# 1 Συνοπτικές σημειώσεις στο Χαμιλτονιανό φορμαλισμό

Ο Λαγκρανζιανός φορμαλισμός μας έδωσε τη δυνατότητα να μελετάμε φυσικά συστήματα (όχι μόνο μηχανικά) συμπυκνώνοντας με απλό τρόπο το πλήρες περιεχόμενο του εκάστοτε συστήματος σε μια συνάρτηση θέσεων, ταχυτήτων (ή και ακόμη υψηλότερων χρονικών παραγώγων) και ίσως του χρόνου. Η συνάρτηση αυτή, η Λαγκρανζιανή, μας οδηγεί, χωρίς τον σχεδιασμό και την ανάλυση δυνάμεων, σε αναλλοίωτες διαφορικές εξισώσεις (τις εξισώσεις Euler-Lagrange) η λύση των οποίων περιγράφει την εξέλιξη του συστήματος. Στο Λαγκρανζιανό φορμαλισμό οι θέσεις και οι ταχύτητες θεωρούνται ανεξάρτητες μεταβλητές και η σύνδεση αυτών επιτυγχάνεται μόνο μέσω των εξισώσεων Euler-Lagrange. Η δε εξέλιξη του συστήματος περιγράφεται ως μια διαδρομή αυτού στον θεσεογραφικό χώρο (configuration space) τον πολυδιάστατο χώρο των συντεταγμένων που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της θέσης του συστήματος. Οι συντεταγμένες αυτές δεν έχουν κατ' ανάγκη κοινές διαστάσεις: κάποιες μπορεί να είναι μήκη, άλλες γωνίες, άλλες οποιεσδήποτε παράμετροι.

Στον Χαμιλτονιανό φορμαλισμό εγκαταλείπουμε τον εποπτικό χώρο των θέσεων $\{q_1, q_2, \ldots, q_N\}$ και μεταβαίνουμε στο χώρο των φάσεων, όπου οι συντεταγμένες των θέσεων (ότι και αν είναι αυτές) συνοδεύονται από τα αντίστοιχα ζευγάρια τους, τις γενικευμένες ορμές $p_i = \partial L/\partial \dot{q}_i$. Οι $2N$ αυτές νέες συντεταγμένες $\{q_1, p_1, q_2, p_2, \ldots, q_N, p_N\}$ είναι ο νέος (πιο μεγάλης διάστασης) χώρος όπου αναπτύσσεται η εξέλιξη του φυσικού συστήματος και μόνο η γνώση αυτών των $2N$ συντεταγμένων του συστήματος ανά πάσα χρονική στιγμή θεωρείται πλήρης περιγραφή του συστήματος. Ο λόγος που φαίνεται ότι ζητάμε περισσότερα στον Χαμιλτονιανό φορμαλισμό οφείλεται στο ότι η δυναμική του συστήματος απαιτεί γνώση όλων των θέσεων και των ορμών σε μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή προκειμένου να μας δώσει την εξέλιξη του συστήματος. Αυτή η υπερβολή απαιτήσεων είναι όμως φαινομενική: και στον Λαγκρανζιανό φορμαλισμό, οι εξισώσεις Euler-Lagrange είναι (τουλάχιστον για τα μηχανικά συστήματα) δεύτερης τάξης και επομένως απαιτείται η γνώση και των αρχικών θέσεων και των αρχικών ταχυτήτων για να υπολογιστεί η εξέλιξη του συστήματος. Η διαφορά έγκειται στο ότι στον Χαμιλτονιανό φορμαλισμό οι απαιτήσεις ως προς την αρχική πληροφορία έχουν ενσωματωθεί στην ίδια τη δυναμική του συστήματος η οποία έχει τη μορφή πρωτοτάξιων εξισώσεων.

Ας δούμε πως επιτυγχάνεται η μετάβαση από τον Λαγκρανζιανό στον Χαμιλτονιανό φορμαλισμό. Έστω

$$L(q_1, \dot{q}_1, q_2, \dot{q}_2, \ldots, q_N, \dot{q}_N, t)$$

η Λαγκρανζιανή κάποιου φυσικού συστήματος. Κατασκευάζουμε τώρα τον μετασχηματισμό Legendre αυτής

$$H(q_1, p_1, q_2, p_2 \ldots, q_N, p_N, t) = \sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i p_i - L \,, \tag{1}$$

εννοώντας όμως κάτι πιο "ψαγμένο" από αυτή την αντιφατική, σε πρώτη ανάγνωση, έκφραση.[1] Κατ' αρχάς θα απορρίψουμε στη συνέχεια το σύμβολο της άθροισης θεωρώντας ότι η αθροιστική σύμβαση το υπονοεί. Τώρα στο ερώτημα του ποιες είναι οι πραγματικά ανεξάρτητες μεταβλητές στην

[1] Στην έκφραση αυτή ποιες είναι αλήθεια οι ανεξάρτητες ματαβλητές; Είναι δυνατό να θεωρούμε την $H$ συνάρτηση θέσεων και ορμών αλλά να γράφουμε στο δεξί μέλος και ταχύτητες;

παραπάνω κατασκευή, θα θεωρήσουμε ότι και το αριστερό και το δεξιό μέλος της εξίσωσης πρέπει να θεωρηθούν ως συναρτήσεις μόνο των συντεταγμένων του χώρου των φάσεων, δηλαδή θέσεων και ορμών (και ίσως του χρόνου). Για το λόγο αυτό οι ταχύτητες $\dot{q}_i$ θα πρέπει να εκληφθούν ως συναρτήσεις των θέσεων και των ορμών.[2] Η σύνδεση αυτή επιτυγχάνεται μέσω αντιστροφής των σχέσεων που ορίζουν τις ορμές στο Λαγκρανζιανό φορμαλισμό:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i(q_1, \dot{q}_1, q_2, \dot{q}_2, \ldots, q_N, \dot{q}_N, t)\ . \tag{2}$$

Στην έκφραση αυτή, η συναρτησιακή σχέση που αναγράφεται είναι ορθή αφού η ίδια η Λαγκρανζιανή που παραγωγίστηκε ως προς μια από τις μεταβλητές της είναι συνάρτηση όλων αυτών των ανεξάρτητων μεταβλητών. Η αιτούμενη αντιστροφή

$$\dot{q}_j = F_j(q_1, p_1, q_2, p_2 \ldots, q_N, p_N, t)$$

βασίζεται στο γεγονός ότι το σύστημα των $N$ εξισώσεων (2) μπορεί όντως να αντιστραφεί και να ξαναγραφεί ως ένα νέο σύστημα γραφής των ταχυτήτων ως συναρτήσεις θέσεων, ορμών και χρόνου.

Ας δούμε ένα παράδειγμα. Έστω

$$L = \dot{q}_1^2 + q_2\dot{q}_1 + e^{(\dot{q}_2^2 + q_1 + t)} - f(q_1, q_2, t)$$

Τότε

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = \dot{q}_1 + q_2\ , \\ p_2 &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2} = 2\dot{q}_2 e^{(\dot{q}_2^2 + q_1 + t)}\ . \end{aligned}$$

Το σύστημα αυτό μπορεί να αντιστραφεί ως προς τις ταχύτητες και να δώσει

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= p_1 - q_2\ , \\ \dot{q}_2 &= g\left(p_2 e^{-(q_1 + t)}\right)\ , \end{aligned}$$

όπου $g(y)$ η αντίστροφη της μονότονης συνάρτησης $y(x) = 2xe^{x^2}$, δηλαδή η $g$ ικανοποιεί την ταυτότητα $y = 2g(y)e^{(g(y))^2}$. Το μόνο που απαιτήθηκε γι' αυτήν την κάπως στριφνή αντιστροφή[α΄] είναι κάποια κατάλληλη μονοτονία της αρχικής συνάρτησης την οποία θα θεωρήσουμε δεδομένη.

[α΄] Στα φυσικά συστήματα με τα οποία θα ασχοληθούμε δεν θα είναι διόλου απαιτητική η αντιστροφή.

[2] Προσέξτε ότι οι ταχύτητες στην έκφραση για τη Χαμιλτονιανή υπάρχουν και στον πρώτο όρο τον $\dot{q}_i p_i$ αλλά και μέσα στη Λαγκρανζιανή.

Διαθέτοντας πλέον εκφράσεις για όλες τις ταχύτητες μέσω αντιστροφών των σχέσεων για τις ορμές μπορούμε να ξαναδιαβάσουμε την έκφραση για τη Χαμιλτονιανή $H$ ως

$$\begin{aligned}&H(q_1, p_1, q_2, p_2 \ldots, q_N, p_N, t) = \\ &= F_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)p_i - L\left[q_1, F_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), q_2, F_2(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), \ldots, q_N, F_N(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), t\right] \ .\end{aligned} \tag{3}$$

όπου τα $\mathbf{q}$, $\mathbf{p}$ είναι απλώς συντομογραφία για όλες τις συντεταγμένες του χώρου των φάσεων $q_1, p_1, q_2, p_2, \ldots, q_n, p_n$. Θα πρέπει στο σημείο αυτό να προσέξουμε ότι η Λαγκρανζιανή παραμένει συνάρτηση όλων αυτών των συντεταγμένων $q_1, F_1, \ldots$ μερικές εκ των οποίων όμως (οι $F_i$) παρουσιάζονται ως συναρτήσεις άλλων συντεταγμένων: των ήδη γνωστών και χρησιμοποιούμενων $q_i$ και των νέων $p_i$. Έτσι αν θέλουμε να παραγωγίσουμε την Χαμιλτονιανή ως προς κάποια συντεταγμένη θέσης, η αντίστοιχη εξάρτηση θα πρέπει να αναζητηθεί άμεσα στην απευθείας εξάρτηση της έκφρασης από την εν λόγω συντεταγμένη (π.χ. την συναρτησιακή εξάρτηση της $L$ και των διαφόρων $F_i$ εκτός της Λαγκρανζιανής από την $q_1$) καθώς και στην έμμεση εξάρτηση από την $q_1$ των διαφόρων $F_i$ που εμφανίζονται στη συναρτησιακή σχέση της $L$ από τις ταχύτητες.

Έτσι αν εκτελέσουμε την παραγώγιση της $H$ ως προς τη συντεταγμένη θέσης $x_k$ θα έχουμε

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = p_i \left.\frac{\partial F_i}{\partial q_k}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, p_j \\ \forall j}} - \left.\frac{\partial L}{\partial q_k}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, \dot{q}_j \\ \forall j}} - \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, \dot{q}_j \\ \forall j}} \times \left.\frac{\partial F_j}{\partial q_k}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, p_j \\ \forall j}} \ . \tag{4}$$

Στις παραπάνω παραγωγίσεις οι ποσότητες $F_i$ και $\dot{q}_i$ είναι ταυτόσημες και απλώς γράφτηκαν διαφορετικά προκειμένου να είναι πιο καθαρή η εξάρτηση της κάθε ταχύτητας από τις θέσεις και τις ορμές μέσω της αντιστροφής που συζητήσαμε παραπάνω. Οι δε ποσότητες που κρατιούνται σταθερές στις παραπάνω παραγωγίσεις σχετίζονται με το ποια ποσότητα παραγωγίζουμε. Έτσι όταν παραγωγίζουμε την $L$ πρέπει να κρατάμε σταθερές θέσεις και ταχύτητες, ενώ όταν παραγωγίζουμε κάποια ταχύτητα $F_i$ πρέπει να κρατάμε σταθερές κάποιες θέσεις και ορμές. Το σύμβολο $\forall j$ έχει να κάνει με όλες τις τιμές δεικτών των παραπάνω θέσεων/ταχυτήτων/ορμών εκτός από εκείνη της συγκεκριμένης θέσης $q_k$. Τέλος να συμπληρώσουμε ότι ισχύει στην έκφραση αυτή η αθροιστική σύμβαση για το ζευγάρι $i$ στον 1ο όρο και το το ζευγάρι $j$ στο γινόμενο του τελευταίου (3ου) όρου.

Δεν πρέπει όμως να ξεχνάμε ότι στον Λαγκρανζιανό φορμαλισμό είναι

$$p_j = \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, \dot{q}_j \\ \forall j}} \ ,$$

οπότε ο 1ος και ο 3ος όρος είναι ίδιοι και αλληλοαναιρούνται:

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial q_k} &= \cancel{\left(p_j - \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, \dot{q}_j \\ \forall j}}\right)} \times \left.\frac{\partial F_j}{\partial q_k}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, p_j \\ \forall j}} - \left.\frac{\partial L}{\partial q_k}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, \dot{q}_j \\ \forall j}} \\ &= -\left.\frac{\partial L}{\partial q_k}\right|_{\substack{q_{j\neq k}, \dot{q}_j \\ \forall j}}\end{aligned}$$

και ο όρος που απομένει, σύμφωνα με τις εξισώσεις Euler-Lagrange δεν είναι άλλος από τη γενικευμένη δύναμη

$$\frac{\partial L}{\partial q x_k} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) = \dot{p}_k \ .$$

Έτσι καταλήξαμε ότι

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = -\dot{p}_k \ . \tag{5}$$

Αντίστοιχα αν παραγωγίσουμε τη Χαμιλτονιανή ως προς κάποια από τις ορμές θα λάβουμε

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = F_k + p_i \left.\frac{\partial F_i}{\partial p_k}\right|_{\substack{q_j, p_{j\neq k} \\ \forall j}} - \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right|_{\substack{q_j, \dot{q}_{j\neq k} \\ \forall j}} \times \left.\frac{\partial F_j}{\partial p_k}\right|_{\substack{q_j, p_{j\neq k} \\ \forall j}} \ . \tag{6}$$

Όπως και πριν όμως αναγνωρίζουμε στον όρο $\partial L/\partial \dot{q}_j$ την ορμή $p_j$, όποτε στην προηγούμενη έκφραση αλληλοαναιρούνται ο 2ος και ο 3ος όρος:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p_k} &= F_k + \cancel{\left(p_j - \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right|_{\substack{q_j, \dot{q}_{j\neq k} \\ \forall j}}\right)} \times \left.\frac{\partial F_j}{\partial p_k}\right|_{\substack{q_j, p_{j\neq k} \\ \forall j}} \ ,^3 \\ &= F_k = \dot{q}_k \ . \end{aligned} \tag{7}$$

Οι εκφράσεις (5,7) αποτελούν ένα σύστημα πρωτοτάξιων εξισώσεων που φέρουν την ονομασία εξισώσεις Hamilton. Με βάση αυτές και προφανώς τη γνώση της ίδιας της Χαμιλτονιανής συνάρτησης μπορούμε να υπολογίσουμε την εξέλιξη του συστήματος στο χώρο των φάσεων. Το σύστημα των εξισώσεων

$$\begin{aligned} \dot{q}_k &= \frac{\partial H}{\partial p_k} \\ \dot{p}_k &= -\frac{\partial H}{\partial q_k} \end{aligned}$$

μπορεί να ειδωθεί ως μια ταχύτητα στο χώρο των φάσεων, πλήρως καθορισμένη σε κάθε θέση μέσα σε αυτόν. Πρόκειται για ένα πεδίο ταχυτήτων στο χώρο των φάσεων που καθορίζει πλήρως την εξέλιξη του φυσικού συστήματος.

[3] Η αλλαγή της ονομασίας δείκτη σε ζεύγος εικονικών δεικτών, για τους οποίους είναι σε ισχύ η αθροιστική σύμβαση, είναι επιτρεπτή.

Ας δούμε ένα γνωστό μας παράδειγμα. Έστω η Λαγκρανζιανή του μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2 \, .$$

Προκειμένου να κατασκευάσουμε τη Χαμιλτονιανή πρέπει πρώτα να αντιστρέψουμε τη σχέση ορμών-ταχυτήτων:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \Rightarrow \dot{x} = p/m \, .$$

Στη συνέχεια θα οικοδομήσουμε τη Χαμιλτονιανή ακολουθώντας την ανωτέρω (3) φόρμουλα:

$$\begin{aligned} H &= \dot{x}p - L \\ &= \frac{p}{m}p - \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{p}{m}\right)^2 - \frac{1}{2}kx^2\right] \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \, . \end{aligned}$$

Οι εξισώσεις Hamilton θα δώσουν τότε

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} = p/m \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx \, . \end{aligned}$$

Ολοκληρώνοντας το σύστημα αυτό των εξισώσεων οδηγούμαστε στη διαγραφή της γνωστής έλλειψης στο χώρο ων φάσεων με ημιάξονες $\sqrt{2H/k}, \sqrt{2Hm}$. Η κάθε έλλειψη χαρακτηρίζεται από μια συγκεκριμένη τιμή της $H$ που δεν είναι άλλο παρά η ενέργεια του ταλαντωτή.

Τα πλεονεκτήματα του Χαμιλτονιανού φορμαλισμού είναι τα ακόλουθα:

1. Όντας πρωτοτάξιες, οι εξισώσεις του Χάμιλτον είναι πιο εύκολα ολοκληρώσιμες, γεγονός το οποίο βοηθά και στην αριθμητική (μέσω υπολογιστών) ολοκλήρωσή τους.

2. Υπάρχουν κάποιες ιδιότητες κατά την εξέλιξη ενός συστήματος στο χώρο των φάσεων, όπως για παράδειγμα το γεγονός ότι κάποιο χωρίο, καθώς εξελίσσεται, διατηρεί αναλλοίωτο τον όγκο του (θεώρημα Liouville). Αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να ελεγχθεί η ακρίβεια των αριθμητικών προσομοιώσεων.

3. Δεδομένου ότι η εξέλιξη ενός συστήματος στο χώρο των φάσεων ακολουθεί κάποια εγγενή ροή αυτού, η Χαμιλτονιανή διατηρείται κατά μήκος της ροής (στις χρονοανεξάρτητες Χαμιλτονιανές). Η δε ροή είναι αυτή ενός ασυμπίεστου ρευστού.

4. Όπως υπάρχει ελευθερία στην κατασκευή της Λαγκρανζιανής (δεν ορίζεται απόλυτα αυτή για ένα φυσικό σύστημα) έτσι υπάρχουν μετασχηματισμοί συντεταγμένων του χώρου των φάσεων

(*κανονικοί μετασχηματισμοί*) που αλλάζουν τη συναρτησιακή μορφή μιας Χαμιλτονιανής, εξακολουθώντας να περιγράφουν το ίδιο φυσικό σύστημα. Οι εξισώσεις Hamilton, για τη νέα Χαμιλτονιανή έκφραση, εξακολουθούν να περιγράφουν τη δυναμική του συστήματος στις νέες συντεταγμένες. Σε κάποιες περιπτώσεις η νέα Χαμιλτονιανή μπορεί να είναι πιο απλή.

5. Η Χαμιλτονιανή ως φυσική ποσότητα έχει κεντρικό ρόλο στην κβαντομηχανική καθώς αυτή διέπει (ως τελεστής πλέον[4]) τη χρονοεξέλιξη της κυματοσυνάρτησης που περιγράφει την κατάσταση ενός φυσικού συστήματος.

[4]Όπως και όλες οι φυσικές ποσότητες στην κβαντομηχανική.