理论力学

第 13 讲

陆晓铭

2024-2025-2

lxm@hdu.edu.cn

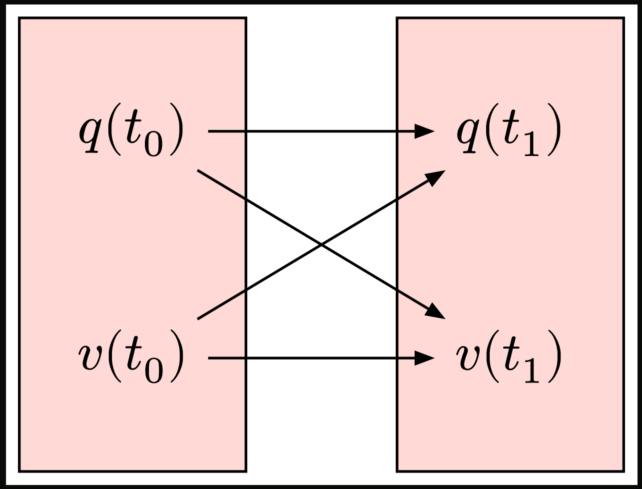
Outline

哈密顿力学

William Rowan Hamilton

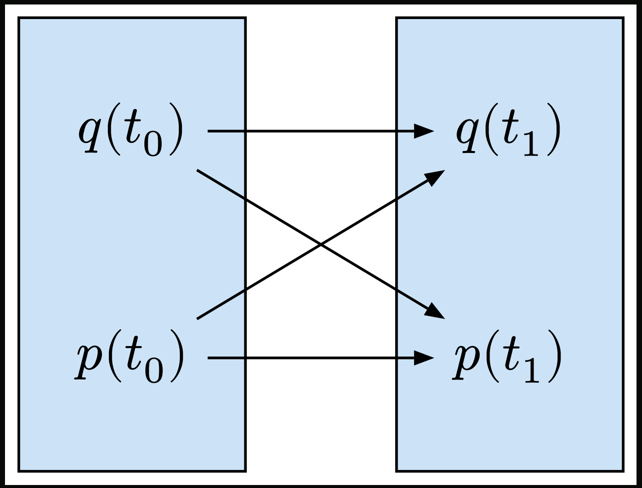
1. 为什么还需要哈密顿力学?
2. 如何得到哈密顿方程?
3. 如何应用哈密顿方程?

状态演化方程



$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ \frac{F}{m} \end{pmatrix}$$

- 拉格朗日方程给出的是 $\dot{p}$ 而非 v
- 对动力学演化而言，考虑动量的变化会比较自然



$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ \frac{\partial L}{\partial q} \end{pmatrix} = \mathcal{F}\left[\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}\right]$$

- 广义坐标和广义动量构成“状态”
- 如何把方程右边变成关于状态的函数？
- 本质上要等价于拉格朗日方程

哈密顿量

- 不显含时的拉格朗日量是广义坐标和广义速度的函数。

$$\mathrm{d}L = \sum_i \underbrace{\frac{\partial L}{\partial q_i}}_{\text{根据拉格朗日方程为 } \dot{p}_i} \mathrm{d}q_i + \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}}_{\text{定义为 } p_i} \mathrm{d}\dot{q}_i \tag{1}$$

$$= \boxed{\sum_i \dot{p}_i \,\mathrm{d}q_i + p_i \,\mathrm{d}\dot{q}_i} \tag{2}$$

- (2) 式 已包含拉格朗日方程的信息
- 希望将 q_i 和 p_i 作为独立变量时，即从 $p_i \,\mathrm{d}q_i$ 变为 $f \,\mathrm{d}p_i$
- 启示:

$$\mathrm{d}(p_i \dot{q}_i) = p_i \,\mathrm{d}\dot{q}_i + \dot{q}_i \,\mathrm{d}p_i \Rightarrow p_i \,\mathrm{d}\dot{q}_i = \mathrm{d}(p_i \dot{q}_i) - \dot{q}_i \,\mathrm{d}p_i \tag{3}$$

这种方法叫做“勒让德变换”

哈密顿正则方程

$$\begin{aligned} \mathrm{d}L &= \sum_i \dot{p}_i \,\mathrm{d}q_i + p_i \,\mathrm{d}\dot{q}_i \\ \Longrightarrow \mathrm{d}\left(\underbrace{\sum_i p_i \dot{q}_i - L}_{H}\right) &= \sum_i (\dot{q}_i \,\mathrm{d}p_i - \dot{p}_i \,\mathrm{d}q_i) \end{aligned} \tag{4}$$

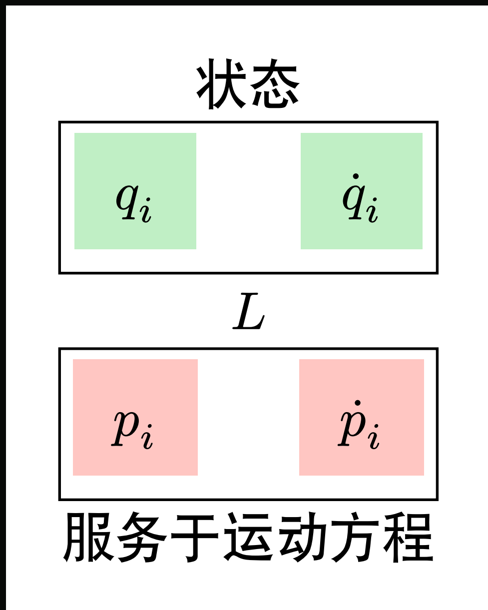
- 因为 (4) 式 来自于 $\mathrm{d}L = \sum_i \dot{p}_i \,\mathrm{d}q_i + p_i \,\mathrm{d}\dot{q}_i$，所以包含了拉格朗日方程的信息，它等价为

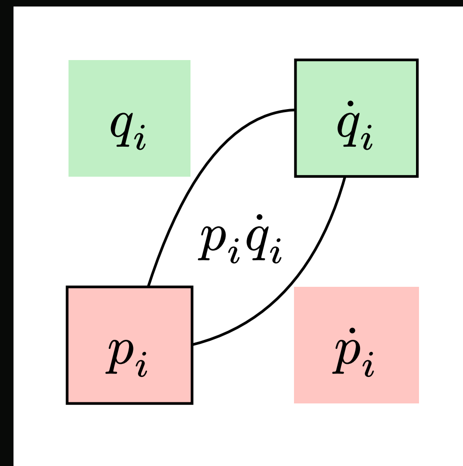
$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{5}$$

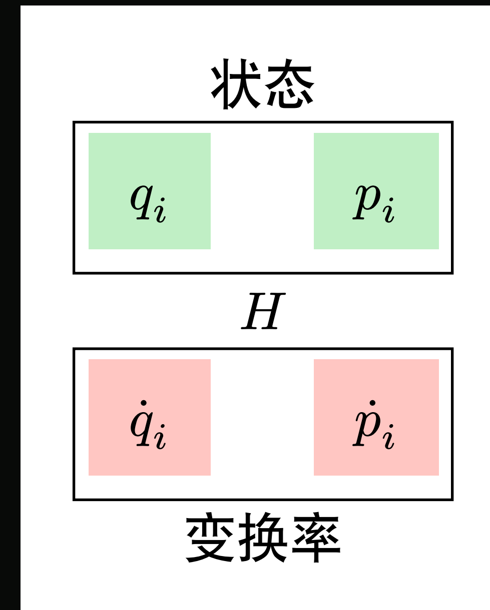
- 通过哈密顿函数 H 来描述系统的动力学，上述哈密顿方程就是运动方程
- 哈密顿方程也称为正则方程

勒让德变换

勒让德变换







- 哈密顿正则方程和拉格朗日方程的等价性利用了勒让德变换
- 物理规律蕴含在偏导关系中

$$\mathrm{d}L = p_i\,\mathrm{d}\dot{q}_i + \dot{p}_i\,\mathrm{d}q_i + \frac{\partial L}{\partial t}\,\mathrm{d}t \Longrightarrow p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad \dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

- 动力学（由拉格朗日量决定）给出了 4 类变量（$q_i, \dot{q}_i, p_i, \dot{p}_i$）之间的关系。
- 被求偏导的量是被选作独立变量的物理量

- 勒让德变换在《热力学统计物理》中也发挥着重要作用

$$\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - P\,\mathrm{d}V$$

- 热力学参数：温度 T、熵 S、压强 P、体积 V
- 以内能 U 的视角，有

$$T = \frac{\partial U}{\partial S}, \quad P = -\frac{\partial U}{\partial V}$$

- 利用勒让德变换，可得

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}H &= \mathrm{d}U + PV = T\,\mathrm{d}S + V\,\mathrm{d}P, \\
\mathrm{d}F &= \mathrm{d}U - TS = -S\,\mathrm{d}T - P\,\mathrm{d}V, \\
\mathrm{d}G &= \mathrm{d}U - TS + PV = -S\,\mathrm{d}T + V\,\mathrm{d}P.
\end{aligned}$$

- 都是热力学势：内能 U、亥姆霍兹自由能 F、焓 H、吉布斯自由能 G
- 值得拥有名字！

哈密顿量与能量的关系

哈密顿量与能量的关系

回忆能量的定义

$$E(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t) := \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)}{\partial \dot{q}_i} - L(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)$$

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \sum_i \left(\ddot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + \underbrace{\dot{q}_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i}_{=0} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} \right) = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

将 E 变量替换 $(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) \to (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$，就是哈密顿函数（Hamiltonian）

$$H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t) = E(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, t)$$

变量替换后，关注的是 H 随 q_i 和 p_i 的变化关系。

哈密顿量与能量的关系

- 直接考察哈密顿函数的时间全导数

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} &= \dot{q}_i \frac{\partial H}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial H}{\partial p_i} + \frac{\partial H}{\partial t} \\
&= \underbrace{-\dot{q}_i \dot{p}_i + \dot{p}_i \dot{q}_i}_{\text{来自哈密顿正则方程}} + \frac{\partial H}{\partial t} \\
&= \frac{\partial H}{\partial t} \\
&= -\frac{\partial L}{\partial t}
\end{aligned}
$$

哈密顿力学的应用

哈密顿力学一般步骤

1. 从拉格朗日量出发，得到广义动量
2. 从广义动量的表达式中反解出广义速度
3. 将广义速度替换到 $p_i\dot{q}_i - L$ 中，得到哈密顿量
4. 从哈密顿量出发，得到哈密顿正则方程

例: 多维谐振子

$$L = \frac{1}{2} M_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k - \frac{1}{2} K_{jk} q_j q_k$$

- 得到广义动量，反解出广义速度

$$p_j = M_{jk} \dot{q}_k \Longrightarrow \boldsymbol{p} = \boldsymbol{M} \dot{\boldsymbol{q}} \Longrightarrow \dot{\boldsymbol{q}} = \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{p}$$

- 替换广义速度，得到哈密顿量

$$\begin{aligned} H &= \boldsymbol{p}^T \dot{\boldsymbol{q}} - L \\ &= \boldsymbol{p}^T \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{p} - \frac{1}{2} \boldsymbol{p}^T \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{p} + \frac{1}{2} \boldsymbol{q}^T \boldsymbol{K} \boldsymbol{q} \\ &= \frac{1}{2} \boldsymbol{p}^T \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{p} + \frac{1}{2} \boldsymbol{q}^T \boldsymbol{K} \boldsymbol{q} \end{aligned}$$

- 哈密顿正则方程:

$$\dot{\boldsymbol{q}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} = \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{p},$$

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}} = -\boldsymbol{K} \boldsymbol{q}$$

例：一般的质点组力学系统

如果 $L = T - V$，T 是广义速度的二次式，V 不依赖于广义速度，那么，

$$p_i \dot{q}_i = 2T,$$

$$H = T + V.$$

例: 相对论性带电粒子在电磁场中的运动

$$L = -mc^2\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}} + \frac{e}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A} - e\Phi$$

- 广义动量

$$\boldsymbol{P} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{v}} = \underbrace{\frac{m\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\boldsymbol{v}^2/c^2}}}_{\text{机械动量 }\boldsymbol{p}} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}.$$

- 广义速度

$$\frac{m^2\boldsymbol{v}^2}{1-\boldsymbol{v}^2/c^2} = \left(\boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 \Longrightarrow \boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p}}{\sqrt{m^2+\boldsymbol{p}^2/c^2}} \text{ 其中 } \boldsymbol{p} = \boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$$

- 哈密顿量

$$\begin{aligned} H &= \boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{v} - L = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v} + mc^2\sqrt{1-\boldsymbol{v}^2/c^2} + e\Phi \\ &= \sqrt{m^2c^4 + c^2\boldsymbol{p}^2} + e\Phi \end{aligned}$$

非相对论近似

$$H = \sqrt{m^2c^4 + c^2\boldsymbol{p}^2} + e\Phi$$

- 非相对论近似

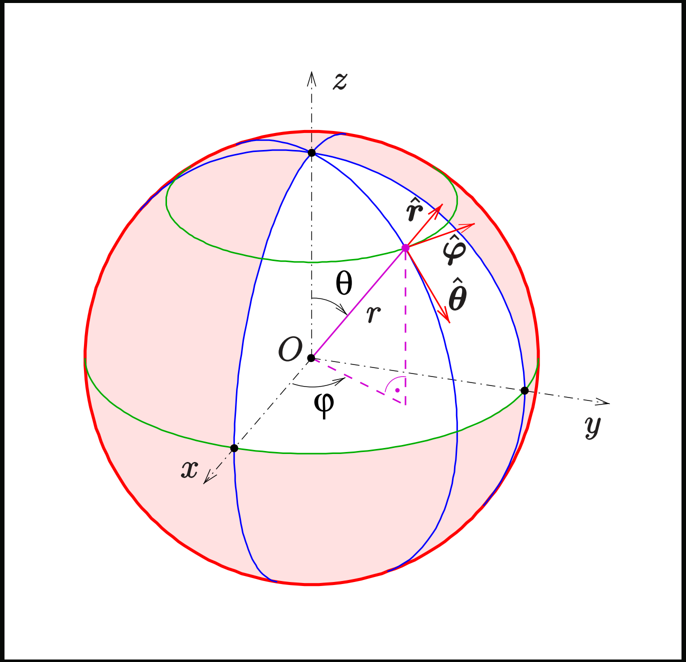
$$m^2c^4 \gg c^2\boldsymbol{p}^2$$

- 展开根号，省略常数项

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + e\Phi \\ &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\Phi \end{aligned}$$

- 这是量子力学当中很重要的一个哈密顿量

常见坐标系下质点的哈密顿量



By Ag2gaeh - Own work, CC BY-SA 4.0

- 以球坐标 (r, θ, φ) 为例

$$H = T + V = \frac{1}{2} m \left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} \right)^2 + V(\boldsymbol{x})$$

- 线元在球坐标中的表达式:

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \mathrm{d}r\,\hat{\boldsymbol{r}} + r\,\mathrm{d}\theta\,\hat{\boldsymbol{\theta}} + r\sin(\theta)\,\mathrm{d}\varphi\,\hat{\boldsymbol{\varphi}}$$

- 线元长度及速度在球坐标中的表达式:

$$(\mathrm{d}\boldsymbol{x})^2 = (\mathrm{d}r)^2 + r^2(\mathrm{d}\theta)^2 + r^2\sin^2\theta(\mathrm{d}\varphi)^2$$

$$\boldsymbol{v}^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2$$

- 广义动量:

$$p_r = m\dot{r}, \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta}, \quad p_\varphi = mr^2\sin^2\theta\dot{\varphi}$$

- 哈密顿量

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\theta} \right) + V(\boldsymbol{x}(r, \theta, \varphi))$$