МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИБОРОСТРОЕНИИ

УДК 531.32, 531.011, 537.533.7, 533.534.7

© **А. С. Бердников, С. В. Масюкевич, Ю. И. Хасин, М. И. Явор,** 2024

О ГАМИЛЬТОНОВОМ ФОРМАЛИЗМЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ОПТИКИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

В статье рассматриваются особенности применения гамильтоновой формы уравнений движения для решения задач оптики заряженных частиц. Анализируются некоторые неочевидные следствия, вытекающие из использования интегрального инварианта Пуанкаре – Картана. Показано, что возможно использовать уравнения движения в гамильтоновой форме для описания движения заряженных частиц в локальной системе координат, сопровождающей центральную траекторию, в том числе и тогда, когда в качестве независимой переменной используется длина базовой траектории.

Кл. сл.: уравнения движения в гамильтоновой форме, общие вопросы оптики заряженных частиц, аберрационные коэффициенты, симплектические соотношения, аналитическая динамика

ВВЕДЕНИЕ

Уравнения движения, записанные в гамильтоновой форме, обеспечивают математически элегантный вид формул и позволяют прийти к неочевидным выводам, следующим из фундаментальных результатов аналитической динамики [1–4]. Однако для задач оптики заряженных частиц, которая, как правило, имеет дело с узкими пучками ионов и электронов, такая форма уравнений движения не слишком удобна [5, 6] отчасти в связи с использованием времени в качестве независимой переменной. В то же время фундаментальные выводы, следующие из гамильтоновой формы уравнений движения, слишком ценны, чтобы так просто от них отказываться. В данной работе рассматривается компромиссный подход, при котором гамильтонов формализм удается сохранить для движения заряженных частиц в локальной системе координат, сопровождающей центральную траекторию. Уровень изложения ориентирован на студентов технических вузов и специалистов, практически занимающихся задачами оптики заряженных частиц, а не на физиков-теоретиков либо профессионалов-математиков.

Уравнения движения, записанные в гамильтоновой форме, определяются следующими характерными особенностями. Механическая система характеризуется $2n$ параметрами p_i, q_i $(i = 1, 2, ..., n)$, изменение которых во времени описывается динамическими уравнениями

$$\dot{q}_i(t) = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \ \dot{p}_i(t) = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \tag{1}$$

где $H(p_i, q_i, t)$ — некоторая функция (гамильтониан), характеризующая рассматриваемую систему. Переменные q_i называются обобщенными координатами, а переменные p_i — обобщенными импульсами, хотя различие между ними достаточно условно [2, 3]. Например, при подстановке $\tilde{p}_i = q_i$, $\tilde{q}_i = p_i$, $\tilde{H}(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, t) = -H(\tilde{q}_i, \tilde{p}_i, t)$ (что является каноническим преобразованием, сохраняющим гамильтонову форму динамических уравнений [2]) обобщенные координаты становятся обобщенными импульсами, обобщенные импульсы становятся обобщенными координатами, однако гамильтонова симметрия (1) для динамических уравнений, описывающих поведение системы, очевидным образом сохраняется.

Для нерелятивистских уравнений движения, описывающих в рамках ионной оптики движение заряженных частиц (ионов) под воздействием внешних электрических и магнитных полей, гамильтониан определяется формулой [7, 8]

$$H = \frac{1}{2m}\left(p - \frac{e}{c}A_X(x, y, z, t)\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(q - \frac{e}{c}A_Y(x, y, z, t)\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(r - \frac{e}{c}A_Z(x, y, z, t)\right)^2 + eU(x, y, z, t). \tag{2}$$

Здесь m — масса иона; e — электрический заряд иона; x, y, z — декартовы координаты, играющие роль обобщенных координат. Обобщенные импульсы p, q, r связаны со скоростями $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$, координатами x, y, z и временем t соотношениями

$$\begin{aligned} p &= m\dot{x} + \frac{e}{c} A_X\left(x, y, z, t\right), \\ q &= m\dot{y} + \frac{e}{c} A_Y\left(x, y, z, t\right), \\ r &= m\dot{z} + \frac{e}{c} A_Z\left(x, y, z, t\right). \end{aligned} \tag{3}$$

Вектор-функция $\mathbf{A}\left(x, y, z, t\right) = \left(A_X, A_Y, A_Z\right)$ — векторный потенциал, связанный с индукцией магнитного поля $\mathbf{B}\left(x, y, z, t\right) = \left(B_X, B_Y, B_Z\right)$ соотношением

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{A}.$$

Функция $U\left(x, y, z, t\right)$ — скалярный потенциал, связанный с напряженностью электрического поля $\mathbf{E}\left(x, y, z, t\right) = \left(E_X, E_Y, E_Z\right)$ соотношением

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad} U - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla U - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}.$$

После элементарных преобразований гамильтоновы уравнения (1) с гамильтонианом (2) приобретают вид классических нерелятивистских уравнений движения заряженной частицы в электрическом и магнитном полях, использующих гауссову систему единиц СГСЕ [7]:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= eE_X + \frac{e}{c}\left(\dot{y}B_Z - \dot{z}B_Y\right), \\ m\ddot{y} &= eE_Y + \frac{e}{c}\left(-\dot{x}B_Z + \dot{z}B_X\right), \\ m\ddot{z} &= eE_Z + \frac{e}{c}\left(\dot{x}B_Y - \dot{y}B_X\right). \end{aligned} \tag{4}$$

В векторных обозначениях уравнения движения (4) выглядят следующим образом:

$$m\ddot{\boldsymbol{\rho}} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}\left(\dot{\boldsymbol{\rho}} \times \mathbf{B}\right),$$

где $\boldsymbol{\rho}\left(t\right) = \left(x\left(t\right), y\left(t\right), z\left(t\right)\right)$ — радиус-вектор, определяющий положение заряженной частицы в пространстве в момент времени t в выбранной декартовой системе координат; $\dot{\boldsymbol{\rho}}\left(t\right) = \left(\dot{x}\left(t\right), \dot{y}\left(t\right), \dot{z}\left(t\right)\right)$ — скорость частицы в момент времени t. Напряженность электрического поля $\mathbf{E}\left(\boldsymbol{\rho}, t\right)$ и индукция магнитного поля $\mathbf{B}\left(\boldsymbol{\rho}, t\right)$ были определены ранее с помощью скалярного и векторного потенциалов, которые для гамильтоновых уравнений движения становятся первичными характеристиками электромагнитного поля.

Далее уравнения движения ионов в имеющихся электрическом и магнитном полях будут рассматриваться в общем виде (1) с n обобщенными импульсами p_i, n обобщенными координатами q_i и абстрактным гамильтонианом $H\left(p_i, q_i, t\right)$, хотя прикладное значение получаемых результатов для оптики заряженных частиц будет постоянно иметься в виду.

1. ИНТЕГРАЛЬНЫЙ ИНВАРИАНТ ПУАНКАРЕ

Для гамильтоновых систем существует специфический закон сохранения — абсолютный интегральный инвариант Пуанкаре [2–4, 9–11]. В дифференциальной форме он имеет вид

$$S\left(t\right) = \sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}p_k, \mathrm{d}q_k\right] = \text{const}, \tag{5}$$

где квадратные скобки обозначают внешнее произведение дифференциалов (подробнее о внешнем произведении и внешнем дифференцировании см. [12, 13]). В выражении (5) дифференцирование осуществляется по свободным параметрам ε_j, от которых зависят траектории динамической системы, но не гамильтонова функция:

$$\begin{aligned} & p_k\left(t\right) = p_k\left(t; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right),\ q_k\left(t\right) = q_k\left(t; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right), \\ & \mathrm{d}p_k = \frac{\partial p_k\left(t; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right)}{\partial \varepsilon_1}\mathrm{d}\varepsilon_1 + \frac{\partial p_k\left(t; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right)}{\partial \varepsilon_2}\mathrm{d}\varepsilon_2 + \ldots, \\ & \mathrm{d}q_k = \frac{\partial q_k\left(t; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right)}{\partial \varepsilon_1}\mathrm{d}\varepsilon_1 + \frac{\partial q_k\left(t; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right)}{\partial \varepsilon_2}\mathrm{d}\varepsilon_2 + \ldots \end{aligned} \tag{6}$$

В частном случае в качестве варьируемых параметров выступают начальные условия, в общем случае варьируемые параметры представляют собой функции от начальных условий. Возможность свободного выбора параметров, характеризующих начальные условия для уравнений движения, заметно облегчает работу по переходу от канонических гамильтоновых уравнений (1) к уравнениям оптики заряженных частиц, где начальные данные и траекторные функции должны иметь наглядный геометрический смысл.

Варьируемые параметры независимы друг от друга в том смысле, что порядок дифференцирования как по этим параметрам, так и по времени для функций p_k и q_k можно менять местами:

$$\frac{\partial}{\partial\varepsilon_i}\left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j}\right)=\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j}\left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon_i}\right),\;\; \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j}\right)=\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right).$$

В соответствии с правилами внешнего произведения дифференциалов, произведение сумм преобразуется в сумму произведений (с сохранением порядка множителей), недифференциальные множители при дифференциалах выносятся за квадратные скобки внешнего произведения, а само внешнее произведение элементарных дифференциалов антисимметрично: $\left[\mathrm{d}\varepsilon_i,\mathrm{d}\varepsilon_j\right]=$ $=-\left[\mathrm{d}\varepsilon_j,\mathrm{d}\varepsilon_i\right]$.

При подстановке дифференциалов (6) в выражение (5) с учетом возможности вынесения недифференциальных множителей за скобки и свойства антисимметричности внешнего произведения $\left[\mathrm{d}\varepsilon_i,\mathrm{d}\varepsilon_j\right]=-\left[\mathrm{d}\varepsilon_j,\mathrm{d}\varepsilon_i\right]$ получаем:

$$S(t)=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}p_k,\mathrm{d}q_k\right]=\sum_{k=1,n}\left[\sum_i\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\mathrm{d}\varepsilon_i,\sum_j\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j\right]=$$

$$=\sum_{k=1,n}\left(\sum_{i,j}\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}\left[\mathrm{d}\varepsilon_i,\mathrm{d}\varepsilon_j\right]\right)=$$

$$=\sum_{i>j}\left(\sum_{k=1.n}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}\right)\left[\mathrm{d}\varepsilon_i,\mathrm{d}\varepsilon_j\right]\right).$$

Таким образом, инвариантная внешняя дифференциальная форма (5) распадается на совокупность инвариантных выражений, более привычных для практических вычислений:

$$S_{ij}(t)=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}\right)=\mathrm{const}, \tag{7}$$

где ε_i и ε_j — любая пара свободных параметров, от которых зависит рассматриваемый пучок траекторий $\left(p_k(t),q_k(t)\right)$, причем очевидным образом $S_{ij}(t)=-S_{ji}(t)$, $S_{ii}(t)=0$.

Для того, чтобы выражение (7) было инвариантом, гамильтониан H не должен зависеть от параметров ε_i и ε_j в явном виде, что не мешает ему зависеть от этих параметров опосредованно через зависимость от ε_i и ε_j обобщенных координат и импульсов. Тогда выражения (7) не зависят от времени. Действительно, поскольку

$$\frac{\partial\dot{q}_k(t)}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial}{\partial\varepsilon_*}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\right)=\sum_{s=1,n}\left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_k\partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial\varepsilon_*}+\frac{\partial^2 H}{\partial p_k\partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial\varepsilon_*}\right),$$

$$\frac{\partial\dot{p}_k(t)}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial}{\partial\varepsilon_*}\left(-\frac{\partial H}{\partial q_k}\right)=$$

$$=\sum_{s=1,n}\left(-\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial\varepsilon_*}-\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial\varepsilon_*}\right)$$

(где вместо ε_* подставляются значения ε_i и ε_j), то после дифференцирования выражения (7) по переменной t получаем:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S_{ij}(t)=$$

$$=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial\dot{p}_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial\dot{q}_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial\dot{p}_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}-\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial\dot{q}_k}{\partial\varepsilon_i}\right)=$$

$$=\sum_{k=1.n}\sum_{s=1,n}\left(-\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\right.$$

$$+\frac{\partial^2 H}{\partial p_k\partial p_s}\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial p_s}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial^2 H}{\partial p_k\partial q_s}\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_s}{\partial\varepsilon_j}+$$

$$+\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}+\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}-$$

$$\left.-\frac{\partial^2 H}{\partial p_k\partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial^2 H}{\partial p_k\partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}\right)=0. \tag{8}$$

Следовательно, хотя выражение (7) при разных значениях начальных параметров $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots$ принимает разные значения, однако при фиксированных $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots$ его значение в любой момент времени будет одним и тем же.

Примечание. Если в качестве начальных параметров $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots$ принимаются начальные условия $p_i^0=p_i(t_0)$, $q_i^0=q_i(t_0)$, выбранные в некоторый начальный момент времени $t=t_0$, то инвариантные выражения (7) совпадут с традиционными симплектическими соотношениями для гамильтоновых систем [4–6]. Однако инвариантность выражений (7) относительно параметров $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots$, с помощью которых задается многопараметрический пучок заряженных частиц, значительно облегчает работу по переходу от гамильтоновых обобщенных координат и импульсов к геометрически содержательным величинам, используемым в оптике заряженных частиц.

2. ИНТЕГРАЛЬНЫЙ ИНВАРИАНТ ПУАНКАРЕ – КАРТАНА

В выражении (5) время t является независимой переменной, играющей особую роль, однако это не всегда удобно. Для задач оптики заряженных частиц более естественно рассматривать случай, когда время t становится одной из зависимых обобщенных координат, а какая-либо обобщенная координата становится независимой переменной (см. далее следующий раздел). В частности, сечения $x = \text{const}$, $y = \text{const}$ либо $z = \text{const}$ позволяют разбивать сложную систему на отдельные "кубики" с относительно простой структурой, а затем эффективно комбинировать их друг с другом [5, 6]. Однако интегральный инвариант Пуанкаре (5) плохо приспособлен к такому варианту действий.

Пусть имеется $(2n+1)$-мерный пучок траекторий $\left(p_k(t), q_k(t)\right)$, зависящий от параметров $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$, меняющихся в некоторой ограниченной области (см. рис.). Вместо сечения $t = \text{const}$ рассмотрим семейство $2n$-мерных сечений этого пучка, соответствующее условию

$$F\left(p_1, q_1, \ldots, p_n, q_n, t\right) = \text{const}. \qquad (9)$$

Очевидно, что сечения $t = \text{const}$ являются одним из частных случаев условия (9).

После подстановки в равенство (9) решения $p_k = p_k(t)$, $q_k = q_k(t)$ гамильтоновых уравнений движения (1) получаем уравнение

$$F\left(p_1(t), q_1(t), \ldots, p_n(t), q_n(t), t\right) = \tau, \qquad (10)$$

в котором τ — произвольный параметр, чье значение можно свободно менять, а время t — неизвестная величина, тесно связанная с параметром τ с помощью равенства (10). Если алгебраическое уравнение (10) не является вырожденным, то можно найти решение

$$t = T\left(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right), \qquad (11)$$

где параметры $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$ возникают в соотношении (11) в силу того, что от них зависят функции $p_k(t)$, $q_k(t)$. Точно также, если задать каким-либо образом вспомогательное соотношение (11), то функции

$$\begin{aligned} &P_k\left(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right) = p_k\left(T\left(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right), ; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right) = p_k, \\ &Q_k\left(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right) = q_k\left(T\left(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right), ; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right) = q_k, \\ &T\left(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots\right) = t \end{aligned} \qquad (12)$$

будут задавать в $(2n+1)$-мерном расширенном фазовом пространстве однопараметрическое семейство $2n$-мерных сечений фазового пучка

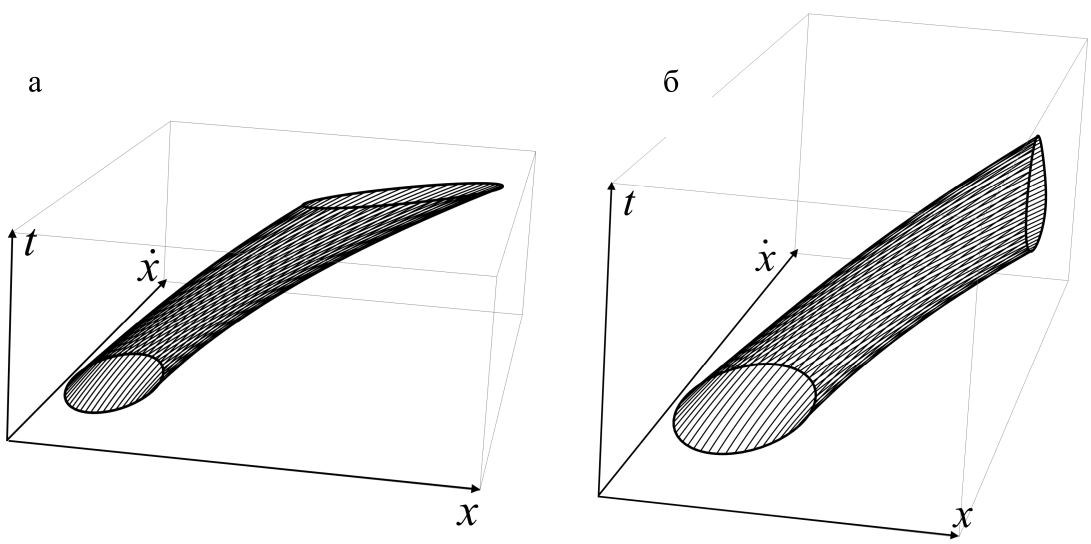

Рис. Трубка траекторий в расширенном фазовом пространстве $(x, \dot{x}, t)$ для параметризованного пучка траекторий, соответствующего одномерному движению иона в ускоряющем электрическом поле.
а) сечение $t = \text{const}$, б) сечение $x = \text{const}$

траекторий $\left(P_k\left(\tau\right),\mathrm{Q}_k\left(\tau\right),T\left(\tau\right)\right)$, зависящих от параметра τ и соответствующих условиям $\tau = \mathrm{const}$.

При такой формулировке задачи параметр τ, осуществляющий развертку траекторий в расширенном фазовом пространстве, больше не связан напрямую с физическим временем и в большинстве случаев может иметь достаточно абстрактную природу. Такой подход позволяет более гибко задавать и исследовать условия пересечения пучков траекторий с геометрическими границами, разделяющими отдельные структурные элементы сложной электронно- или ионно-оптической системы.

После подстановки (12) фазовые переменные P_k, Q_k, T, образующие расширенное фазовое пространство, становятся равноправными. В новых координатах значения гамильтониана $H\left(p_k,q_k,t\right)$ вдоль отдельно взятой траектории вычисляются как

$$\begin{aligned}&\bar{H}\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots\right)=\\&=H\left(P_k\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots\right),Q_k\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots\right),T\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots\right)\right).\end{aligned} \tag{13}$$

Расширенная форма интегрального инварианта (5), которая называется интегральным инвариантом Пуанкаре – Картана [10, 11], имеет вид:

$$K\left(\tau\right)=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}Q_k\right]-\left[\mathrm{d}\bar{H},\mathrm{d}T\right]=\mathrm{const}, \tag{14}$$

где, как и раньше, квадратные скобки обозначают внешнее произведение соответствующих линейных дифференциальных форм, а дифференцирование выполняется относительно параметров ε_j.

Выражение (14) выводится из выражения (5) следующим образом:

$$\mathrm{d}T=\sum_j\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j, \tag{15}$$

$$\mathrm{d}P_k=\sum_j\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}+\dot{p}_k\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\mathrm{d}p_k-\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}T, \tag{16}$$

$$\mathrm{d}Q_k=\sum_j\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\dot{q}_k\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\mathrm{d}q_k+\frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}T, \tag{17}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\bar{H}&=\sum_j\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_j}\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\\&=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}P+\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}Q_k\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\mathrm{d}T.\end{aligned} \tag{18}$$

Из равенств (16) и (17) можно выразить дифференциалы $\mathrm{d}p_k$ и $\mathrm{d}q_k$ через дифференциалы $\mathrm{d}P_k$, $\mathrm{d}Q_k$ и $\mathrm{d}T$. После подстановки этих дифференциалов в выражение (5), где вместо переменной t используется функция $T\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots\right)$, получаем:

$$\begin{aligned}\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}p_k,\mathrm{d}q_k\right]&=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k+\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}T,dQ_k-\frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}T\right]=\\&=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}Q_k\right]-\sum_{k=1,n}\frac{\partial H}{\partial p_k}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}T\right]+\sum_{k=1,n}\frac{\partial H}{\partial q_k}\left[\mathrm{d}T,\mathrm{d}Q_k\right]-\sum_{k=1,n}\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k}\left[\mathrm{d}T,\mathrm{d}T\right]=\\&=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}Q_k\right]-\sum_{k=1,n}\left[\frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}T\right]-\sum_{k=1,n}\left[\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}Q_k,\mathrm{d}T\right]-\frac{\partial H}{\partial t}\left[\mathrm{d}T,\mathrm{d}T\right]=\\&=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}Q_k\right]-\left[\mathrm{d}\bar{H},\mathrm{d}T\right]\end{aligned} \tag{19}$$

(здесь было использовано условие $\left[\mathrm{d}T,\mathrm{d}T\right]=0$).

Ранее было показано, что при фиксированных параметрах ε_j дифференциальная форма (5) сохраняет свое исходное значение при любом изменении переменной t. Это означает, что если подставить в (5) вместо переменной t новую функцию $T(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...)$ достаточно произвольного вида, то полученное выражение будет точно так же сохранять свое исходное значение, но теперь уже при любом изменении переменной τ. Из равенства (19) следует, что в таком случае дифференциальная форма (14) очевидным образом не будет изменять своего исходного значения при фиксированных параметрах ε_j и изменении свободной переменной τ.

Инвариантная форма (14) представляет собой сумму инвариантных выражений

$$K_{ij}(\tau)=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_i}\right)-\left(\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)=\mathrm{const},\qquad(20)$$

где ε_i и ε_j — любая пара свободных параметров, от которых зависит пучок траекторий $(P_k(\varsigma),Q_k(\tau),T(\tau))$, представленный в параметризованной форме (12). Гамильтониан H зависит от параметров ε_i и ε_j косвенно, через описывающие траекторию обобщенные координаты, обобщенные импульсы и время, так что частные производные гамильтониана в формуле (20) вычисляются из следующего соотношения (где ε_* равно ε_i либо ε_j):

$$\frac{\partial H(P_k,Q_k,T)}{\partial\varepsilon_*}=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_*}+\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_*}\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*}.\qquad(21)$$

Покажем напрямую, что выражение (20) мало чем отличается от с инварианта Пуанкаре (5) и тем самым при фиксированных параметрах $\varepsilon_1,\varepsilon_2,...$ обязано являться константой, не зависящей от переменной τ. Действительно,

$$\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_*}+\dot{p}_k\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_*}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*},$$

$$\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_*}+\dot{q}_k\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_*}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*},$$

$$\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_*}=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_*}+\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_*}\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*},$$

где вместо ε_* подставляются значения ε_i и ε_j. Тогда

$$\begin{aligned}K_{ij}(\tau)&=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_i}\right)-\left(\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)=\\&=\sum_{k=1,n}\left(\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)-\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)\right)-\\&-\left(\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)+\frac{\partial H}{\partial q_k}\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}+\\&+\left(\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)+\frac{\partial H}{\partial q_k}\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}=\\&=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}\right).\end{aligned}$$

В этих выражениях, согласно соотношениям (12) для функций $p_k(t)$ и $q_k(t)$, используется подстановка $t=T(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...)$, а для функции $H(p_k,q_k,t)$, согласно соотношению (13), — подстановки $p_k=P_k(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...)$, $q_k=Q_k(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...)$, $t=T(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...)$. Так как инвариант Пуанкаре (7) при фиксированных параметрах ε_j является константой, не зависящей от значения переменной t, то и после подстановки в него значения $t=T(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...)$ выражение (7) окажется константой, не зависящей от переменной τ. Вывод: при любых значениях свободного параметра τ величина $K_{ij}(\tau)$ сохраняет одно и то же значение при фиксированных параметрах ε_j.

Примечание. В [10, 11] показано, что если для некоторой динамической системы выражение (14) является инвариантом, то такая динамическая система необходимым образом описывается системой гамильтоновых дифференциальных уравнений с гамильтонианом H. Поэтому никаких дополнительных инвариантных внешних дифференциальных форм, независимых от формы (14), у такой системы быть не может. Следовательно, не может быть дополнительных функционально независимых дифференциальных соотношений, аналогичных симплектическим соотношениям для аберрационных коэффициентов, используемых для описания пучков электронов и ионов в оптике заряженных частиц [5, 6].

Пример: закон Лиувилля о сохранении фазового объема [1–4] эквивалентен инвариантности внешней дифференциальной формы, состоящей из единственного монома $[\mathrm{d}p_1\mathrm{d}q_1\mathrm{d}p_2\mathrm{d}q_2...\mathrm{d}p_n\mathrm{d}q_n]$ с $2n$ сомножителями. Однако эта дифференциальная форма является результатом n-кратного внешнего произведения дифференциальной формы (5) на саму себя. Поэтому инвариантность внешней дифференциальной формы Лиувилля является алгебраическим следствием инвариантности формы (5).

3. ЗАМЕНА ВРЕМЕНИ НА КООРДИНАТУ

Внимательный взгляд на интегральный инвариант Пуанкаре – Картана (14) подсказывает, что все парные внешние произведения дифференциалов имеют одинаковый вес. Поэтому можно ввести в рассмотрение новый виртуальный обобщенный импульс $\tilde{P}=-H$ и новую виртуальную обобщенную координату $\tilde{Q}=T$, при этом в качестве нового "гамильтониана" взять функцию $\tilde{H}=-P_1$, а в качестве нового "времени" — обобщенную координату $\tilde{T}=Q_1$. Инвариантность внешней дифференциальной формы (14) от такой замены не изменится и, следовательно, соответствующая динамическая система снова будет описываться системой уравнений с гамильтоновой симметрией. Законность этой операции обосновывается инвариантностью дифференциального выражения для первого дифференциала сложной функции [14].

Рассмотрим этот процесс более подробно. Пусть из алгебраического уравнения

$$p=-H(p_1,q_1,p_2,q_2,...,p_n,q_n;t) \tag{22}$$

обобщенный импульс p_1 выражен как функция переменных p,t, p_2,q_2, …, p_n,q_n и q_1 (для этого достаточно, чтобы выполнялось условие $\partial H/\partial p_1\neq 0$):

$$p_1=-S(p_2,q_2,...,p_n,q_n,p,t,q_1). \tag{23}$$

Дополнительно из равенства $q_1(t)=\tau$ время t выражено как функция новой независимой переменной τ: $t=T(\tau)$ (для этого требуется, чтобы $\dot{q}_1(t)\neq 0$, что опять-таки эквивалентно условию $\partial H/\partial p_1\neq 0$). Для функций

$$P_i(\tau)=p_i(T(\tau)),\ Q_i(\tau)=q_i(T(\tau)),$$
$$P(\tau)=-H(P_1(\tau),Q_1(\tau),...,P_n(\tau),Q_n(\tau);T(\tau)),\ T(\tau)$$

получаем динамические уравнения

$$\frac{\mathrm{d}P_i(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=\left(\left.\frac{\mathrm{d}p_i(t)}{\mathrm{d}t}\right|_{t=T(\tau)}\right)\frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=-\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial q_i}\Big/\frac{\mathrm{d}q_1(t)}{\mathrm{d}t}=$$
$$=-\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial q_i}\Big/\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial p_1},$$

$$\frac{\mathrm{d}Q_i(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=\left(\left.\frac{\mathrm{d}q_i(t)}{\mathrm{d}t}\right|_{t=T(\tau)}\right)\frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial p_i}\Bigg/\frac{\mathrm{d}q_1(t)}{\mathrm{d}t}=$$
$$=\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial p_i}\Bigg/\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial p_1},$$

$$\frac{\mathrm{d}P(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=-\left(\left.\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\right|_{t=T(\tau)}\right)\frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=-\left(\sum_{i=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\right)\Bigg/\frac{\mathrm{d}q_1(t)}{\mathrm{d}t}=$$
$$=-\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial t}\Bigg/\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial p_1},$$

$$\frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=1\Bigg/\left(\left.\frac{\mathrm{d}q_1(t)}{\mathrm{d}t}\right|_{t=T(\tau)}\right)=1\Bigg/\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial p_1},$$

где потребуется сделать подстановку $p_i=P_i(\tau)$, $q_i=Q_i(\tau)$, $t=T(\tau)$ для аргументов функций, расположенных справа от знака равенства.

Примечание. Решение $q_1(t)$ гамильтоновых динамических уравнений для обобщенной координаты q_1 является функцией не только времени t, но и начальных условий. Соответственно, обратная функция $t=T(\tau)$ также является функцией не только свободной переменной τ, но и тех же самых начальных условий. Очевидно, что независимо от начальных условий $q_1(T(\tau))\equiv\tau$, так что $\dot{q}_1(T(\tau))\equiv 1/T(\tau)$. Аналогичным образом функции $p_i(t)$, $q_i(t)$ ($i=2,3,...,n$) зависят не только от времени t, но и от набора начальных условий, который использовался при вычислении функции $q_1(t)$.

Поскольку (23) является решением уравнения (22), то справедливо тождество

$$p\equiv$$
$$\equiv -H\left(-S\left(p_2,q_2,...,p_n,q_n,p,t,q_1\right),q_1,p_2,q_2,...,p_n,q_n;t\right). \tag{24}$$

При дифференцировании тождества (24) по переменным p, p_i, q_i и t получаем равенства:

$$\begin{gathered}1=\frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial S}{\partial p},\quad 0=\frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial S}{\partial p_i}-\frac{\partial H}{\partial p_i},\\ 0=\frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial S}{\partial q_i}-\frac{\partial H}{\partial q_i},\quad 0=\frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial S}{\partial t}-\frac{\partial H}{\partial t},\end{gathered}\tag{25}$$

где конструкцию $-S(...)$, которая входит в список аргументов функции H, в соответствии с равенством (23) надо заменить* на переменную p_1.

Из полученных соотношений можно выразить частные производные функции S через частные производные функции H. Эти выражения в точности совпадают с правыми частями полученных ранее уравнений для $P_i(\tau)$, $Q_i(\tau)$, $P(\tau)$, $T(\tau)$. Следовательно, функции $P_i(\tau)$, $Q_i(\tau)$ (где $i=2,3,...,n$), $P(\tau)$, $T(\tau)$ удовлетворяют гамильтоновым уравнениям с гамильтонианом $S(p_2,q_2,...,p_n,q_n,p,t,\tau)$, где $\tau=q_1$ — обобщенная

* Это достаточно тонкий момент. Вообще говоря, как равенства (25), так и получаемые с их помощью выводы не могут быть справедливыми при совершенно произвольных переменных p_1,q_1, p_2,q_2, …, p_n,q_n, p,t. Либо переменная p_1 является независимой, а переменная p выражается через нее и остальные свободные переменные — с помощью соотношения (22), либо переменная p является независимой, а переменная p_1 выражается через нее и остальные свободные переменные — с помощью соотношения (23). Но т.к. форма дифференциала первого порядка для сложной функции инвариантна [14], можно по ходу дела менять, кто из переменных от кого зависит, не слишком беспокоясь о законности такой операции. Для производных и дифференциалов более высокого порядка такой подход, естественно, работать не будет.

координата, выбранная на роль независимой переменной вместо времени t:

$$\frac{\mathrm{d}P_i(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=-\frac{\partial S}{\partial q_i},\qquad \frac{\mathrm{d}Q_i(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=\frac{\partial S}{\partial p_i},\qquad \frac{\mathrm{d}P(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=-\frac{\partial S}{\partial t},$$

$$\frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=\frac{\partial S}{\partial p}.$$

Примечание. Теорема о возможности замены времени на координату с сохранением гамильтоновой структуры динамических уравнений принадлежит Алексу Драгту (Alex Dragt) [15]. В его фундаментальной работе [16] переход к новым обобщенным координатам и импульсам возникает как *deus ex machina*, не слишком убедительно обоснованный с помощью принципа наименьшего действия. При использовании интегрального инварианта Пуанкаре – Картана этот переход выглядит естественным и почти очевидным.

4. РАСШИРЕННЫЙ НАБОР ГАМИЛЬТОНОВЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

При сравнении интегрального инварианта Пуанкаре – Картана (14) и исходного интегрального инварианта Пуанкаре (5) легко предположить, что вместо того, чтобы исключать из списка гамильтоновых переменных какую-либо пару "обобщенный импульс – обобщенная координата" с заменой их на пару "полная энергия – время" (см. предыдущий раздел), имеет смысл дополнить текущий список гамильтоновых переменных еще одной парой значений, сохранив для расширенного списка переменных гамильтонову структуру динамических уравнений. После такой операции интегральный инвариант Пуанкаре – Картана (14) превращается в интегральный инвариант Пуанкаре (5), записанный для расширенной системы гамильтоновых переменных, а зависящий от времени гамильтониан становится стационарным.

Добавим к списку решений гамильтоновых динамических уравнений $p_i(t)$, $q_i(t)$ (где $i=1,2,...,n$) новые функции $h(t)=$ $=-H\left(p_i(t),q_i(t),t\right)$ и $\tau(t)=t$. Также добавим новую свободную переменную s, где связь между временем t и переменной s задана как $t=T(s)$ с помощью пока что не определенной функции $T(s)$.

Пусть теперь $L(p_i,q_i,h,\tau)$ — это новый гамильтониан, не зависящий в явном виде от свободной переменной s. Рассмотрим функции

$$\tilde{p}_i(s)=p_i\left(T(s)\right),\quad \tilde{q}_i(s)=q_i\left(T(s)\right),$$
$$\tilde{h}(s)=-H\left(\tilde{p}_i(s),\tilde{q}_i(s),\tilde{\tau}(s)\right),\quad \tilde{\tau}(s)=T(s),$$

которые предположительно должны быть решениями новых гамильтоновых уравнений. Для этих функций должны выполняться равенства:

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}\tilde{p}_i(s)}{\mathrm{d}s}=\dot{p}_i\left(T(s)\right)\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s}=\\
&\quad=-\frac{\partial H\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{\tau}\right)}{\partial q_i}\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s}=-\frac{\partial L\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{h},\tilde{\tau}\right)}{\partial q_i},\\
&\frac{\mathrm{d}\tilde{q}_i(s)}{\mathrm{d}s}=\dot{q}_i\left(T(s)\right)\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s}=\frac{\partial H\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{\tau}\right)}{\partial p_i}\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s}=\\
&\quad=\frac{\partial L\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{h},\tilde{\tau}\right)}{\partial p_i},\\
&\frac{\mathrm{d}\tilde{h}(s)}{\mathrm{d}s}=\left(-\left.\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\right|_{t=T(s)}\right)\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s}=\\
&\quad=\left(-\sum_{i=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i+\frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i\right)-\frac{\partial H}{\partial t}\right)\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s}=\\
&\quad=-\frac{\partial H\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{\tau}\right)}{\partial \tau}\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s}=-\frac{\partial L\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{h},\tilde{\tau}\right)}{\partial \tau},\\
&\frac{\mathrm{d}\tilde{\tau}(s)}{\mathrm{d}s}=\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s}=F\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{h},\tilde{\tau}\right)=\frac{\partial L\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{h},\tilde{\tau}\right)}{\partial h},
\end{aligned}\tag{26}$$

где $F(p_i,q_i,h,\tau)$ — некоторая пока не определенная функция.

На основании анализа равенств (26) потребуем, чтобы неизвестная функция $L(p_i,q_i,h,\tau)$ удовлетворяла системе уравнений в частных производных

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial L\left(p_i,q_i,h,\tau\right)}{\partial q_i}=\frac{\partial H\left(p_i,q_i,\tau\right)}{\partial q_i}F\left(p_i,q_i,h,\tau\right),\\
&\frac{\partial L\left(p_i,q_i,h,\tau\right)}{\partial p_i}=\frac{\partial H\left(p_i,q_i,\tau\right)}{\partial p_i}F\left(p_i,q_i,h,\tau\right),\\
&\frac{\partial L\left(p_i,q_i,h,\tau\right)}{\partial \tau}=\frac{\partial H\left(p_i,q_i,\tau\right)}{\partial \tau}F\left(p_i,q_i,h,\tau\right),\\
&\frac{\partial L\left(p_i,q_i,h,\tau\right)}{\partial h}=F\left(p_i,q_i,h,\tau\right)
\end{aligned}\tag{27}$$

(здесь было использовано равенство $\mathrm{d}T(s)/\mathrm{d}s = F$).

Для того, чтобы у системы (27) имелось решение, необходимо и достаточно (см. [17, 18]), чтобы $\forall i, j$ для смешанных частных производных, которые вычисляются с помощью правых частей системы уравнений (27), были выполнены тождества

$$\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial L}{\partial p_j}\right)=\frac{\partial}{\partial p_j}\left(\frac{\partial L}{\partial p_i}\right), \quad \frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\right)=\frac{\partial}{\partial q_j}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right), \quad \frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\right)=\frac{\partial}{\partial q_j}\left(\frac{\partial L}{\partial p_i}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\frac{\partial L}{\partial p_i}\right)=\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial L}{\partial \tau}\right), \quad \frac{\partial}{\partial \tau}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right)=\frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial L}{\partial \tau}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{\partial L}{\partial p_i}\right)=\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial L}{\partial h}\right), \quad \frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right)=\frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial L}{\partial h}\right), \quad \frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{\partial L}{\partial \tau}\right)=\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\frac{\partial L}{\partial h}\right).$$

Для системы уравнений (27) соответствующие соотношения имеют вид:

$$\frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial F}{\partial p_i}=\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial p_j}, \quad \frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial F}{\partial q_i}=\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial q_j}, \quad \frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial F}{\partial p_i}=\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_j},$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial \tau}=\frac{\partial H}{\partial \tau}\frac{\partial F}{\partial p_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial \tau}=\frac{\partial H}{\partial \tau}\frac{\partial F}{\partial q_i},$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial h}=\frac{\partial F}{\partial p_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial h}=\frac{\partial F}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial \tau}\frac{\partial F}{\partial h}=\frac{\partial F}{\partial \tau}.$$

Легко убедиться, что для того, чтобы эти соотношения были выполнены, необходимо и достаточно, чтобы функция $F\left(p_i, \underset{\cdot\cdot}{q_i}, h, \tau\right)$ удовлетворяла системе линейных уравнений в частных производных первого порядка:

$$\begin{gathered}\forall i: \ \frac{\partial F}{\partial p_i}-\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial h}=0, \\ \forall i: \ \frac{\partial F}{\partial q_i}-\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial h}=0, \\ \frac{\partial F}{\partial \tau}-\frac{\partial H}{\partial \tau}\frac{\partial F}{\partial h}=0.\end{gathered} \tag{28}$$

Система линейных дифференциальных уравнений (28) в частных производных первого порядка является совместной (см. [17, 18]), и ее общее решение имеет вид

$$F\left(p_i, \underset{\cdot\cdot}{q_i}, h, \tau\right)=\Phi\left(h+H\left(p_i, \underset{\cdot\cdot}{q_i}, \tau\right)\right), \tag{29}$$

где $\Phi(u)$ — произвольная функция. Точно так же, когда выполнено условие (29), то система линейных дифференциальных уравнений (27) в частных производных первого порядка является совместной, и ее общее решение имеет вид

$$L\left(p_i, \underset{\cdot\cdot}{q_i}, h, \tau\right)=\Omega\left(h+H\left(p_i, \underset{\cdot\cdot}{q_i}, \tau\right)\right), \tag{30}$$

где $\Omega(u)$ — произвольная функция. При этом для функции $\Phi(u)$, которая используется в условии (29), должно быть выполнено равенство $\Omega'(u)=\Phi(u)$. Это не противоречит сделанному ранее утверждению об отсутствии условий, наложенных на функцию $\Phi(u)$: если $\Omega(u)$ — произвольная функция для решения (30) системы уравнений (27), то и $\Phi(u)=\Omega'(u)$ — произвольная функция для решения (29) системы уравнений (28).

Вывод: система динамических уравнений для расширенной системы функций $p_i(t)$, $q_i(t)$, $h(t)=-H\left(p_i(t), q_i(t), t\right)$ и $\tau(t)=t$ является гамильтоновой с гамильтонианом (30). С точностью до знака физический смысл функции $h(t)$ — гамильтониан исходной динамической системы (полная энергия, если гамильтониан H не зависит от времени), а физический смысл функции $\tau(t)$ — время движения.

Примечание. Гамильтониан (30) не зависит в явном виде от нового "времени" s, так что для него должен иметь силу соответствующий аналог закона сохранения энергии. Таким законом сохранения является условие $h+H\left(p_i, \underset{\cdot\cdot}{q_i}, \tau\right)=\mathrm{const}$ (легко убедиться, что для динамических уравнений (26) выражение $\tilde{h}+H\left(\tilde{p}_i, \underset{\cdot\cdot}{\tilde{q}_i}, \tilde{\tau}\right)$ будет первым интегралом). Переменная h является вспомогательной, поэтому без ограничения общности можно потребовать, чтобы в начальной точке траектории выполнялось условие $h^0+H\left(p_i^0, q_i^0, \tau^0\right)=0$. В таком случае в любой точке траектории, подчиняющейся динамическим уравнениям (26) с гамильтонианом (30), выполнено тождество $\tilde{h}(s)\equiv -H\left(\tilde{p}_i(s), \underset{\cdot\cdot}{\tilde{q}_i}(s), \tilde{\tau}(s)\right)$.

5. ЛОКАЛЬНЫЕ КООРДИНАТЫ И ИМПУЛЬСЫ

Пусть $p_i^0(t)$, $q_i^0(t)$ — фиксированная базовая траектория (частное решение), удовлетворяющая гамильтоновым уравнениям с гамильтонианом $H^0(p_i^0, q_i^0, t)$, а $p_i(t)$ $q_i(t)$ — общее решение для гамильтоновых уравнений с гамильтонианом $H(p_i, q_i, t)$. Легко проверить, что приращения $\delta p_i(t)$ обобщенных импульсов и приращения $\delta q_i(t)$ обобщенных координат, которые задаются равенствами

$$p_i(t) = p_i^0(t) + \delta p_i(t),\ q_i(t) = q_i^0(t) + \delta q_i(t), \quad (31)$$

удовлетворяют гамильтоновым уравнениям с гамильтонианом

$$\tilde{H}(\delta p_i, \delta q_i, t) = H\left(p_i^0(t) + \delta p_i, q_i^0(t) + \delta q_i, t\right) - \\ -\sum_{i=1,n}\left(\frac{\partial H^0\left(p_i^0(t), q_i^0(t), t\right)}{\partial q_i^0}\delta q_i + \right. \\ \left. + \frac{\partial H^0\left(p_i^0(t), q_i^0(t), t\right)}{\partial p_i^0}\delta p_i\right). \quad (32)$$

Таким образом, динамические уравнения для локальных приращений обобщенных импульсов и координат снова обладают гамильтоновой симметрией. Для целей оптики заряженных частиц существенно, что базовая траектория и обобщенные импульсы и координаты общего решения, описывающего движение заряженных частиц, могут быть разными функциями. В частности, базовая траектория может соответствовать движению в идеальном электрическом и магнитном поле, а само решение — движению в возмущенном электрическом и магнитном поле, где возмущение обусловлено неточностями изготовления и сборки электродов, магнитов и катушек с током, а также неточностями электрических потенциалов, приложенных к электродам, и неточностями электрических токов, которые протекают сквозь катушки.

Примечание. Вообще говоря, функции $p_i^0(t)$, $q_i^0(t)$ могут быть произвольными функциями времени, а не траекторией движения базовой заряженной частицы. В этом случае гамильтониан, с помощью которого определяются гамильтоновы уравнения для локальных приращений обобщенных координат и обобщенных импульсов, имеет вид

$$\tilde{H}(\delta p_i, \delta q_i, t) = H\left(p_i^0(t) + \delta p_i, q_i^0(t) + \delta q_i, t\right) + \\ + \sum_{i=1,n}\left(\dot{p}_i^0(t)\cdot\delta q_i - \dot{q}_i^0(t)\cdot\delta p_i\right). \quad (33)$$

Частным случаем этого выражения является формула (32). Следует, однако, подчеркнуть, что случай (32), когда базовая траектория является реальной траекторией заряженной частицы в идеальном электрическом и магнитном поле, важен для конструирования физически осмысленных моделей движения заряженных частиц.

6. ЛОКАЛЬНАЯ СИСТЕМА КООРДИНАТ С КОНТРОЛЕМ НАПРАВЛЕНИЯ КООРДИНАТНЫХ ОСЕЙ

В предыдущем разделе было показано, что локальная система координат, привязанная к некоторой базовой траектории, может демонстрировать все преимущества гамильтоновой симметрии уравнений движения. Такая система координат позволяет эффективно использовать смещение центра координат и его движение вдоль базовой траектории, но при этом сохраняет неизменным глобальное направление координатных осей. В этом разделе будет показано, что можно гибко управлять направлением координатных осей локальной системы координат (например, совмещать их с касательными и/или нормалями к базовой траектории, которые соответствуют текущей точке привязки локальной системы координат) и при этом сохранять гамильтонову симметрию уравнений движения.

Поскольку любой n-мерный поворот можно рассматривать как суперпозицию элементарных планарных поворотов, затрагивающих какую-либо пару координат и не меняющих остальные координаты [19], ограничимся доказательством сохранения гамильтоновых свойств при таких элементарных поворотах. Пусть в точке базовой траектории, соответствующей моменту времени t, пара локальных обобщенных координат q_r, q_s подвергается повороту на угол $\alpha(t)$. Синхронно с координатами поворачивается пара локальных обобщенных импульсов p_r, p_s, которые соответствуют выбранным координатам. Преобразование координат и импульсов выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \tilde{q}_r(t) = q_r(t)\cos\alpha(t) - q_s(t)\sin\alpha(t), \\ \tilde{q}_s(t) = q_r(t)\sin\alpha(t) + q_s(t)\cos\alpha(t), \\ \tilde{p}_r(t) = p_r(t)\cos\alpha(t) - p_s(t)\sin\alpha(t), \\ \tilde{p}_s(t) = p_r(t)\sin\alpha(t) + p_s(t)\cos\alpha(t). \end{cases} \quad (34)$$

Обратное преобразование координат и импульсов определяется формулами

$$\begin{cases} q_r(t) = \tilde{q}_r(t)\cos\alpha(t) + \tilde{q}_s(t)\sin\alpha(t), \\ q_s(t) = -\tilde{q}_r(t)\sin\alpha(t) + \tilde{q}_s(t)\cos\alpha(t), \\ p_r(t) = \tilde{p}_r(t)\cos\alpha(t) + \tilde{p}_s(t)\sin\alpha(t), \\ p_s(t) = -\tilde{p}_r(t)\sin\alpha(t) + \tilde{p}_s(t)\cos\alpha(t). \end{cases} \tag{35}$$

Динамические уравнения для преобразованных координат и импульсов получаются из дифференцирования по времени соотношений (35):

$$\begin{aligned} &\dot{q}_r = \dot{\tilde{q}}_r\cos\alpha + \dot{\tilde{q}}_s\sin\alpha - \dot{\alpha}\tilde{q}_r\sin\alpha + \dot{\alpha}\tilde{q}_s\cos\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \\ &\dot{q}_s = -\dot{\tilde{q}}_r\sin\alpha + \dot{\tilde{q}}_s\cos\alpha - \dot{\alpha}\tilde{q}_r\cos\alpha - \dot{\alpha}\tilde{q}_s\sin\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_s}, \\ &\dot{p}_r = \dot{\tilde{p}}_r\cos\alpha + \dot{\tilde{p}}_s\sin\alpha - \dot{\alpha}\tilde{p}_r\sin\alpha + \dot{\alpha}\tilde{p}_s\cos\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_r}, \\ &\dot{p}_s = -\dot{\tilde{p}}_r\sin\alpha + \dot{\tilde{p}}_s\cos\alpha - \dot{\alpha}\tilde{p}_r\cos\alpha - \dot{\alpha}\tilde{p}_s\sin\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_s}, \end{aligned} \tag{36}$$

где в списке аргументов функции H надо сделать подстановку для переменных q_r, q_s, p_r, p_s и заменить их на соответствующие выражения с переменными $\tilde{q}_r$, $\tilde{q}_s$, $\tilde{p}_r$, $\tilde{p}_s$, как это задано формулами (35).

После элементарных преобразований уравнения (36) приобретают вид

$$\begin{aligned} &\dot{\tilde{q}}_r = \frac{\partial H}{\partial p_r}\cos\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_s}\sin\alpha - \dot{\alpha}\tilde{q}_s, \\ &\dot{\tilde{p}}_r = -\frac{\partial H}{\partial q_r}\cos\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_s}\sin\alpha - \dot{\alpha}\tilde{p}_s, \\ &\dot{\tilde{q}}_s = \frac{\partial H}{\partial p_r}\sin\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_s}\cos\alpha + \dot{\alpha}\tilde{q}_r. \\ &\dot{\tilde{p}}_s = -\frac{\partial H}{\partial q_r}\sin\alpha - \frac{\partial H}{\partial q_s}\cos\alpha + \dot{\alpha}\tilde{p}_r. \end{aligned} \tag{37}$$

Определим новый гамильтониан $\tilde{H}$ формулой

$$\begin{aligned} &\tilde{H}(\ldots,\tilde{p}_r,\tilde{q}_r,\tilde{p}_s,\tilde{q}_s,\ldots) = \\ &= H(\ldots,\tilde{p}_r\cos\alpha + \tilde{p}_s\sin\alpha, \tilde{q}_r\cos\alpha + \tilde{q}_s\sin\alpha, \\ &\quad -\tilde{p}_r\sin\alpha + \tilde{p}_s\cos\alpha, -\tilde{q}_r\sin\alpha + \tilde{q}_s\cos\alpha,\ldots) + \\ &\quad +\dot{\alpha}(-\tilde{p}_r\tilde{q}_s + \tilde{p}_s\tilde{q}_r). \end{aligned} \tag{38}$$

Частные производные для функции (38) равны

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{p}_r} = \frac{\partial H}{\partial p_r}\cos\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_s}\sin\alpha - \dot{\alpha}\tilde{q}_s, \\ &\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{q}_r} = \frac{\partial H}{\partial q_r}\cos\alpha - \frac{\partial H}{\partial q_s}\sin\alpha + \dot{\alpha}\tilde{p}_s, \\ &\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{p}_s} = \frac{\partial H}{\partial p_r}\sin\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_s}\cos\alpha + \dot{\alpha}\tilde{q}_r, \\ &\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{q}_s} = \frac{\partial H}{\partial q_r}\sin\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_s}\cos\alpha - \dot{\alpha}\tilde{p}_r. \end{aligned}$$

Таким образом, динамические уравнения (37) оказываются гамильтоновыми с гамильтонианом (38).

ВЫВОДЫ

В предыдущих разделах были рассмотрены элементарные операции, каждая из которых сохраняет гамильтонову симметрию уравнений движения за счет надлежащего изменения гамильтониана. Объединив эти операции в единое целое, можно обосновать гамильтонову структуру уравнений движения и, как следствие, законность применения специфических гамильтоновых инвариантов для локальных систем координат, которые используются в оптике заряженных частиц.

Процедура выглядит следующим образом. С помощью преобразования, рассмотренного в разделе 5, можно перейти от глобальной системы координат к локальной системе координат, центр которой движется синхронно с движением вдоль базовой траектории. Затем с помощью серии преобразований из раздела 6 можно развернуть локальную систему координат в каждой точке базовой траектории таким образом, чтобы одна ось была направлена по касательной к базовой траектории, а две остальные оси образовывали сопровождающий трехгранник. Например, естественным выбором будет, когда одна из осей лежит в касательной плоскости базовой траектории и направлена по нормали к касательному вектору, а вторая ось направлена по нормали к касательной плоскости и тем самым перпендикулярна к каждой из ранее выбранных координатных осей [19]. При этом, чтобы касательная координата не была тождественным нулем при перемещении системы координат вдоль траектории, начальному значению касательной координаты приписывается значение длины базовой траектории от точки старта и до текущего момента.

Если в такой системе координат записать уравнения движения для базовой траектории, то решением будет монотонно возрастающая во времени касательная координата, тогда как две остальные локальные координаты вдоль базовой траектории тождественно равны нулю. После замены времени движения на касательную координату (раздел 3) мы вплотную подойдем к той системе геометрических параметров, которая обычно используется в оптике заряженных частиц для описания пучков траекторий [5, 6].

Вплоть до этого шага при переходе от одной системы координат к следующей системе координат сохранялась гамильтонова симметрия уравнений движения хотя бы и за счет существенной перестройки гамильтониана динамической системы. Это означает, что для обобщенных координат и обобщенных импульсов, записанных в новой системе координат, сохранится интегральный инвариант Пуанкаре (раздел 1). Поскольку в него не входит в явном виде гамильтониан динамической системы, то искажения исходной гамильтоновой функции, которые пришлось применить при переходе от системы к системе, не слишком важны.

Последний шаг — переход от гамильтоновых обобщенных импульсов и координат к геометрически содержательным параметрам (углам и энергиям), к сожалению, неизбежно разрушает гамильтонову симметрию динамической системы. Как следствие этого факта, для геометрических параметров пучка траекторий уже нельзя использовать напрямую гамильтоновы инварианты, рассмотренные в разделах 1 и 2. Однако в силу простой функциональной связи между геометрическими параметрами и гамильтоновыми обобщенными координатами и импульсами можно построить аналоги гамильтоновых инвариантов для геометрических параметров пучков траекторий. Эта процедура и важные выводы, которые из нее следуют, будут рассмотрены в следующей публикации.

Благодарности

Работа выполнена в Институте аналитического приборостроения Российской академии наук (Санкт-Петербург) в рамках темы FFZM-2022-0009 (номер гос. регистрации 122040600002-3) государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-01157-23-00 от 29.12.2022.

При проведении вычислений использовалась программа Wolfram Mathematica версии 11 (Home Edition) [20].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Айзерман М.А.* Классическая механика. М.: Наука, 1980. 294 с.
2. *Гантмахер Ф.Р.* Лекции по аналитической механике: учебное пособие. 3-е изд. М.: Физматлит, 2001. 263 с.
3. *Уиттекер Э.* Аналитическая динамика (2-е изд.). М.: УРСС, 2004. 500 с.
4. *Вилази Г.* Гамильтонова динамика. М.: ИКИ и РХД, 2006. 432 с.
5. *Wollnik H.* Optics of Charged Particles. 2nd ed. Academic Press, 2022. 303 p.
6. *Yavor M.I.* Optics of Charged Particle Analyzers (Ser. Advances of Imaging and Electron Physics, Vol. 157). Elsevier, 2009. 398 p.
7. *Яворский Б.М., Детлаф А.А., Лебедев А.К.* Справочник по физике для инженеров и студентов. 8-е изд, перераб. и испр. М.: Мир и образование, 2022. 1056 с.
8. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.*. Теория поля (Сер. "Теоретическая физика"). 7-е изд., испр. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. 512 с.
9. *Пуанкаре А.* Избранные труды. Т. 3. М.: Наука, 1974. 771 с.
10. *Картан Э.* Интегральные инварианты. М.-Л.: Гостехиздат, 1940. 216 с.
11. *Картан Э., Козлов В.В.* Интегральные инварианты. Интегральные инварианты после Пуанкаре и Картана. Изд. 2, стереот. М.: URSS, 2005. 264 с.
12. *Ефимов Н.В.* Введение в теорию внешних форм. М.: Наука, 1977, 88 с.
13. *Фиников С.П.* Метод внешних форм Картана в дифференциальной геометрии. М.-Л.: ОГИЗ-ГИТТЛ, 1948. 432 с.
14. *Фихтенгольц Г.М.* Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 1. 9-е изд. стер. Санкт-Петербург: Изд-во "Лань", 2009. 607 с.
15. *Dragt A.J.* Personal page by Prof., Department of Physics University of Maryland. URL: https://umdphysics.umd.edu/people/faculty/emeritus/item/125-dragt.html
16. *Dragt A.J.* Lie Methods for Nonlinear Dynamics with Applications to Accelerator Physics. URL: http://www.physics.umd.edu/dsat/
17. *Трикоми Ф.* Лекции по уравнениям в частных производных. М.: Изд-во иностранной литературы, 1957. 444 с.
18. *Гюнтер Н.М.* Интегрирование уравнений первого порядка в частных производных. Л.-М.: ОНТИ-ГТТИ, 1934. 359 с.
19. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. Издание 5-е. М.: Наука, 1984. 835 с.
20. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing. URL: http://wolfram.com/mathematica/

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

Контакты: *Бердников Александр Сергеевич*, asberd@yandex.ru

Материал поступил в редакцию 24.10.2023

HAMILTONIAN EQUATIONS OF MOTION AS APPLIED TO CHARGED PARTICLE OPTICS

A. S. Berdnikov, S. V. Masyukevich, Yu. I. Khasin, M. I. Yavor

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg, Russia

The article discusses the features of the Hamiltonian form of the dynamic equations as applied to problems of charged particles optics. Some non-obvious consequences arising from the Poincaré – Cartan integral invariant are analyzed. It is shown that Hamiltonian equations of motion can be used to describe the motion of charged particles in a local coordinate system accompanying the central trajectory, including the case where the length of the base trajectory is used as an independent variable.

Keywords: hamiltonian equations of motion, general problems of charged particle optics, aberration coefficients, symplectic relations, analytical dynamics

REFERENCES

1. Aizerman M.A. *Klassicheskaya mekhanika* [Classical mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1980. 294 p. (In Russ.).
2. Gantmakher F.R. *Lektsii po analiticheskoi mekhanike: uchebnoe posobie. 3-e izd* [Lectures on analytical mechanics: textbook. 3rd ed.]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2001. 263 p. (In Russ.).
3. Whittaker E.T. *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies. 2nd ed.* Cambridge University Press, 1917. 456 p. (Russ. ed.: Uitteker Eh. *Analiticheskaya dinamika. 2-e izd.* Translate I.G. Malkin. Moscow, URSS, 2004. 500 p.).
4. Vilasi G. *Hamiltonian Dynamics*. World Scientific Publishing Company, 2001. 456 p. (Russ. ed.: Vilazi G. *Gamil'tonova dinamika*. Translate from eng. Moscow, IKI i RKhD, 2006. 432 p.).
5. Wollnik H. *Optics of Charged Particles. 2nd ed.* Academic Press, 2022. 303 p.
6. Yavor M.I. *Optics of Charged Particle Analyzers.* (Ser. Advances of Imaging and Electron Physics, Vol. 157). Elsevier, 2009. 398 p.
7. Yavorskii B.M., Detlaf A.A., Lebedev A.K. *Spravochnik po fizike dlya inzhenerov i studentov. 8-e izd, pererab. i ispr* [Handbook of Physics for Engineers and Students. 8th ed., revised]. Moscow, Mir i obrazovanie Publ., 2022. 1056 p. (In Russ.).
8. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoriya polya (Ser. "Teoreticheskaya fizika"). 7-e izd., ispr.* [Field Theory (Ser. "Theoretical Physics"). 7th ed., revised]. Moscow, Nauka, Gl. red. fiz.-mat. lit. Publ., 1988. 512 p. (In Russ.).
9. Puankare A. *Izbrannye trudy. T. 3* [Poincaré H. *Selected Work*]. Moscow, Nauka Publ., 1974. 772 p.
10. Cartan E. *Lecons sur les invariants integraux*. Paris, Librairie scientifique A. Hermann & Fils, 1922. 210 p. (Russ. ed.: Kartan Eh. *Integral'nye invarianty*. Moscow, Leningrad, Gostekhizdat Publ., 1940. 216 p.).
11. Kartan E., Kozlov V.V. *Integral invariants. Integral invariants after Poincaré and Cartan. Izd. 2, stereot.* [Integral invariants. Integral invariants after Poincaré and Cartan. Ed. 2, stereot]. Moscow, URSS, 2005. 264 p. (In Russ.).
12. Efimov N.V. *Vvedenie v teoriyu vneshnikh form* [Introduction to the theory of external forms]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 88 p. (In Russ.).
13. Finikov S.P. *Metod vneshnikh form Kartana v differentsial'noi geometrii* [Cartan's method of external forms in diffeomorphic geometry]. Moscow, Leningrad, OGIZ-GITTL Publ., 1948. 432 p. (In Russ.).
14. Fikhtengol'ts G.M. *Kurs differentsial'nogo i integral'nogo ischisleniya. T. 1. 9-e izd. ster.* [Course of differential and integral calculus. T. 1. 9th ed. ster.]. Saint Petersburg, Lan' Publ., 2009. 607 p. (In Russ.).
15. Dragt A.J. Personal page by Prof., Department of Physics University of Maryland. URL: https://umdphysics.umd.edu/people/faculty/emeritus/item/125-dragt.html
16. Dragt A.J. Lie Methods for Nonlinear Dynamics with Applications to Accelerator Physics. URL: http://www.physics.umd.edu/dsat/
17. Trikomi F. *Lektsii po uravneniyam v chastnykh proizvodnykh*. B.M. Levitan, editor [Tricomi F. *Differential equations*]. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1957. 444 p.). (In Russ.).
18. Gyunter N.M. *Integrirovanie uravnenii pervogo poryadka v chastnykh proizvodnykh* [Integration of first order partial derivative equations]. Leningrad, Moscow, ONTI-GTTI Publ., 1934. 359 p. (In Russ.).
19. Korn G., Korn T. *Spravochnik po matematike dlya nauchnykh rabotnikov i inzhenerov. Izd. 5-e* [Korn G.A., Korn T.M. *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers*]. Moscow, Nauka Publ., 1984. 835 p. (In Russ.).
20. *Wolfram Mathematica*: the system for modern technical computing. URL: http://wolfram.com/mathematica/

Contacts: *Berdnikov Aleksandr Sergeevich*,
asberd@yandex.ru

Article received by the editorial office on 24.10.2023

INTRODUCTION

Equations of motion written in Hamiltonian form provide mathematically elegant formulas and allow one to come to non-obvious conclusions following from the fundamental results of analytical dynamics [1–4]. This form of the equations of motion is not very convenient for the optics of charged particles, which, as a rule, deals with narrow beams of ions and electrons [5, 6], partly due to using time as an independent variable. However, the fundamental conclusions following from the Hamiltonian form of the equations of motion are too valuable to be so easily abandoned. This work considers a compromise approach in which the Hamiltonian formalism can be preserved for the motion of charged particles in a local coordinate system accompanying the central trajectory. The level of writing is aimed at students of technical universities and specialists who are practically involved in problems of charged particle optics, not at theoretical physicists or professional mathematicians.

The equations of motion, written in Hamiltonian form, are determined by the following characteristic features. A mechanical system is characterized by $2n$ parameters p_i, q_i $(i = 1, 2, ..., n)$, the change of which over time is described by dynamic equations

$$\dot{q}_i(t) = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i(t) = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \tag{1}$$

where $H(p_i, q_i, t)$ is a certain function (Hamiltonian) characterizing the system under consideration. The variables q_i are called generalized coordinates, and the variables p_i are called generalized momenta, although the difference between them is quite arbitrary [2, 3]. For example, when substituting $\tilde{p}_i = q_i$, $\tilde{q}_i = p_i$, $\tilde{H}(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, t) = -H(\tilde{q}_i, \tilde{p}_i, t)$ (which is a canonical transformation that preserves the Hamiltonian form of dynamic equations [2]), generalized coordinates become generalized momenta, generalized momenta become generalized coordinates, however, Hamiltonian symmetry (1) for dynamic equations describing the behavior of the system is obviously preserved.

For nonrelativistic equations of motion that describe the movement of charged particles (ions) under the influence of external electric and magnetic fields within the framework of ion optics, the Hamiltonian is determined by the formula [7, 8]

$$H = \frac{1}{2m}\left(p - \frac{e}{c}A_X(x,y,z,t)\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(q - \frac{e}{c}A_Y(x,y,z,t)\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(r - \frac{e}{c}A_Z(x,y,z,t)\right)^2 + eU(x,y,z,t). \tag{2}$$

Here m is the mass of the ion; e is the electric charge of the ion; x, y, z are the Cartesian coordinates playing the role of generalized coordinates. Generalized momenta p, q, r are related to speeds $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$, coordinates x, y, z, and time t by relations

$$\begin{aligned} p &= m\dot{x} + \frac{e}{c}A_X(x,y,z,t), \\ q &= m\dot{y} + \frac{e}{c}A_Y(x,y,z,t), \\ r &= m\dot{z} + \frac{e}{c}A_Z(x,y,z,t). \end{aligned} \tag{3}$$

A vector function $\mathbf{A}(x,y,z,t) = (A_X, A_Y, A_Z)$ is a vector potential associated with the magnetic field induction $\mathbf{B}(x,y,z,t) = (B_X, B_Y, B_Z)$ by the relation

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{A}.$$

Function $U(x,y,z,t)$ is a scalar potential related to the electric field strength $\mathbf{E}(x,y,z,t) = (E_X, E_Y, E_Z)$ by the relation

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad} U - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla U - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}.$$

After elementary transformations, Hamiltonian equations (1) with Hamiltonian (2) take on the form of classical non-relativistic equations of motion of a charged particle in electric and magnetic fields, using the CGS Gaussian system of units [7]:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= eE_X + \frac{e}{c}\left(\dot{y}B_Z - \dot{z}B_Y\right), \\ m\ddot{y} &= eE_Y + \frac{e}{c}\left(-\dot{x}B_Z + \dot{z}B_X\right), \\ m\ddot{z} &= eE_Z + \frac{e}{c}\left(\dot{x}B_Y - \dot{y}B_X\right). \end{aligned} \tag{4}$$

In vector notation, the equations of motion (4) look like this:

$$m\ddot{\boldsymbol{\rho}} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}\left(\dot{\boldsymbol{\rho}} \times \mathbf{B}\right),$$

where $\boldsymbol{\rho}(t)=(x(t),y(t),z(t))$ is the radius vector that determines the position of the charged particle in space at a moment of time t in the selected Cartesian coordinate system; $\dot{\boldsymbol{\rho}}(t)= \; =(\dot{x}(t),\dot{y}(t),\dot{z}(t))$ is a particle speed at the moment of time t. The electric field strength $\mathbf{E}(\boldsymbol{\rho},t)$ and magnetic field induction $\mathbf{B}(\boldsymbol{\rho},t)$ were determined earlier using scalar and vector potentials, which for the Hamiltonian equations of motion become the primary characteristics of the electromagnetic field.

Further, the equations of motion of ions in the existing electric and magnetic fields will be considered in general form (1) with n generalized momenta p_i n generalized coordinates q_i, and abstract Hamiltonian $H(p_i,q_i,t)$, although the applied significance of the results obtained for the optics of charged particles will always be kept in mind.

1. POINCARE INTEGRAL INVARIANT

For Hamiltonian systems, there is a specific conservation law - the absolute integral invariant of Poincaré [2–4, 9–11]. In differential form, it has the form

$$S(t)=\sum_{k=1,n}[\mathrm{d}p_k,\mathrm{d}q_k]=\mathrm{const},, \tag{5}$$

where square brackets denote the outer product of differentials (for more details about the outer product and outer differentiation, see [12, 13]). In expression (5), differentiation is carried out according to free parameters ε_j, on which the trajectories of the dynamical system depend, but not the Hamiltonian function:

$$p_k(t)=p_k(t;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots),\; q_k(t)=q_k(t;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots),$$
$$\mathrm{d}p_k=\frac{\partial p_k(t;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots)}{\partial\varepsilon_1}\mathrm{d}\varepsilon_1+\frac{\partial p_k(t;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots)}{\partial\varepsilon_2}\mathrm{d}\varepsilon_2+\ldots, \tag{6}$$
$$\mathrm{d}q_k=\frac{\partial q_k(t;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots)}{\partial\varepsilon_1}\mathrm{d}\varepsilon_1+\frac{\partial q_k(t;\varepsilon_1,\varepsilon_2,\ldots)}{\partial\varepsilon_2}\mathrm{d}\varepsilon_2+\ldots$$

In a particular case, the variable parameters are the initial conditions; in the general case, the variable parameters are functions of the initial conditions. The possibility of free choice of parameters characterizing the initial conditions for the equations of motion significantly facilitates the transition from the canonical Hamiltonian equations (1) to the equations of charged particle optics, where the initial data and trajectory functions should have a clear geometric meaning.

Variable parameters are independent from each other in the sense that the order of differentiation both by these parameters and by time for functions p_k and q_k can be swapped:

$$\frac{\partial}{\partial\varepsilon_i}\left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j}\right)=\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j}\left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon_i}\right),\; \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j}\right)=\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right).$$

In accordance with the rules of the external product of differentials, the product of sums is transformed into the sum of products (preserving the order of factors), non-differential factors of differentials are placed outside the square brackets of the external product, and the external product of elementary differentials is antisymmetric $[\mathrm{d}\varepsilon_i,\mathrm{d}\varepsilon_j]= \; =-[\mathrm{d}\varepsilon_j,\mathrm{d}\varepsilon_i]$.:

When substituting differentials (6) into expression (5), taking into account the possibility of bringing non-differential factors out of brackets as well as the antisymmetry property of the external product $[\mathrm{d}\varepsilon_i,\mathrm{d}\varepsilon_j]=-[\mathrm{d}\varepsilon_j,\mathrm{d}\varepsilon_i]$, we obtain:

$$S(t)=\sum_{k=1,n}[\mathrm{d}p_k,\mathrm{d}q_k]=\sum_{k=1,n}\left[\sum_i\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\mathrm{d}\varepsilon_i,\sum_j\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j\right]=$$
$$=\sum_{k=1,n}\left(\sum_{i,j}\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}[\mathrm{d}\varepsilon_i,\mathrm{d}\varepsilon_j]\right)=$$
$$=\sum_{i>j}\left(\sum_{k=1.n}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}\right)[\mathrm{d}\varepsilon_i,\mathrm{d}\varepsilon_j]\right).$$

Thus, the invariant external differential form (5) breaks down into a set of invariant expressions that are more familiar for practical calculations:

$$S_{ij}(t)=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}\right)=\mathrm{const}, \tag{7}$$

where ε_i and ε_j are any pair of free parameters on which the considered beam of trajectories $(p_k(t),q_k(t))$ depends, and $S_{ij}(t)=-S_{ji}(t)$, $S_{ii}(t)=0$ in an obvious way.

In order for expression (7) to be an invariant, the Hamiltonian H should not depend on the parameters ε_i and ε_j in explicit form, which does not prevent it from depending on these parameters indirectly through the dependence on ε_i and ε_j of generalized coordinates and momenta. Then expressions (7) do not depend on time. Indeed, since

$$\frac{\partial \dot{q}_k(t)}{\partial \varepsilon_*} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_*}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\right) = \sum_{s=1,n}\left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial \varepsilon_*} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial \varepsilon_*}\right),$$

$$\frac{\partial \dot{p}_k(t)}{\partial \varepsilon_*} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_*}\left(-\frac{\partial H}{\partial q_k}\right) = \sum_{s=1,n}\left(-\frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial \varepsilon_*} - \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial \varepsilon_*}\right)$$

(where the values ε_i and ε_j are substituted instead of ε_*), then after differentiating expression (7) by variable t we get:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} S_{ij}(t) &= \sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial \dot{p}_k}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial \varepsilon_j} + \frac{\partial p_k}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \varepsilon_j} - \frac{\partial \dot{p}_k}{\partial \varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial \varepsilon_i} - \frac{\partial p_k}{\partial \varepsilon_j}\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \varepsilon_i}\right) = \\
&= \sum_{k=1.n}\sum_{s=1,n}\left(-\frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial \varepsilon_j} - \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial \varepsilon_j} + \right. \\
&\quad + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial p_s}\frac{\partial p_k}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial p_s}{\partial \varepsilon_j} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_s}\frac{\partial p_k}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial q_s}{\partial \varepsilon_j} + \\
&\quad + \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial \varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial \varepsilon_i} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial \varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial \varepsilon_i} - \\
&\quad \left. - \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial p_s}\frac{\partial p_s}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial p_k}{\partial \varepsilon_j} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_s}\frac{\partial q_s}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial p_k}{\partial \varepsilon_j}\right) = 0.
\end{aligned} \tag{8}$$

Consequently, although expression (7) takes on different values for different values of the initial parameters $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$, but if $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$ are fixed, its value at any time will be the same.

Note. If the initial conditions $p_i^0 = p_i(t_0)$, $q_i^0 = q_i(t_0)$ are chosen as the initial parameters $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$, at some initial moment of time $t = t_0$, then the invariant expressions (7) will coincide with the traditional symplectic relations for Hamiltonian systems [4–6]. However, the invariance of expressions (7) with respect to the parameters $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$ with the help of which a multiparameter beam of charged particles is specified, significantly facilitates the transition from Hamiltonian generalized coordinates and momenta to geometrically meaningful values used in charged particle optics.

2. POINCARE – CARTAN INTEGRAL INVARIANT

In expression (5), time is an independent variable that plays a special role, but this is not always convenient. For problems in the optics of charged particles, it is more natural to consider the case when time t becomes one of the dependent generalized coordinates, and any generalized coordinate becomes an independent variable (see the next section). In particular, cross sections $y = \text{const}$ or $z = \text{const}$ allow you to break a complex system into separate "cubes" with a relatively simple structure, and then effectively combine them with each other [5, 6]. However, the Poincaré integral invariant (5) is poorly adapted to this type of action.

Let there be a $(2n+1)$-dimensional beam of trajectories $(p_k(t), q_k(t))$ depending on the parameters $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$ varying in some limited region (see Fig.). Instead of a cross section $t = \text{const}$, we consider a family of $2n$-dimensional cross sections of this beam corresponding to the condition

$$F(p_1, q_1, , \ldots, p_n, q_n, t) = \text{const}. \tag{9}$$

Obviously, cross sections $t = \text{const}$ are one of the special cases of condition (9).

Fig. Tube of trajectories in extended phase space $(x, \dot{x}, t)$ for a parameterized beam of trajectories corresponding to the one-dimensional motion of an ion in an accelerating electric field.
a) section $t = \text{const}$, б) section $x = \text{const}$

After substituting the solution $p_k = p_k(t)$, $q_k = q_k(t)$ to the Hamiltonian equations of motion (1) into equality (9), we obtain the equation

$$F(p_1(t), q_1(t), , \ldots, p_n(t), q_n(t), t) = \tau, \tag{10}$$

in which τ is an arbitrary parameter, which value can be freely changed, and t is time, which is an unknown quantity, closely related to the parameter τ by equality (10). If the algebraic equation (10) is not degenerate, then you can find a solution

$$t = T(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots), \tag{11}$$

where the parameters $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$ appear in relation (11) due to the fact that the functions $p_k(t)$, $q_k(t)$ depend on them. In the same way, if you specify the auxiliary relation (11) in some way, then the functions

$$P_k\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right)=p_k\left(T\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right),;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right)=p_k,$$
$$Q_k\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right)=q_k\left(T\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right),;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right)=q_k, \quad (12)$$
$$T\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right)=t$$

will set a one-parameter family of $2n$-dimensional cross sections of the phase beam of trajectories $\left(P_k(\tau),\mathrm{Q}_k(\tau),T(\tau)\right)$ depending on the parameter τ and corresponding to the conditions $\tau=\mathrm{const}$ in the $(2n+1)$-dimensional extended phase space.

With this formulation of the problem, the parameter τ that performs the sweep of trajectories in the extended phase space is no longer directly related to physical time and, in most cases, can be of a rather abstract nature. This approach makes it possible to more flexibly set and study the conditions for the intersection of beams of trajectories with geometric boundaries separating the individual structural elements of a complex electron or ion optical system.

After substitution (12), the phase variables P_k, Q_k, T forming the extended phase space become equal. In the new coordinates, the values of the Hamiltonian $H\left(p_k,q_k,t\right)$ along a single trajectory are calculated as

$$\bar{H}\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right)=$$
$$=H\left(P_k\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right),Q_k\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right),T\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right)\right).\quad (13)$$

The extended form of the integral invariant (5), which is called the Poincare – Cartan integral invariant [10, 11], has the form:

$$K(\tau)=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}Q_k\right]-\left[\mathrm{d}\bar{H},\mathrm{d}T\right]=\mathrm{const}, \quad (14)$$

where, as before, square brackets denote the outer product of the corresponding linear differential forms, and differentiation is performed with respect to the parameters ε_j.

Expression (14) is derived from expression (5) as follows:

$$\mathrm{d}T=\sum_j\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j, \quad (15)$$

$$\mathrm{d}P_k=\sum_j\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}+\dot{p}_k\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\mathrm{d}p_k-\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}T, \quad (16)$$

$$\mathrm{d}Q_k=\sum_j\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\dot{q}_k\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=\mathrm{d}q_k+\frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}T, \quad (17)$$

$$\mathrm{d}\bar{H}=\sum_j\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_j}\mathrm{d}\varepsilon_j=\sum_j\left(\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_j}\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\mathrm{d}\varepsilon_j=$$
$$=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}P+\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}Q_k\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\mathrm{d}T. \quad (18)$$

From equalities (16) and (17) we can express differentials $\mathrm{d}p_k$ and $\mathrm{d}q_k$ in terms of differentials $\mathrm{d}P_k$, $\mathrm{d}Q_k$, $\mathrm{d}T$. After substituting these differentials into expression (5), where the function $T\left(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...\right)$ is used instead of a variable t, we obtain:

$$\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}p_k,\mathrm{d}q_k\right]=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k+\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}T,dQ_k-\frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}T\right]=$$
$$=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}Q_k\right]-\sum_{k=1,n}\frac{\partial H}{\partial p_k}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}T\right]+\sum_{k=1,n}\frac{\partial H}{\partial q_k}\left[\mathrm{d}T,\mathrm{d}Q_k\right]-\sum_{k=1,n}\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k}\left[\mathrm{d}T,\mathrm{d}T\right]=$$
$$=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}Q_k\right]-\sum_{k=1,n}\left[\frac{\partial H}{\partial p_k}\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}T\right]-\sum_{k=1,n}\left[\frac{\partial H}{\partial q_k}\mathrm{d}Q_k,\mathrm{d}T\right]-\frac{\partial H}{\partial t}\left[\mathrm{d}T,\mathrm{d}T\right]=$$
$$=\sum_{k=1,n}\left[\mathrm{d}P_k,\mathrm{d}Q_k\right]-\left[\mathrm{d}\bar{H},\mathrm{d}T\right] \quad (19)$$

(here the condition $\left[\mathrm{d}T,\mathrm{d}T\right]=0$ was used).

It was shown earlier that, with fixed parameters ε_j, the differential form (5) retains its original value for any change in the variable t. This means that if we substitute a new function $T(\tau;\varepsilon_1,\varepsilon_2,...)$ of a fairly arbitrary form in (5) instead of a variable t, then the resulting expression will retain its original value in the same way, but now for any change in the variable τ. It follows from equality (19) that the differential form (14) will obviously not change its original value in the case of fixed parameters ε_j and changing free variable τ.

Invariant form (14) represents the sum of invariant expressions

$$K_{ij}(\tau)=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_i}\right)-\left(\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)=\text{const},\tag{20}$$

where ε_i and ε_j are any pair of free parameters on which the beam of trajectories $(P_k(\varsigma),Q_k(\tau),T(\tau))$, presented in parameterized form (12), depends. The Hamiltonian H depends on the parameters ε_i and ε_j indirectly, through the generalized coordinates, generalized momenta, and time that describe trajectory, so that the partial derivatives of the Hamiltonian in formula (20) are calculated from the following relation (where ε_* is equal to ε_i or ε_j):

$$\frac{\partial H(P_k,Q_k,T)}{\partial\varepsilon_*}=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_*}+\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_*}\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*}.\tag{21}$$

Let us show directly that expression (20) differs little from the Poincaré invariant (5) and thus, for fixed parameters $\varepsilon_1,\varepsilon_2,...$, must be a constant independent from the variable τ. Indeed,

$$\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_*}+\dot{p}_k\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_*}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*},$$

$$\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_*}+\dot{q}_k\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*}=\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_*}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*},$$

$$\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_*}=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_*}+\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_*}\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_*},$$

where the values ε_i and ε_j are substituted instead of ε_*. Then

$$\begin{aligned}K_{ij}(\tau)&=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial P_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial Q_k}{\partial\varepsilon_i}\right)-\left(\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial\bar{H}}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)=\\
&=\sum_{k=1,n}\left(\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)-\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)\right)-\\
&-\left(\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)+\frac{\partial H}{\partial q_k}\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}\right)\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}+\\
&+\left(\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)+\frac{\partial H}{\partial q_k}\left(\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}+\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\right)+\frac{\partial H}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_j}\right)\frac{\partial T}{\partial\varepsilon_i}=\\
&=\sum_{k=1,n}\left(\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_i}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_j}-\frac{\partial p_k}{\partial\varepsilon_j}\frac{\partial q_k}{\partial\varepsilon_i}\right).\end{aligned}$$

In these expressions, according to relations (12) the substitution $t = T(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, ...)$ is used for the functions $p_k(t)$ and $q_k(t)$, and the substitutions $p_k = P_k(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, ...)$, $q_k = Q_k(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, ...)$, $t = T(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, ...)$ are used for the function $H(p_k, q_k, t)$, according to relation (13). Since the Poincaré invariant (7) with fixed parameters ε_j is a constant that does not depend on the value of the variable t, then after substituting the value into it $t = T(\tau; \varepsilon_1, \varepsilon_2, ...)$, expression (7) turns out to be a constant that does not depend on the variable τ. Conclusion: for any values of the free parameter τ, the value $K_{ij}(\tau)$ retains the same value in the case of fixed parameters ε_j.

Note. It is shown in [10, 11] that if expression (14) is an invariant for some dynamic system, then such a dynamic system is necessarily described by a system of Hamiltonian differential equations with Hamiltonian H. Therefore, such a system cannot take any additional invariant external differential forms that are independent from form (14). Consequently, there cannot be additional functionally independent differential relations similar to the symplectic relations for aberration coefficients used to describe electron and ion beams in charged particle optics [5, 6].

Example: Liouville's law of conservation of phase volume [1–4] is equivalent to the invariance of an external differential form consisting of a single monomial $[\mathrm{d}p_1 \mathrm{d}q_1 \mathrm{d}p_2 \mathrm{d}q_2 ... \mathrm{d}p_n \mathrm{d}q_n]$ with $2n$ factors. However, this differential form is the result of the n-multiple outer product of the differential form (5) with itself. Therefore, the invariance of the external differential Liouville form is an algebraic consequence of the invariance of form (5).

3. REPLACEMENT OF TIME FOR COORDINATE

A careful look at the Poincare – Cartan integral invariant (14) suggests that all paired exterior products of differentials have the same weight. Therefore, you can enter a new virtual generalized momentum $\tilde{P} = -H$ and a new virtual generalized coordinate $\tilde{Q} = T$ into consideration, while taking the function $\tilde{H} = -P_1$ as a new "Hamiltonian", and the generalized coordinate $\tilde{T} = Q_1$ as the new "time". The invariance of the external differential form (14) will not change from such a replacement and, therefore, the corresponding dynamical system will again be described by a system of equations with Hamiltonian symmetry. The legality of this operation is justified by the invariance of the differential expression for the first differential of a complex function [14].

Let's look at this process in more detail. From the algebraic equation

$$p = -H(p_1, q_1, p_2, q_2, ..., p_n, q_n; t) \qquad (22)$$

the generalized momentum p_1 is expressed as a function of the variables p, t, p_2, q_2, …, p_n, q_n and q_1 (for this it is sufficient that the condition $\partial H / \partial p_1 \neq 0$ be satisfied):

$$p_1 = -S(p_2, q_2, ..., p_n, q_n, p, t, q_1). \qquad (23)$$

Additionally, from the equality $q_1(t) = \tau$, time t is expressed as a function of the new independent variable τ: $t = T(\tau)$ (this requires that $\dot{q}_1(t) \neq 0$, which is again equivalent to the condition $\partial H / \partial p_1 \neq 0$). For functions

$$P_i(\tau) = p_i(T(\tau)),\ Q_i(\tau) = q_i(T(\tau)),$$
$$P(\tau) = -H(P_1(\tau), Q_1(\tau), ..., P_n(\tau), Q_n(\tau); T(\tau)),\ T(\tau)$$

we obtain dynamic equations

$$\frac{\mathrm{d}P_i(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = \left(\left. \frac{\mathrm{d}p_i(t)}{\mathrm{d}t} \right|_{t=T(\tau)} \right) \frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{\partial H(p_i, q_i, t)}{\partial q_i} \Bigg/ \frac{\mathrm{d}q_1(t)}{\mathrm{d}t} =$$
$$= -\frac{\partial H(p_i, q_i, t)}{\partial q_i} \Bigg/ \frac{\partial H(p_i, q_i, t)}{\partial p_1},$$
$$\frac{\mathrm{d}Q_i(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = \left(\left. \frac{\mathrm{d}q_i(t)}{\mathrm{d}t} \right|_{t=T(\tau)} \right) \frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = \frac{\partial H(p_i, q_i, t)}{\partial p_i} \Bigg/ \frac{\mathrm{d}q_1(t)}{\mathrm{d}t} =$$
$$= \frac{\partial H(p_i, q_i, t)}{\partial p_i} \Bigg/ \frac{\partial H(p_i, q_i, t)}{\partial p_1},$$

$$\frac{\mathrm{d}P(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = -\left(\left.\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\right|_{t=T(\tau)}\right)\frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = -\left(\sum_{i=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i\right) + \frac{\partial H}{\partial t}\right)\Bigg/\frac{\mathrm{d}q_1(t)}{\mathrm{d}t} =$$
$$= -\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial t}\Bigg/\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial p_1},$$

$$\frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = 1\Bigg/\left(\left.\frac{\mathrm{d}q_1(t)}{\mathrm{d}t}\right|_{t=T(\tau)}\right) = 1\Bigg/\frac{\partial H(p_i,q_i,t)}{\partial p_1},$$

where one needs to make a substitution $p_i = P_i(\tau)$, $q_i = Q_i(\tau)$, $t = T(\tau)$ for the arguments of the functions located to the right of the equal sign.

Note. The solution $q_1(t)$ to Hamiltonian dynamic equations for a generalized coordinate q_1 is a function of not only time t, but also the initial conditions. Accordingly, the inverse function $t = T(\tau)$ is also a function not only of the free variable τ, but also of the same initial conditions. It is obvious that, regardless of the initial conditions $q_1(T(\tau)) \equiv \tau$, so $\dot{q}_1(T(\tau)) \equiv 1/T(\tau)$. In a similar way, functions $p_i(t)$, $q_i(t)$ ($i = 2,3,...,n$) depend not only on time t, but also on the set of initial conditions that was used for calculating the function $q_1(t)$.

Since (23) is a solution to equation (22), the identity holds

$$p \equiv$$
$$\equiv -H\big(-S(p_2,q_2,...,p_n,q_n,p,t,q_1),q_1,p_2,q_2,...,p_n,q_n;t\big). \tag{24}$$

When differentiating identity (24) with respect to the variables p, p_i, q_i and t we obtain the equalities

$$\begin{aligned} &1 = \frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial S}{\partial p}, \quad 0 = \frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial S}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i},\\ &0 = \frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial S}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad 0 = \frac{\partial H}{\partial p_1}\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\partial H}{\partial t}, \end{aligned} \tag{25}$$

where the construction $-S(...)$ that is included in the list of function H, arguments must be replaced* with a variable p_1 in accordance with equality (23).

From the obtained relations, it is possible to express the partial derivatives of the function S in terms of the partial derivatives of the function H. These expressions exactly coincide with the right-hand sides of the previously obtained equations for $P_i(\tau)$, $Q_i(\tau)$, $P(\tau)$, $T(\tau)$. Consequently, the functions $P_i(\tau)$, $Q_i(\tau)$ (where $i = 2,3,...,n$), $P(\tau)$, $T(\tau)$ satisfy the Hamiltonian equations with the Hamiltonian $S(p_2,q_2,...,p_n,q_n,p,t,\tau)$, where $\tau = q_1$ is the generalized coordinate chosen to be the independent variable instead of time t:

$$\frac{\mathrm{d}P_i(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{\partial S}{\partial q_i}, \qquad \frac{\mathrm{d}Q_i(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = \frac{\partial S}{\partial p_i}, \qquad \frac{\mathrm{d}P(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{\partial S}{\partial t},$$
$$\frac{\mathrm{d}T(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = \frac{\partial S}{\partial p}.$$

Note. The theorem on the possibility of replacing time with a coordinate while preserving the Hamiltonian structure of dynamic equations belongs to Alex Dragt [15]. In his fundamental work [16], the transition to new generalized coordinates and momenta appears as a *deus ex machina*, not very convincingly justified using the principle of least action. When using the Poincare – Cartan integral invariant, this transition looks natural and almost obvious.

* This is a rather subtle point. Generally speaking, both equalities (25) and the conclusions obtained with their help cannot be valid for completely arbitrary variables p_1,q_1, p_2,q_2, …, p_n,q_n, p,t. , ..., , . Either the variable p_1 is independent, and the variable p is expressed through it and the remaining free variables — using relation (22), or the variable p is independent, and the variable p_1 is expressed through it and the remaining free variables — using relation (23). But because the form of a first-order differential for a complex function is invariant [14], one can change which of the variables depends on which along the way, without worrying too much about the legality of such an operation. For derivatives and differentials of higher order, this approach, naturally, will not work.

4. EXTENDED SET OF HAMILTONIC VARIABLES

When comparing the Poincaré – Cartan integral invariant (14) and the original Poincaré integral invariant (5), it is easy to assume that instead of excluding any pair "generalized momentum – generalized coordinate" from the list of Hamiltonian variables and replacing them with the "total energy – time" pair (see the previous section), it makes sense to supplement the current list of Hamiltonian variables with another pair of values, preserving the Hamiltonian structure of dynamic equations for the extended list of variables. After such an operation, the Poincaré – Cartan integral invariant (14) turns into the Poincaré integral invariant (5), written for the extended system of Hamiltonian variables, and the time-dependent Hamiltonian becomes stationary.

Let's add new functions $h(t) = -H\left(p_i(t), q_i(t), t\right)$ and $\tau(t) = t$ to the list of solutions to Hamiltonian dynamic equations $p_i(t)$, $q_i(t)$ (where $i = 1, 2, ..., n$). We also add a new free variable s, where the connection between time t and variable s is given as $t = T(s)$ using a yet undefined function $T(s)$.

Let now $L(p_i, q_i, h, \tau)$ be a new Hamiltonian that does not explicitly depend on the free variable s. Let's look at the functions

$$\tilde{p}_i(s) = p_i\left(T(s)\right), \quad \tilde{q}_i(s) = q_i\left(T(s)\right),$$
$$\tilde{h}(s) = -H\left(\tilde{p}_i(s), \tilde{q}_i(s), \tilde{\tau}(s)\right), \quad \tilde{\tau}(s) = T(s),$$

which presumably should be solutions of new Hamiltonian equations. These functions must satisfy the equalities

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{p}_i(s)}{\mathrm{d}s} = \dot{p}_i\left(T(s)\right)\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s} = -\frac{\partial H\left(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, \tilde{\tau}\right)}{\partial q_i}\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s} = -\frac{\partial L\left(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, \tilde{h}, \tilde{\tau}\right)}{\partial q_i},$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{q}_i(s)}{\mathrm{d}s} = \dot{q}_i\left(T(s)\right)\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial H\left(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, \tilde{\tau}\right)}{\partial p_i}\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial L\left(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, \tilde{h}, \tilde{\tau}\right)}{\partial p_i},$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{h}(s)}{\mathrm{d}s} = \left(-\left.\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\right|_{t=T(s)}\right)\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s} = \left(-\sum_{i=1,n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i\right) - \frac{\partial H}{\partial t}\right)\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s} = -\frac{\partial H\left(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, \tilde{\tau}\right)}{\partial \tau}\frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s} = -\frac{\partial L\left(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, \tilde{h}, \tilde{\tau}\right)}{\partial \tau},$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\tau}(s)}{\mathrm{d}s} = \frac{\mathrm{d}T(s)}{\mathrm{d}s} = F\left(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, \tilde{h}, \tilde{\tau}\right) = \frac{\partial L\left(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i, \tilde{h}, \tilde{\tau}\right)}{\partial h}, \tag{26}$$

where $F(p_i, q_i, h, \tau)$ is some as yet undefined function.

Based on the analysis of equalities (26), we require that the unknown function $L(p_i, q_i, h, \tau)$ satisfy the system of partial differential equations

$$\frac{\partial L\left(p_i, q_i, h, \tau\right)}{\partial q_i} = \frac{\partial H\left(p_i, q_i, \tau\right)}{\partial q_i}F\left(p_i, q_i, h, \tau\right),$$
$$\frac{\partial L\left(p_i, q_i, h, \tau\right)}{\partial p_i} = \frac{\partial H\left(p_i, q_i, \tau\right)}{\partial p_i}F\left(p_i, q_i, h, \tau\right),$$
$$\frac{\partial L\left(p_i, q_i, h, \tau\right)}{\partial \tau} = \frac{\partial H\left(p_i, q_i, \tau\right)}{\partial \tau}F\left(p_i, q_i, h, \tau\right),$$
$$\frac{\partial L\left(p_i, q_i, h, \tau\right)}{\partial h} = F\left(p_i, q_i, h, \tau\right) \tag{27}$$

(equality $\mathrm{d}T(s)/\mathrm{d}s = F$ was used here).

In order for system (27) to have a solution, it is necessary and sufficient (see [17, 18]) that for all mixed partial derivatives, which are calculated using the right-hand sides of the system of equations (27), the identities are satisfied

$$\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial L}{\partial p_j}\right) = \frac{\partial}{\partial p_j}\left(\frac{\partial L}{\partial p_i}\right), \quad \frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\right) = \frac{\partial}{\partial q_j}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right),$$
$$\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\right) = \frac{\partial}{\partial q_j}\left(\frac{\partial L}{\partial p_i}\right),$$
$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\frac{\partial L}{\partial p_i}\right) = \frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial L}{\partial \tau}\right), \quad \frac{\partial}{\partial \tau}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right) = \frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial L}{\partial \tau}\right),$$
$$\frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{\partial L}{\partial p_i}\right) = \frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{\partial L}{\partial h}\right), \quad \frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right) = \frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial L}{\partial h}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{\partial L}{\partial \tau}\right)=\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\frac{\partial L}{\partial h}\right).$$

For the system of equations (27), the corresponding relations have the form:

$$\frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial F}{\partial p_i}=\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial p_j},\qquad \frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial F}{\partial q_i}=\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial q_j},$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial F}{\partial p_i}=\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_j},$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial \tau}=\frac{\partial H}{\partial \tau}\frac{\partial F}{\partial p_i},\quad \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial \tau}=\frac{\partial H}{\partial \tau}\frac{\partial F}{\partial q_i},$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial h}=\frac{\partial F}{\partial p_i},\qquad \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial h}=\frac{\partial F}{\partial q_i},\qquad \frac{\partial H}{\partial \tau}\frac{\partial F}{\partial h}=\frac{\partial F}{\partial \tau}.$$

It is easy to see that to satisfy these relations, it is necessary and sufficient that the function $F\left(p_i,q_i,h,\tau\right)$ satisfy the system of linear partial differential equations of the first order:

$$\begin{aligned}&\forall i:\ \frac{\partial F}{\partial p_i}-\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial h}=0,\\ &\forall i:\ \frac{\partial F}{\partial q_i}-\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial h}=0,\\ &\frac{\partial F}{\partial \tau}-\frac{\partial H}{\partial \tau}\frac{\partial F}{\partial h}=0.\end{aligned}\tag{28}$$

The system of linear differential equations (28) in partial derivatives of the first order is consistent (see [17, 18]), and its general solution has the form

$$F\left(p_i,q_i,h,\tau\right)=\Phi\left(h+H\left(p_i,q_i,\tau\right)\right),\tag{29}$$

where $\Phi(u)$ is an arbitrary function. In the same way, when condition (29) is satisfied, then the system of linear first-order partial differential equations (27) is consistent, and its general solution has the form

$$L\left(p_i,q_i,h,\tau\right)=\Omega\left(h+H\left(p_i,q_i,\tau\right)\right),\tag{30}$$

where $\Omega(u)$ is an arbitrary function. In this case, the equality $\Omega'(u)=\Phi(u)$ must be satisfied for the function that is used in condition (29),. This does not contradict the statement made earlier about the absence of conditions imposed on the function $\Phi(u)$: if $\Omega(u)$ is an arbitrary function for solving (30) to the system of equations (27), then $\Phi(u)=\Omega'(u)$ is an arbitrary function for solving (29) of the system of equations (28).

Conclusion: the system of dynamic equations for the extended system of functions $p_i(t)$, $q_i(t)$, $h(t)=-H\left(p_i(t),q_i(t),t\right)$ and $\tau(t)=t$ is Hamiltonian with Hamiltonian (30). Up to the sign, the physical meaning of the function $h(t)$ is the Hamiltonian of the original dynamical system (the total energy if the Hamiltonian H does not depend on time), and the physical meaning of the function $\tau(t)$ is the time of motion.

Note. Hamiltonian (30) does not depend explicitly on the new "time" s, so that the corresponding analogue of the law of conservation of energy must be valid for it. This conservation law is a condition $h+H\left(p_i,q_i,\tau\right)=\text{const}$ (it is easy to verify that the expression $\tilde{h}+H\left(\tilde{p}_i,\tilde{q}_i,\tilde{\tau}\right)$ is the first integral for dynamic equations (26)). The variable h is auxiliary, therefore, without loss of generality, we can require that the condition $h^0+H\left(p_i^0,q_i^0,\tau^0\right)=0$ be satisfied at the initial point of the trajectory.

In this case, at any point of the trajectory that obeys dynamic equations (26) with Hamiltonian (30), the identity $\tilde{h}(s)\equiv -H\left(\tilde{p}_i(s),\tilde{q}_i(s),\tilde{\tau}(s)\right)$ is satisfied.

5. LOCAL COORDINATES AND PULSES

Let $p_i^0(t)$, $q_i^0(t)$ be a fixed reference trajectory (particular solution) satisfying the Hamiltonian equations with the Hamiltonian $H^0\left(p_i^0,q_i^0,t\right)$, and let $p_i(t)$ $q_i(t)$ be the general solution to Hamiltonian equations with Hamiltonian $H\left(p_i,q_i,t\right)$. It is easy to check that the increments $\delta p_i(t)$ of generalized pulses and the increments $\delta q_i(t)$ of generalized coordinates, which are set by the equalities

$$p_i(t)=p_i^0(t)+\delta p_i(t),\ q_i(t)=q_i^0(t)+\delta q_i(t),\tag{31}$$

satisfy the Hamiltonian equations with the Hamiltonian

$$\tilde{H}\left(\delta p_i,\delta q_i,t\right)=H\left(p_i^0\left(t\right)+\delta p_i,q_i^0\left(t\right)+\delta q_i,t\right)-$$
$$-\sum_{i=1,n}\left(\frac{\partial H^0\left(p_i^0\left(t\right),q_i^0\left(t\right),t\right)}{\partial q_i^0}\delta q_i+\right.$$
$$\left.+\frac{\partial H^0\left(p_i^0\left(t\right),q_i^0\left(t\right),t\right)}{\partial p_i^0}\delta p_i\right). \quad (32)$$

Thus, the dynamic equations for local increments of generalized momenta and coordinates again have Hamiltonian symmetry. For the purposes of charged particle optics, it is essential that the reference trajectory and the generalized momenta and coordinates of the general solution describing the motion of charged particles can be different functions. In particular, the reference trajectory can correspond to movement in an ideal electric and magnetic field, and the solution itself is movement in a disturbed electric and magnetic field, where the disturbance is caused by inaccuracies in the manufacture and assembly of electrodes, magnets, and coils with current, as well as inaccuracies of electric potentials applied to the electrodes, and inaccuracies of electric currents, that flow through the coils.

Note. Generally speaking, the functions $p_i^0\left(t\right)$, $q_i^0\left(t\right)$ can be arbitrary functions of time, and not the trajectory of the reference charged particle. In this case, the Hamiltonian, with the help of which the Hamiltonian equations for local increments of generalized coordinates and generalized momenta are determined, has the form

$$\tilde{H}\left(\delta p_i,\delta q_i,t\right)=H\left(p_i^0\left(t\right)+\delta p_i,q_i^0\left(t\right)+\delta q_i,t\right)+$$
$$+\sum_{i=1,n}\left(\dot{p}_i^0\left(t\right)\cdot\delta q_i-\dot{q}_i^0\left(t\right)\cdot\delta p_i\right). \quad (33)$$

A special case of this expression is formula (32). It should, however, be emphasized that the case (32), where the reference trajectory is the real trajectory of a charged particle in an ideal electric and magnetic field, is important for constructing physically meaningful models of the motion of charged particles.

6. LOCAL COORDINATE SYSTEM WITH DIRECTION CONTROL OF COORDINATE AXES

In the previous section, it was shown that a local coordinate system tied to some reference trajectory can demonstrate all the advantages of the Hamiltonian symmetry of the equations of motion. Such a coordinate system makes it possible to effectively use the displacement of the coordinate center and its movement along the reference trajectory, but at the same time, it keeps the global direction of the coordinate axes unchanged. This section will show that it is possible to flexibly control the direction of the coordinate axes of the local coordinate system (for example, combine them with tangents and/or normals to the reference trajectory that correspond to the current anchor point of the local coordinate system) and maintain Hamiltonian symmetry equations of motion.

Since any n-dimensional rotation can be considered as a superposition of elementary planar rotations affecting any pair of coordinates and not changing the remaining coordinates [19], we limit ourselves to proving the conservation of Hamiltonian properties when performing such elementary rotations. Let a pair of local generalized coordinates q_r, q_s undergo a rotation through an angle $\alpha\left(t\right)$ at the point of the reference trajectory corresponding to the moment of time t. A pair of local generalized pulses p_r, p_s that correspond to the selected coordinates rotates synchronously with the coordinates. The transformation of coordinates and pulses is as follows:

$$\begin{cases}\tilde{q}_r\left(t\right)=q_r\left(t\right)\cos\alpha\left(t\right)-q_s\left(t\right)\sin\alpha\left(t\right),\\ \tilde{q}_s\left(t\right)=q_r\left(t\right)\sin\alpha\left(t\right)+q_s\left(t\right)\cos\alpha\left(t\right),\\ \tilde{p}_r\left(t\right)=p_r\left(t\right)\cos\alpha\left(t\right)-p_s\left(t\right)\sin\alpha\left(t\right),\\ \tilde{p}_s\left(t\right)=p_r\left(t\right)\sin\alpha\left(t\right)+p_s\left(t\right)\cos\alpha\left(t\right).\end{cases} \quad (34)$$

The inverse transformation of coordinates and pulses is determined by the formulas

$$\begin{cases}q_r\left(t\right)=\tilde{q}_r\left(t\right)\cos\alpha\left(t\right)+\tilde{q}_s\left(t\right)\sin\alpha\left(t\right),\\ q_s\left(t\right)=-\tilde{q}_r\left(t\right)\sin\alpha\left(t\right)+\tilde{q}_s\left(t\right)\cos\alpha\left(t\right),\\ p_r\left(t\right)=\tilde{p}_r\left(t\right)\cos\alpha\left(t\right)+\tilde{p}_s\left(t\right)\sin\alpha\left(t\right),\\ p_s\left(t\right)=-\tilde{p}_r\left(t\right)\sin\alpha\left(t\right)+\tilde{p}_s\left(t\right)\cos\alpha\left(t\right).\end{cases} \quad (35)$$

Dynamic equations for transformed coordinates and momenta are obtained from differentiation with respect to time of relations (35):

$$\dot{q}_r=\dot{\tilde{q}}_r\cos\alpha+\dot{\tilde{q}}_s\sin\alpha-\dot{\alpha}\tilde{q}_r\sin\alpha+\dot{\alpha}\tilde{q}_s\cos\alpha=\frac{\partial H}{\partial p_r},$$
$$\dot{q}_s=-\dot{\tilde{q}}_r\sin\alpha+\dot{\tilde{q}}_s\cos\alpha-\dot{\alpha}\tilde{q}_r\cos\alpha-\dot{\alpha}\tilde{q}_s\sin\alpha=\frac{\partial H}{\partial p_s},$$
$$\dot{p}_r=\dot{\tilde{p}}_r\cos\alpha+\dot{\tilde{p}}_s\sin\alpha-\dot{\alpha}\tilde{p}_r\sin\alpha+\dot{\alpha}\tilde{p}_s\cos\alpha=-\frac{\partial H}{\partial q_r},$$
$$\dot{p}_s=-\dot{\tilde{p}}_r\sin\alpha+\dot{\tilde{p}}_s\cos\alpha-\dot{\alpha}\tilde{p}_r\cos\alpha-\dot{\alpha}\tilde{p}_s\sin\alpha=-\frac{\partial H}{\partial q_s}, \quad (36)$$

where it is necessary to make a substitution for the variables q_r, q_s, p_r, p_s and replace them with the corresponding expressions with the variables $\tilde{q}_r$, $\tilde{q}_s$, $\tilde{p}_r$, $\tilde{p}_s$ in the list of function H arguments, as given by formulas (35).

After elementary transformations, equations (36) take the form

$$\begin{aligned}
\dot{\tilde{q}}_r &= \frac{\partial H}{\partial p_r}\cos\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_s}\sin\alpha - \dot{\alpha}\tilde{q}_s, \\
\dot{\tilde{p}}_r &= -\frac{\partial H}{\partial q_r}\cos\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_s}\sin\alpha - \dot{\alpha}\tilde{p}_s, \\
\dot{\tilde{q}}_s &= \frac{\partial H}{\partial p_r}\sin\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_s}\cos\alpha + \dot{\alpha}\tilde{q}_r. \\
\dot{\tilde{p}}_s &= -\frac{\partial H}{\partial q_r}\sin\alpha - \frac{\partial H}{\partial q_s}\cos\alpha + \dot{\alpha}\tilde{p}_r.
\end{aligned} \tag{37}$$

Let us define a new Hamiltonian $\tilde{H}$ using the formula

$$\begin{aligned}
&\tilde{H}\left(...,\tilde{p}_r,\tilde{q}_r,\tilde{p}_s,\tilde{q}_s,...\right) = \\
&= H\left(...,\tilde{p}_r\cos\alpha + \tilde{p}_s\sin\alpha, \tilde{q}_r\cos\alpha + \tilde{q}_s\sin\alpha,\right. \\
&\qquad \left. -\tilde{p}_r\sin\alpha + \tilde{p}_s\cos\alpha, -\tilde{q}_r\sin\alpha + \tilde{q}_s\cos\alpha,...\right) + \\
&\qquad + \dot{\alpha}\left(-\tilde{p}_r\tilde{q}_s + \tilde{p}_s\tilde{q}_r\right).
\end{aligned} \tag{38}$$

The partial derivatives for function (38) are equal to

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{p}_r} &= \frac{\partial H}{\partial p_r}\cos\alpha - \frac{\partial H}{\partial p_s}\sin\alpha - \dot{\alpha}\tilde{q}_s, \\
\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{q}_r} &= \frac{\partial H}{\partial q_r}\cos\alpha - \frac{\partial H}{\partial q_s}\sin\alpha + \dot{\alpha}\tilde{p}_s, \\
\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{p}_s} &= \frac{\partial H}{\partial p_r}\sin\alpha + \frac{\partial H}{\partial p_s}\cos\alpha + \dot{\alpha}\tilde{q}_r, \\
\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{q}_s} &= \frac{\partial H}{\partial q_r}\sin\alpha + \frac{\partial H}{\partial q_s}\cos\alpha - \dot{\alpha}\tilde{p}_{\boldsymbol{r}}.
\end{aligned}$$

Thus, dynamic equations (37) turn out to be Hamiltonian ones with Hamiltonian (38).

CONCLUSIONS

The previous sections examined elementary operations, each of which preserves the Hamiltonian symmetry of the equations of motion by appropriately changing the Hamiltonian. By combining these operations into a single whole, it is possible to substantiate the Hamiltonian structure of the equations of motion and, as a consequence, the legality of using specific Hamiltonian invariants for local coordinate systems that are used in the optics of charged particles.

The procedure is as follows. Using the transformation discussed in Section 5, one can move from a global coordinate system to a local coordinate system, the center of which moves synchronously with the movement along the reference trajectory. Then, using a series of transformations from Section 6, the local coordinate system can be rotated at each point of the reference trajectory so that one axis is directed tangent to the reference trajectory, and the other two axes form an accompanying trihedron. For example, a natural choice would be when one of the axes lies in the tangent plane of the reference trajectory and is directed normal to the tangent vector, and the second axis is directed normal to the tangent plane and thereby perpendicular to each of the previously selected coordinate axes [19]. The initial value of the tangent coordinate is assigned to the value of the length of the reference trajectory from the starting point to the current moment so that the tangent coordinate is not identically zero when moving the coordinate system along the trajectory.

If we write the equations of motion for the reference trajectory in such a coordinate system, then the solution will be the tangent coordinate that monotonically increases over time, while the other two local coordinates along the reference trajectory are identically equal to zero. After replacing the time of movement by the tangent coordinate (Section 3), we will come close to the system of geometric parameters that is usually used in the optics of charged particles to describe beams of trajectories [5, 6].

Up until this step, when moving from one coordinate system to the next coordinate system, the Hamiltonian symmetry of the equations of motion was preserved, at least due to a significant rearrangement of the Hamiltonian of the dynamical system. This means that for generalized coordinates and generalized momenta written in the new coordinate system, the integral Poincaré invariant will be preserved (Section 1). Since it does not explicitly include the Hamiltonian of the dynamical system, the distortions of the original Hamiltonian function that had to be applied when moving from system to system are not very important.

The last step - the transition from Hamiltonian generalized momenta and coordinates to geometrically meaningful parameters (angles and energies), unfortunately, inevitably destroys the Hamiltonian symmetry of the dynamic system. As a consequence of this fact, for the geometric parameters of a pencil of trajectories it is no longer possible to directly use the Hamiltonian invariants considered in Sections 1 and 2. However, due to the simple functional connection between the geometric parameters and the Hamiltonian generalized coordinates and momenta, it is possible to construct analogues of the Hamiltonian invariants for the geometric parameters of trajectory beams. This procedure and the important conclusions that follow from it will be discussed in a future publication.