Day 15. 正则变换.

在拉格朗日力学下，我们得到的都是二阶ODE，且中含有 $q, \dot q, t$。对于这样的二阶方程，并没有通用的求解方法。若想化简，一般找到新的广义坐标，而这依赖于特定问题。

相比之下，哈密顿方程更为对称（一阶ODE），并且还可以给出通用的寻找新相空间坐标的方法。

考虑相空间坐标变换：$\xi^\alpha \to \Xi^\alpha(t,\xi)$。回想一下，在广义坐标变换下（只是变量代换），在同一条轨道上各点处的 L 不变 $\Rightarrow S=\int_{t_1}^{t_2} L\,dt = \tilde S = \int_{t_1}^{t_2}\tilde L\,dt$，从而对于同一条轨道，变换前后的 S 不变。由 S 的形式直接推出 $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q^a} - \frac{\partial L}{\partial q^a}=0$ 与 $\frac{d}{dt}\frac{\partial \tilde L}{\partial \dot q^a} - \frac{\partial \tilde L}{\partial q^a}=0$ 在这条轨道上同时成立。

而相空间中 $S=\int(p\dot q - H)\,dt$，在变换前后，被积函数并不一定差一个对时间的全导数，从而变换前后给出真实轨道的并非同一个方程。换言之，形式保持的方程给出不一样的解。

我们迫切地希望找到一个方法，使变换后仍给出真实运动的那组方程形式上保持不变。

于是先看欧氏、闵氏空间。对于欧氏空间，两函数梯度之内积 $\langle f,g\rangle_x = \delta^{ij}\frac{\partial f}{\partial x^i}\frac{\partial g}{\partial x^j}$

变换后：$\langle f,g\rangle_x = \delta^{kl}\left(\frac{\partial f}{\partial x'^i}\frac{\partial x'^i}{\partial x^k}\right)\left(\frac{\partial g}{\partial x'^j}\frac{\partial x'^j}{\partial x^l}\right) = \left(\delta^{kl}\frac{\partial x'^i}{\partial x^k}\frac{\partial x'^j}{\partial x^l}\right)\frac{\partial f}{\partial x'^i}\frac{\partial g}{\partial x'^j} \neq \langle f,g\rangle_{x'}$。要使得它不变，则必有 $\delta^{kl}\frac{\partial x'^i}{\partial x^k}\frac{\partial x'^j}{\partial x^l}=\delta^{ij}$（正变换Jacobi阵为正交阵）

$\Updownarrow$ $\delta^{kl}\frac{\partial x'^i}{\partial x}$

从而用内积表达为：$\langle x'^i, x'^j\rangle_x = \delta^{ij}$ 或 $\langle x^i, x^j\rangle_{x'} = \delta^{ij}$。这样的变换为 $(\mathbb{R}^3, \delta_{ab})$ 中的旋转。

对于闵氏空间有类似的讨论。若要求在新坐标下闵氏空间"内积括号"不变，则有 $\eta^{\rho\sigma}\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\rho}\frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\sigma}=\eta^{\mu\nu}$，写成矩阵为 $J^T\eta J=\eta$。 $\eta J=(J^T)^{-1}\eta$， $J=\eta^{-1}(J^T)^{-1}\eta$

从而有 $(J^{-1})^T\eta J^{-1} = \eta^T J(\eta^{-1})^T\eta\,\eta^{-1}J^T\eta = \eta J\cancel{(\eta^{-1})^T\eta}\,\eta^{-1}J^T\eta = \eta J(\eta^{-1}J^T\eta) = \eta J J^{-1} = \eta$ $\qquad J^{-1}=\eta^{-1}J^T\eta$

$\Rightarrow$ X 与 x 位置可对换。同样在"内积括号"下写：$\langle x^\mu, x^\nu\rangle_{x'}=\eta^{\mu\nu}$， $\langle x'^\mu, x'^\nu\rangle_x=\eta^{\mu\nu}$。这样的变换称为洛伦兹变换。

那么，对于相空间，没有度规，我们唯一的期望是保辛形式。不难验证条件为 $\omega^{\rho\sigma}\frac{\partial\Xi^\alpha}{\partial\xi^\rho}\frac{\partial\Xi^\beta}{\partial\xi^\sigma}=\omega^{\alpha\beta}$ 或反过来。用矩阵记 $\frac{\partial\Xi^\alpha}{\partial\xi^\beta}=M^\alpha{}_\beta$， $\frac{\partial\xi^\alpha}{\partial\Xi^\beta}=(M^{-1})^\alpha{}_\beta$

则有 $M\omega M^T=\omega^{-1}$ $\qquad M^T\omega M=\omega$。这里保持辛形式 ω 不变的矩阵 M 称为辛矩阵，ω 为 M 的特例。由于坐标变换前后，$[f,g]_\xi=[f,g]_\Xi$，从而各个正则单面上面积之和不变。

正则变换的条件可以简写为 $[\Xi^\alpha,\Xi^\beta]_\xi=\omega^{\alpha\beta}$， $[\xi^\alpha,\xi^\beta]_\Xi=\omega^{\alpha\beta}$。显然，正则变换下经典力学量的poisson括号都不变，特别地，Hamilton方程形式不变。

下面先说明位形空间点变换为正则变换。 $q^a\to Q^a=(q,t)$。 $\to \dot q^a=\frac{\partial q^a}{\partial t}+\frac{\partial q^a}{\partial Q^b}\dot Q^b$ $\Rightarrow \frac{\partial \dot q^a}{\partial \dot Q^b}=\frac{\partial q^a}{\partial Q^b}$。由于变换下拉氏量 $L(q,\dot q,t)=\tilde L(Q,\dot Q,t)$。

$$P_a=\frac{\partial\tilde L}{\partial\dot Q_a}=\frac{\partial L}{\partial\dot Q_a}=\frac{\partial L}{\partial q^b}\cdot\frac{\partial q^b}{\partial\dot Q^a}+\frac{\partial L}{\partial\dot q^b}\cdot\frac{\partial\dot q^b}{\partial\dot Q^a}=p_b\frac{\partial q^b}{\partial Q^a}$$

验证它：$[Q^a,Q^b]=\omega^{\alpha\beta}\frac{\partial Q^a}{\partial\xi^\alpha}\cdot\frac{\partial Q^b}{\partial\xi^\beta}=\omega^{\alpha\beta}\cdot\frac{\partial Q^a}{\partial\xi^a}\cdot\frac{\partial Q^b}{\partial\xi^b}\ (a,b\leq s)\ =0$.

$$[P_a,P_b]=\left[\frac{\partial q^{a'}}{\partial Q^a}p_{a'},\ \frac{\partial q^{b'}}{\partial Q^b}p_{b'}\right]\ \underset{\text{(莱布尼兹法则)}}{=}\ p_{a'}\frac{\partial q^{b'}}{\partial Q^b}\left[\frac{\partial q^{a'}}{\partial Q^a},p_{b'}\right]+p_{b'}\frac{\partial q^{a'}}{\partial Q^a}\left[p_{a'},\frac{\partial q^{b'}}{\partial Q^b}\right]$$

$$=p_{a'}\underbrace{\frac{\partial q^{b'}}{\partial Q^b}\frac{\partial}{\partial q^{b'}}}_{=\frac{\partial}{\partial Q^b}}\left(\frac{\partial q^{a'}}{\partial Q^a}\right)-p_{b'}\underbrace{\frac{\partial q^{a'}}{\partial Q^a}\frac{\partial}{\partial q^{a'}}}_{=\frac{\partial}{\partial Q^a}}\left(\frac{\partial q^{b'}}{\partial Q^b}\right)p_{b'}$$

$$=\frac{\partial^2 q^{a'}}{\partial Q^a\partial Q^b}p_{a'}-\frac{\partial^2 q^{b'}}{\partial Q^a\partial Q^b}p_{b'}=0.$$

Q^a 与 $\frac{\partial q^c}{\partial Q^b}$ 均不包含 p. 故这一项为0.

$$[Q^a, P_b] = [Q^a, \frac{\partial q^c}{\partial Q^b} p_c] = [Q^a, \frac{\partial q^c}{\partial Q^b}] p_c + [Q^a, p_c]\frac{\partial q^c}{\partial Q^b} = \frac{\partial Q^a}{\partial q^c}\cdot\frac{\partial q^c}{\partial Q^b} = \delta^a_b$$

下面给出一个通用地得到正则变换的方法——生成函数. 由于新旧坐标都能描述真实的运动轨迹(只不过是由另一套坐标系描述), 于是如下二式必在真实轨迹上同时成立:

$$\delta S[q,p] = \int dt\, \delta[p_a \dot q^a - H(t,q,p)] = 0$$

$$\delta \tilde S[Q,P] = \int dt\, \delta[\underset{\text{这里是}P}{P_a \dot Q^a} - K(t,Q,P)] = 0$$

应同时成立.

⚠ $H(p,q,t) \to H(p,Q,t)$ 在数值上如同像 $q \to Q$ 一样不变. 但是这里 H 的函数形式要变.

目的是保证 $(p\dot q - H)$ 与 $(P\dot Q - K)$ 这两个积分项之间差一个对时间的全导. 从而保证前后作用量等效

从而: $p_a \dot q^a - H(t,q,p) = P_a \dot Q^a - K(t,Q,P) + \frac{dF}{dt}$ 稍做整理 $dF = p_a dq^a - P_a dQ^a + [K(t,Q,P) - H(t,q,p)]dt$ 若 $\{q,Q\}$ 独立, 则 F 为 $\{q,Q\}, t$ 函数. 且偏导可直接读:

$$\frac{\partial F(t,q,Q)}{\partial q^a} = p_a \qquad \frac{\partial F(t,q,Q)}{\partial Q^a} = -P_a \qquad \frac{\partial F}{\partial t} = K(t,Q,P) - H(t,q,p)$$

$$Q^a = Q^a(t,p,q) \qquad P_a = P_a(t,q,Q) = P_a(t,q,p) \qquad K(t,Q,P)$$

可以看出, 只要指定 $F(q,Q,t)$, 就生成了正则变换 $\{q,p\} \to \{Q,P\}$. 因此 $F(q,Q,t)$ 称为生成函数.

我们可以构造多种正则变换. 上面这种称为1型.

$d(F_1 + Q^a P_a) = p_a dq^a + Q^a dP_a + (K-H)dt \Rightarrow F_2(q,P,t) = F_1 + Q^a P_a$

$d(F_1 - p_a q^a) = -q^a dp_a - P_a dQ^a + (K-H)dt \Rightarrow F_3(t,p,Q) = F_1(t,q,Q) - p_a q^a$

$d(F_1 - p_a q^a + P_a Q^a) = -q^a dp_a + Q^a dP_a - (K-H)dt \Rightarrow F_4(t,p,P) = F_1(t,q,Q) - q^a p_a + Q^a P_a$

以上的做法是将所有"旧的"都换成"新的", 实际上我们可以换一部分 e.g. $\{t, p^1, q^1, p^2, q^2\} \to \{t, P^1, q^1, p^2, Q^2\}$ 可以类似地给出生成函数.

正则变换也有被动(是坐标变换, 而点不动) 或主动(坐标架不动, 点动了). 两种视角. 在主动视角看来, 不停地做无穷小正则变换, 点在相空间中轨迹划出一曲线.

考虑相空间坐标无穷小变换. $\xi^\alpha \to \xi^\alpha + \varepsilon X^\alpha(\xi)$, $X^\alpha(\xi)$ 为 ξ 的函数. 这个变换何时正则? 通过计算泊松括号.

$$[\xi^\alpha + \varepsilon X^\alpha, \xi^\beta + \varepsilon X^\beta] = [\xi^\alpha, \xi^\beta] + \varepsilon[\xi^\alpha, X^\beta] + \varepsilon[X^\alpha, \xi^\beta] = \omega^{\alpha\beta} + \varepsilon\left(\omega^{\alpha\rho}\frac{\partial X^\beta}{\partial \xi^\rho} - \omega^{\beta\rho}\frac{\partial X^\alpha}{\partial \xi^\rho}\right) \Rightarrow \omega^{\alpha\rho}\frac{\partial X^\beta}{\partial \xi^\rho} = \omega^{\beta\rho}\frac{\partial X^\alpha}{\partial \xi^\rho} \xrightarrow{\text{具体写}} \begin{cases} \frac{\partial u^b}{\partial p_a} = \frac{\partial u^a}{\partial p_b} \\ \frac{\partial v_b}{\partial q^a} = \frac{\partial v_a}{\partial q^b} \\ \frac{\partial u^a}{\partial q^b} = -\frac{\partial v_b}{\partial p_a} \end{cases}$$

什么样的函数满足? 若 X^α 是由 ω "旋转"过的函数 G 的梯度. $X^\alpha_G = \omega^{\alpha\beta}\frac{\partial G}{\partial \xi^\beta} = [\xi^\alpha, G]$ (哈密顿矢量场).

从而验证: $\omega^{\alpha\rho}\frac{\partial X^\beta}{\partial \xi^\rho} - \omega^{\beta\rho}\frac{\partial X^\alpha}{\partial \xi^\rho} = (\omega^{\alpha\rho}\omega^{\beta\sigma} - \omega^{\beta\rho}\omega^{\alpha\sigma})\frac{\partial^2 G}{\partial \xi^\rho \partial \xi^\sigma} = 0$. 从而, 给定相空间上函数 $G(t,\xi)$, 即得到无穷小正则变换. $\xi^\alpha \to \xi^\alpha + \delta\xi^\alpha$, $\delta\xi^\alpha = \varepsilon[\xi^\alpha, G]$

具体写出, 有: $\delta q^a = \varepsilon[q^a, G] = \varepsilon\frac{\partial G}{\partial p_a}$ $\quad \delta p_a = \varepsilon[p_a, G] = -\varepsilon\frac{\partial G}{\partial q^a}$.

这样, 若有一条曲线是正则变换"变"出来的. (将 $\xi^\alpha(\lambda) \to \xi^\alpha(\lambda + d\lambda)$). 从而 $\xi^\alpha(\lambda) \to \xi^\alpha(\lambda + d\lambda) = \xi^\alpha(\lambda) + d\lambda[\xi^\alpha, G] \Rightarrow \frac{d\xi^\alpha(\lambda)}{d\lambda} = [\xi^\alpha, G]$. 从而得到 G 诱导的无穷小变换的相流.

无穷小正则变换的生成函数可以如下构造: 由于恒等变换为 $F_2 = q^a P_a \to$ 无穷小: $F_2 = q^a P_a + \varepsilon W(t,q,P)$. 从而有 $\delta q^a = Q^a - q^a = \varepsilon\frac{\partial W}{\partial P_a}$ $\quad \delta p_a = -\varepsilon\frac{\partial G}{\partial q^a}$

从而 $G(t,q,p) = \lim_{\varepsilon\to 0} W(t,q,P)$.

另外, 由Hamilton方程形式: $\frac{d\xi^\alpha(t)}{dt} = \omega^{\alpha\beta}\frac{\partial H}{\partial \xi^\beta} = [\xi^\alpha, H] = X^\alpha_H$. 从而时间演化是由生成元 H 给定的无穷小正则变换.

力学量的演化: $\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \xi^\alpha}\frac{\partial \xi^\alpha}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \xi^\alpha}[\xi^\alpha, H] = \frac{\partial f}{\partial t} + [f, H]$. 从而 $[\xi^\alpha(t), \xi^\beta(t)] = \omega^{\alpha\beta}$ 一直保持. 无穷小正则变换的判断与Hamilton方程的判断一致.

现考虑一个只依赖于相空间坐标的力学量. 在无穷小变换下有 $\delta f = f(\lambda+\xi) - f(\lambda) = \frac{\partial f}{\partial \xi^\alpha}\delta\xi^\alpha = \varepsilon \frac{\partial f}{\partial\xi^\alpha}[\xi^\alpha, G] = \varepsilon[f,G]$. 从而可定义 $\hat{G}_{cl}\bullet = [\bullet, G]$. ∴在G生成的正则变换下的无穷小变换

$f(\lambda) = \exp(\lambda\hat{G}_{cl}) f(0)$.

若 $[G,H]=0$ $\begin{cases} \delta_H G = 0 & \text{G为运动常数} \\ \delta_G H = 0. & \text{G生成的无穷小正则变换是体系的对称变换.} \end{cases}$

这正是 Noether's Theorem 在 Hamilton 力学框架下的表述.

现在说明体元是正则变换下不变量. 单自由度: $dA \to d\hat{A} = dQ\,dP = \left|\det\left(\frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)}\right)\right| dA$, $= [Q,P]_{\{q,p\}} = 1$.

多自由度: $dV = |\det M|\, dV$ M为Jacobian 由于 $M^T\omega M = \omega \Rightarrow \det(M^T)\det(\omega)\cdot\det(M) = \det(\omega) \Rightarrow \det(M) = 1$.

Liouville's Theorem: 相空间体元在正则变换(演化)下保持不变!

相流散度: $\nabla\cdot X_G = \frac{\partial}{\partial\xi^\alpha}\left(\omega^{\alpha\beta}\frac{\partial G}{\partial\xi^\beta}\right) = 0$. ⇒ 相空间给定区域内相点数目不变. 考虑 $\rho(t,\xi)$ 为 ξ 附近点密度. 则 ξ 附近 dV 内点 → $\tilde{\xi}$ 附近 $\tilde{dV}$ 内点.

我们追踪特定数目的点. 由体元不变 → $\rho(\tilde{t},\tilde{\xi}) = \rho(t,\xi)$. ⇒ $\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + [\rho, H] = 0$.