第 49 卷 第 2 期 2000 年 2 月
1000-3290/2000/49(02)/0201-09
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol. 49, No. 2, February, 2000

Liouville 方程的八类精确解

沈惠川
(中国科学技术大学天文与应用物理系统计力学中心,合肥 230026)
(1999 年 3 月 24 日收到;1999 年 6 月 3 日收到修改稿)

利用 Poisson 括号的正则不变性求得了 Liouville 方程的八类精确解:1)"重力"势系统,2)谐振系统,3)正负平方幂函数势系统,4)双曲函数势系统,5)三角函数势系统,6) Pöschl-Teller 势系统,7)"引(斥)力"势系统和 8) Kratzer 势系统.得到了"化动量正则变换"的一般方法.在求解后两个系统 Liouville 方程的过程中还应用了 Routh 方法和 Binet 方法.

PACC:0520;0540

1 引 言

Liouville 方程是 Joseph Liouville 于 1838 年得到的,它是一个纯经典力学的运动方程,本身并无任何特殊假设,只是在将其用于讨论大量粒子的宏观(平均)效果时,才需引入统计力学中的"系综"概念[1,2].该方程在近代物理学中引起重视,盖始于 1946 年 Bogoliubov, Born 等用其处理多体问题(BBGKY 方程链),并进而讨论 Boltzmann 方程的理论基础之时.1962 年,Prigogine[3] 在《非平衡态统计力学》中仍将此方程置于突出的地位.现在依然.

除此之外,Liouville 方程在讨论量子力学基础理论方面的意义亦非同小可.de Broglie[4] 在《非线性波动力学》中指出,Liouville 方程的解类似于 Schrödinger 方程的解(模方).Ballentine[5] 在《量子力学》中断言:"量子力学的经典极限总是经典的统计力学而非经典的质点力学."刘全慧[6]、黄湘友[7] 用算例证实了 Ballentine 的这一结论,而且黄湘友[8] 进一步断言:"量子力学中的分布函数在经典极限下满足 Liouville 方程."大量的文献都证明,用分布函数表示粒子状态时,可由 Schrödinger 方程导得 Liouville 方程.

尽管 Liouville 方程的重要性日显突出,但是数学物理学家求解此方程的热情始终无法同他们求解 Schrödinger 方程的热情相比,在数量上更是几近于零.这或许是因为求解 Liouville 方程需要某种特别的技巧的缘故.黄湘友上述断言目前只有理论上的意义,至今未见有人从 Schrödinger 方程的解出发导出 Liouville 方程的解.当然,气体分子运动论中的"Maxwell 速度分布律(函数)"[9,10] 亦即"Maxwell 解"能够满足 Liouville 方程,但从本文的研究中可看出,Maxwell 解只是力学系统的一个稳定的运动积分,只是一个"平凡解".而 Vlasov 方程的精确解[11] 可视为 Liouville 方程精确解的特例.至于 Prigogine 在文献[3]中所得到的形式解,只是为了同 Schrödinger 方程的解相类比,并没有具体解的表达式.值得一提的是,文献[3]中注意到谐振系统正则变量的正则变换与本文的考虑符合.

谐振系统是真实系统的一级近似,固体就可视为谐振系统.这种近似处理对于许多材料物理问题来说已足够精确[3].

本文所研究的八类系统,包括谐振系统在内,都属于量子力学 Schrödinger 方程的可解模型[11].

本文中凡重复指标按 Einstein 约定求和.

2 Liouville 方程及其平凡解

Liouville 方程可写为[12,13]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + [H.f] = 0. \tag{1}$$

式中 f 为分布函数,H 为系统的 Hamiltonian,$[H,f]$ 为 Hamiltonian 与分布函数的、以广义坐标 q_k 和广义动量 p_k 为自变量的 Poisson 括号 $[H,f]_{p,q}$ 的缩写

$$[H,f] = \frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial f}{\partial q_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial f}{\partial p_k}, \quad (k = 1,\cdots,m), \tag{2}$$

而 m 为系统的总自由度数.

若引进中间变量(如下文的'引(斥)力'势系统和 Kratzer 势系统中那样的)θ,

$$\theta = \theta(t), \tag{3}$$

则由于

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \dot{\theta}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\theta}, \tag{4}$$

式中 $\dot{\theta} = \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}$,因而 Liouville 方程变形为

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} + [\widetilde{H}, f] = 0, \tag{5}$$

式中 $\widetilde{H}$ 所对应的 Hamilton 正则方程为

$$\frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}\theta} = \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial p_k}, \quad \frac{\mathrm{d}p_k}{\mathrm{d}\theta} = -\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial q_k}, \quad (k = 1, \cdots, m), \tag{6}$$

而正则方程(6)式所对应的 Euler-Lagrange 方程(由 Hamilton 原理得出)是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\frac{\partial \widetilde{L}}{\partial\left(\frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}\theta}\right)} - \frac{\partial \widetilde{L}}{\partial q_k} = 0, \quad (k = 1, \cdots, m), \tag{7}$$

$\widetilde{H}$,$\widetilde{L}$ 是区别于原来的 H,L 的'Hamiltonian'和'Lagrangian'.

当 H 与 f 无关(表示粒子间无'明显'相互作用)时,Liouville 方程(1)式是关于分布函数 f 的一阶线性偏微分方程. 为此,作为第一步,可用分离变量法分离出其中的时间(t)因子. 设

$$f = \rho(p_k, q_k)\exp(-m\omega t), \tag{8}$$

式中 ω 为正的常数,且具有频率的量纲;m 仍为系统的总自由度数,将(8)式代入(1)式,有

$$[H, \ln\rho] = m\omega. \tag{9}$$

记

$$\phi = \ln\rho, \tag{10}$$

则方程(9)式就是

$$[H, \phi] = m\omega. \tag{11}$$

此为关于 ϕ 的一阶线性偏微分方程,其齐次方程

$$[H, \phi_0] = 0 \tag{12}$$

的通解有形如 $\phi_0 = \phi_0(H)$ 的无穷多种. 作为物理上有意义的考虑,可取 $\phi_0(H)$ 的 Taylor 展开的前两项:

$$\phi_0 = A + BH, \tag{13}$$

式中 A,B 为待定常数. 由于有(10)式,故常数 A 可化为 ρ 前面的系数.

考虑到(10)式,ϕ_0 必须无量纲,再加上对边界情况的综合估计[10]和与 Maxwell 解的对比,故有

$$\phi_0 = -\frac{H}{k_{\mathrm{B}}T} + A, \tag{14}$$

式中 T 为 Kelvin 温度,k_{B} 为 Boltzmann 常数.

解(14)式即为 Liouville 方程(1)式的平凡解,即对任何形式的 Hamiltonian,此解恒满足 Liouville 方程. 于是可看出,Maxwell 解就是平凡解.

对方程(5)式,亦有类似的平凡解存在.

3 用正则变换化简 Poisson 括号

下面的问题,是求非齐次方程(9)或(11)式的特解. 非齐次方程(11)式的特解加上齐次方程(12)式的解,才是非齐次方程(11)式的通解. 在探求方程(11)式特解的时候,Hamiltonian 必须是具体的(在这一点上与求齐次方程的平凡解不同).

在处理这一问题之前,必须首先注意到 Poisson 括号的正则不变性,即两个函数的、以广义动量 p_k 和广义坐标 q_k 为自变量的 Poisson 括号,等于经过正则变换的此两个函数的、以广义动量 p_k^* 和广义坐标 q_k^* 为自变量的 Poisson 括号;其中 p_k^*,q_k^* 与 p_k,q_k 之间是正则变换关系1),亦即满足 Jacobi 行列式等于 1 的方程

$$\frac{\partial(p_k^*, q_k^*)}{\partial(p_l, q_l)} = 1, \quad (k, l = 1, \cdots, m). \tag{15}$$

在本文中,Poisson 括号的正则不变性可写成

$$[H, \phi]_{p,q} = [H^*, \phi^*]_{p^*, q^*}, \tag{16}$$

式中 $H^* = H + \frac{\partial F}{\partial t}$,$\phi^* = \phi$;$F$ 为正则变换中的母函数;但 H^* 和 ϕ^* 必须是用自变量 p_k^* 和 q_k^* 来表

---

1) 在证明 Poisson 括号的正则不变性时,必须用到正则变换公式. 例如,在采用第一类正则变换公式时,q_k 与 q_k^* 是相互独立的变量,故有

$$\frac{\partial q_k^*}{\partial q_l} = 0, \quad \frac{\partial p_k}{\partial q_l^*} = -\frac{\partial p_l^*}{\partial q_k}, \quad (k, l = 1, \cdots, m),$$

从而得到'基本 Poisson 括号':

$$[p_k^*, q_l^*] = \delta_{kl}, \qquad [q_k^*, p_l^*] = -\delta_{kl},$$
$$[q_k^*, q_l^*] = 0, \qquad [p_k^*, p_l^*] = 0$$

(δ_{kl} 为 Krönecker 符号)许多分析力学教科书中未指出使用正则变换公式. 这是一种缺陷!

示的. 利用 Poisson 括号正则不变性的目的,是为了使 H^* 中产生更多的可遗坐标. 根据分析力学[13,14],原则上可将所有广义坐标变换成可遗坐标(只要此问题是可解的).

由此,非齐次方程(11)式变形为

$$[H^*,\phi^*]_{p^*,q^*} = m\omega, \tag{17}$$

即

$$\frac{\partial H^*}{\partial p_k^*}\frac{\partial \phi^*}{\partial q_k^*} - \frac{\partial H^*}{\partial q_k^*}\frac{\partial \phi^*}{\partial p_k^*} = m\omega, \quad (k = 1,\cdots,m). \tag{18}$$

若 H^* 中所有的广义坐标 q_k^* 都是可遗的,则(18)式中等号左端第二项为零,便有

$$\frac{\partial H^*}{\partial p_k^*}\frac{\partial \phi^*}{\partial q_k^*} = m\omega,(k = 1,\cdots,m). \tag{19}$$

方程(19)式的特解可以是

$$\begin{aligned} H^* &= \omega(p_1^* + \cdots + p_m^*), \\ \phi^* &= q_1^* + \cdots + q_m^*, \end{aligned} \tag{20}$$

也可以是

$$\begin{aligned} H^* &= p_1^* + \cdots p_m^*, \\ \phi^* &= \omega(q_1^* + \cdots + q_m^*). \end{aligned} \tag{21}$$

(20)式中的 H^* 若取成 p_k^* 的平方和(动能和),则只要将 ϕ^* 作相应的修正也能满足方程(19)式.

4 化动量正则变换

接下来的问题是寻找这种将所有广义坐标变换成可遗坐标的正则变换. 通常的做法是利用 Pfaff 方程找出母函数 F[15],但事实证明这种做法困难重重,往往是行不通的. 本文所要介绍的方法类似于 Hamilton-Jacobi 理论,区别在于 Hamilton-Jacobi 理论中用的是'化零正则变换'[15],而本文用的则是"化动量正则变换".

考虑第二类正则变换的 Pfaff 方程

$$p_k \mathrm{d}q_k + q_k^* \mathrm{d}p_k^* - (H - H^*)\mathrm{d}t = \mathrm{d}F_2(q_k, p_k^*, t) \tag{22}$$

及变换公式

$$p_k = \frac{\partial F_2}{\partial q_k}, \quad q_k^* = \frac{\partial F_2}{\partial p_k^*}, \quad H^* = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}, \tag{23}$$

适当选择

$$F_2 = \tilde{S}(q_k, p_k^*, t) \tag{24}$$

使

$$H^* = c_k p_k^*, \tag{25}$$

则由(23)式有

$$p_k = \frac{\partial \tilde{S}}{\partial q_k}, \quad q_k^* = \frac{\partial \tilde{S}}{\partial p_k^*}, \quad \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + H = c_k p_k^*, \tag{26}$$

式中 $\tilde{S}$ 不是 Hamilton 作用量,c_k 为非全为零的常量."化动量正则变换'之称得自(25)式.

由新的正则方程

$$\begin{aligned} \dot{q}_k^* &= \frac{\partial H^*}{\partial p_k^*} = \frac{\partial(c_l p_l^*)}{\partial p_k^*} = c_k, \\ \dot{p}_k^* &= -\frac{\partial H^*}{\partial q_k^*} = -\frac{\partial(c_l p_l^*)}{\partial q_k^*} = 0, \end{aligned} \tag{27}$$

有

$$\begin{aligned} p_k^* &= \alpha_k, \\ q_k^* &= c_k t + \beta_k, \end{aligned} \tag{28}$$

式中 α_k,β_k 为积分常数.

将(28)式代入(24)式,有

$$F_2 = \tilde{S}(q_k, \alpha_k, t). \tag{29}$$

从(26)式中的第三个方程和第一个方程及(28)式的第一式,可得关于 $\tilde{S}$ 的方程为

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + H\left(q_k, \frac{\partial \tilde{S}}{\partial q_k}, t\right) = c_k \alpha_k. \tag{30}$$

对稳定势场问题而言,

$$H = E, \tag{31}$$

可使方程(30)式得以简化. 注意到此时(26)式的第三个方程是

$$-\frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} = E - c_k \alpha_k, \tag{32}$$

而它的积分式是

$$\tilde{S} = -(E - c_k \alpha_k)t + W(q_k, \alpha_k), \tag{33}$$

将(33)式代入方程(30)式,便有

$$H\left(q_k, \frac{\partial W}{\partial q_k}\right) = E, \tag{34}$$

这正好与通常的定态 Hamilton-Jacobi 方程一样,而 W 也正好就是 Maupertuis 作用量.

必须指出的是,在本文所引入的'化动量正则变换'中,对稳定势场来说,Hamilton-Jacobi 方程(34)式中的 E 可直接写成 $H^* = c_k p_k^*$,即

$$H\left(q_k, \frac{\partial W}{\partial q_k}\right) = c_k p_k^*. \tag{35}$$

由方程(35)式及变换公式

$$c_k p_k^* = H,$$

$$q_k^* = \frac{\partial W}{\partial p_k^*} \tag{36}$$

可以方便地求得‘化动量正则变换”.

5 “重力’势系统 Liouville 方程的精确解

作为上述理论的第一个应用或算例,首先讨论“重力’势系统 Liouville 方程的精确解. 在此系统中, Hamiltonian 为

$$H = \frac{1}{2\mu}p^2 + \mu g q, \tag{37}$$

相应的 Hamilton-Jacobi 方程为

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}q}\right)^2 + \mu g q = E, \tag{38}$$

故

$$W = \int \sqrt{2\mu(E - \mu g q)}\,\mathrm{d}q. \tag{39}$$

若

$$H^* = H = p^*, \tag{40}$$

则

$$p^* = \frac{1}{2\mu}p^2 + \mu g q. \tag{41}$$

而(39)式成为

$$W = \int \sqrt{2\mu(p^* - \mu g q)}\,\mathrm{d}q. \tag{42}$$

由

$$q^* = \frac{\partial W}{\partial p^*} = \int \frac{\mu\,\mathrm{d}q}{\sqrt{2\mu(p^* - \mu g q)}}, \tag{43}$$

可得

$$q^* = -\frac{1}{\mu g}\sqrt{2\mu(p^* - \mu g q)}. \tag{44}$$

将(41)代入(44)式,便得到‘化动量正则变换”为

$$\begin{aligned} p^* &= \frac{1}{2\mu}p^2 + \mu g q, \\ q^* &= -\frac{p}{\mu g}, \end{aligned} \tag{45}$$

式中 μ 为粒子的质量, g 为重力加速度. 此正则变换与教科书中陈述的完全一样.

将此结果推广至 m 个自由度,并相继代入(21),(16),(11),(10)和(8)式,得到

$$f = n\left(\frac{\mu}{2\pi k_{\mathrm{B}}T}\right)^{m/2}\exp\left[-m\omega t - \frac{\omega}{\mu g}(p_1 + \cdots + p_m) - \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\left(\frac{1}{2\mu}p_k p_k + \mu g q_1 + \cdots + \mu g q_m\right)\right], \tag{46}$$

其系数 $n\left(\frac{\mu}{2\pi k_{\mathrm{B}}T}\right)^{m/2}$ 由常数 A 转化而来,是 $t=0$ 时(即初始时刻) $V(q_k)=0$ 处(即平衡位置处)的归一化条件所必需的,它当然等于 Maxwell 解的系数(条件是 在一般情况和本文中,动能为 $\frac{1}{2\mu}p^2$),式中 n 为粒子数密度[10].

6 谐振系统 Liouville 方程的精确解

作为上述理论的第二个应用和算例,其次讨论谐振系统 Liouville 方程的精确解. 在此系统中, Hamiltonian 为

$$H = \frac{1}{2\mu}p^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 q^2, \tag{47}$$

相应的 Hamilton-Jacobi 方程为

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}q}\right)^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 q^2 = E, \tag{48}$$

故

$$W = \int \sqrt{2\mu\left(E - \frac{1}{2}\mu\omega^2 q^2\right)}\,\mathrm{d}q. \tag{49}$$

若

$$H^* = H = p^*, \tag{50}$$

则

$$p^* = \frac{1}{2\mu}p^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 q^2, \tag{51}$$

而(49)式成为

$$W = \int \sqrt{2\mu\left(p^* - \frac{1}{2}\mu\omega^2 q^2\right)}\,\mathrm{d}q. \tag{52}$$

由

$$q^* = \frac{\partial W}{\partial p^*} = \int \frac{\mu\,\mathrm{d}q}{\sqrt{2\mu\left(p^* - \frac{1}{2}\mu\omega^2 q^2\right)}}, \tag{53}$$

可得

$$q^* = \frac{1}{\omega}\mathrm{tg}^{-1}\left[\frac{\sqrt{\frac{\mu}{2}}\,\omega q}{\sqrt{p^* - \frac{1}{2}\mu\omega^2 q^2}}\right]. \tag{54}$$

将(51)代入(54)式,便得到‘化动量正则变换”为

$$\begin{aligned} p^* &= \frac{1}{2\mu}p^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 q^2, \\ q^* &= \frac{1}{\omega}\mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{\mu\omega q}{p}\right). \end{aligned} \tag{55}$$

可看出,谐振系统和前文“重力”势系统中 Hamiltonian 的正则变换,是在任何一本分析力学教

科书的例题和习题中均可找到的，只不过在本文之前尚无人引入"化动量正则变换"的一般方法，尚无人意识到这种变换可用来求解 Liouville 方程罢了.

将此结果推广至 m 个自由度，并相继代入(21)，(16)，(11)，(10)和(8)式，得到

$$f = n\left(\frac{\mu}{2\pi k_{\rm B}T}\right)^{m/2}\exp\left[-m\omega t + \mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{\mu\omega q_1}{p_1}\right) + \cdots + \mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{\mu\omega q_m}{p_m}\right) - \frac{1}{k_{\rm B}T}\left(\frac{1}{2\mu}p_kp_k + \frac{1}{2}\mu\omega^2q_kq_k\right)\right]. \tag{56}$$

必须指出的是，Prigogine 在文献[3]中也注意到了谐振系统的正则变换公式，但他未能利用 Poisson 括号的正则不变性.

7　正负平方幂函数势系统 Liouville 方程的精确解

应用以上阐述的方法，现在简略地讨论其他几类系统 Liouville 方程的精确解. 在正负平方幂函数势系统中，Hamiltonian 为

$$H = \frac{1}{2\mu}p^2 + V_0\left(\frac{a}{q} - \frac{q}{a}\right)^2,\quad (q > 0). \tag{57}$$

其"化动量正则变换"可算得为

$$p^* = \frac{1}{2\mu}p^2 + V_0\left(\frac{a}{q} - \frac{q}{a}\right)^2,$$

$$q^* = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{\mu}{2V_0}}\cdot\mathrm{tg}^{-1}\left[\frac{\frac{1}{2\mu}p^2 + V_0\left(\frac{a}{q} - \frac{q}{a}\right)\left(\frac{a}{q} + \frac{q}{a}\right)}{\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}\left(\frac{q}{a}\right)p}\right]. \tag{58}$$

于是，相应的 Liouville 方程的精确解是

$$f = n\left(\frac{\mu}{2\pi k_{\rm B}T}\right)^{1/2}\exp\left\{-\omega t + \frac{\omega a}{2}\sqrt{\frac{\mu}{2V_0}}\cdot\mathrm{tg}^{-1}\left[\frac{\frac{1}{2\mu}p^2 + V_0\left(\frac{a}{q} - \frac{q}{a}\right)\left(\frac{a}{q} + \frac{q}{a}\right)}{\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}\left(\frac{q}{a}\right)p}\right] - \frac{1}{k_{\rm B}T}\left[\frac{1}{2\mu}p^2 + V_0\left(\frac{a}{q} - \frac{q}{a}\right)^2\right]\right\}, \tag{59}$$

其 m 维形式，同前面的讨论一样可以得到推广.

8　双曲函数势系统 Liouville 方程的精确解

双曲函数势系统的 Hamiltonian 为

$$H = \frac{1}{2\mu}p^2 - V_0\mathrm{sech}^2\left(\frac{q}{a}\right). \tag{60}$$

其"化动量正则变换"可算得为

$$p^* = \frac{1}{2\mu}p^2 - V_0\mathrm{sech}^2\left(\frac{q}{a}\right),$$

$$q^* = -a\sqrt{\frac{\frac{\mu}{2}}{\frac{1}{2\mu}p^2 - V_0\mathrm{sech}^2\left(\frac{q}{a}\right)}}\cdot\mathrm{th}^{-1}\left[\frac{\sqrt{\frac{1}{2\mu}p^2 - V_0\mathrm{sech}^2\left(\frac{q}{a}\right)}}{\sqrt{\frac{1}{2\mu}}p}\mathrm{th}\left(\frac{q}{a}\right)\right]. \tag{61}$$

于是，相应的 Liouville 方程的精确解是

$$f = n\left(\frac{\mu}{2\pi k_{\rm B}T}\right)^{1/2}\exp\left\{-\omega t - \omega a\sqrt{\frac{\frac{\mu}{2}}{\frac{1}{2\mu}p^2 - V_0\mathrm{sech}^2\left(\frac{q}{a}\right)}}\cdot\mathrm{th}^{-1}\left[\sqrt{\frac{1}{2\mu}p^2 - V_0\mathrm{sech}^2\left(\frac{q}{a}\right)}\frac{\mathrm{th}\left(\frac{q}{a}\right)}{\sqrt{\frac{1}{2\mu}}p}\right] - \frac{1}{k_{\rm B}T}\left[\frac{1}{2\mu}p^2 - V_0\mathrm{sech}^2\left(\frac{q}{a}\right)\right]\right\}. \tag{62}$$

其 m 维形式亦可由类似的推广得到.

9　三角函数势系统 Liouville 方程的精确解

三角函数势系统的 Hamiltonian 为

$$H = \frac{1}{2\mu}p^2 + V_0\mathrm{ctg}^2\left(\frac{\pi}{a}q\right),\quad (0 < q < a). \tag{63}$$

其"化动量正则变换"可算得为

$$p^* = \frac{1}{2\mu}p^2 + V_0\mathrm{ctg}^2\left(\frac{\pi}{a}q\right),$$

$$q^{*}=\left(\frac{a}{\pi}\right)\sqrt{\frac{\mu}{\frac{1}{2\mu}p^{2}+V_{0}\operatorname{cosec}^{2}\left(\frac{\pi}{a}q\right)}}$$

$$\cdot\operatorname{tg}^{-1}\left[\sqrt{\frac{1}{2\mu}p^{2}+V_{0}\operatorname{cosec}^{2}\left(\frac{\pi}{a}q\right)}\frac{\operatorname{ctg}\left(\frac{\pi}{a}q\right)}{\sqrt{\frac{1}{2\mu}}p}\right].\tag{64}$$

于是,相应的 Liouville 方程的精确解是

$$f=n\left(\frac{\mu}{2\pi k_{\mathrm{B}}T}\right)^{1/2}\exp\left\{-\omega t+\left(\frac{\omega a}{\pi}\right)\sqrt{\frac{\mu}{\frac{1}{2\mu}p^{2}+V_{0}\operatorname{cosec}^{2}\left(\frac{\pi}{a}q\right)}}\cdot\operatorname{tg}^{-1}\left[\sqrt{\frac{p^{2}}{2\mu}+\frac{V_{0}}{\sin^{2}\left(\frac{\pi}{a}q\right)}}\frac{\operatorname{ctg}\left(\frac{\pi}{a}q\right)}{\sqrt{\frac{1}{2\mu}}p}\right]-\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\left[\frac{1}{2\mu}p^{2}+V_{0}\operatorname{ctg}^{2}\left(\frac{\pi}{a}q\right)\right]\right\}.\tag{65}$$

其 m 维形式亦可由类似的推广得到.

10 Pöschl-Teller 势系统 Liouville 方程的精确解

Pöschl-Teller 势系统的 Hamiltonian 为

$$H=\frac{1}{2\mu}p^{2}+\frac{1}{2}V_{0}\left(\frac{a}{\sin^{2}\alpha q}+\frac{b}{\cos^{2}\alpha q}\right).\tag{66}$$

其'化动量正则变换'可算得为

$$p^{*}=\frac{1}{2\mu}p^{2}+\frac{1}{2}V_{0}\left(\frac{a}{\sin^{2}\alpha q}+\frac{b}{\cos^{2}\alpha q}\right),$$

$$q^{*}=-\frac{1}{2\alpha}\sqrt{\frac{\frac{\mu}{2}}{\frac{1}{2\mu}p^{2}+\frac{1}{2}V_{0}\left(\frac{a}{\sin^{2}\alpha q}+\frac{b}{\cos^{2}\alpha q}\right)}}\cdot\operatorname{tg}^{-1}\left[\sqrt{\frac{\frac{\mu}{2}}{\frac{1}{2\mu}p^{2}+\frac{1}{2}V_{0}\left(\frac{a}{\sin^{2}\alpha q}+\frac{b}{\cos^{2}\alpha q}\right)}}\cdot\left(\left(\frac{p^{2}}{2\mu}+\frac{V_{0}b}{2\cos^{2}\alpha q}\right)\frac{\operatorname{tg}\alpha q}{p}-\left(\frac{p^{2}}{2\mu}+\frac{V_{0}a}{2\sin^{2}\alpha q}\right)\cdot\frac{\operatorname{ctg}\alpha q}{p}\right)\right].\tag{67}$$

于是,相应的 Liouville 方程的精确解是

$$f=n\left(\frac{\mu}{2\pi k_{\mathrm{B}}T}\right)^{1/2}\exp\left\{-\omega t-\frac{\omega}{2\alpha}\sqrt{\frac{\frac{\mu}{2}}{\frac{1}{2\mu}p^{2}+\frac{1}{2}V_{0}\left(\frac{a}{\sin^{2}\alpha q}+\frac{b}{\cos^{2}\alpha q}\right)}}\cdot\operatorname{tg}^{-1}\left[\sqrt{\frac{\frac{\mu}{2}}{\frac{p^{2}}{2\mu}+\frac{V_{0}}{2}\left(\frac{a}{\sin^{2}\alpha q}+\frac{b}{\cos^{2}\alpha q}\right)}}\cdot\left(\left(\frac{p^{2}}{2\mu}+\frac{V_{0}b}{2\cos^{2}\alpha q}\right)\frac{\operatorname{tg}\alpha q}{p}-\left(\frac{p^{2}}{2\mu}+\frac{V_{0}a}{2\sin^{2}\alpha q}\right)\frac{\operatorname{ctg}\alpha q}{p}\right)\right]-\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\left[\frac{1}{2\mu}p^{2}+\frac{1}{2}V_{0}\left(\frac{a}{\sin^{2}\alpha q}+\frac{b}{\cos^{2}\alpha q}\right)\right]\right\}.\tag{68}$$

其 m 维形式亦可由类似的推广得到.

11 "引(斥)力"势系统 Liouville 方程的精确解

二维(平面)"引(斥)力"势系统的 Lagrangian 为

$$L=\frac{1}{2}\mu(\dot{r}^{2}+r^{2}\dot{\theta}^{2})+\frac{a}{r},\tag{69}$$

式中 r 为矢径,$\dot{r}=\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}$,$\theta$ 为极角,a 为任意常数. 由于 r 出现在势能项的分母中,因此求解该系统 Liouville 方程决非易事. 在这里,需要用到 Newton 力学中的 Binet 方法和分析力学中的 Routh 方法.

由于 θ 为可遗坐标,故有

$$\mu r^{2}\dot{\theta}=J_{0},\tag{70}$$

式中 $\dot{\theta}=\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}$,$J_0$ 为常数. 用 Routh 方法,引入"引(斥)力"势系统的 Routhian R:

$$R=\dot{\theta}\frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}}-L=-\frac{1}{2}\mu\dot{r}^{2}+\frac{J_{0}^{2}}{2\mu r^{2}}-\frac{a}{r}.\tag{71}$$

必须立即指出,三维"引(斥)力"势系统的 Routhian 与(71)式完全一样(在三维问题中,可将 $\sqrt{\dot{\theta}^{2}+\dot{\varphi}^{2}\sin^{2}\theta}$ 视为一广义速度,其中 θ,φ 为角坐

标，$\dot{\varphi}=\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$），因此（71）式适用于任何轴对称或球对称系统.

此 Routhian 只有一个自由度，用 Binet 方法，设广义坐标为

$$q = \frac{1}{r}, \tag{72}$$

将（72）代入（70）式，有

$$\dot{\theta} = \frac{J_0}{\mu}q^2, \tag{73}$$

而

$$\dot{r} = -\frac{J_0}{\mu}\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right). \tag{74}$$

因而，Routhian（71）式可改写成

$$R = -\frac{J_0^2}{2\mu}\left[\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right)^2 - q^2\right] - aq. \tag{75}$$

从分析力学可知，Routhian 服从 Euler-Lagrange 方程（7）式，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\frac{\partial R}{\partial\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right)} - \frac{\partial R}{\partial q} = 0. \tag{76}$$

可以验证，将（75）代入方程（76）式，便得到 Binet 方程（或称为‘Binet 公式’）.

由方程（76）式可得到与 R 相对应的广义能量积分或‘Hamiltonian ”$\widetilde{H}$：

$$\widetilde{H} = -\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right)\frac{\partial R}{\partial\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right)} + R, \tag{77}$$

式中 $\widetilde{H}$ 满足‘正则方程’（6）式，而且‘广义动量’为

$$p = \frac{\partial R}{\partial\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right)}. \tag{78}$$

将（75），（78）式代入（77）式，得到

$$\widetilde{H} = \frac{\mu}{2J_0^2}p^2 + \frac{J_0^2}{2\mu}q^2 - aq \tag{79a}$$

或

$$\widetilde{H} = \frac{\mu}{2J_0^2}p^2 + \frac{J_0^2}{2\mu}\left(q - \frac{\mu}{J_0^2}a\right)^2 - \frac{\mu}{2J_0^2}a^2. \tag{79b}$$

仿照谐振系统中的‘化动量正则变换”，得

$$\begin{aligned} p^* &= \frac{\mu}{2J_0^2}p^2 + \frac{J_0^2}{2\mu}\left(q - \frac{\mu}{J_0^2}a\right)^2, \\ q^* &= \mathrm{tg}^{-1}\left[\frac{J_0\left(q - \frac{\mu}{J_0^2}a\right)}{\mu p}\right]. \end{aligned} \tag{80}$$

于是，相应的 Liouville 方程的精确解是

$$f = n\left(\frac{\mu}{2\pi k_\mathrm{B}T}\right)^{1/2}\exp\left[-\theta + \mathrm{tg}^{-1}\left\{\frac{J_0^2\left(q - \frac{\mu}{J_0^2}a\right)}{\mu p}\right\} - \frac{1}{k_\mathrm{B}T}\left(\frac{\mu}{2J_0^2}p^2 + \frac{J_0^2}{2\mu}q^2 - aq\right)\right]. \tag{81}$$

注意式中

$$p = -\frac{J_0}{\mu}\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right), \quad q = \frac{1}{r}. \tag{82}$$

12 Kratzer 势系统 Liouville 方程的精确解

Kratzer 势系统与‘引（斥）力’势系统是类似的，因而相应的 Liouville 方程的解法也类似. 二维 Kratzer 势系统的 Lagrangian 为

$$L = \frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) + 2V_0\left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2}\frac{a^2}{r^2}\right). \tag{83}$$

对应的二维或三维 Kratzer 势系统的 Routhian 都是

$$R = -\frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{J_0^2}{2\mu r^2} - 2V_0\left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2}\frac{a^2}{r^2}\right) \tag{84}$$

或

$$R = -\frac{J_0^2}{2\mu}\left[\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right)^2 - q^2\right] - 2V_0\left(aq - \frac{1}{2}a^2q^2\right). \tag{85}$$

它所对应的 Hamiltonian 为

$$\widetilde{H} = \frac{\mu}{2J_0^2}p^2 + \left(\frac{J_0^2}{2\mu} + V_0a^2\right)\left[q - \frac{V_0a}{\frac{J_0^2}{2\mu} + V_0a^2}\right]^2 - \frac{V_0^2a^2}{\frac{J_0^2}{2\mu} + V_0a^2}. \tag{86}$$

其‘化动量正则变换’为

$$\begin{aligned} p^* &= \frac{\mu}{2J_0^2}p^2 + \left(\frac{J_0^2}{2\mu} + V_0a^2\right)\left[q - \frac{V_0a}{\frac{J_0^2}{2\mu} + V_0a^2}\right]^2, \\ q^* &= \frac{1}{\sqrt{1 + V_0a^2\left(\frac{2\mu}{J_0^2}\right)}}\mathrm{tg}^{-1}\left[\frac{J_0^2}{\mu}\sqrt{1 + V_0a^2\left(\frac{2\mu}{J_0^2}\right)} \cdot \frac{\left[q - \frac{V_0a}{\frac{J_0^2}{2\mu} + V_0a^2}\right]}{p}\right]. \end{aligned} \tag{87}$$

于是相应的 Liouville 方程的精确解是

$$f = n\left(\frac{\mu}{2\pi k_\mathrm{B}T}\right)^{1/2}\exp\left\{-\theta + \frac{1}{\sqrt{1 + V_0a^2\left(\frac{2\mu}{J_0^2}\right)}}\right.$$

$$\cdot \operatorname{tg}^{-1}\left[\frac{J_0^2}{\mu}\sqrt{1+V_0a^2\left(\frac{2\mu}{J_0^2}\right)}\ \frac{\left(q-\dfrac{V_0a}{\dfrac{J_0^2}{2\mu}+V_0a^2}\right)}{p}\right]\Bigg]$$

$$-\frac{1}{k_\mathrm{B}T}\left[\frac{\mu}{2J_0^2}p^2+\left(\frac{J_0^2}{2\mu}+V_0a^2\right)\right.$$

$$\left.\cdot\left(q-\frac{V_0a}{\dfrac{J_0^2}{2\mu}+V_0a^2}\right)^2-\frac{V_0^2a^2}{\dfrac{J_0^2}{2\mu}+V_0a^2}\right]\Bigg\}, \tag{88}$$

式中

$$p=-\frac{J_0}{\mu}\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\theta}\right),\quad q=\frac{1}{r}. \tag{89}$$

13 结论和讨论

(1) 从与文献资料的比较中可看出,本文所得到的八类系统 Liouville 方程的精确解,是一种全面满足 Liouville 方程,含有特解部分的通解,其显式是首次报道.而 Maxwell 解只是一个平凡解.这些精确解的形式,除"重力"势系统外,其余都与通常统计力学教科书中的定性描述有很大不同.对这些精确解的应用,必有一番探索.

(2) 从求解过程中可看出,本文的关键之处是利用 Poisson 括号的正则不变性,并从"化动量正则变换"着手,将广义坐标转变为可遗坐标等诸多分析力学技巧.原则上讲,"化动量正则变换"总是可以进行的,只要问题是可解的便成.这样说,并非要否认在特殊的问题中必须采用特殊的手段.例如,在最后两类系统中,为了使问题得到简化易于讨论,本文还应用了 Routh 方法和 Binet 方法.本文中所使用的方法,在其他未涉及的系统的 Liouville 方程精确解的求解过程中也适用.

(3) 与"化动量正则变换"相类似的,还可以提出一种所谓"化动能正则变换".为此,可将(25)式改写为

$$H^*=\frac{1}{2}p_k^*p_k^*, \tag{90}$$

则(26)式成为

$$p_k=\frac{\partial\tilde{S}}{\partial q_k},\quad q_k^*=\frac{\partial\tilde{S}}{\partial p_k^*},$$

$$H+\frac{\partial\tilde{S}}{\partial t}=\frac{1}{2}p_k^*p_k^*, \tag{91}$$

而(27)式则成为

$$\dot{q}_k^*=\frac{\partial H^*}{\partial p_k^*}=p_k^*,$$

$$\dot{p}_k^*=-\frac{\partial H^*}{\partial q_k^*}=0. \tag{92}$$

从而,(30),(32)和(33)式分别变成

$$\frac{\partial\tilde{S}}{\partial t}+H\left(q_k,\frac{\partial\tilde{S}}{\partial q_k},t\right)=\frac{1}{2}p_k^*p_k^*=\frac{1}{2}\alpha_k\alpha_k, \tag{93}$$

$$-\frac{\partial\tilde{S}}{\partial t}=E-\frac{1}{2}\alpha_k\alpha_k, \tag{94}$$

$$\tilde{S}=-\left(E-\frac{1}{2}\alpha_k\alpha_k\right)t+W(q_k,\alpha_k). \tag{95}$$

将(95)式代入方程(93)式,便有

$$H\left(q_k,\frac{\partial W}{\partial q_k}\right)=E. \tag{96}$$

它仍旧与通常的定态 Hamilton-Jacobi 方程一样,而 W 也仍旧正好就是 Maupertuis 作用量.

(4) 在求取平凡解(14)式的过程中,也许会有人产生疑惑:既然此平凡解不显含时间,那么任何 $f=f(H)$ 都可能是方程(1)式的平凡解,为何独独选中(14)式?实际上,此举是有着物理上的考虑的.其动机有二:一是此解必须具有同具体的精确特解(由(45),(55),(58),(61),(64),(67),(80)和(87)式代入(20)或(21)式得到)一样的指数函数形式;二是此解必须同 Maxwell 解(也是指数函数形式)相协调,必须涵盖 Maxwell 解.从这一物理考虑出发,取(14)式作为平凡解是合理的;而且,应当认为,对求取 Liouville 方程的平凡解来说,方程(12)式要比 $[H,f]=0$ 来得更为基本.

(5) 与上一问题相关的,是(13)式中待定常数 B 为何取为 $\left(-\frac{1}{k_\mathrm{B}T}\right)$ 的问题.根据"ϕ_0 必须为无量纲"的考虑,H 必须除以单位能量($k_\mathrm{B}T$);根据"无穷远'边界'处分布函数 f 必须趋于零"的考虑,B 必须取负值.应该指出的是,"单位能量"($k_\mathrm{B}T$)前,本来是有一个系数(如 1/2,1,3/2 等),但与 Maxwell 解比较后就可发现,此系数必等于 1.当然,这种推导不十分严格,它必须经常参照 Maxwell 解.

(6) 从这八类精确解中可看出,尤其是在"重力"势系统 Liouville 方程精确解(46)式中看得更清楚:若将特解中的动量 p 归纳到 Maxwell 解的动能项中去,便有"加速"和"加温"两种效应产生.由此可知,外场(不仅是 Vlasov 方程中的电磁场)对分布函数有着明显的影响.这也正是人们对 Maxwell 解不甚放心的原因.

(7) Liouville 方程是一个“时间可逆”的运动方程[16]，但并不能说时间可逆的方程的解(尤其是特解)就一定是时间可逆的. 本文中的解，在经过一段相当长的时间后会趋于某一常数(实际上，根据 Liouville 方程的线性特点，由(45)，(55)，(58)，(61)，(64)，(67)，(80)和(87)代入(20)或(21)式得到的精确解，亦可与 Maxwell 解直接线性相加. 在此形式下，严格说来，当时间趋于无穷时，Liouville 方程的精确解不是趋于某一常数，而是趋于 Maxwell 分布)，这种机理，与 Landau 阻尼的机理有类似之处. 至于 Liouville 方程为何会有时间不可逆的解，究其原因，是由于 Hamiltonian 的特定形式、特定结构决定的，极而言之，是由势能函数的形式和结构决定的.

(8) 本文的实质可以同样用来处理等离子体 Vlasov 方程，在 Vlasov 方程的精确解中，将出现真正的 Landau 阻尼.

(9) 因为 Liouville 方程就是无碰撞项的 Boltzmann 方程，所以本文的结果可用作相应系统 Boltzmann 方程解析解的一级近似. 同样，由于 Liouville 方程与 BBGKY 方程链之间的关系，所以本文的结果对讨论 BBGKY 方程链也十分有用.

(10) 若分离时间因子的(8)式改为

$$f = \rho(p_k, q_k)\exp(-\mathrm{i}m\omega t), \tag{97}$$

则 Liouville 方程的精确解将成为波函数解，而不必考虑其“不可逆性”. 对这种条件下的“定态解”，可不必在乎 Maxwell 解(平凡解可略去).

(11) 因为量子力学与经典统计力学，Schrödinger 方程与 Liouville 方程之间有着 Ballentine 所说的对应关系，所以对同一系统的量子分布函数与经典分布函数之间的比较，可用来确定有没有、有多少量子效应的问题.

[1] 吴大猷，热力学、气体运动论及统计力学，科学出版社，(1983) [Wu Ta-you, Thermodynamics, Kinetic Theory of Gases and Statistical Mechanis, Lien-King Publ. Co., (1978) (in Chinese)].

[2] Wu Ta-you, Kinetic Equations of Gases and Plasmas, Addison-Wesley, (1966).

[3] I. Prigogine, Non-equilibrium Statistical Mechanics, Interscience, (1962).

[4] L. de Broglie, Une Tentative d'Interprétation Causale et Non Linéaire de la Mécanique Ondulatoire, Gauthier-Villars (1956).

[5] L. E. Ballentine, Quantum Mechanis, Prentice-Hall. Inc., (1990).

[6] Liu Quan-hui, *Acta Physica Sinica*, **42** (4) (1993), 522 (in Chinese).

[7] Huang Xiang-you, *Acta Physica Sinica*, **45** (5) (1996), 729 (in Chinese).

[8] Huang Xiang-you, *Science in China*, **23** (10) (1992), 1065 (in Chinese).

[9] D. ter Haar, Elements of Statistical Mechanics, Rinehart, (1955).

[10] Wang Zu-xi, Introduction to Statistical Mechanias, People-education Publishing House (1956) (in Chinese).

[11] Su Ru-keng, Quantum Mechanics, Press of Fudan University (1997) (in Chinese).

[12] Shen Hui-chuan, Exact solution of Vlasov equation, *Acta Mathematica Scientia*, **16** (1) (1996), 40 (in Chinese).

[13] 吴大猷，古典动力学(科学出版社，1983) [Wu Ta-you, Classical Dynamics: Lagrargian and Hamiltonian Dynamics, Lien-King Publ. Co., (1977) (in Chinese)].

[14] H. Goldstein, Classical Mechanics (2nd ed.), Addison-Wesley (1980).

[15] Mei Feng-xiang, Higher Analytical-Mechanics, Press of Beijing Institute of Technology (1991) (in Chinese).

[16] 吴大猷，吴大猷科学哲学文集，社会科学文献出版社(1996) [Wu Ta-you, Science-Philosophy Collected Works of Professor Ta-you Wu, Press of Social Science Document (1996) (in Chinese)].

EIGHT EXACT SOLUTIONS FOR LIOUVILLE EQUATION

SHEN HUI-CHUAN

(*Department of Astronomy and Applied Physics, Center for Statistical Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei* 230026)

(Received 24 March 1999; revised manuscript received 3 June 1999)

ABSTRACT

By means of a canonical transformation technique for changing the Hamiltonian into a generalized momentum, exact solutions of Liouville equation have been obtained for systems in the following force fields or potentials: 1) the constant force field, 2) linear restoring force field, 3) square plus inverse-square function potential, 4) hyperbolic function potential, 5) trigonometric function potential, 6) Pöschl-Teller potential, 7) Coulomb potential, and 8) the Kratzer potential.

PACC: 0520; 0540