UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

Ostrogradského nestabilita

Bakalárska práca

Máj 2016

Dominik Rist

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

Ostrogradského nestabilita

Bakalárska práca

Študijný program:	Fyzika
Študijný odbor:	1160 fyzika
Školiace pracovisko:	Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky
Školiteľ :	doc. RNDr. Marián Fecko, PhD.

Bratislava, Máj 2016 Dominik Rist

Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta:	Dominik Rist
Študijný program:	fyzika (Jednoodborové štúdium, bakalársky I. st., denná forma)
Študijný odbor:	4.1.1. fyzika
Typ záverečnej práce:	bakalárska
Jazyk záverečnej práce:	slovenský
Sekundárny jazyk:	anglický

Názov: Ostrogradského nestabilita
Ostrogradsky instability

Cieľ: Naštudovať si, ako to ten Ostrogradskij vymyslel. Čiže ako sa dá dynamika s lagranžiánom vyššieho rádu prerobiť na dynamiku formulovanú hamiltonovsky a ako z výsledku vidno, že táto dynamika obsahuje patológiu, ktorá je v pôvodnom lagranžovskom jazyku skrytá. Spísať to celé ako text zrozumiteľný pre motivovaných spolužiakov (druhákov, tretiakov). Ak by toto prebehlo príliš rýchlo, „nepovinnou" časťou by bolo pohrať sa s tým v jazyku symplektickej geometrie (časť diferenciálnej geometrie, ktorá je v pozadí za hamiltonovskou aj lagranžovskou mechanikou).

Literatúra: R. P. Woodard: The Theorem of Ostrogradsky, arXiv:150602210v1 [hep-th]

Anotácia: M.V.Ostrogradskij je nám všetkým dôverne známy cez Gaussovu-Ostrogradského vetu (vetu o divergencii). Keď si ale prečítame jeho životopis, zistíme, že jeho dielo je oveľa širšie a obsahuje viacero ďalších a pozoruhodných (a z rôznych príčin nedocenených) výsledkov. Jedným z tých, ktorých význam sa pochopil až celkom nedávno, je tzv. Ostrogradského nestabilita. Ide o výsledok publikovaný v roku 1850 (čiže nie práve najhorúcejšia novinka). Vtedy však nevyvolal žiaden ohlas (dá sa aj pochopiť prečo, stačí dočítať zadanie).
O čo zhruba ide? Pripomeňme si, že v analytickej mechanike sa (Legendreovou transformáciou) prechádza od lagranžovskej formulácie mechaniky (rovnice sú druhého rádu) k hamiltonovskej (dvojnásobný počet rovníc prvého rádu). V štandardnom prípade je lagranžián funkciou (zovšeobecnených) súradníc a rýchlostí. Ostrogradskij preštudoval aj prípad, keď lagranžián závisí aj od vyšších derivácií súradníc (viac bodiek ako jedna). Napísať Eulerove-Lagrangeove rovnice je celkom ľahké, nie je však celkom triviálne zopakovať prechod k hamiltonovskej formulácii. On to však zvládol (a po ňom aj my) a oplatilo sa mu to. Takto totiž zistil, že v prípade vyšších derivácií v lagranžiáne vždy nastáva istý (vážny) problém (tá „nestabilita" z nadpisu). Vtedy nikto nevykríkol uáău, lebo Newtonove rovnice sú druhého rádu, takže tie vyššie derivácie v lagranžiáne zodpovedajú len akémusi uletenému akademickému prípadu, bez ktorého si všetci vedeli svoj život predstaviť celkom dobre. (Navyše sa vykrikovať uáău vtedy nepovažovalo za in). Potom sa však fyzika vyvíjala, vyvíjala, až došlo na (snahu o) kvantovanie gravitácie (nech to už je čokoľvek). A tam (teda už mimo mechaniky) sa zacítila potreba mať v lagranžiáne (pre gravitačné pole) aj členy obsahujúce vyššie derivácie.

Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

79720221

A zrazu je Ostrogradský dobrý (či skôr zlý, lebo také členy vedú na tú nestabilitu, čo je problém).

Vedúci: doc. RNDr. Marián Fecko, PhD.
Katedra: FMFI.KTFDF - Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky
Vedúci katedry: doc. RNDr. Tomáš Blažek, PhD.
Dátum zadania: 26.06.2015

Dátum schválenia: 23.07.2015

prof. RNDr. Jozef Masarik, DrSc.
garant študijného programu

....
študent

M. Fecko
....
vedúci práce

Hlboká vďaka patrí školiteľovi doc. RNDr. Mariánovi Feckovi, PhD. za jeho čas, pomoc, vtipné príhody a cenné rady, ktoré veľmi prispeli k úspešnému napísaniu tejto práce.

Abstrakt

V tejto práci preskúmame viac ako 150 rokov starý výsledok M. V. Ostrogradského, ktorý má dopad na moderné fyzikálne teórie, ako je napr. kvantovanie gravitácie. Ide o Ostrogradského nestabilitu. Tá hovorí o probléme, ktorý sa objaví pri prechode od lagranžovského formalizmu k hamiltonovskému formalizmu pre lagranžiány obsahujúce vyššie derivácie a im zodpovedajúce Lagrangeove rovnice. V prvej časti tejto práce sa pozrieme na odvodenie Lagrangeových rovníc pre takéto lagranžiány cez princíp najmenšieho účinku a v druhej časti ukážeme, že tieto rovnice majú hamiltonovskú štruktúru tým, že k nim skonštruujeme hamiltonovský formalizmus. Vďaka tomuto formalizmu sa nám odhalí oná problematická črta spomínaná vyššie, ktorá bola v pôvodnom jazyku skrytá.

kľúčové slová: princíp najmenšieho účinku, lagranžovský formalizmus, hamiltonovský formalizmus, Lagrangeove rovnice, Ostrogradského nestabilita

Abstract

In this thesis we will be investigating the 150-year-old discovery made by M. V. Ostrogradsky, which impacts today's modern physical theories, e.g. the quantization of gravity. It is the Ostrogradsky instability. It points out a problem, which occurs when going from Lagrangian formalism to Hamiltonian formalism of higher derivative Lagrangians and their corresponding Lagrange's equations. In the first part of this thesis we will derive Lagrange's equations from the principle of least action and then in the second part we will show that these equations have Hamiltonian structure by constructing Hamiltonian formalism for them. Thanks to this formalism we will be able to see the problematic feature, which was invisible in the original language.

keywords: principle of least action, Lagrangian formalism, Hamiltonian formalism, Lagrange's equations, Ostrogradsky instability

Predhovor

V modernej teoretickej fyzike sa v mnohých teóriách ojavujú problémy s divergentnými členmi. Jeden nápad, ako takéto členy odstrániť, je zaviesť do lagranžiánov týchto teórií členy obsahujúce vyššie derivácie. Spočiatku dobrý nápad sa ukazuje byť už nie tak dobrý, pretože naráža na výsledok publikovaný Ostrogradským už v roku 1850. Ostrogradského nestabilita obmedzuje moderné teórie natoľko, že členy v lagranžiánoch obsahujúce derivácie rádu 2 a viac musia byť z týchto lagranžiánov vyhodené. Podľa niektorých fyzikov ide o princíp, o ktorý by sa mali opierať *všetky* fundamentálne teórie tohto sveta a zatiaľ sa aj implicitne opierali. Tadiaľto zrejme cesta ku kvantovej gravitácii nevedie. Teda až do doby kedy sa niekomu podarí nájsť cestu okolo Ostrogradského nestability.

Obsah

Úvod

Mikhail Vasilyevich Ostrogradskij bol ruský matematik a fyzik ukrajinského pôvodu, ktorý žil medzi rokmi 1801 až 1862. Je známy najmä vďaka svojej vete o divergencii (dnes známej ako Gaussova-Ostrogradského veta), ktorú sformuloval a dokázal v roku 1826. Gauss ju nezávisle na ňom objavil o pár rokov neskôr. V tejto práci nás však bude zaujímať Ostrogradského iný výsledok, a to výsledok z roku 1850 [1]. Ten je tiež známy ako Ostrogradského veta alebo Ostrogradského nestabilita. Ide o hamiltonovskú formuláciu Lagrangeových rovníc pre *nedegenerované lagranžiány vyšších rádov*. To sú lagranžiány, ktoré závisia aj od vyšších derivácií a spĺňajú podmienku nedegenerovanosti.

Prechod k hamiltonovskému formalizmu pre lagranžiány vyšších rádov predstavuje oblasť výskumu, v ktorej sú publikované mnohé, nie práve najčerstvejšie výsledky [5], [12]. Napriek tomu sa v tejto oblasti robí výskum aj dnes a jej výsledky majú podľa niektorých autorov ďalekosiahly dopad na problémy súčasnej teoretickej fyziky [9], [10], [11]. My sa však nebudeme pohybovať v týchto výšinách, ale iba si predvedieme niektoré výsledky na elementárnej úrovni.

Pretože sa snažíme vyložiť hlavný problém prechodu od lagranžovského formalizmu k hamiltonovskému formalizmu, našu diskusiu budeme viesť v pojmoch známych absolventovi teoretickej mechaniky. Znamená to, že budeme skúmať len sústavy s konečným počtom stupňov voľnosti, teda napríklad sústavy častíc alebo tuhých telies. Je však dôležité podotknúť, že hoci budeme používať matematický aparát pre opis takýchto sústav, naše úvahy majú oveľa širšiu platnosť. Môžeme ich aplikovať aj na sústavy s nekonečným počtom stupňov voľnosti, ako sú napr. gitarové struny alebo polia (tie fyzikálne) a výsledky budú analogické.

Lagranžovský formalizmus vznikol ako zovšeobecnenie mechaniky danej Newtonovými pohybovými rovnicami. V tomto formalizme sa zvyknú pomocou princípu najmenšieho účinku odvodiť pohybové rovnice nejakej fyzikálnej sústavy, nazývané *Lagrangeove rovnice*. Ukazuje sa, že celá informácia o časovom vývoji tejto sústavy je schovaná v Lagrangeovej funkcii $\equiv$ *lagranžiáne*. Pre sústavy s konečným počtom stupňov voľnosti obsahuje lagranžián členy len s *časovými* deriváciami. Toto je v kontraste s hustotou lagranžiánu, používanou v teóriách poľa, v ktorej sú členy derivované podľa viacerých premenných, vrátane času.

Táto práca nemá mať a ani nemá matematický charakter. Aj keď sa budeme snažiť vyjadrovať sa presne a formulovať pojmy jednoznačne, nebudeme lipnúť na rigoróznosti, najmä ak by bola na úkor fyzikálnemu pohľadu na vec. Avšak miestami sa jej oddáme, aby sme potešili aj matematickejšie založeného čitateľa. Nie je cieľom tejto práce budovať matematickú teóriu, ale aplikovať existujúce výsledky vo fyzikálnom kontexte. Častokrát sa budeme odvolávať na dokázané vety, ktorých dôkazy môže čitateľ nájsť v príslušnej literatúre.

Práca je rozdelená do 2 častí, z ktorých každá obsahuje 4 kapitoly. V prvej časti začneme zavedením účinku a sformulovaním princípu najmenšieho účinku pre sústavy s konečným počtom stupňov voľnosti. Pomocou tohto princípu sa potom odvodia Lagrangeove rovnice pre lagranžiány vyšších rádov. Na záver tejto časti sa pokúsime prepísať Lagrangeove rovnice ako rovnice prvého rádu. V druhej časti vykonáme prechod od lagranžovského formalizmu k hamiltonovskému formalizmu pre nedegenerovaný lagranžián vyššieho rádu, podobne ako to spravil Ostrogradkij v práci z roku 1850 [5]. Ako sa ukáže, podmienka nedegenerovanosti je všetko, čo treba žiadať, aby sa takýto prechod dal uskutočniť. Na záver sa pozrieme, aký problém vyšiel najavo v hamiltonovskom formalizme lagranžiánov rádu 2 a viac a niečo si povieme aj o Ostrogradského nestabilite a jej dopade na súčasný výskum vo fundamentálnych teóriách.

Na záver uveďme ešte zopár poznámok k používanej symbolike. Dôležité a dlhšie poznámky budeme vymedzovať hranatými zátvorkami [...] a medzerami a vpisovať priamo do textu, ktorého sa týkajú. Menej dôležité a kratšie poznámky uvádzame pod čiarou na spodku strany.

Čo sa týka matematickej symboliky, tam používame štandardný zápis a snažíme sa držať zaužívaných konvencií. Jednou často používanou konvenciou v tejto práci je Einsteinova sumačná konvencia, ktorá hovorí, že ak máme v jednom člene nejakého výrazu práve dva rovnaké indexy, máme cez tieto indexy sčítať v rozsahu vyplývajúcom z kontextu. Teda napr. výraz $\sum_{i=1}^{n} a_i b_i \equiv a_i b_i$. Ďalej gradient funkcie H podľa $\mathbf{q} \equiv (q_1, \ldots, q_n)$ budeme zapisovať ako $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \equiv \left(\frac{\partial H}{\partial q_1}, \ldots, \frac{\partial H}{\partial q_n}\right)$.

Po týchto technických poznámkach môžeme pristúpiť k samotnej práci.

Časť I

Lagrangeov formalizmus a princíp najmenšieho účinku

V teoretickej mechanike a aj v iných oblastiach fyziky sme sa doposiaľ stretli len s lagranžiánom závislým od prvých časových derivácií súradníc. Takýto lagranžián v tejto práci nazývame *lagranžiánom prvého rádu.* V tejto časti zavedieme *lagranžiány vyšších rádov* a aj si ukážeme, ako princíp najmenšieho účinku vedie pre takéto lagranžiány na Lagrangeove rovnice, ktoré opisujú časový vývoj fyzikálnej sústavy. Táto časť predstavuje prvý krok k hamiltonovskej formulácii pohybových rovníc daných lagranžiánmi vyšších rádov.

Pre odvodenie Lagrangeových rovníc pre lagranžián vyššieho rádu bude užitočné predviesť toto odvodenie v tom najjednoduchšom prípade, ktorý sa učí už v kurze teoretickej mechaniky, a to pre lagranžián prvého rádu. Preto začneme najprv s tým.

1 Pripomenutie: Lagrangeove rovnice pre lagranžián prvého rádu

Pripomeňme odvodenie Lagrangeových rovníc cez princíp najmenšieho účinku.

Majme sústavu, ktorá má n stupňov voľnosti. Môžeme si napríklad predstaviť dvojné rovinné kyvadlo, ktoré ich má 2 alebo aj časticu v elektromagnetickom poli, ktorá má 3 stupne voľnosti. Budeme používať jazyk teoretickej mechaniky, avšak metódy a výsledky, ktoré tu použijeme a odvodíme, majú oveľa širšiu platnosť a používajú sa aj v modernej teoretickej fyzike.

Polohu našej sústavy vieme popísať pomocou *zovšeobecnených súradníc* $(q_1, \ldots, q_n) \equiv \mathbf{q}$. Priestor, ktorý tieto súradnice parametrizujú, nazývame *konfiguračný priestor.* Budeme vyšetrovať *dynamiku* $\equiv$ časový vývoj našej fyzikálnej sústavy. Nech teda táto sústava v čase vykonáva nejaký pohyb (aj státie považujeme za pohyb v čase). Potom zovšeobecnené súradnice sú funkciami času, $q_i = q_i(t)\,,\; i = 1, \ldots, n\,.$ Funkcie $\dot{q}_i(t) \equiv \frac{dq_i}{dt}$, ktoré tvoria n-ticu $\dot{\mathbf{q}}$, potom zrejme udávajú rýchlosť sústavy v čase t. Hovoríme preto o *zovšeobecnenej rýchlosti.* Budeme študovať pohyb sústavy v nejakom časovom intervale $[t_A, t_B]$ a budeme predpokladať, že sústava má v čase t_A polohu $\mathbf{q}(t_A) \equiv \mathbf{q}_A$ a v čase t_B polohu $\mathbf{q}(t_B) \equiv \mathbf{q}_B$. Na n-ticu funkcií $\mathbf{q}$ sa dá preto pozerať ako na *krivku* (v konfiguračnom priestore) - zobrazenie, ktoré konkrétnemu času priradí polohu sústavy (bod v konfiguračnom priestore) v tom čase, teda $\mathbf{q} : [t_A, t_B] \to \mathbb{R}^n$. Táto krivka má fixované konce v bodoch $\mathbf{q}_A$ a $\mathbf{q}_B$. Zrejme bude fyzikálne rozumné žiadať, aby funkcie $\mathbf{q}$ aj $\dot{\mathbf{q}}$ boli spojité.

Teraz prichádza hlavná otázka: ako zistiť, po akej krivke $\mathbf{q}$ sa bude sústava medzi časmi t_A a t_B pohybovať? Pomocou *princípu najmenšieho účinku*, ktorého platnosť v prírode budeme predpokladať.

1.1 Princíp najmenšieho účinku (Hamiltonov)

Princíp najmenšieho účinku je variačný princíp, ktorý sa používa na odvodenie pohybových rovníc. Variačný znamená, že patrí do oblasti matematiky, ktorá sa historicky nazýva variačný počet. Tá sa zaoberá vyšetrovaním vlastností funkcionálov, čo sú zobrazenia, ktoré funkciám priraďujú čísla. Jedná sa teda o obdobu funkcií v matematickej analýze a variačný počet je potom v najužšom zmysle obdobou diferenciálneho počtu funkcií.

Pre formulovanie princípu najmenšieho účinku je najprv potrebné povedať, čo to ten *účinok* je. Účinkom nazývame funkcionál $\mathcal{S}$, ktorý krivke $\mathbf{q}$ priradí reálne číslo, a to nasledovným spôsobom:

$$\mathcal{S} : \mathbf{q} \mapsto \mathcal{S}[\mathbf{q}] := \int_{t_A}^{t_B} L \, dt \ \in \mathbb{R} \,, \tag{1}$$

kde L je Lagrangeova funkcia $\equiv$ *lagranžián.* Metódami teoretickej mechaniky sa dá ukázať, že pre mechanické sústavy často platí $L = T - U$, kde T je kinetická energia sústavy a U je jej potenciálna energia [3]. V tejto práci však žiadne konkrétne vyjadrenie lagranžiánu nepotrebujeme, a preto budeme pracovať s funkciou L, čo dáva našim úvahám všeobecnejší charakter.

Keď už máme definovaný účinok, môžeme formulovať princíp najmenšieho účinku. Ten udáva kritérium, podľa ktorého sa dá zistiť, po akej krivke sa bude sústava medzi časmi t_A a t_B hýbať:

Sústava sa bude pohybovať medzi časmi t_A a t_B po takej krivke $\mathbf{q}$, pre ktorú sa účinok do prvého rádu zmeny tejto krivky nezmení.

Inak povedané, ak "trochu" vychýlime tú *správnu* krivku, jej účinok sa zmení až v druhom ráde tohto vychýlenia. Poďme sa pokúsiť preformulovať tento princíp matematicky. Zoberme teda skutočnú krivku $\mathbf{q}$ (tú, po ktorej sa bude sústava podľa princípu najmenšieho účinku pohybovať) a druhú dostatočne blízku krivku $\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}$.

[Blízkosť dvoch kriviek by bolo treba špecifikovať, môžeme si to však teraz predstaviť tak, že ich grafy a rovnako tak aj grafy ich prvých časových derivácií, prípadne vyšších derivácií, sú od seba v štandardnej euklidovskej metrike vzdialené o nie viac ako nejaké dostatočne malé (kladné) číslo. Bližšie detaily môže čitateľ nájsť v literatúre, napr. [8].]

Táto druhá krivka musí byť prípustná, t.j. musí spĺňať rovnaké predpoklady ako $\mathbf{q}$, ale ináč je ľubovoľná. Teda žiadame $\delta\mathbf{q}(t_A) = \delta\mathbf{q}(t_B) = 0$. Princíp najmenšieho účinku potom hovorí, že výraz

$$\mathcal{S}[\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}] - \mathcal{S}[\mathbf{q}] \tag{2}$$

bude do prvého rádu v $\delta\mathbf{q}$ rovný nule. Ak si požičiame intuíciu z diferenciálneho počtu funkcií, vieme, že rozdiel funkčných hodnôt dvoch blízkych bodov je pre diferencovateľné funkcie dominovaný *diferenciálom* funkcie. To je výraz, ktorý je *lineárny* v rozdiele týchto bodov a od rozdielu funkčných hodnôt sa líši len o malú hodnotu, tým menšiu, čím bližšie k sebe sú dané body. Niečo podobné platí aj vo variačnom počte. Tam tento "diferenciál" nazývame *variáciou*. Potom rozdiel účinkov (2) vieme zapísať ako

$$\mathcal{S}[\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}] - \mathcal{S}[\mathbf{q}] = \delta\mathcal{S} + \dots \quad ,$$

kde variácia $\delta\mathcal{S}$ predstavuje funkcionál, ktorý je lineárny[1] v $\delta\mathbf{q}$ a bodky predstavujú nelineárne funkcionály vyšších rádov v $\delta\mathbf{q}$. Princíp najmenšieho účinku potom nadobudne podobu

$$\delta\mathcal{S} = 0\,. \tag{3}$$

Tejto podmienke sa hovorí *stacionárnosť* účinku (vo všeobecnosti funkcionálu).

[Mali by sme preto presnejšie hovoriť o princípe *stacionárneho* účinku a nie najmenšieho účinku, pretože rovnako ako pri diferenciálnom počte, tak ani pri variačnom počte z podmienky (3) nutne nevyplýva existencia minima, a teda len z tejto podmienky nevieme či je účinok pre krivku $\mathbf{q}$ skutočne najmenší. Budeme však naďalej hovoriť o princípe najmenšieho účinku. Tejto terminológie sa držíme z historických dôvodov, pretože účinky počítané v mnohých prípadoch mali v hľadaných krivkách naozaj minimum.]

Keď už vieme (aj matematicky), čo je princíp najmenšieho účinku, poďme odvodiť Lagrangeove rovnice pre najjednoduchší prípad - lagranžián prvého rádu.

[1] Pod lineárnym funkcionálom sa myslí taký funkcionál A, ktorý lineárnej kombinácií funkcií $\lambda f + g$, $\lambda \in \mathbb{R}$, priradí lineárnu kombináciu čísel $A(\lambda f + g) := \lambda A(f) + A(g)$.

1.2 Odvodenie Lagrangeových rovníc

V tomto odseku lagranžián bude funkciou $2n+1$ premenných $L = L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) \equiv L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$. Od funkcie L budeme žiadať, aby mala spojité derivácie podľa všetkých svojich argumentov až do druhého rádu.

Podľa princípu najmenšieho účinku sa sústava bude pohybovať po takej krivke $\mathbf{q} : [t_A, t_B] \to \mathbb{R}^n$, $\mathbf{q}(t_A) \equiv \mathbf{q}_A$, $\mathbf{q}(t_B) \equiv \mathbf{q}_B$, pre ktorú bude platiť podmienka (3), t.j. účinok bude stacionárny. Musíme teda najprv nájsť vzorec pre variáciu účinku. V predošlom odseku sme načrtli všeobecný postup, ako tento vzorec nájsť, a preto teraz, keď poznáme argumenty lagranžiánu, môžeme pristúpiť ku konkrétnemu výpočtu. Budeme sa snažiť upraviť (2) do podoby, kde nám vystúpi funkcionál, ktorý je lineárny v $\delta\mathbf{q}$ a líši sa len o málo od rozdielu (2). Ten bude

$$\mathcal{S}[\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}] - \mathcal{S}[\mathbf{q}] = \int_{t_A}^{t_B} [L(\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}} + \delta\dot{\mathbf{q}}, t) - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)]\, dt \quad . \tag{4}$$

Z predpokladov na funkciu L vyplýva, že je diferencovateľná, a preto môžeme v každom t písať pre dostatočne malé $\delta\mathbf{q}(t)$

$$\begin{aligned} L(\mathbf{q}(t) + \delta\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t) + \delta\dot{\mathbf{q}}(t), t) - L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t) &= \frac{\partial L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t)}{\partial \mathbf{q}} \cdot \delta\mathbf{q}(t) \\ &+ \frac{\partial L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t)}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \delta\dot{\mathbf{q}}(t) + o(\delta\mathbf{q}(t), \delta\dot{\mathbf{q}}(t)) \,, \end{aligned} \tag{5}$$

kde funkcia $o(\delta\mathbf{q}(t), \delta\dot{\mathbf{q}}(t)) \xrightarrow{\delta\mathbf{q}(t), \delta\dot{\mathbf{q}}(t) \to \mathbf{0}} 0$ rýchlejšie ako $\delta\mathbf{q}(t), \delta\dot{\mathbf{q}}(t)$. Pod prvými dvoma členmi na pravej strane rovnice (5) rozumieme skalárny súčin, a teda s využitím Einsteinovej sumačnej konvencie

$$\frac{\partial L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t)}{\partial \mathbf{q}} \cdot \delta\mathbf{q}(t) \equiv \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i\right)(t) \quad , \quad \frac{\partial L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t)}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \delta\dot{\mathbf{q}}(t) \equiv \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta \dot{q}_i\right)(t) \,.$$

Výraz (4) potom prejde do tvaru

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}] - \mathcal{S}[\mathbf{q}] = \int_{t_A}^{t_B} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i\right)(t) + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta \dot{q}_i\right)(t)\right] dt \\ + \text{malé členy nelineárne v } \delta\mathbf{q}(t). \end{aligned} \tag{6}$$

Vidíme, že prvý člen na pravej strane rovnosti (6) je hľadaná variácia účinku. Teda platí

$$\delta\mathcal{S} = \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta \dot{q}_i\right] dt \,. \tag{7}$$

Využitím princípu najmenšieho účinku (3), integrovania per partes v (7) a okrajových podmienok pre $\delta\mathbf{q}$ dostávame[2]

$$\int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta \dot{q}_i\right] dt = \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\right] \delta q_i dt + \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i\right|_{t_A}^{t_B} \tag{8}$$

$$= \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\right] \delta q_i dt \stackrel{!}{=} 0 \tag{9}$$

Vzhľadom na fakt, že funkcie δq_i , $i = 1, \ldots, n$, majú byť prípustné a malé, ale inak sú ľubovoľné, môže byť vzťah (9) splnený jedine vtedy, ak platí (dôkaz nájde čitateľ v [8])

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \qquad i = 1, \ldots, n\,. \tag{10}$$

Rovniciam (10) sa hovorí *Lagrangeove rovnice* (prípadne Eulerove-Lagrangeove rovnice).

[Všimnime si, že ak by sme na začiatku nepredpokladali fixovanosť funkcií $q_i(t)$, $i = 1, \ldots, n$, v počiatočnom a konečnom čase, aby sme zaručili nulovosť druhého člena vzťahu (8), museli by sme žiadať, aby platilo $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(t_A) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(t_B) = 0$. Avšak toto by bola odlišná variačná úloha (riešiť rovnice (10) s týmito okrajovými podmienkami), ktorá by fyzikálne znamenala niečo iné, pretože už by sme dovolili bodom $\mathbf{q}_A$ a $\mathbf{q}_B$ hýbať sa. Nejednalo by sa teda o princíp najmenšieho účinku (hoci variácia účinku by bola stále nulová). V ňom sa žiada, aby $\delta q_i(t_A) = \delta q_i(t_B) = 0$, $i = 1, \ldots, n$.]

1.3 "Newtonove" rovnice z Lagrangeových

Poďme sa teraz bližšie pozrieť na rovnice, ktoré sme dostali. Zrekapitulujme si najprv fyzikálny kontext, v akom sme ich odvodili. Hľadali sme krivku $\mathbf{q}$ (teda funkcie $q_i(t)$, $i = 1, \ldots, n$), ktorá by opisovala časový vývoj fyzikálnej sústavy s n stupňami voľnosti v časovom intervale $[t_A, t_B]$. Predpokladali sme pritom, že časový vývoj sústavy je daný princípom najmenšieho účinku. Inak povedané, tvrdili sme, že sústava sa bude pohybovať po takej krivke, že integrál v (1) sa takmer nebude meniť, ak ho vyrátame aj po blízkych krivkách. Vyberali sme len z kriviek, ktoré spĺňali okrajové podmienky

$$\mathbf{q}(t_A) \equiv \mathbf{q}_A \qquad , \qquad \mathbf{q}(t_B) \equiv \mathbf{q}_B\,, \tag{11}$$

teda mali fixované konce v bodoch $\mathbf{q}_A$ a $\mathbf{q}_B$. Vidíme teda, že tento *integrálny princíp*, ktorý vypovedá o krivke ako celku, nás priviedol na *diferenciálny princíp* - pohybové rovnice

[2]Všimnime si, že $\delta\dot{\mathbf{q}} = \frac{d}{dt}(\delta\mathbf{q})$.

(10), ktoré hovoria, ako zo stavu sústavy v čase t vypočítať stav sústavy v blízkom čase $t+\varepsilon$.[3]

Z matematického hľadiska tvoria Lagrangeove rovnice (10) systém n obyčajných diferenciálnych rovníc 2. rádu pre neznáme funkcie $q_i(t)$, $i=1,\ldots,n$, s okrajovými podmienkami (11). Teda

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) =: \mathcal{E}_i^{L_1}(\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}},\ddot{\mathbf{q}},t) = 0 \qquad i=1,\ldots,n\,,$$

kde L_1 označuje, že sa jedná o lagranžián prvého rádu. Z klasickej mechaniky vieme, že dynamika fyzikálnej sústavy (hmotných bodov) je daná ekvivalentne aj Newtonovými pohybovými rovnicami, a teda mali by sme byť schopní upraviť Lagrangeove rovnice do tvaru podobnému Newtonovým rovniciam. Tieto majú pre bodovú časticu tvar $\mathbf{F}=m\mathbf{a}$, kde $\mathbf{F}$ je celková sila pôsobiaca na časticu, m jej hmotnosť a $\mathbf{a}$ jej zrýchlenie. My ich už však máme v jednom z možných tvarov Newtonových rovníc. Stačí si uvedomiť, že tieto sa dajú písať aj ako $\mathbf{F}=\dot{\mathbf{p}}$, kde $\mathbf{p}$ je hybnosť. Funkcia $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}$ zodpovedá sile a nazýva sa *zovšeobecnená sila* a $\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}$ zodpovedá hybnosti a nazýva sa *zovšeobecnená hybnosť*. Preveďme Lagrangeove rovnice teraz do tvaru, ktorý obsahuje osamostatnenú veličinu zodpovedajúcu zrýchleniu. Spočítaním časovej derivácie v druhom člene rovníc (10) dostaneme

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\partial^2 L}{\partial q_j \partial \dot{q}_i}\dot{q}_j - \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_j \partial \dot{q}_i}\ddot{q}_j - \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial t} = 0 \qquad i=1,\ldots,n\,. \tag{12}$$

Predpokladajme teraz, že platí

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_j \partial \dot{q}_i}\right) \neq 0 \qquad i,j=1,\ldots,n \tag{13}$$

v každom bode[3]. Tejto podmienke hovoríme *nedegenerovanosť* lagranžiánu (prvého rádu). Vďaka podmienke nedegenerovanosti môžeme prepísať Lagrangeove rovnice do tvaru

$$\ddot{q}_i = \mathcal{F}_i(\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}},t) \qquad i=1,\ldots,n\,, \tag{14}$$

kde konkrétna podoba $\mathcal{F}_i$ sa vypočíta z (12). Podarilo sa nám teda prepísať Lagrangeove rovnice ekvivalentne do "Newtonových". Keďže rovnice (14) predstavujú n rovníc 2. rádu, na ich jednoznačné riešenie treba $2n$ podmienok, a teda okrajové podmienky (11) môžeme nahradiť napr. počiatočnými podmienkami $\mathbf{q}(t_A)=\mathbf{q}_A$, $\dot{\mathbf{q}}(t_A)=\dot{\mathbf{q}}_A$.

Po takejto diskusii o Lagrangeových rovniciach pre lagranžián prvého rádu sa môžeme vrhnúť na prvý netriviálny prípad lagranžiánov vyšších rádov, a to lagranžián druhého rádu.

[3]Bodom tu myslíme argumenty funkcie L.

2 Lagrangeove rovnice pre lagranžián druhého rádu

V predošlej časti sme uvažovali, že lagranžián je závislý iba od zovšeobecnených súradníc a ich prvých časových derivácií, prípadne aj explicitne od času. V niektorých teóriách poľa sa však vyskytujú problémy, ktoré by sa možno dali odstrániť zavedením závislosti lagranžiánov od vyšších časových derivácií súradníc.

Začneme tým, že odvodíme Lagrangeove rovnice pre lagranžián druhého rádu, teda budeme vyšetrovať prípad, kedy $L = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, t)$, kde $\ddot{\mathbf{q}}$ je n-tica funkcií $\ddot{q}_i(t) \equiv \frac{d^2 q_i}{dt^2}$, $i = 1, \ldots, n$, od ktorých (prirodzene) žiadame, aby boli aspoň spojité. Stále vyšetrujeme pohyb sústavy, ktorá má n stupňov voľnosti a v čase t_A sa nachádza v bode $\mathbf{q}_A$ a v čase t_B v bode $\mathbf{q}_B$. Znova predpokladáme, že jej dynamika je daná princípom najmenšieho účinku.

2.1 Odvodenie Lagrangeových rovníc

Ak chceme odvodiť Lagrangeove rovnice z princípu najmenšieho účinku, musíme najprv nájsť vzorec pre variáciu účinku. Potom môžeme použiť podmienku (3) a z nej extrahovať Lagrangeove rovnice tak, ako sme to urobili v časti 1.2. Postup je teda analogický.

Vieme, že variácia musí byť lineárna vo funkciách δq_i , $i = 1, \ldots, n$ a dostatočne blízka k rozdielu (2), tým bližšia, čím menšie ("nulovejšie") sú tieto funkcie. Keď použijeme Taylorovu vetu na úpravu (2) dostaneme

$$\begin{aligned}\mathcal{S}[\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}] - \mathcal{S}[\mathbf{q}] &= \int_{t_A}^{t_B} \left[L(\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}} + \delta\dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}} + \delta\ddot{\mathbf{q}}, t) - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, t)\right] dt \\ &= \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\delta\ddot{q}_i\right] dt + \text{malé členy nelineárne v } \delta q_i \,.\end{aligned}$$

Variácia účinku je preto v tomto prípade

$$\delta\mathcal{S} = \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\delta\ddot{q}_i\right] dt \tag{15}$$

Použitím jedenkrát per partes v druhom člene podintegrálnej funkcie a dvakrát v treťom člene a preusporiadaním dostaneme

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{S} = &\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\right)\right] \delta q_i \Big|_{t_A}^{t_B} + \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\delta\dot{q}_i \Big|_{t_A}^{t_B} \\ &+ \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) + \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\right)\right] \delta q_i dt \overset{!}{=} 0\end{aligned} \tag{16}$$

Nehovorili sme ešte, čo budeme rozumieť pod prípustnými funkciami $\mathbf{q}$. Princíp najmenšieho účinku vyžaduje, aby platilo $\delta q_i(t_A) = \delta q_i(t_B) = 0$, $i = 1, \ldots, n$, avšak z posledného vzťahu vidíme, že len týchto $2n$ podmienok nestačí. Aby sme vyhoveli podmienke (3), musíme ešte žiadať nulovosť druhého člena ľavej strany rovnice (16). To sa najprirodzenejšie dosiahne, ak budeme žiadať, aby $\delta\dot{q}_i(t_A) = \delta\dot{q}_i(t_B) = 0$, $i = 1, \ldots, n$. To znamená, že prípustné funkcie budú také, ktoré budú mať fixované body v časoch t_A, t_B, rovnako ako ich derivácie. Teda žiadame splnenie podmienok

$$\begin{array}{ll} \mathbf{q}(t_A) = \mathbf{q}_A & \dot{\mathbf{q}}(t_A) = \dot{\mathbf{q}}_A \\ \mathbf{q}(t_B) = \mathbf{q}_B & \dot{\mathbf{q}}(t_B) = \dot{\mathbf{q}}_B \end{array} . \tag{17}$$

Potom (16) prejde na

$$\delta\mathcal{S} = \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) + \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\right) \right] \delta q_i dt \stackrel{!}{=} 0\,,$$

a to je splnené pre ľubovoľné prípustné δq_i , $i = 1, \ldots, n$, len ak samotná zátvorka v integráli je nulová [8]. Dostávame teda Lagrangeove rovnice pre lagranžián druhého rádu

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) + \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\right) = 0 \qquad i = 1, \ldots, n \quad . \tag{18}$$

2.2 Lagrangeove rovnice v "newtonovskej" podobe

Z matematického hľadiska sme dostali n obyčajných diferenciálnych rovníc 4. rádu pre neznáme funkcie $q_i(t)$, $i = 1, \ldots, n$, s okrajovými podmienkami (17). Tak ako v predošlej časti upravme rovnice (18) spočítaním časových derivácií. Dostaneme

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \ddot{q}_j \partial \ddot{q}_i}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, t)\ddddot{q}_j = \mathcal{Q}_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \dddot{\mathbf{q}}, t) \qquad i = 1, \ldots, n\,, \tag{19}$$

kde funkciu $\mathcal{Q}_i$ kvôli prehľadnosti nevypisujeme, ale priamočaro, aj keď pracne ju dostaneme z rovníc (18). Nedegenerovanosť lagranžiánu bude v tomto prípade znamenať, že

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \ddot{q}_j \partial \ddot{q}_i}\right) \neq 0 \qquad i, j = 1, \ldots, n \tag{20}$$

všade. Ak budeme žiadať, aby bol L nedegenerovaný, môžeme upraviť poslednú rovnicu do tvaru

$$\ddddot{q}_i = \mathcal{F}_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \dddot{\mathbf{q}}, t) \qquad i = 1, \ldots, n\,. \tag{21}$$

Vidíme teda, že prítomnosť $\ddot{\mathbf{q}}$ v našom lagranžiáne spôsobila, že príslušné "Newtonove" rovnice sú až štvrtého rádu a nie tretieho, ako by sme si mohli na začiatku myslieť. Keďže máme n rovníc, potrebujeme $4n$ počiatočných podmienok na ich jednoznačné riešenie. Môžeme nimi teda nahradiť podmienky (17).

2.3 Čo to znamená?

Ak by Lagrangeova funkcia L, ktorá vystupuje vo výraze pre účinok (1) obsahovala aj *druhé* časové derivácie súradnicových funkcií $q_i(t)$, $i = 1, \ldots, n$, dostali by sme rovnice pre časový vývoj *štvrtej* časovej derivácie polohy, teda akéhosi "zrýchlenia zrýchlenia"[4]. Ak by náš svet bol skutočne taký (teda, ak by lagranžiány vystupujúce v našich teóriách boli závislé od zrýchlení), možno by potom Isaac Newton tak ľahko svoju rovnicu neuhádol a Pierre-Simon Laplace by svoj slávny výrok musel pozmeniť([13], str. 4) a svojho démona dovzdelať aj v počiatočných zrýchleniach a ryvoch (tretích deriváciách súradníc). Je však aj taká možnosť, že na škálach "bežného života" sa všetko deje po starom, čiže Laplace s Newtonom si môžu vydýchnuť, ale na škálach "vznešených" moderných teórií sa objavujú lagranžiány druhých alebo aj vyšších rádov. Ako sa však ukáže pri prechode k hamiltonovskému formalizmu, prítomnosť už aj druhých derivácií súradníc v lagranžiánoch spôsobuje obrovské problémy.

2.4 Príklad: Paisov-Uhlenbeckov oscilátor

Na záver našej diskusie o lagranžiáne druhého rádu uveďme ešte veľmi jednoduchý príklad, ktorý nám poslúži aj neskôr v hamiltonovskom formalizme. Tento príklad sme prebrali z [11]. Budeme skúmať Paisov-Uhlenbeckov oscilátor (PUO)[6] v jednom rozmere.

Pripomeňme najprv jednoduchý harmonický oscilátor (JHO). Ten slúži v teoretickej mechanike (okrem iného) ako jednoduchý príklad na demonštrovanie lagranžovského ako aj hamiltonovského formalizmu a je dôležitý aj preto, lebo má uplatnenie v kvantovej mechanike. Lagranžián JHO s hmotnosťou m a vlastnou frekvenciou ω v jednom rozmere $(n = 1)$ vyzerá nasledovne:

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} m\dot{q}^2 - \frac{1}{2} m\omega q^2 \,. \tag{22}$$

PUO sa líši tým, že v jeho lagranžiáne vystupuje okrem JHO časti ešte ďalší člen obsahujúci druhú časovú deriváciu násobenú bezrozmerným parametrom $\epsilon > 0$, ktorý udáva jeho odchýlku od JHO:

$$L(q, \dot{q}, \ddot{q}) = -\frac{\epsilon m}{2\omega^2}\ddot{q}^2 + \frac{m}{2}\dot{q}^2 - \frac{m\omega^2}{2} q^2 \,. \tag{23}$$

Keďže

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \ddot{q}^2} = -\frac{\epsilon m}{\omega^2} \neq 0 \quad , \quad \text{pre} \quad \forall q, \dot{q}, \ddot{q} \quad ,$$

[4]Angličtina má pre túto veličinu výraz *jounce* alebo *snap*, v slovenčine pre ňu žiadny výraz zaužívaný nemáme.

jedná sa (podľa (20)) o nedegenerovaný lagranžián. Spočítaním výrazov

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -m\omega^2 q \quad , \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = m\ddot{q} \quad , \quad \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\right) = -\frac{\epsilon m}{\omega^2}\ddddot{q} \, ,$$

ich dosadením do (18) a predelením $-m$ dostaneme Lagrangeovu rovnicu pre PUO

$$\frac{\epsilon}{\omega^2}\ddddot{q} + \ddot{q} + \omega^2 q = 0 \, . \tag{24}$$

Vidíme, že ak $\epsilon = 0$, tak dostávame už dobre známu rovnicu pre harmonický pohyb.

Rovnica (24) je obyčajná lineárna diferenciálna rovnica 4. rádu s konštantnými koeficientmi. Riešenie preto môžeme hľadať v tvare $q(t) = Ce^{\alpha t}$; $\alpha, C \in \mathbb{C}$. Dosadením tohto ansatzu do (24) a vyriešením príslušnej algebraickej rovnice 4. rádu pre α dostávame všeobecné riešenie rovnice (24), ktoré zapíšeme v tvare

$$q(t) = C_+ cos(k_+ t) + S_+ sin(k_+ t) + C_- cos(k_- t) + S_- sin(k_- t) \, , \tag{25}$$

kde

$$k_\pm = \omega\sqrt{\frac{1 \mp \sqrt{1-4\epsilon}}{2\epsilon}}$$

a C_+, C_-, S_+, S_- sú reálne konštanty (sú 4, lebo máme rovnicu 4. rádu), ktoré vieme určiť z počiatočných podmienok. Vidíme teda, že dostávame kmity s dvomi rôznymi frekvenciami. Preto označenie *oscilátor* je opodstatnené.

[To je prekvapujúce, pretože spočiatku sme nevedeli či sa vôbec bude jednať o nejaké kmitanie. Nebolo vôbec zrejmé či člen $-\frac{\epsilon m}{2\omega^2}\ddot{q}^2$, ktorý sme pridali k lagranžiánu JHO nám jeho kmitanie úplne "nepokazí".]

Na teraz necháme PUO na pokoji a pozrieme sa na odvodenie Lagrangeových rovníc pre všeobecný lagranžián vyššieho rádu. K PUO sa znova vrátime v časti o hamiltonovskom formalizme.

3 Lagrangeove rovnice pre lagranžián k-teho rádu

Pre úplnosť sa poďme ešte pozrieť na prípady lagranžiánov obsahujúcich vyššie časové derivácie.

3.1 Odvodenie Lagrangeových rovníc

Poučení prípadom pre lagranžián obsahujúci aj druhé časové derivácie súradníc môžeme zovšeobecniť odvodenie Lagrangeových rovníc cez princíp najmenšieho účinku pre lagranžián obsahujúci derivácie funkcií $q_1(t), \dots, q_n(t)$ až do k-teho rádu, t.j. $L = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \dots, \mathbf{q}^{(k)}, t) \equiv L(q_1, \dots, q_n^{(k)}, t)$, kde $q_i^{(k)}(t) \equiv \frac{d^k q_i}{dt^k}$, $i = 1, \dots, n$, sú spojité funkcie času. Od lagranžiánu budeme žiadať, aby bol dvakrát spojite diferencovateľnou funkciou. V predošlej časti sa pre lagranžián druhého rádu ukázalo rozumné predpokladať splnenie podmienok (17), preto teraz budeme žiadať splnenie analogických podmienok, a to

$$\begin{array}{c} \mathbf{q}(t_A) = \mathbf{q}_A \\ \mathbf{q}(t_B) = \mathbf{q}_B \end{array} , \quad \begin{array}{c} \dot{\mathbf{q}}(t_A) = \dot{\mathbf{q}}_A \\ \dot{\mathbf{q}}(t_B) = \dot{\mathbf{q}}_B \end{array} , \dots , \quad \begin{array}{c} \mathbf{q}^{(k-1)}(t_A) = \mathbf{q}_A^{(k-1)} \\ \mathbf{q}^{(k-1)}(t_B) = \mathbf{q}_B^{(k-1)} \end{array} . \tag{26}$$

Vypočítajme rozdiel účinkov pre krivku $\mathbf{q}$ a dostatočne blízku krivku $\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}] - \mathcal{S}[\mathbf{q}] &= \int_{t_A}^{t_B} \left[L(\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}} + \delta\dot{\mathbf{q}}, \dots, \mathbf{q}^{(k)} + \delta\mathbf{q}^{(k)}, t) - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \dots, \mathbf{q}^{(k)}, t) \right] dt \\ &= \underbrace{\int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i + \dots + \frac{\partial L}{\partial q_i^{(k)}} \delta q_i^{(k)5} \right] dt}_{\delta\mathcal{S}} + \quad \cdots \quad , \end{aligned}$$

kde bodky za integrálom znamenajú malé členy nelineárne v $\delta\mathbf{q}$. Úpravou variácie pomocou per partes a preusporiadaním členov potom dostaneme nutnú podmienku pre extrém v tvare

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{S} &= \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i} \right) + \dots + (-1)^{k-1} \frac{d^{k-1}}{dt^{k-1}} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i^{(k)}} \right) \right] \delta q_i \Bigg|_{t_A}^{t_B} \\ &+ \left[\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dddot{q}_i} \right) + \dots + (-1)^{k-2} \frac{d^{k-2}}{dt^{k-2}} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i^{(k)}} \right) \right] \delta \dot{q}_i \Bigg|_{t_A}^{t_B} + \dots + \frac{\partial L}{\partial q_i^{(k)}} \delta q_i^{(k-1)} \Bigg|_{t_A}^{t_B} \\ &+ \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) + \dots + (-1)^k \frac{d^k}{dt^k} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i^{(k)}} \right) \right] \delta q_i dt \\ &= \sum_{j=1}^{k} \mathbf{p}_j \cdot \delta\mathbf{q}^{(j-1)} \Bigg|_{t_A}^{t_B} + \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{E}_i^{L_k} \delta q_i dt \quad , \end{aligned} \tag{27}$$

[5] Nesumujeme cez k - označuje rád derivácie, nie je to sčítací index.

kde sme zaviedli symboly $\mathbf{p}_j$ a $\mathcal{E}_i^{L_k}$[6] nasledovne:

$$\mathcal{E}_i^{L_k} := \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) + \cdots + (-1)^k \frac{d^k}{dt^k}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i^{(k)}}\right) \qquad i = 1, \ldots, n \tag{28}$$

a $\mathbf{p}_j$, $j = 1, \ldots, k$, je n-tica funkcií ($i = 1, \ldots, n$)

$$p_{ji} := \frac{\partial L}{\partial q_i^{(j)}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i^{(j+1)}}\right) + \cdots + \left(-\frac{d}{dt}\right)^{(k-j)}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i^{(k)}}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_i^{(j)}} - \dot{p}_{j+1\,i} \quad . \tag{29}$$

Suma vo výraze (27) bude vďaka podmienkam (26) nulová. Toto sa dalo nahliadnuť aj pri každom použití metódy per partes pri odvodzovaní výrazu (27); napísali sme tú sumu napriek tomu a v danom tvare, pretože nám to poslúži pre budúce účely. Princíp najmenšieho účinku nás potom privedie k rovniciam

$$\delta\mathcal{S} = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathcal{E}_i^{L_k} = 0 \qquad i = 1, \ldots, n\,.$$

Teda Lagrangeove rovnice pre lagranžián k-teho rádu sú

$$\mathcal{E}_i^{L_k} \equiv \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) + \cdots + (-1)^k \frac{d^k}{dt^k}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i^{(k)}}\right) = 0 \qquad i = 1, \ldots, n\,. \tag{30}$$

[Poznamenajme ešte, že na začiatku sme žiadali len to, aby funkcia L bola dvakrát spojite diferencovateľná. Avšak pri odvodzovaní rovníc (30) sme využívali aj existenciu vyšších derivácií. Ukazuje sa, že to je v poriadku. Existencia derivácií funkcie L až do rádu $k+1$ sa dá dokázať, ale zložitejšími metódami ako sme použili my, pozri napr. [14], str. 103.]

3.2 Lagrangeove rovnice v “newtonovskej” podobe

Lagrangeove rovnice (30) tvoria systém n obyčajných diferenciálnych rovníc, ktoré sú tentokrát až $2k$-teho rádu. Pre jednoznačné určenie funkcií $q_i(t)$, $i = 1, \ldots, n$, ich treba riešiť napr. pri zadaných okrajových podmienkach (26). Tak ako pre lagranžiány prvého a druhého rádu aj teraz sa pri podmienke nedegenerovanosti funkcie L dajú rovnice (30) prepísať do “newtonovskej” podoby, teda dá sa osamostatniť najvyššia časová derivácia súradníc. Stačí len v každom člene rovníc (30) derivovať podľa času naznačený počet ráz a dostaneme rovnice v tvare

$$\frac{\partial^2 L}{\partial q_j^{(k)} \partial q_i^{(k)}}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ldots, \mathbf{q}^{(k)}, t)\, q_j^{(2k)} = \mathcal{Q}_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \ldots, \mathbf{q}^{(2k-1)}, t) \qquad i = 1, \ldots, n\,,$$

[6] L_k označuje, že sa jedná o lagranžián k-teho rádu.

kde funkcia $\mathcal{Q}_i$ vznikne zozbieraním členov obsahujúcich časové derivácie $\mathbf{q}$ až do rádu $(2k-1)$. Nedegenerovanosťou L rozumieme podmienku

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial q_j^{(k)} \partial q_i^{(k)}}\right) \neq 0 \qquad i,j = 1,\ldots,n\,. \tag{31}$$

Potom z Lagrangeových rovníc dostaneme ich "newtonovskú" podobu

$$q_i^{(2k)} = \mathcal{F}_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \ldots, \mathbf{q}^{(2k-1)}, t) \qquad i = 1,\ldots,n\,. \tag{32}$$

Pozrime sa ešte na niektoré zaujímave postrehy v súvislosti s Lagrangeovými rovnicami pre lagranžián k-teho rádu.

3.3 Súvis okrajových podmienok s rádom Lagrangeových rovníc

Všimnime si, že keď sme odvodzovali Lagrangeove rovnice v odseku 1.2 (pre $L = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$), na dosiahnutie nulovosti variácie účinku (podmienka (3)) bolo treba žiadať okrem platnosti Lagrangeových rovníc aj splnenie ďalších $2n$ podmienok. Vďaka tomu, ako sme formulovali princíp najmenšieho účinku, sme mali zaručenú platnosť podmienok (11), inak povedané, pri variácií účinku sme ako prípustné brali iba krivky s fixovanými koncovými bodmi. Dostali sme n rovníc 2. rádu pre n neznámych funkcií pri $2n$ zadaných podmienkach. Jednoznačnosť riešení týchto rovníc je týmto zaručená.

Podobne pre lagranžián druhého rádu sme predpokladali splnenie podmienok (17), teda fixovali sme v počiatočnom a koncovom čase polohu aj rýchlosť fyzikálnej sústavy, teda dokopy sme mali $4n$ podmienok ($2n$ za polohu, $2n$ za rýchlosť). Lagrangeove rovnice boli 4. rádu a bolo ich n. Preto vieme aj v tomto prípade nájsť ich jednoznačné riešenie. Vidíme, že už samotné odvodenie Lagrangeových rovníc z podmienky (3) si vyžaduje splnenie $4n$ podmienok. Vidíme to zo vzťahu (16), kde ich musíme žiadať, aby prvé 2 členy (presnejšie prvých $2n$ členov) boli nulové. Pri prepise Lagrangeových rovníc do "newtonovskej" podoby sme zistili, že môžeme žiadať namiesto nich splnenie počiatočných podmienok pre polohu, rýchlosť, zrýchlenie a ryv. Je pozoruhodné, že predpoklad o určitých počiatočných a konečných vlastnostiach fyzikálnej sústavy spolu s princípom najmenšieho účinku vedú na špecifikovanie ďalších vlastností, ktoré sme explicitne nepredpokladali. Tento zdanlivo teleologický aspekt princípu extremálneho účinku nebudeme ďalej rozvíjať.

Pre úplnosť ešte uveďme, že pre lagranžián k-teho rádu bude situácia úplne analogická. Jednoznačné riešenie existuje[7], pretože Lagrangeove rovnice sú $2k$-teho rádu a je ich n a máme zadaných $2kn$ okrajových podmienok.

[7]Hovoríme len o *jednoznačnosti* riešenia. Existenciu aspoň jedného riešenia predpokladáme.

3.4 Globálne a lokálne riešenia

Nedegenerovanosťou lagranžiánu k-teho rádu sme nazvali podmienku $\det(\frac{\partial^2 L}{\partial q_j^{(k)} \partial q_i^{(k)}}) \neq 0$ všade - t.j. v každom argumente funkcie L. Táto podmienka nám umožnila prepísať Lagrangeove rovnice ekvivalentne do "newtonovskej" podoby. Keďže Lagrangeove rovnice máme riešiť pri zadaných okrajových podmienkach, zaujímajú nás globálne riešenia v intervale $[t_A, t_B]$.

[Pri všeobecných diferenciálnych systémoch globálne riešenia nemusia vôbec existovať. My však predpokladáme, že existujú - inak povedané, skúmame len sústavy s takými lagranžiánmi, že ich Lagrangeove rovnice majú riešenie.]

Ak by sme však predpokladali len podmienku $\det(\frac{\partial^2 L}{\partial q_j^{(k)} \partial q_i^{(k)}}) \neq 0$ v nejakom bode, vďaka dvojnásobnej spojitej diferencovateľnosti L máme nenulovosť aj v nejakom okolí tohto bodu, a teda lokálne vieme Lagrangeove rovnice prepísať do "newtonovskej" podoby. Globálnosť riešenia rovníc v tejto podobe však zaručenú nemáme.

4 Od Lagrangeových rovníc k rovniciam prvého rádu

Odteraz už nebudeme explicitne vypisovať množinu možných čísel pre index i, ale budeme si pamätať, že za i môžeme voliť prirodzené čísla od 1 po n, kde n predstavuje počet stupňov voľnosti skúmanej fyzikálnej sústavy. Podobne hrubo vytlačené veličiny budú naďalej označovať n-tice (napr. $\mathbf{q}$ označuje n-ticu súradníc $q_1, \ldots, q_n$), avšak počet stupňov voľnosti n sa môže v závislosti od situácie meniť.

4.1 Motivácia

Videli sme, ako odvodiť Lagrangeove rovnice všeobecne pre lagranžián k-teho rádu. Videli sme aj, že tieto rovnice sú vo všeobecnosti $2k$-teho rádu. V ďalších odsekoch sa pokúsime prejsť od lagranžovského formalizmu k formalizmu hamiltonovskému, a teda od Lagrangeových rovníc k rovniciam Hamiltonovým. Činíme tak preto, lebo hamiltonovský formalizmus má veľa výhod, ku ktorým sa ešte vyjadríme a predstavuje používaný nástroj modernej teoretickej fyziky. Začnime prvou z jeho výhod - Hamiltonove rovnice sú rovnice *prvého* rádu. Z teórie diferenciálnych rovníc vieme, že každý diferenciálny systém sa dá prepísať ako systém rovníc prvého rádu, napr. tak, že za nové premenné zvolíme vyššie derivácie neznámej funkcie. Akú výhodu má prepis Lagrangeových rovníc na rovnice prvého rádu? Pripomeňme si to na všeobecnom príklade: majme systém rovníc prvého rádu spolu s počiatočnými podmienkami v tvare

$$\begin{array}{c} \dot{x}_1 = V_1(x_1, \ldots, x_m, t) \\ \vdots \\ \dot{x}_m = V_m(x_1, \ldots, x_m, t) \end{array} \quad , \quad \begin{array}{c} x_1(0) = x_1^0 \\ \vdots \\ x_m(0) = x_m^0 \end{array} \quad , \tag{33}$$

Tieto rovnice nám hovoria, ako sa máme hýbať z počiatočnej polohy so súradnicami $x_1^0, \ldots, x_m^0$. Teda ak tam sme v čase $t = 0$, v čase $t = \varepsilon$, kde ε je dostatočne malé, budeme len o kúsok ďalej, a to v

$$\begin{array}{c} x_1(\varepsilon) \approx x_1^0 + \varepsilon \dot{x}_1(0) = x_1^0 + \varepsilon V_1(x_1^0, \ldots, x_m^0, 0) \\ \vdots \\ x_m(\varepsilon) \approx x_m^0 + \varepsilon \dot{x}_m(0) = x_m^0 + \varepsilon V_m(x_1^0, \ldots, x_m^0, 0) \end{array} \quad . \tag{34}$$

V čase $t = 2\varepsilon$ budeme v bode

$$\begin{array}{c} x_1(2\varepsilon) \approx x_1(\varepsilon) + \varepsilon \dot{x}_1(\varepsilon) = x_1(\varepsilon) + \varepsilon V_1(x_1(\varepsilon), \ldots, x_m(\varepsilon), \varepsilon) \\ \vdots \\ x_m(2\varepsilon) \approx x_m(\varepsilon) + \varepsilon \dot{x}_m(\varepsilon) = x_m(\varepsilon) + \varepsilon V_m(x_1(\varepsilon), \ldots, x_m(\varepsilon), \varepsilon) \end{array} \quad . \tag{35}$$

Takýmto spôsobom môžeme postupovať aj ďalej a dostaneme tak celú *integrálnu krivku* $x_1(t), \ldots, x_m(t)$.

[Presnejšie, o integrálnych krivkách hovoríme, ako o riešeniach systému (33), keď funkcie $V_1, \ldots, V_m$ nezávisia explicitne od času. Takýmto systémom sa zvykne hovoriť *autonómne systémy*.]

Konvergencia tejto metódy pre $\varepsilon \to 0$ je zaručená pri určitých predpokladoch na funkcie $V_1, \ldots, V_m$. Význačnou vlastnosťou rovníc prvého rádu v takomto tvare je teda fakt, že ak vieme, kde sme v nejakom čase, vieme do prvého rádu presnosti, kde budeme o chvíľu.

4.2 Rovnice prvého rádu

Vráťme sa teraz k Lagrangeovým rovniciam. Poďme sa pokúsiť použitím našej zavedenej symboliky prepísať tieto rovnice na rovnice prvého rádu. Budeme si všímať niektoré špeciálne prípady všeobecných rovníc (30). Pre $k = 1$ sa nám zreprodukujú rovnice (10), teda

$$\mathcal{E}_i^{L_1} = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0\,. \tag{10}$$

V označení z (29) tieto rovnice prejdú do tvaru

$$\mathcal{E}_i^{L_1} = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad , \quad p_i \equiv p_{1i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad , \tag{36}$$

čo predstavuje $2n$ rovníc prvého rádu v premenných p_i, q_i. Hoci sú prvého rádu, nemajú tvar (33). Avšak nedegenerovanosť lagranžiánu nám (použitím vety o implicitne zadanej funkcii) umožňuje vyjadriť z druhej rovnice (36) $\dot{q}_i$ ako funkcie p_i a q_i, a tak dostaneme systém rovníc prvého rádu v tvare (33), ktorý, ako dobre vieme, je dokonca hamiltonovský.

Pozrime sa teraz na prípad $k = 2$. Dostávame rovnice (18)

$$\mathcal{E}_i^{L_2} = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) + \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\underbrace{\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{d}{dt}\overbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\right)}^{p_{2i}}\right]}_{p_{1i}} = 0 \tag{18}$$

a v označení z (29) prejdú do tvaru

$$\mathcal{E}_i^{L_2} = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \dot{p}_{1i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad , \quad \dot{p}_{2i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - p_{1i} \quad , \quad p_{2i} = \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i} \quad ,$$

čo však nie sú rovnice prvého rádu, pretože L teraz obsahuje aj $\ddot{\mathbf{q}}$. Ak však zavedieme nové premenné $x_{1i} := q_i$, $x_{2i} := \dot{q}_i$ a pridáme k ekvivalentne zapísaným Lagrangeovým rovniciam rovnice $x_{2i} = \dot{x}_{1i}$, dostaneme už rovnice prvého rádu, pretože teraz už platí $L = L(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dot{\mathbf{x}}_2, t)$:

$$\dot{p}_{1i} = \frac{\partial L}{\partial x_{1i}} \quad , \quad \dot{p}_{2i} = \frac{\partial L}{\partial x_{2i}} - p_{1i} \quad , \quad p_{2i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{2i}} \quad , \quad \dot{x}_{1i} = x_{2i} \quad . \tag{37}$$

Využitím nedegenerovanosti lagranžiánu (20) ich môžeme podobne ako pre prípad lagranžiánu prvého rádu prepísať do tvaru (33) tým, že z tretej rovnice (37) vyjadríme $\dot{x}_{2i}$ ako funkcie x_{1i}, x_{2i} a p_{2i}. Ako ukážeme v ďalšej časti, toto budú Hamiltonove rovnice.

Uveďme ešte prípad Lagrangeových rovníc pre lagranžián tretieho rádu. Všeobecné rovnice (30) prejdú pre $k = 3$ na tvar

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i^{L_3} &= \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) + \frac{d^2}{dt^2}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i}\right) - \frac{d^3}{dt^3}\left(\frac{\partial L}{\partial \dddot{q}_i}\right) \\ &= \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\underbrace{\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{d}{dt}\left(\overbrace{\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i} - \frac{d}{dt}\left(\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dddot{q}_i}}_{p_{3i}}\right)}^{p_{2i}}\right)\right]}_{p_{1i}} = 0\,. \end{aligned} \tag{38}$$

Ak k $3n$ premenným z (29) pridáme ďalších $3n$ premenných $x_{1i} := q_i$, $x_{2i} := \dot{q}_i$, $x_{3i} := \ddot{q}_i$, môžeme prepísať Lagrangeove rovnice ekvivalentne ako rovnice prvého rádu

$$\mathcal{E}_i^{L_3} = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \begin{array}{lll} \dot{p}_{1i} = \dfrac{\partial L}{\partial x_{1i}} & \dot{p}_{2i} = \dfrac{\partial L}{\partial x_{2i}} - p_{1i} & \dot{p}_{3i} = \dfrac{\partial L}{\partial x_{3i}} - p_{2i} \\ \dot{x}_{1i} = x_{2i} & \dot{x}_{2i} = x_{3i} & p_{3i} = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}_{3i}} \end{array}$$

a lagranžián je tvaru $L = L(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dot{\mathbf{x}}_3, t)$.

Tento náš prepis na rovnice prvého rádu nebol samoúčelný. Vo všetkých troch prípadoch sa ukáže, že voľba našich súradníc je vhodná pre prepis Lagrangeových rovníc do Hamiltonových rovníc. K tejto úlohe prikročíme v ďalšej časti.

Časť II

Hamiltonov formalizmus

V tejto časti vyšetríme, ako je možné prejsť od Lagrangeových rovníc k Hamiltonovým rovniciam pre *nedegenerovaný* lagranžián všeobecného rádu. Dostávame sa tak k hlavnej časti tejto práce. Fyzikálne stále vyšetrujeme dynamiku nejakej fyzikálnej sústavy s n stupňami voľnosti avšak tentokrát v hamiltonovskom formalizme.

Začnime pripomenutím prechodu od Lagrangeových rovníc k Hamiltonovým rovniciam pre prípad lagranžiánu prvého rádu. Ako sa ukáže, štandardný postup pre tento prechod nevieme aplikovať aj na lagranžiány vyšších rádov, a teda lagranžián prvého rádu je v tomto smere výnimočný.

5 Pripomenutie: prechod od Lagrangeových rovníc k Hamiltonovým pre lagranžián prvého rádu

5.1 Odvodenie Hamiltonových rovníc

Zopakujme odvodenie Hamiltonových rovníc z Lagrangeových rovníc pre lagranžián prvého rádu. Vieme, že princíp najmenšieho účinku vedie pre takýto lagranžián na rovnice

$$\mathcal{E}_i^{L_1} = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \qquad i = 1, \dots, n \quad , \quad \text{kde} \qquad L = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)\,. \tag{10}$$

V teoretickej mechanike sa pri odvodení Hamiltonových rovníc postupuje nasledovne. V súlade s naším označením z (29) sa zavedú *zovšeobecnené (kanonické) hybnosti*

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad\qquad i = 1, \dots, n\,. \tag{39}$$

Podmienka nedegenerovanosti lagranžiánu (13) umožňuje využitím vety o implicitne zadanej funkcii vyjadriť z tejto rovnice $\dot{q}_i$ ako funkcie p_i a q_i, teda $\dot{q}_i = \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$. Potom sa zavedie Hamiltonova funkcia $\equiv$ *hamiltonián* vzťahom

$$H \equiv H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) := p_i \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), t)\,. \tag{40}$$

Takýto hamiltonián budeme ďalej nazývať hamiltoniánom *prvého rádu* (keďže sme ho zaviedli pomocou lagranžiánu prvého rádu). Na odvodenie Hamiltonových rovníc sa najprv spočíta diferenciál hamiltoniánu dH a porovnajú sa derivácie stojace pri diferenciáloch argumentov H.

$$\begin{aligned}
dH &= d(p_i\dot{q}_i) - dL = \cancel{p_i d\dot{q}_i} + \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i}dq_i - \cancel{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}d\dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial t}dt \\
&= -\frac{\partial L}{\partial q_i}dq_i + \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t}dt \\
dH &= \frac{\partial H}{\partial q_i}dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i}dp_i + \frac{\partial H}{\partial t}dt
\end{aligned}$$

Z vety o jednoznačnosti diferenciálu vyplýva

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \qquad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \quad . \tag{41}$$

Teraz sa pripomenú Lagrangeove rovnice, ktoré v používanom označení hovoria $\frac{\partial L}{\partial q_i} = \dot{p}_i$, ako vidíme z (36). Z rovníc (41) tak dostávame

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \qquad \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \quad . \tag{42}$$

Tieto vzťahy sa nazývajú *Hamiltonove (kanonické) rovnice.*

5.2 Legendreova transformácia a fázový priestor

Všimnime si teraz bližšie, ako sme odvodili rovnice (42). Najprv sme zaviedli nové premenné - zovšeobecnené hybnosti $p_1, \ldots, p_n$ vzťahom (39) a z tohto vzťahu sme vyjadrili $\dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n$ pomocou zovšeobecnených súradníc a hybností. Dostali sme tak nové súradnice $\mathbf{q}, \mathbf{p}$, ktoré sa nazývajú *kanonické súradnice* a priestor, ktorý parametrizujú, sa nazýva *fázový priestor.* Po zavedení kanonických súradníc sme definovali hamiltonián vzťahom (40). Tento prechod od $\dot{\mathbf{q}}$ k $\mathbf{p}$ a od $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ k $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ sa v teoretickej mechanike nazýva *Legendreova transformácia (čiastočná).*[8]

[V skutočnosti sa Legendreova transformácia dá definovať aj abstraktnejšie, a to sa robí v teórii konvexných funkcií a v diferenciálnej geometrii ([2], str. 539), my si však vystačíme s našou definíciou, s ktorou sa môžeme stretnúť aj v teoretickej mechanike, pretože hlbšie vedomosti o Legendreových transformáciách pre naše účely nepotrebujeme mať.]

Všeobecnejšie, ak máme funkciu $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ súradníc $x_1, \ldots, x_n, y_1, \ldots, y_m$, potom (čiastočná) Legendreova transformácia zabezpečuje prechod k novým súradniciam $x_1, \ldots, x_n$, $z_1, \ldots, z_m$ podľa pravidla

$$z_i := \frac{\partial L}{\partial y_i} \qquad i = 1, \ldots, m \tag{43}$$

[8] Čiastočná preto, lebo súradnice $\mathbf{q}$ netransformujeme.

a požiadavka invertibilnosti tohto vzťahu (v našom kontexte to je nedegenerovanosť lagranžiánu) zabezpečuje prechod k novej funkcii (legendreovsky združenej)

$$H(\mathbf{x},\mathbf{z}) := z_i y_i(\mathbf{x},\mathbf{z}) - L(\mathbf{x},\mathbf{y}(\mathbf{x},\mathbf{z}))\,, \tag{44}$$

ktorá zároveň zabezpečuje inverznú Legendreovu transformáciu od $x_1,\ldots,x_n,z_1,\ldots,z_m$ k $x_1,\ldots,x_n,y_1,\ldots,y_m$, vzťahom

$$y_i = \frac{\partial H}{\partial z_i} \qquad i = 1,\ldots,m\,. \tag{45}$$

Ak si všimneme druhú z rovníc (42), tá zabezpečuje práve túto inverziu.

To je všetko, čo nám stačí o Legendreovej transformácii vedieť. Poďme si ešte pripomenúť elementárne poznatky o fázovom priestore.

Povedali sme, že fázový priestor je priestor kanonických súradníc $q_1,\ldots,q_n,p_1,\ldots,p_n$. Je teda $2n$ rozmerný. Spomeňme si, že Lagrangeove rovnice pre lagranžián prvého rádu (10) boli 2. rádu a mali sme k nim na jednoznačné riešenie $2n$ počiatočných (alebo okrajových) podmienok $\mathbf{q}(t_A) = \mathbf{q}_A$, $\dot{\mathbf{q}}(t_A) = \dot{\mathbf{q}}_A$. Nedegenerovanosť lagranžiánu (13) nám umožňuje legendreovsky zamieňať $\dot{\mathbf{q}}$ a $\mathbf{p}$ podľa vzťahu (39)

$$\dot{\mathbf{q}} \underset{H}{\overset{L}{\rightleftarrows}} \mathbf{p} \quad . \tag{46}$$

Znamená to teda, že na fázový priestor sa môžeme pozerať aj ako na priestor počiatočných podmienok. Ak máme zadané počiatočné podmienky fyzikálnej sústavy a poznáme jej lagranžián, resp. hamiltonián, potom poznáme vďaka rovniciam (42) celú dynamiku sústavy. Keďže Hamiltonove rovnice sú rovnicami prvého rádu v tvare z odseku 4, riešeniami sú integrálne krivky. Sú to teda *krivky* vo fázovom priestore. Stav sústavy si potom môžeme predstaviť ako bod tohto priestoru a jej dynamiku tak, že ak v čase t_A sme v nejakom bode $\mathbf{q}_A, \mathbf{p}_A$, z tohto bodu (počiatočného stavu) plynutím času "odtečieme" po integrálnej krivke do ďalšieho bodu, ktorý je novým stavom sústavy.

5.3 Hamiltonián ako integrál pohybu

Veličinám, ktoré sú konštantné na integrálnych krivkách, sa hovorí *integrály pohybu* alebo aj *zachovávajúce sa veličiny*. Niekedy hovoríme aj o *zákonoch zachovania*. Ak lagranžián nezávisí *explicitne* od času, teda ak $\frac{\partial L}{\partial t} \equiv 0$, potom aj $\frac{\partial H}{\partial t} \equiv 0$, ako to vidíme z tretej rovnice (41). Pre totálnu časovú deriváciu hamiltoniánu v takom prípade platí

$$\frac{dH}{dt} = \underbrace{\frac{\partial H}{\partial t}}_{0} + \overbrace{\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}}^{-\dot{\mathbf{p}}} \cdot \dot{\mathbf{q}} + \overbrace{\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}}^{\dot{\mathbf{q}}} \cdot \dot{\mathbf{p}} = 0\,. \tag{47}$$

Hamiltonián je v takom prípade integrálom pohybu a zodpovedá zachovávaniu sa energie pre *izolovaný* systém.

Predstavme si teraz, že vzťah (40) pre hamiltonián nepoznáme. Poďme sa pokúsiť ho nájsť využitím zákona zachovania energie izolovaného systému. Budeme taktiež od hľadaného hamiltoniánu žiadať, aby generoval rovnice (42). Výhodou oproti Legendreovej transformácii bude to, že budeme pracovať priamo s Lagrangeovými rovnicami a z nich nám vypadne ako hamiltonián, tak aj kanonické hybnosti. Pre prehľadnosť vzťahov zavedieme skrátené označenie parciálnych derivácií, a to nasledovne: ak budeme mať parciálne zderivovať lagranžián napr. podľa $\dot{q}_i$ zapíšeme to ako $L_{\dot{q}_i} \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$; ak budeme písať gradient lagranžiánu vzhľadom na $\mathbf{q}$, náš zápis bude $L_{\mathbf{q}} \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}$. V takejto symbolike Lagrangeove rovnice vyzerajú nasledovne:

$$L_{\mathbf{q}} - \dot{L}_{\dot{\mathbf{q}}} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \mathcal{E}_i^{L_1} = 0 \qquad i = 1, \ldots, n\,. \tag{48}$$

Vynásobme Lagrangeove rovnice skalárne s $\dot{\mathbf{q}}$. Fyzikálne je za tým nasledovná úvaha: keďže, ako sme spomínali v odseku 1.3, $L_{\mathbf{q}}$ zodpovedá sile a $\dot{\mathbf{q}}$ zodpovedá rýchlosti, ich skalárny súčin potom zodpovedá výkonu, čo je časová derivácia energie, ktorú predstavuje hamiltonián. Po vynásobení dostaneme

$$0 = \dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{q}} \cdot \dot{L}_{\dot{\mathbf{q}}} = \dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\mathbf{q}} - \frac{d}{dt}\left(\dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}}\right) + \ddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}}\,.$$

Avšak izolovanosť sústavy znamená, že $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$, takže prvý člen spolu s tretím členom poslednej rovnosti tvoria $\dot{L}$. Dostávame teda zachovávajúcu sa veličinu

$$0 = \frac{d}{dt}\left(L - \dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}}\right) \qquad \Longrightarrow \qquad L - \dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}} = const.\,.$$

Vidíme, že sme dostali hamiltonián, preto označíme túto veličinu ako $-H$. Ukážeme ešte, že na to, aby sa zreprodukovali Hamiltonove rovnice, musíme žiadať $\mathbf{p} = L_{\dot{\mathbf{q}}}$. Spočítajme diferenciál H:

$$dH = d\left(\dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}} - L\right) = \cancel{L_{\dot{\mathbf{q}}} \cdot d\dot{\mathbf{q}}} + \dot{\mathbf{q}} \cdot dL_{\dot{\mathbf{q}}} - L_{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} - \cancel{L_{\dot{\mathbf{q}}} \cdot d\dot{\mathbf{q}}} \overset{(48)}{=} \dot{\mathbf{q}} \cdot dL_{\dot{\mathbf{q}}} - \dot{L}_{\dot{\mathbf{q}}} \cdot d\mathbf{q}\,.$$

Odtiaľ vidíme, že Hamiltonove rovnice (42) sa nám zreprodukujú, ak zvolíme $\mathbf{p} = L_{\dot{\mathbf{q}}}$.

5.4 Výhody hamiltonovského formalizmu

V odseku 4.1 sme spomínali, že hamiltonovský formalizmus má veľa výhod. Hovorili sme o prvej z nich, a to že Hamiltonove rovnice sú prvého rádu. Pripomeňme teraz niektoré ďalšie výhody tohto formalizmu.

Vďaka tvaru rovníc (42) vidíme, že ak v hamiltoniáne nevystupuje nejaká kanonická súradnica (takejto súradnici hovoríme, že je *cyklická*), vedie to na zachovávanie nejakej veličiny. Teda, napr. ak $H = H(\cancel{q_1}, \dots, p_n, t) \Leftrightarrow H_{q_1} = 0$, tak platí, že $p_1(t) = const.$, teda zachováva sa hybnosť p_1. V predošlom odseku sme ukázali, že hamiltonián, ktorý explicitne nezávisí od času, je tiež zachovávajúcou sa veličinou. Výhodou hamiltonovského formalizmu je teda to, že z Hamiltonových rovníc vidno viaceré zákony zachovania.

Ďalšou výhodou je platnosť Liouvilleovej vety. Tá hovorí o zachovávaní fázového objemu pri fázovom toku. Fázový tok je zobrazenie[9] $\Phi_t : (\mathbf{q}(t_A), \mathbf{p}(t_A)) \mapsto (\mathbf{q}(t_A + t), \mathbf{p}(t_A + t))$. Pri takomto zobrazení sa podľa Liouvilleovej vety zachováva veličina

$$V(\mathcal{D}(t)) = \int_{\mathcal{D}(t)} dq_1 \dots dq_n dp_1 \dots dp_n \quad ,$$

nazývaná fázový objem.

Ďalšou výsadou Hamiltonových rovníc je to, že pre časový vývoj nejakej (pozorovateľnej) veličiny (presnejšie funkcie na fázovom priestore) platí vzťah

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\} \quad , \quad \text{kde} \qquad \{H, f\} := \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial f}{\partial p_i} \quad \text{sú } \textit{Poissonove zátvorky.}$$

Použiteľnosť hamiltonovského formalizmu v modernej teoretickej fyzike spočíva v potrebe kvantovania fyzikálnych teórií. V nich sa síce namiesto štandardného lagranžiánu často pracuje s *hustotou lagranžiánu* ([3], str. 18), ale princíp je rovnaký. Ak máme nejakú teóriu poľa, pre ktorú vieme napísať klasické rovnice, existuje metóda, ktorou sa tieto rovnice dajú kvantovať (t.j. previesť do jazyka kvantovej mechaniky). Tá metóda sa nazýva *kanonické kvantovanie* a zaviedol ju Paul Dirac. V nej ide o to, že klasické rovnice sa zapíšu v hamiltonovskom formalizme a ku kvantovému opisu sa prejde tak, že kanonickým súradniciam sa priradia *operátory*, Poissonove zátvorky sa nahradia *komutátormi* a zavedú sa *kanonické komutačné vzťahy* ([15], str. 269).

Keďže kanonické kvantovanie predstavuje populárnu (hoci nie jedinú) metódu prechodu ku kvantovému opisu, používa sa aj v moderných teóriách. V nich sa štandardne predpokladá, že lagranžián (hustota lagranžiánu) závisí len od prvých derivácií. V týchto teóriách sa však potom objavujú rôzne problémy s divergentnými výrazmi a mnohým sa nedá prisúdiť dobrý fyzikálny zmysel. Existujú však náznaky, že by tieto problémy mohli byť odstránené zavedením závislostí lagranžiánov od vyšších derivácií [6]. Tieto úvahy sú však ďaleko za rámcom tejto práce, záujemcu odkazujeme napr. na text [10].

[9]Niekedy aj jednoparametrická grupa takýchto zobrazení.

6 Prechod od Lagrangeových rovníc k Hamiltonovým rovniciam pre lagranžián druhého rádu

6.1 Hamiltonián, kanonické súradnice a Hamiltonove rovnice

Teraz pristúpime k prechodu od lagranžovského formalizmu k hamiltonovskému formalizmu pre *nedegenerovaný* lagranžián druhého rádu. Vieme, že Lagrangeove rovnice sú v takomto prípade 4. rádu, a teda potrebujeme $4n$ počiatočných podmienok na ich riešenie (n je počet rovníc $\equiv$ počet stupňov voľnosti $\equiv$ rozmer konfiguračného priestoru). Na fázový priestor sa môžeme pre nedegenerovaný lagranžián pozerať aj ako na priestor počiatočných podmienok, a preto bude $4n$-rozmerný. Prejsť k hamiltonovskému formalizmu znamená nájsť $4n$ nových súradníc (kanonických) $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ a Hamiltonovu funkciu $H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t)$ (hamiltonián *druhého rádu*) tak, aby dynamika fyzikálnej sústavy daná Lagrangeovými rovnicami bola ekvivalentne daná Hamiltonovými rovnicami

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_1} \quad , \quad \dot{\mathbf{x}}_2 = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_2} \quad , \quad \dot{\mathbf{p}}_1 = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_1} \quad , \quad \dot{\mathbf{p}}_2 = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_2} \quad . \tag{49}$$

Ukážeme, že sa tento prechod dá uskutočniť, tým, že priamo tieto kanonické súradnice a hamiltonián nájdeme. Nájdeme ich tak, ako sme ich našli v odseku 5.3, teda, že budeme hľadať v Lagrangeových rovniciach izolovaného systému ($\frac{\partial L}{\partial t} \equiv 0$) zachovávajúcu sa veličinu. Začnime tým, že Lagrangeove rovnice (18) zapíšeme v označení z odseku 5.3:

$$L_{\mathbf{q}} - \dot{L}_{\dot{\mathbf{q}}} + \ddot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \mathcal{E}_i^{L_2} = 0 \qquad i = 1, \ldots, n\,. \tag{50}$$

Vynásobme skalárne tieto rovnice s $\dot{\mathbf{q}}$. Dostaneme

$$\dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{q}} \cdot \dot{L}_{\dot{\mathbf{q}}} + \dot{\mathbf{q}} \cdot \ddot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} = 0\,. \tag{51}$$

Budeme teraz túto rovnicu upravovať tak, aby sme dostali časovú deriváciu nejakého výrazu. Pre ten účel si všimnime, že platí

$$\dot{\mathbf{q}} \cdot \dot{L}_{\dot{\mathbf{q}}} = \frac{d}{dt}(\dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}}) - \ddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}} \qquad \text{a} \qquad \dot{\mathbf{q}} \cdot \ddot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} = \frac{d}{dt}\left(\dot{\mathbf{q}} \cdot \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}}\right) - \frac{d}{dt}(\ddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\ddot{\mathbf{q}}}) + \dddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\ddot{\mathbf{q}}} \quad .$$

Dosadením do (51) a preusporiadaním členov dostávame

$$\begin{aligned} 0 &= \underbrace{\dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\mathbf{q}} + \ddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}} + \dddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\ddot{\mathbf{q}}}}_{\dot{L} - \frac{\partial L}{\partial t} = \dot{L}} - \frac{d}{dt}(\dot{\mathbf{q}} \cdot L_{\dot{\mathbf{q}}}) + \frac{d}{dt}\left(\dot{\mathbf{q}} \cdot \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}}\right) - \frac{d}{dt}(\ddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\ddot{\mathbf{q}}}) \\ &= \frac{d}{dt}\left[L - \dot{\mathbf{q}} \cdot \left(L_{\dot{\mathbf{q}}} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}}\right) - \ddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\ddot{\mathbf{q}}}\right] . \end{aligned}$$

Dostávame zachovávajúcu sa veličinu, ktorú označíme ako

$$H := \dot{\mathbf{q}} \cdot \left(L_{\dot{\mathbf{q}}} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \right) + \ddot{\mathbf{q}} \cdot L_{\ddot{\mathbf{q}}} - L \tag{52}$$

Ukážeme, že toto je hľadaný hamiltonián, ktorý vedie na rovnice (49) pre vhodné $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$. Predpoklad izolovanosti sústavy ($L_t = 0$) už nebudeme potrebovať, takže ďalej budeme počítať so všeobecným lagranžiánom. Spočítajme diferenciál funkcie H

$$\begin{aligned} dH = & \left(\cancel{L_{\dot{\mathbf{q}}}} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \right) \cdot d\dot{\mathbf{q}} + \dot{\mathbf{q}} \cdot d \left(L_{\dot{\mathbf{q}}} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \right) + \cancel{L_{\ddot{\mathbf{q}}} \cdot d\ddot{\mathbf{q}}} + \ddot{\mathbf{q}} \cdot dL_{\ddot{\mathbf{q}}} \\ & - L_{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} - \cancel{L_{\dot{\mathbf{q}}} \cdot d\dot{\mathbf{q}}} - \cancel{L_{\ddot{\mathbf{q}}} \cdot d\ddot{\mathbf{q}}} - L_t dt \\ = & - L_{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \cdot d\dot{\mathbf{q}} + \dot{\mathbf{q}} \cdot d \left(L_{\dot{\mathbf{q}}} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \right) + \ddot{\mathbf{q}} \cdot dL_{\ddot{\mathbf{q}}} - L_t dt \quad . \end{aligned}$$

Lagrangeove rovnice v tvare (50) vlastne hovoria

$$L_{\mathbf{q}} = \frac{d}{dt} \left(L_{\dot{\mathbf{q}}} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \right) \quad .$$

Použitím Lagrangeových rovníc vo výraze pre diferenciál hamiltoniánu dostaneme

$$dH = -\frac{d}{dt} \left(L_{\dot{\mathbf{q}}} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \right) \cdot d\mathbf{q} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \cdot d\dot{\mathbf{q}} + \dot{\mathbf{q}} \cdot d \left(L_{\dot{\mathbf{q}}} - \dot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} \right) + \ddot{\mathbf{q}} \cdot dL_{\ddot{\mathbf{q}}} - L_t dt \quad .$$

Avšak H ako funkcia $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t$ má diferenciál

$$dH = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot d\mathbf{x}_1 + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_2} \cdot d\mathbf{x}_2 + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_1} \cdot d\mathbf{p}_1 + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_2} \cdot d\mathbf{p}_2 + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad .$$

Vidíme, že na to, aby platili Hamiltonove rovnice (49), stačí, ak zvolíme

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &:= \mathbf{q} \qquad & \mathbf{p}_1 &:= \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{\mathbf{q}}} \right) \\ \mathbf{x}_2 &:= \dot{\mathbf{q}} \qquad & \mathbf{p}_2 &:= \frac{\partial L}{\partial \ddot{\mathbf{q}}} \end{aligned} \tag{53}$$

To sú Ostrogradského (kanonické) súradnice pre hamiltonián druhého rádu. Vďaka nedegenerovanosti lagranžiánu (20) dokážeme podľa vety o implicitne zadanej funkcii obrátiť definičný vzťah pre $\mathbf{p}_2$ a vyjadriť z neho zrýchlenie $\ddot{\mathbf{q}}$ ako funkciu kanonických súradníc $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2$, teda $\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{A}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2, t)$. Je zaujímavé, že zrýchlenie (a preto ani lagranžián) vôbec nezávisí od kanonickej hybnosti $\mathbf{p}_1$. Lagranžián vieme teraz prepísať ako funkciu kanonických súradníc $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, t) = L(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{A}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2), t)$ a hamiltonián ako funkcia kanonických súradníc bude

$$H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t) = \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{x}_2 + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2, t) - L(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{A}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2), t) \quad . \tag{54}$$

Vidíme teda, že takýto hamiltonián s týmito kanonickými súradnicami udáva cez Hamiltonove rovnice (49) dynamiku fyzikálnej sústavy ekvivalentne Lagrangeovým rovniciam (18). Podarilo sa nám ukázať, že Lagrangeove rovnice pre nedegenerovaný lagranžián druhého rádu majú hamiltonovskú štruktúru.

6.2 Ako sa dali "uvidieť" Ostrogradského súradnice?

Teraz už chápeme, prečo sme pri odvodení Lagrangeových rovníc k-teho rádu v odseku 3.1 pre $k = 2$ zaviedli označenie (29). Ostrogradského súradnice môžeme uvidieť už priamo vo vzťahu (27) pre variáciu účinku. Ten totiž pre $k = 2$ bude

$$\delta\mathcal{S} = \mathbf{p}_1 \cdot \delta\mathbf{q}\Big|_{t_A}^{t_B} + \mathbf{p}_2 \cdot \delta\dot{\mathbf{q}}\Big|_{t_A}^{t_B} + \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{E}_i^{L_2} \delta q_i dt \quad , \tag{27}$$

kde $\mathbf{p}_1$ a $\mathbf{p}_2$ podľa (29) sa zhodujú s $\mathbf{p}_1$ a $\mathbf{p}_2$ podľa (53). Z výrazu pre variáciu účinku vieme taktiež identifikovať aj súradnice $\mathbf{x}_1$ a $\mathbf{x}_2$.

Kanonické súradnice by sa dali nahliadnuť aj inak, napr. tak, že budeme účinok chápať ako funkciu stavu sústavy v nejakom čase a derivovať ho podľa týchto veličín (pozri [4]), čo je však v určitom zmysle to, čo sme povedali.

Ako sme videli v odseku 4.2, pri našom prepise Lagrangeových rovníc na rovnice prvého rádu sa nám podarilo uhádnuť tie *správne* súradnice (ktoré sa ukázali byť Ostrogradského súradnicami) a pomocou nich prepísať Lagrangeove rovnice na rovnice prvého rádu v tvare (33) (aj keď sme ich explicitne neuviedli), ktoré však vlastne sú Hamiltonovými rovnicami. Mohlo by nám napadnúť pokúsiť sa vyrobiť z tých súradníc hamiltonián, pre ktorý by platili rovnice (49) a mohlo by nám napadnúť použiť na to Legendreovu transformáciu, tak ako pri lagranžiáne prvého rádu. Ako však o chvíľu ukážeme, takýto postup by nás nepriviedol k cieľu.

6.3 Fázový priestor ako priestor počiatočných podmienok

Spomínali sme, že na fázový priestor (teda na priestor $\mathbf{x}$-ov a $\mathbf{p}$-čiek) sa môžeme pozerať pre nedegenerovaný lagranžián aj ako na priestor počiatočných podmienok pre Lagrangeove rovnice (18). Keďže tieto sú 4. rádu, potrebujeme $4n$ počiatočných podmienok, povedzme v čase t_A : $\mathbf{q}_A, \dot{\mathbf{q}}_A, \ddot{\mathbf{q}}_A, \dddot{\mathbf{q}}_A$. Ukážme, že nedegenerovanosť lagranžiánu skutočne vedie na bijekciu $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \dddot{\mathbf{q}}) \leftrightarrow (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$. Priradenie $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \dddot{\mathbf{q}}) \mapsto (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ je dané vzťahmi (53) a z inverzného priradenia nám stačí už len ukázať, ako vyjadriť $\dddot{\mathbf{q}}$ pomocou kanonických súradníc. Z definičného vzťahu pre $\mathbf{p}_1$ máme

$$p_{1i} = L_{\dot{q}_i} - \dot{L}_{\ddot{q}_i} = L_{\dot{q}_i} - L_t - L_{\ddot{q}_i q_j}\dot{q}_j - L_{\ddot{q}_i \dot{q}_j}\ddot{q}_j - L_{\ddot{q}_i \ddot{q}_j}\dddot{q}_j$$

a keďže nedegenerovanosť lagranžiánu znamená, že $\det(L_{\ddot{q}_i\ddot{q}_j}) \neq 0$, po vynásobení inverznou maticou $L^{-1}_{\ddot{q}_i\ddot{q}_j}$ môžeme písať

$$\dddot{\mathbf{q}} = \mathbf{B}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t) \quad .$$

Hoci sa jedná o bijekciu, kanonické súradnice sú predsa len preferované (odtiaľ ich kanonickosť). V týchto súradniciach totižto Lagrangeove rovnice ako systém rovníc prvého rádu nadobúda hamiltonovský tvar, t.j. platia rovnice (49).

Uveďme ešte poznámku na záver. To, že rôzne voľby súradníc v Lagrangeových rovniciach ako rovniciach prvého rádu odhaľujú o nich rôzne veci, nás nabáda k tomu, aby sme v nich hľadali skrytú štruktúru. To nás privedie k vyjadreniu týchto rovníc v bezsúradnicovom zápise, pre ktorý je potrebné zaviesť určité objekty diferenciálnej geometrie. V takomto balení sa dá potom uvidieť, že hamiltonovský tvar týchto rovníc (t.j. (49)) je v istom zmysle najjednoduchší. Takisto sa dá vidieť, že Ostrogradského súradnice nie sú jedinými možnými kanonickými súradnicami (teda takými, že v nich máme rovnice (49)), ale vďaka *kanonickým transformáciám* sa dajú vyrobiť aj ďalšie takéto súradnice. [2]

6.4 Je to Legendreova transformácia?

Pozrime sa ešte na priradenie $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \dddot{\mathbf{q}}) \mapsto (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$. V odseku 5.2 o Legendreovej transformácii sme spomínali, že v prípade lagranžiánu prvého rádu priradenie $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \mapsto (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ *je* (čiastočnou) Legendreovou transformáciou, lebo platí

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \qquad \text{a} \qquad H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L = (\text{transformované})_i \, (\text{pôvodné})_i - L \quad .$$

Avšak v prípade lagranžiánu druhého rádu, sa už o Legendreovu transformáciu, tak ako ju poznáme z teoretickej mechaniky, nejedná. Zdôvodnime prečo. Keďže $\mathbf{x}_1 := \mathbf{q}$ a $\mathbf{x}_2 := \dot{\mathbf{q}}$, vidíme, že legendreovský prechod sa môže diať len v súradniciach $\ddot{\mathbf{q}}$ a $\dddot{\mathbf{q}}$. Avšak hamiltonián druhého rádu má tvar

$$H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \mathbf{p}_1 \cdot \dot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_2 \cdot \ddot{\mathbf{q}} - L \quad , \tag{55}$$

z ktorého vidno, že súradnice, ktoré by sme mali legendreovsky transformovať, sú $\dot{\mathbf{q}}$ a $\ddot{\mathbf{q}}$. Ďalej vieme, že kanonické hybnosti $\mathbf{p}_1$ a $\mathbf{p}_2$ nie sú definované cez gradienty lagranžiánu vzhľadom na $\dot{\mathbf{q}}$ a $\ddot{\mathbf{q}}$ tak, ako sa to žiada v Legendreovej transformácii, ale komplikovanejšie, a to vzťahmi (53). Preto prechod ku kanonickým súradniciam pre lagranžián druhého rádu *nie je* Legendreovou transformáciou, tak ako sa zavádza v teoretickej mechanike.

[Nie je účelom tejto práce skúmať rôzne alternatívne definície Legendreovej transformácie, tak aby prechod k Ostrogradského súradniciam bol opísaný takouto transformáciou, a teda túto možnosť nevylučujeme.]

6.5 Príklad: Paisov-Uhlenbeckov oscilátor

Poďme si ešte vyskúšať aplikovať vybudovaný aparát na príklade Paisovho-Uhlenbeckovho oscilátora, ktorý sme začali riešiť v odseku 2.4. Jeho lagranžián je

$$L(q,\dot{q},\ddot{q}) = -\frac{\epsilon m}{2\omega^2}\ddot{q}^2 + \frac{m}{2}\dot{q}^2 - \frac{m\omega^2}{2}q^2 \tag{23}$$

a k nemu prislúcha Lagrangeova rovnica

$$\frac{\epsilon}{\omega^2}\ddot{\ddot{q}} + \ddot{q} + \omega^2 q = 0\,. \tag{24}$$

Teraz prejdeme k hamiltonovskému formalizmu. Kanonické súradnice budú podľa (53)

$$\begin{aligned} x_1 &= q \qquad & p_1 &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}\right) = m\dot{q} + \frac{\varepsilon m}{\omega^2}\dddot{q} \\ x_2 &= \dot{q} \qquad & p_2 &= \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}} = -\frac{\varepsilon m}{\omega^2}\ddot{q} \implies \ddot{q} = -\frac{\omega^2}{\varepsilon m}p_2 \end{aligned} \quad ,$$

a hamiltonián bude podľa (54)

$$\begin{aligned} H &= p_1\dot{q} + p_2\ddot{q} - L = p_1 x_2 - \frac{\omega^2}{\varepsilon m}p_2^2 + \underbrace{\frac{\varepsilon m}{2\omega^2}\left(-\frac{\omega^2}{\varepsilon m}p_2\right)^2 - \frac{m}{2}x_2^2 + \frac{m\omega^2}{2}x_1^2}_{-L(x_1,x_2,p_2)} \\ H(x_1,x_2,p_1,p_2) &= p_1 x_2 - \frac{\omega^2}{2\varepsilon m}p_2^2 - \frac{m}{2}x_2^2 + \frac{m\omega^2}{2}x_1^2 \quad . \end{aligned} \tag{56}$$

Potom dostávame Hamiltonove rovnice (49) v tvare

$$\dot{x}_1 = x_2 \quad , \quad \dot{x}_2 = -\frac{\omega^2}{\varepsilon m}p_2 \quad , \quad \dot{p}_1 = -m\omega^2 x_1 \quad , \quad \dot{p}_2 = m x_2 - p_1 \quad .$$

7 Prechod od Lagrangeových rovníc k Hamiltonovým rovniciam pre lagranžiány vyšších rádov

Videli sme, že Lagrangeove rovnice pre lagranžián druhého rádu majú v sebe skrytú hamiltonovskú štruktúru. Je prirodzené očakávať, že druhý rád nie je v tomto smere výnimočný a Hamiltonove rovnice budeme schopní odvodiť aj z Lagrangeových rovníc pre lagranžiány vyšších rádov. Poďme sa o tom presvedčiť.

7.1 Hamiltonove rovnice pre hamiltonián tretieho rádu

Začnime s tým, ako prejsť k hamiltonovskému formalizmu pre nedegenerovaný lagranžián tretieho rádu (t.j. $L = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \dddot{\mathbf{q}}, t)$ + podmienka (31) pre $k = 3$). Pre takýto lagranžián sme už napísali príslušné Lagrangeove rovnice v odseku 4.2 (vzťah (38)). V našom skrátenom označení vyzerajú nasledovne

$$L_{\mathbf{q}} - \dot{L}_{\dot{\mathbf{q}}} + \ddot{L}_{\ddot{\mathbf{q}}} - \dddot{L}_{\dddot{\mathbf{q}}} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \mathcal{E}_i^{L_3} = 0 \qquad i = 1, \dots, n \quad . \tag{57}$$

Tieto rovnice sú 6. rádu, takže fázový priestor bude $6n$-rozmerný. Na prepis Lagrangeových rovníc do Hamiltonových rovníc preto potrebujeme $6n$ kanonických súradníc, ktoré označíme $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$ a $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3$, ako aj Hamiltonovu funkciu. Chceme teda odvodiť rovnice

$$\dot{\mathbf{x}}_j = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_j} \quad , \quad \dot{\mathbf{p}}_j = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_j} \qquad j = 1, 2, 3 \quad . \tag{58}$$

Mohli by sme postupovať tak ako v odseku 6.1, teda nájsť v Lagrangeových rovniciach (57) izolovaného systému zachovávajúcu sa veličinu a spočítaním diferenciálu tejto veličiny určiť Ostrogradského súradnice tak, aby boli splnené Hamiltonove rovnice (58). Dostávali by sme však neprehľadné výrazy. Môžeme sa ale inšpirovať predošlou kapitolou a *najprv* zaviesť Ostrogradského kanonické súradnice a hamiltonián a potom pomocou Lagrangeových rovníc odvodiť pre ne Hamiltonove rovnice. Tento postup má tú výhodu, že sa dá potom elegantne aplikovať aj na vyššie rády.

Ako nájsť Ostrogradského súradnice? V odseku (6.2) sme jeden z možných postupov už načrtli. V prípade lagranžiánu druhého rádu sa tieto súradnice dali vidieť už z vyjadrenia pre variáciu účinku. Pozrime sa preto na variáciu účinku v prípade lagranžiánu tretieho rádu. Zo vzťahu (27) dostávame pre $k = 3$

$$\delta\mathcal{S} = \mathbf{p}_1 \cdot \delta\mathbf{q}\Big|_{t_A}^{t_B} + \mathbf{p}_2 \cdot \delta\dot{\mathbf{q}}\Big|_{t_A}^{t_B} + \mathbf{p}_3 \cdot \delta\ddot{\mathbf{q}}\Big|_{t_A}^{t_B} + \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{E}_i^{L_3} \delta q_i dt \quad , \tag{27}$$

kde $\mathbf{p}_j$, $j = 1, 2, 3$, sú definované vzťahom (29). Ostrogradského súradnice teda budú

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}_1 &:= \mathbf{q} & \mathbf{p}_1 &:= \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} - \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \ddot{\mathbf{q}}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dddot{\mathbf{q}}}\right)\right] = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} - \dot{\mathbf{p}}_2 \\
\mathbf{x}_2 &:= \dot{\mathbf{q}} & \mathbf{p}_2 &:= \frac{\partial L}{\partial \ddot{\mathbf{q}}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dddot{\mathbf{q}}}\right) = \frac{\partial L}{\partial \ddot{\mathbf{q}}} - \dot{\mathbf{p}}_3 \\
\mathbf{x}_3 &:= \ddot{\mathbf{q}} & \mathbf{p}_3 &:= \frac{\partial L}{\partial \dddot{\mathbf{q}}} \quad .
\end{aligned}
\tag{59}
$$

Využijeme podmienku nedegenerovanosti na vyjadrenie $\dddot{\mathbf{q}}$ z definičného vzťahu pre $\mathbf{p}_3$. Dostaneme

$$
\dddot{\mathbf{q}} = \mathbf{A}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{p}_3, t) \quad \text{, a preto} \quad L = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, \dddot{\mathbf{q}}, t) = \mathscr{L}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{p}_3, t) \quad .
$$

Všimnime si, že L a $\dddot{\mathbf{q}}$ závisia z kanonických hybností len od $\mathbf{p}_3$. Toto je dôležitý postreh, ku ktorému sa neskôr vrátime. Hamiltonián zavedieme vzťahom analogickým vzťahu (55)

$$
\begin{aligned}
H &:= \mathbf{p}_1 \cdot \dot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_2 \cdot \ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_3 \cdot \dddot{\mathbf{q}} - L \\
H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, t) &:= \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{x}_2 + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{x}_3 + \mathbf{p}_3 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{p}_3, t) \\
&\quad - \mathscr{L}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{p}_3, t) \quad .
\end{aligned}
\tag{60}
$$

Ukážeme teraz, že pre takto zvolený hamiltonián a kanonické súradnice, Lagrangeove rovnice (57) sú ekvivalentné Hamiltonovým rovniciam (58). Overovať túto ekvivalenciu priamym dosádzaním do rovníc by bolo zdĺhavé a nepraktické, a preto zvolíme štandardný postup, ktorý sa nám osvedčil už viackrát.

Zrátajme teda diferenciál hamiltoniánu

$$
dH = \dot{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{p}_1 + \ddot{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{p}_2 + \dddot{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_1 \cdot d\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_2 \cdot d\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_3 \cdot d\dddot{\mathbf{q}} - dL \quad , \tag{61}
$$

kde

$$
dL = L_{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} + L_{\dot{\mathbf{q}}} \cdot d\dot{\mathbf{q}} + L_{\ddot{\mathbf{q}}} \cdot d\ddot{\mathbf{q}} + L_{\dddot{\mathbf{q}}} \cdot d\dddot{\mathbf{q}} + L_t dt \quad .
$$

Keď teraz využijeme v poslednej rovnosti definičné vzťahy pre kanonické súradnice a Lagrangeove rovnice, ktoré sa dajú potom zapísať ako $\dot{\mathbf{p}}_1 = L_{\mathbf{q}}$, dostaneme

$$
\begin{aligned}
dL &= \dot{\mathbf{p}}_1 \cdot d\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 + \dot{\mathbf{p}}_2) \cdot d\dot{\mathbf{q}} + (\mathbf{p}_2 + \dot{\mathbf{p}}_3) \cdot d\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_3 \cdot d\dddot{\mathbf{q}} + L_t dt \\
&= \dot{\mathbf{p}}_1 \cdot d\mathbf{q} + \dot{\mathbf{p}}_2 \cdot d\dot{\mathbf{q}} + \dot{\mathbf{p}}_3 \cdot d\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_1 \cdot d\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_2 \cdot d\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{p}_3 \cdot d\dddot{\mathbf{q}} + L_t dt \quad .
\end{aligned}
$$

Keď teraz dosadíme za dL v (61), po odčítaní rovnakých členov zostane

$$
\begin{aligned}
dH &= \dot{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{p}_1 + \ddot{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{p}_2 + \dddot{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{p}_3 - \dot{\mathbf{p}}_1 \cdot d\mathbf{q} - \dot{\mathbf{p}}_2 \cdot d\dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{p}}_3 \cdot d\ddot{\mathbf{q}} - L_t dt \\
&= \dot{\mathbf{x}}_1 \cdot d\mathbf{p}_1 + \dot{\mathbf{x}}_2 \cdot d\mathbf{p}_2 + \dot{\mathbf{x}}_3 \cdot d\mathbf{p}_3 - \dot{\mathbf{p}}_1 \cdot d\mathbf{x}_1 - \dot{\mathbf{p}}_2 \cdot d\mathbf{x}_2 - \dot{\mathbf{p}}_3 \cdot d\mathbf{x}_3 - L_t dt \quad .
\end{aligned}
$$

Zároveň však platí

$$dH = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_1} \cdot d\mathbf{p}_1 + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_2} \cdot d\mathbf{p}_2 + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_3} \cdot d\mathbf{p}_3 + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot d\mathbf{x}_1 + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_2} \cdot d\mathbf{x}_2 + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_3} \cdot d\mathbf{x}_3 + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad .$$

Porovnaním posledných dvoch vyjadrení dH vidíme, že platia Hamiltonove rovnice (58), a teda že sme si správne zvolili hamiltonián aj súradnice (a máme preto právo nazývať ich kanonické). Podarilo sa nám teda ukázať, že aj Lagrangeove rovnice pre *nedegenerovaný* lagranžián tretieho rádu *majú* hamiltonovskú štruktúru.

Čo sa týka vyšších rádov, tam sa nič podstatné oproti práve diskutovanému prípadu nezmení a teda rovnakým spôsobom sa dá ukázať, že Lagrangeove rovnice ľubovoľného rádu majú hamiltonovskú štruktúru, t.j. vo vhodných súradniciach sa pre ne dajú napísať Hamiltonove rovnice. V ďalšom odseku preto len zhrnieme tieto výsledky pre všeobecný k-ty rád.

7.2 Hamiltonove rovnice pre hamiltonián k-teho rádu

Pre úplnosť napíšme, ako vyzerajú Ostrogradského kanonické súradnice, hamiltonián a Hamiltonove rovnice pre nedegenerovaný lagranžián k-teho rádu a jemu príslušné Lagrangeove rovnice.

Lagrangeove rovnice pre takýto lagranžián sú $2k$-teho rádu a vyzerajú takto

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}\right) + \cdots + (-1)^k \frac{d^k}{dt^k}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}^{(k)}}\right) = 0 \quad . \tag{62}$$

Fázový priestor je $2kn$-rozmerný (kde n je rozmer konfiguračného priestoru), preto máme $2kn$ Ostrogradského kanonických súradníc $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k$ a $\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_k$, ktoré sú definované nasledovne

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_j &:= \mathbf{q}^{(j-1)} \qquad\qquad j = 1, \ldots, k \\ \mathbf{p}_j &:= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}^{(j)}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}^{(j+1)}}\right) + \cdots + \left(-\frac{d}{dt}\right)^{(k-j)}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}^{(k)}}\right) = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}^{(j)}} - \dot{\mathbf{p}}_{j+1} \quad . \end{aligned} \tag{63}$$

Vďaka nedegenerovanosti lagranžiánu (podmienka (31)), vieme zo vzťahu $\mathbf{p}_k = L_{\mathbf{q}^{(k)}}$ vyjadriť $\mathbf{q}^{(k)}$ ako funkciu kanonických súradníc:

$$\mathbf{q}^{(k)} = \mathbf{A}(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k, t) \quad , \quad L = L(\mathbf{q}, \ldots, \mathbf{q}^{(k)}, t) = \mathscr{L}(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k, t) \quad . \tag{64}$$

Hamiltonián k-teho rádu má potom definíciu

$$\begin{aligned} H(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{p}_k, t) := &\ \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{x}_2 + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{x}_3 + \cdots + \mathbf{p}_{k-1} \cdot \mathbf{x}_k + \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k, t) \\ &- \mathscr{L}(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k, t) \quad . \end{aligned} \tag{65}$$

V takto zavedených súradniciach sú Lagrangeove rovnice (62) ekvivalentné Hamiltonovým rovniciam

$$\dot{\mathbf{x}}_j = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_j} \quad , \quad \dot{\mathbf{p}}_j = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_j} \qquad j = 1, \dots, k \quad . \tag{66}$$

8 Ostrogradského nestabilita

V predošlých kapitolách sa nám podarilo ukázať, že sa *dá* prejsť od lagranžovského formalizmu k hamiltonovskému formalizmu pre lagranžián ľubovoľného rádu. Teraz ukážeme, že nám hamiltonovský formalizmus vyšších rádov ($k > 1$) poodhalil patológiu, ktorú v pôvodnom lagranžovskom formalizme nebolo vidieť. Táto patológia má podľa niektorých autorov [11] obrovský dopad na moderné fyzikálne teórie a zabraňuje zahrnutiu derivácií vyšších rádov do argumentov lagranžiánov týchto teórií. Hoci nemáme potrebné vedomosti a ani matematický aparát na úplnu diskusiu tohto problému, poďme sa pokúsiť aspoň zhruba načrtnúť, o aký problém sa jedná. Začneme našim známym príkladom - PUO.

8.1 Nestabilita v Paisovom-Uhlenbeckovom oscilátore

Paisov-Uhlenbeckov oscilátor sme si predviedli ako v lagranžovskom formalizme (odsek (2.4)), tak aj v hamiltonovskom formalizme (odsek (6.5)). Poďme sa pozrieť, čo nám hamiltonovský formalizmus o tomto oscilátore odhalil.

Začneme tým, že si všimneme, že hamiltonián PUO (vzťah (56)) explicitne nezávisí od času, a preto bude zachovávajúcou sa veličinou. Jeho hodnotu môžeme teda vyrátať na začiatku z počiatočných podmienok, keďže plynutím času bude konštantná. Ak budeme mať v čase $t = 0$ počiatočné podmienky $x_1^0, x_2^0, p_1^0, p_2^0$, tak hamiltonián ako funkcia času bude

$$H(t) = p_1^0 x_2^0 - \frac{\omega^2}{2\varepsilon m}(p_2^0)^2 - \frac{m}{2}(x_2^0)^2 + \frac{m\omega^2}{2}(x_1^0)^2 \quad .$$

Počiatočné podmienky vyjadrené pomocou konštánt vystupujúcich v riešení Lagrangeových rovníc pre PUO (25) budú

$$\begin{aligned} x_1^0 &= C_+ + C_- & p_1^0 &= m\left(k_+ S_+ + k_- S_-\right) - \frac{m\varepsilon}{\omega^2}\left(k_+^3 S_+ + k_-^3 S_-\right) \\ x_2^0 &= k_+ S_+ + k_- S_- & p_2^0 &= \frac{m\varepsilon}{\omega^2}\left(k_+^2 C_+ + k_-^2 C_-\right) \quad . \end{aligned}$$

Po vykonaní zopár algebraických úprav $H(t)$ prejde do tvaru

$$H(t) = \frac{1}{2} m\sqrt{1-4\varepsilon}\; k_+^2 \left(C_+^2 + S_+^2\right) - \frac{1}{2} m\sqrt{1-4\varepsilon}\; k_-^2 \left(C_-^2 + S_-^2\right) \quad .$$

Z tohto tvaru už je zrejmé, že k_+ módy nesú kladnú energiu, zatiaľčo k_- módy zápornú energiu. A to je problém pre kvantový svet. Podľa Woodarda [11] by kvantový analóg PUO nemal základný stav. Skonštruovaním kreačno-anihilačných operátorov by sa dalo ukázať, že môžu existovať častice s kladnými aj zápornými energiami. To potom znamená, ako tvrdí Woodard [11], že napr. také vákuum sa môže samovoľne rozpadať na častice so zápornými a kladnými energiami (celkový súčet energií sa nezmení). A tento proces je z hľadiska zvyšovania entropie výhodný. Preto sa vákuum rozpadať bude. Nič také sa však v experimentoch nepozoruje.

8.2 Nestabilita vo všeobecnosti

Pozrime sa teraz všeobecne na hamiltonián druhého rádu (vzťah (54)). V odseku 6.1 sme poukázali na to, že zrýchlenie ani lagranžián, keď sme ich vyjadrili cez kanonické súradnice, neboli funkciami $\mathbf{p}_1$. Jediná závislosť od $\mathbf{p}_1$ v hamiltoniáne druhého rádu bola v prvom člene $\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{x}_2$. To znamená, že hamiltonián závisí *lineárne* od súradníc $\mathbf{p}_1$ a táto závislosť sa nedá nijako ovplyvniť voľbou lagranžiánu. Dostávame teda hamiltonián, ktorý nie je zdola ohraničený. A to v pomerne veľkej oblasti fázového priestoru. Môžeme dosiahnuť ľubovoľné záporné hodnoty hamiltoniánu tým, že napr. pre $x_{21} < 0$ zvolíme dostatočne veľké $p_{11} > 0$ a naopak, čo predstavuje takmer polovicu priestoru. Fakt, že hamiltonián závisí lineárne na $\mathbf{p}_1$ predstavuje obrovskú prekážku pre kvantovanie teórie, v ktorej vystupuje lagranžián druhého rádu. Hoci pracujeme len s klasickými veličinami, kvantovanie našu situáciu nevylepší. V "Ostrogradského" kvantovej mechanike by operátory $\mathbf{p}_1$ a $\mathbf{x}_2$ komutovali, a teda nemali by sme žiaden vzťah neurčitosti pre tieto veličiny. Prítomnosť lineárneho člena teda vedie na problém, ktorý sme naznačili už v predošlom odseku, teda nestabilitu vákua, ale aj na ďalšie, napr. nestabilitu interegajúcich polí a mnohé ďalšie problémy špecifické napr. pre kvantovanie gravitácie. Podľa niektorých autorov [10] tak zahrnutie vyšších derivácií do lagranžiánov nevyrieši problémy kvantovej gravitácie.

Uvedomme si, že prechod k vyšším rádom derivácií v lagranžiáne našu situáciu len zhorší. Všimnime si vzťah (65) pre hamiltonián k-teho rádu. Tým, že $\mathbf{q}^{(k)}$ ani L *nie sú* funkciami prvých $k-1$ kanonických hybností, ako to vidíme z (64), je spôsobené, že dostávame výhradne *lineárnu* závislosť hamiltoniánu od prvých $k-1$ kanonických hybností. Teda znova máme hamiltonián, ktorý je zdola neohraničený, a teda znova máme problém.

Avšak hamiltonián *prvého* rádu (teda taký, na aký sme boli doteraz zvyknutí) žiadny takýto problém nevykazuje. Ako vidíme zo vzťahu (40), hamiltonián neobsahuje žiadnu všeobecnú lineárnu závislosť, tak ako tomu bolo pri vyšších rádoch. Tým je tento "obyčajný" prípad vlastne výnimočný.

Zatiaľ to vyzerá tak, že Ostrogradského nestabilita je vážny problém, ktorý sa nedá tak ľahko odstrániť. Napriek snahám viacerých fyzikov o jeho obídenie [11] stále pretrváva a obmedzuje moderné teórie.

Záver

Cieľom tejto práce bolo preštudovať prechod od dynamiky danej Lagrangeovými rovnicami pre lagranžián ľubovoľného rádu k dynamike formulovanej hamiltonovsky a poukázať na črtu takéhoto formalizmu, ktorá vedie na Ostrogradského nestabilitu. Ukázalo sa, že tento prechod sa dá uskutočniť, ak je lagranžián nedegenerovaný, avšak takmer vždy (okrem lagranžiánu prvého rádu) to vedie na vyššie spomínanú nestabilitu.

Začali sme tým, že sme v prvej kapitole pripomenuli princíp najmenšieho účinku a Lagrangeove rovnice pre lagranžián prvého rádu. Pomocou princípu najmenšieho účinku sme potom odvodili v druhej kapitole Lagrangeove rovnice pre lagranžián druhého rádu. V tejto kapitole sme si taktiež vyskúšali náš aparát na (ako sa ukázalo) dôležitom príklade Paisovho-Uhlenbeckovho oscilátora. V tretej kapitole sme zovšeobecnili naše výsledky pre všeobecný lagranžián k-teho rádu a sformulovali podmienku nedegenerovanosti takéhoto lagranžiánu. V poslednej kapitole prvej časti sme sa pokúsili prejsť od Lagrangeových rovníc k rovniciam prvého rádu, čo sa nám aj podarilo, a to tak, že sme dokonca uhádli súradnice, ktoré sa v ďalšej časti ukázali byť správnymi pre hamiltonovský formalizmus.

V druhej časti tejto práce sme sa úspešne pokúsili prejsť k hamiltonovskému formalizmu Lagrangeových rovníc odvodených v predošlej časti. V piatej kapitole sme začali pripomenutím si tohto prechodu pomocou Legendreovej transformácie v štandardnom prípade lagranžiánu prvého rádu a povedali sme si niečo aj o výhodách hamiltonovského formalizmu pre súčasné fyzikálne teórie. V šiestej kapitole sme potom pristúpili k hamiltonovskému formalizmu dynamiky danej lagranžiánom druhého rádu. Našli sme Ostrogradského kanonické súradnice a hamiltonián, pre ktoré platili Hamiltonove rovnice, ktoré udávali dynamiku sústavy ekvivalentne Lagrangeovým rovniciam. Vrátili sme sa k príkladu Paisovho-Uhlenbeckovho oscilátora a aplikovali hamiltonovský prístup naň. V siedmej kapitole sme potom zovšeobecnili naše výsledky na ľubovoľný rád lagranžiánu. Vo všetkých kapitolách sa pre prechod k hamiltonovskému formalizmu ukázalo postačujúce žiadať nedegenerovanosť lagranžiánu. V poslednej kapitole sme poukázali na fakt, že hamiltonián vyššieho rádu závisel lineárne od všetkých kanonických hybností okrem jednej. Táto lineárna závislosť viedla na Ostrogradského nestabilitu. Ukázali sme si túto nestabilitu aj na Paisovom-Uhlenbeckovom oscilátore. Na záver sme spomenuli dopad tejto závislosti na moderné teórie vo fyzike.

Ku koncu tejto práce už len spomeňme, že Ostrogradského nestabilita nepredstavuje jediný problém súčasných fyzikálnych teórií. Existujú aj ďalšie významné problémy. Sila Ostrogradského nestability sa však prejavuje v jej širokej aplikovateľnosti. Možno že sa nikdy nepodarí tento problém obísť. Teda nebude možné pracovať s lagranžiánmi vyších rádov v hamiltonovskom formalizme, tak aby sme boli schopní sa Ostrogradského nestabilite vyhnúť. V takom prípade treba hľadať riešenia problémov súčasných teórií inde.

Literatúra

[1] O'CONNOR, J. J. a ROBERTSON, E. F.. *Mikhail Vasilevich Ostrogradski.* MacTutor History of Mathematics. Dostupné na: http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk/Biographies/Ostrogradski.html

[2] FECKO, M.. *Diferenciálna geometria a Lieove grupy pre fyzikov.* Bratislava: Iris, 2008. 741 strán.

[3] FECKO, M.. *Rozšírený sylabus a príklady k prednáške Teoretická mechanika.* Updated 2010-09-20. 41 strán. Dostupné na: http://davinci.fmph.uniba.sk/ fecko1/teormech/primech11.pdf

[4] FECKO, M.. *Ostrogradsky theorem (from 1850).* Dostupné na: http://davinci.fmph.uniba.sk/∼ fecko1/referaty/stara_lesna_2015.pdf

[5] OSTROGRADSKY, M. V.. *Memoires sur les equations differentielles relatives au probleme des isoperimetres.* Mem. Acad. St. Petersburg **VI 4**, 1850. Strany 385-517.

[6] PAIS, A. a UHLENBECK, G. E.. *On Field Theories with Non-Localized Action.* Phys. Rev. 79 145-165 (1950). 21 strán.

[7] WHITTAKER, E. T.. *A treatise on the analytical dynamics of particles and rigid bodies.* 4th edition. Cambridge University Press, 1960. 444 strán.

[8] GELFAND, I. M. a FOMIN, S. V.. *Calculus of variations.* Englewood Cliffs, N. J.: PRENTICE-HALL, INC., 1963. 241 strán.

[9] WOODARD, R. D.. *Avoiding Dark Energy with 1/R Modifications of Gravity.* arXiv:astro-ph/0601672v2 (6 Feb 2006). 30 strán.

[10] WOODARD, R. D.. *How Far Are We from the Quantum Theory of Gravity?.* arXiv (gr-qc): 0907.4238v1. (24 Jul 2009). 106 strán.

[11] WOODARD, R. D.. *The Theorem of Ostrogradsky.* arxiv (hep-th): 1506.02210v1. (7 June 2015). 23 strán.

[12] FRANCAVIGLIA, M. a KRUPKA, D.. *The Hamiltonian formalism in higher order variational problems.* Annales de l'I. H. P., section A, tome 37, no 3, 295 (1982). 22 strán. Dostupné na: http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1982__37_3_295_0

[13] LAPLACE, P.S.. *A Philosophical Essay on Probabilities*. 229 strán. Dostupné na: http://bayes.wustl.edu/Manual/laplace_A_philosophical_essay_on_probabilities.pdf

[14] HESTENES, M. R.. *Calculus of variations and optimal control theory*. John Wiley & Sons, Inc., 1966. 416 strán.

[15] PIŠÚT, J., et al.. *Úvod do kvantovej mechaniky*. 2. vydanie. Bratislava: Alfa, 1983. 552 strán.