A mechanika elvei

A variációszámítás alapjai

Mint azt láttuk a klasszikus mechanika egy „axiomatikus” modell a makroszkopikus testek (dinamikai) viselkedésének a megértéséhez. Természetesen itt az „axioma” nem a matematikai szigorúsággal értendő. Pusztán annyit jelent, hogy kísérleti megfigyeléseken alapuló tények sokaságából kiválasztjuk azt a lehető legkisebb számút, amelyek segítségével a többi (lehetőleg összes) mechanikai jelenség logikusan levezethető. A logikusság itt matematikai formalizmusban mutatkozik meg.

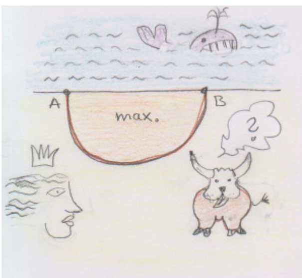
A Newton-törvények (vagy Newton axiomák) adják a klasszikus mechanika alaptörvényeit. Newtont követő fizikusok (D’alambert, Euler, Lagrange, Hamilton,) megpróbálták a mozgástörvényt más formában is megfogalmazni. Ezeket ma a „mechanika elvei”-ként tartjuk számon.

Ezek az elvek nem lépnek túl a newtoni mechanika határain, így ebből a szempontból ekvivalens megfogalmazásai a klasszikus mechanikai modelljeinknek. Mégis van egy fontos sajátosságuk, amely a Newton-féle mozgástörvényekkel szemben nagy elvi előnynek bizonyult. Ez pedig az, hogy olyan formában fogalmazzák meg a dinamika alaptörvényét, amely közvetlenül általánosítható a mikrofizika irányába. Mindez természetesen csak utólag derült ki. A kísérleti tapasztalatok hatására, a XX. század első évtizedeiben, ezen elméleti alapok tették lehetővé a kvantummechanika megszületését.

Vizsgálódásunkat látszólag nagyon távolról kezdjük.

A legendás történetet (Julis Ceasar kortársa) Publius **Vergilius** Maro eposza az **Aeneis** örökítette meg, a következő képpen.

A mai időszámítás szerint Ie 825-ben Dido elszökött szülőhazájából Föníciából. Volt rá oka, hiszen férjét meggyilkolták. A helyzet komolyságát az mutatta, hogy a tettes a városállam „türannosza”, aki egyben Dido bátyja is volt. Az asszonynak nem sok választása lehetett, mert hű embereivel titokban hajóra szállt és meg sem állt amíg biztonságos távolságban nem érezte magát. A mai Tunisznál ért partot. Nem mondhatni, hogy a helybéliek nagyon örültek volna a váratlanul partra lépő új jövevényeknek. De Dido meggyőzte Hiarabas királyt mondván, hogy neki csak annyi terület kell, mint amennyit egy marha bőrével körbe tud keríteni. A királynak tetszhetett a képtelen ajánlat és belement az alkuba. Megkönnyebbülése azonban nem tartott sokáig. Dido okosabbnak bizonyult, mint sejtették. A leölt marha bőrét ugyanis vékony csíkokra vágatta, majd egy hosszú kötelet készíttetett belőle. Kisétált a tengerpartra, és fékőrt formálva a kötélből hatalmas területet elkerített magának s társainak. Mint az ma már közismert, a kör az a síkidom, amelynek adott kerület mellett a legnagyobb a területe. Nem volt mit tenni, a szerződést a meghökkent királynak is be kellett tartania! Így történt aztán, hogy Dido embereivel letelepedett. Majd ie.814-ben megalapította Karthagot és annak első uralkodója, „királynője” lett. Mint tudjuk a történelemből ez a városállam még sok borsot tört Róma orra alá.



1.ábra

Ez az első leírása egy „izoperimetrikus, integrálvariációs problémának”. Iu 200-ban a görögök sejtették, hogy a helyes megoldás a „kör”. De a matematikai bizonyítás hiányzott. Erre még több mint 1600 évet kellett várni. Weierstraβ és Steiner 1841-ben megadták a feladat precíz megoldását.

Hasonló szélsőérték feladatot számtalant tudunk gyártani. Ilyen például a „geodetikus vonal” problémája. Adott (tetszőleges, de elegendően sima) felületen kijelölünk két pontot. Keressük azt a két pontot összekötő vonalat, amelynek a hossza a legkisebb. A síkon a megoldás az egyenes. Mint tudjuk a gömbön a két ponton átmenő főkör.

MEGJEGYZÉS: Az elmúlt századokban a matematikai közélet egyik fóruma az volt, hogy valaki kitűzött egy újszerű problémát és a többiek megpróbálták azt megoldani. A leghíresebb ilyen a „nagy Fermat sejtés” volt : $\{a^n + b^n \neq c^n \mid a,b,c,n = 3,4,5,....\}$ (Pierre de Fermat 1601-1665.) Ennek a (mindenki által helyesnek elfogadott) bizonyítását csak 1995-re sikerült megalkotni és ez Andrew Wiles angol matemetikus nevéhez fűződik. 300 éves, „népszerű fejtörő” megoldására derült fény. Kétségtelen tény , hogy annak az évnek ez volt „A” tudományos szenzációja. Még a bulvárlapok címoldalán is megjelent. De mint egy jó krimiben, egy újabb „kognitív talány” merült fel. Ugyanis a Wiles által közölt bizonyítás olyan mélyebb és szerteágazó matematikai részletekre épít, amely Fermat korában még teljességgel ismeretlen volt. De akkor miért írta Fermat „híres/hírhedt szavait” a Diophantosz : Aritmetika könyv margójára:

„…dividere cuius rei demonstrationem mirabilem sane detexi.
***Hanc marginis** exiguitas non caperet,”*

Azaz:

„…i*gazán csodálatos bizonyítást találtam erre a tételre.*
***A margó azonban** túlságosan keskeny, semhogy ideírhatnám,”*

Vagy talán az utolsó szó végi (,) írásjel a mondat valamiféle folytatását jelenti, amely enyhítette a leírt szavak súlyát? Ez ma már nem derülhet ki, mert az eredeti kézirat eltűnt. A halottak meg nem beszélnek, hacsak nem a fennmaradt „műveik” által.

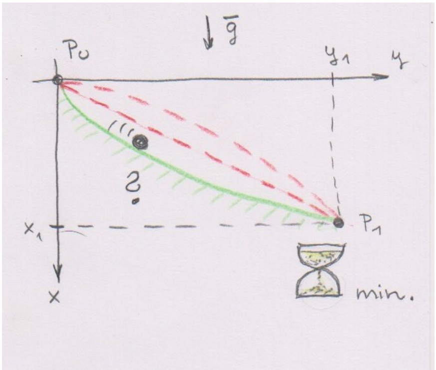
Johann BERNOULLI
(1667-1748)
Daniel Bernoulli apja

Johann Bernoulli 1696-ban a következő feladatot tűzte ki: „Függőleges síkban kijelölünk két pontot. Milyen vonallal kell összekötni őket ahhoz, hogy a görbén, egy súrlódásmentesen lecsúszó tömegpont a legrövidebb idő alatt érjen le? A feladat a „brachisztochron” (legrövidebb idő) néven került be a Fizika ill. a Matematika történetébe.

A feladatra több megoldás is született. Maga Newton (saját bevallása szerint) egyetlen éjszaka alatt megoldotta. Euler (1744) és Lagrange (1760) által publikált művek a matematika új területét a „variációszámítás" alapjait rakta le mindkettőjüket a „brachisztochron" inspirálta. Ma általában az általuk kitűzött utat követjük. És a megoldásul szolgáló differenciálegyenletet „Euler-Lagrange" egyenletnek hívjuk.

Fogalmazzuk meg tehát a feladatot. A függőleges *(x,y)* síkban keresett pálya egyenlete legyen az $y(x)$ függvény. A rögzített végpontokat jelölje $P_0(0{,}0), P_1(x_1, y_1)$. A pálya mentén a tömegpont sebessége $v(s)$, ahol „*s*" az indulási végponttól mért pálya menti úthossz. A lecsúszás ideje ekkor

$$T_{12} = \int_{P0}^{P1} \frac{ds}{v(s)}$$



2.ábra

A tömegpont sebessége az energia megmaradás tételéből számítható ki Ha a tömegpont az origóból, nyugalomból indul, akkor

$$\frac{1}{2}mv^2 = mgx,$$

azaz

$$v = \sqrt{2gx}$$

A pálya menti elmozdulás pedig közismert

$$ds = \sqrt{1 + y'^2}\,dx$$

Keresett az az $y(x)$ függvény, amelyik esetén az alábbi integrál minimális értéket vesz fel.

$$T = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^{X1} \frac{\sqrt{1 + y'^2}}{\sqrt{x}} dx = \text{„extrémum"}$$

Ezzel megkaptuk a „brachisztochron" probléma matematikai megfogalmazását.

A „hagyományos" szélsőérték kereséshez képest ez a feladat többféle újdonságot jelent. Láthatóan a „T " a függvényfogalomnak egy általánosítása, hiszen az $\{y(x) \mid y_0(x_0) \text{ és } y_1(x_1)\}$ függvényhalmaz minden eleméhez egy T valós számot rendelünk. Ezen függvények két végpontja (pl. most) rögzített. Keressük azt a függvényt, amely esetén a „*T*" a legnagyobb/legkisebb értékét veszi fel. Ennek az „általánosított" függvényfogalomnak a neve „funkcionál". Mivel most a leképezés egy integrálás műveletével történik, ezért a szóban forgó feladatot „integrálvariációs" problémának hívjuk. Általában pedig Variációszámításról beszélünk.

Dido esetében a kissé bonyolultabb a helyzet.
A körülhatárolt terület könnyen számolható ugyan

$$T = \int_{X1}^{X2} y(x)dx = \text{„extremum”},$$

de a kötél hossza adott állandó érték

$$L = \int_{X1}^{X2} \sqrt{1 + y'(x)}dx \;.$$

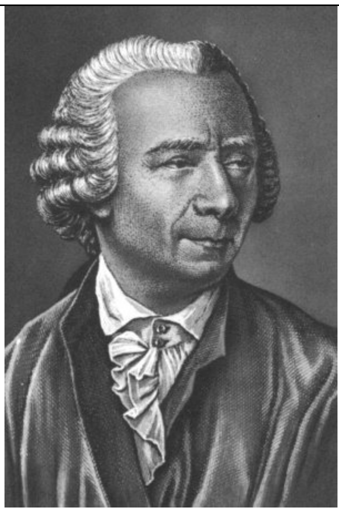
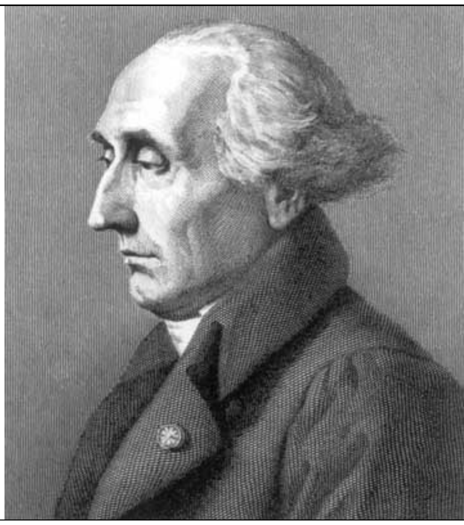
Láhatóan ez egy „feltételes szélsőérték feladat”. Mivel a keresett síkidom kerülete állandó, ezért az ilyen típusú feladatok neve „izoperimetrikus” probléma. A feladatot ún. „Lagrange multiplikátor” módszerrel lehet megoldani. Ekkor a feladatot visszavezetjük egy „feltétel nélküli szélsőérték” keresésre. Ez úgy történik, hogy képezzük az alábbi kifejezést

$$F \equiv y(x) + \lambda \cdot \sqrt{1 + y'(x)}$$

És keressük a

$$I = \int_{X1}^{X2} F(x)dx = \text{„extremum”}$$

A „λ” itt egy meghatározandó paraméter.
A feladatot többféle módon és szemlélettel lehet megoldani. Mi az Euler-Lagrange féle megoldást ismertetjük.

		
Leonhard EULER (1707 - 0783)	**Joseph-Louis LAGRANGE** (1736—1813)	**William Rowan HAMILTON** (1805–1865)

A funkcionálra a következő jelölést vezetjük be.
Az $\{y(x) \to I\}$ leképzést $I[y]$ -al jelöljük.
A funkcionálok egy része integrál alakjába írható, azaz

$$I[y] = \int_{X1}^{X2} f(y, y', y'', y''', ..; x)dx$$

Mi most csak olyan, a Fizikában gyakran előforduló esetekkel foglalkozunk, amikor az integrandus $f \equiv f(y, y'; x)$ alakú függvény. Mint az látható, mindkét bevezető feladatunk ilyen.

Keressük tehát az $I[y]$ funkcionál szélső értékét az $\{y(x)\}$ függvényhalmazon.

Nézzük meg először, hogy hagyományos függvények esetén hasonló esetben mit teszünk.

Ha egy $g(x)$ függvénynek szélső értéke van az x_0 pontban, akkor annak kis környezetében a „g" megváltozása első rendben a következő módon írható:

$$dg \equiv g(x) - g(x_0) = \left[\frac{dg}{dx}\right]_{x_0} \cdot (x - x_0) + \ldots$$

A szélső érték szükséges feltétele az, hogy

$$g'(x_0) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{g(x_0 + \varepsilon) - g(x_0)}{\varepsilon} = 0$$

és ezért írható, hogy

$$dg = 0$$

Azt mondjuk erre, hogy: „A szélső érték (extrémum) kis környezetében a függvény megváltozása (variációja) első rendben zérus. Ennek szükséges feltétele, hogy $g'(x_0) = 0$ legyen"

Legyen mindez igaz a funkcionálok esetében is.

Próbáljuk meg visszavezetni a feladatot egyváltozós függvény szélsőérték keresésére. Tegyük fel, hogy a $I[y(x)]$ funkcionál az $y_0(x)$ függvénynél veszi fel az extrémumát. Ennek egy kis környezete legyen most

$$y(x) \equiv y_0(x) + \varepsilon \cdot \eta(x)$$

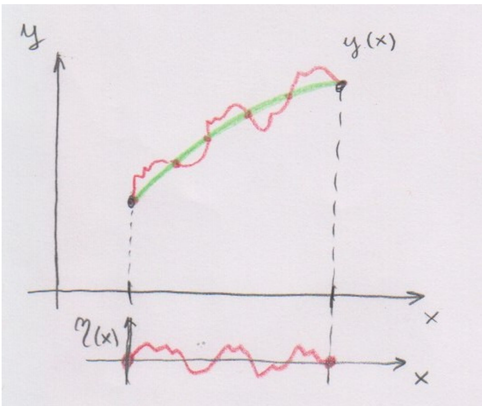
ahol

$$\varepsilon << 1$$

és mivel az integrálási határok rögzítettek, ezért

$$\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$$

$$\eta(x) \neq 0 \text{ ha } x_1 < x < x_2$$



3.ábra

Az $\eta(x)$ amúgy egy tetszőleges, de jól viselkedő függvény (azaz elegendően sima, mindenhol véges, stb…) Ekkor a funkcionálunk így is írható:

$$I[y_0(x) + \varepsilon \cdot \eta(x)] = I(\varepsilon)$$

Azaz egy közönséges $I(\varepsilon)$ függvényhez jutottunk, amelynek a változója az „ε” .
Mármost a funkcionál szélsőértékénél (első rendben)

$$\delta I = 0$$

Ennek szükséges feltétele az, hogy

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = 0$$

Végezzük el a deriválást, ügyelve arra, hogy most

$$y(x) \equiv y_0(x) + \varepsilon \cdot \eta(x)$$

és ezért

$$y'(x) \equiv y_0'(x) + \varepsilon \cdot \eta'(x)$$

Ekkor kapjuk, hogy

$$\frac{d}{d\varepsilon}\int_{X1}^{X2} f(y, y', x)dx = \int_{X1}^{X2}\left\{\frac{d}{d\varepsilon} f(y, y', x)\right\}dx$$

Az integrandusban az „ε” a változó. Az $f \equiv f(y, y'; x)$-ben pedig mind az „ $y(x)$” mind pedig az „ $y'(x)$” ennek az „ε”-nak a függvénye. Az összetett függvények deriválási szabálya szerint tehát írható, hogy

$$\frac{d}{d\varepsilon} f(y, y', x) = \frac{\partial f}{\partial y}\cdot\frac{dy}{d\varepsilon} + \frac{\partial f}{\partial y'}\cdot\frac{dy'}{d\varepsilon} = \frac{\partial f}{\partial y}\cdot\eta + \frac{\partial f}{\partial y'}\cdot\eta'$$

Azaz kapjuk, hogy

$$\frac{d}{d\varepsilon}\int_{X1}^{X2} f(y, y', x)dx = \int_{X1}^{X2}\left\{\frac{\partial f}{\partial y}\cdot\eta + \frac{\partial f}{\partial y'}\cdot\eta'\right\}dx = \int_{X1}^{X2}\left\{\frac{\partial f}{\partial y}\cdot\eta\right\}dx + \int_{X1}^{X2}\left\{\frac{\partial f}{\partial y'}\cdot\eta'\right\}dx$$

A második tagban parciális integrálást végezhetünk.

$$\int_{X1}^{X2}\left\{\frac{\partial f}{\partial y'}\cdot\eta'\right\}dx = \left[\frac{\partial f}{\partial y'}\cdot\eta\right]_{X1}^{X2} - \int_{X1}^{X2}\left\{\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right)\cdot\eta\right\}dx$$

A jobboldal első tagja eltűnik, hiszen $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$.
Végülis adódik az, hogy

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \frac{d}{d\varepsilon}\int_{X1}^{X2} f(y, y', x)dx = \int_{X1}^{X2}\left\{\frac{\partial f}{\partial y}\cdot\eta\right\}dx + \int_{X1}^{X2}\left\{\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right)\cdot\eta\right\}dx = \int_{X1}^{X2}\left\{\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right)\right\}\cdot\eta(x)dx = 0$$

Ennek minden, tetszőleges $\eta(x)$-nél igaznak kell lennie. Ez csakis úgy lehet, ha az $\eta(x)$ együtthatója azonosan zérus. Azaz

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right) - \frac{\partial f}{\partial y} = 0$$

Ennek a neve Euler-Lagrange egyenlet. Ez a funkcionál szélső értékének a szükséges feltétele.
Fontos észrevennünk, hogy az egyenletünkben „teles deriválás” *(d/dx)* és „parciális deriválás” (∂/∂y) is szerepel. Ügyeljünk a kétféle deriválásra!

MEGJEGYZÉS:

a.) Az Euler-Lagrange egyenlet csak „**szükséges, de nem elégséges**” feltétele a megoldásnak. Ez azonban minket nem kell, hogy zavarjon. Ugyanis a minket érdeklő fizikai problémák esetén eleve tudjuk, hogy **van a feladatnak megoldása**. Így a szükséges feltétel egyben elégséges is.

b.) A levezetésünk alapvető elem volt az $y(x) \equiv y_0(x) + \varepsilon \cdot \eta(x)$ definíciós összefüggés. Ez pedig azt jelenti, hogy csak relatív (lokális) szélső értékeket tudunk így meghatározni. A fizikai problémák nagy részénél ez sem lényeges, mert az abszolút minimum, vagy maximum fizikailag „triviális” szélsőséges megoldásokat jelent, ami számunkra érdektelen.

Szemléltetésképpen oldjuk meg a két kitűzött feladatunkat:

A „**brachisztochron**” probléma esetén kaptuk, hogy:

$$T_{12}[y(x)] = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^{X1} \sqrt{\frac{1+y'^2}{x}}\,dx \; = \text{„extrémum”}$$

Azaz

$$f((y, y', x) = \frac{1}{\sqrt{2g}} \sqrt{\frac{1+y'^2}{x}}$$

Az Euler-Lagrange egyenlet

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right) - \frac{\partial f}{\partial y} = 0$$

Most azonban láthatjuk, hogy az „ f ” nem függ az „ y ”-tól. Azaz $\frac{\partial f}{\partial y} = 0$ és ezért

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right) = 0$$

Így aztán

$$\frac{\partial f}{\partial y'} = C = \text{állandó}$$

Tehát

$$\frac{\partial f}{\partial y'} = \frac{1}{\sqrt{x}} \cdot \frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} = \mathrm{C}$$

Átrendezés után kapjuk, hogy:

$$y' = \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{a-x}}, \qquad \text{ahol } a \equiv \frac{1}{C^2}.$$

Integrálás után kapjuk

$$y(x) = \int \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{a-x}}\,dx + C_0 \qquad \text{YY...}$$

Ez már a keresett $y(x)$ függvény. Szemléletes megoldást kapunk, ha új változót vezetünk be a következő definícióval:

$$x \equiv a \cdot \sin^2\left(\frac{u}{2}\right) \qquad \text{XX}$$

Ekkor

$$dx = a \cdot \sin\left(\frac{u}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{u}{2}\right) \cdot du$$

Ezt beírva a YY egyenletbe adódik, hogy

$$y = \int \frac{\sqrt{a} \cdot \sin\left(\frac{u}{2}\right)}{\sqrt{a - a\sin^2\left(\frac{u}{2}\right)}} \cdot a \cdot \sin\left(\frac{u}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{u}{2}\right) \cdot du \;+\; C_0 = \; a \cdot \int \sin^2\left(\frac{u}{2}\right) du + C_0$$

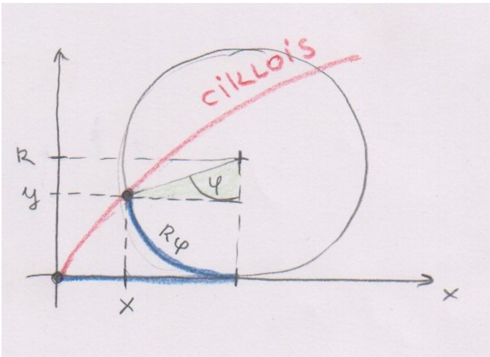
Elvégezve az integrálást azt kapjuk, hogy

$$y = \frac{a}{2}(u - \sin u)$$

és

$$x = \frac{a}{2}(1 - \cos u)$$

Ez utóbbinál átalakítottuk az XX definíciós egyenlőséget. Rögtön látszik, hogy ez egy ciklois paraméteres egyenlete.



4.ábra

A **Dido** probléma megoldása a következő. Mint azt láttuk

$$F \equiv y(x) + \lambda \cdot \sqrt{1 + y'(x)}$$

Az Euler-Lagrange egyenlet pedig

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) - \frac{\partial F}{\partial y} = 0$$

Erre adódik, hogy

$$\frac{d}{dx}\left[\lambda \cdot \frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}}\right] = 1$$

Integrálás után:

$$\lambda \cdot \frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} = x + C$$

Átrendezve

$$\frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} = \frac{x+C}{\lambda} \equiv$$

Új változókat bevezetve

$$u \equiv \frac{x+C}{\lambda} \qquad \text{és} \qquad v \equiv \frac{y}{\lambda}$$

Ekkor

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dv}{du} \equiv v'$$

Ezért

$$\frac{v'}{\sqrt{1+v'^2}} = u$$

valamint átrendezve:

$$v' = \frac{u}{\sqrt{1-u^2}}$$

Azaz

$$v = -\sqrt{1-u^2} + C$$

Átrendezés után kapjuk, hogy

$$(v-C)^2 + u^2 = 1$$

$$\left(\frac{y}{\lambda} - C\right)^2 + \left(\frac{x}{\lambda} + \frac{C}{\lambda}\right)^2 = 1$$

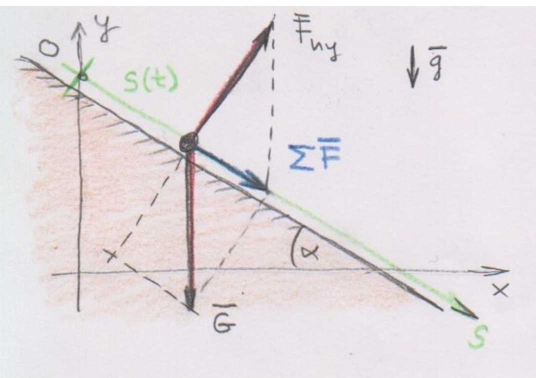
Majd a „λ^2”-el való szorzás után

$$(y - C\lambda)^2 + (x+C)^2 = \lambda^2$$

Ez egy körnek az egyenlete.

A Lagrange-féle mozgásegyenlet és a Hamilton-elv

Az eddigi mechanikai tanulmányainkból tudjuk, hogy általános esetben egy tömegpontra ható erők két félek lehetnek, szabad erők és kényszer erők. A legegyszerűbb példa a függőleges síkban lévő lejtőn mozgó tömegpont esete.



5.ábra

A tömegpontra ható $\vec{G} = m\vec{g}$ erő egy szabad erő és a lejtő által kifejtett $\vec{F}_n$ egy kényszer erő. Ez utóbbit ugyanis a Newton egyenlet felírásakor még nem ismerjük. Abból a feltételből tudjuk meghatározni, hogy a tömegpont a lejtőre merőlegesen nem tud mozogni. Ez egy „kinematikai feltétel", hiszen a mozgás jellegére köt ki valamit. Nevezetesen azt, hogy a tömegpont mozgása csak a lejtő mentén történhet. Azaz az „x,y" koordináták nem függetlenek egymástól. A mozgás így valójában „egydimenziós" lesz. Azaz pl. a lejtőn megtett „$s(t)$" úttal jellemezhető.

MEGJEGYZÉS: Sokféle kényszer létezik. Mi csak egyfajtával, a fenti példához hasonló kényszerekkel foglakozunk. Ezek neve „holonom, szkleronom" kényszer. Ezek olyan időben állandó (szkleronom) feltételek, amelyeket a pont koordinátái közötti függvénykapcsolattal tudunk megadni (holonom). Ezek pedig csökkentik a rendszert jellemző független skalár adatok (koordináták) számát. Vannak olyan kényszerek is, amelyek „csak" a koordináta megváltozások (pl. *dx, dy*) közötti kapcsolatokat írják elő. Ezeknek a neve „anholonom kényszer". Ezek is lehetnek „szkleronomok" (időben állandók) vagy reonomok (időfüggők). A kényszererők pedig azok az erők, amelyek (a fizikai viszonyok által megkövetelt) kényszerfeltételeket biztosítják.

Általában egy „*N*" db tömegpontból álló rendszer esetén a kényszerek száma és bonyolultsága igen változatos lehet. Ennek megfelelően a kényszererők meghatározása sem olyan triviális, mint azt a „lejtős példánál" láttuk.

A következőkben ezt a kérdéskört fogjuk megvizsgálni.

Egy, „*N*" db részecskéből álló tömegpontrendszer esetén a mozgásegyenlet tehát a következő

$$m_j \ddot{\vec{r}}_j = \vec{F}_j^{SZ} + \vec{F}_j^{K} \qquad j = 1,2,3,...N$$

Ahol

$\vec{F}_j^{SZ}$ a „*j*"-ik tömegpontra ható szabad erők összege és

$\vec{F}_j^{SZ}$ a „*j*"-ik tömegpontra ható kényszer erők összege.

A kényszerfeltételek legyenek olyanok, hogy

$$\varphi_l(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, ...\vec{r}_N) = 0 \quad l = 1,2,3,...k$$

Az első fejezetben már láttuk, hogy a Descartes koordináták használata azért kényelmes, mert a koordinátarendszert definiáló egységvektorok a tér minden pontjában ugyanazok. Így a skalár mozgásegyenletek a következők

$$m_l \ddot{x}_l = X_l \qquad l = 1,2,3,...3N$$

$$X_l \equiv X_l^{SZ} + X_l^{K}$$

$$\varphi_i(x_1, x_2, x_3, ...x_{3N}) = 0 \qquad i = 1,2,3,...k$$

(Az „*l*"-el való indexelés értelemszerűen veendő.)

Ekkor a „*3N*" db koordináta között „*k*" db kapcsolat van. Így az egymástól független adatok száma „*f=3N-k*" . Az „*f*" neve a „szabadságfok".

A holonom kényszerek tehát csökkentik a rendszer független változóinak a számát. Válasszunk *f-db* egymástól független skalár adatot amely a rendszer mozgásállapotát egyértelműen megadja. Ezeket általános koordinátáknak hívjuk.

$$\{q_1, q_2, q_3, ...q_f\}$$

A rendszer dinamikai viselkedését a $\{q_i(t)\}_{i=1}^{f}$ függvények írják le. Ezek természetesen a kényszer feltételeknek eleget tevő mozgás leírását adják. Ezért mintegy „implicite magukba foglalják" a kényszererőket is. Ezen általános koordináták időfüggvényét meghatározó mozgásegyenleteket „Lagrange-féle másodfajú" (mozgás)egyenleteknek hívjuk. A Feladatunk az, hogy a Newton egyenletekből kiindulva keressük meg ezeket a mozgásegyenleteket.

Tulajdonképpen a

$$\{x_1, x_2, x_3, \ldots x_{3N}\} \rightarrow \{q_1, q_2, q_3, \ldots q_f\}$$

transzformációt kell végrehajtani.

Mivel a $\{q_i(t)\}_{i=1}^{f}$ általános koordináták teljes egészében jellemzik a rendszert, ezért minden Descartes koordinátát is egyértelműen meghatároznak, azaz

$$x_l(q_1, q_2, q_3, \ldots q_f) \qquad l = 1,2,3,\ldots 3N$$

Képezzük a következő kétindexes mennyiséget

$$J_{li} \equiv \frac{\partial x_l}{\partial q_i}$$

Ez lesz az „transzformációs mátrix”, amelyet használni fogunk a kitűzött feladatunk megoldásához.
Tekintsük a Newton egyenleteket

$$m_l \ddot{x}_l = X_l \qquad l = 1,2,3,\ldots 3N$$

Végezzük el a következő transzformációt:

$$\sum_{l=1}^{3N} m_l \ddot{x}_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \sum_{l=1}^{3N} X_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} \qquad i = 1,2,3,\ldots f \qquad \text{TR0}$$

Az egyenlet baloldala a következő képpen bontható tovább

$$\sum_{l=1}^{3N} m_l \ddot{x}_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}\left(\sum_{l=1}^{3N} m_l \dot{x}_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i}\right) - \sum_{l=1}^{3N} m_l \dot{x}_l \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial x_l}{\partial q_i}\right) \qquad \text{TR1}$$

A η_{li} transzformációs mátrixra triviálisan igazak a következő összefüggések

$$\frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \frac{\partial \dot{x}_l}{\partial \dot{q}_i}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial x_l}{\partial q_i}\right) = \frac{\partial \dot{x}_l}{\partial q_i}$$

Ezeket felhasználva a TR1 egyenletben kapjuk, hogy

$$\sum_{l=1}^{3N} m_l \ddot{x}_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}\left(\sum_{l=1}^{3N} m_l \dot{x}_l \frac{\partial \dot{x}_l}{\partial \dot{q}_i}\right) - \sum_{l=1}^{3N} m_l \dot{x}_l \frac{\partial \dot{x}_l}{\partial q_i} \qquad \text{TR2}$$

A rendszer „T” kinetikus energiája definíció szerűen (Descartes koordináták használata esetén)

$$T = \sum_{k=1}^{3N} \frac{1}{2} m_k \dot{x}_k^2$$

Azaz a kinetikus energia **csak a Descartes koordináták időderiváltjától függ**.

MEGJEGYZÉS: Görbevonalú (henger, gömbi, stb..) koordinátarendszer választás esetén ez nincsen így!

Ebből pedig kapjuk, hogy

$$m_l \dot{x}_l = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_l} \qquad l = 1,2,3,...3N$$

Ezt beírva a TR2 egyenletbe adódik, hogy

$$\sum_{l=1}^{3N} m_l \ddot{x}_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}\left(\sum_{l=1}^{3N} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_l} \frac{\partial \dot{x}_l}{\partial \dot{q}_i} \right) - \sum_{l=1}^{3N} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_l} \frac{\partial \dot{x}_l}{\partial q_i} \qquad (i = 1,2,3,...f) \qquad \text{TR3}$$

A közvetett deriválás szabálya szerint azt kapjuk, hogy:

$$\sum_{l=1}^{3N} m_l \ddot{x}_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_i} \qquad i = 1,2,3,...f \qquad \text{TR3}$$

Ezzel a TR0 így alakul

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_i} = \sum_{l=1}^{3N} X_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} \qquad i = 1,2,3,...f \qquad \text{TR4}$$

Térjünk rá ezen egyenlet jobb oldalának a vizsgálatára. Most értünk el ahhoz a ponthoz, ahol az egész eljárásunk lényege koncentrálódik. Ugyanis most fogunk automatikusan megszabadulni a kényszererőktől.

$$\sum_{l=1}^{3N} X_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \sum_{l=1}^{3N} \left(X_l^{SZ} + X_l^K \right) \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \sum_{l=1}^{3N} X_l^{SZ} \frac{\partial x_l}{\partial q_i} + \sum_{l=1}^{3N} X_l^K \frac{\partial x_l}{\partial q_i}$$

A jobboldal második tagja biztosan zérus. Ugyanis a kényszererőknek éppen az a szerepe, hogy a megadott kényszernek megfelelően, bizonyos irányú mozgásokat megakadályozzanak. Így a kényszererők mindig merőlegesek a létrejövő mozgásokra. Azaz, mint azt tudjuk, a **kényszererők nem végeznek munkát,** tehát $dW^K = 0$.

Ezért aztán

$$\sum_{l=1}^{3N} X_l^K \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \frac{1}{\partial q_i} \sum_{l=1}^{3N} X_l^K \partial x_l = \frac{\partial W^K}{\partial q_i} = 0 \qquad i = 1,2,3,...f$$

A következőkben csak **konzervatív rendszerek** vizsgálatára szorítkozunk. Ebben az esetben minden szabad erőkomponens a rendszer $V(x_1, x_2, x_3, ...x_{3N})$ potenciális energiájából adódik, azaz

$$X_l^{SZ} = -\frac{\partial V}{\partial x_l}$$

Ezzel a jobb oldal átírható a következő módon:

$$\sum_{l=1}^{3N} X_l \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \sum_{l=1}^{3N} X_l^{SZ} \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = \sum_{l=1}^{3N} \left(-\frac{\partial V}{\partial x_l} \right) \cdot \frac{\partial x_l}{\partial q_i} = -\frac{\partial V}{\partial q_i} \qquad i = 1,2,3,...f$$

Ezért TR4 alakja a következő lesz

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}\right)-\frac{\partial T}{\partial q_i}=-\frac{\partial V}{\partial q_i} \qquad i=1,2,3,\dots f \qquad \text{TR5}$$

MEGJEGYZÉS: Felmerülhet a kérdés, hogy a kinetikus energia valóban függ-e explicit módon a q_i koordinátáktól, hiszen Descartes koordináták esetén ez nincsen így. Könnyen megmutatható, hogy igen. Transzformáljuk át a kinetikus energiát az általános koordinátákra. Ekkor a sebességkomponensekre kapjuk, hogy

$$\dot{x}_k=\sum_{i=1}^{f}\frac{\partial x_k}{\partial q_i}\dot{q}_i$$

Ha ezt beírjuk a kinetikus energia definíciójába kapjuk, hogy

$$T=\sum_{k=1}^{3N}\frac{1}{2}m_k\dot{x}_k^2=\sum_{k=1}^{3N}\frac{1}{2}m_k\left(\sum_{i=1}^{f}\frac{\partial x_k}{\partial q_i}\dot{q}_i\right)\left(\sum_{j=1}^{f}\frac{\partial x_k}{\partial q_j}\dot{q}_j\right)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\sum_{j=1}^{f}\left(\sum_{k=1}^{3N}m_k\frac{\partial x_k}{\partial q_i}\frac{\partial x_k}{\partial q_j}\right)\dot{q}_i\dot{q}_j\equiv\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\sum_{j=1}^{f}m_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j$$

Ahol látható, hogy az $m_{ij}(q_1,q_2,q_3,\dots q_f)$ valóban függ az általános koordinátáktól. Ezért tehát $T(q_i,\dot{q}_i)$.

Tudjuk, hogy konzervatív erők esetén a potenciális energia csak a koordinátáktól függ, de azok időbeli deriváltjától nem , azaz

$$\frac{\partial V}{\partial \dot{q}_i}=0$$

Így a TR5 egyenlet „0"-val bővíthető:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}\right)-\frac{\partial T}{\partial q_i}=\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial V}{\partial \dot{q}_i}\right)-\frac{\partial V}{\partial q_i} \qquad i=1,2,3,\dots f \qquad \text{TR6}$$

Átrendezés után megkapjuk a $\{q_i(t)\}_{i=1}^{f}$ általános koordinátákra vonatkozó, keresett „Lagrange2" mozgásegyenleteket konzervatív rendszerek esetén.

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0 \qquad i=1,2,3,\dots f \qquad \text{L2}$$

Ahol bevezettük az ún. Lagrange függvényt a következő definícióval:

$$L\equiv T-V$$

és amelyre természetesen

$$L(q_1,q_2,q_3,\dots q_f;\dot{q}_1,\dot{q}_2,\dot{q}_3,\dots\dot{q}_f)$$

Egyszerűsített jelöléssel

$$L(q_i,\dot{q}_i)\equiv L(q_1,q_2,q_3,\dots q_f;\dot{q}_1,\dot{q}_2,\dot{q}_3,\dots\dot{q}_f)$$

A kapott mozgásegyenlet elgondolkoztató. Hiszen ez pontosan egy Euler-Lagrange egyenlet, amely mint tudjuk egy „integrálvariációs szélsőérték probléma" megoldhatóságának a szükséges feltétele. A bevezetésben előforduló funkcionálokhoz képest ez egy „többváltozós" eset.

Könnyen legyártható az ennek megfelelő funkcionál

$$S[q_1,q_2,q_3,\dots q_f]=\int_{t1}^{t2}L(q_i,\dot{q}_i)dt$$

A Lagrange2 mozgásegyenlethez úgy jutunk, hogy megoldjuk a

$$S[q_i] = \int_{t1}^{t2} L(q_i, \dot{q}_i)dt \ = \text{extrémum}$$

Integrálvariációs szélsőérték problémát. Ezek után ezt fogjuk tekinteni a dinamika alaptörvényének. Ennek a neve **Hamilton-elv vagy a „legkisebb hatás elve”**. Az elnevezés oka az, hogy a bevezetett $S[q_i]$ funkcionált „hatásnak” nevezzük. A hatás mértékegysége $[S] = 1 \cdot Js$

A tapasztalat azt mutatja, hogy a Hamilton elv abban az estben is jó, amikor a Lagrange függvény nem írható egyszerűen $L \equiv T - V$ alakba és explicite függ a „*t*” időtől is.

$$S[q_i] = \int_{t1}^{t2} L(q_i, \dot{q}_i, t)dt \ = \text{extrémum}$$

Sajnos a konzervatív rendszereket kivéve nincsen egy olyan szisztematikus eljárás, amely segítségével egy általános mechanikai rendszer esetén a Lagrange függvény „legyártható” lenne. Itt elsősorban a szakmai rutin és az intuíció segít bennünket. Egyetlen módja a „megálmodott” „*L*” ellenőrzésének az, hogy megoldjuk a Lagrange2 mozgásegyenlet és ellenőrizzük, hogy az helyes eredményt ad-e.

MEGJEGYZÉS: Mi most Hamilton elvet az integrálvariációs problémák matematikai megoldásának az ismeretében alkottuk meg. Szokásos a „közvetlen módszer” is, amikor a Hamilton elv (mint „axioma”) kimondása után megkeressük annak megoldását. Ekkor a $q_i(t)$ „pálya” függvények kis (lokális) megváltozását (az $\varepsilon_i \cdot \eta_i(t)$ helyett) δq_i -vel szokás jelölni. Így a következő levezetéshez jutunk.
A hatás

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t)dt$$

A hatás első rendbeni megváltozása

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{f} \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta \dot{q}_i \right\} dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{f} \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\left(\frac{d}{dt}\delta q_i\right) \right\} dt$$

A jobb oldali integrál második tagjának a parciális integrálásával adódik, hogy

$$\delta S = \left[\sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{f} \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) \right\} \delta q_i dt = 0$$

Tudjuk, hogy definíció szerűen a „végpontok rögzítettek”, azaz $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$. Ezért a δS első tagja zérus. De a Hamilton elvnek minden tetszőleges $\delta q_i(t)$ megváltozásra igaznak kell lennie. Ez pedig csak akkor lehetséges, ha az integrálban szereplő $\delta q_i(t)$-k együtthatója azonosan zérus. Ez pedig éppen a Lagrange2 differenciálegyenlet.

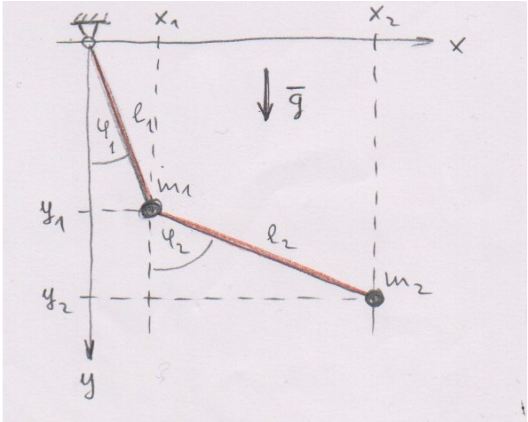
A Hamilton elv meglepően „szép” mélységeit tárja fel természeti törvényeknek. De a Lagrange egyenlet használata gyakorlati előnyökkel is jár. Hiszen olyan konzervatív rendszer esetén, amelyben sok és igen bonyolult kényszer van a Newton formalizmus szinte használhatatlan. Ugyanakkor a mozgásegyenlet felállítása a Lagrange egyenletekkel „könnyen” megtehető.

Ennek egyik igen tanulságos példája az ún. matematikai „kettős inga”.

A megoldás kulcsa az, hogy a megfelelő Lagrange függvényt megtaláljuk.
Mivel a rendszer (most is) konzervatív, ezért definíció szerűen $L = T - V$. Az egyes energiatagok megadásánál egy szisztematikus utat érdemes követni. Ez úgy történik, hogy először legyártjuk a

Lagrange függvényt Descartes koordinátákkal. Ezután meghatározzuk a rendszer „*f*' szabadságfokát. Majd alkalmasan választunk „*f*" db általános koordinátát.

Lássuk tehát a részleteket!



6.ábra

A Descartes és az általános koordinátaválasztás az ábrán látható-

A rendszer szabadságfoka „*f=2*".
A tömegpontok helyzetét az $\{x_1, y_1, x_2, y_2\}$ Descartes koordináták adják meg. Általános koordinátáknak érdemes a $\{\varphi_1, \varphi_2\}$ szögeket választani.

Az m_1 esetén a megoldás triviális.

$$T_1 = \frac{1}{2} m_1 l_1^2 \dot{\varphi}_1^2$$
$$V_1 = -m_1 g l_1 \cos\varphi_1$$

Az m_2 esetén a „szisztematikus utat" követjük.

$$x_2 = l_1 \sin\varphi_1 + l_2 \sin\varphi_2$$
$$y_2 = l_1 \cos\varphi_1 + l_2 \cos\varphi_2$$

Így aztán

$$\dot{x}_2 = +l_1 \cdot \dot{\varphi}_1 \cos\varphi_1 + l_2 \cdot \dot{\varphi}_2 \cos\varphi_2$$
$$\dot{y}_2 = -l_1 \cdot \dot{\varphi}_1 \sin\varphi_1 - l_2 \cdot \dot{\varphi}_2 \sin\varphi_2$$

Az m_2 kinetikus és potenciális energiája tehát

$$T_2 = \frac{1}{2} m_2 \left[l_1^2 \dot{\varphi}_1^2 + l_2^2 \dot{\varphi}_2^2 + 2 l_1 l_2 \varphi_1 \varphi_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \right]$$
$$V_2 = -m_2 g (l_2 \cos\varphi_2 + l_1 \cos\varphi_1)$$

Így

$$L = (T_1 + T_2) - (V_1 + V_2),$$

azaz

$$L = \frac{m_1 + m_2}{2} l_1^2 \dot{\varphi}_1^2 + \frac{m_2}{2} l_2^2 \dot{\varphi}_2^2 + m_2 l_1 l_2 \dot{\varphi}_1 \dot{\varphi}_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + m_1 g l_1 \cos\varphi_1 + m_2 g (l_1 \cos\varphi_1 + l_2 \cos\varphi_2)$$

Az egyenletek könnyebb kezelhetősége végett vezessük be a következő jelöléseket:

$$\Theta_1 \equiv \frac{1}{2}(m_1 + m_2) \cdot l_1^2$$
$$\Theta_2 \equiv \frac{1}{2} m_2 \cdot l_2^2$$
$$\Theta_3 \equiv m_2 \cdot l_1 l_2$$
$$G_1 \equiv g(m_1 + m_2) \cdot l_1$$
$$G_2 \equiv g m_2 \cdot l_2$$

Ezekkel a Lagrange függvény

$$L = \Theta_1 \dot{\varphi}_1^{\,2} + \Theta_2 \dot{\varphi}_2^{\,2} + \Theta_3 \dot{\varphi}_1 \dot{\varphi}_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + G_1 \cos\varphi_1 + G_2 \cos\varphi_2$$

A két mozgásegyenlet a következő:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_1}\right) - \frac{\partial L}{\partial \varphi_1} = 0 \quad \text{és} \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_2}\right) - \frac{\partial L}{\partial \varphi_2} = 0$$

Azaz

$$2\Theta_1 \ddot{\varphi}_1 + \Theta_3 \ddot{\varphi}_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - \Theta_3 \dot{\varphi}_2 \sin(\varphi_1 - \varphi_2) \cdot [\dot{\varphi}_1 - \dot{\varphi}_2] + \Theta_3 \dot{\varphi}_1 \dot{\varphi}_2 \sin(\varphi_1 - \varphi_2) + G_1 \sin\varphi_1 = 0$$
$$2\Theta_2 \ddot{\varphi}_2 + \Theta_3 \ddot{\varphi}_1 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \Theta_3 \dot{\varphi}_1 \sin(\varphi_1 - \varphi_2) \cdot [\dot{\varphi}_1 - \dot{\varphi}_2] + \Theta_3 \dot{\varphi}_1 \dot{\varphi}_2 \sin(\varphi_1 - \varphi_2) + G_2 \sin\varphi_2 = 0$$

A kapott differenciálegyenlet rendszer megoldása igen nehéz. Zárt alakú megoldása nem lehetséges. Ennek oka az, hogy az egyenletrendszer **nem lineáris**. Így csak közelítő megoldásokra szorítkozhatunk. A közelítés lehetősége kis szögek esetén áll fenn, azaz

$$\varphi_1 << 1 \text{ és}$$
$$\varphi_2 << 1$$
$$\sin\varphi \cong \varphi$$
$$\cos\varphi \cong 1 - \frac{1}{2}\varphi^2$$

Ekkor a mozgásegyenletek így alakulnak.

$$2\Theta_1 \ddot{\varphi}_1 + \Theta_3 \ddot{\varphi}_2 - \Theta_3 \dot{\varphi}_1 \dot{\varphi}_2 \cdot (\varphi_1 - \varphi_2) + G_1 \varphi_1 = 0$$
$$2\Theta_2 \ddot{\varphi}_2 + \Theta_3 \ddot{\varphi}_1 + \Theta_3 \dot{\varphi}_1 \dot{\varphi}_2 \cdot (\varphi_1 - \varphi_2) + G_2 \varphi_2 = 0$$

Ez még mindig eléggé bonyolult egyenletrendszer. A nem lineáris tagokat elhagyva kapjuk, hogy

$$2\Theta_1 \ddot{\varphi}_1 + \Theta_3 \ddot{\varphi}_2 + G_1 \varphi_1 = 0$$
$$2\Theta_2 \ddot{\varphi}_2 + \Theta_3 \ddot{\varphi}_1 + G_2 \varphi_2 = 0$$

Ezekben felismerhető két csatolt oszcillátor mozgásegyenlete. Ennek a megoldásával most nem foglalkozunk.

Az eddigi vázlatos tárgyalás szépen megmutatta a Lagrange módszer nagy előnyét. Newtoni szemlélettel a csuklónál ébredő kényszererők kiszámítása igen nehéz lett volna. Most erre nem volt szükség és a mozgásegyenletek egyszerűen adódtak. Az egyenletek megoldása természetesen nehéz kérdés de az amúgy is az lenne.

Hamilton-féle kanonikus egyenletek

Az előzőekben láttuk, hogy konzervatív rendszerek esetén a Lagrange függvény $L \equiv T - V$ és nem függ explicite (közvetlenül) az időtől , azaz

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

Ezért általában

$$L = L(q_i, \dot{q}_i)$$

Határozzuk meg ebben az esetben a „L" teljes időszerinti deriváltját

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i \right\}$$

De a Lagrange 2 mozgásegyenletek szerint, a zárójel első tagja átírható és ezért adódik, hogy

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \left\{ \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i \right\} = \frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i$$

Átrendezés után kapjuk, hogy

$$\frac{d}{dt}\left\{ \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L \right\} = 0$$

Ami azt jelenti, hogy találtunk egy „mozgásállandót", amelynek a mértékegysége „Joule". „Mozgásállandónak" nevezzük az(oka)t a mechanikai mennyiségeket, amelyek a vizsgált mechanikai rendszer mozgása során nem változnak. Természetesen ezek értékét a kezdeti feltételek egyértelműen meghatározzák. Ezek a mozgásállandók nagyon fontosak, mert a segítségükkel a rendszer mechanikai viselkedése könnyebben kiszámítható.
Azt kaptuk tehát, hogy konzervatív rendszerek esetén a

$$\sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L = \text{állandó.}$$

Tudjuk azt, hogy definíció szerint a konzervatív rendszer össz-energiája állandó. Várható tehát, hogy az imént kapott kifejezés az energiával szoros kapcsolatban van. Definiáljuk tehát a következő kifejezést:

$$W(q_i, \dot{q}_i) \equiv \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i) \qquad \text{HD}$$

Mivel a Lagrange függvény energia dimenziójú mennyiség,ezért $[W] = 1J$
Konzervatív rendszerek esetén a potenciális energia csak az általános koordináták függvénye, azaz

$$V = V(q_i)$$

Ezért aztán:

$$L = L(q_i, \dot{q}_i) = T(q_i, \dot{q}_i) - V(q_i)$$

Így tehát

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}$$

Azt is tudjuk, hogy a kinetikus energia, a definíciója alapján a $\{\dot{q}_i\}$-ok négyzetes függvénye kell, hogy legyen. Azaz általánosan írható, hogy

$$T = \sum_{l=1}^{f}\sum_{j=1}^{f} a_{lj}\dot{q}_l\dot{q}_j$$

Ezért aztán

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \sum_{l=1}^{f}\sum_{j=1}^{f} a_{lj}\left(\frac{\partial \dot{q}_l}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_j + \dot{q}_l\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{q}_i}\right) = \sum_{l=1}^{f}\sum_{j=1}^{f} a_{lj}\left(\delta_{li}\dot{q}_j + \dot{q}_l\delta_{ji}\right) = \sum_{j=1}^{f} a_{ij}\left(\dot{q}_j\right) + \sum_{l=1}^{f} a_{li}\left(\dot{q}_l\right)$$

És így

$$\sum_{i=1}^{f}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i = \sum_{i=1}^{f}\sum_{j=1}^{f} a_{ij}\dot{q}_j\dot{q}_i + \sum_{i=1}^{f}\sum_{l=1}^{f} a_{li}\dot{q}_l\dot{q}_i = 2T$$

Ezt felhasználva a HD kifejezés a következő alakot ölti:

$$W \equiv \sum_{i=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L = 2T - L = 2T - (T - V) = T + V$$

Tehát a most bevezetett „$W(q_i, \dot{q}_i)$" függvényre konzervatív rendszerek esetén az adódott, hogy éppen a rendszer „E" összenergiáját adja.

$$W(q_i, \dot{q}_i) = E$$

Általánosítsuk az iménti állításunkat! Mondjuk azt, hogy **bármilyen mechanikai rendszer** esetén definiálható egy „W" függvény, amely konzervatív rendszer esetén éppen az összenergiát adja.

A newtoni dinamikából már tudjuk, hogy az alapvető dinamikai mennyiség az impulzus. A sebesség „csak" kinematikai fogalom, a mozgás leírásához nélkülözhetetlen ugyan, de a dinamikában közvetlen szerepe nincsen. Ellentétben az impulzussal, amely a dinamika kulcsfontosságú fogalma. (Erre utal a Newton egyenlet $\dot{\vec{p}} = \vec{F}$ eredeti alakja is!.)

Az más kérdés, hogy a sebesség és az impulzus kapcsolata jól definiált, azaz

$$\vec{p}_i = m_i\dot{\vec{r}}_i \qquad i = 1,2,3,..N$$

$$p_l = m_l\dot{x}_l \qquad l = 1,2,3,...3N$$

Tekintsünk egy **kényszermentes, konzervatív** mechanikai rendszert és vizsgáljuk most ezt a Lagrange-féle módszerrel. Mivel kényszerek nincsenek, ezért a rendszer szabadságfoka „$f = 3N$". Célszerű Descartes koordinátákat használni. A Lagrange függvény definíció szerint egyértelműen adódik.

$$L = \sum_{l=1}^{3N}\frac{1}{2}m_l\dot{x}_l^2 - V(x_1, x_2, x_3, ...x_{3N})$$

A Lagrange2 differenciálegyenletek éppen a Newton-féle mozgásegyenleteket adják.

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_l}\right) - \frac{\partial L}{\partial x_l} = 0 \qquad l = 1,2,3,...3N \qquad \text{L2}$$

$$m_l\ddot{x}_l = -\frac{\partial V}{\partial x_l} \qquad l = 1,2,3,...3N$$

Cseréljük ki az $\{\dot{x}_l\}_{l=1}^{3N}$ sebesség komponenseket impulzus komponensekre, hiszen csak ez utóbbiaknak van dinamikai jelentése. Látható, hogy kiindulásul szolgáló Lagrange függvényből az impulzus komponensek egyértelműen megkaphatók, hiszen:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial}{\partial \dot{x}_i}\left(\sum_{l=1}^{3N}\frac{1}{2}m_l\dot{x}_l^2 - V(x_1, x_2, x_3, ...x_{3N})\right) = m_i\dot{x}_i\,.$$

Célszerű a HD alatt defiiniált „W" összenergia függvényt az impulzussal kifejezni.

Adódik tehát

$$W \equiv \sum_{l=1}^{3N} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_l} \dot{x}_l - L = \sum_{l=1}^{3N} p_l \cdot \frac{p_l}{m_l} - L = 2T - L = T + V$$

Ezt az összenergia kifejezést, amelyik $\{p_l, x_l\}_{l=1}^{3N}$ impulzus- és koordináta komponensek függvénye megkülönböztetésül „*H*"-val jelöljük és a neve „Hamilton függvény" lesz. Azaz

$$H(p_l, x_l,) = W(\dot{x}_l, x_l)$$

$$H = \sum_{l=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1, x_2, x_3, \ldots. x_{3N})$$

Ezt a gondolat mentet általánosítjuk. Azt mondjuk, hogy mindez legyen helyes kényszerekkel rendelkező, $L = L(q_i, \dot{q}_i, t)$ Lagrange függvénnyel jellemezhető mechanikai rendszerek setén is.
Az előzőek szellemében bevezetjük az „általános impulzus fogalmát" a következő definícióval:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad i = 1,2,3, \ldots f$$

Láthatóan

$$p_i = p_i(q_k, \dot{q}_k) \qquad i = 1,2,3, \ldots f$$

Ezért aztán az általános koordináta időderiváltja („általános sebességnek" is mondhatnánk) kifejezhető az általános impulzussal:

$$\dot{q}_i = \dot{q}_i(q_k, p_k)$$

És így

$$H \equiv \left[\sum_{i=1}^{f} p_i \dot{q}_i - L(\dot{q}_i, q_i, t) \right]_{\dot{q}_i(p_k, q_k)} \equiv H(p_k, q_k, t)$$

MEGJEGYZÉS: Vigyázat $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m_i \dot{x}_i$ csak Descartes koordináták esetén igaz. Általános koordináták használatakor nem mindig van így azaz $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \neq m_i \dot{q}_i$!

Tekintsük a $\{q_k, p_k\}_{k=1}^{f}$ általános koordinátákat és általános impulzusokat a $H(q_k, p_k, t)$ Hamilton függvény **független változóinak**! Nézzük meg, hogy ezzel a szemlélettel milyen mozgásegyenletek adódnak. A technikánk az lesz, hogy kiszámítjuk a $H(q_k, p_k, t)$ Hamilton függvényen parciális deriváltjait, majd kapcsolatba hozzuk ezeket e Lagrange-féle mozgásegyenletekkel.

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = \sum_{i=1}^{f} p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_k} - \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} + \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_k} \right) = \sum_{i=1}^{f} p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_k} - \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} + \sum_{i=1}^{f} p_i \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_k} \right) = -\frac{\partial L}{\partial q_k}$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \left(\dot{q}_k + \sum_{i=1}^{f} p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} \right) - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} = \left(\dot{q}_k + \sum_{i=1}^{f} p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} \right) - \sum_{i=1}^{f} p_i \cdot \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} = \dot{q}_k$$

Az első egyenletünk tehát

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = -\frac{\partial L}{\partial q_k}$$

Ebből a matematikai összefüggésből úgy kaphatunk mozgásegyenletet, ha az egyenlet jobb oldalát a Lagrange2 mozgásegyenlet falhasználásával átalakítjuk. Eszerint és az általános impulzus definíciója alapján az egyenlet jobb oldala a következő alakba írható.

$$\frac{\partial L}{\partial q_k}=\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) = \dot{p}_k$$

Ezzel és a második egyenlet változatlan megtartásával a következő egyenlet-párhoz jutunk:

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial q_k}&=-\dot{p}_k\\ \frac{\partial H}{\partial p_k}&=+\dot{q}_k\end{aligned}\right\}\ (k=1,2,3,\dots f)$$

A fenti egyenletek neve „Hamilton féle kanonikus egyenletek” (kanonikus=szabályos). A „$\pm$” előjeltől tekintve valóban szép szabályosak. Ezek a mechanikai rendszer mozgásegyenletei a Hamilton-féle formalizmusban, ahol a „q_k” általános koordináták és a „p_k” általános impulzusok független változóknak tekintendők.

A kanonikus egyenletek rendszere „*2f*” darab elsőrendű differenciál egyenlet, amely a megoldása során „*2f*” darab kezdeti feltétel megadását igényli. Ez ekvivalens az „*f*” darab másodrendű Lagrange differenciál egyenletekkel amelyek megoldásakor ugyancsak „*2f*” darab kezdeti feltétel szükséges.

A „q_k, p_k” összetartozó változókat „kanonikusan konjugált pároknak” nevezzük

(Kanonikusan konjugált = szabályosan összekapcsolt)

Határozzuk meg a $H(q_k, p_k, t)$ Hamilton függvény idő szerinti teljes deriváltját is:

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

A „$\dot{q}_k$, $\dot{p}_k$” időderiváltak a **kanonikus mozgásegyenletekből** kifejezhetőek és ezek felhasználásával adódik, hogy:

$$\frac{dH}{dt}=\frac{\partial H}{\partial t}+\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)=\frac{\partial H}{\partial t}$$

Azaz, ha a Hamilton függvény nem függ explicit módon az időtől, azaz $\partial_t H = 0$, és ekkor a „*H=állandó*”. Ez közismerten a mechanikai energia megmaradás tétele és az ilyen rendszereket „konzervatív rendszereknek” nevezzük.

Természetesen a vizsgált mechanikai rendszerben definiálható bármilyen $F \equiv F(q_k, p_k, t)$ dinamikai mennyiség (ezeket „dinamikai változóknak” nevezzük). Mármost, az adott **mechanikai rendszer mozgása során** ennek az „*F*”-nek az idő szerinti teljes deriváltja a „*H*”-hoz hasonló módon határozható meg.

Először képezzük a teljes deriváltat a matematika szabályai szerint (összetett függvény deriválása)

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

De a rendszer dinamikáját a Hamilton-féle mozgásegyenletek „irányítják”, azaz a „$\dot{q}_k$, $\dot{p}_k$” időderiváltak a kanonikus egyenletek szerint kell, hogy változzanak. Ezért tehát adódik, hogy

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)=\frac{\partial F}{\partial t}+\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_i}-\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i}\right)$$

Vezessük be az ún. „Poisson féle zárójeleket” a következő definícióval:

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

Ezzel a jelöléssel a mechanikai rendszer mozgása során az „*F*” mennyiség teljes időderiváltja

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

A kanonikus egyenletek így teljesen szimmetrikus („még kanonikusabb”) formába írhatók:

$$\left.\begin{aligned} \dot{q}_k &= \{H, q_k\} \\ \dot{p}_k &= \{H, p_k\} \end{aligned}\right\} \quad (k = 1,2,3,\ldots f)$$

Ez lesz az a mozgásegyenlet, amelyik az atomi méretek tartományában uralkodó mechanikai törvények felfedezésénél majd kulcsfontosságúnak mutatkozik. Azaz egy **„igen szokatlan” általánosítással** a Kvantummechanika elméleti világába elvezet.

Végezetül érdemes a Poisson zárójelek néhány matematikai tulajdonságáról is szólni.
Ezek bizonyítása igen egyszerű, ezért az Olvasóra bízható:

$$\{f, g\} = -\{g, f\}$$
$$\{f_1 + f_2, g\} = \{f_1, g\} + \{f_2, g\}$$
$$\{f, const\} = 0$$

A kanonikus párokra pedig

$$\{q_i, q_i\} = 0$$
$$\{p_i, p_j\} = 0$$
$$\{p_i, q_k\} = \delta_{ik}$$