Invarianten für zeitabhängige

Hamilton-Systeme

J. Struckmeier

Vortrag im Rahmen des Winterseminars
des Instituts für Angewandte Physik
der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt a.M.

Hirschegg, 04. – 10. März 2001

0. Übersicht

- Rückblick: Hamilton-Funktion, kanonische Gleichungen, Invarianten, kanonische Transformationen
- Spezielle Klasse von zeitabhängigen Hamiltonsystemen
- Kanonische Transformation in das äquivalente zeitunabhängige System
- Invariante des zeitabhängigen Hamiltonsystems
- Beispiel mit Computer-Demonstration
- Anwendung: Verifikation von Computer-Simulationen dynamischer Systeme

1. Hamilton-Funktion, kanonische Gleichungen

Mit Hilfe der Lagrange-Funktion $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$ kann die Hamilton-Funktion $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ eines i.a. explizit zeitabhängigen Systems aus n Freiheitsgraden $\vec{q} = (q_1, \ldots, q_n)$, $\vec{p} = (p_1, \ldots, p_n)$ definiert werden durch

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)\,, \qquad\qquad L = T - V\,.$$

Aus dem Hamiltonschen Variationsprinzip

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H(\vec{q}, \vec{p}, t) \right] dt = 0$$

folgen die Bewegungsgleichungen (die „kanonischen Gleichungen“)

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}\,, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}\,, \qquad i = 1, \ldots, n$$

2. Invarianten

Eine Größe

$$I = I\left(\vec{q}(t), \vec{p}(t), t\right)$$

nennen wir „Invariante“, wenn ihre totale zeitliche Ableitung entlang des „Systempfads“ $\{\vec{q}(t), \vec{p}(t)\}$ verschwindet:

$$I \text{ ist Invariante} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{dI}{dt} = 0\,.$$

Für die totale zeitliche Ableitung der Hamiltonfunktion gilt:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i \right) = \frac{\partial H}{\partial t}\,.$$

$\rightsquigarrow$ Für nicht explizit zeitabhängige Hamiltonsysteme ist die Hamiltonfunktion $H(\vec{q}, \vec{p})$ eine Invariante: $H = I$.

$\rightsquigarrow$ Die Hamiltonfunktion H ist für $\partial H/\partial t \neq 0$ <u>keine</u> Invariante.

<u>Aufg.</u>: Bestimmung einer Invarianten I für Systeme mit $\partial H/\partial t \neq 0$.

3. Kanonische Transformationen

Eine allgemeine Transformation auf neue Koordinaten

$$q_i' = q_i'(\vec{q}, \vec{p}, t)\,, \qquad p_i' = p_i'(\vec{q}, \vec{p}, t)\,, \qquad i = 1, \ldots, n$$

heißt „kanonisch“, wenn das Hamiltonsche Variationsprinzip auch in den neuen Koordinaten gilt

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_{i=1}^{n} p_i' \dot{q}_i' - H'(\vec{q}\,', \vec{p}\,', t) \right] dt = 0\,,$$

wenn also die kanonischen Gleichungen erhalten bleiben:

$$\dot{q}_i' = \frac{\partial H'}{\partial p_i'}\,, \qquad \dot{p}_i' = -\frac{\partial H'}{\partial q_i'}\,, \qquad i = 1, \ldots, n$$

Die Integranden dürfen sich nur um $dF_3(\vec{q}\,', \vec{p}, t)/dt$ unterscheiden

$$q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i}\,, \qquad p_i' = -\frac{\partial F_3}{\partial q_i'}\,, \qquad H' = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}$$

4. Spezielle Klasse von zeitabhängigen Hamiltonsystemen

Wir betrachten nun das zeitabhängige Hamilton-System

$$H(\vec{q},\vec{p},t) = \sum_{i=1}^{n} \tfrac{1}{2} p_i^2 + V(\vec{q},t)$$

mit den zugehörigen kanonischen Gleichungen

$$\dot{q}_i = p_i\,, \qquad \dot{p}_i + \frac{\partial V(\vec{q},t)}{\partial q_i} = 0\,, \qquad i = 1,\dots,n$$

$\rightsquigarrow$ Die Hamiltonfunktion H ist für $\partial H/\partial t \neq 0$ <u>keine</u> Invariante.

<u>Vorgehensweise</u>: das zeitabhängige System H wird kanonisch in ein nicht zeitabhängiges (autonomes) System $\widetilde{H}$ transformiert:

$$H(\vec{q},\vec{p},t) \xrightarrow{\text{kanon. Transf.}} \widetilde{H}(\vec{q}\,',\vec{p}\,')\,.$$

$\rightsquigarrow$ $\widetilde{H}$ ist eine Invariante. $\widetilde{H}$ ausgedrückt in den alten Koordinaten $\vec{q}$, $\vec{p}$ liefert dann eine Invariante I im ursprünglichen System H.

5. Kanon. Transformation in ein zeitunabhängiges System

1. Schritt: kanonische Transformation erzeugt durch

$$F_3(\vec{q}\,', \vec{p}, t) = \sum_{i=1}^{n} \left(-\sqrt{\xi(t)}\, q_i' p_i + \tfrac{1}{4} \dot{\xi}(t)\, {q_i'}^2 \right) .$$

Hieraus folgen die linearen Transformationsregeln

$$\begin{pmatrix} q_i \\ p_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\xi(t)} & 0 \\ \dot{\xi}(t)/\sqrt{4\xi(t)} & 1/\sqrt{\xi(t)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_i' \\ p_i' \end{pmatrix} .$$

Die partielle zeitliche Ableitung der Erzeugenden Funktion $F_3(\vec{q}\,', \vec{p}, t)$ ausgedrückt in den neuen Koordinaten ist

$$\frac{\partial F_3}{\partial t} = \frac{1}{\xi(t)} \sum_{i=1}^{n} \left[\tfrac{1}{4} \left(\ddot{\xi}\xi - \dot{\xi}^2 \right) {q_i'}^2 - \tfrac{1}{2} \dot{\xi}\, q_i' p_i' \right] .$$

Als transformierte Hamilton-Funktion H' erhalten wir sofort

$$H'(\vec{q}', \vec{p}', t) = \frac{1}{\xi(t)} \left(\sum_{i=1}^{n} \tfrac{1}{2} p_i'^{\,2} + \bar{V}(\vec{q}') \right) ,$$

mit $\bar{V}(\vec{q}')$ als dem neuen effektiven Potential

$$\bar{V}(\vec{q}') = \tfrac{1}{4} \left[\ddot{\xi}\xi - \tfrac{1}{2}\dot{\xi}^2 \right] \sum_{i=1}^{n} q_i'^{\,2} + \xi\, V\left(\sqrt{\xi}\, \vec{q}', t \right) .$$

<u>Frage</u>: Woher wissen wir, daß $\bar{V}$ nicht explizit zeitabhängig ist?

<u>Antwort</u>: Wir bestimmen die in der Erzeugenden Funktion F_3 eingeführte Größe $\xi = \xi(t)$ in der Weise, daß dies der Fall ist

$$\frac{\partial \bar{V}(\vec{q}')}{\partial t} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Longrightarrow \quad \xi = \xi(t) .$$

Wir erhalten hierdurch eine lineare Differentialgleichung für $\xi(t)$:

$$\dddot{\xi}(t)\sum_{i=1}^{n} q_i^2 + 4\dot{\xi}\left(V + \tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} q_i \frac{\partial V}{\partial q_i}\right) + 4\xi\frac{\partial V}{\partial t} = 0\,,$$

die wir „Hilfsgleichung" für $\xi(t)$ nennen wollen. Im allgemeinen hängt diese Gleichung von allen n Ortskoordinaten ab.

Schlußfolgerungen:

- Die Hilfsgleichung kann nur simultan mit der Lösung aller Bewegungsgleichungen integriert werden.
- Entlang des Lösungspfads $\vec{q}(t)$ hängen die Koeffizienten der Hilfsgleichung nur noch vom Parameter t ab: $V = V(\vec{q}(t), t)$
- Die Hilfsgleichung ist eine gewöhnliche, lineare, homogene Differentialgleichung dritter Ordnung.
- Es existiert eine eindeutige Lösungsfunktion $\xi(t)$, solange $V(\vec{q}(t), t)$ und seine partiellen Ableitungen stetig sind.

Mit $\xi(t)$ Lösung der Hilfsgleichung ist $\bar{V}$ nicht explizit zeitabhängig. Hingegen ist die transformierte Hamiltonfunktion $H'(\vec{q}', \vec{p}', t)$ wegen des Vorfaktors $\xi(t)$ noch explizit zeitabhängig, also <u>keine</u> Invariante.

$\rightsquigarrow$ <u>2. Schritt</u>: Zeitskalierung

$$t \to \tau(t) = \int_{t_0}^{t} \frac{dt'}{\xi(t')} \,.$$

Mit τ als neuer unabhängiger Variabler lassen sich die von H' abgeleiteten kanonischen Gleichungen schreiben als

$$\frac{dq'_i}{d\tau} = p'_i \qquad\qquad \frac{dp'_i}{d\tau} = -\frac{\partial \bar{V}}{\partial q'_i} \,,$$

welche ihrerseits aus der Hamiltonfunktion $\widetilde{H}$ folgen

$$\widetilde{H}(\vec{q}', \vec{p}') = \sum_{i=1}^{n} \tfrac{1}{2} {p'_i}^2 + \bar{V}(\vec{q}') = I \,.$$

$\widetilde{H}$ ist nicht explizit zeitabhängig und somit die gesuchte Invariante.

Schlußfolgerungen:

- Die Hamiltonfunktion $\widetilde{H}$ ist eine Invariante.
- $\widetilde{H}$ beschreibt das zu H äquivalente autonome System.
- Das äquivalente autonome System $\widetilde{H}$ stellt nur für $\xi(t) > 0$ ein reales physikalisches System dar.
- Aufgrund der Linearität der Hilfsgleichung existiert die Lösungsfunktion $\xi(t)$ und somit die Invariante I für alle t, vorausgesetzt daß $V(\vec{q}(t), t)$ und seine partiellen Ableitungen stetig sind.
- $\widetilde{H}$ ausgedrückt in den ursprünglichen Koordinaten liefert für alle t und zugehörige $\xi(t)$ eine Invariante I des zeitabhängigen Hamiltonsystems H:

$$I = \xi(t)\, H(\vec{q}, \vec{p}, t) - \tfrac{1}{2}\dot{\xi}(t) \sum_{i=1}^{n} q_i p_i + \tfrac{1}{4}\ddot{\xi}(t) \sum_{i=1}^{n} q_i^2 \,.$$

6. Beispiel: Zeitabhängiger anharmonischer Oszillator

Wir betrachten nun als einfaches Beispiel einen zeitabhängigen nichtlinearen Oszillator mit der Hamiltonfunktion

$$H(q,p,t) = \tfrac{1}{2}p^2 + \tfrac{1}{2}\omega^2(t)\,q^2 + a(t)\,q^3\,.$$

Die Invariante I folgt sofort als Spezialfall der allgemeinen

$$I = \xi(t)\Big(\tfrac{1}{2}p^2 + \tfrac{1}{2}\omega^2(t)\,q^2 + a(t)\,q^3\Big) - \tfrac{1}{2}\dot{\xi}(t)\,qp + \tfrac{1}{4}\ddot{\xi}(t)\,q^2\,.$$

Die Differentialgleichung für $\xi(t)$ ist entsprechend ein Spezialfall der allgemeinen linearen Hilfsgleichung dritter Ordnung

$$\dddot{\xi} + 4\dot{\xi}\omega^2 + 4\xi\omega\dot{\omega} + q(t)\Big(4\xi\dot{a} + 10\dot{\xi}a\Big) = 0\,.$$

Die Abhängigkeit der Lösung $\xi(t)$ von der Trajektorie $q(t)$ wird durch den Koeffizienten des kubischen Terms $a(t)$ erzeugt.
$\rightsquigarrow$ <u>simultane</u> Integration der Bewegungsgleichung erforderlich!

6.1. Sonderfall: Zeitabhängiger Harmonischer Oszillator

Für $a(t) \equiv 0$ wird die Hilfsgleichung unabhängig von $q(t)$.
$\rightsquigarrow$ Die Lösungsfunktion $\xi(t)$ gilt dann für <u>alle</u> $q(t)$ als Lösung der linearen Bewegungsgleichung $\ddot{q} + \omega^2(t)\, q = 0$.
Die Hilfsgleichung kann dann einmal analytisch integriert werden

$$\ddot{\xi}\xi - \tfrac{1}{2}\dot{\xi}^2 + 2\xi^2\omega^2(t) = 2c\,, \qquad c = \text{const.}$$

und in den Ausdruck für die Invariante eingesetzt werden

$$\xi(t)\, I = \tfrac{1}{2}\big(\xi p - \tfrac{1}{2}\dot{\xi} q\big)^2 + \tfrac{1}{2} c q^2 > 0 \quad \text{für } c > 0$$

$\rightsquigarrow$ $\xi(t) > 0$ für alle t. Hilfsgleichung und Invariante können somit als Funktion von $\rho(t) \equiv \sqrt{\xi(t)}$ ausgedrückt werden

$$\ddot{\rho} + \omega^2(t)\, \rho = \frac{c}{\rho^3}\,, \qquad I = \tfrac{1}{2}\big(\rho\, p - \dot{\rho}\, q\big)^2 + \tfrac{1}{2} c \frac{q^2}{\rho^2}$$

$$\widetilde{H} \equiv I = \tfrac{1}{2} p'^{\,2} + \tfrac{1}{2} c\, q'^{\,2}\,, \qquad p' = \rho\, p - \dot{\rho}\, q\,, \quad q' = q/\rho$$

6.2. Numerisches Beispiel

Bewegungsgleichung des nichtlinearen Oszillators und Hilfsgleichung

$$\ddot{q} + \omega^2(t)\, q + 3a(t)\, q^2 = 0$$

$$\dddot{\xi} + 4\dot{\xi}\omega^2 + 4\xi\omega\dot{\omega} + q(t)\Big(4\xi\dot{a} + 10\dot{\xi}a\Big) = 0$$

$$\omega(t) = \sqrt{2}\cos(t/2)\,, \qquad a(t) = 5\times 10^{-2}\sin(t/3)$$

werden simultan numerisch integriert mit den Anfangsbedingungen

$$q(0) = 1\,, \quad p(0) = \dot{q}(0) = 0\,, \qquad \xi(0) = 1\,, \quad \dot{\xi}(0) = 0\,, \quad \ddot{\xi}(0) = 0\,.$$

$\rightsquigarrow$ Für dieses Teilchen folgt die Invariante $I = 1$.
Dargestellt wird

- die Bewegung im Potentialtopf: $V(q(t), t)$ gegen $q(t)$
- die Bewegung des Teilchens im Phasenraum: $p(t)$ gegen $q(t)$, sowie die Phasenraumkurve gleicher Invarianten $I(q, p, t) = 1$.

7. Verifikation von Computer-Simulationen

Wir kehren nun zur allgemeinen Formulierung zurück und fassen zusammen:

$$I = \xi(t)\left(\sum_{i=1}^{n} \tfrac{1}{2}p_i^2 + V(\vec{q},t)\right) - \tfrac{1}{2}\dot{\xi}(t)\sum_{i=1}^{n} q_i p_i + \tfrac{1}{4}\ddot{\xi}(t)\sum_{i=1}^{n} q_i^2$$

ist eine Invariante eines Systems, dessen Dynamik von den Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}_i = p_i\,, \qquad \dot{p}_i + \frac{\partial V(\vec{q},t)}{\partial q_i} = 0\,, \qquad i = 1,\ldots,n$$

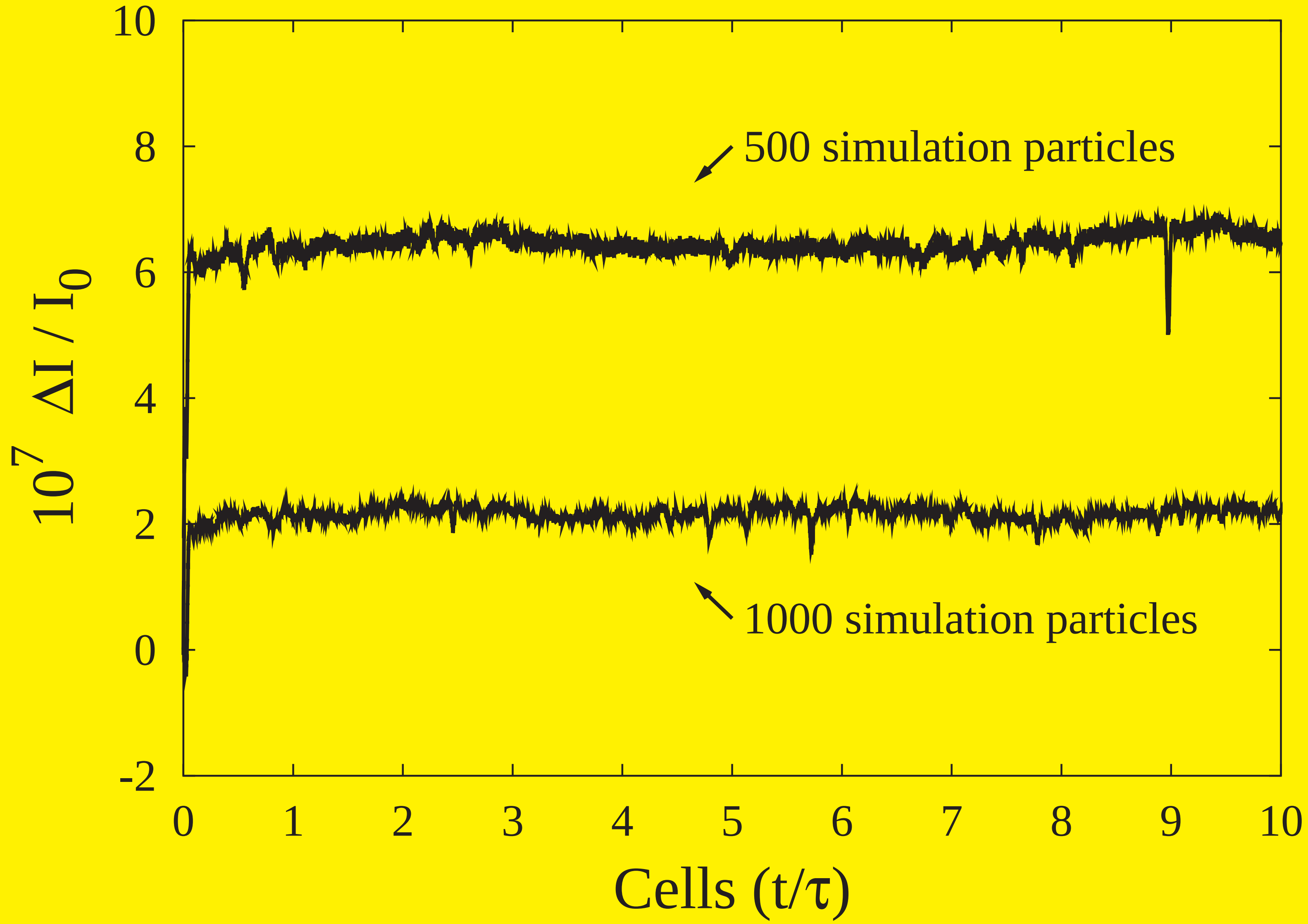
bestimmt wird — unter der Voraussetzung, daß $\xi(t)$ Lösung der linearen Differentialgleichung 3. Ordnung (Hilfsgleichung) ist

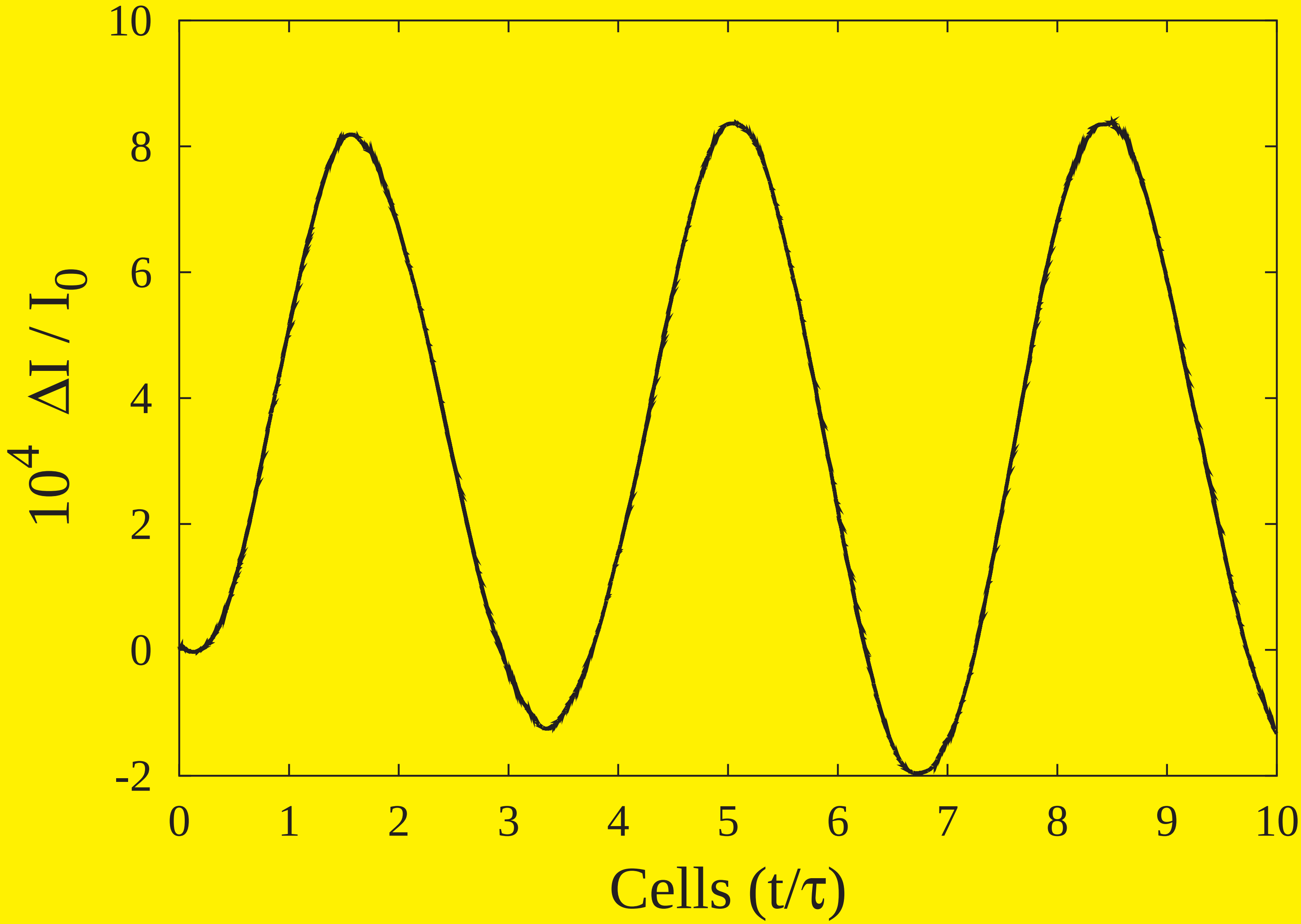
$$\dddot{\xi}\sum_{i=1}^{n} q_i^2 + 4\dot{\xi}\left(V + \tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} q_i \frac{\partial V}{\partial q_i}\right) + 4\xi\frac{\partial V}{\partial t} = 0\,.$$

<u>Beweis</u>: Berechnung von dI/dt und Einsetzen der Bewegungsgl.

Schlußfolgerungen:

- I ist also ein Zeitintegral der Hilfsgleichung, sofern $\vec{q}(t)$ und $\vec{p}(t)$ Zeitintegrale der Bewegungsgleichungen sind.
- Sind $\vec{q}(t)$ und $\vec{p}(t)$ Ergebnis einer Computersimulation, so können wegen der prinzipiell beschränkten Genauigkeit numerischer Methoden die Bewegungsgleichungen nur näherungsweise erfüllt sein.
- Wird mit den Simulationsergebnissen die Hilfsgleichung integriert und mit der so erhaltenen Funktion $\xi(t)$ die Größe I berechnet, so ist I <u>keine</u> Invariante.
- Die relative Abweichung $[I(t) - I(0)]/I(0)$ des berechneten $I(t)$ von der exakten Invarianten $I(0)$ kann als „a posteriori"-Fehlerabschätzung der jeweiligen Simulation aufgefaßt werden.
- Es handelt sich also um eine Verallgemeinerung der Methode, $H = \text{const.}$ bei konservativen (autonomen) Systemen zu testen.


10
8
6
4
2
0
-2
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
10^7 ΔI / I_0
Cells (t/τ)
500 simulation particles
1000 simulation particles


10
8
6
4
2
0
-2
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
$10^4\ \Delta I / I_0$
Cells (t/τ)

Veröffentlichungen:

- Phys. Rev. Lett. **85**, 3830 (2000)
- Phys. Rev. E **63**, (2001)
- Annalen der Physik (Leipzig) (zur Veröffentlichung angenommen)