldsymbol{K}A}_{A'}\vec{Q}$$

- “解耦” 的意思是将 $M'$ 和 $A'$ 同时对角化.
- 正交变换在一般情形下无法同时对角化两个矩阵

# 从简正模式到简正坐标

观察:

$$L = \frac{1}{2}\dot{\vec{Q}}^{\mathsf{T}} \underbrace{A^{\mathsf{T}} M A}_{M'} \dot{\vec{Q}} - \frac{1}{2}\vec{Q}^{\mathsf{T}} \underbrace{A^{\mathsf{T}} K A}_{A'} \vec{Q}$$

- 令 $O$ 为任意正交矩阵（$O^{\mathsf{T}}O = I$）

$$A = M^{-\frac{1}{2}}O \Longrightarrow M' = O^{\mathsf{T}} \underbrace{M^{-\frac{1}{2}} M M^{-\frac{1}{2}}}_{I} O = O^{\mathsf{T}}O = I$$

- 该类变换不仅能让动能项“解耦”，而且让 $M'$ 为单位矩阵，即

$$T = \frac{1}{2}\dot{\vec{Q}}^{\mathsf{T}}\dot{\vec{Q}}.$$

- 注意：矩阵 $M^{\frac{1}{2}}$ 的定义是满足 $X^2 = M$ 的半正定矩阵 $X$，并不是所有矩阵元开根号！
- $M^{-\frac{1}{2}}$ 是 $M^{\frac{1}{2}}$ 的逆矩阵。

# 简正坐标

一般系统，除非所有广义速度都为零，总动能 $T = \frac{1}{2}\dot{\vec{q}}^{\mathsf{T}} M \dot{\vec{q}}$ 都是正定的。这意味着动能项中的系数矩阵 $M$ 是完全正定矩阵。因此，$M^{\frac{1}{2}}$ 是可逆矩阵，记它的逆矩阵为 $M^{-\frac{1}{2}}$.

势能项变为

$$
\begin{aligned}
V &= \frac{1}{2}\vec{q}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{K} \vec{q} \\
&= \frac{1}{2}\vec{Q}^{\mathsf{T}} \underbrace{\boldsymbol{O} M^{-\frac{1}{2}} K M^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{O}^{\mathsf{T}}}_{\text{对角化 } \operatorname{diag}(\omega_1^2, \omega_2^2, \ldots, \omega_n^2)} \vec{Q}
\end{aligned}
$$

- $O$ 的作用是对角化 $M^{-\frac{1}{2}} K M^{-\frac{1}{2}}$

任何一个实对称矩阵总可以通过一个正交变换将其对角化。

$$
L = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}\left(\dot{Q}_i^2 - \omega_i^2 Q_i^2\right)
$$

# 简正坐标

解耦拉格朗日量: 找一个模态矩阵 $\boldsymbol{A}$ ($\vec{q} = \boldsymbol{A}\vec{Q}$) 使得

$$\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$$
$$\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{A} = \mathrm{diag}(\omega_1^2, ..., \omega_n^2),$$

多自由度简谐振动问题最终归结于简正模式 $Q_i$ 和本征频率 $\omega_i$ 的求解。

$$L = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}\left(\dot{Q}_i^2 - \omega_i^2 Q_i^2\right)$$

- 对于简正坐标，通解为

$$Q_i(t) = a_i e^{i\omega_i t} + c.c.$$

- 通过模态矩阵可以变换到原坐标:

$$q_j(t) = \sum_i A_{ji} Q_i(t) = \sum_i A_{ji}(a_i e^{i\omega_i t} + c.c.)$$

# 手算多自由度简谐振动的步骤

1. 从方程 $\det(\omega^2 M - K) = 0$ 中求出本征值 $\omega_i^2$.
2. 根据每个本征值从方程 $(\omega_i^2 M - K)\vec{\eta}_i = 0$ 求出简正模式 $\vec{\eta}_i$.

如何求模态矩阵?

- 模态矩阵将标准基矢 $\vec{e}_i$ 变换为简正模式 $\vec{\eta}_i$，因此

$$A = \begin{pmatrix} \vec{\xi}_1 & \vec{\xi}_2 & \dots \end{pmatrix}$$

其中 $\vec{\xi}_i$ 正比于 $\vec{\eta}_i$

- 需要满足:

$$A^{\mathsf{T}} M A = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \quad A^{\mathsf{T}} K A = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & & \\ & \omega_2^2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\Longleftrightarrow \vec{\xi}_i^{\mathsf{T}} M \vec{\xi}_j = \delta_{ij}, \quad \vec{\xi}_i^{\mathsf{T}} K \vec{\xi}_j = \delta_{ij}\omega_i^2$$

# 手算多自由度简谐振动的步骤

- 利用

$$\left.\begin{aligned}&(\omega_i^2 M - K)\vec{\eta}_i = 0\\&\vec{\eta}_j^{\mathsf{T}}\left(\omega_j^2 M - K\right) = 0\\&\vec{\eta}_j^{\mathsf{T}} K\vec{\eta}_i - \vec{\eta}_i^{\mathsf{T}} K\vec{\eta}_j = 0\end{aligned}\right\} \Longrightarrow \left(\omega_i^2 - \omega_j^2\right)\vec{\eta}_i^{\mathsf{T}} M\vec{\eta}_j = 0$$

- 当 $\omega_i \neq \omega_j$ 时，必有

$$\vec{\eta}_i^{\mathsf{T}} M\vec{\eta}_j \propto \delta_{ij}$$

- 归一化为 $\vec{\xi}_i^{\mathsf{T}} M\vec{\xi}_j = \delta_{ij}$，可得

$$0 = \vec{\xi}_i^{\mathsf{T}}(\omega_i^2 M - K)\vec{\xi}_j = \delta_{ij}\omega_i^2 - \vec{\xi}_i^{\mathsf{T}} K\vec{\xi}_i \Longrightarrow \vec{\xi}_i^{\mathsf{T}} K\vec{\xi}_i = \delta_{ij}\omega_i^2$$

# 计算机程序求解多自由度简谐振动的步骤

$$L = \frac{1}{2}\dot{\vec{q}}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{M} \dot{\vec{q}} - \frac{1}{2}\vec{q}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{K} \vec{q}$$

- 求解矩阵 $\boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}}$ 和 $\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}$.
- 计算矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{K} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}$，求其本征值 $\lambda_i = \omega_i^2$，本征态 $\vec{\beta}_i$.
- 使 $O^{\mathsf{T}} \widetilde{K} O$ 对角化的正交矩阵为

$$O = \begin{pmatrix} \vec{\beta}_1 & \vec{\beta}_2 & \dots \end{pmatrix}$$

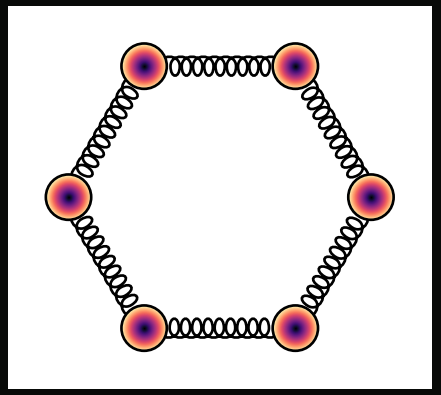
- 模态矩阵:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{O}$$

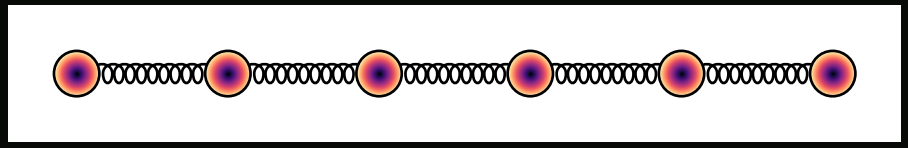
- 简正坐标: $\vec{Q} = \boldsymbol{A}^{-1} \vec{q}$

# 分子振动的对称情况

对称性总是能够给我们带来便利。要善于利用对称性来分析问题。



苯环分子



一维链

$$L = \sum_{n=1}^{N} \frac{m}{2} \dot{x}_n^2 - \frac{k}{2} \sum_{n=1}^{N} \left[ (x_n - x_{n-1})^2 \right]$$

- 广义坐标 $x_n$ 是第 $n$ 个质点偏离其平衡的位移。
- 如果是环，则使用周期性边界条件 $x_{N+n} = x_n$
- 运动方程

$$\ddot{x}_n = \frac{k}{m}(x_{n-1} + x_{n+1} - 2x_n)$$

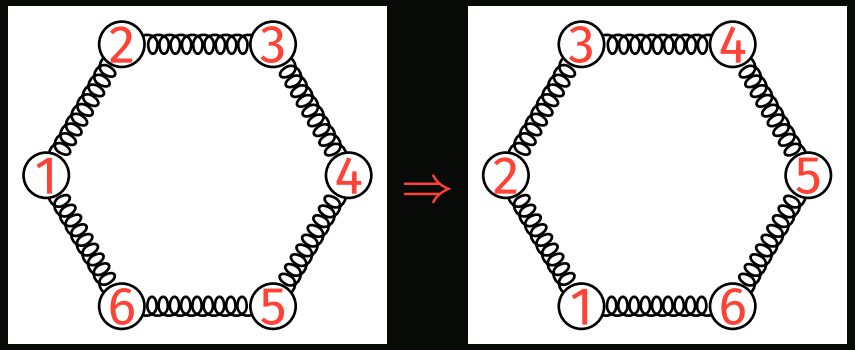
# 求解运动方程

**运动方程**

$$\ddot{x}_n = \frac{k}{m}(x_{n-1} + x_{n+1} - 2x_n)$$

问题：求系统的本征频率

特殊性：系统具有指标的“轮换不变性”




- 如果 $\vec{x}(t) := (x_1(t), x_2(t), ..., x_N(t))$ 是运动方程的简正模式，那么分量轮换后也是。
- 不简并的情况，$\vec{x}$ 是轮换操作本征态。简并情况，总可以选择轮换本征态作为解。
- 轮换操作 $S$ 的本征矢量$\vec{y}$ 满足 $S\vec{y} = s\vec{y}$
- 周期性边界条件：$s^N = 1 \Rightarrow s = e^{ip}$, 其中 $Np$ 是 $2\pi$ 的整数倍，$p = 2\pi\ell/N$.

# 求解运动方程

- 3 格点的例子 ($e^{3ip} = 1$)

$$\begin{pmatrix} e^{ip} \\ e^{2ip} \\ e^{3ip} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} e^{2ip} \\ e^{3ip} \\ e^{ip} \end{pmatrix} = e^{ip} \begin{pmatrix} e^{ip} \\ e^{2ip} \\ e^{3ip} \end{pmatrix}$$

- 试探解

$$x_n(t) = Ae^{-i\omega t + ipn}$$

- 思考: $e^{ipn}$ 的含义? $A$ 为什么与 $n$ 无关?
- 代入运动方程 $\ddot{x}_n = \omega_0^2(x_{n-1} + x_{n+1} - 2x_n)$, 其中 $\omega_0 = \sqrt{k/m}$, 可得

$$\omega^2 = 2\omega_0^2(1 - \cos(p)) = 2\omega_0^2\left(1 - \cos\left(\frac{2\pi\ell}{N}\right)\right)$$

  其中 $\ell = \pm 2, \pm 1, 0, 3$.

- 本征频率的简并发生在

$$\cos\left(\frac{2\pi\ell}{N}\right) = \cos\left(\frac{2\pi\ell'}{N}\right)$$

# 非谐效应（非线性振子）

# 非谐效应的拉格朗日量

- 可能的非线性项

$$L = \underbrace{\frac{1}{2}\left(M_{ij}\dot{x}_i\dot{x}_j - K_{ij}x_ix_j\right)}_{\text{谐振项 } L_0} + \underbrace{\frac{1}{2}N_{ijk}\dot{x}_i\dot{x}_jx_k - \frac{1}{3}L_{ijk}x_ix_jx_k}_{\text{非谐项 } L'}$$

- 可以使用谐振项的简正坐标来表示拉格朗日量

$$L = \sum \frac{1}{2}\left(\dot{Q}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2\right) + \frac{1}{2}\lambda_{\alpha\beta\gamma}\dot{Q}_\alpha\dot{Q}_\beta Q_\gamma - \frac{1}{3}\mu_{\alpha\beta\gamma}Q_\alpha Q_\beta Q_\gamma$$

  其中系数 $\lambda_{\alpha\beta\gamma}$ 关于前两个指标是对称的，系数 $\mu_{\alpha\beta\gamma}$ 关于所有指标都是对称的。

- 为什么?

# 非谐效应的处理方法

将 $L = L_0 + L'$ 代入欧拉拉格朗日方程 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial Q_\alpha} = 0$ 可得

$$\ddot{Q}_\alpha + \omega_\alpha^2 Q_\alpha = f_\alpha\left(Q, \dot{Q}, \ddot{Q}\right)$$

其中 $f_\alpha$ 是二次齐次函数，包含了 $Q, \dot{Q}$ 和 $\ddot{Q}$ 的各种可能二次项，而坐标是这些量的一次项。

- 假设非线性项是微扰:

$$Q_{\alpha(t)} = Q_\alpha^{(0)}(t) + Q_\alpha^{(1)}(t) + Q_\alpha^{(2)}(t) + ...$$

- 根据非线性的运动方程中关于 $Q, \dot{Q}$ 和 $\ddot{Q}$ 的次数关系，可以逐阶来求解。

第四章作业第 5、6 题

（下周交）