# 相空间及相空间中的运动

为了理解 Lagrange 力学，我们发现引入一个描述体系位形的抽象空间是很有帮助的，我们把它称为位形空间中，它是由广义坐标所确定的。由于在位形空间体系的运动是完全自由的，你不再需要考虑任何的约束效应，因此所得到的动力学方程——Lagrange 方程——就是 Newton 方程在位形空间中的投影，其中约束力不再出现。但是，如果你在位形空间画出体系运动的轨迹，你并不能从中读出体系在任意位置处的状态，当然你也就不会知道体系在下一个时刻状态将如何变化。为了克服这一困难，我们在 Hamilton 力学中引入另一个抽象的空间，它以 $2s$ 个变量 $q_1,\cdots,q_s,p_1,\cdots,p_s$ 作为坐标，通常被称为相空间。

为简单起见，我们暂时假定 Hamilton 函数仅仅是 $q_i$ 与 $p_i$ 的函数，而不显含时间 $t$。$H(q,p)$ 在 $2s$ 维相空间中的每一点都有一个确定的值。这时候，Hamilton 函数 $H=\text{const.}$ 是正则变量必然满足的一个关系，而它就确定了 $2s$ 维相空间中的一个 $2s-1$ 维的子空间，一个超曲面。因此，在相空间中，体系就只能在这一超曲面上运动。

现在，设 $t=t_0$ 时力学体系的全部粒子的位置和动量作为初始条件（初始状态，就相当于在相空间中选取某一点，即所谓相点），那么下一时刻体系将有什么样的状态呢？根据正则方程，体系在下一时刻的状态由

$$\begin{aligned} q_i\left(t_0+\varepsilon\right)&=q_i\left(t_0\right)+\dot{q}_i\left(t_0\right)\varepsilon=q_i\left(t_0\right)+\frac{\partial H}{\partial p_i}\varepsilon \\ p_i\left(t_0+\varepsilon\right)&=p_i\left(t_0\right)+\dot{p}_i\left(t_0\right)\varepsilon=p_i\left(t_0\right)-\frac{\partial H}{\partial q_i}\varepsilon \end{aligned} \tag{1}$$

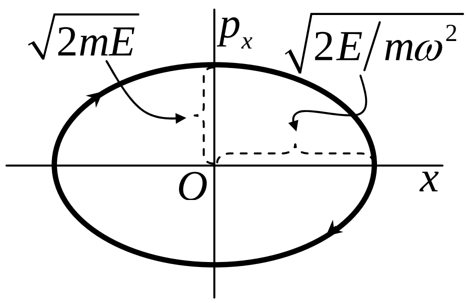
确定。其中第一个等号是运动学方程，它无非是讲体系的状态不同是因为它发生了变化；第二个等号才是关于动力学的，它告诉我们状态之所以变化，是因为 Hamilton 函数具有非零的“斜率”。此二式表示代表体系状态的点在相空间内的各个“方向”运动。再下一个时刻，也可类似的以 $t_0+\varepsilon$ 时刻的位置和动量作为

初条件得到，这样逐步做下去的话，就可以了解体系整体的运动，从而也就知道了代表其状态的相点在相空间中描绘出得整个的“曲线”(不妨将其称为体系在相空间中的轨道)。当然，这个轨道必然是在由$H=\text{const}.$所确定的超曲面上的。

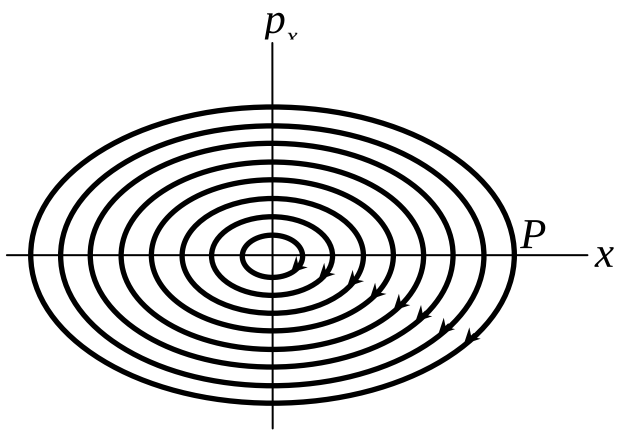
用例子来讨论最容易弄懂，所以我们来考虑一维谐振子（到二维以上，相空间变到四维以上，连图都无法画出，难于处理）。考虑一维谐振子，相空间是以$x$和$p_x$作为坐标的平面，而

$$H=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}=E=\text{const}. \tag{2}$$

所确定的超曲面就是一条曲线，而这也就是谐振子在相空间中的轨道，不难看出它是如图那样的椭圆。至于沿着那个椭圆运动那是由$E$的数值或者说初始条件确定的。




现在，我取$x(t_0)=x_0$，$p_x(t_0)=0$。在相空间中，相当于图那样从$x$轴上$P$点出发。设$x_0>0$，则下一时刻的状态由




$$\begin{aligned}x(t_0+\varepsilon)&=x(t_0)+\frac{p_x(t_0)}{m}\varepsilon\\&=x_0\\p_x(t_0+\varepsilon)&=p_x(t_0)-m\omega^2x(t_0)\varepsilon\\&=-m\omega^2x_0\varepsilon<0\end{aligned} \tag{3}$$

确定，所以代表体系的用$(x,p_x)$表示的点从$P$移动到下方。

再下一个时刻的状态为

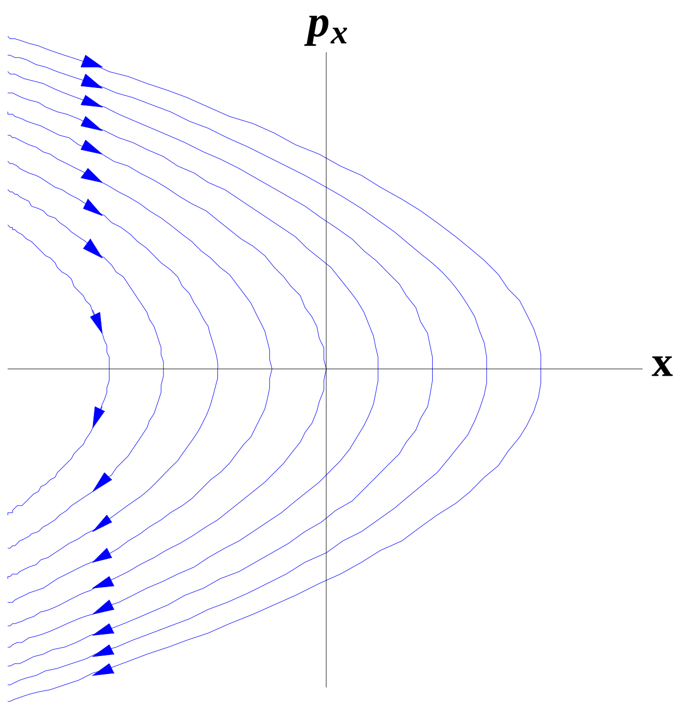
$$x(t_0+2\varepsilon)=x(t_0+\varepsilon)+\frac{p_x(t_0+\varepsilon)}{m}\varepsilon=x_0-\omega^2x_0\varepsilon^2$$
$$p_x(t_0+2\varepsilon)=p_x(t_0+\varepsilon)-m\omega^2x(t_0+\varepsilon)\varepsilon=-2m\omega^2x_0\varepsilon \tag{4}$$

表示在同样稍稍向下行进的同时，$x$ 减小了那么很小的一点点，前进路程弯向左下方。这样顺序走下去，就能得到沿着图的椭圆顺时针方向绕 $x-p_x$ 空间旋转的运动。

再举一个例子。在重力场中竖直抛起又竖直落下的粒子，其在相空间中的轨道是由

$$E=\frac{p_x^2}{2m}+mgx \tag{5}$$

所确定抛物线。与谐振子完全类似的，你可以发现粒子在这条抛物线上是从上到下运动的。




在 $H(q,p,t)$ 显含时间 $t$ 的情况，即使是相空间中的相同点，$H$ 以及 $\partial H/\partial p_i$ 和 $\partial H/\partial q_i$ 也将因 $t$ 而异，故即使从同一点出发，也会因何时出发的不同而使得路径不同，但是上面的考虑方法是相同的，只不过是要随着移向目的地各个时刻的 $\partial H/\partial p_i$ 和 $\partial H/\partial q_i$ 来确定下一步前进的道路。因此，若出发时刻与出发点确定了的话，以后的运动就没有选择的余地而单值地确定。

正如以后将会了解的那样，除去奇异点之外，在同一时刻通过相空间中一点的两条以上运动路径是不存在的，好像位形空间中通过其中各点各种各样的运动都是可能的，但是没有轨道交叉的情况。如果是一维谐振子，相空间是由无数充

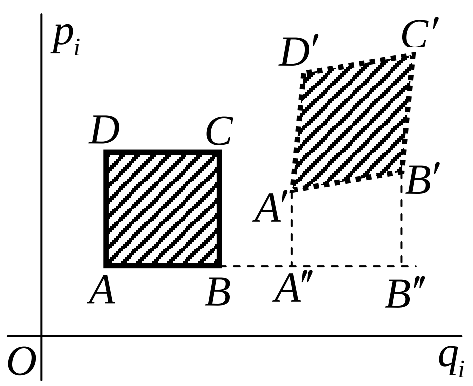
满着的同心椭圆（顺时针）构成的，它们互不相交。

在这样的意义下，使用 Hamilton 函数和相空间来讨论，易于把握运动的性质，这是与变量的数目由 $q_1,\cdots,q_s$ 这 $s$ 个加倍到包含 $p_1,\cdots,p_s$，但是方程变成了关于时间的一阶微分方程这一点有关的。Newton 和 Lagrange 方程是用 $q_i$ 的二阶导数来表示的，所以在初始条件当中需要位置和速度这两个量。为此，如在抛物线运动中，考虑从同一点抛掷物体的时候，由于给定出速度的方法不同而可能有五花八门的运动，然而用相空间 Hamilton 方法，则仅由出发点的“位置”就完全可以确定运动，由于初速度不同“位置”是不同的。这种优点在考察的统计力学对象中得到了充分的发挥。

如果体系自由度非常多，直接求解将变的不再现实，而且，对于复杂体系（例如气体），对体系中的每一个粒子确定其初始条件实际上都是不可能的。由于无法把相空中的点与在给定时刻体系真实的状态联系起来，我们就必须寻找别的方法来研究复杂体系的动力学，这个方法就是统计力学的方法。Hamilton 方法对于复杂体系的统计研究是一个合适的工具。我将通过一个定理的证明对此作部分的说明。

对于大量粒子组成的体系，如气体，我们无法用相空间中的特定点来代表体系。但是我们可以用大量点的集合填充相空间，每一个点代表体系的一个可能状态。也就是说，我们想象大量数目的体系，每一个体系都包含相同数目的粒子并满足相同的约束条件，因此任何一个这样的体系都可能是真实的体系。由于我们无法讨论真实体系中粒子运动的细节，因此我们对等价体系的一个集合（所谓系统）加以讨论。相空间中的每一个代表点对应于该系统中的一个单独体系，每一个特定点的运动表示相应体系的独立运动。

现在来研究相空间中的一个如 $ABCD$ 那样的面积元（暂时假设体系只有一个自由度），在很短的时间 $\varepsilon$ 后，它移动到 $A'B'C'D'$。设 $A$ 点的“位置”为 $(q_A, p_A)$，$AB=dq$，$AD=dp$，经



过时间$\varepsilon$后$A$移动到$A'$，根据(1)有

$$q_{A'}=q_A+\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_A\varepsilon \tag{6}$$

以及

$$q_{B'}=q_B+\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_B\varepsilon=q_A+dq+\left[\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_A+\left(\frac{\partial^2 H}{\partial q\partial p}\right)_A dq\right]\varepsilon \tag{7}$$

这里我用到$q_B=q_A+dq$、$p_B=p_A$。因此，在$\varepsilon$时间之后底边的水平长度变为

$$q_{B'}-q_{A'}=\left[1+\left(\frac{\partial^2 H}{\partial q\partial p}\right)_A\varepsilon\right]dq \tag{8}$$

类似地你可以得到上下方向的长度变为

$$p_{D'}-p_{A'}=\left[1+\left(\frac{\partial^2 H}{\partial q\partial p}\right)_A\varepsilon\right]dp \tag{9}$$

如果$\varepsilon$极短（也就是说$\varepsilon$取无穷小量）的话，可以认为$A'B'$与$q_i$轴以及$A'D'$与$p_i$轴形成的角度都是很小的 ($\cos\delta\approx 1$)，所以只保留的一阶小量的话

$$\begin{aligned}A'B'C'D'\text{的面积}&=\left(1+\frac{\partial^2 H}{\partial q\partial p}\varepsilon\right)dq\cdot\left(1-\frac{\partial^2 H}{\partial q\partial p}\varepsilon\right)dp\\&=dqdp=ABCD\text{的面积}\end{aligned} \tag{10}$$

你可以把前面的讨论直接推广到有任意自由度$s$的情形，这时面积变为了$2s$为相空间中的体积。在相空间内取有限的体积，其中的各点在有限的时间中进行的运动也是将这样的微小部分的集合所进行的运动对时间积分而得到的，所以

**在所考虑的相空间有限区域内的各点按照正则方程**

**进行运动时，该区域的形状变化，但体积保持不变。**

将其称为 Liouville 定理。通常我们把相空间中的体积记为

$$\Gamma = \int dq_1 \cdots dq_s dp_1 \cdots dp_s \tag{11}$$

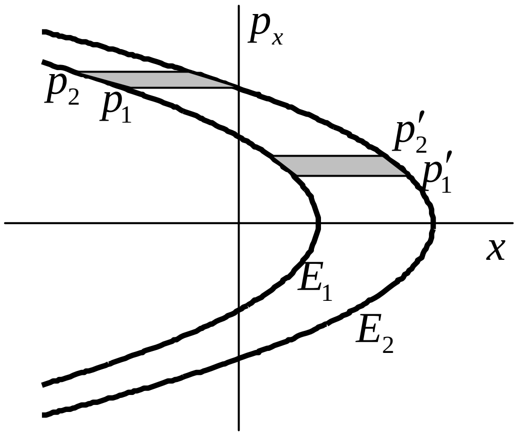
因此上面的定理就可以写为$\Gamma = \Gamma'$。Liouville 定理是构成统计力学重要基础的定理。

举个例子。重力场中质量为$m$的粒子组成的体系。真实的运动沿着能量取常数的曲线

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + mgx \tag{12}$$

进行。轨道是抛物线

$$p_x = \sqrt{2m\left(E - mgx\right)} \tag{13}$$




这里能量作为一个参数。我们考虑时刻动量位于 $p_1 \le p_x \le p_2$ 、能量位于$E_1 \le E \le E_2$范围（水平条带）内的大量粒子，它们在相空间中占据的面积为$\Gamma$。在某个时刻$t$占据的面积为$\Gamma'$。这时动量为

$$p_x' = p_x - mgt \tag{14}$$

因此$\Gamma'$是限制在$p_1 - mgt \le p_x' \le p_2 - mgt$之间的抛物线的面积（仍然是水平条带）。利用(11)有

$$x = \frac{E - p_x^2/2m}{mg} \tag{15}$$

容易计算面积

$$\Gamma = \int_{p_1}^{p_2} dp_x \int_{\frac{E_1 - p_x^2/2m}{mg}}^{\frac{E_2 - p_x^2/2m}{mg}} dx = \frac{E_2 - E_1}{mg}\int_{p_1}^{p_2} dp_x = \frac{\left(E_2 - E_1\right)\left(p_2 - p_1\right)}{mg} \tag{16}$$

类似的

$$\Gamma' = \frac{\left(E_2 - E_1\right)\left(p_2' - p_1'\right)}{mg} = \Gamma \tag{17}$$

这正是 Liouville 定理。

前面我们看到，体系运动时代表体系状态的相点在相空间中划出了一条曲线，当然，你可以想象体系从这里到那里是通过不同途径到达的。在位形空间中我们知道体系真实的运动是沿着作用量取最小值的那条路线进行的，那么，在相空间中，我们是否也有可能通过申明某个量取极值从而得到正确的运动呢？答案是肯定的。由于想象路线可能是相空间中的任意一条曲线，因此不仅仅广义坐标 $q_i$ 可以随意变化，而且广义动量 $p_i$ 也可以随意变化。也就是说，它们都可以独立的改变（虚的）。这跟位形空间中想象路线满足 $\delta\dot{x} = d\left(\delta x\right)/dt$ 是很不一样的。当然，我们还要求在端点处 $q_i$ 和 $p_i$ 的变分都为零。那么，对于相空间中的真实路线来说，究竟什么东西取最小值（确切地说变分等于零）呢？这个东西仍然是作用量，只是我们应该将被积分的 Lagrange 函数 Legendre 变换将它表示为正则变量及其微商的函数，这个原理就称为相空间中的 Hamilton 原理：

$$\begin{gathered}\delta S = \delta\int_{t_1}^{t_2}\left[\dot{q}_i p_i - H\left(q,p,t\right)\right]dt = 0 \\ \delta q_i\left(t_1\right) = \delta q_i\left(t_2\right) = 0 \quad \text{and} \quad \delta p_i\left(t_1\right) = \delta p_i\left(t_2\right) = 0\end{gathered} \tag{18}$$

利用已经熟悉的变分规则，我们得到

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2}\left(\dot{q}_i\delta p_i + p_i\delta\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\delta p_i\right)dt \tag{19}$$

利用 $\delta\dot{q}_i = \dfrac{d}{dt}\delta q_i$ 对第二项作分部积分

$$\int_{t_1}^{t_2}\left[\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i}\right)\delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\right)\delta q_i\right]dt = 0 \tag{20}$$

这里我没有写出端点项 $p_i\delta q_i\Big|_{t_1}^{t_2}$，因为 $\delta q_i\left(t_1\right) = \delta q_i\left(t_2\right) = 0$，它实际上是等于零的。由于 $\delta q_1,\cdots,\delta q_s,\delta p_1,\cdots,\delta p_s$ 是全部独立而取的任意微小变化，所以为了使上式成立，每一个变分前的系数必须为零，因此，我们就得到了正则

方程：

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (i = 1, 2, \cdots, s) \tag{21}$$

因此我们看到，相空间中的 Hamilton 原理为我们提供了另一种对运动的理解，一种整体的思想，这种理解与正则方程是等价的。

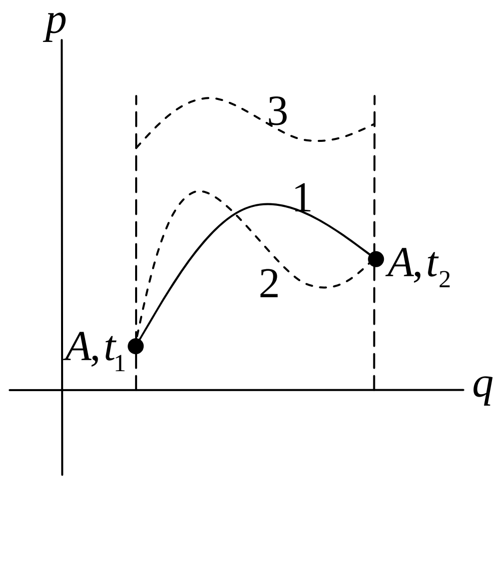
我想就这个原理说明两点。首先，在这个变分原理当中，我们的想象路线是任意的，也就是说，$q_i$ 和 $p_i$ 都可以独立的改变，那么这里会不会出现问题呢？譬如对于一维抛物体的例子

$$H(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + mgx \tag{22}$$

对于真实路线，其运动满足 $H(x, p_x) = E$，我们不妨假设假想路线由

$$\begin{aligned} \overline{x} &= x(t) + \xi(t) = x_0 + v_0 t - \frac{1}{2} g t^2 + \xi(t) \\ \overline{p}_x &= p_x(t) + m\eta(t) = m\left[v_0 - gt + \eta(t)\right] \end{aligned} \tag{23}$$

所确定。如果 $x$ 和 $p_x$ 都可以随意变化，也就是说，如果 $\xi(t)$ 和 $\eta(t)$ 都可以是任意函数的话（当然应该要求它们在端点处为零），那么你就可能提出如下疑问：这样一来，在相空中想象路线从出发点到达目的地的时间就很可能会不同于真实路线的，因为它们的平均速度 $\langle p_x \rangle / m$ 和 $\langle \overline{p}_x \rangle / m$ 一般来说是不同的。这是一个有趣的问题，不过对这个问题的回答是很简单的：对于真实路线来说，其运动满足 Hamilton 方程，从而 $p_x = m\dot{x}$；但是对于想象路线来说，$\overline{p}_x = m\dot{\overline{x}}$ 一般是不成立的，因为 $\overline{x}$ 和 $\overline{p}_x$ 并不满足 Hamilton 方程，而这不正是相空间中的 Hamilton 原理所表达的含义吗？




其次，你会发现，在前面我们的推导过程当中事实上并没有用到“$\delta p$ 在端点

处等于零”这个条件，也就是说，真实路线（图中曲线 1）的作用量不仅仅对于相空间中有相同端点的路线（如曲线 2）是取极值，而且与那些端点处 $q$ 相同，而广义动量 $p$ 不同的路线（如曲线 3）相比较，作用量也是取极值的。但是，保留“$\delta p$ 在端点处等于零”这个条件是有好处的，这样一来，在被积项中我们就可以附加某个正则变量以及时间函数的全微商项而不会影响整个的结论：

$$\dot{q}_i p_i - H(q,p,t) + \frac{dF(q,p,t)}{dt} \tag{24}$$

因为积分之后，这个附加项仅仅是贡献一个常数（端点项）：

$$F\left(q(t_2),p(t_2),t_2\right) - F\left(q(t_1),p(t_1),t_1\right) = \text{const.} \tag{25}$$

而这是不会改变极值点的位置的。这一点对于我们后面讨论正则变换会带来很大的方便。