arXiv:2303.12746v1 [physics.class-ph] 22 Mar 2023

时变哈密顿系统的不变量

J¨urgen Struckmeier 和 Claus Riedel[¶]重离子研究学会（GSI），普朗克大街1号，64291 达姆施塔特，德国（日期：2000年9月21日收到，2001年7月17日发表）

本文为具有一般含时势的 n 自由度哈密顿系统推导出一个精确不变量。我们采用两种等价的方法求得该不变量。第一种方法中，我们为不变量定义一种特殊的试探形式，并确定其时变系数。第二种方法中，我们对初始的时变哈密顿量进行两步正则变换，将其转化为时不变哈密顿量。结果发现，该不变量包含一个时间函数 $f_2(t)$，它由一个线性三阶微分方程的解定义；该方程的系数一般取决于由系统时间演化决定、且已明确知晓的构形空间轨迹。我们证明，该不变量可解释为能量平衡方程对时间的积分。我们将结果应用于一维含时阻尼非线性振子，以及一个被限制在含时二次外势中的库仑相互作用粒子三维系统。最后，我们说明，所得结果可用于评估时变哈密顿系统数值模拟的准确性。

数字对象标识符：
10.1103/PhysRevE.64.026503

物理学与天文学分类体系编号：物理学与天文学分类体系编号：
41.85.-p, 45.50.Jf

I. 引言

为给定物理系统找出守恒量的解析方法，是哈密顿量理论领域的一项重要目标。对于自治系统这一特殊情形，哈密顿量不显含时间，因此可以立即找到一个守恒量：哈密顿量本身，此时它代表系统作为运动常量的总能量。遗憾的是，大多数真实物理系统的哈密顿量都显含时间，因此无法直接提供守恒量。

在拉格朗日形式的背景下，Noether 最早提出了识别显含时间系统守恒量的方法之一 [1]。Lutzky [2] 证明，一维含时谐振子 [3, 4]的著名不变量可由诺特定理直接推出。随后，Chattopadhyay [5] 将这项工作拓展到某些一维非线性系统，从该定理推导出不变量。

Leach [6] 采用另一种方法，求解显含时哈密顿系统的守恒量。他实施有限的时变正则变换，将时变阻尼谐振子的哈密顿量映射为一个与时间无关的哈密顿量。用旧坐标表示这个新哈密顿量，便可立即得到原系统中的一个不变量。

Lewis 和 Leach[7] 系统地发展了第三种求解含时经典哈密顿量精确不变量的方法，即直接采用正则动量不同幂次的 Ans¨atze。

本文将在第二节和第三节中证明，无论是采用关于正则动量的二次试探形式的直接方法，还是正则变换方法，都可以直接推广到具有一般时变势的 n 自由度哈密顿系统。在这两种情况下，得到的都是同一个不变量。该不变量包含一个未知的时间函数 $f_2(t)$，它由一个线性三阶微分方程的解给出，该方程称为辅助方程。一般而言，这个方程取决于系统的空间自由度。因此，辅助方程只能与运动方程结合起来求解。

根据时变哈密顿系统的能量平衡方程可知，不变量可以解释为系统随时间变化的能量含量与输入系统或从系统中移除的能量之和。

我们将在第 IV 节展示研究结果的两项应用。在第一个例子中，我们将求出阻尼非对称弹簧这一一维系统的不变量及其相关辅助方程。我们将证明，当非线性为零这一特殊情形下，该不变量与谐振子的结果一致。对于自治系统，我们还将证明，若辅助方程的一个解满足 $f_2(t) \neq \text{const}$，则会得到一个非平凡不变量，它与哈密顿量给出的不变量并存。

在第二个例子中，我们将考察一个更具挑战性的情形：由同种带 N 库仑相互作用粒子构成的三维系综，被约束在含时二次外势中。从相关辅助方程的形式可以明显看出，函数 $f_2(t)$代表了束流包络函数的一种推广。研究表明，函数$f_2(t)$可能会变得不稳定，这取决于外聚焦力的强度——这与包络函数 [8]的行为相似。

在第五节中，我们将指出，显含时哈密顿系统中不变量的存在，可用于评估此类系统数值模拟的精度。类似于自治系统中可将哈密顿量的实际守恒作为精度判据，我们可以在显含时

系统的模拟中，检查数值求得的不变量与理想情况下的精确不变量相差多大。

II. 试探函数法

我们考虑由同种粒子组成的 n 自由度系统，这些粒子在显含时间的势 V 中运动，该系统可由如下形式的哈密顿量 H 描述:

$$H = \sum_{i=1}^{n} \frac{c(t)}{2} p_i^2 + V\big(\{x\}, t\big)\,. \tag{1}$$

其中， $c(t)$ 定义为任意二阶可微的时间函数，它结合了粒子的动能与速度依赖势，从而产生速度呈线性依赖的各向同性摩擦力。对于 $c(t) \equiv 1$，哈密顿量 (1) 因而描述无摩擦系统 [9]。花括号表示构型空间变量 n 的集合 $\{x\} = x_1,\ \ldots\ldots,\ x_n$。

由正则方程，我们为每个自由度 i 推导出运动方程:

$$\dot{x}_i = c(t)\, p_i\ , \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial V(\{x\}, t)}{\partial x_i}\,. \tag{2}$$

令 $\{p\} = p_1,\ \ldots\ldots,\ p_n$ 为正则动量的集合，则有一个量

$$I = I\left(\{x\}, \{p\}, t\right) \tag{3}$$

若某个量沿着表示系统时间演化的相空间轨迹，其全时间导数为零，则该量构成粒子运动的不变量。

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\partial I}{\partial x_i} \dot{x}_i + \frac{\partial I}{\partial p_i} \dot{p}_i \right] = 0\,.$$

我们考察对于由方程 (1) 描述的系统，是否存在守恒量 (3)，其中对 I 采用一种特殊的试探形式，使其至多为动量的二次函数

$$I = \sum_i \left[\tfrac{1}{2} f_2(t)\, p_i^2 + f_1(x_i, t)\, p_i \right] + f_0\big(\{x\}, t\big)\,. \tag{4}$$

使 I 成为不变量的函数组 $f_2(t)$、 $f_1(x_i, t)$ 和 $f_0(\{x\}, t)$ 有待确定。根据运动方程 (2)， $dI/dt = 0$ 明确表示为

$$\sum_i \left[\frac{1}{2} p_i^2 \frac{df_2}{dt} + p_i \frac{\partial f_1}{\partial t} + p_i^2 c \frac{\partial f_1}{\partial x_i} + p_i c \frac{\partial f_0}{\partial x_i} - \left(p_i f_2 + f_1\right) \frac{\partial V}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial f_0}{\partial t} = 0\,. \tag{5}$$

现在，我们逐步消去方程 (4) 中包含的函数 f_1 和 f_0。为此，可以按照方程 (5) 中各项关于动量 p_i 的幂次进行整理。对于每个指标 f_1，若对应各幂次的系数分别为零，则动量的各次幂对应的项便满足方程 (5)。因此，由与 p_i^2 成正比的项可得条件

$$\tfrac{1}{2} \dot{f}_2(t) + c(t)\, \frac{\partial f_1(x_i, t)}{\partial x_i} = 0\,.$$

由此可知， $f_1(x_i, t)$ 必须是关于 x_i 的线性函数

$$f_1(x_i, t) = -\frac{\dot{f}_2}{2c}\, x_i\,, \tag{6}$$

略去一个与构型空间变量无关的积分常数。

对于关于 p_i 的线性项，由方程导出的条件为 (5)

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = f_2(t)\, \frac{\partial V}{\partial x_i} - c(t)\, \frac{\partial f_0}{\partial x_i}\,. \tag{7}$$

另一方面， $\partial f_1/\partial t$ 是方程 (6) 对时间的偏导数

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = \left(\frac{\dot{f}_2 \dot{c}}{2c^2} - \frac{\ddot{f}_2}{2c} \right) x_i\,. \tag{8}$$

将式（8）代入式（7），并求解其中含有尚未知但任意的辅助函数 $f_0(\{x\}, t)$ 的偏导数的各项，可得到关于 f_0 的以下偏微分方程

$$\frac{\partial f_0}{\partial x_i} = \left(\frac{\ddot{f}_2}{2c^2} - \frac{\dot{f}_2 \dot{c}}{2c^3} \right) x_i + \frac{f_2}{c}\, \frac{\partial V}{\partial x_i}\,. \tag{9}$$

具有偏导数（9）的函数 $f_0(\{x\}, t)$ 显然可写为

$$f_0\big(\{x\}, t\big) = \left(\frac{\ddot{f}_2}{c^2} - \frac{\dot{f}_2 \dot{c}}{c^3} \right) \sum_i \tfrac{1}{4} x_i^2 + \frac{f_2}{c}\, V\big(\{x\}, t\big)\,. \tag{10}$$

式（5）的其余各项与动量 p_i 无关。因此，利用式（6）， I 成为粒子运动不变量的第三个条件可写为

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\dot{f}_2}{2c} \sum_i x_i\, \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0\,. \tag{11}$$

为了消去式（11）中包含的试探函数 f_0，我们计算式（10）的偏时间导数，即在固定 x_i 时对时间求导

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = \left(\frac{\dddot{f}_2}{c^2} - \frac{3\ddot{f}_2 \dot{c}}{c^3} - \frac{\dot{f}_2 \ddot{c}}{c^3} + \frac{3\dot{f}_2 \dot{c}^2}{c^4} \right) \sum_i \tfrac{1}{4} x_i^2 + \left(\frac{\dot{f}_2}{c} - \frac{f_2 \dot{c}}{c^2} \right) V + \frac{f_2}{c}\, \frac{\partial V}{\partial t}\,. \tag{12}$$

将式 (12) 代入式 (11)，最终得到一个关于 $f_2(t)$ 的齐次线性三阶微分方程，它仅依赖于构形空间变量

$$\left(\dot{f}_2\, c - f_2\, \dot{c}\right) V + f_2\, c\, \frac{\partial V}{\partial t} + \tfrac{1}{2} \dot{f}_2\, c \sum_i x_i \frac{\partial V}{\partial x_i} + \left(\dddot{f}_2 - \frac{3\ddot{f}_2\, \dot{c} + \dot{f}_2\, \ddot{c}}{c} + \frac{3\dot{f}_2\, \dot{c}^2}{c^2} \right) \sum_i \tfrac{1}{4} x_i^2 = 0\,. \tag{13}$$

将式 (6)、(10) 和哈密顿量 (1) 代入试探形式 (4)，最终即可得到不变量 I

$$I = \frac{f_2}{c} H - \frac{\dot{f}_2}{2c} \sum_i x_i\, p_i + \frac{\ddot{f}_2\, c - \dot{f}_2\, \dot{c}}{4c^3} \sum_i x_i^2 \,. \qquad (14)$$

回顾我们求解不变量（14）的方法，我们记得，运动方程（2）已代入方程（5）中关于 $dI/dt = 0$ 的表达式。这意味着，后续的方程（13）与方程（14）中的附加条件 $I =$ const 结合起来，可以视为关于势 $V(\{x\}, t)$ 的条件方程，而该势与运动方程（2）的一个解相一致。

反过来，我们也可以假设运动方程（2）已预先求解。此时，轨迹 $\{x(t)\}$、势 $V(\{x(t)\}, t)$ 及其偏导数构成方程（13）的已知系数，这些系数仅依赖于时间。这样理解时，方程（13）便是关于 $f_2(t)$ 的常微分方程。不变量（14）随即由方程（2）的解轨迹（$\{x(t)\}, \{p(t)\}$）以及作为方程（13）解函数的 $f_2(t)$ 得出。根据线性常微分方程的存在唯一性定理，方程（13）存在唯一解 $f_2(t)$，因此不变量 I 也随之存在——前提是 V 及其偏导数沿着 $\{x(t)\}$ 连续。

若 $f_2(t)$ 是方程（13）的解，我们可以直接证明，沿着运动方程（2）的解，$dI/dt = 0$ 成立。将方程（2）代入方程（14）的全时间导数后，我们发现所得方程与方程（13）一致。因此，当且仅当系统的演化由运动方程（2）支配时，方程（14）才提供一个守恒量，作为方程（13）的时间积分。我们将在第五节利用这一关系，估算由方程（2）描述的动力系统计算机模拟中的数值误差。

结合方程（13）的三阶方程，容易证明方程（14）中的不变量 $I =$ const 可推出运动方程（2）：将方程（13）代入方程（14）的全时间导数即可。由于 $dI/dt \equiv 0$ 必须对方程（13）的所有解 $f_2(t)$成立，因此分别与 $f_2(t)$、$f_2(t)$ 和 $f_2(t)\ddot{}$ 成比例的各项之和必须分别为零。对于与 $f_2(t)$ 成比例的项，这意味着

$$\frac{\ddot{f}_2}{2c^2} \sum_i x_i \big(\dot{x}_i - c(t)\, p_i\big) \equiv 0 \,. \qquad (15)$$

恒等式（15）必须对底层动力系统的所有初始条件（$\{x(0)\}$，$\{p(0)\}$）及其产生的相空间轨迹（$\{x(t)\}$，$\{p(t)\}$）成立。因此，括号中的表达式必须对每个指标 i 分别为零，从而得到运动方程（2）的第一个方程。对于 $dI/dt \equiv 0$ 的其余项，我们得到

$$\sum_i \left(f_2 p_i - \frac{1}{2c(t)} \dot{f}_2 x_i \right) \left(\dot{p}_i + \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) \equiv 0 \,.$$

与前一种情况类似，通常只有在第二个运动方程（2）成立时，对于方程（13）的任意解 $f_2(t)$ 及每个指标 i，我们才能满足该方程。

总而言之，我们可以这样表述：由运动方程（2）、三阶方程（13）以及方程（14）的不变量 $I =$ const构成的三者形成了一个逻辑三角形：任意给定其中两者，便可推导出第三者。

通过考察哈密顿量（1）的全时间导数，可以推导出不变量（14）的物理解释。利用正则方程（2），我们得到

$$\frac{d}{dt} \left[\sum_{i=1}^{n} \tfrac{1}{2} c(t)\, p_i^2 + V \right] - \sum_{i=1}^{n} \tfrac{1}{2} \dot{c}(t)\, p_i^2 - \frac{\partial V}{\partial t} = 0 \,, \quad (16)$$

这恰好是适用于哈密顿量（1）的一般定理 $dH/dt = \partial H/\partial t$ 的显式形式。方程（16）可解释为能量平衡关系，表明系统总能量的变化量 dH/dt 由耗散和外势的显式时间依赖性决定。将方程（16）乘以无量纲量f_2/c，并根据辅助方程（13）代入 $\partial V/\partial t$，所得各项之和为全时间导数

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{f_2}{c} H - \frac{\dot{f}_2}{2c} \sum_i x_i\, p_i + \frac{\ddot{f}_2\, c - \dot{f}_2\, \dot{c}}{4c^3} \sum_i x_i^2 \right] = 0 \,.$$

方括号中的表达式与不变量 (14) 一致。$\dot{}$ $\ddot{}$对于辅助方程 (13) 的初始条件 $f_2(0)/c(0) = 1, f_2(0) = f_2(0) = 0$，不变量 I 现在可解释为由哈密顿量 (1) 描述的非自治系统的守恒的初始能量 H_0，它包含系统的时变能量 H 以及输入系统或从系统中扣除的能量。

如果将哈密顿量 H 形式上视为一个自变量，那么根据不变量的表示式 (14)，$f_2(t)$ 的含义便显而易见：$I = I(\{x\}, \{p\}, t, H)$。此时，不变量 I 的全时间导数为零，可写为

$$\frac{dI}{dt} = \left.\frac{\partial I}{\partial t}\right|_{\{x\},\{p\},H} + \left.\frac{\partial H}{\partial t} \frac{\partial I}{\partial H}\right|_{\{x\},\{p\},t} + \sum_i \left(\dot{x}_i \left.\frac{\partial I}{\partial x_i}\right|_{\{p\},t,H} + \dot{p}_i \left.\frac{\partial I}{\partial p_i}\right|_{\{x\},t,H} \right) = 0 \,.$$

将正则方程 (2) 中的 x_i 和 p_i 代入，并再次利用辅助方程 (13) 消去.....三阶导数 $f_2(t)$，即可得到预期结果

$$\left.\frac{\partial I}{\partial H}\right|_{\{x\},\{p\},t} = \frac{f_2(t)}{c(t)} \,.$$

f_2/c 因此给出了总能量 I 相对于实际系统能量 H的斜率。

最后我们指出，对于特殊情形 $\dot{c} \equiv \partial V/\partial t \equiv 0$，即自治系统，$f_2(t) \equiv c \equiv 1$ 始终是方程（13）的解。对于这种情形，不变量（14）简化为 $I = H$，因此给出了系统的总能量；对于显式不依赖时间的哈密顿系统而言，这是一个已知的不变量。尽管如此，对于这些系统，方程（13）也存在解$f_2(t) \neq$ const。因此，我们得到了另一个非平凡不变量，它与代表能量守恒定律的不变量同时存在。我们将在第 IVA 节末尾的一个示例中对此加以说明。

III. 正则变换方法

这种方法旨在将哈密顿量（1）变换为一个~新的哈密顿量 H，使其不再显式依赖时间，从而将变换后的系统的总能量体现为一个运动常数。事实证明，这一过程分两步进行最为清晰。第一步，我们可以通过正则变换，将哈密顿量（1）变换到一组新的坐标$\{x\} \to \{\bar{x}\}$、$\{p\} \to \{\bar{p}\}$，从而得到一个中间哈密顿量¯ H。该变换的显含时间的生成函数可以用新的位置和旧的动量表示为

$$F_3\big(\{\bar{x}\},\{p\},t\big) = \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\dot{f}_2(t)}{4c(t)}\,\bar{x}_i^2 - \sqrt{f_2(t)}\,\bar{x}_i p_i\right]. \quad (17)$$

由（17）推导出的坐标变换规则为

$$x_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i} = \sqrt{f_2}\,\bar{x}_i$$
$$\bar{p}_i = -\frac{\partial F_3}{\partial \bar{x}_i} = \sqrt{f_2}\,p_i - \frac{\dot{f}_2}{2c}\bar{x}_i\,.$$

用矩阵表示法，这种保持相空间不变的线性变换写作

$$\begin{pmatrix} x_i \\ \\ p_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{f_2} & 0 \\ \\ \dot{f}_2/\big(2c\sqrt{f_2}\big) & 1/\sqrt{f_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{x}_i \\ \\ \bar{p}_i \end{pmatrix}. \quad (18)$$

用新的（带横线）坐标表示，生成函数（17）的偏时间导数为

$$\frac{\partial F_3}{\partial t} = \sum_i \left[\left(\frac{\ddot{f}_2}{c} - \frac{\dot{f}_2^2}{c f_2} - \frac{\dot{f}_2\dot{c}}{c^2}\right)\tfrac{1}{4}\bar{x}_i^2 - \frac{\dot{f}_2}{2f_2}\bar{x}_i\bar{p}_i\right]. \quad (19)$$

最后，将旧的哈密顿量 H 用新的¯坐标表示，可得变换后的哈密顿量 $H = H + \partial F_3/\partial t$:

$$\bar{H} = \frac{c(t)}{f_2(t)}\left[\sum_{i=1}^{n}\tfrac{1}{2}\bar{p}_i^2 + \bar{V}\big(\{\bar{x}\},t\big)\right] \quad (20)$$

¯变换后的系统中的势 V为

$$\bar{V}\big(\{\bar{x}\},t\big) = \left(\frac{f_2\ddot{f}_2}{c^2} - \frac{\dot{f}_2^2}{2c^2} - \frac{f_2\dot{f}_2\dot{c}}{c^3}\right)\sum_{i=1}^{n}\tfrac{1}{4}\bar{x}_i^2 + \frac{f_2}{c}\,V\Big(\Big\{\sqrt{f_2}\,\bar{x}\Big\},t\Big). \quad (21)$$

¯新势 V 由两个部分组成：一项与原势 V 相关，另一项是额外的二次势，用于描述由于将时间依赖的线性变换（18）应用到新的参考系而产生的线性惯性力。

到目前为止，生成函数（17）中包含的函数 $f_2 = f_2(t)$一直被定义为任意的正则

¯时间函数。现在我们要求势 $V(\{\bar{x}\},t)$（如方程（21）所定义）显式地不依赖于时间:

$$\frac{\partial\bar{V}(\{\bar{x}\},t)}{\partial t} \overset{!}{=} 0\,. \quad (22)$$

这意味着，现在对 $f_2(t)$ 进行了专门设计，使其恰好在 $\{\bar{x}\}$ 消去方程（ 21 ）的显式时间依赖性。若将原势 $V(\{x\},t)$ 用新的空间坐标表示，由此引入的显式时间依赖性为

$$\frac{\partial V}{\partial\big(\sqrt{f}_2\,\bar{x}_i\big)}\frac{\partial\big(\sqrt{f}_2\,\bar{x}_i\big)}{\partial t} = \frac{\dot{f}_2}{2f_2}\,x_i\frac{\partial V}{\partial x_i}\,. \quad (23)$$

具体而言，用旧的空间坐标表示，方程（22）结合方程（23）意味着

$$\frac{\partial\bar{V}}{\partial t} = \left(\frac{\dddot{f}_2}{c^2} - \frac{3\ddot{f}_2\,\dot{c} + \dot{f}_2\,\ddot{c}}{c^3} + \frac{3\dot{f}_2\,\dot{c}^2}{c^4}\right)\sum_i \tfrac{1}{4}x_i^2 + \left(\frac{\dot{f}_2}{c} - \frac{f_2\,\dot{c}}{c^2}\right)V + \frac{f_2}{c}\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{\dot{f}_2}{2c}\sum_i x_i\frac{\partial V}{\partial x_i} = 0\,. \quad (24)$$

我们注意到，方程（24）与第二节中得到的关于 $f_2(t)$ 的线性微分方程（13）一致。若 f_2 是方程（24）的解，则变换后的哈密顿量 H 的显式时间依赖性仅由前面的因子 c/f_2 引入。

$$\bar{H} = \frac{c(t)}{f_2(t)}\left[\sum_{i=1}^{n}\tfrac{1}{2}\bar{p}_i^2 + \bar{V}\big(\{\bar{x}\}\big)\right]. \quad (25)$$

借助由下式定义的时间尺度变换 $t \to \tau$，可在第二步中消去哈密顿量（25）的显式时间依赖性。

$$\tau(t) = \int_{t_0}^{t}\frac{c(t')}{f_2(t')}\,dt'. \quad (26)$$

以 τ 为自变量，正则方程

$$\frac{d\bar{x}_i}{d\tau} = \frac{\partial\widetilde{H}}{\partial\bar{p}_i}\,, \qquad \frac{d\bar{p}_i}{d\tau} = -\frac{\partial\widetilde{H}}{\partial\bar{x}_i}$$

~ ¯由方程 (25) 得出。此处包含的新哈密顿量 $H = H\,f_2/c$不再显含时间

$$\widetilde{H} = \sum_{i=1}^{n}\tfrac{1}{2}\bar{p}_i^2 + \bar{V}\big(\{\bar{x}\}\big)\,. \quad (27)$$

根据方程 (18)，将 (27) 用原坐标表示，可得原系统 H的一个不变量 I

$$\widetilde{H} = \frac{f_2}{c}\left[\sum_i \frac{c}{2}\,p_i^2 + V\big(\{x\},t\big)\right] - \frac{\dot{f}_2}{2c}\sum_i x_i p_i + \frac{\ddot{f}_2\,c - \dot{f}_2\,\dot{c}}{4c^3}\sum_i x_i^2 \;=\; I\,, \quad (28)$$

该式此前已基于试探形式（4）推导得出，见方程（14）。

IV. 数值示例

A. 时变阻尼非对称弹簧

作为一个简单示例，我们研究一个随时间变化的“阻尼非对称弹簧”一维非线性系统。其哈密顿量定义为：其中 $c(t) = \exp[-F(t)]$,

$$H = \tfrac{1}{2}e^{-F(t)}p^2 + \left(\tfrac{1}{2}\omega^2(t)\,x^2 + a(t)\,x^3\right)e^{F(t)}\,. \qquad (29)$$

写出 $f(t) \equiv F(t)$，即可得到运动方程

$$\dot{x} = p\,e^{-F(t)}\,,\ \ddot{x} + f(t)\,\dot{x} + \omega^2(t)\,x + 3a(t)\,x^2 = 0\,. \quad (30)$$

将哈密顿量H 取为方程（29），并将单自由度系统的一般不变量（14）写出，即可立即得到不变量 I

$$I = \tfrac{1}{2}e^{2F(t)}\Big[f_2\dot{x}^2 - \dot{f}_2x\dot{x} + x^2\big\{\tfrac{1}{2}\ddot{f}_2 + \tfrac{1}{2}\dot{f}_2f(t) + f_2\omega^2(t) + 2xf_2a(t)\big\}\Big]\,. \qquad (31)$$

对于这一特例，函数 $f_2(t)$ 可由线性三阶常微分方程的解给出

$$\dddot{f}_2 + 3\ddot{f}_2f(t) + \dot{f}_2\dot{f}(t) + 2\dot{f}_2f^2(t) + 4\dot{f}_2\omega^2(t) + 4f_2f(t)\omega^2(t) + 4f_2\omega\dot{\omega}(t) + 2x(t)\big[2f_2\dot{a}(t) + 4f_2a(t)f(t) + 5\dot{f}_2a(t)\big] = 0\,, \quad (32)$$

该方程由方程（13）或等价地由方程（24）得到。由于方程（32）中明确包含粒子轨迹 $x = x(t)$，解 $f_2(t)$ 只能通过将方程（32）与运动方程（30）同时积分来求得。

我们可以很容易地确认，I 确实是一个守恒量。对方程（31）求全时间导数，并代入运动方程（30），便得到方程（32）；根据定义，对于给定的轨迹 $x = x(t)$，该方程由 $f_2(t)$满足。

三阶方程（32）可以转化为一组耦合的一阶和二阶方程。二阶方程

$$\ddot{f}_2 - \frac{\dot{f}_2^2}{2f_2} + \dot{f}_2f(t) + 2f_2\omega^2(t) = \frac{g_x(t)}{f_2}\,e^{-2F(t)} \qquad (33)$$

若方程（33）中引入的 $g_x(t)$的时间导数满足下式，则该方程等价于方程（32）：

$$\dot{g}_x(t) = -2x(t)f_2\,e^{2F(t)}\big(2f_2\dot{a} + 4f_2af + 5\dot{f}_2a\big)\,. \quad (34)$$

借助辅助方程（33），不变量（31）可改写为另一种形式

$$I = \frac{e^{2F(t)}}{2f_2}\left[\left(f_2\dot{x} - \tfrac{1}{2}\dot{f}_2x\right)^2 + 2x^3f_2^2(t)\,a(t)\right] + \frac{g_x(t)}{4f_2}x^2\,. \qquad (35)$$

与方程（32）不同，方程（33）和（34）组成的等价耦合方程组不含外部函数 $f(t)$ 和 $\omega(t)$ 的时间导数。若 $a(t) \equiv 0$，则不变量（35）化为时变阻尼谐振子众所周知的不变量[6]，这意味着$g_x(t) = g_0 =$ 为常数。对于这个特定的线性系统，方程（33）不再依赖于具体的粒子轨迹 $x = x(t)$。此时，解函数 $f_2(t)$ 和 $f_2(t)$ 适用于所有由 $a(t) \equiv 0$时运动方程（30）的积分解所产生的轨迹。根据方程（13）给出的 $f_2(t)$ 微分方程的一般形式，我们得出结论：只有对于各向同性线性系统，才可能与运动方程（2）解耦。

线性系统 $[a(t) \equiv 0]$ 的另一项性质可由方程（35）直接得出。对于正积分常数$g_x(t) = g_0 > 0$，可得 $f_2(t)\,I \geq 0$。因此，$f_2(t)$的符号永远不会改变；对于初始条件 $f_2(0) > 0$，它始终非负，这意味着 $I > 0$。于是，生成函数（17）在所有时刻 t都保持为实数，并相应地，变换后的系统的哈密顿量 H。

另一方面，对于一般非线性系统（30），$f_2(t)$可能会因非线性力的强度而改变符号。此时，含时正则变换（18）会变为虚数，这意味着自治系统不再是一个物理系统。在这种情况下，含时非线性系统中的粒子运动无法再表示为实自治系统中的线性变换运动。

图1展示了运动方程 (30) 数值积分的一个特殊情形。图中还给出了对方程 (33) 和 (34) 同时进行数值积分的结果。方程 (30) 的系数定义为 $\omega(t) = \cos(t/2)$、$a(t) = 5 \times 10^{-3}\sin(t/3)$ 和$f(t) = 1.76 \times 10^{-3}\cos^2(t/\pi)$。初始条件设为 $x(0) = 1$、$\dot{x}(0) = 0$、$f_2(0) = 1$、$\dot{f}_2(0) = 0$ 和$\ddot{f}_2(0) = 0$。根据方程 (35)，我们在此为样本粒子定义一个不变量 $I = 0.5$。结合这两项结果，我们可以计算不变量 $I(x, \dot{x}, t) = 0.5$恒定时的相空间曲线，该曲线由方程 (35) 定义。图2

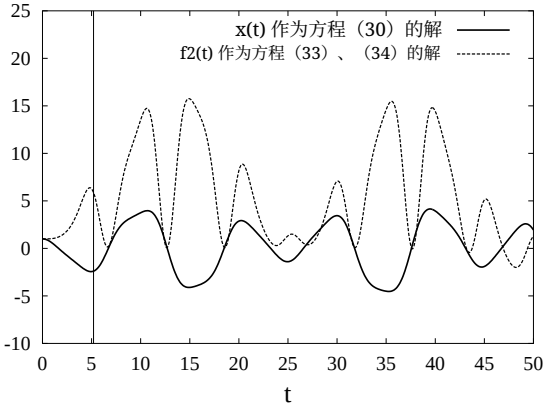


图 1. 方程（30）的数值积分，以及方程（33）和（34）的同步数值积分示例。竖线标示时刻 $t = 5.2$，该时刻将在图 2 中提及。

展示了该曲线在 $t = 5.2$ 时的快照，以及样本粒子的瞬时位置。正如预期，粒子恰好位于 I恒定的直线上，从而对方程 (35) 进行了数值验证。对于这一特殊情形

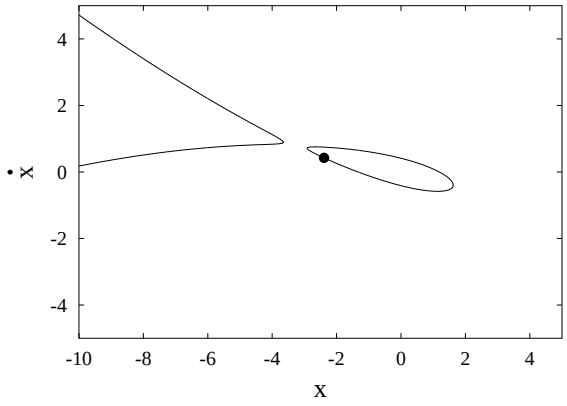


图 2. 不变量 $I = 0.5$ 的等值线在 $(x, \dot{x})$ 相空间中的分布，以及样本粒子在 $t = 5.2$, $f_2 = 6.1$ 处的位置。

对于自治系统，我们定义 $c(t) = \exp(-F) = 1$,$\omega(t) = \omega_0 = \text{const}$，以及 $a(t) = a_0 = \text{const}$。由此可得. .
$F = f = f = \dot{\omega} = \dot{a} = 0$，这意味着方程（32）可化简为

$$\dddot{f}_2 + \dot{f}_2 \left(4\omega_0^2 + 10x(t)\, a_0\right) = 0\,. \tag{36}$$

显然，该方程有特殊解 $f_2(t) \equiv 1$。此时，不变量（31）为

$$I = \tfrac{1}{2}\dot{x}^2 + \tfrac{1}{2}\omega_0^2 x^2 + a_0 x^3 = H\,,$$

因此，它与系统的哈密顿量一致，后者表示守恒总能量。对于满足 $f_2(t) \neq \text{const}$ 的方程（36）的解，可得到另一个非平凡不变量:

$$I = \tfrac{1}{2}\big[f_2\dot{x}^2 - \dot{f}_2 x\dot{x} + x^2\big\{\tfrac{1}{2}\ddot{f}_2 + f_2\omega_0^2 + 2x f_2 a_0\big\}\big]\,. \tag{37}$$

对于简谐振子，即对于 $a_0 = 0$，我们可以代入方程（36）的积分

$$\ddot{f}_2(t) + 4\omega_0^2\, f_2(t) = 0 \tag{38}$$

代入式（37），可推导出如下形式的不变量

$$I = \tfrac{1}{2}\big[f_2\big(\dot{x}^2 - \omega_0^2 x^2\big) - \dot{f}_2 x\dot{x}\big]\,.$$

当 $f_2(t)$ 是式（38）的一组解时，该表达式与 Lutzky [10] 先前给出的不变量一致。

B. 库仑相互作用粒子系统

现在我们分析一个三维示例，即由同种 N 库仑相互作用粒子组成的系综，它们在随时间变化的二次外势中运动；对于穿过线性聚焦晶格的带电粒子束，该外势通常在共动坐标系中给出。

三个空间方向上的粒子坐标分别记为 x_i、 y_i 和 z_i，相应的正则动量分别记为 $p_{x,\,i}$、 $p_{y,\,i}$ 和 $p_{z,\,i}$。在式 (1) 中令 $c(t) \equiv 1$，该系统的哈密顿量 H 可写为

$$H = \sum_{i=1}^{N} \tfrac{1}{2}\big(p_{x,i}^2 + p_{y,i}^2 + p_{z,i}^2\big) + V\big(\{x\},\{y\},\{z\},t\big)\,. \tag{39}$$

其中所包含的有效势为

$$V\big(\{x\},\{y\},\{z\},t\big) = \sum_{i=1}^{N}\Big[\tfrac{1}{2}\omega_x^2(t)\, x_i^2 + \tfrac{1}{2}\omega_y^2(t)\, y_i^2 + \tfrac{1}{2}\omega_z^2(t)\, z_i^2 + \tfrac{1}{2}\sum_{j\neq i}\frac{c_1}{r_{ij}}\Big]\,, \tag{40}$$

其中， $r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2$ 和 $c_1 = q^2/4\pi\epsilon_0 m$、 q 及 m 分别表示粒子的电荷和质量。由式（2）和式（40）得到的运动方程为

$$\dot{x}_i = p_{x,i}\,, \quad \ddot{x}_i + \omega_x^2(t)\, x_i - c_1 \sum_{j\neq i}\frac{x_i - x_j}{r_{ij}^3} = 0\,, \tag{41}$$

对于 y 和 z 方向，情况也相同。我们注意到，式（40）中库仑相互作用项前的因子 $1/2$ 在式（41）中消失了，因为在双重求和的对称形式中，每一项都出现了两次。

对于有效势（40）和 $c\,(t) \equiv 1$， f_2 对应的三阶微分方程（13）可具体写为

$$\sum_i \Big[x_i^2\big(\dddot{f}_2 + 4\dot{f}_2\omega_x^2 + 4f_2\omega_x\dot{\omega}_x\big) + y_i^2\big(\dddot{f}_2 + 4\dot{f}_2\omega_y^2 + 4f_2\omega_y\dot{\omega}_y\big) + z_i^2\big(\dddot{f}_2 + 4\dot{f}_2\omega_z^2 + 4f_2\omega_z\dot{\omega}_z\big) + \dot{f}_2\sum_{j\neq i}\frac{c_1}{r_{ij}}\Big] = 0\,. \tag{42}$$

由方程（42）的解 $f_2\,(t)$ 和哈密顿量（39） H，可直接由方程（14）得出不变量:

$$I = f_2(t)\, H - \tfrac{1}{2}\dot{f}_2\sum_i\big(x_i\, p_{x,i} + y_i\, p_{y,i} + z_i\, p_{z,i}\big) + \tfrac{1}{4}\ddot{f}_2\sum_i\big(x_i^2 + y_i^2 + z_i^2\big)\,. \tag{43}$$

如果将粒子坐标的求和用“二阶束流矩”表示，记作 $\langle x^2\rangle$（针对 x 坐标），方程（42）便可写成紧凑形式。同样，库仑相互作用项的双重求和也可表示为所有粒子的电场能 $W\,(t)$

$$\langle x^2\rangle(t) = \frac{1}{N}\sum_i x_i^2(t)\,, \quad W(t) = \frac{m}{2}\sum_i\sum_{j\neq i}\frac{c_1}{r_{ij}}\,.$$

粒子坐标的所有二次项都将采用类似的记法。与前一个例子相对应，三阶方程 (42) 可拆分为一组耦合的

一阶和二阶微分方程。类似于式 (33)，我们将函数 $g = g(t)$ 定义为

$$f_2\ddot{f}_2 - \tfrac{1}{2}\dot{f}_2^2 + 2f_2^2\,\omega^2(t) = g(t)\,. \tag{44}$$

本文中的函数 $\omega^2(t)$ 定义为“平均聚焦函数”，即

$$\omega^2(t) = \frac{\omega_x^2\left\langle x^2\right\rangle + \omega_y^2\left\langle y^2\right\rangle + \omega_z^2\left\langle z^2\right\rangle}{\left\langle x^2\right\rangle + \left\langle y^2\right\rangle + \left\langle z^2\right\rangle}\,.$$

比较式（44）的时间导数与式（42），可知 $g(t)$ 的时间导数必须满足

$$\dot{g}(t) = \frac{1}{\left\langle x^2\right\rangle + \left\langle y^2\right\rangle + \left\langle z^2\right\rangle}\Bigg[-2f_2\dot{f}_2\frac{W}{mN} + 4f_2^2\{ \\ \left\langle xp_x\right\rangle\left(\omega_x^2 - \omega^2\right) + \left\langle yp_y\right\rangle\left(\omega_y^2 - \omega^2\right) + \left\langle zp_z\right\rangle\left(\omega_z^2 - \omega^2\right)\}\Bigg]\,. \tag{45}$$

与三阶方程（42）不同，等价的耦合方程组（44）和（45）不再包含外部聚焦函数 $\omega_x(t)$、 $\omega_y(t)$ 和 $\omega_z(t)$ 的时间导数。我们注意到， $\dot{g}(t)$ 由两个性质不同的物理量决定：由所有粒子构成的场能（用来衡量库仑相互作用的强度），以及系统各向异性。与 IVA 节一维示例中的 $g_x(t)$ 不同，在此处给出的线性情形下，函数 $g(t)$ 通常并非常数；该情形对应于库仑相互作用为零（$W \to 0$）。

借助式 (44)，式 (43) 中的外部聚焦函数，以将不变量表示为另一种形式

$$2f_2 I/N = \left\langle\left(f_2p_x - \tfrac{1}{2}\dot{f}_2x\right)^2\right\rangle + \left\langle\left(f_2p_y - \tfrac{1}{2}\dot{f}_2y\right)^2\right\rangle \\ + \left\langle\left(f_2p_z - \tfrac{1}{2}\dot{f}_2z\right)^2\right\rangle + f_2^2(t)\frac{2W}{mN} \\ + \tfrac{1}{2}g(t)\left(\left\langle x^2\right\rangle + \left\langle y^2\right\rangle + \left\langle z^2\right\rangle\right)\,. \tag{46}$$

与前一个例子类似，函数 $g(t)$ 考虑到了 $f_2(t)$ 可能发生的符号变化，因为等式右侧的其他所有项都不会变为负值。

对于满足 $f_2(t) = 0$ 的时刻 t，正则变换 (18) 无定义。此外，对于 $f_2(t)$ 为负值的时间区间，变换矩阵 (18) 的元素会变为虚数。在这些情况下，由正则变换规则 (18) 和 (26) 定义的方程 (39) 和 (40) 的等效自治系统不再具有物理意义。这表明，束流在非自治系统中的演化方式已无法通过线性正则变换 (18) 与束流在自治系统中的演化相关联。相比之下，对于所有满足辅助方程 (42) 的解 $f_2(t)$，不变量 (43) 本身始终存在。

图 3 和图 4 展示了函数 $f_2(t)$，这是对耦合方程组 (44) 和 (45) 进行数值积分的结果。二阶矩（用尖括号表示）以及场能函数 $W(t)$，取自对虚构的三维各向异性聚焦晶格的模拟。该晶格由哈密顿量 (39) 和势函数 (40) 描述。图 3 所示模拟是在零流 tune 为 $\sigma_0 = 45°$、各方向上的空间电荷压低 tune 为 $\sigma = 9°$ 的条件下进行的。由于

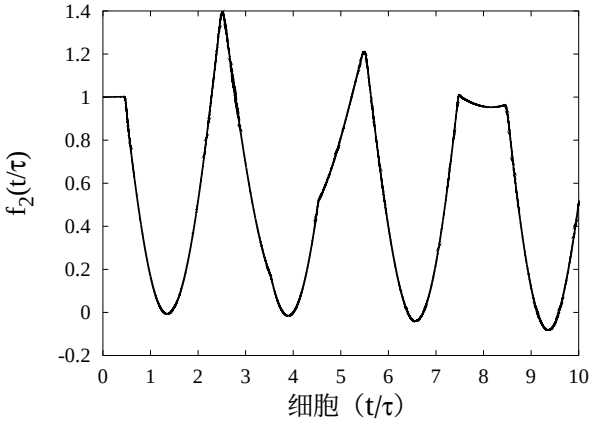


图 3. $f_2(t)$ 是方程 (42) 在 $\sigma_0 = 45°, \sigma = 9°$ 下的稳定解。τ 表示三个方向共有的聚焦周期。

在各种模拟中，我们发现 $f_2(t)$ 在$\sigma_0 \geq 60°$时会变得不稳定。此外，结果表明，随着场能$W(t)$增加， $f_2(t)$发生不稳定演化的这一极限值会降低。图 4 展示了一个 $f_2(t)$振幅不断增长的情况，其中束流在零流 tune 为 $\sigma_0 = 60°$、凹陷 tune 为 $\sigma = 15°$的条件下传播。与此前关于高流强束流输运 [11], 的研究一致，模拟结果表明，在这些条件下，束流矩保持有界。这意味着， $f_2(t)$的不稳定并不一定伴随着束流矩的不稳定。然而，当 $f_2(t)$及其导数发散时， I 恒定的相空间平面会变得越来越扭曲。这可能表明束流粒子的运动从规则运动转变为混沌运动。

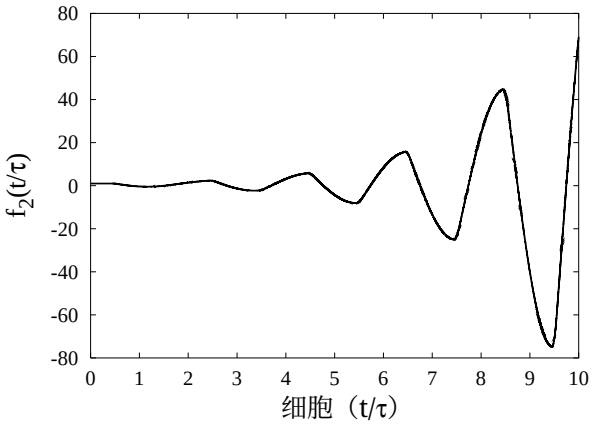


图 4. $f_2(t)$ 是方程 (42) 在 $\sigma_0 = 60°, \sigma = 15°$ 下的不稳定解。τ 表示三个方向共有的聚焦周期。

V. 哈密顿系统数值模拟准确性的检验

对于显含时哈密顿系统，已证明存在守恒量 I，可用来检验这类系统的数值模拟结果。如第二节所述，如果系统的时间演化严格遵循运动方程（2），方程（14）就包含了方程（13）的一个时间积分。在理想情况下，也就是说，如果对由方程（1）支配的系统进行计算机模拟时没有引入数值误差，并且在随后对方程（13）积分时也没有加入数值误差，那么随着时间变化计算不变量（14）时，我们不会看到任何偏差 $\Delta I/I_0$。

当然，由于数值方法的精度通常有限，我们无法避免动力系统计算机模拟中的数值误差。出于同样的原因，对方程（13）进行数值积分也存在特定的有限误差容限。在这种情况下，由方程（14）给出的量 I ——其中 $f_2(t)$、$\dot{f}_2(t)$ 和 $\ddot{f}_2(t)$ 均由方程（13）得出——不再可能保持严格恒定。两项数值任务——对运动方程（2）进行数值积分，以及随后对方程（13）进行数值积分——都会在整个积分时间段内产生非零的$\Delta I/I_0$。尽管如此，由于这两项任务的误差容限彼此独立，我们可以将得到的 $\Delta I/I_0$曲线视为对两种数值方法的交叉检验。由于对方程（13）进行数值积分时的误差容限是底层算法的已知属性，我们可以根据 $\Delta I(t)/I_0$ 估算运动方程（2）积分时的误差容限。

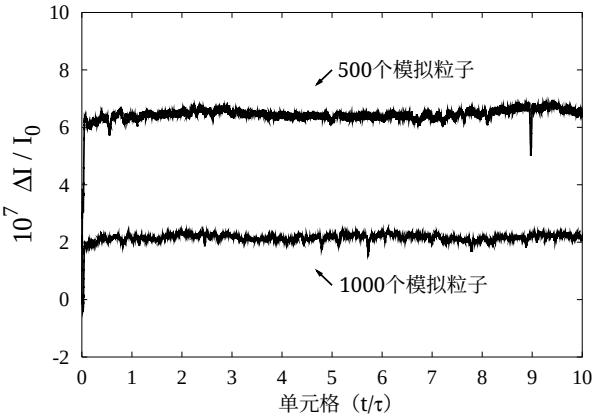


图5. 不同宏粒子数下带电粒子束三维模拟的相对不变量误差 $\Delta I/I_0$。

图 5 展示了带电粒子束数值模拟中，相对于不变量 (43) 的偏差曲线的两个示例 $\Delta I/I_0$。用于计算 I 的函数 $f_2(t)$及其导数，是通过对方程 (42) 进行数值积分得到的；或者等价地，通过对方程组 (44) 和 (45) 进行数值积分得到。方程 (42) 的时变系数，即二阶束流矩和场能 $W(t)$，此前已通过三维模拟确定：该模拟研究了带电粒子束在具有不可忽略库仑相互作用的线性聚焦晶格中的传播，其势函数由 (40) 描述。正如预期，残余偏差 $\Delta I/I_0$ 取决于模拟中使用的宏粒子数量。

作为对比，图6绘出了空间电荷力计算存在系统性5%误差时模拟所得的相应偏差。此时我们发现相对偏差 $\Delta I/I_0$ 的量级为 10^{-3}，因此比前一种不存在人为引入的空间电荷力误差的情况大三个数量级。通过比较不同的模拟运行结果，

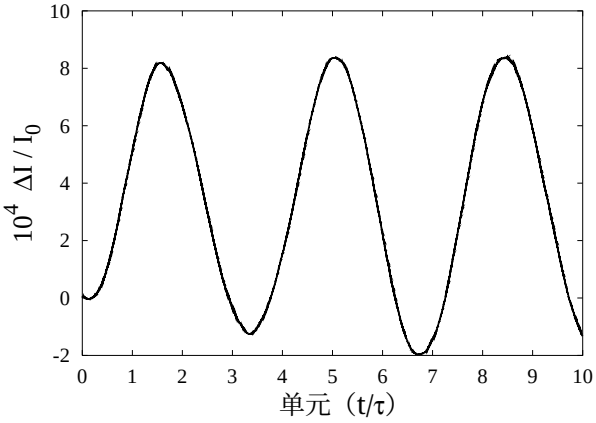


图6. 在空间电荷力计算存在 5% 误差的带电粒子束三维模拟中，相对不变量误差 $\Delta I/I_0$

对于宏粒子数量、时间步长以及用于积分运动方程的数值算法细节等不同参数，我们可以直接检查特定模拟的整体精度是否有所提高。

VI. 结论

我们得到了一个相当普遍的结果：可以直接推导出显含时间的哈密顿系统的一个守恒量。该不变量包含一个未知函数 $f_2(t)$ 及其一阶和二阶时间导数，该函数由一个线性齐次三阶辅助微分方程确定。一般而言，这个辅助方程取决于系统的空间自由度。在这种情况下，只有将辅助方程与运动方程同时积分，才能确定解 $f_2(t)$。该不变量可视为非自治系统的守恒总能量；在哈密顿量 H 所表示的时变能量基础上，加上输入系统或从系统中移除的能量，即可得到该守恒总能量。

该不变量已被发现与一维时变谐振子的已知守恒量一致 [4, 6]。对于这个特定的一维线性情形，辅助方程对

粒子位置的依赖会消失。随后，可直接对三阶辅助方程积分，得到适用于所有粒子轨迹的关于 $f_2(t)$ 的非线性二阶方程。此外，还可以直接重现时不变谐振子的第二个不变量 [10]。所有这些不变量都是由我们给出的不变量及其相关辅助方程的一般表达式导出的特例。

研究表明，不变量有助于检验显含时哈密顿系统数值模拟的准确性。对运动方程进行数值积分后，可以对系统的三阶辅助微分方程进行积分，随后计算“ 不变量” I 的数值。然后，可以用 I 相对于精确不变量 I_0的相对偏差 $\Delta I/I_0$ 来衡量相应模拟的准确性。

辅助微分方程中 $f_2(t)$ 的不稳定行为所关联的物理含义仍有待研究。此外，还必须阐明辅助方程的解在 $f_2(t)$ 变为负值时的物理意义。在这种情况下，坐标变换矩阵 (18) 的元素会变成虚数，这意味着等价的自治系统不再作为物理系统存在。这表明，显含时间的哈密顿量系统的演化方式已无法再通过线性映射与某个时不变系统的演化相对应。尽管如此，显含时间系统的不变量 I 仍独立于 $f_2(t)$ 的符号而存在。

最后指出，不变量（14）及其相关辅助方程（13）也可以通过在扩展相空间中进行无穷小正则变换来推导。此外，也可以基于诺特定理 [1]求得该不变量和辅助方程。因此，我们的不变量恰好体现了诺特对称变换所产生的守恒量。我们将在后续论文中报告这些结果 [12]。

[1] E. Noether，《哥廷根科学学会新闻》，数学-物理组 57，235 1918( )。[2] M. Lutzky，《物理快报》68A，3 (1978)。[3] E.D. Courant 和 H.S. Snyder，《物理年鉴》（纽约）3，1 (1958)。[4] H. R. Lewis，《物理评论快报》18，510 9，1976 1967 1968 ( )；《数学物理杂志》( )。[5] P. Chattopadhyay，《物理快报》75A，457 (1980)。[6] P.G.L.Leach，SIAM（工业与应用数学学会）《应用数学杂志》34，496 1978( )。[7] H. R. Lewis 和 P.G.L. Leach，《数学物理杂志》23，2371 (1982)。[8] J. Struckmeier 和 M. Reiser，粒子加速器 14，227（1984）。[9] J. Struckmeier 和 C. Riedel，物理评论快报 85，3830（2000）。[10] M. Lutzky，物理学杂志 A 11，249（1978）。[11] I. Hofmann、L.J.Laslett、L. Smith 和 I. Haber，粒子加速器 13，145（1983）；J. Struckmeier 和 M. Reiser，同上，14，227（1984）。[12] J. Struckmeier 和 C. Riedel，莱比锡物理年刊 11（2002）（即将发表） [已接受发表]。