مباحث ویژه در مکانیک هامیلتونی / فروردین ۱۳۹۴

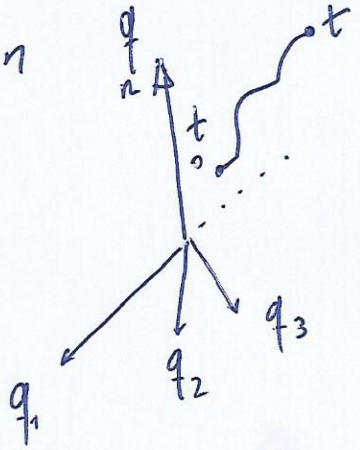
- در فرمالیزم لاگرانژی، سیستمی با n درجه آزادی لاگرانژی، در n معادله دیفرانسیل درجه ۲ صدق می‌کند. از آنجایی که معادلات اویلر-لاگرانژ درجه ۲ می‌باشند

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

$2n$ درجه فیزیکی سیستم احتیاج به $2n$ شرط اولیه دارد.

به طور مثال اگر q_i و $\dot{q}_i$ در زمان t مشخص باشد.

حال می‌توان سیستم را در یک فضای n-بعدی به نام Configuration Space، که مختصه‌های آن q_i ($i = 1, \dots, n$) است را مشخص کرد. که n کمیت مستقل وجود دارد.



در صورتی که n متغیر مستقل نباشند می‌توان سیستم را با m ($m < n$) کمیت مستقل فرمولبندی کرد که

$n - m$ = تعداد قیدها خواهد بود.

- در فرمالیزم هامیلتونی، معادلات حرکت با معادلات دیفرانسیل مرتبه 1 داده می‌شود. از آن جایی که درجات آزادی فیزیکی (تعداد شرایط اولیه) $2n$ می‌باشد در این صورت فرمالیزم هامیلتون با $2n$ معادله دیفرانسیل و $2n$ مختصه مستقل در فضای فاز Phase Space توصیف می‌شود.

n درجه مستقل این سیستم مختصات تعمیم یافته q_i می‌باشند و n درجه دیگر تکانه تعمیم یافته p_i Conjugate momenta می‌باشند که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$p_i = \frac{\partial L(q_j, \dot{q}_j ; t)}{\partial \dot{q}_i}$$

به (q, p) مختصات کانونیک Canonical Variables می‌گویند.

حال برای بررسی سیستم مکانیکی و انتقال از مکانیک لاگرانژی که متغیرهای $(q, \dot{q}\,; t)$ را دارد به مکانیک همیلتونی با متغیرهای (q, p, t) که p، تکانه مرتبط با q است با تبدیل ریاضی Legendre Transform. انجام می‌شود.

برای بررسی تبدیل لژاندر، تابع $f(x,y)$ را در نظر بگیرید. دیفرانسیل f به صورت زیر داده می‌شود.

$$df = u\,dx + v\,dy \qquad \text{که} \qquad \begin{cases} u \equiv \dfrac{\partial f}{\partial x} \\[2ex] v \equiv \dfrac{\partial f}{\partial y} \end{cases}$$

حال می‌خواهیم متغیرهای مستقل را از (x,y) به (u,y) تبدیل کنیم.

فرض کنید g تابعی از u و y باشد، خواهیم داشت

$$g = f - ux$$

$$dg = df - u\,dx - x\,du = \cancel{u\,dx} + v\,dy - \cancel{u\,dx} - x\,du = v\,dy - x\,du$$

$$\rightarrow \quad dg = v\,dy - x\,du$$

حال v و x را می‌توان برحسب u و y نوشت

$$x = -\frac{\partial g}{\partial u}, \qquad v = \frac{\partial g}{\partial y}$$

تبدیلات لژاندر در ترمودینامیک استفاده می‌شود.

قانون اول ترمودینامیک، تغییرات دیفرانسیل انرژی dU، را به تغییرات گرما dQ و کار انجام شده به سیستم dW ربط داد.

$$dU = dQ - dW$$

برای گاز که در یک فرایند برگشت پذیر باشد تغییرات انرژی

$$dU = T\,dS - P\,dV \qquad \text{که} \qquad U = U(\underbrace{S}_{\text{آنتروپی}}, \underbrace{V}_{\text{حجم}})$$

$$dU = TdS - PdV \qquad U = U(S,V)$$

در نتیجه فشار P و دما T به صورت زیر تعریف می‌شوند

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

حال آنتالپی enthalpy، $H = H(S,P)$ با تبدیل لژاندر زیر به دست می‌آید.

$$\boxed{H = U + PV}$$

که شکل دیفرانسیلی رابطه (دما و حجم) بر اساس تغییرات متغیرهای جدید S, P به صورت زیر به دست می‌آید:

$$dH = dU + PdV + VdP = TdS - \cancel{PdV} + \cancel{PdV} + VdP$$

$$\boxed{dH = TdS + VdP}$$

در نتیجه $T = \frac{\partial H}{\partial S}, \quad V = \frac{\partial H}{\partial P}$

تبدیلات لژاندر دیگر انرژی آزاد هلمهولتز Helmholtz free energy $F(T,V)$

$$F = U - TS$$

و انرژی آزاد گیبس $G(T,P)$ Gibbs free energy است

$$G = H - TS$$

حال می‌خواهیم تبدیل لژاندر لاگرانژی $L = L(q, \dot{q}, t)$ را بررسی کنیم.

$$dL = \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

با توجه به تعریف تکانه $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ ، معادله اویلر لاگرانژ $\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$

دیفرانسیل لاگرانژی به صورت زیر بدست می‌آید -

$$dL = \dot{p}_i \, dq_i + p_i \, d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

همیلتونی از تبدیل لژاندر زیر بدست می‌آید.

$$H(q,p,t) = \dot{q}_i p_i - L(q,\dot{q},t)$$

که دیفرانسیل آن

$$dH = \dot{q}_i \, dp_i + \cancel{p_i \, d\dot{q}_i} - \dot{p}_i \, dq_i - \cancel{p_i \, d\dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

$$\rightarrow \quad dH = \dot{q}_i \, dp_i - \dot{p}_i \, dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \qquad (1)$$

از طرف دیگر دیفرانسیل همیلتونی می‌تواند به صورت زیر نیز نوشته شود.

$$H = H(q_i, p_i) \rightarrow \quad dH = \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \qquad (2)$$

با برابر قرار دادن (۱),(۲) ، $2n+1$ معادلات canonical equation of Hamilton

ترم کانونی اولین بار توسط C. G. J. Jacobi (1837) مطرح شد در مقاله Comptes rendus de l'Académie des Sciences de Paris, 5, p. 61 (1837)

$$(a) \begin{cases} \dot{q}_i = \dfrac{\partial H}{\partial p_i} \\ -\dot{p}_i = \dfrac{\partial H}{\partial q_i} \\ -\dfrac{\partial L}{\partial t} = \dfrac{\partial H}{\partial t} \end{cases}$$

روابط (a) معکوس تعریف تکانه p_i است (اطلاعات جدیدی ندارد)

این در صورتی است که از لاگرانژی شروع کرده باشید، در صورتی که از تکانه همیلتونی آغاز کنید

دو دسته معادلات مستقل هستند

□ معادلات همیلتون به شکل symplectic

The term symplectic comes from the Greek for "intertwined" particularly appropriate for Hamilton's equations where $\dot{q}$ is matched with a derivative with respect to p and $\dot{p}$ similarly with negative of a q derivative.

H. Weyl first introduced the term in 1939 in his book "The Classical Groups"

برای سیستمی با n درجه آزادی لاگرانژی، یک ماتریس ستونی $2n\times 1$ تعریف به اسم $\vec{\eta}$ درست می‌کنیم که

$$\eta_i = q_i \,,\quad \eta_{i+n} = p_i \qquad \eta = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_n \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix}$$

$i \leq n$

$$,\quad \left(\frac{\partial H}{\partial \eta}\right)_i = \frac{\partial H}{\partial q_i} \;;\quad \left(\frac{\partial H}{\partial \eta}\right)_{i+n} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

حال ماتریس J، $2n\times 2n$ را تعریف می‌کنیم که از چهار ماتریس $n\times n$: صفر، یکانی شکل گرفته

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\underset{\text{transpose}}{J^T} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = -J = \underset{\text{ماتریس معکوس}}{J^{-1}}$$

$$J^T J = J J^T = \mathbb{1} \quad \& \quad J^2 = -1 \quad \& \quad \det J = +1$$

حال معادلات همیلتون را می‌توان به شکل زیر نوشت.

$$\dot{\eta} = J \frac{\partial H}{\partial \eta}$$

برای لاگرانژی با دو درجه آزادی خواهیم داشت.

$$\begin{bmatrix} \dot q_1 \\ \dot q_2 \\ \dot p_1 \\ \dot p_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\dot p_1 \\ -\dot p_2 \\ \dot q_1 \\ \dot q_2 \end{bmatrix}$$

پس نمایش فوق موسوم به نمایش معادلات همیلتون به شکل ماتریسی یا Symplectic است.

□ رهیافت "Symplectic" به تبدیلات کانونی "Canonical Transf."

پیش از بررسی تبدیلات کانونی به روش symplectic، ابتدا به تعریف تبدیل کانونی و توابع مولد می‌پردازیم.

یک مسئله مشخص در مکانیک همیلتونی وجود دارد که راه حل آن بسیار ساده است که همیلتونی ثابت حرکت باشد و تمام مختصه‌ها، مختصه چرخشی باشد.

در این صورت $\dot p_i = \frac{-\partial H}{\partial q_i} = 0 \to p_i = cte = \alpha_i$

$H = H(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \to$ در نتیجه معادله همیلتون $\dot q_i = \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} = w_i$

تابعی از α_i ها باشد و ثابت می‌باشد در نتیجه $q_i = w_i t + \beta_i$ (β_i ثابت انتگرال‌گیری است که با شرایط اولیه مشخص می‌شود)

سؤال مهم در مکانیک همیلتونی این است که مختصات تعمیم یافته‌ای را بیابیم که مختصه چرخه‌ای وجود داشته باشد تا معادلات حرکت را آسان‌تر حل کنیم.

در تبدیل مختصات (مثلا از دکارتی به قطبی) از تبدیل $Q_i = Q_i(q, t)$ استفاده می‌کنیم

که به این تبدیل نقطه‌ای point transformation می‌گویند

این تبدیل نقطه‌ای در فضای پیکربندی است "point transformation in configuration space"

از آن جایی که در مکانیک همیلتونی q_i و p_i کمیت‌های مستقل هستند، تبدیل مختصات باید شکل وسیع‌تری به خود بگیرد و شامل تکانه‌ها هم باشد.

$$Q_i = Q_i(q, p, t)$$

$$P_i = P_i(q, p, t)$$

در نتیجه مختصه جدید بر حسب مختصات تعمیم یافته و تکانه مربوط به آنها تعریف می‌شود

در این حالت تبدیل نقطه‌ای در فضای فاز می‌باشد "point transformation of phase space"

در مکانیک همیلتونی آن دسته از تبدیلات مد نظر می‌باشند که کانونی باشند (P , Q مختصه کانونی باشند)

این تبدیل یعنی این است که تابع K وجود داشته باشد $K = K(Q, P, t)$ به طوری که معادلات حرکت در مختصه جدید

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad , \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}$$

- K نقش همیلتونی را در مختصه جدید بازی می‌کند، این همیلتونی باید مستقل از نوع مسئله باشد.

در صورتی که Q و P مختصه کانونی باشند باید در اصل وردش به شکل زیر قرار بگیرند.

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (p_i \dot{q}_i - H(q, p, t))\, dt = 0 \qquad (1)$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t))\, dt = 0 \qquad (2)$$

اصل همیلتون جدید

کلی‌ترین حالتی که از برقراری دو رابطه (۱) و (۲) نتیجه می‌شود این است که

$$\lambda (p_i q_i - H) = P_i Q_i - K + \frac{dF}{dt}$$

- F هر تابعی از مختصه‌ها فضای فاز است، λ ثابتی است مستقل از مختصات تعمیم یافته و زمان

λ بستگی به نوع خاصی از تبدیلات در فضای فاز است که تبدیل مقیاس scale transform. معروف است.

8/

به طور مثال

$$Q_i' = \mu q_i \ , \quad P_i' = \nu p_i$$

$$K'(Q', P') = \mu\nu H(q, p)$$

و به طور واضح اشتراک اندازه که در اصل وردش وارد شده است

$$\mu\nu\left(p_i \dot{q}_i - H\right) = P_i' \dot{Q}_i' - K'$$

که در این صورت $\lambda = \mu\nu$ ، در نتیجه با استفاده از تبدیل مختصات مناسب ، همواره می‌توانیم تبدیلاتی را بنویسیم که $\lambda = 1$ در نتیجه

$$p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF}{dt}$$

$\lambda \neq 1$ Extended canonical transformation.

$\lambda = 1$ Canonical transformation.

در صورتی که

$Q_i = Q_i(q, p)$ Restricted Canonical transformation

$P_i = P_i(q, p)$ Does not depend on time, explicitly.

F is called "generating function" of transformation

F می‌تواند شکل دقیق تبدیلات کانونی را مشخص کند، در صورتی که به جز زمان، نصف متغیرهای آن به (q_i, p_i) و نصف دیگر آن به (Q_i, P_i) بستگی داشته باشد.

به طور مثال:

$$F = F_1(q, Q, t)$$

$$p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF_1}{dt}$$

جاگذاری در رابطه بالا

$$= P_i \dot{Q}_i - K + \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i$$

Q_i , q_i به طور جدا مستقلند

$$\begin{cases} p_i = \dfrac{\partial F_1}{\partial q_i} \\ P_i = -\dfrac{\partial F_1}{\partial Q_i} \end{cases} \rightarrow \boxed{K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}}$$

حال به بررسی روش دوم با استفاده از ماتریس symplectic برای بدست آوردن تبدیلات کانونی می‌پردازیم.

- شکل ساده‌ای از تبدیلات را در نظر گرفته‌ایم که بستگی به زمان ندارد.

$$* \begin{cases} Q_i = Q_i(q,p) \\ P_i = P_i(q,p) \end{cases}$$

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial Q_i}{\partial p_j}\dot{p}_j = \frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial Q_j}{\partial p_j}\cdot\frac{\partial H}{\partial q_j}$$

از طرف دیگر تحول معکوس روابط تبدیل * به صورت زیر است در این صورت مشتق همیلتونی H به P_i به صورت ذیل است:

$$q_j = q_j(Q,P)$$

$$p_j = p_j(Q,P)$$

$$\frac{\partial H}{\partial P_i} = \frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial p_j}{\partial P_i} + \frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial q_j}{\partial P_i}$$

$\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i}$ that is, the transformation is canonical if

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial Q_i}{\partial q_j}\right)_{q,p} = \left(\frac{\partial p_j}{\partial P_i}\right)_{Q,P} \quad \& \quad \left(\frac{\partial Q_i}{\partial p_j}\right)_{q,p} = -\left(\frac{\partial q_j}{\partial P_i}\right) \\ \left(\frac{\partial P_i}{\partial q_j}\right)_{q,p} = -\left(\frac{\partial p_j}{\partial Q_i}\right)_{Q,P} \;;\; \left(\frac{\partial P_i}{\partial p_j}\right)_{q,p} = \left(\frac{\partial q_j}{\partial Q_i}\right)_{Q,P} \end{cases}$$

به روابط فوق شرایط مستقیم برای تبدیل کانونی محدود شده می‌نامند.