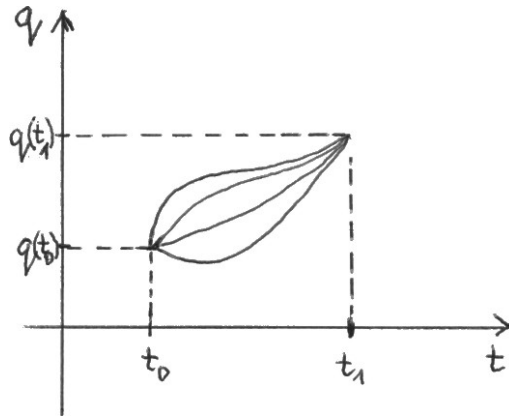


MECHANIKA KLASYCZNA

3 Nierelatywistyczna mechanika analityczna

3.1 Zasada wariacyjna Hamiltona

Przejdziemy teraz do szerszego omówienia pewnych zagadnień związanych z mechaniką układu punktów materialnych lub brył sztywnych z dwustronnymi więzami holonomicznymi doskonałymi i z siłami ze zdefiniowaną uogólnioną energią potencjalną. Układ taki jest w pełni scharakteryzowany przez lagranżjan $L(q, \dot{q}, t)$ i jego ruch wyznaczają równania Lagrange'a II rodzaju $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$, $i = 1, \dots, f$, gdzie f - liczba stopni swobody układu, q - współrzędne uogólnione zgodne z więzami.



Działanie Hamiltona $S[q] \equiv \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}, t) dt$ dla układu o lagranżjanie L w przedziale czasu (t_0, t_1) jest funkcjonalem ruchów $q(t)$, jakie mogłyby wystąpić dla rozważanego układu (ruchów niekoniecznie rzeczywistych). Rozważmy wariację działania (będącą dla funkcjonalu odpowiednikiem różniczki funkcji) przy wariacji ruchu (bez wariacji czasu) $q(t) \rightarrow q'(t) = q(t) + \delta q(t)$, czyli także odpowiadającej temu wariacji prędkości uogólnionej $\dot{q}(t) \rightarrow \dot{q}'(t) = \dot{q}(t) + \frac{d\delta q(t)}{dt}$:

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d\delta q_i}{dt} \right) dt = \int_{t_0}^{t_1} \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt + \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \Big|_{t_0}^{t_1},$$

gdzie wykonaliśmy całkowanie przez części drugiego składnika sumy. Jeśli rozważymy wariacje ruchu bez wariacji na końcach przedziału całkowania $\delta q(t_0) = 0 = \delta q(t_1)$, to z dowolności wariacji δq wewnątrz przedziału wynika równoważność znikania takiej wariacji działania S i równań Lagrange'a drugiego rodzaju $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$.

Wyprowadzony wyżej związek nazywa się **zasadą wariacyjną Hamiltona** (1834): w dowolnym przedziale czasu (t_0, t_1) ruchem rzeczywistym układu, czyli będącym rozwiązaniem równań Lagrange'a II rodzaju, jest taki ruch $q(t)$, dla którego znika wariacja działania S przy dowolnych wariacjach δq znikających na brzegach przedziału $\delta q(t_0) = 0 = \delta q(t_1)$.

Wariacja dla funkcjonalu jest odpowiednikiem różniczki dla funkcji i znikanie wariacji działania jest warunkiem koniecznym występowania ekstremum działania dla ruchu rzeczywistego. Można udowodnić, że dla dostatecznie małych przedziałów czasu zasada wariacyjna Hamiltona oznacza zasadę najmniejszego działania Hamiltona, czyli rozważane ekstremum odpowiada minimum działania.

Zasada wariacyjna Hamiltona jest odpowiednikiem ogólnego twierdzenia matematycznego z rachunku wariacyjnego:

Znikanie wariacji funkcjonału $\int_{x_0}^{x_1} F(y, y', x) dx$ dla funkcji $y(x)$ przy dowolnych wariacjach δy znikających na brzegu przedziału $\delta y(x_0) = 0 = \delta y(x_1)$ jest równoważne temu, że funkcja $y(x)$ jest rozwiązaniem równania Eulera-Lagrange'a $\frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0$.

Funkcję y , dla której znika wariacja funkcjonału, nazywa się ekstremalą funkcjonału.

Przykład.

Rozważmy jednowymiarowy oscylator harmoniczny o lagranżjanie $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ i jego ruch w przedziale $(0, t_1)$ odpowiadający przejściu od $x(0) = 0$ do $x(t_1) = x_1$.

Ruch rzeczywisty rozpoczynający się w $x(0) = 0$ ma postać $x = A \sin(\omega t)$ i z warunku $A \sin(\omega t_1) = x_1$ wynika, że określony jest wzorem $x = x_1 \frac{\sin(\omega t)}{\sin(\omega t_1)}$. Działanie dla ruchu rzeczywistego wynosi

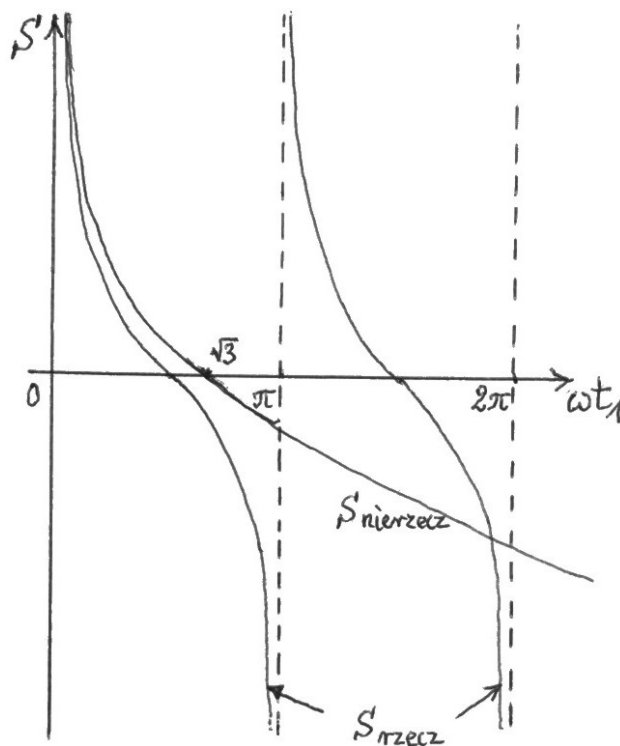
$$\begin{aligned} S_{rzecz} &= \int_{t_0}^{t_1} dt \left[\frac{1}{2} m \frac{x_1^2}{\sin^2(\omega t_1)} \omega^2 \cos^2(\omega t) - \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{x_1^2}{\sin^2(\omega t_1)} \sin^2(\omega t) \right] = \\ &= \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{x_1^2}{\sin^2(\omega t_1)} \int_0^{t_1} \cos(2\omega t) dt = \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{x_1^2}{\sin^2(\omega t_1)} \frac{\sin(2\omega t_1)}{2\omega} = \\ &= \frac{1}{2} m \omega x_1^2 \operatorname{ctg}(\omega t_1) = \frac{1}{2} m \omega x_1^2 \left(\frac{1}{\omega t_1} - \frac{1}{3} \omega t_1 + (\text{dalsze wyrazy ujemne}) \right), \end{aligned}$$

gdzie na końcu dokonaliśmy rozwinięcia zbieżnego dla $0 < \omega t_1 < \pi$.

Działanie dla prostego ruchu nierzeczywistego $x = \frac{x_1}{t_1} t$ wynosi

$$S_{nierzecz} = \frac{1}{2} m \frac{x_1^2}{t_1^2} \int_0^{t_1} dt (1 - \omega^2 t^2) = \frac{1}{2} m \omega x_1^2 \left(\frac{1}{\omega t_1} - \frac{1}{3} \omega t_1 \right)$$

Dla $0 < \omega t_1 < \pi$ mamy więc $S_{rzecz} < S_{nierzecz}$, ale dla $\omega t_1 > \pi$ ruch rzeczywisty (ekstremala) niekoniecznie odpowiada minimum działania Hamiltona.



Zasada wariacyjna Hamiltona (obok innych zasad wariacyjnych, np. zasady Maupertuis i zasady Jacobiego omówionych np. w podręcznikach Białkowskiego czy Rubinowicza i Królikowskiego)

jest użyteczna także w innych działach fizyki niż mechanika klasyczna (odpowiednikiem zasady Jacobiego w optyce geometrycznej jest zasada Fermata). Zasady wariacyjne stanowią istotnie nowe spojrzenie na ruch. Różniczkowe równania ruchu wiążą ze sobą przyczynę (siłę) ze zmianą ruchu w każdej chwili, czyli są wyrazem przyczynowego (kauzalnego) opisu zjawisk fizycznych. Natomiast zasady wariacyjne porównują ruchy potencjalnie możliwe w skończonym przedziale i określają warunki, które muszą być spełnione przez ruch rzeczywisty. Opis taki jest więc opisem teleologicznym: układ porusza się tak, aby był osiągnięty pewien cel, odpowiadający ekstremalności działania. W 1948 r. R. Feynman zwrócił uwagę na realność tych potencjalnych ruchów w mikroświecie, w którym ze względu na zasadę nieoznaczoności Heisenberga następuje rozmycie torów cząstek, i sformułował nowe podejście do mechaniki kwantowej (metodę całek po trajektoriach). Istnieje głęboka analogia między mechaniką klasyczną i mechaniką kwantową a optyką geometryczną i optyką falową.

3.2 Twierdzenie Noether

Rozważmy ogólne nieosobliwe przekształcenie współrzędnych uogólnionych i czasu:

$$\begin{aligned} t &\rightarrow t' = t'(q, t), \\ q &\rightarrow q' = q'(q, t). \end{aligned}$$

Aby wygenerować równania ruchu w zmiennych primowanych, musimy przekształcić lagranżjan $L(q, \dot{q}, t) \rightarrow L'(q', \frac{dq'}{dt'}, t')$ w ten sposób, by spełniony był warunek:

$$\boxed{L'(q', \frac{dq'}{dt'}, t')dt' = [L(q, \dot{q}, t) - \frac{d\Phi(q, t)}{dt}]dt,}$$

czyli by zasada wariacyjna Hamiltona ze zmiennymi primowanymi generowała ruch rzeczywisty równoważny ekstremalom w zmiennych nieprimowanych (przypominamy, że lagranżjany różniące się o $\frac{d\Phi(q, t)}{dt}$ prowadzą do identycznych równań ruchu).

Przykład

Jeśli $L(x, \frac{dx}{dt}, t) = \frac{1}{2}m(\frac{dx}{dt})^2 - V(x)$, to równania ruchu mają postać

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\partial V}{\partial x} = 0.$$

Przy przekształceniu $t' = t + \epsilon t^2$, $x' = x$, czyli $t = \frac{\sqrt{1+4\epsilon t'}-1}{2\epsilon}$, $dt = \frac{dt'}{\sqrt{1+4\epsilon t'}}$, po przejściu do nowego czasu równanie ruchu przyjmie postać ($\frac{dx}{dt} = \sqrt{1+4\epsilon t'} \frac{dx'}{dt'}$, $\frac{d^2x}{dt^2} = (1+4\epsilon t') \frac{d^2x'}{dt'^2} + 2\epsilon \frac{dx'}{dt'}$):

$$m(1+4\epsilon t') \frac{d^2x'}{dt'^2} + 2m\epsilon \frac{dx'}{dt'} + \frac{\partial V}{\partial x'} = 0.$$

Równanie Lagrange'a II rodzaju $\frac{d}{dt'} \frac{\partial L'}{\partial \frac{dx'}{dt'}} - \frac{\partial L'}{\partial x'} = 0$ będzie takie, jeśli po przekształceniu lagranżjan będzie miał postać zgodną z podanym wyżej warunkiem

$$L'(x', \frac{dx'}{dt'}, t') = \frac{1}{2}m\sqrt{1+4\epsilon t'} (\frac{dx'}{dt'})^2 - \frac{1}{\sqrt{1+4\epsilon t'}} V(x')$$

(zwróćmy uwagę, że w tym wypadku $L'(x', \frac{dx'}{dt'}, t') \neq L(x', \frac{dx'}{dt'}, t')$ i $\Phi(x, t) = 0$).

Przekształceniem symetrii nazywamy takie przekształcenie współrzędnych uogólnionych i czasu, przy którym (ewentualnie przy odpowiednim wyborze funkcji $\Phi(q, t)$) **postać** lagranżjanu nie ulega zmianie

$$\boxed{L'(q', \frac{dq'}{dt'}, t') = L(q', \frac{dq'}{dt'}, t'),}$$

czyli nie ulega zmianie **postać** równań ruchu.

Jeśli przekształcenia symetrii tworzą grupę Liego, czyli grupę ciągłą, którą można generować przez przekładanie przekształceń nieskończonych:

$$\begin{aligned} t' &= t + \Delta t, \\ q'(t') &= q(t) + \Delta q, \end{aligned}$$

(zmiany (wariacje) oznaczamy przez Δ , a nie δ , ze względu na uwzględnianie wariacji czasu), to dla takich nieskończonych przekształceń symetrii warunk

$$L(q', \frac{dq'}{dt'}, t') \frac{dt'}{dt} - L(q, \dot{q}, t) + \frac{d\Phi(q, t)}{dt} = 0$$

z dokładnością do wyrazów liniowych w Δt i Δq przyjmie postać:

$$[L(q, \dot{q}, t) + \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \Delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \Delta \dot{q}_i \right) + \frac{\partial L}{\partial t} \Delta t + \dots] \left(1 + \frac{d\Delta t}{dt} \right) - L(q, \dot{q}, t) + \frac{d\Delta\Phi}{dt} + \dots = 0.$$

Ponieważ

$$\begin{aligned} \Delta \dot{q}_i &\equiv \frac{dq'(t')}{dt'} - \frac{dq(t)}{dt} = \left(\frac{dq_i}{dt} + \frac{d\Delta q_i}{dt} \right) \frac{1}{1 + \frac{d\Delta t}{dt}} - \frac{dq_i}{dt} = \\ &= \left(\dot{q}_i + \frac{d\Delta q_i}{dt} \right) \left(1 - \frac{d\Delta t}{dt} + \dots \right) - \dot{q}_i = \frac{d}{dt} \Delta q_i - \dot{q}_i \frac{d}{dt} \Delta t + \dots, \end{aligned}$$

to rozważany warunek ostatecznie przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^f \Delta q_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) + \Delta t \left[\frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^f \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L \right) + \frac{\partial L}{\partial t} \right] + \\ + \frac{d}{dt} \left[\sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \Delta q_i - \left(\sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L \right) \Delta t + \Delta\Phi \right] = 0. \end{aligned}$$

Dla ruchów rzeczywistych, gdy $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$ i $\frac{dG}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t}$, a $p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ i $G \equiv \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - L$ są pędami uogólnionymi i energią uogólnioną układu, otrzymujemy zasadę zachowania:

$$\boxed{\frac{d}{dt} \left[\sum_{i=1}^f (p_i \Delta q_i) - G \Delta t + \Delta\Phi \right] = 0.}$$

Jeśli rozważana grupa przekształceń symetrii jest p -parametrową grupą Liego, to dla ruchów rzeczywistych mamy p zachowywanych wielkości, będących współczynnikami przy poszczególnych parametrach nieskończonych.

Twierdzenie Noether (1916)

Jeśli grupa przekształceń symetrii jest p -parametrową grupą Liego, to dla ruchów rzeczywistych mamy p zasad zachowania.

Przykład

Wróćmy do problemu n ciał, czyli odosobnionego układu n swobodnych punktów materialnych o masach m_i , oddziałujących ze sobą siłami centralnymi zachowawczymi o potencjałach $V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$, $V_{ij} = V_{ji}$, a więc układu o lagranżjanie

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i \dot{\vec{r}}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|).$$

Grupą symetrii tego układu jest w tym wypadku 10-parametrowa grupa przekształceń Galileusza i z twierdzenia Noether wnioskujemy, że dla problemu n ciał istnieje 10 ogólnych zasad zachowania.

- Rozważmy najpierw przesunięcia (translacje) przestrzenne: $t' = t$, $\vec{r}'_i = \vec{r}_i + \vec{c}$. Ponieważ $L(\vec{r}', \dot{\vec{r}}') = L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})$, $\Delta t = 0$, $\Delta \vec{r}_i = \vec{c}$, $\Delta \Phi = 0$, to zgodnie z twierdzeniem Noether zachowuje się wielkość $(\sum_{i=1}^n \vec{p}_i) \vec{c}$, czyli ze względu na dowolność \vec{c} mamy zasadę zachowania trzech składowych pędu układu $\vec{P} \equiv \sum_{i=1}^n \vec{p}_i$. Symetrię względem przesunięć przestrzennych nazywamy **jednorodnością przestrzeni**.
- Przy przesunięciach (translacjach) w czasie: $t' = t + \epsilon$, $\vec{r}'_i = \vec{r}_i$ mamy $L(\vec{r}', \dot{\vec{r}}') = L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})$, $\Delta t = \epsilon$, $\Delta \vec{r}_i = \vec{0}$, $\Delta \Phi = 0$ i zgodnie z twierdzeniem Noether zachowuje się wielkość $-G\epsilon$, czyli z dowolności ϵ energia układu E (w tym wypadku $G = E$). Symetrię względem przesunięć w czasie nazywamy **jednorodnością czasu**.
- Przy obrotach (rotacjach) w przestrzeni mamy $L(\vec{r}', \dot{\vec{r}}') = L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})$ i dla obrotów nieskończenie małych (o kąt ϵ wokół osi w kierunku wektora \vec{n} , gdzie $\vec{c} \equiv \epsilon \vec{n}$): $t' = t$, $\vec{r}'_i = \vec{r}_i + \vec{c} \times \vec{r}_i$ otrzymujemy $\Delta t = 0$, $\Delta \vec{r}_i = \vec{c} \times \vec{r}_i$ i $\Delta \Phi = 0$. Zgodnie z twierdzeniem Noether zachowuje się wielkość $\sum_{i=1}^n \vec{p}_i (\vec{c} \times \vec{r}_i) = \sum_{i=1}^n (\vec{r}_i \times \vec{p}_i) \vec{c}$, czyli z dowolności \vec{c} mamy zachowanie trzech składowych momentu pędu układu $\vec{L} \equiv \sum_{i=1}^n \vec{r}_i \times \vec{p}_i$. Symetrię względem obrotów przestrzennych nazywamy **izotropią przestrzeni**.
- Przy szczególnych transformacjach Galileusza $t' = t$, $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{c}t$ mamy

$$\begin{aligned} L(\vec{r}', \dot{\vec{r}}') &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i (\dot{\vec{r}}_i + \vec{c})^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) + \sum_{i=1}^n (m_i \dot{\vec{r}}_i \vec{c} + \frac{1}{2} m_i \vec{c}^2) = \\ &= L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) + \frac{d}{dt} \left[\sum_{i=1}^n (m_i \vec{r}_i \vec{c} + \frac{1}{2} m_i \vec{c}^2 t) \right] \end{aligned}$$

i stąd $\Delta t = 0$, $\Delta \vec{r}_i = \vec{c}t$, $\Delta \Phi = -\sum_{i=1}^n (m_i \vec{r}_i) \vec{c} = -M \vec{R} \vec{c}$. Z twierdzenia Noether wynika zachowanie wielkości $\sum_{i=1}^n \vec{p}_i \vec{c}t - M \vec{R} \vec{c} = (\vec{P}t - M \vec{R}) \vec{c}$, czyli z dowolności \vec{c} otrzymujemy

$$\vec{P}t - M \vec{R} = const = \vec{P}t_0 - M \vec{R}_0 \quad \Rightarrow \quad \vec{R} = \vec{R}_0 + \frac{\vec{P}}{M}(t - t_0).$$

Z niezmienniczości względem szczególnych transformacji Galileusza wynika więc, że środek masy układu porusza się ruchem jednostajnym prostoliniowym.

3.3 Hamiltonian i równania kanoniczne Hamiltona

Rozważmy układ punktów materialnych lub brył sztywnych z dwustronnymi więzami holonomicznymi doskonałymi. Układ taki jest scharakteryzowany przez lagranżjan $L(q, \dot{q}, t)$, który w ogólnym wypadku jest funkcją kwadratową prędkości uogólnionych i macierz $(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j})$ jest dodatnio określona, czyli w szczególności $\det(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j}) > 0$.

W tym podrozdziale wykażemy, że stosowany dotąd przez nas formalizm lagranżowski jest równoważny formalizmowi hamiltonowskiemu, w którym rolę lagranżjanu przejmuje hamiltonian, a równania Lagrange'a II rodzaju zostają zastąpione przez równania kanoniczne Hamiltona. Formalizm hamiltonowski pozwolił uzyskać wiele interesujących wyników w mechanice klasycznej, a także okazał się najwygodniejszy przy formułowaniu mechaniki statystycznej i mechaniki kwantowej. Zaczniemy od wstępu matematycznego dotyczącego przekształcenia Legendre'a.

Przekształceniem Legendre'a od zmiennych $x \equiv (x_1, \dots, x_n)$ do zmiennych $y \equiv (y_1, \dots, y_n)$, generowanym przez funkcję tworzącą $X(x, \alpha)$ z parametrami $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ i $\det(\frac{\partial^2 X}{\partial x_i \partial x_j}) \neq 0$, nazywamy przekształcenie określone wzorami $y_i = \frac{\partial X(x, \alpha)}{\partial x_i}$, $i = 1, \dots, n$.

Twierdzenie Donkina dla przekształcenia Legendre'a

Jeśli przekształcenie Legendre'a od zmiennych $x = (x_1, \dots, x_n)$ do zmiennych $y = (y_1, \dots, y_n)$ jest generowane przez funkcję $X(x, \alpha)$, czyli $y_i = \frac{\partial X(x, \alpha)}{\partial x_i}$, $i = 1, \dots, n$, to przekształcenie odwrotne jest przekształceniem Legendre'a generowanym przez funkcję $Y(y, \alpha) \equiv \sum_{j=1}^n x_j(y, \alpha)y_j - X(x(y, \alpha), \alpha)$, czyli $x_i = \frac{\partial Y(y, \alpha)}{\partial y_i}$, przy czym $\frac{\partial Y}{\partial \alpha_l} = -\frac{\partial X}{\partial \alpha_l}$, $l = 1, \dots, m$.

Dowód

Przekształcenie odwrotne do przekształcenia $y_i = y_i(x)$ istnieje, jeśli jacobian przekształcenia $\det(\frac{\partial y_i}{\partial x_j}) = \det(\frac{\partial^2 X}{\partial x_i \partial x_j}) \neq 0$, co jest spełnione z definicji przekształcenia Legendre'a. Możemy więc wyznaczyć $x = x(y, \alpha)$ i wypisać $Y(y, \alpha)$, a następnie wykazać, że:

$$\frac{\partial Y}{\partial y_i} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial x_j}{\partial y_i} y_j + x_i - \sum_{j=1}^n \frac{\partial X}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial y_i} = x_i + \sum_{j=1}^n \frac{\partial x_j}{\partial y_i} (y_j - \frac{\partial X}{\partial x_j}) = x_i,$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \alpha_l} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial x_j}{\partial \alpha_l} y_j - \sum_{j=1}^n \frac{\partial X}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial \alpha_l} - \frac{\partial X}{\partial \alpha_l} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial x_j}{\partial \alpha_l} (y_j - \frac{\partial X}{\partial x_j}) - \frac{\partial X}{\partial \alpha_l} = -\frac{\partial X}{\partial \alpha_l}.$$

□

Wróćmy obecnie do mechaniki¹ i dokonajmy przejścia od prędkości uogólnionych $\dot{q} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f)$ do pędów uogólnionych $p = (p_1, \dots, p_f)$, gdzie $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$. Przejście to jest przekształceniem Legendre'a generowanym przez lagranżjan $L(q, \dot{q}, t)$ (q i t są parametrami przekształcenia). Przekształcenie odwrotne generowane jest przez funkcję $H(q, p, t) \equiv \sum_{j=1}^f \dot{q}_j(q, p, t)p_j - L(q, \dot{q}(q, p, t), t)$, zwaną **hamiltonianem** układu, czyli

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{oraz} \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}.$$

Równania Lagrange'a II rodzaju $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$ (układ f równań drugiego rzędu na $q(t)$) dają się zapisać w równoważnej postaci **równań kanonicznych Hamiltona**

$$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, f,}$$

czyli układu $2f$ równań pierwszego rzędu na $q(t)$ i $p(t)$. Wielkości q i p nazywa się często wielkościami kanonicznie sprzężonymi.

Hamiltonian $H(q, p, t)$, równy liczbowo energii uogólnionej $G(q, \dot{q}, t)$, jest określony jako funkcja od q , p i t zamiast od q , \dot{q} i t . Ponieważ $\frac{dG}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t}$, to $\frac{dH}{dt} = \frac{dG}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$. Hamiltonian zawiera, podobnie jak lagranżjan, pełną informację dynamiczną o układzie, a dodatkowo ma bezpośredni sens fizyczny - jest równy energii uogólnionej.

Zasady zachowania

Jeśli $\frac{\partial H}{\partial q_j} = 0$, to $p_j = \text{const}$ (zasada zachowania pędu uogólnionego).

¹Przekształcenia Legendre'a są stosowane również w termodynamice (czy fizyce statystycznej) przy zmianie niezależnych wielkości termodynamicznych charakteryzujących układy termodynamiczne w stanie równowagi, np. przejście od objętości V do ciśnienia $p = -\frac{\partial U}{\partial V}$, gdzie $U(S, V)$ jest energią swobodną (parametr S jest entropią), jest transformacją Legendre'a i transformacja odwrotna $V = \frac{\partial H}{\partial p}$ jest generowana przez entalpię $H(S, p) = U + pV$.

Jeśli $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, to $H = const = h$ (zasada zachowania energii uogólnionej).

Jak pamiętamy, f -wymiarową przestrzeń zmiennych q dla rozważanego układu mechanicznego nazywamy **przestrzenią konfiguracyjną** układu zgodną z więzami i równania Lagrange'a opisują ruch układu w przestrzeni konfiguracyjnej. Z kolei, $2f$ -wymiarową przestrzeń zmiennych (q, p) dla układu mechanicznego nazywamy **przestrzenią fazową** układu i równania kanoniczne Hamiltona opisują ruch układu w przestrzeni fazowej.

Na wybór współrzędnych uogólnionych q w przestrzeni konfiguracyjnej nie ma nałożonych żadnych warunków poza żadaniami nieosobliwości i jednoznacznego określania położenia układu. Postać równań $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$ prowadząca do równań ruchu Lagrange'a II rodzaju nie zależy od wyboru tych współrzędnych, czyli równania te są współzmiennicze (kowariantne) względem nieosobliwych **przekształceń punktowych** $q \rightarrow q' = q'(q, t)$. Przekształcenia te zachowują również postać równań kanonicznych Hamiltona, lecz równania kanoniczne Hamiltona są współzmiennicze względem szerszej klasy przekształceń - **przekształceń kanonicznych**. Przekształceniami kanonicznymi nazywa się takie nieosobliwe przekształcenia $(q, p) \rightarrow (q' = q'(q, p, t), p' = p'(q, p, t))$, które zachowują postać równań kanonicznych Hamiltona. Przykładem przekształcenia kanonicznego jest np. $q' = \alpha p, p' = \beta q$, gdzie stałe $\alpha, \beta \neq 0$, i wtedy $H' = -\alpha\beta H$.

Pominiemy tu szerszą analizę przekształceń kanonicznych i twierdzeń dla ruchu w przestrzeni fazowej (np. twierdzenia Liouville'a czy twierdzenia Poincarégo o powrocie) - niektóre problemy będą omówione na wykładzie z fizyki (czy mechaniki) statystycznej. W następnych podrozdziałach omówimy tylko nawiasy Poissona i równanie Hamiltona-Jacobiego, które są nadzwyczaj istotne przy przechodzeniu z mechaniką kwantową do granicy klasycznej.

Przykłady hamiltonianów

- a. Cząstka o masie m w polu sił o potencjale $V(\vec{r}, t)$:

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}, t), \quad \vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = m \dot{\vec{r}} \Rightarrow \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m},$$

$$H = \vec{p} \frac{\vec{p}}{m} - \frac{1}{2} m \left(\frac{\vec{p}}{m} \right)^2 + V(\vec{r}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t).$$

Równania kanoniczne Hamiltona mają postać:

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m}, \quad \dot{\vec{p}} = -\text{grad} V(\vec{r}, t), \quad \text{skąd} \quad m \ddot{\vec{r}} = -\text{grad} V(\vec{r}, t).$$

- b. Cząstka o masie m i ładunku q w polu elektromagnetycznym o potencjałach $\phi(\vec{r}, t)$ i $\vec{A}(\vec{r}, t)$:

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 - q\phi(\vec{r}, t) + q\dot{\vec{r}}\vec{A}(\vec{r}, t), \quad \vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = m\dot{\vec{r}} + q\vec{A} \Rightarrow \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p} - q\vec{A}}{m},$$

$$H = \vec{p} \frac{\vec{p} - q\vec{A}}{m} - \frac{1}{2} m \left(\frac{\vec{p} - q\vec{A}}{m} \right)^2 + q\phi - q\vec{A} \frac{\vec{p} - q\vec{A}}{m} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi.$$

3.4 Nawiasy Poissona, ogólne równanie mechaniki, twierdzenie Poissona-Jacobiego

Weźmy dwie funkcje zmiennych kanonicznych i czasu: $F(q, p, t)$ i $G(q, p, t)$. **Nawiasem Poissona** dwóch funkcji F i G nazywamy wielkość (F, G) zdefiniowaną wzorem

$$(F, G) \equiv \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right).$$

Bezpośrednio z definicji wynikają następujące właściwości nawiasów Poissona:

1. $(F_1, F_2) = -(F_2, F_1)$,
2. $(F, F) = 0$,
3. $(F_1 + F_2, G) = (F_1, G) + (F_2, G)$,
4. $(F_1 F_2, G) = F_1(F_2, G) + (F_1, G)F_2$,
5. $(F, q_l) = -\frac{\partial F}{\partial p_l}$,
6. $(F, p_l) = \frac{\partial F}{\partial q_l}$,
7. $\frac{\partial}{\partial t}(F, G) = (\frac{\partial F}{\partial t}, G) + (F, \frac{\partial G}{\partial t})$,
8. tożsamość Poissona: $(F_1, (F_2, F_3)) + (F_2, (F_3, F_1)) + (F_3, (F_1, F_2)) = 0$.

Słuszne są w szczególności wzory:

$$(q_i, q_l) = 0, \quad (q_i, p_l) = \delta_{il}, \quad (p_i, p_l) = 0.$$

Obliczmy obecnie pochodną zupełną względem czasu dla dowolnej wielkości $F(q, p, t)$:

$$\frac{d}{dt}F(q, p, t) = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial F}{\partial t} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial F}{\partial t},$$

gdzie wykorzystaliśmy równania ruchu - równania kanoniczne Hamiltona.

Otrzymaliśmy więc równanie ruchu dla dowolnej wielkości mechanicznej - **ogólne równanie mechaniki**:

$$\boxed{\frac{dF}{dt} = (F, H) + \frac{\partial F}{\partial t}}$$

Równanie to zawiera w sobie jako szczególny przypadek równania kanoniczne Hamiltona

$$\frac{dq_l}{dt} = (q_l, H) = \frac{\partial H}{\partial p_l}, \quad \frac{dp_l}{dt} = (p_l, H) = -\frac{\partial H}{\partial q_l},$$

i prawo zmiany energii uogólnionej

$$\frac{dH}{dt} = (H, H) + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}.$$

Wielkość fizyczna F **zachowuje się** w czasie ruchu, jeśli

$$\boxed{(H, F) = \frac{\partial F}{\partial t}}$$

Jeśli $(H, p_l) = 0$, czyli $\frac{\partial H}{\partial q_l} = 0$, to $p_l = const$.

Jeśli $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, to $H = const$.

Twierdzenie Poissona-Jacobiego

Jeśli w czasie ruchu $F(q, p, t) = const$ i $G(q, p, t) = const$, to (F, G) jest także stałą ruchu.

Dowód

Z założenia $\frac{dF}{dt} = 0$ i $\frac{dG}{dt} = 0$ wynika, że

$$(H, F) = \frac{\partial F}{\partial t}, \quad (H, G) = \frac{\partial G}{\partial t}.$$

Stąd

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(F, G) &= ((F, G), H) + \frac{\partial}{\partial t}(F, G) = ((F, G), H) + \left(\frac{\partial F}{\partial t}, G\right) + \left(F, \frac{\partial G}{\partial t}\right) = \\ &= ((F, G), H) + ((H, F), G) + (F, (H, G)) = ((F, G), H) + ((H, F), G) + ((G, H), F) = 0, \end{aligned}$$

gdzie na końcu skorzystaliśmy z tożsamości Poissona. \square

Przykłady

1. Jeśli w czasie ruchu układu punktów materialnych w polu sił potencjalnych zachowują się dwie składowe kartezyjskie momentu pędu, to zachowuje się także trzecia składowa momentu pędu.

Dowód

Z definicji $\vec{L} = \sum_{i=1}^n (\vec{r}_i \times \vec{p}_i)$ wynikają wzory

$$(L_x, L_y) = L_z, \quad (L_y, L_z) = L_x, \quad (L_z, L_x) = L_y,$$

gdyż np.

$$\begin{aligned} (L_x, L_y) &= \sum_{i,j=1}^n (y_i p_{iz} - z_i p_{iy}, z_j p_{jx} - x_j p_{jz}) = \sum_{i,j=1}^n y_i (p_{iz}, z_j) p_{jx} + \sum_{i,j=1}^n p_{iy} (z_i, p_{jz}) x_j = \\ &= \sum_{i=1}^n (-y_i p_{ix} + x_i p_{iy}) = L_z. \end{aligned}$$

Z twierdzenia Poissona Jacobiego wynika więc, że jeśli składowe L_x i L_y są stałe, to stała jest także składowa L_z . \square

Podobnie można udowodnić, że np.:

2. jeśli w ruchu układu punktów materialnych w polu sił potencjalnych zachowują się P_x, L_x i L_y , to zachowują się także P_y, P_z i L_z .
3. w ruchu trójwymiarowego oscylatora harmonicznego z $H = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 (p_i^2 + m^2 \omega^2 x_i^2)$ zachowują się wielkości $Q_{ij} = \frac{1}{2m} (p_i p_j + m^2 \omega^2 x_i x_j)$, $i, j = 1, 2, 3$.

3.5 Równanie Hamiltona-Jacobiego

Rozważmy ruch rzeczywisty $q(t)$ układu o lagranżjanie $L(q, \dot{q}, t)$, gdy układ przesuwa się od q_0 do q w przedziale czasu (t_0, t) . Działanie Hamiltona S jest wtedy funkcją wielkości q_0, t_0, q, t oraz

$$S(q_0, t_0, q, t) = \int_{t_0}^t L(q, \dot{q}, t) dt.$$

Przeanalizujemy zależność S od q i q_0 przy ustalonych t_0 i t . Zmiana działania przy przejściu od ruchu rzeczywistego $q(t)$ do bliskiego mu $q(t) + dq(t)$ dana jest wzorem (zob. podobną analizę przy zasadzie wariacyjnej Hamiltona):

$$\begin{aligned} dS &= \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right) dt = \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) dq_i dt + \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} dq_i \Big|_{t_0}^t = \\ &= \sum_{i=1}^f (p_i dq_i - p_{i0} dq_{i0}), \end{aligned}$$

a z drugiej strony

$$dS = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial S}{\partial q_{i0}} \right),$$

czyli z dowolności dq_i i dq_{i0} mamy:

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}(q_0, t_0, q, t), \quad p_{i0} = -\frac{\partial S}{\partial q_{i0}}(q_0, t_0, q, t).$$

Przez rozwikłanie drugiego równania otrzymujemy $q = q(t, t_0, q_0, p_0)$ i po podstawieniu do pierwszego równania mamy $p = p(t, t_0, q_0, p_0)$. W tej jednej funkcji, czyli działaniu $S(q_0, t_0, q, t)$, zakodowane są więc informacje o ruchu rzeczywistym układu, gdyż pochodne cząstkowe tego działania pozwalają odczytać ruch układu w przestrzeni zarówno konfiguracyjnej jak i fazowej.

W tym podrozdziale wykażemy, że wynik ten można uogólnić tak, aby stał się pewną nową metodą całkowania równań ruchu. Zaczniemy od znalezienia równania różniczkowego dla funkcji $S(q, t)$. Z definicji działania mamy $\frac{dS}{dt} = L$, a z drugiej strony $\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_{i=1}^f \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i$, czyli $\frac{\partial S}{\partial t} + \left(\sum_{i=1}^f \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i - L \right) = 0$. Otrzymane równanie, zwane **równaniem Hamiltona-Jacobiego** (1837) można zapisać w postaci

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t} + H(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t) = 0.}$$

Jest to równanie różniczkowe cząstkowe pierwszego rzędu na $S(q, t)$. Ogólne rozwiązanie tego równania, zwane całką ogólną, zależy od dowolnej funkcji. Do naszych celów wystarczające okaże się rozwiązanie szczególne, zwane całką zupełną.

Całką zupełną równania Hamiltona-Jacobiego $\frac{\partial S}{\partial t} + H(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t) = 0$ nazywamy takie rozwiązanie tego równania $S(q, t, \alpha)$, zależne od f stałych dowolnych $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_f)$, które spełnia warunek $\det(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \alpha_j}) \neq 0$ (oznacza to w szczególności, że do α nie możemy włączyć rzeczywistej stałej addytywnej).

Twierdzenie Jacobiego

Jeśli funkcja $S(q, t, \alpha)$ jest całką zupełną równania Hamiltona-Jacobiego, to rozwiązanie równań kanonicznych Hamiltona określają wzory

$$\boxed{p_j = \frac{\partial S}{\partial q_j}(q, t, \alpha), \quad \beta_j = \frac{\partial S}{\partial \alpha_j}(q, t, \alpha), \quad j = 1, \dots, f,}$$

gdzie α i β - dowolne stałe.

Przez rozwikłanie drugiego układu równań otrzymujemy $q = q(t, \alpha, \beta)$ i po podstawieniu do pierwszego układu równań uzyskamy $p = p(t, \alpha, \beta)$, czyli przez różniczkowanie całki zupełnej $S(q, t, \alpha)$ możemy odczytać ruch rzeczywisty układu zarówno w przestrzeni konfiguracyjnej (co w zasadzie jest wystarczające) jak i fazowej. W jednej funkcji $S(q, t, \alpha)$ zakodowane są więc rozwiązania równań ruchu układu hamiltonowskiego.

Dowód twierdzenia

Po podstawieniu $S(q, t, \alpha)$ do równania Hamiltona-Jacobiego jest spełniony tożsamościowo związek $\frac{\partial S}{\partial t}(q, t, \alpha) + H(q, \frac{\partial S}{\partial q}(q, t, \alpha), t) \equiv 0$.

a. Różniczkując tę tożsamość po α_j mamy

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_j \partial t} + \sum_{i=1}^f \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \alpha_j} = 0,$$

a obliczając zupełną pochodną po czasie definiującej $q(t)$ równości $\beta_j = \frac{\partial S}{\partial \alpha_j}$ mamy

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t \partial \alpha_j} + \sum_{i=1}^f \dot{q}_i \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \alpha_j} = 0,$$

czyli

$$\sum_{i=1}^f \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \alpha_j} \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) = 0,$$

co przy różnym od zera wyznaczniku $\det\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \alpha_j}\right)$ daje $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$.

b. Różniczkując tę tożsamość po q_j mamy

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial t} + \frac{\partial H}{\partial q_j} + \sum_{i=1}^f \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j} = 0,$$

a z drugiej strony

$$\dot{p}_j = \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial t} + \sum_{i=1}^f \dot{q}_i \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j},$$

czyli $\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$.

□

Otrzymaliśmy w ten sposób nowy i, jak się okazuje, najdoskonalszy sposób znajdowania ruchu układu. Dla bardzo szerokiej klasy układów można bowiem znaleźć całkę zupełną równania Hamiltona-Jacobiego metodą rozdzielania zmiennych. Równanie to ma również znaczenie jako podstawa rachunku zaburzeń w mechanice klasycznej².

W **metodzie rozdzielania zmiennych** poszukujemy rozwiązania w postaci

$$S(q, t, \alpha) = \sum_{i=1}^f S_i(q_i) + S_0(t).$$

²Równanie Hamiltona-Jacobiego stanowi także bezpośredni klasyczny odpowiednik równania Schrödingera. Dla cząstki w polu sił potencjalnych równanie Schrödingera ma postać

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{r}, t) \Psi.$$

Jeśli wprowadzimy funkcję S wzorem $\Psi = e^{\frac{i}{\hbar} S}$, to

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi, \quad \Delta \Psi = -\frac{1}{\hbar^2} (\text{grad } S)^2 \Psi + \frac{i}{\hbar} \Delta S \Psi$$

i równanie Schrödingera przyjmuje postać

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\text{grad } S)^2 + V + \frac{\hbar}{2mi} \Delta S = 0.$$

W granicy klasycznej, czyli $\hbar \rightarrow 0$, otrzymujemy klasyczne równanie Hamiltona-Jacobiego i funkcja S staje się klasycznym działaniem. Fakt ten odgrywa dużą rolę w przybliżeniu kwaziklasycznym mechaniki kwantowej i we wspomnianym już wcześniej sformułowaniu mechaniki kwantowej przy użyciu całek po trajektoriach (R. Feynman (1948)).

Równanie Hamiltona-Jacobiego przyjmuje wtedy postać

$$\frac{dS_0}{dt} + H(q_1, \dots, q_f, \frac{dS_1}{dq_1}, \dots, \frac{dS_f}{dq_f}, t) = 0.$$

Metoda rozdzielania zmiennych stosuje się, jeśli możemy stąd wydzielić równania różniczkowe zwyczajne dla występujących tu funkcji. W dwóch szczególnych przypadkach takie funkcje jednej zmiennej są nadzwyczaj proste.

Jeśli $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, to pierwszy człon w równaniu, zależny od t , jest równy wielkości niezależnej od t , czyli $\frac{dS_0}{dt} = -h = const$ i stąd $S_0 = -ht$, a równanie Hamiltona-Jacobiego upraszcza się do równania

$$H(q_1, \dots, q_f, \frac{dS_1}{dq_1}, \dots, \frac{dS_f}{dq_f}) = h.$$

Stała h jest pierwszą ze stałych α i ma sens zachowywanej energii uogólnionej układu.

Jeśli $\frac{\partial H}{\partial q_k} = 0$, to $\frac{dS_k}{dq_k} = \alpha_k = const$ i stąd $S_k = \alpha_k q_k$, a równanie Hamiltona-Jacobiego upraszcza się do równania

$$\frac{dS_0}{dt} + H(q_1, \dots, q_{k-1}, q_{k+1}, \dots, q_f, \frac{dS_1}{dq_1}, \dots, \frac{dS_{k-1}}{dq_{k-1}}, \alpha_k, \frac{dS_{k+1}}{dq_{k+1}}, \dots, \frac{dS_f}{dq_f}, t) = 0.$$

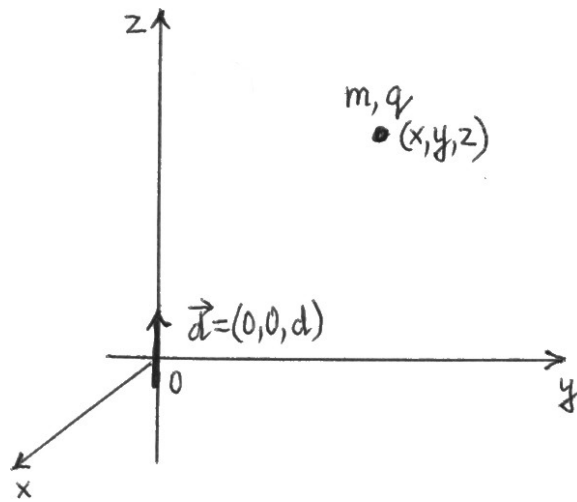
Każda tego typu zasada zachowania upraszcza rozważane równanie, gdyż zmniejsza liczbę szukanych funkcji jednej zmiennej. Stałe α_k są równe zachowywanym w takiej sytuacji pędom uogólnionym p_k .

Przykład: Ruch cząstki o masie m i ładunku q w polu elektrostatycznym wytworzonym przez punktowy dipol o momencie dipolowym elektrycznym \vec{d} .

Wybermy początek układu współrzędnych w punkcie, gdzie znajduje się dipol i wybierzmy oś Oz wzdłuż momentu dipolowego $\vec{d} = d\vec{e}_z$. Cząstka ma trzy stopnie swobody i jako współrzędne uogólnione wybierzmy współrzędne kuliste cząstki r , ϑ i φ . Lagranżjan cząstki wynosi

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2 + r^2\sin^2\vartheta\dot{\varphi}^2) - \gamma \frac{\cos\vartheta}{r^2},$$

gdzie $\gamma \equiv \frac{qd}{4\pi\epsilon_0}$.



Dwie zasady zachowania $G = E$ i $p_\varphi = L_z$ nie wystarczają do scałkowania równań ruchu. Obliczmy więc hamiltonian cząstki:

$$\begin{aligned} p_r &= \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, & p_\vartheta &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\vartheta}} = mr^2\dot{\vartheta}, & p_\varphi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\sin^2\vartheta\dot{\varphi}, \\ \dot{r} &= \frac{p_r}{m}, & \dot{\vartheta} &= \frac{p_\vartheta}{mr^2}, & \dot{\varphi} &= \frac{p_\varphi}{mr^2\sin^2\vartheta}, \end{aligned}$$

$$H = T + V = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\vartheta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \vartheta} \right) + \gamma \frac{\cos \vartheta}{r^2}.$$

Równanie Hamiltona-Jacobiego ma postać:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \vartheta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \left(\frac{\partial S}{\partial \varphi} \right)^2 \right] + \gamma \frac{\cos \vartheta}{r^2} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Poszukajmy całki zupełnej w postaci

$$S = -Et + L_z \varphi + S_r(r) + S_\vartheta(\vartheta).$$

Po podstawieniu do równania i pomnożeniu przez $2mr^2$ otrzymujemy

$$r^2 \left(\frac{dS_r}{dr} \right)^2 - 2mEr^2 = - \left(\frac{dS_\vartheta}{d\vartheta} \right)^2 - \frac{L_z^2}{\sin^2 \vartheta} - 2m\gamma \cos \vartheta = \text{const} = -\alpha,$$

czyli

$$\frac{dS_r}{dr} = \sqrt{2mE - \frac{\alpha}{r^2}}, \quad S_r = \int \sqrt{2mE - \frac{\alpha}{r^2}} dr,$$

$$\frac{dS_\vartheta}{d\vartheta} = \sqrt{\alpha - \frac{L_z^2}{\sin^2 \vartheta} - 2m\gamma \cos \vartheta}, \quad S_\vartheta = \int \sqrt{\alpha - \frac{L_z^2}{\sin^2 \vartheta} - 2m\gamma \cos \vartheta} d\vartheta$$

i ostatecznie

$$S = -Et + L_z \varphi + \int \sqrt{2mE - \frac{\alpha}{r^2}} dr + \int \sqrt{\alpha - \frac{L_z^2}{\sin^2 \vartheta} - 2m\gamma \cos \vartheta} d\vartheta.$$

Problem znalezienia ruchu sprowadza się do kwadratur:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial L_z} = \beta_1 &\Rightarrow \quad \varphi - \int \frac{L_z d\vartheta}{\sin^2 \vartheta \sqrt{\alpha - \frac{L_z^2}{\sin^2 \vartheta} - 2m\gamma \cos \vartheta}} = \beta_1 &\Rightarrow \quad \varphi = \varphi(\vartheta), \\ \frac{\partial S}{\partial \alpha} = \beta_2 &\Rightarrow \quad -\frac{1}{2} \int \frac{dr}{r^2 \sqrt{2mE - \frac{\alpha}{r^2}}} + \frac{1}{2} \int \frac{d\vartheta}{\sqrt{\alpha - \frac{L_z^2}{\sin^2 \vartheta} - 2m\gamma \cos \vartheta}} = \beta_2 &\Rightarrow \quad \vartheta = \vartheta(r), \\ \frac{\partial S}{\partial E} = \beta_3 &\Rightarrow \quad -t + \int \frac{m dr}{\sqrt{2mE - \frac{\alpha}{r^2}}} = \beta_3 &\Rightarrow \quad r = r(t). \end{aligned}$$

Ostatnia całka wyznacza ruch radialny

$$r = \sqrt{\frac{2E}{m}(t + \beta_3)^2 + \frac{\alpha}{2mE}},$$

a pozostałe całki pozwalają kolejno wyznaczyć $\vartheta = \vartheta(t)$ i $\varphi = \varphi(t)$ (pojawiają się tu znane nam całki eliptyczne pierwszego rodzaju).

3.6 Mechanika nieliniowa i chaos deterministyczny

W mechanice klasycznej nieliniowość równań ruchu jest całkiem naturalna - nieliniowe są równania ruchu dla tak ważnych w fizyce układów jak np. wahadła matematycznego

$$ml^2 \ddot{\varphi} + mgl \sin \varphi = 0$$

czy problemu ruchu planety wokół słońca

$$\mu \ddot{\vec{r}} + \frac{\alpha \vec{r}}{r^3} = 0.$$

Dla tych podstawowych układów znaleźliśmy ściśle rozwiązania i ludzie przez wiele lat nie dostrzegali istotnej różnicy między rozwiązaniami równań nieliniowych i liniowych poza tym, że dla równań liniowych łatwiej było znaleźć rozwiązania analitycznie. Gdy jakiegoś równania nieliniowego nie potrafiliśmy rozwiązać, analizowaliśmy często taki problem tylko w obszarze, w którym można było go opisać w dobrym przybliżeniu przez równania liniowe. Dopiero w 1890 r Henri Poincaré jako pierwszy zauważył, że w bardziej złożonych problemach nieliniowych rozwiązania równań ruchu mogą być bardzo **wrażliwe na warunki początkowe**. Mimo że równania opisujące układ są deterministyczne, to w dłuższej skali czasowej układ wydaje się zachowywać w sposób losowy (chaotyczny) - zjawisko to nazywamy obecnie **chaosem deterministycznym**. Poincaré zajmował się grawitacyjnym problemem trzech ciał, czyli np. układem planeta, księżyc i słońce. Spostrzeżenie Poincarégo pozostało niezauważone przez fizyków i matematyków aż do lat 1970., gdy postęp w dziedzinie komputerów umożliwił znalezienie numerycznych rozwiązań wielu problemów nieliniowych i wiele osób zainteresowało się szczegółowym badaniem chaosu deterministycznego. Pierwszą pracą tego typu była wprawdzie praca meteorologa Edwarda Lorenza z 1963 r., dotycząca konwekcji w atmosferze, ale i ona wywołała zainteresowanie dopiero po dziesięciu latach. Swoje wystąpienie na jednej z konferencji Lorenz zatytułował: "Przewidywalność: czy machnięcie skrzydełkami przez motyla w Brazylii może spowodować tornado w Teksasie?", gdyż chciał tym prowokującym pytaniem uzmysłowić niemożność jakichkolwiek przewidywań dla złożonych układów nieliniowych mimo precyzyjnie określanych warunków początkowych. Warunkiem koniecznym pojawienia się chaosu w ewolucji czasowej układu jest nieliniowość równań opisujących jego ruch oraz pewna ich złożoność. Równania ruchu układu można zawsze zapisać w postaci układu równań różniczkowych pierwszego rzędu dla N zmiennych dynamicznych układu:

$$\dot{\xi}_j = f_j(\xi_1, \dots, \xi_N), \quad j = 1, \dots, N,$$

w których po prawej stronie nie pojawia się czas t (taki układ równań nazywa się układem autonomicznym). Można udowodnić, że aby układ dysypatywny wykazywał zachowanie chaotyczne, jego równania ruchu zapisane w postaci autonomicznej muszą być nieliniowe i zawierać $N \geq 3$ zmiennych. Dla układów bez dysypacji (np. układów hamiltonowskich) konieczna jest nieliniowość i $N \geq 4$.

Przykłady

Najprostszymi fizycznie układami, w których może pojawić się chaos, są płaskie podwójne wahadło matematyczne (układ hamiltonowski z $N = 4$) i płaskie tłumione wahadło matematyczne z siłą wymuszającą (układ dysypatywny z $N = 3$). Równania ruchu dla wahadła podwójnego (zob. podrozdział 1.10) mają postać:

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_1 &= \omega_1, & \dot{\varphi}_2 &= \omega_2, \\ \dot{\omega}_1 &= \frac{-g(m_1 + m_2) \sin \varphi_1 + m_2 g \sin \varphi_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - m_2 [l_2 \omega_2^2 + l_1 \omega_1^2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)] \sin(\varphi_1 - \varphi_2)}{l_1 [m_1 + m_2 - m_2 \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2)],} \\ \dot{\omega}_2 &= \frac{\sin(\varphi_1 - \varphi_2) [(m_1 + m_2)(g \cos \varphi_1 + l_1 \omega_1^2) + m_2 l_2 \omega_2^2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]}{l_2 [m_1 + m_2 - m_2 \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2)].} \end{aligned}$$

Równanie ruchu wahadła matematycznego tłumionego można zapisać w postaci autonomicznej w następujący sposób (stała $b > 0$ jest współczynnikiem definiującym liniową siłę oporu):

$$\dot{\varphi} = \psi,$$

$$m l \dot{\psi} + b l \psi + m g \sin \varphi = 0,$$

co odpowiada $N = 2$ i mimo nieliniowości układ ten nie wykazuje zachowania chaotycznego. Jeśli w tym układzie dodamy siłę wymuszającą $F(t) = F_0 \cos \omega t$, $\omega = \text{const} > 0$, to otrzymamy tłumione wahadło matematyczne z siłą wymuszającą. Równania ruchu tego wahadła są układem równań z $N = 3$:

$$\dot{\varphi} = \psi, \quad \dot{\xi} = \omega,$$

$$\dot{\psi} = -\frac{b}{m}\psi - \frac{g}{l}\sin\varphi + \frac{F_0}{ml}\cos\xi$$

i jego rozwiązania wykazują zachowanie chaotyczne dla pewnych wartości występujących w nim parametrów.

W tym wykładzie ograniczymy się do analizy chaosu deterministycznego dla **tłumionego wahadła matematycznego z siłą wymuszającą**. W standardowej postaci równania ruchu takiego wahadła

$$ml\ddot{\varphi} + b\dot{\varphi} + mg\sin\varphi = F_0\cos\omega t,$$

wygodnie jest przejść do równania z wielkościami bezwymiarowymi

$$\frac{d^2\varphi}{d\tau^2} + \frac{1}{q}\frac{d\varphi}{d\tau} + \sin\varphi = A\cos\omega_w\tau$$

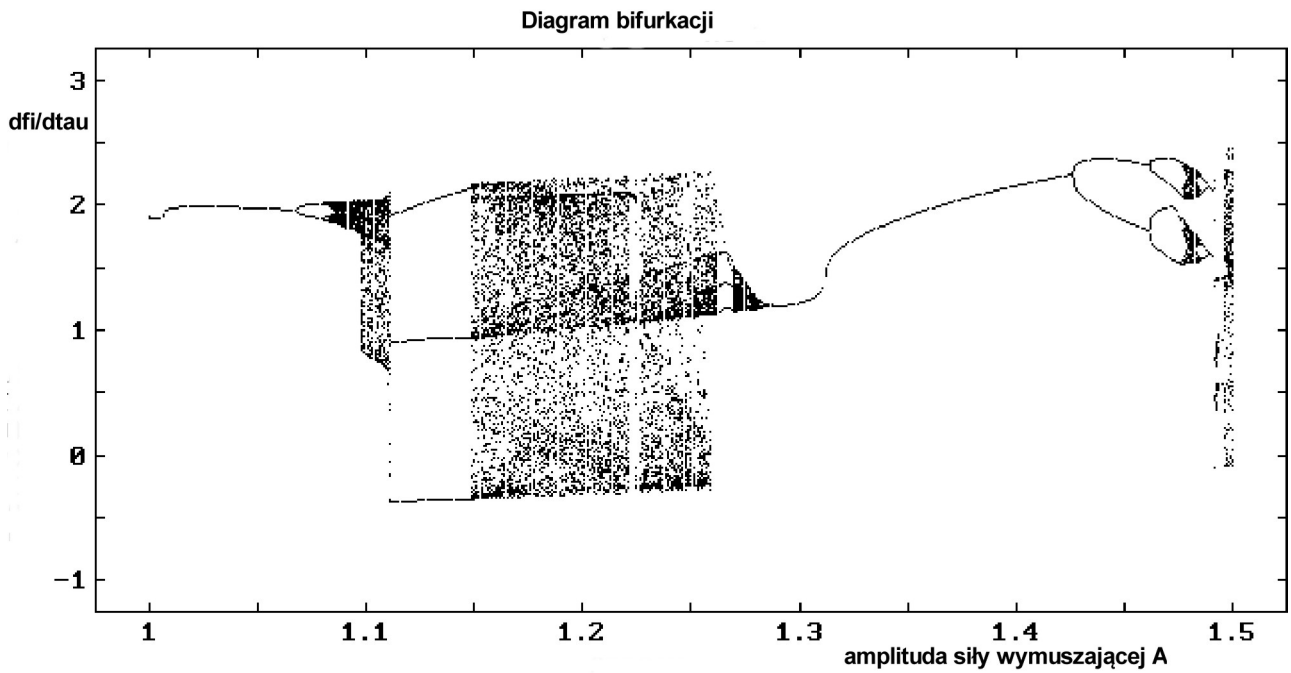
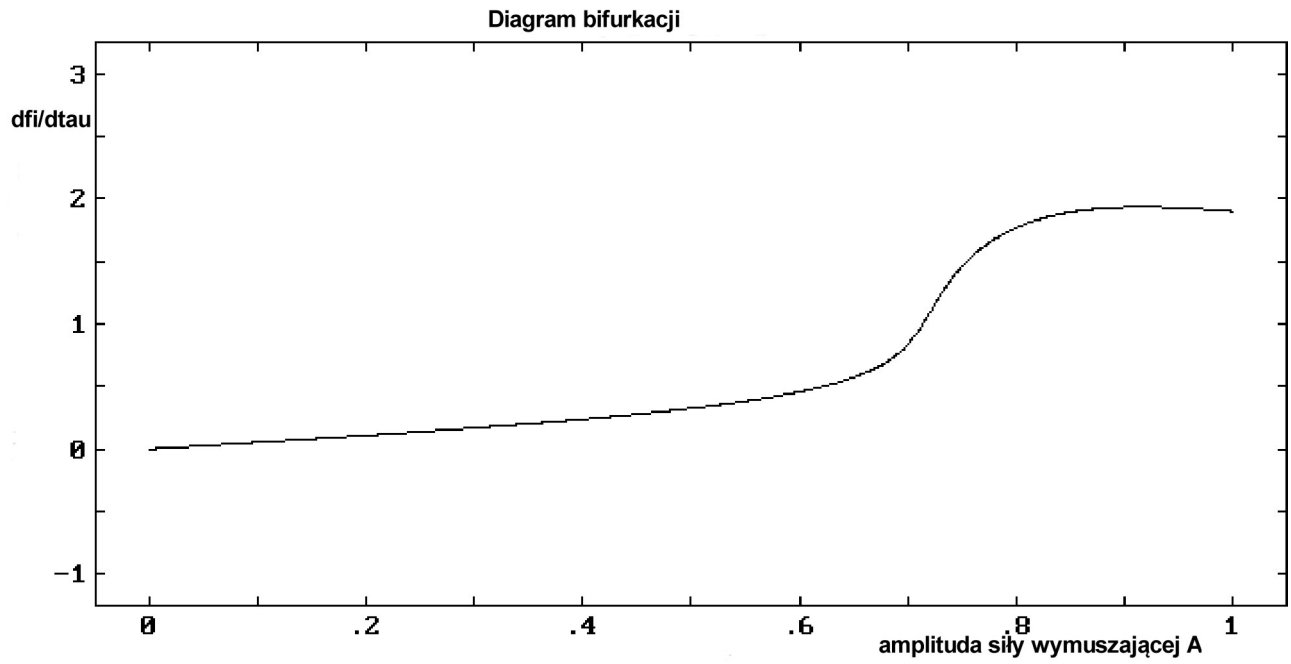
przez wprowadzenie bezwymiarowego czasu $\tau = \sqrt{\frac{l}{g}}t$ (częstość małych drgań swobodnych jest wtedy jednostkowa) i bezwymiarowych parametrów:

- parametru tłumienia $\frac{1}{q} \equiv \frac{b}{m}\sqrt{\frac{l}{g}}$,
- amplitudy siły wymuszającej $A \equiv \frac{F_0}{mg}$,
- częstości siły wymuszającej $\omega_w = \omega\sqrt{\frac{l}{g}}$.

Wybermy $q = 2$, $\omega_w = \frac{2}{3} = 0,66666$ (czyli $\tau_w = \frac{2\pi}{\omega_w} \approx 10$) i przeanalizujemy numerycznie ruch dla różnych wartości amplitudy siły wymuszającej A przy warunkach początkowych ($\varphi(t=0) = 0 = \dot{\varphi}(t=0)$). Obliczenia wykonamy przy użyciu programu komputerowego załączonego do książki G. L. Bakera i J. P. Golluba *Wstęp do dynamiki układów chaotycznych*.

Analizę ruchu wygodnie jest przeprowadzić badając zmianę w czasie prędkości kątowej $\dot{\varphi}(t)$ zamiast kąta $\varphi(t)$, gdyż dla $A > 1$, gdy możliwe stają się obroty, konieczne jest przyrównanie kątów φ różniących się o 2π (odpowiadających temu samemu położeniu fizycznemu), co prowadzi do sztucznej nieciągłości na wykresach zależności czasowej.

Wspaniałą ilustrację osobliwości ruchu w układach nieliniowych stanowią diagramy bifurkacji, na których dla różnych wartości amplitudy siły wymuszającej przedstawione są wartości $\dot{\varphi}(t)$ dla czasów będących wielokrotnością okresu wymuszania (dane zbieramy po odpowiednio dużym czasie, gdy zanikły już efekty początkowe). Jeśli ruch jest okresowy z okresem τ_w , na diagramie bifurkacji odpowiada mu jeden punkt. Gdy pojawia się ruch okresowy o okresie $2\tau_w$, zaczynamy obserwować na wykresie dwa punkty - pojedyncza krzywa rozgałęzia się na dwie (następuje bifurkacja). Jeśli ruch jest okresowy o okresie $n\tau_w$, to na wykresie pojawia się n punktów. Gdy punkty przestają się powtarzać i wypełniają w sposób "ciągły" odpowiedni przedział, to znajdujemy się w obszarze chaosu.

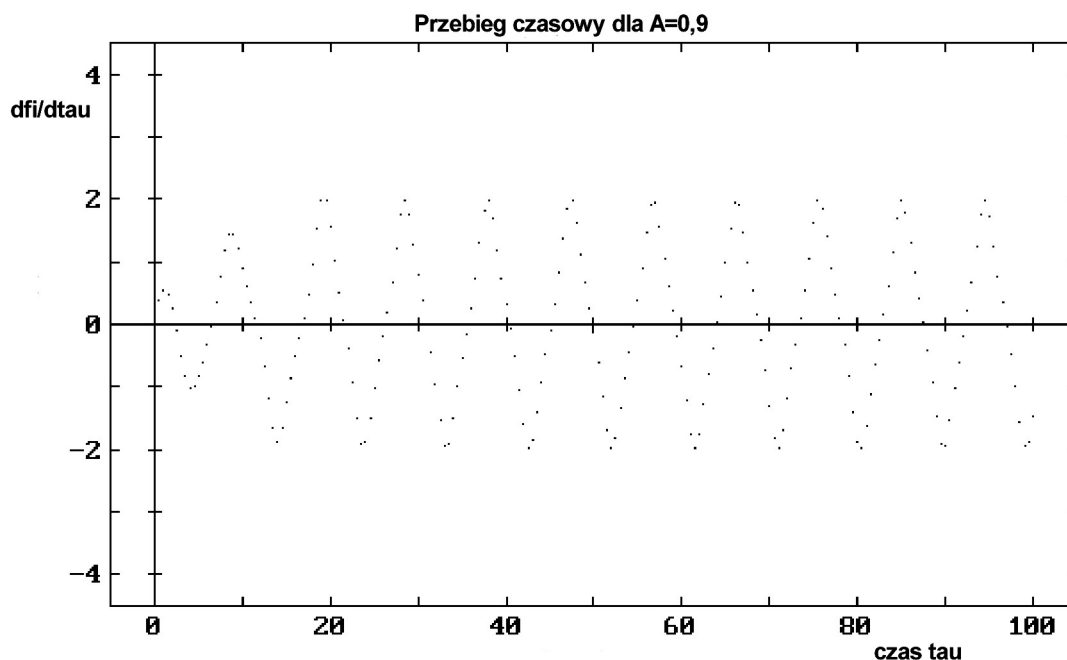


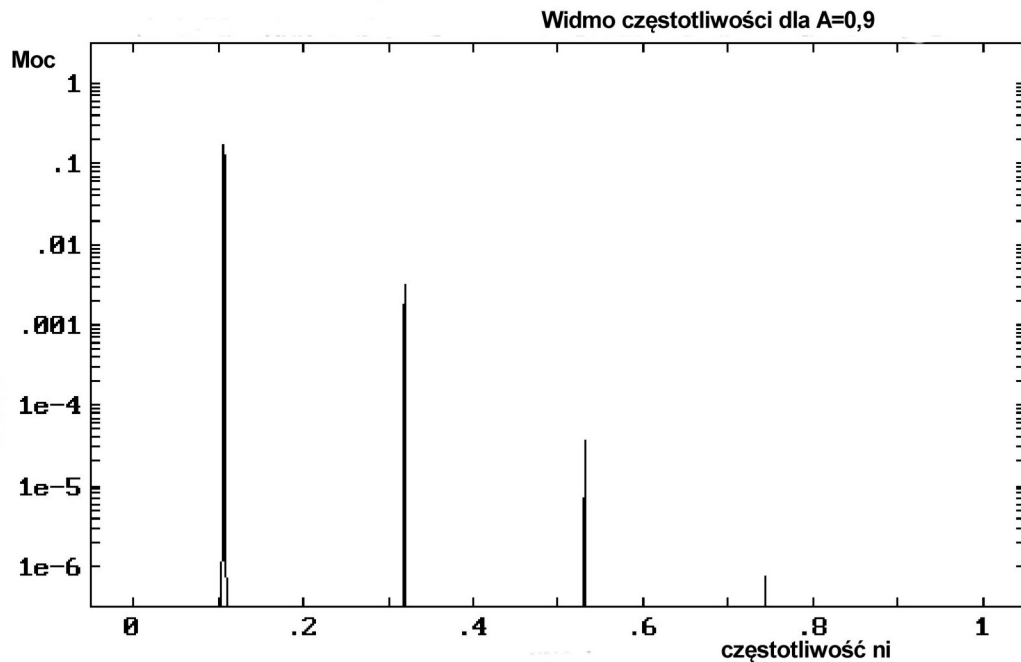
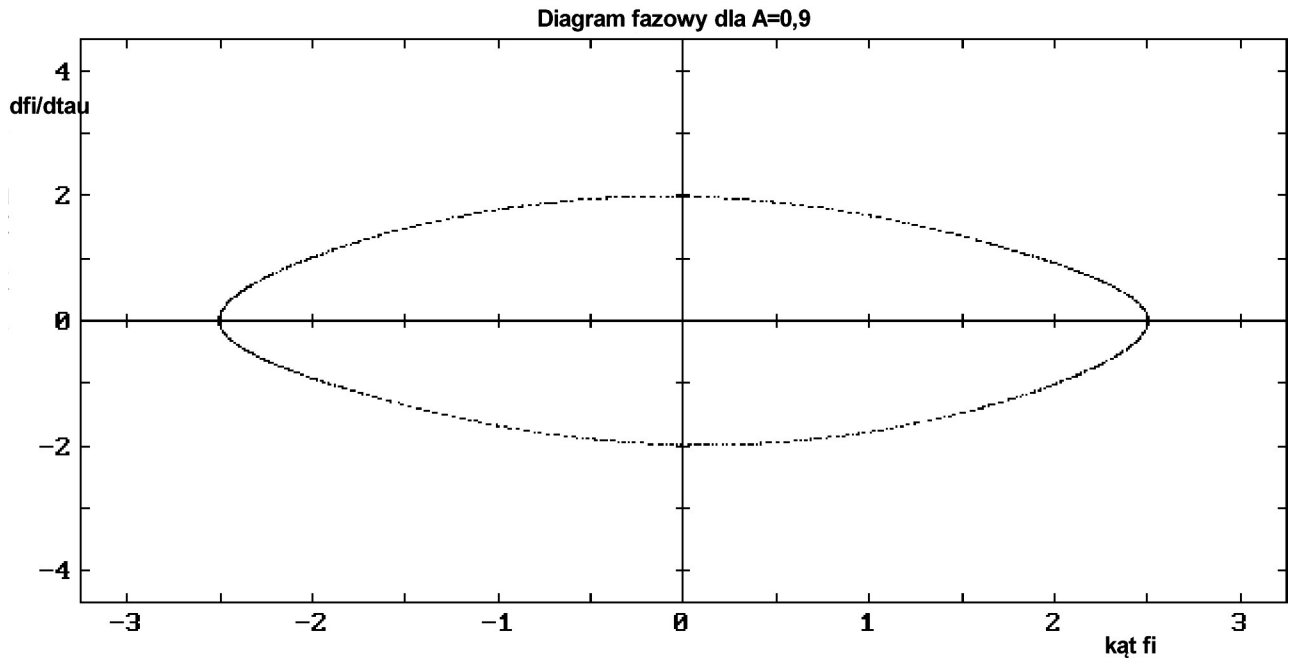
Zachowanie się wahadła tłumionego z wymuszeniem ($q = 2, \omega_w = \frac{2}{3}$.)

Zakres wartości A	Typ ruchu
$A < 1,0829$	okresowy
$1,0829 < A < 1,11$	chaotyczny
$1,11 < A < 1,14$	okresowy
$1,14 < A < 1,22$	chaotyczny
$A \approx 1,22$	okresowy
$1,22 < A < 1,28$	chaotyczny
$1,28 < A < 1,475$	okresowy
$1,475 < A < 1,485$	chaotyczny
$1,485 < A < 1,493$	okresowy
$1,493 < A < 1,495$	chaotyczny
$1,495 < A < 1,497$	okresowy
$1,497 < A < 1,5$	chaotyczny

Przeanalizujmy ten diagram bardziej szczegółowo:

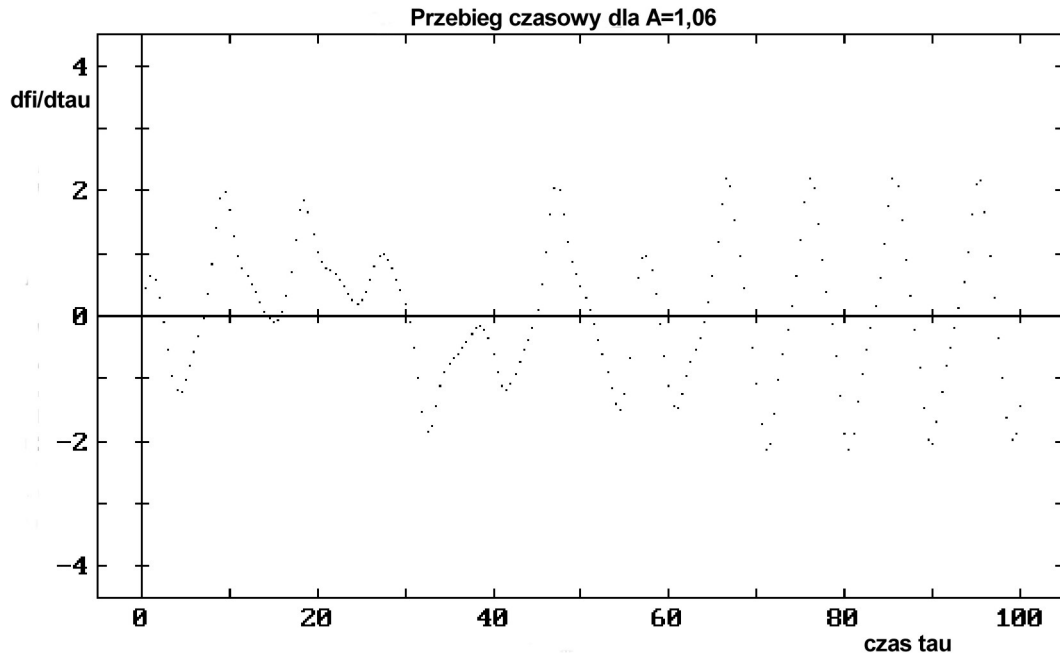
- dla $A \leq 1$, czyli gdy siła wymuszająca jest mniejsza od siły ciężkości, po okresie początkowym, gdy zachodzi proces tłumienia drgań swobodnych, obserwujemy niezależne od warunków początkowych drgania okresowe wokół $\varphi = 0$ z częstością równą częstości siły wymuszającej ω_w : przy małych A mamy w dobrym przybliżeniu drgania harmoniczne (sinusoidalne), przy większych A pojawiają się oprócz drgań z częstością wymuszenia wyższe składowe harmoniczne z częstościami będącymi całkowitą wielokrotnością częstości wymuszenia (zob. widmo częstotliwości ($\nu = \frac{\omega}{2\pi}$)) i wykres ruchu przestaje być sinusoidą.



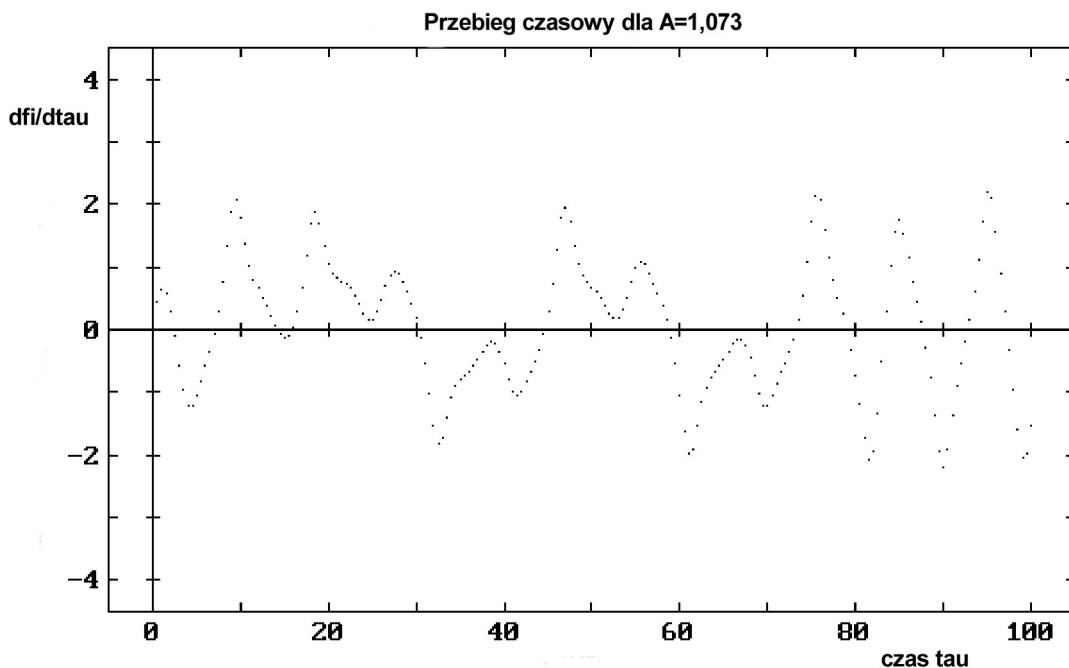


Graniczny (asymptotyczny) ruch, który pojawia się dla dostatecznie dużych czasów, nazywamy **atraktorem**. Ruchy odpowiadające różnym warunkom początkowym zблиżają się asymptotycznie do tego samego atraktora. Diagram fazowy, będący jednym z możliwych obrazów takiego atraktora, dla małych A jest elipsą, dla większych A pojawiają się wyższe harmoniczne i jego wykres jest odpowiednio "odkształconą elipsą".

- dla $1 < A \leq 1,0663$ drgania początkowo są bardzo burzliwe (pojawia się ruch obrotowy), lecz po pewnym czasie pojawiają się znów drgania okresowe z częstością ω_w . Jest to obszar "ciszy przed burzą", sygnalizujący pojawienie się dla jeszcze większych A jakichś istotnych zmian ruchu.



- dla $1,0663 < A \leq 1,0829$ i dla pewnych warunków początkowych oraz pewnych częstości siły wymuszającej atraktor przechodzi przez kaskadę podwajania okresu, w czasie której okres ruchu jest wielokrotnie podwajany (dąży do nieskończoności przy $A = 1,0829$). W przeciwieństwie do poprzednich obszarów mamy obecnie więcej atraktorów i ruchy z różnymi warunkami początkowymi są "przyciągane" przez różne atraktory. Dla $A = 1,073$ drgania po upływie okresu wymuszania τ_w mają dwie nieco różne amplitudy, co widać wyraźnie na diagramie fazowym lub na przekroju Poincarégo, będącym zdjęciem "stroboskopowym" tego diagramu dla czasów będących wielokrotnością okresu wymuszania. Ogólnie, obserwowany okres ruchu dla atraktorów jest całkowitą wielokrotnością okresu wymuszenia i jeśli wzrasta n -krotnie, to częstość staje się częstością n -krotnie mniejszą, czyli jest częstością podharmoniczną częstości wymuszenia. Jest to obszar "drogi do chaosu".



Przebieg czasowy dla $A=1,073$

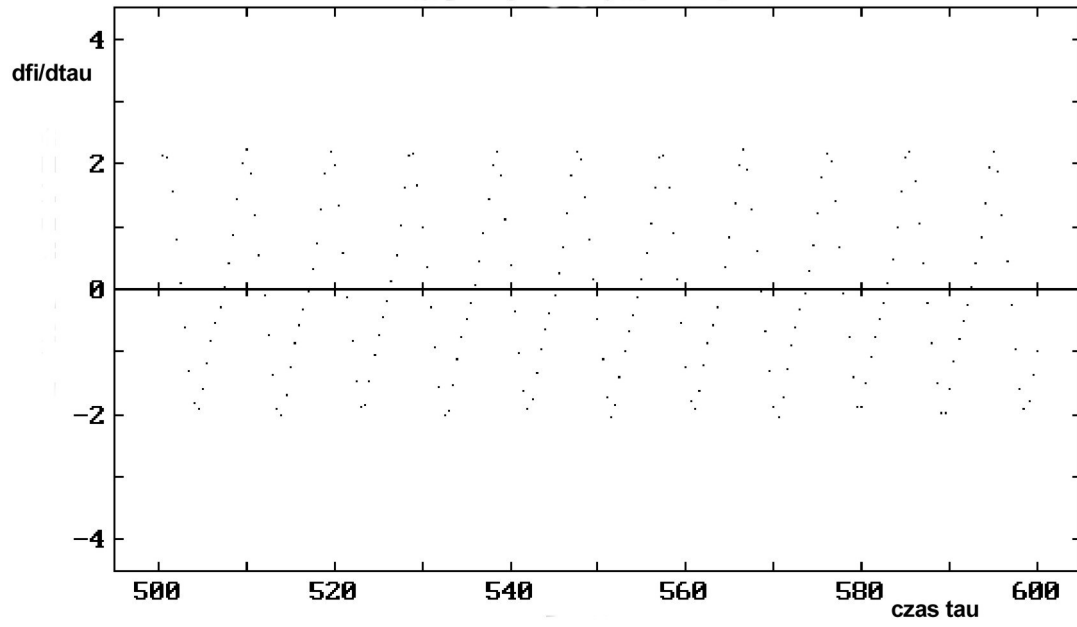
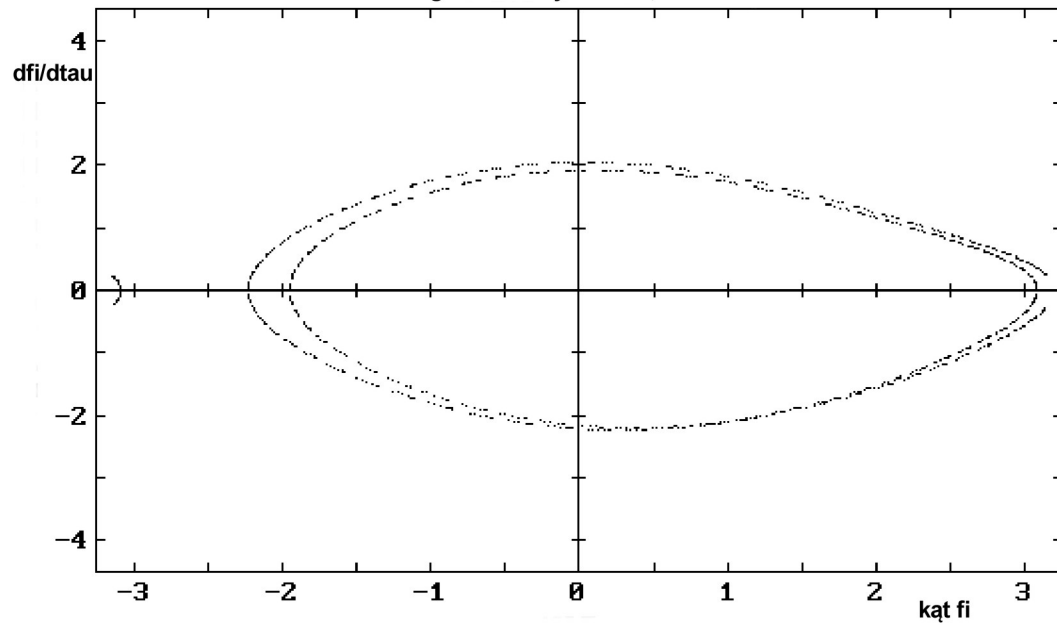
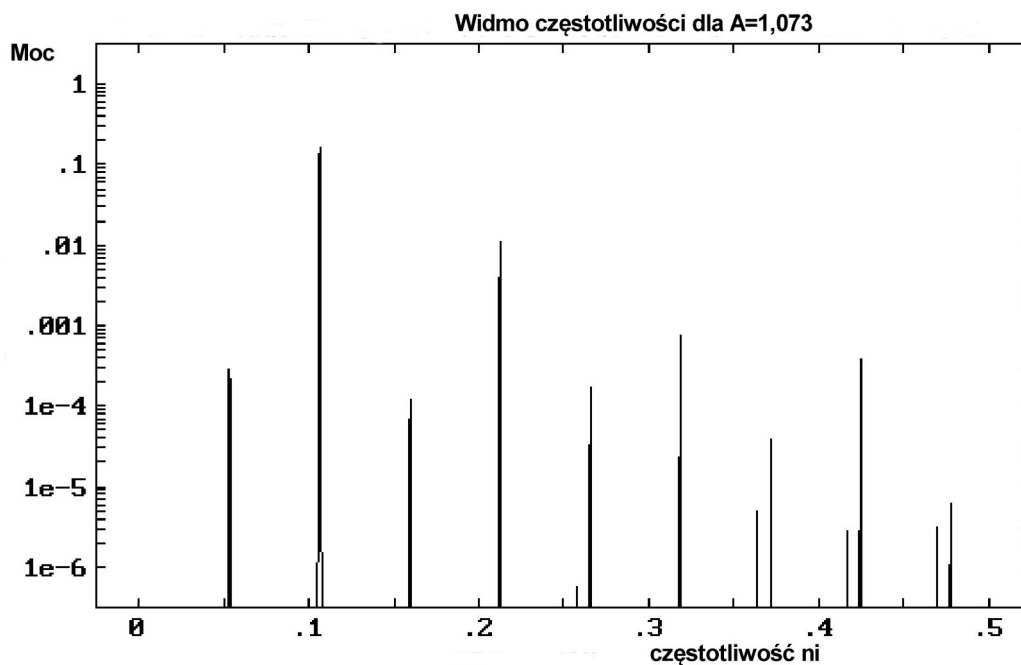
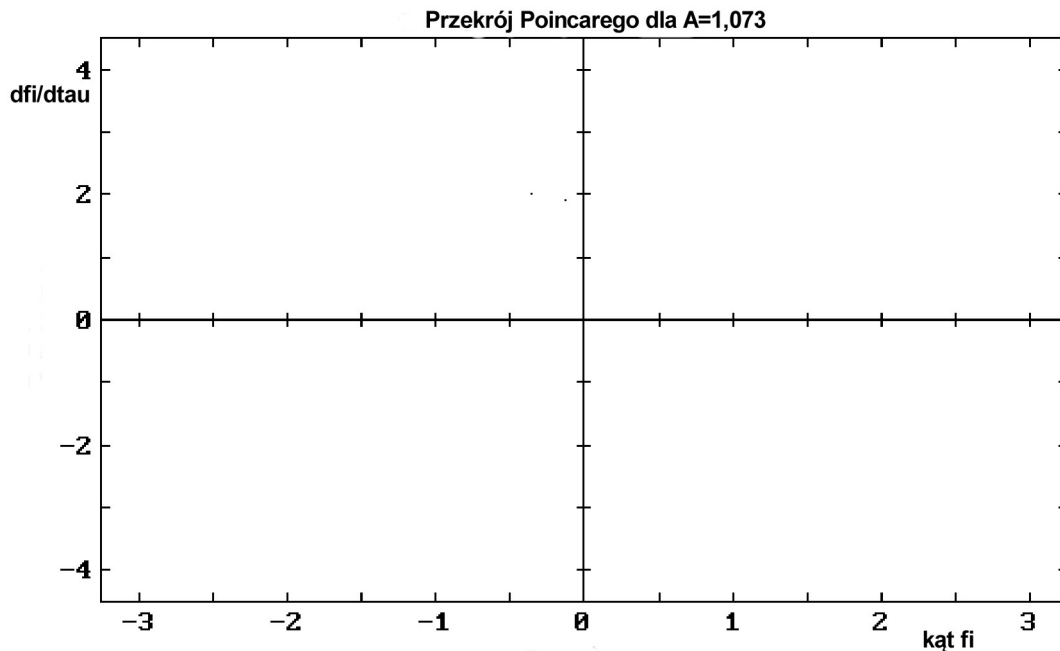


Diagram fazowy dla $A=1,073$





- dla $A > 1,0829$ przynajmniej dla niektórych częstotliwości siły wymuszającej i pewnych warunków początkowych ruch w długiej skali czasu staje się nieokresowy - pojawia się chaos. Dalsze zwiększenie A powoduje pojawianie się znów przedziałów ruchu okresowego i przedziałów chaosu. Wykresy przedstawiające ruch chaotyczny przedstawiamy dla $A = 1,15$. Brak okresowości widoczny jest nie tylko na wykresie przebiegu czasowego prędkości kątowej, ale także na diagramie fazowym czy przekroju Poincarého. Widmo częstotliwości staje się praktycznie ciągłe.

Przebieg czasowy dla $A=1,15$

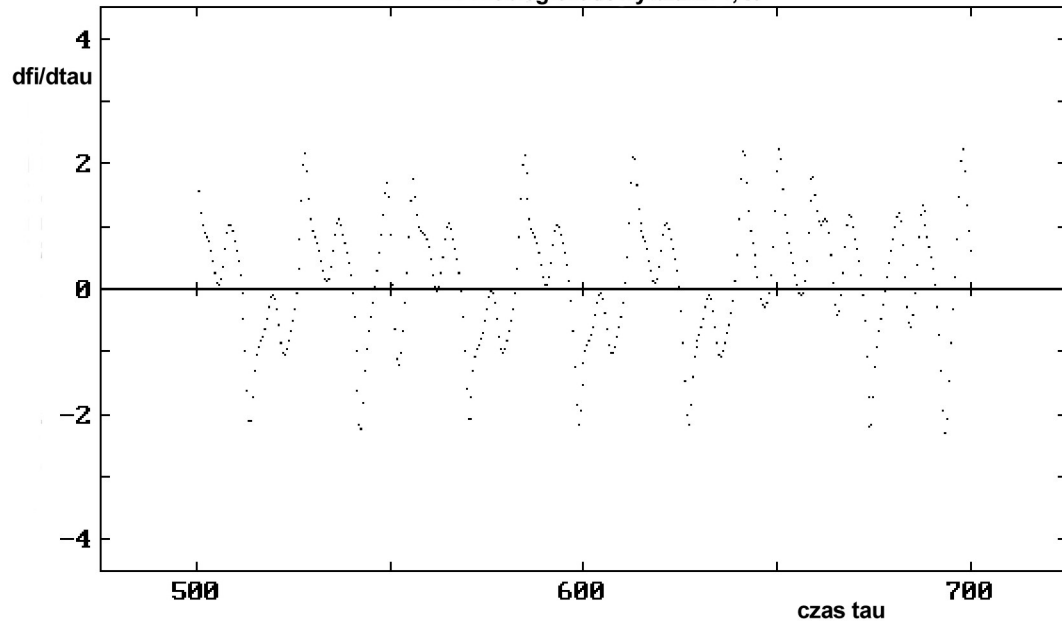
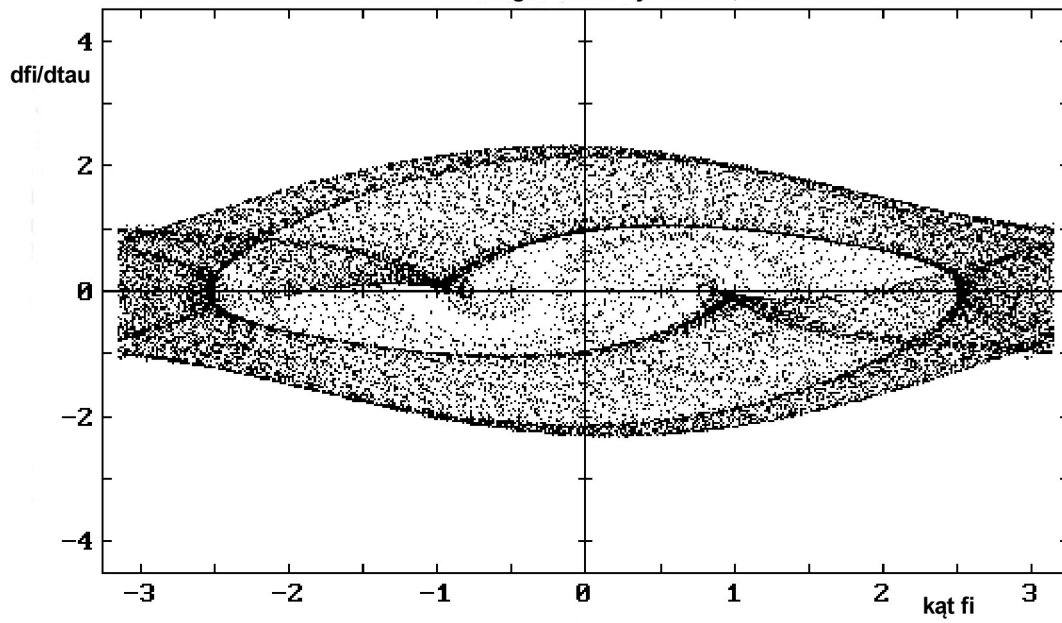
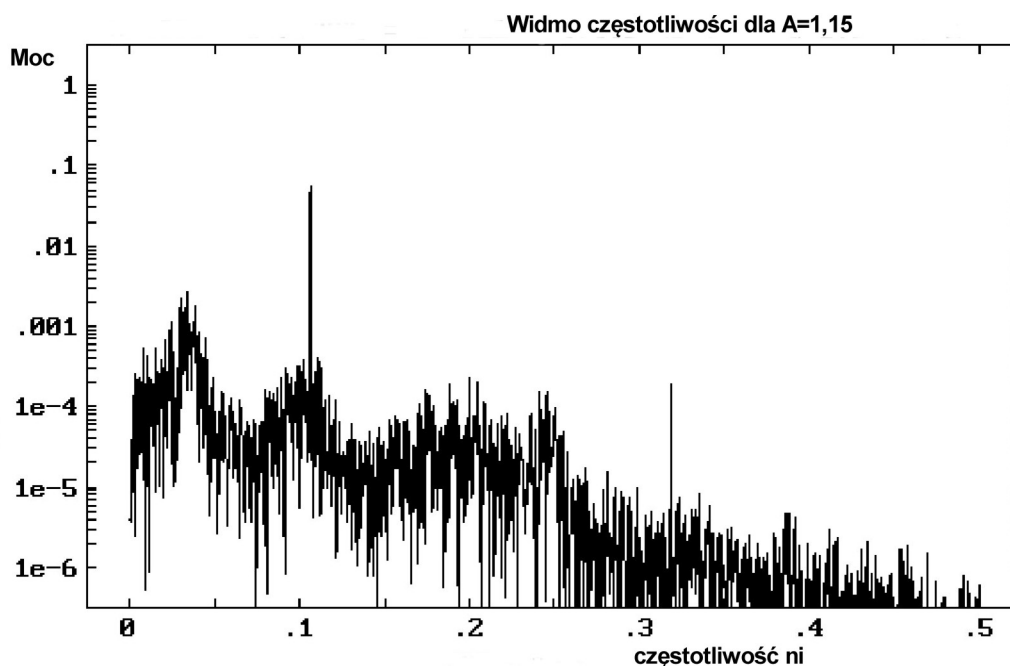
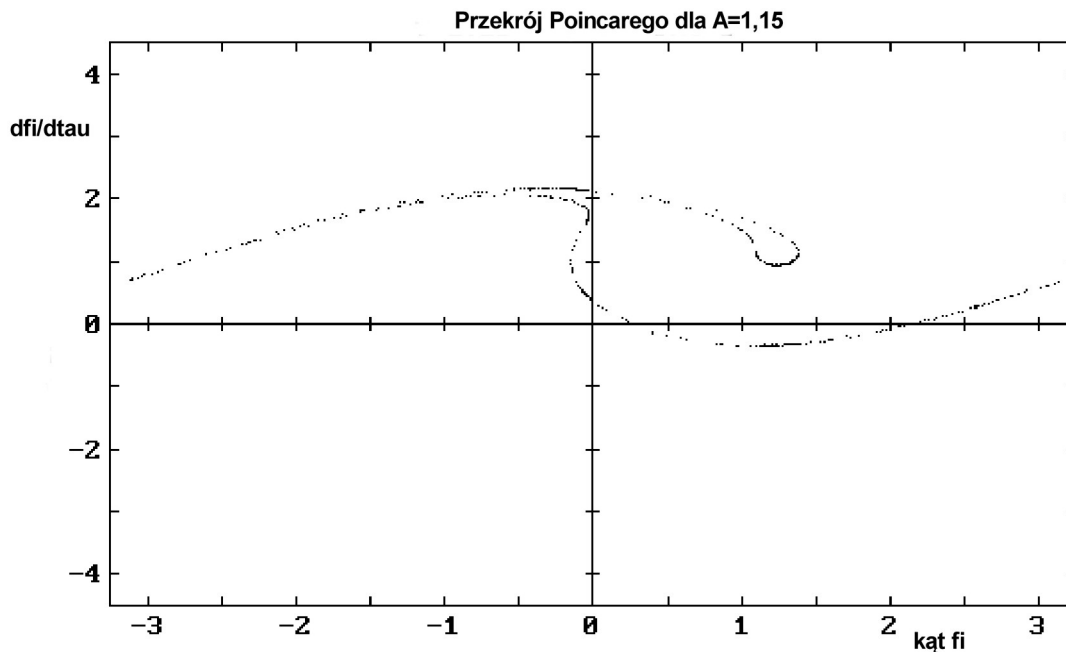


Diagram fazowy dla $A=1,15$



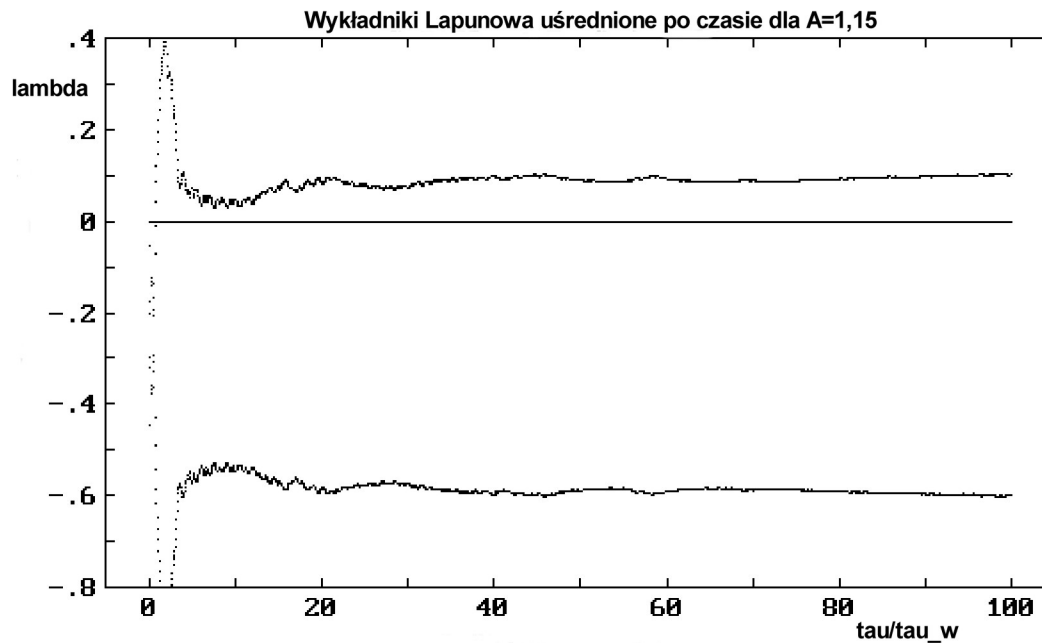
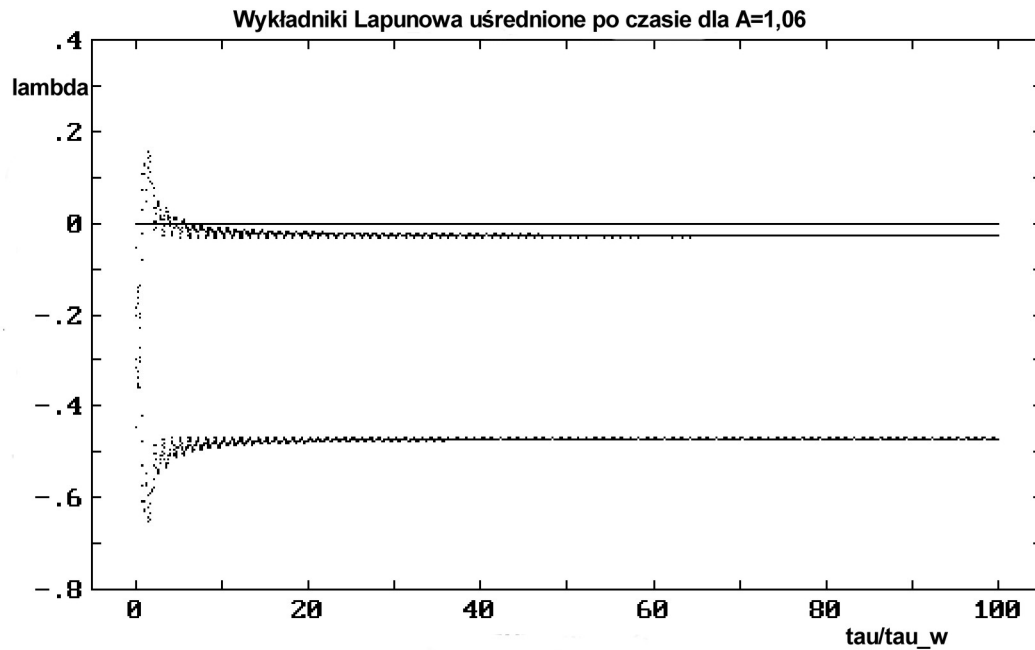


Ruch chaotyczny jest niezwykle wrażliwy na warunki początkowe. Jeśli dwa identyczne wahadła z takim samym wymuszeniem wprowadzimy w ruch z nieznacznie różniącymi się warunkami początkowymi, to odległość między nimi będzie wykładniczo rosła w czasie niezależnie od tego, jak mała była początkowa różnica. Wrażliwość na warunki początkowe charakteryzujemy przy użyciu wykładników Lapunowa. Dla rozważanego wahadła mamy trójwymiarową przestrzeń fazową związaną ze zmiennymi (φ, ψ, ξ) układu autonomicznego. Mała sfera w przestrzeni fazowej zmienia się w czasie w elipsoidę o osiach głównych skierowanych w kierunku jej rozszerzania się lub ściskania. Początkowa objętość V_0 sfery zmienia się w czasie zgodnie ze wzorem

$$V(\tau) = V_0 e^{(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)\tau},$$

gdzie wykładniki Lapunowa λ_i charakteryzują szybkość zmiany długości osi głównych elipsoidy, przy czym dla układu dysypatywnego, jakim jest wahadło, mamy $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = -\frac{1}{q}$. W

obszarze parametrów odpowiadających ruchom okresowym wahadła wykładniki Lapunowa są zerowe lub ujemne, natomiast dla ruchów chaotycznych jeden wykładnik jest dodatni i pojawia się wykładnicza rozbieżność ruchów, czyli wrażliwość na warunki początkowe.



Problem chaosu deterministycznego pojawia się przy analizie procesów nieliniowych nie tylko w mechanice, ale także w optyce, chemii, biologii, geofizyce, ekonomii itd. W ostatnich 20 latach wydano (także w języku polskim) bardzo dużo książek na temat chaosu deterministycznego. Cały rozdział na temat mechaniki nieliniowej i chaosu jest w podręczniku Taylora.

Warto również samodzielnie wygenerować sobie różne wykresy dla wahadła lub innych układów przy użyciu przeglądarki i programów dostępnych w internecie (np. pod adresem <http://www.phy.davidson.edu/StuHome/chgreene/Chaos/Chaos.html>).

Mechanika klasyczna jako dziedzina nauki istnieje już ponad 300 lat nadal nie jest zamkniętą dziedziną, gdyż, jak widzimy, ciągle jest przedmiotem badań naukowych fizyków i matematyków.