Hamiltonformulierung, Daniel Grumiller, WS18/19

Legendretransformation

Gegeben sei eine konvexe Funktion $y(x)$. Stellen Kurve als Funktion der Ableitung $\xi = \mathrm{d}y/\,\mathrm{d}x$ dar. Mit $y = y(x(\xi))$ erhalten wir zwar eine Funktion $y = f(\xi)$, aber nicht eindeutig, da $\mathrm{d}y/\,\mathrm{d}x = f^{-1}(y)$ für jede Lösung $y(x)$ auch Lösung $y(x + \text{const.})$ zulässt. Um Legendretransformation eindeutig zu machen betrachten wir Schnittpunkt $(x^0 = 0, y^0 = \text{const.})$ der y-Achse mit Tangente auf die Kurve $y(x)$ (eindeutig wegen Konvexität). Für Steigung der Tangente gilt $\xi = (y - y^0)/(x - x^0)$, woraus folgt

$$y^0(\xi) = y - x\xi = y - x\,\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\,. \tag{1}$$

Man nennt die Funktion $y^0(\xi)$ Legentretransformierte von y bezüglich der Variablen x. Sie beschreibt dieselbe Kurve wie $y(x)$, aber als Funktion von $\xi = \mathrm{d}y/\,\mathrm{d}x$. Legendretransformierte der Legendretransformierten ist wieder ursprüngliche Funktion: $\mathrm{d}y^0/\,\mathrm{d}\xi = (\mathrm{d}y/\,\mathrm{d}x) \times (\mathrm{d}x/\,\mathrm{d}\xi) - \xi\,\mathrm{d}x/\,\mathrm{d}\xi - x = -x$ und $(y^0)^0 = y^0 - \xi\,\mathrm{d}y^0/\,\mathrm{d}\xi = y^0 + \xi x = y$. Anmerkung: falls y Funktion auf einem Vektorraum ist, ist Legendretransformierte Funktion auf dualem Vektorraum.

Wichtige Anwendung: Legendretransformation der Lagrangefunktion bezüglich Geschwindigkeiten ergibt (mit Minusvorzeichen) Hamiltonfunktion:

$$-H(q_i,\, p^i) = L(q_i,\, \dot q_i) - \dot q_i\,\frac{\partial L}{\partial \dot q_i} = L - p^i \dot q_i \qquad \text{mit } p^i := \frac{\partial L}{\partial \dot q_i} \tag{2}$$

Beispiel: $L = m\dot q^2/2 - V(q)$ ergibt mit $p = m\dot q$ Hamiltonfunktion $H = p\dot q - L = p^2/m - p^2/(2m) + V(q) = p^2/(2m) + V(q)$.

Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Nullsetzen der Variation der Hamiltonschen Wirkung

$$\delta S_H = \delta\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\big(p^i\dot q_i - H(q_i,\, p^i)\big) = \int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\Big[\delta p^i\Big(\dot q_i - \frac{\partial H}{\partial p^i}\Big) - \delta q_i\Big(\dot p^i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\Big)\Big] + p^i\delta q_i\big|_{t_1}^{t_2} = 0 \tag{3}$$

ergibt Hamiltonsche Bewegungsgleichungen (vorausgesetzt $p^i\delta q_i|_{t_{1,2}} = 0$):

$$\dot q_i = \frac{\partial H}{\partial p^i} \qquad \dot p^i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{4}$$

Definiert man kanonische Poissonklammern

$$\{q_i,\, p^j\} = \delta_i^j \qquad \{q_i,\, q_j\} = 0 = \{p^i,\, p^j\} \tag{5}$$

so gilt für Zeitenwicklung beliebiger Funktionen $f(q_i,\, p^i)$ im Phasenraum:

$$\dot f = \{f,\, H\} = \frac{\partial f}{\partial q_i}\,\{q_i,\, p^j\}\,\frac{\partial H}{\partial p^j} + \frac{\partial f}{\partial p^i}\,\{p^i,\, q_j\}\,\frac{\partial H}{\partial q_j} = \frac{\partial f}{\partial q_i}\,\frac{\partial H}{\partial p^i} - \frac{\partial f}{\partial p^i}\,\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{6}$$

Hamiltonfunktion erzeugt Zeitentwicklung. Siehe (4) für $f = q_i$, $f = p^i$.

Zwangsbedingungen in Hamiltonformulierung

Unterschied zu Lagrangeformulierung: p und q werden unabhängig variiert — Phasenraum doppelt so gross wie Konfigurationsraum, dafür Differenzialgleichungen erster Ordnung statt zweiter Ordnung; beschreibt dieselbe Physik. ABER: Legendretransformation oft singulär! Kann zu Zwangsbedingungen führen.

Übergang Lagrange zu Hamilton eindeutig wenn Beschleunigungen $\ddot{q}_i$ durch $q_i,\, \dot{q}_i$ ausdrückbar. Euler–Lagrange Bewegungsgleichungen implizieren

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j}\, \ddot{q}_j = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial q_j}\, \dot{q}_j \tag{7}$$

Wenn Matrix $\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j}$ invertierbar: alles ok; ansonsten: erhalte Zwangsbedingungen $\Phi_k(q_i,\, p^i) = 0,\ k = 1, 2, \ldots, N$, wobei N die Dimension des Kerns von $\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j}$ ist. Diese Zwangsbedingungen heissen "primary constraints".

Konsistenz der Zwangsbedingungen mit Zeitwentwicklung:

$$\dot{\Phi}_k = \{\Phi_k,\, H\} = 0 \tag{8}$$

Es gibt fünf Möglichkeiten: 1. (8) ist unmöglich erfüllbar (Theorie ist inkonsistent); 2. (8) ist identisch erfüllt; 3. (8) ist erfüllt unter Verwendung von $\Phi_k = 0$; 4. (8) ist erfüllt für bestimmte Wahl der Lagrangemultiplikatoren λ_k; 5. (8) führt zu neuen Zwangsbedingungen ("secondary constraints"). Im letzten Fall muss Konsistenz der secondary constraints überprüft werden (analog zu (8)), solange bis keine neuen Zwangsbedingungen generiert werden. Am Schluss hat man eine Menge an Zwangsbedingungen Φ_k, wobei $k = 1, 2, \ldots, M$ mit $M \geq N$.

Eichtransformationen im Phasenraum

Zwangsbedingung Φ erster Klasse ("1$^{\text{st}}$ class constraints"):

$$\{\Phi,\, \Phi_j\} = \sum_{k=1}^{M} C_j{}^k \Phi_k \approx 0 \approx \sum_{k=1}^{M} v^k \Phi_k = \{\Phi,\, H\} \tag{9}$$

Zwangsbedingungen zweiter Klasse ("2$^{\text{nd}}$ class constraints"): erfüllen nicht (9). Dimension D_{phys} des physikalischen Phasenraums (D: totaler Phasenraum):

$$D_{\text{phys}} = D - S - 2F \qquad F/S : \text{Anzahl der } 1^{\text{st}}/2^{\text{nd}} \text{ class constraints} \tag{10}$$

Grund für Faktor 2 vor F: jede Zwangsbedingung Φ erster Klasse generiert Eichtransformation im totalen Phasenraum

$$\delta_\epsilon f = \epsilon\, \{f,\, \Phi\} \qquad \text{mit beliebigem } f = f(q_i,\, p^i) \tag{11}$$

da $H_1 = H + \lambda_1 \Phi$ dieselbe Zeitwentwicklung im physikalischen Phasenraum generiert wie $H_2 = H + \lambda_2 \Phi$, und es gilt $\dot{f}_1 - \dot{f}_2 = (\lambda_1 - \lambda_2)\, \{f,\, \Phi\}$.

Eichfixierung: willkürlich gewählte Bedingungen $B_k(q_i,\, p^i) = 0$ wobei $k = 1, \ldots, F$, so dass gilt $\det\{B_k,\, \Phi_j\} \neq 0$, wobei Index j über die F 1$^{\text{st}}$ class constraints läuft. Eichbedingungen konvertieren, wenn als weitere Zwangsbedingungen interpretiert, 1$^{\text{st}}$ class constraints in doppelt so viele 2$^{\text{nd}}$ class constraints.