几何化的经典力学-Ep.5

Hamilton 矢量场和泊松括号

之前我们已经发现，辛流形上的正则变换与保辛形式的映射 $\phi_\star\omega_{ab}=\omega_{ab}$ 有关。我们将生成了保辛映射的向量场称为辛矢量场（对应于黎曼流形上的 Killing 矢量场,，所有辛向量场的集合记为 $\mathcal{X}_{\mathrm{Sp}}(M)$）。根据嘉当魔法公式，对于辛矢量场有：

$$\mathrm{d}(\omega_{ab}X^a)=0$$

通过对比 $\omega_{ab}X^a$ 和 $(\mathrm{d}H)_b$ 在正则坐标基底下的形式，可知我们原则上可以找到函数 H，使得：

$$\omega_{ab}X^a=(\mathrm{d}H)_b$$

成立，我们称 X^a 是辛流形上的一个哈密顿矢量场，将所有哈密顿矢量场的集合记为 $\mathcal{X}_{\mathrm{Ham}}(M)$。从物理意义上来看，$\mathcal{X}_{\mathrm{Ham}}(M)$ 显然是 $X_{\mathrm{Sp}}(M)$ 的子集，所以一个辛矢量场都可以视作由某个生成函数 H 生成的哈密顿矢量场。

Theorem：哈密顿矢量场的生成函数沿哈密顿矢量场积分曲线守恒

该定理的证明十分简单。方便起见，借辛流形上任意坐标系完成证明。设积分曲线为 $\gamma(t)$，其切矢记为 $Z^a=\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^a$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}H(\gamma(t))}{\mathrm{d}t}&=\left(\frac{\mathrm{d}x^i}{\mathrm{d}t}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x^i}\right)^a\left(\frac{\partial H}{\partial x^j}\right)(\mathrm{d}x^j)_a\\&=(\mathrm{d}H)_aX^a\\&=X^a(\omega_{ab}X^b)\\&=0\end{aligned}$$

Theorem：$\mathcal{X}_{\mathrm{Ham}}(M)$ 按照矢量场的对易括号构成 Lie 代数

辛流形上矢量场的对易括号和黎曼流形上一致。取任意函数 f 和矢量 X^a,Y^a，有：

$$[X,Y](f)=X(Y(f))-Y(X(f))$$

或写成不依赖于 f 的形式：取辛流形上的任意无挠联络 ∇_a：

$$[X,Y]^a=X^b\nabla_bY^a-Y^b\nabla_bX^a$$

我们证明 $\mathcal{X}_{\mathrm{Hal}}$ 对对易括号的封闭性。由于这里的无挠联络可以任意选择，我们不妨选择与辛形式适配的联络，也就是 $\nabla_c(\omega_{ab})=0$（注意：这个条件不足以确定唯一的无挠联络，但是我们确实从这样的联络中选择一个）：

$$\begin{aligned}&\omega_{ab}X^c\nabla_cY^a-\omega_{ab}Y^c\nabla_cX^a\\&=X^c\nabla_c(Y^a\omega_{ab})-Y^aX^c\nabla_c(\omega_{ab})-Y^c\nabla_c(\omega_{ab}X^a)+Y^cX^a\nabla_c(\omega_{ab})\\&=X^c\nabla_c(Y^a\omega_{ab})-Y^c\nabla_c(\omega_{ab}X^a)\\&=X^c\nabla_c((\mathrm{d}G)_b)-Y^c\nabla_c((\mathrm{d}H)_b)\end{aligned}$$

由于两边都是张量等式，所以下面我们借一个正则坐标系完成问题。最大的好处是在正则坐标系上 $\omega_{ab}=\sum_i(\mathrm{d}q^i)_a\wedge(\mathrm{d}p^i)_b$，那么很容易验证其上的普通导数算符 ∂_x 恰好是与 ω_{ab} 适配的无挠联络。从而上文中的 ∇_c 可以直接替换成 ∂_c。在正则坐标系内展开上式：

$$\begin{aligned}&X^c\nabla_c((\mathrm{d}G)_b)-Y^c\nabla_c((\mathrm{d}H)_b)\\&=\omega^{cd}(\partial_dH)(\partial_c\partial_bG)+\omega^{cd}(\partial_cG)(\partial_d\partial_bH)\\&=\partial_b(\omega^{cd}(\partial_dH)(\partial_cG))\end{aligned}$$

从而我们完成了证明，并且发现在某个正则坐标系内，$[X,Y]^a$ 的生成函数可以写成 $\omega^{cd}(\partial_cG)(\partial_dH)$ 的形式。从而我们定义：

$$[G,H]_{\mathrm{cls}}=\omega^{cd}(\mathrm{d}G)_c(\mathrm{d}H)_d=\omega_{ab}X^a_GY^b_H$$

为函数 G,H 的经典对易子，或泊松括号。不难证明，按照上述定义，它有性质：

- 作为新的哈密顿矢量场的生成元

$$[X_G, X_H] = -X_{[G,H]_{\text{cls}}}$$

- 反对称性、莱布尼兹性、雅可比恒等式

辛体积形式，刘维尔定理

在辛流形上，我们无法定义曲线的长度、矢量的夹角等等，但是可以定义体积。先回忆一下在黎曼流形上我们如何定义体积。我们首先定义一个形式在流形上的积分为：若 $\omega = \omega_{1,\cdots,n}(x^1,\cdots,x^n)\mathrm{d}x_1\wedge\cdots\wedge\mathrm{d}x^n$，那么：

$$\int_A \omega = \int_A \omega(x^1,\cdots,x^n)\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_n$$

我们定义区域 A 的体积为与度规适配的体元 $\epsilon_{a_1,\cdots,a_n}$ 在 A 上的积分。在任意坐标基底下，与度规适配的体元表示为：

$$\epsilon_{a_1,\cdots,a_n} = \pm\sqrt{\det(g)}(e^1)_{a_1}\wedge\cdots\wedge(e^n)_{a_n}$$

在辛流形上，与辛形式适配的体积 $2n$ 形式可以如下定义：

$$\omega_{\text{vol}} = \frac{1}{n!}\underbrace{\omega\wedge\cdots\wedge\omega}_{n\text{个}\omega} = \frac{1}{n!}\omega^{\wedge n}$$

例如，我们在一组正则坐标上展开辛形式：

$$\begin{aligned}
\omega_{\text{vol}} &= \frac{1}{n!}\left(\sum_{i_1=1}^{n}\mathrm{d}q_{i_1}\wedge\mathrm{d}p_{i_1}\right)\wedge\cdots\wedge\left(\sum_{i_n=1}^{n}\mathrm{d}q_{i_n}\wedge\mathrm{d}p_{i_n}\right)\\
&= \frac{1}{n!}\sum_{\{i_1,\cdots,i_n\}=\{1,\cdots,n\}}(\mathrm{d}q_{i_1}\wedge\mathrm{d}p_{i_1})\wedge\cdots\wedge(\mathrm{d}q_{i_n}\wedge\mathrm{d}q_{i_n})\\
&= \frac{1}{n!}\sum_{\{i_1,\cdots,i_n\}=\{1,\cdots,n\}}(\mathrm{d}q_{i_1}\wedge\cdots\wedge\mathrm{d}q_{i_n})\wedge(\mathrm{d}p_{i_1}\wedge\cdots\wedge\mathrm{d}p_{i_n})\\
&= \mathrm{d}q_1\wedge\cdots\wedge\mathrm{d}q_n\wedge\mathrm{d}p_1\wedge\cdots\wedge\mathrm{d}p_n
\end{aligned}$$

这个与 $(\mathbb{R}^{2n},\delta_{ab})$ 上的标准体积形式完全相同，从而这印证了我们定义的辛形式确实给出了"体积"。体积辛形式顺便给出了辛流形上的一个定向。

接下来我们研究保体积映射。考虑两个辛流形 $(M,\omega_{\text{vol},M})$，$(N,\omega_{\text{vol},N})$，若 $\omega_M = \phi^\star\omega_N$，取 M 上的一个区域 A，并在 M 上选择坐标系 $\{x^i\}$，在 N 上选择坐标系 $\{y^i = \phi(x)\}$，那么在 M 上区域 A 的体积为：

$$\int_A \omega_M\left(\frac{\partial}{\partial x^1}\right)^{a_1}\cdots\left(\frac{\partial}{\partial x^{2n}}\right)^{a_{2n}}\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{2n}$$

而在 N 上区域 $\phi(A)$ 的体积为：

$$\begin{aligned}
&\int_{\phi(A)}\phi_\star(\omega_M)\left(\frac{\partial}{\partial y^1}\right)^{a_1}\cdots\left(\frac{\partial}{\partial y^{2n}}\right)^{a_{2n}}\mathrm{d}y_1\cdots\mathrm{d}y_{2n}\\
=&\int_{\phi(A)}\omega_M\phi^\star\left(\frac{\partial}{\partial y^1}\right)^{a_1}\cdots\phi^\star\left(\frac{\partial}{\partial y^{2n}}\right)^{a_{2n}}\mathrm{d}y_1\cdots\mathrm{d}y_{2n}\\
=&\int_{\phi(A)}\omega_M\left(\frac{\partial}{\partial x^1}\right)^{a_1}\cdots\left(\frac{\partial}{\partial x^{2n}}\right)^{a_{2n}}\det(J^{-1})\det(J)\mathrm{d}x_1\cdot\mathrm{d}x_{2n}
\end{aligned}$$

从而可以证明保持体积 $2n$ 形式的映射有性质：

$$\int_{\phi(A)}\phi_\star\omega_M = \int_A\omega_M$$

这也是推前映射将一个流形上的几何性质原封不动地带到另一个流形上的体现。

由于体积形式 $\omega_{\text{vol},2n}$ 是由 n 个正则辛形式楔形积得到的，所以显然等辛形式映射 $\phi_\star\omega_{ab} = \omega_{ab}$ 也是保持体积的。我们知道等辛形式映射是正则变换的主动观点，因此我们可以说正则变换保持相空间中的体积不变，考虑到由 H 生成的演化也是正则变换，我们立刻得到刘维尔定理：

Theorem：刘维尔定理

相空间体元在演化映射下保持体积不变。

直观上，刘维尔定理导致哈密顿向量场中不存在相流的"流出点"或者"汇入点"。

诺特定理

显然，在哈密顿系统中，系统的状态由相空间中的点表示，系统状态的函数被称为力学量。容易验证，力学量的演化与其和哈密顿量的泊松括号有关：

$$\frac{\mathrm{d}f(\gamma(t))}{\mathrm{d}t} = -[f,H]_{\text{cls}}$$

特别地，若 $[f,H]=0$，则 f 是沿着运动轨迹的守恒量，或者称为**运动积分**。
接下来，我们来到经典力学中最美的定理之一：我们要宣称系统的对称性与守恒量有关。

Definition：哈密顿系统的对称变换

我们称映射 $\phi: M \to M$ 是哈密顿系统 (M,ω,H) 的对称变换，若：

- ϕ 是辛同胚，即 $\phi_\star\omega_{ab} = \omega_{ab}$
- ϕ 保持 H 不变，即 $\phi_\star H = H$

在介绍主要定理前，我们先介绍一个引理。

Lemma：对称变换的性质

若 ϕ 为哈密顿系统 (M,ω,H) 的对称变换，则 $\phi_\star X_H^a = X_H^a$

证明：

$$\begin{aligned}
\phi_\star X_H^a &= \phi_\star(\omega^{ab}(\mathrm{d}H)_b) \\
&= \phi_\star(\omega^{ab})\phi_\star((\mathrm{d}H)_b) \\
&= \omega^{ab}\mathrm{d}(\phi_\star \mathrm{H})_\mathrm{b} \\
&= \omega^{ab}(\mathrm{d}H)_b
\end{aligned}$$

现在给出 Noether 定理：

Theorem：Noether 定理

设 (M,ω,H) 是 Hamilton 系统，$\{\phi_s\}$ 是使用参数 s 参数化的对称变换组成的单参微分同胚群，该对称变换的切向量场为 Y^a。则在 M 上存在力学量 F，使得：

- Y 由 F 生成：$\omega_{ab}Y^a = (\mathrm{d}F)_b$
- F 是运动积分：$[F,H]_{\text{cls}} = 0$
  一句话解释：对称变换向量场的生成元是运动积分。

证明：首先根据对称变换的定义，对称变换必然是保辛变换，从而必然可以找到生成元 F 使得 $\omega_{ab}Y^a = (\mathrm{d}F)_b$。继续利用它的定义，有：

$$\mathcal{L}_Y H = Y(H) = (\omega^{ab}(\mathrm{d}F)_b)(H) = \omega^{ab}(\nabla_a H)(\mathrm{d}F)_b = \omega^{ab}(\mathrm{d}H)_a(\mathrm{d}F)_b = 0$$

从而立刻得证。

对于任意一个系统，我们显然希望更多地找到系统的运动积分，有一种平凡的运动积分是我们不需要的：假定我们已有运动积分 $f_1,\cdots,f_k$，那么 $f=\phi(f_1,\cdots,f_k)$ 一定是运动积分，然而（显然）这样的运动积分并不给我们提供更多的关于系统的信息。这可以以另外一种方式表述为 $(\mathrm{d}f)_a$ 与 $(\mathrm{d}f_i)_a$ 是线性相关的。另外一种构造运动积分的方式是利用泊松括号：若

f_1, f_2 都是运动积分，则 $[f_1, f_2]_{\text{cls}}$ 也为运动积分。我们现在希望寻找一个系统的"完备但又不多余"的运动积分集，也就是说寻找运动积分 $\{f_1, \cdots, f_k\}$，使得 $(\mathrm{d}f_i)_a$ 在相空间上的任何一点处线性无关，并且使用泊松括号无法生成新的运动积分（这个条件可以表述为 $[f_i, f_j]_{\text{cls}} = 0$，若不符合，把原来的运动积分线性组合一下即可）。

Theorem：运动积分的最大数量

设 (M, ω, H) 是 $2n$ 维 Hamilton 系统，若存在运动积分集合 $\{f_1, \cdots, f_k\}$ 满足：

- $(\mathrm{d}f_i)_a$ 在相空间上任意一点线性无关
- $[f_i, f_j]_{\text{cls}} = 0$
  则运动积分的最大数目 $k \leq n$

设 $X_1^a, \cdots, X_k^a$ 是由 $f_1, \cdots, f_k$ 生成的 Hamilton 矢量场，由于 $(\mathrm{d}f_i)_a$ 的线性无关性可以导出 X_i^a 的线性无关性，从而 $\dim\{X_1, \cdots, X_k\} = k$。利用泊松括号的定义 $\omega_{ab}X_i^aX_j^b = 0$ 可知 $\{X_1, \cdots, X_k\}$ 为 $2n$ 维辛线性空间 T_xM 上的迷向子空间，从而 $k \leq n$ 成立。

可积系统与遍历性简介

显然，如果我们能找到最多的 n 个运动积分，那么我们就有了对这个系统最大的了解，我们将这样的系统称为**可积系统**。对于可积系统我们有如下定理：

Theorem：Arnold-Liouville 定理

设 (M, ω, H) 为 $2n$ 维可积系统，$\{f_1 = H, f_2, \cdots, f_n\}$ 是其 n 个运动积分。定义 $f: M \to \mathbb{R}^n$ 为 $f = (f_1, \cdots f_n)$，系统运行在 $f^{-1}(c), c \in \mathbb{R}^n$ 上，且 $f^{-1}(c)$ 是 M 的 n 维光滑嵌入流形，那么：

- $f^{-1}(c)$ 是 (M, ω) 的拉格朗日子流形
- $f^{-1}(c)$ 的所有紧连通分支同胚于 T^n，即所谓"不变环面"；任意连通分支在一定条件下同胚于 $T^k \times \mathbb{R}^{n-k}$
- 对于 $f^{-1}(c)$ 的任意一个连通分支，可以找到一组坐标系 $(\theta^1, \cdots, \theta^n)$，使得哈密顿矢量场积分曲线的方程可以写成 $\dfrac{\mathrm{d}\theta_i}{\mathrm{d}t} = v_i$，$v_i$ 是常数，这 n 个坐标称为角坐标。
- 在该连通分支上各点的一个邻域存在正则坐标系 $(\theta_1, \cdots, \theta_n, \tau_1, \cdots, \tau_n)$，新添的 n 个坐标称为作用坐标。
  一句话总结：可积系统的运动轨迹可以表述为匀速直线运动和圆周运动的复合。

下面介绍遍历性定理：

Theorem：Birkhoff 遍历定理

设 T 是概率空间 $(X, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ 上的保测映射，f 为 X 上可积函数，$\mathcal{C}$ 是 T 的不变子集生成的 $\sigma-$ 代数。从而几乎对于 $\forall x$ 有：

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f(T^i(x)) = \mathbb{E}[f|\mathcal{C}](x)$$

特别地，若 X 本身是 T 的不变子集，那么右边直接是 $\mathbb{E}[f] = \int_X f\mathrm{d}\mathbb{P}$

此即所谓的"时间平均=空间（系综）平均"，对于左边，由哈密顿量生成的演化就是辛形式上的保测映射，右侧的概率测度即为相空间上的体积元。在统计力学中研究微正则、正则或巨正则系综时，我们实际上总是将系统（或系统和外界热库的总和）限制在某个固定的能量上，并且让系统在这个能量上的任意位置以相同的概率出现。

番外：保辛数值格式

作为番外，我们研究如何数值求解一个经典力学问题。简单起见，我们以谐振子为例，作为最基本的求解方法，我们有显式 Euler 格式和隐式 Euler 格式：

$$\frac{q_{m+1} - q_m}{\Delta t} = p_m \quad \frac{p_{m+1} - p_m}{\Delta t} = -q_m$$

$$\frac{q_{m+1}-q_m}{\Delta m}=p_{m+1}\quad\frac{p_{m+1}-p_m}{\Delta t}=-q_{m+1}$$

如果真的拿它们求解，就会发现显式格式使得能量增加；隐式格式使得能量减少。但是，在不增加格式的阶数的情况下，采用下面的"半显半隐"格式却有很好的效果：

$$\frac{q_{m+1}-m}{\Delta t}=p_m\quad\frac{p_{m+1}-p_m}{\Delta t}=-q_{m+1}$$

为什么会出现这样的情况？我们之前说过，演化就是正则变换，而现在我们使用差分方程演化。将 $\{q_m,p_m\}\to\{q_{m+1},p_{m+1}\}$ 视作坐标变换，对于显式格式有：

$$\mathrm{d}q_{m+1}\wedge\mathrm{d}p_{m+1}=(1+(\Delta t)^2)\mathrm{d}q_m\wedge\mathrm{d}p_m$$

同样地，对于隐式格式有：

$$(\mathrm{d}q_{m+1})\wedge(\mathrm{d}p_{m+1})=\frac{1}{1+(\Delta t)^2}\mathrm{d}q_m\wedge\mathrm{d}p_m$$

所以它们并不是保持辛形式的。容易验证"半显半隐"的算法可以保持辛形式不变。这样的结论可以推广到任意系统的求解过程中，经过枯燥的数学运算，我们可以证明以下辛 Euler 法总是保持辛形式不变的：

$$\frac{q_j^{m+1}-q_j^m}{\Delta t}=\frac{\partial H}{\partial p_j}(q^m,p^{m+1})\quad\frac{p_j^{m+1}-p_j^m}{\Delta t}=-\frac{\partial H}{\partial q_j}(q^m,p^{m+1})$$