Hamiltonian & Routh Function

哈密顿量和罗斯函数

Unipict 2022

2022 年 9 月 3 日

1 哈密顿量与哈密顿正则方程

拉格朗日方法并不是分析力学中的唯一方法。事实上，除了使用 q、$\dot{q}$、t 作为变量，我们还可以使用 q、p、t 作为变量来构建分析力学体系，而后者即是所谓的哈密顿力学体系。在一些问题中，哈密顿力学的框架相较拉格朗日力学更为简便（量子力学即是其中的代表）；并且，哈密顿力学拥有更加优雅的几何结构，这一点不仅可以导出很多深刻而重要的结论（比如统计力学中的刘维尔定理（Liouville Theorem)），还可以为各种计算机模拟算法提供强有力的指导（保辛算法）——为此，我们将专门对这一框架展开论述。

将一组变量换为另一组变量最常见的方法即是勒让德变换（Legendre transformation）。为此，我们写出 $\mathcal{L}$ 的微分：

$$d\mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^\mu} dq^\mu + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\mu} d\dot{q}^\mu + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt$$

而又有 p^μ 的定义：

$$p_\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\mu}$$

我们便可以得出以下变换：

$$\begin{aligned}
&d(p_\mu \dot{q}^\mu - \mathcal{L}) \\
&= p_\mu d\dot{q}^\mu + \dot{q}^\mu dp_\mu - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^\mu} dq^\mu - p_\mu \dot{q}^\mu - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \\
&= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^\mu} dq^\mu + \dot{q}^\mu dp_\mu - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt
\end{aligned}$$

这一变换已经将变量 q、$\dot{q}$、t 换成了 q、p、t。而：

$$\mathcal{H}(q, p, t) = p_\mu \dot{q}^\mu - \mathcal{L} \tag{1}$$

即是 q、p、t 变量体系下的核心函数——哈密顿量。

现在我们来求解哈密顿力学下的运动方程。注意到我们只需将拉格朗日方程：

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\mu} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^\mu} = 0 \tag{2}$$

和 p^μ 的定义代入 $\mathcal{H}$ 的微分即可得：

$$d\mathcal{H} = \dot{q}^\mu dp_\mu - \dot{p}_\mu dq^\mu - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}dt \tag{3}$$

也即：

$$\dot{q}^\mu = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\mu}\ ,\ \dot{p}_\mu = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\mu} \tag{4}$$

这一方程由于形式上的对称性，被称为哈密顿正则方程（下文简称"正则方程"）。

注意到在求得 eqs(4) 的过程中我们已经引入了由最小作用量原理得出的 eqs(2)，故而我们的运动方程也是最小作用量原理导出的结果。上述方法在导出正则方程时无疑是最简便的，但我们也可以使用类似推导 eqs(2)的变分方法从最小作用量原理直接导出 eqs(4)，请参见习题 1。

下面我们来讨论一下哈密顿量的简单性质。

首先我们从 eqs(3)可以看出如下关系式：

$$(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t})_{q,p} = -(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t})_{q,\dot{q}} \tag{5}$$

其中的下标表示求偏导时保持不变的量。由此可以看出，倘若系统保守，即 $\mathcal{L}$ 不显含 t，那么 $\mathcal{H}$ 也不显含 t。将 eqs(3)中的 dt 除下来，我们便会得到：

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = (\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t})_{q,p} \tag{6}$$

值得注意的是，eqs(5)并不依赖于最小作用量原理，而 eqs(6)却是依赖的——这表明前者是一个形式关系，而后者是一个实际物理过程中的关系。由 eqs(6)和先前讨论可知，若系统保守，则在实际运动中 $\mathcal{H}$ 保持为一常量不变。其实不难看出，$\mathcal{H}$ 和系统的能量 E 在数值上是相等的，但在哈密顿力学中，二者有很微妙的差异，请参见习题 3。

我们注意到 eqs(5)其实可以做更一般的推广。假设 $\mathcal{L}$ 的微分具有如下形式：

$$d\mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^\mu}dq^\mu + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\mu}d\dot{q}^\mu + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda}d\lambda$$

其中 λ 是一个参数，那么我们经过同样的推导流程就可以得到：

$$(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda})_{q,p} = -(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda})_{q,\dot{q}} \tag{7}$$

此式阐明了 $\mathcal{H}$ 的参数和 $\mathcal{L}$ 的参数的依赖关系。eqs(5)可以看作 eqs(7)的一个特例。

有了哈密顿量和哈密顿正则方程，我们就可以进一步讨论另一个特殊的函数——罗斯函数了。

2 罗斯函数

我们现在来考虑一个有趣的问题。我们知道，若 q^μ 不显含于 $\mathcal{L}$，那么相应的 p_μ 就会是一个常数，那么我们可不可以把这个“没用”的坐标（称为循环坐标）在变分时扔掉呢？答案当然是肯定的，但这一问题十分微妙，我们要特别的小心。您可以先自己试一试习题 4 以获得“wow”或者“opps”的体验（多半是后者）。下面，我们假设 q^μ 不是循环坐标，相应的广义动量为 p_μ；而 ξ^ν 是循环坐标，相应的广义动量为 η_ν, 以进行推导。

我们最朴实的想法很可能是通过初值解出 η_ν 从而得到 $\dot{\xi}^\nu$ 关于其他坐标的表达式，并将它们全部代入 $\mathcal{L}$，再对 q^μ 列拉式方程 eqs(2)。然而这一思路并不对！我们需要注意的是拉氏方程是从最小作用量原理得来的，也就是说运用拉氏方程的时候我们已经相当于做了变分。最小作用量原理的变分要求广义坐标除两个端点外不能有其他任何限制。刚才的想法中，我们将 $\eta_\nu = const$ 当作限制放进拉氏方程，也就相当于把其放进了变分之中，此时我们便无法保证端点条件 $\delta\xi^{\nu\ (1)} = \delta\xi^{\nu\ (2)} = 0$, 所得的方程也会自相矛盾。

为了安全，我们仍然从 S 的变分出发，按部就班就可得到：

$$\begin{aligned}\delta S = &\int_{t_1}^{t_2} (\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}^\mu} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q^\mu})\delta q^{\boldsymbol{\mu}}\ dt + \int_{t_1}^{t_2} (\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\xi}^\nu} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\xi^\nu})\delta\xi^{\boldsymbol{\nu}}\ dt \\ &+ p_\mu\delta q^\mu \mid_{t_2}^{t_1} + \eta_\nu\delta\xi^\nu \mid_{t_2}^{t_1}\end{aligned}$$

代入 eqs(2)马上可以得到：

$$\delta S = p_\mu\delta q^\mu \mid_{t_1}^{t_2} + \eta_\nu\delta\xi^\nu \mid_{t_1}^{t_2}$$

q^μ 不循环，第一项可以正常的消去。倘若我们要求加入 $\eta_{nu} = const$ 的限制，那么为了保证最小作用量原理成立，就不能随意让后一项消去（因为在没有这一限制的变分 $\delta S = 0$，那么加入这一限制的变分就不见得 $\delta S = 0$ 了），而应该按如下方法处理：将 S 写作：

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

然后加入约束：

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}dt = \eta_\nu\delta\xi^\nu \mid_{t_1}^{t_2} = \delta(\eta_\nu\xi^\nu) \mid_{t_1}^{t_2} = \delta\int_{t1}^{t2} (\eta_\nu\dot{\xi}^\nu)dt$$

移项即可得：

$$\delta\int_{t_2}^{t_1} (\eta_\nu\dot{\xi}^\nu - \mathcal{L})dt = 0 \tag{8}$$

我们将：

$$R = \eta_\nu\dot{\xi}^\nu - \mathcal{L} \tag{9}$$

补充：若 $\mathcal{L}$ 不显含 $\dot{\lambda}^\mu$，那么可以将其运动方程插入

$\delta S = \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\lambda}^\mu}\right) \delta\lambda^\mu \Big|_{t_2}^{t_1}$ $\because \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\lambda}^\mu} = 0$ $\therefore$ 无论 $\delta\lambda^\mu$ 是否为0，$\delta S = 0$

运动方程不变.

称为罗斯函数（Ross function）。那么我们首先得确定 R 的自变量，如果参照 eqs(1)对 $\mathcal{H}$ 的定义我们便会发现 eqs(9)看起来就像只对循环坐标进行了勒让德变换！因此，我们可知 $R \equiv R(q, \dot{q}, \xi, \eta, t)$。

那么由 R 怎样导出运动方程呢？我们一开始的目标就是扔掉循环坐标，故而我们先考察非循环坐标的方程。由 R 的自变量即可以看出如下关系：

$$\frac{\partial R}{\partial q^\mu} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^\mu}\ ,\ \frac{\partial R}{\partial \dot{q}^\mu} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\mu} \tag{10}$$

那么最终的方程就应该是：

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial R}{\partial \dot{q}^\mu} - \frac{\partial R}{\partial q^\mu} = 0 \tag{11}$$

尽管形式上一致，我们应该注意 eqs(11)和 eqs(2)的区别：前者可以直接代入 $\eta_\nu = const$ 和其解出的结果而后者不能，这是由于二者所来自的变分限制不同所造成的（可以回看 eqs(8)来仔细体会这一点）。

事实上，R 及以其为核心的运动方程（包括循环坐标的运动方程）可以完全由勒让德变换得到，而且相较于上面的推导简便很多，您可以在在习题 5 中尝试之。我们在此展示由变分推导的目的是在于强调使用拉氏方程和正则方程时必须留意是否加入了本不该有的约束条件（习题 3 和习题 4 您想对了吗？），以及从最小作用量原理出发加入约束条件导出运动方程的方法——这些在之后的哈密顿-雅可比方程中将会有类比式的应用。

习题

1. 请从最小作用量原理出发运用变分直接导出正则方程 eqs(4)。提示：将 $\mathcal{L}$ 写作 $\mathcal{L} = p_\mu \dot{q}^\mu - \mathcal{H}(p, q, t)$（小心自变量！），并将 p_μ、q^μ 视作独立变分的量（为何可以这么做？）。

2.[求某些系统的哈密顿量和运动方程，暂时没想好，搁置一下]

3. 不难发现，系统哈密顿量 $\mathcal{H}$ 和能量 E 在数值上是相等的。那么对于一个保守系统来说，理应有 $\mathcal{H} = E = const$，进而正则方程 eqs(4)会告诉我们 $\dot{p}_\mu = 0$, $\dot{q}^\mu = 0$。这显然是荒谬的。那么到底是哪里出了问题呢？提示：参看罗斯函数一节以获得启发。

4. 如图，一个竖直的光滑圆形管道可绕过圆心的竖直轴转动，转动惯量为 I。初始时，管道角速度为 ω_0。管道顶端的 A 点有一质量为 m 的小球（直径与管道直径基本一致）由静止受微扰下滑。

(1) 写出这个系统的拉氏方程和正则方程（取如图的 θ 和 ϕ 为广义坐标），并给出运动方程。

(2) 请计算物体在水平点 C 时的 $\ddot{\theta}$。

(3) 显而易见的，这个系统中 ϕ 是一个循环坐标。请考虑如何在方程中直接应用 $p_\phi = const$ 这一条件。下面给出一种思路：
由 $p_\phi = const$，解出 $p_\phi \equiv p_\phi(\theta, \dot{\theta}, \dot{\phi})$。将之代入 $\mathcal{L}$，并对代入后的 $\mathcal{L}$ 列拉氏方程。
这一思路正确吗？或者您有更好的思路？您可以用之计算一下 (2) 来验证一下。
(PS: 本题改编自梁昆淼《力学（下册）》习题 3.5，目前感觉不是很好，待修改）

5. 请仿照我们导出 $\mathcal{H}$ 和正则方程 eqs(4)的方法导出 R 及其运动方程。提示：做一个“部分的”勒让德变换，由此会看出 R“一半长得像 $\mathcal{H}$, 一半长得像 $\mathcal{L}$”的特性。