

Mechanika teoretyczna

Wykład 14

Równanie Hamiltona-Jacobiego

Na poprzednim wykładzie wykorzystaliśmy zasadę wariacyjną

$$0 = \delta \int (p\dot{q} - H) dt$$

do uzyskania – drogą redukcji zagadnienia wariacyjnego – zasady Jacobiego. Zasady o której wiele dobrego starałem się już powiedzieć.

Obecnie zajmiemy się wyprowadzeniem jeszcze jednego sformułowania praw mechaniki, również niezwykle przydatnego w praktyce, oraz – podobnie jak zasada Jacobiego – ukazującego jeszcze raz i jeszcze głębiej związku między mechaniką klasyczną a kwantową.

Zastanówmy się nad rodzajem **zmian zmiennych** q i p które warto by próbować robić w celu uzyskania jakichś korzyści.

W przypadku zasady Hamiltona, funkcja pod całką była pozbawiona jakiejś szczególnej struktury. Wszystko mogło być lagranżianem. Każda zmiana zmiennych oczywiście była (i teraz też jest) dopuszczalna. Zamiast starego lagranżianu wychodził jakiś nowy. Jednak teraz, struktura funkcji podcałkowej jest dość szczególna, dzięki czemu równania są szczególnie „ładne” i użyteczne. Byle jaka zmiana zmiennych popsukała by tę strukturę i mała jest szansa, że mimo to, udało by się uzyskać jakieś uproszczenie. Nie ma pochodnych pędu, a gdy „wymieszam” wszystkie $2f$ zmiennych wprowadzając nowe, pojawi się $2f$ pochodnych.

Zbadajmy na początek tzw. „przekształcenia punktowe” odpowiadające zwykłej zamianie zmiennych w przestrzeni konfiguracyjnej. Dla uproszczenia ograniczę się do transformacji niezależnych jawnie od czasu:

$$Q = Q(q) \quad q = q(Q)$$

Mamy kolejno:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial q_i(Q)}{\partial Q_j} \dot{Q}_j \quad \tilde{L}(Q, \dot{Q}) = L\left(q(Q), \frac{\partial q(Q)}{\partial Q_i} \dot{Q}_i\right)$$

$$P_j = \frac{\partial \tilde{L}(Q, \dot{Q})}{\partial \dot{Q}_j} = \frac{\partial L\left(q(Q), \frac{\partial q(Q)}{\partial Q} \dot{Q}\right)}{\partial \dot{Q}_j} = \frac{\partial q_i(Q)}{\partial Q_j} P_i$$

$$P_i = \frac{\partial Q_j(q)}{\partial q_i} P_j = \frac{\partial}{\partial q_i} \sum P_j Q_j(q) = \frac{\partial S(q, P)}{\partial q_i}$$

$$Q_i = \frac{\partial}{\partial P_i} \sum P_j Q_j(q) = \frac{\partial S(q, P)}{\partial P_i}$$

Jeśli zamiana zmiennych jest prawidłowa, macierz pochodnych musi być różna od zera:

$$\det \left[\frac{\partial Q_j(q)}{\partial q_i} \right] = \det \left[\frac{\partial \frac{\partial S(q, P)}{\partial P_j}}{\partial q_i} \right] = \det \left[\frac{\partial^2 S(q, P)}{\partial P_j \partial q_i} \right] \neq 0$$

Funkcja $S(q, P)$ liniowa w „nowych” pędach z współczynnikami będącymi funkcjami „starych” położeń wyrażającymi nowe współrzędne $Q(q)$ jest zwartym sposobem zapisania transformacji punktowej. Nowe współrzędne spełniają w sposób oczywisty równania Hamiltona i zasadę wariacyjną. Przecież zamiast wykonywać transformację Legendre’a zaczynając od współrzędnych q , wolno nam było przejść do zmiennych Q i dopiero potem ją wykonać.

Pokaże teraz, że zachowując wzory

$$p_i = \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial P_i}, \quad \det \left[\frac{\partial^2 S(q, P, t)}{\partial P_j \partial q_i} \right] \neq 0$$

i dopuszczając **ogólniejszą funkcję S** , generujemy przekształcenie prowadzące do zmiennych Q, P spełniających znów równania Hamiltona z pewnym nowym, jak się okaże, hamiltonianem.

Swobodę wyboru funkcji S wykorzystuje się do radykalnego uproszczenia „nowego” hamiltonianu.

Dowód jest stosunkowo prosty.

Funkcjonał działania wyrażamy przez nowe zmienne dynamiczne:

$$\begin{aligned}
 & \int \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial q} dq - H dt = \\
 & = \int \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial q} dq + \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial P} dP + \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial t} dt + \\
 & \quad - \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial P} dP - \left(\frac{\partial S(q, P, t)}{\partial t} + H \right) dt = \\
 & = S \Big|_1^2 + \int \left(- \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial P} \dot{P} - \left(\frac{\partial S(q, P, t)}{\partial t} + H \right) \right) dt =
 \end{aligned}$$

$$= S|_1^2 + \int (-Q\dot{P} - \tilde{H}) dt \quad \tilde{H}(Q, P) \equiv \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial t} + H$$

Troszkę to jest, na razie , różne od tego co oczekujemy, ale przyrównajmy do zera wariację:

$$\begin{aligned} 0 &= \delta S|_1^2 + \int \left(-Q\delta\dot{P} - \dot{P}\delta Q - \frac{\partial\tilde{H}}{\partial Q}\delta Q - \frac{\partial\tilde{H}}{\partial P}\delta P \right) dt = \\ &= \frac{\partial S}{\partial P}\delta P|_1^2 - Q\delta P + \int \left(\dot{Q}\delta P - \dot{P}\delta Q - \frac{\partial\tilde{H}}{\partial Q}\delta Q - \frac{\partial\tilde{H}}{\partial P}\delta P \right) dt = \\ &= \int \left(\left(\dot{Q} - \frac{\partial\tilde{H}}{\partial P} \right) \delta P - \left(\dot{P} + \frac{\partial\tilde{H}}{\partial Q} \right) \delta Q \right) dt \end{aligned}$$

Dla ruchu rzeczywistego wariacja ta znika. Znikąca gdy działanie było zapisane z użyciem „starych” zmiennych. Do nowych zmiennych przeliczyliśmy **to samo działanie**, więc jest ono stacjonarne względem wariacji nowych zmiennych (przy których znikają wariacje Q na brzegach). Widzimy **explicite**, że nowe zmienne spełniają równania Hamiltona z nowym hamiltonianem.

Liczne zastosowania.

- Rozszerzenie klasy przekształceń wzbogaca też możliwości **nowych symetrii**. Ma to szczególne znaczenie w teorii kwantowej. Istnieje związek symetrii z prawem zachowania, podobny, choć inny niż ten ujęty twierdzeniem Noether.
- Użycie, jako podstawowych zmiennych dynamicznych, pewnych **kombinacji** położeń i pędów jest bardzo owocne przy kwantowaniu układów dynamicznych .
- Wprowadzając zależną od czasu funkcję tworzącą można **radzykalnie** zmienić hamiltonian i doprowadzić go do postaci, przy której rozwiązanie równań ruchu, będzie łatwiejsze (bo, na przykład, pojawi się możliwość zastosowania skutecznej metody kolejnych przybliżeń), albo wręcz **stanie się BANALNE**.

Poszukajmy funkcji S , która przeprowadzi hamiltonian w**ZERO**. Tak, w zero! Równania ruchu będą mieć postać:

$$\dot{Q} = 0$$

i rozwiązanie :

$$Q = \text{const}$$

$$\dot{P} = 0$$

$$P = \text{const}$$

Transformacja odwrotna (wystarczy połowa wzorów): $q = (Q, P, t)$

byłaby ostatecznym, najogólniejszym rozwiązaniem problemu mechanicznego: wyznaczenie położenia w funkcji czasu i $2f$ stałych dowolnych $:P_1, P_2, P_3, \dots, Q_1, Q_2, Q_3, \dots$
 By taki cel osiągnąć, trzeba dobrać funkcję tworzącą przekształcenia tak, by:

$$\tilde{H}(Q, P) \equiv \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial t} + H = \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial q}, t\right) = 0$$

To jest równanie **Hamiltona-Jacobiego**.

Jest to równanie różniczkowe cząstkowe na funkcję od q i t . „Nowe” pędy P są parametrami rozwiązania. W rzeczywistości, równania cząstkowe pierwszego rzędu w pewnej liczbie zmiennych (u nas $f+1$) mają rozwiązania zależne od $f+1$ stałych dowolnych. Jest to tzw. „całka zupełna” równanie H-J. Wielkości P pojawiają się w trakcie rozwiązywania. Słuszne jest pisać:

$$\frac{\partial S(q, t)}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S(q, t)}{\partial q}, t\right) = 0$$

R H-J zawiera tylko pochodne S , przeto jedną z tych stałych jest stała addytywna:
 $S=S(q, P, t)+\text{const}$, nieistotna z punktu widzenia transformacji.

Rozwiązanie ogólne **równań zwyczajnych – równań ruchu**, jest dane w postaci uwikłanej:

$$Q_i = \frac{\partial S(q, P, t)}{\partial P_i}$$

Całki **PIERWSZE** P , pierwsze się pojawiają w trakcie rozwiązywania, całki drugie Q , dopisujemy potem. W pewnym sensie całki pierwsze są ważniejsze.

Jeśli zetknęliście się Państwo już z równaniem Schrödingera na funkcję od położenia, czasu i zarazem zależną od **liczb kwantowych** (3 dla jednej cząstki w potencjale sił), zawierające pochodne tej funkcji po współrzędnych, to widzicie, że oto pojawiło się, **jako całkowicie równoważne równaniom Newtona**, równanie zawierające te wszystkie elementy. To **jeszcze nie jest** równanie Schrödingera, ale jesteśmy blisko.

O równaniu H-J twierdzi się, że jest to **najogólniejsza** metoda analitycznego rozwiązywania problemów mechaniki. Jeśli rozwiązywalny (do znaczy dający się sprowadzić do „kwadratur”) jest jakiś problem metodą Lagrange’a, czy Hamiltona, czy z zasady wariacyjnej Jacobiego, czy jeszcze jakoś, to jest też explicite rozwiązywalny metodą H-J.

Na czymże ta rozwiązywalność polega? Otóż równanie H-J jest rozwiązywalne, jeśli w poszukiwaniu „całki zupełnej” wystarczy rozwiązywać po drodze pojedyncze zwyczajne równania różniczkowe pierwszego rzędu. Wiąże się to z metodą **separacji zmiennych**.

Na początek weźmy ogólny przypadek hamiltonianu **niezależnego od czasu**.

Podkreślam, że nie szukamy Najogólniejszego rozwiązania równania o pochodnych cząstkowych, nie szukamy wszystkich możliwych całek zupełnych. Usatysfakcjonuje nas **jakakolwiek**. Bez wahania możemy czynić założenia (ansatz!) co do rozwiązania jakie wydają się nam prawdopodobne i próbować znaleźć rozwiązanie.

Przypuśćmy więc, że szukana funkcja S jest **sumą** funkcji $S_q(q,P)+S_t(t)$

$$\frac{d S_t(t)}{d t} + H\left(q, \frac{\partial S_q(q)}{\partial q}\right) = 0, \text{ czyli}$$

$$H\left(q, \frac{\partial S_q(q)}{\partial q}\right) = -\frac{d S_t(t)}{d t}$$

Nastąpiło klasyczne **rozdzielenie zmiennych**. Czas po lewej, współrzędne po prawej. Równość dla wszelkich czasów i położeń możliwa wtedy i tylko wtedy, gdy obie strony solidarnie są stałe. Bo stała to jedyna (formalnie) funkcja samego czasu i zarazem samych współrzędnych!

$$H\left(q, \frac{\partial S_q(q)}{\partial q}\right) = E, \quad \frac{d S_t(t)}{d t} = -E$$

$$S(q, t) = S_q(q) - Et, \quad H\left(q, \frac{\partial S_q(q)}{\partial q}\right) = E$$

Równanie H-J ma jeszcze jedną przyjemną cechę. Czas i współrzędne, pełniące tak dramatycznie różne role w równaniach Newtona (czy Lagrange'a, czy Hamiltona), w równaniu H-J są **analogicznymi** zmiennymi niezależnymi, argumentami funkcji S . Jeśli hamiltonian nie zawiera także którejś współrzędnej, (tak jak przed chwilą nie zawierał czasu), to analogicznie odseparujemy tę zmienną. Przyjmijmy, że to q_1 :

$$S_q(q) = S_1(q_1) + S_{q_2, \dots, q_f}(q_2, \dots, q_f)$$

$$H(q_2, \dots, q_f, \boxed{\frac{dS_1(q_1)}{dq_1}}, \frac{\partial S_{q_2, \dots, q_f}(q_2, \dots, q_f)}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S_{q_2, \dots, q_f}(q_2, \dots, q_f)}{\partial q_f}) = E$$

Można rozwikłać algebraicznie względem $dS_1(q_1)/dq_1$ i mieć tę zmienną po jednej stronie, resztę po drugiej, Jasne, że pojawia się kolejna stała separacji P_1 .

$$S_q(q) = P_1 q_1 + S_{q_2, \dots, q_f}(q_2, \dots, q_f)$$

$$H(q_2, \dots, q_f, P_1, \frac{\partial S_{q_2, \dots, q_f}(q_2, \dots, q_f)}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S_{q_2, \dots, q_f}(q_2, \dots, q_f)}{\partial q_f}) = E$$

Zmienne się separują także wtedy, gdy jakaś współrzędna i jej pęd tworzą kombinację algebraiczną poprzez którą występują w hamiltonianie. W kombinacji tej może wystąpić inna zmienna, jeśli będzie to funkcja pędu cyklicznego innej wielkości. A oto ważniejsze przykłady.

Cząstka swobodna we współrzędnych kartezjańskich:

$$\frac{1}{2m} \left(\left(\frac{dS_x(x)}{dx} \right)^2 + \left(\frac{dS_y(y)}{dy} \right)^2 + \left(\frac{dS_z(z)}{dz} \right)^2 \right) = E$$

Wszystkie współrzędne są cykliczne. Gdy wprowadzą dwa pędy, trzeci będzie wyznaczony. Wygodniej jest zamiast E jako całki pierwszej potraktować trzy współrzędne symetrycznie. Dostajemy:

$$S = \vec{r}\vec{P} - \frac{\vec{P}^2}{2m}t$$

Ruch dany jest równaniami:

$$\vec{Q} = \frac{\partial S}{\partial \vec{P}} = \vec{r} - \frac{\vec{P}}{m}t$$

$$\vec{r} = \frac{\vec{P}}{m}t + \vec{Q}, \quad \vec{p} = \frac{\partial S}{\partial \vec{q}} = \vec{P}$$

„Całki pierwsze”, to w tym wypadku składowe kartezjańskie pędu, „całki drugie” to położenia początkowe.

Cząstka swobodna we współrzędnych biegunowych:

$$\frac{1}{2m} \left(\left(\frac{dS_r(r)}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{dS_\varphi(\varphi)}{d\varphi} \right)^2 \right) = E$$

$$S_\varphi(\varphi) = p_\varphi \varphi$$

$$\frac{dS_r(r)}{dr} = \pm \sqrt{2mE - \frac{p_\varphi^2}{r^2}}$$

$$S = -Et + p_\varphi \varphi \pm \int \sqrt{2mE - \frac{p_\varphi^2}{r^2}} dr$$

$$Q_E = -t \pm \int \frac{m}{\sqrt{2mE - \frac{p_\varphi^2}{r^2}}} dr$$

$$Q_\varphi = \varphi \mp \int \frac{p_\varphi / r^2}{\sqrt{2mE - \frac{p_\varphi^2}{r^2}}} dr$$

Cząstka we współrzędnych walcowych:

$$\frac{1}{2m} \left(\left(\frac{dS_r(r)}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{dS_\varphi(\varphi)}{d\varphi} \right)^2 + \left(\frac{dS_z(z)}{dz} \right)^2 \right) = E - V_r(r) - V_z(z)$$

$$S_\varphi(\varphi) = p_\varphi \varphi \quad \frac{1}{2m} \left(\left(\frac{dS_z(z)}{dz} \right)^2 \right) + V_z(z) = E_z$$

$$\left(\frac{dS_r(r)}{dr} \right)^2 = 2m(E - E_z) - V_r(r) - \frac{p_\varphi^2}{r^2}$$

$$\frac{dS_r(r)}{dr} = \pm \sqrt{2m(E - E_z - V(r)) - \frac{p_\varphi^2}{r^2}}, \quad \frac{dS_z(z)}{dz} = \pm \sqrt{2m(E_z - V(z))}$$

$$S = -(\tilde{E} + E_z)t + p_\varphi \varphi \pm \int \sqrt{2m(\tilde{E} - V(r)) - \frac{p_\varphi^2}{r^2}} dr \pm \int \sqrt{2m(E_z - V(z))} dz$$

$$Q_{\tilde{E}} = -t \pm \int \frac{m}{\sqrt{2m(\tilde{E} - V_r(r)) - \frac{p_\phi^2}{r^2}}} dr$$

$$Q_{E_z} = -t \pm \int \frac{m}{\sqrt{2m(E_z - V_z(z))}} dz$$

$$Q_{p_\phi} = \varphi \mp \int \frac{p_\phi / r^2}{\sqrt{2m(\tilde{E} - V_r(r)) - \frac{p_\phi^2}{r^2}}} dr$$

Cząstka we współrzędnych sferycznych:

$$\frac{1}{2m} \left(\left(\frac{dS_r(r)}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \left(\frac{dS_\varphi(\varphi)}{d\varphi} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{dS_\vartheta(\vartheta)}{d\vartheta} \right)^2 \right) = E - V_r(r)$$

$$\frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \vartheta} + \left(\frac{dS_\vartheta(\vartheta)}{d\vartheta} \right)^2 = r^2 \left(2m(E - V_r(r)) - \left(\frac{dS_r(r)}{dr} \right)^2 \right) = J^2$$

$$S = -Et + p_\varphi \varphi \pm \int \sqrt{J^2 - \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \vartheta}} d\vartheta \pm \int \sqrt{2m(E - V_r(r)) - \frac{J^2}{r^2}} dr$$

Rozważmy działanie jako funkcję punktu końcowego, przy ustalonym punkcie początkowym.

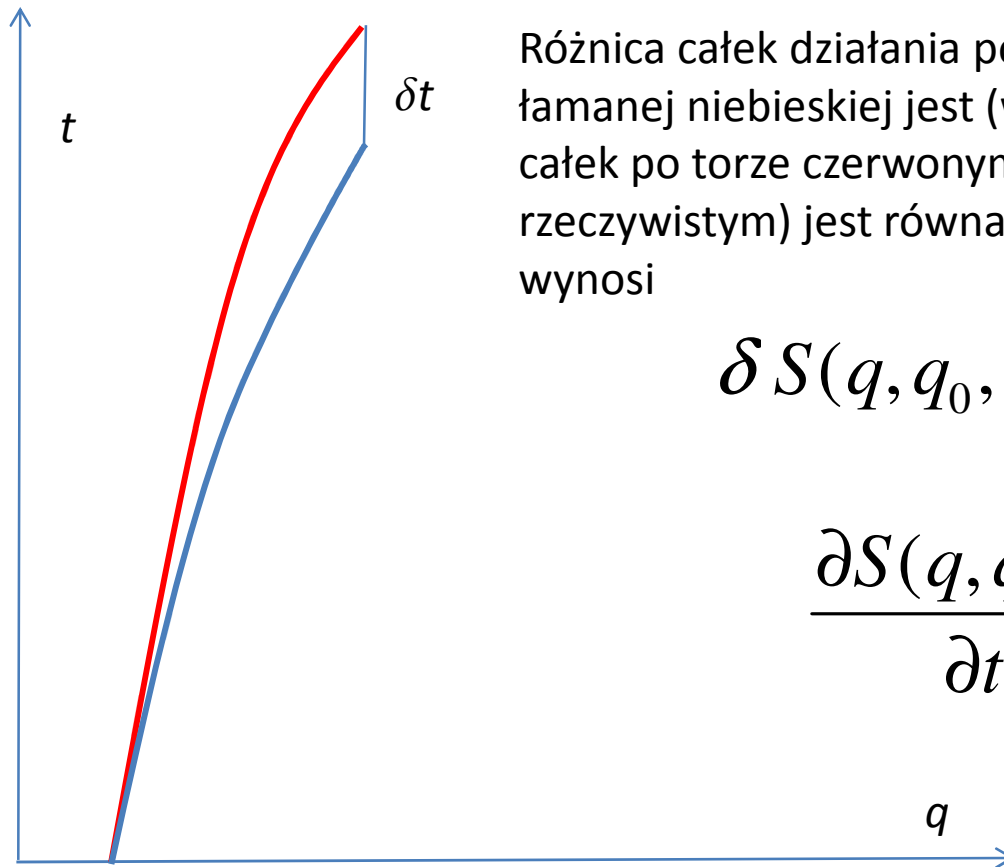
$$\int_{q_0, t_0}^{q, t} (p \dot{q} - H) dt \equiv S(q, q_0, t)$$

Obliczmy pochodne cząstkowe tej funkcji. Zmiana końcowego q (infinitesimalna) pociągnie za sobą (infinitesimalną) zmianę całej trajektorii i zmianę działania:

$$\begin{aligned} \delta S(q, q_0, t) &= \int_{q_0, t_0}^{q, t} (p \delta \dot{q} + \dot{q} \delta p - \delta H) dt = \\ &= p \delta q \Big|_{\text{koniec}} + \int_{q_0, t_0}^{q, t} \left(\left(\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p - \left(\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q \right) dt \end{aligned}$$

Stąd:

$$\frac{\partial S(q, q_0, t)}{\partial q} = p$$



Różnica całek działania po torze czerwonym (rzeczywistym) i łamanej niebieskiej jest (w przybliżeniu liniowym) zero. Różnica całek po torze czerwonym i **grubym niebieskim** (też rzeczywistym) jest równa całce po czasie przy ustalonym q i wynosi

$$\delta S(q, q_0, t) = -H \delta t$$

$$\frac{\partial S(q, q_0, t)}{\partial t} = -H$$

Policzmy działanie rzeczywiste dla cząstki swobodnej:

$$\int_{\vec{r}_0, t_0}^{\vec{r}, t} \left(m \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{t - t_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{t - t_0} - \frac{m}{2} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{t - t_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{t - t_0} \right) dt = \frac{m}{2} \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0)^2}{t - t_0}$$

$$S(\vec{r}, \vec{r}_0, t) = \frac{m}{2} \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0)^2}{t - t_0}$$

Jest to też rozwiązanie równania Hamiltona Jacobiego! Całkami pierwszymi są tu położenia początkowe! A czym są „całki drugie”?

$$\frac{\partial S(\vec{r}, \vec{r}_0, t)}{\partial \vec{r}_0} = -m \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{t - t_0} = -\vec{p}$$

$$\vec{r} = \frac{\vec{p}}{m} (t - t_0) + \vec{r}_0$$

Kolekcja wszystkich rozwiązań danych powyższym równaniem i równaniami uzyskanymi z

$$S = \vec{r} \vec{P} - \frac{\vec{P}^2}{2m} (t - t_0)$$

jest identyczna. O ile jeden zbiór odpowiada normalnym do frontów fali płaskiej, to drugi kulistej. W pierwszym **pęd jest dobrze określony, w drugim położenie początkowe !!!**