Hamiltonovy rovnice

Dosud jsme pro řešení pohybu soustav hmotných bodů používali Lagrangeovy rovnice druhého druhu. Bylo jich vždy tolik, kolik měl problém stupňů volnosti. V této kapitole odvodíme rovnice, jichž bude dvakrát tolik, ale zato půjde o rovnice prvního řádu. Seznámíme se také s pojmy, které jsou důležité v dalších partiích fyziky: *hamiltonián* v kvantové fyzice a *fázový prostor* ve statistické fyzice. A také trochu „nakoukneme pod pokličku“ zákonům zachování. Při tom všem budeme hodně pracovat s hybnostmi – ne ale s „obyčejnými“, tedy $m\vec{v}$, ale se *zobecněnými hybnosti*.

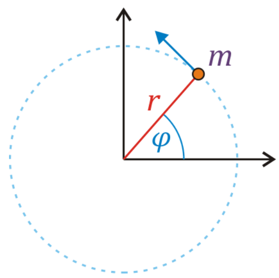
Zobecněné hybnosti

V kapitole 2 jsme pro popis polohy soustavy hmotných bodů zavedli zobecněné souřadnice q_j; jejich časovými derivacemi byly zobecněné rychlosti $\dot{q}_j$. V analogii s tím, co známe ze středoškolské fyziky a z úvodního kurzu mechaniky, by se mohlo zdát, že hybnosti zavedeme nějak jako $m\dot{q}_k$.[1] Ukazuje se však, že mnohem vhodnější je zavést ***zobecněné hybnosti*** jako

$$\boxed{p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\ ,} \tag{7.1}$$

kde L je lagrangián a $\dot{q}_j$ zobecněná rychlost. Říkáme, že jde o zobecněnou hybnost sdruženou[2] s příslušnou zobecněnou souřadnicí q_j.

Někdy může být zobecněná hybnost složkou normálního vektoru hybnosti, jak ho běžně užíváme. Například pro jeden volný hmotný bod (to znamená hmotný bod, na který nepůsobí žádné síly, takže jeho potenciální energie je $V = 0$) je $L = T - V = T = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right)$, takže zobecněná hybnost sdružená se souřadnicí x (označíme ji p_x) je $p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{d}{d\dot{x}}\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2\right) = m\dot{x}$.



Jindy ale nemusí mít zobecněná hybnost vůbec rozměr hybnosti, jak jsme na něj zvyklí (tedy v jednotkách kg·m/s). Například při pohybu hmotného bodu po kružnici (viz obrázek) je[3] $L = \frac{1}{2}m\left(r\dot{\varphi}\right)^2$, takže $p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{d}{d\dot{\varphi}}\left(\frac{1}{2}mr^2\dot{\varphi}^2\right) = mr^2\dot{\varphi}$. Tato veličina má jednotku kg·m²/s, takže rozhodně nemá rozměr hybnosti. Má ale rozměr momentu hybnosti – a když se na ni blíže podáváme, vidíme, že opravdu jde o moment hybnosti[4].

[1] To by ale nemuselo jít tak jednoduše, jak jsme to zde napsali. Co kdyby zobecněná souřadnice byla rozdílem souřadnic dvou různě hmotných bodů nebo nějakou ještě složitější kombinací – jakou hmotností bychom ji pak násobili?

[2] Resp. *kanonicky sdruženou,* k tomuto názvosloví se ještě vrátíme dále.

[3] Uvažujeme opět $V = 0$, i když výsledek by se nezměnil, ani kdyby se hmotný bod pohyboval třeba v homogenním tíhovém poli, takže by bylo $V = mgr\sin\varphi$ - vyzkoušejte si, že je tomu tak.

[4] Resp. složku momentu hybnosti do směru kolmého na rovinu, v níž se bod pohybuje. p_φ je součinem ramene r a hybnosti $m\left(r\dot{\varphi}\right)$ na toto rameno kolmé.

Malá odbočka: zákony zachování (a zmínka o teorému Noetherové)

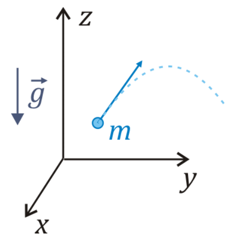
Z Lagrangeových rovnice druhého druhu,

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0, \tag{7.2}$$

plyne po dosazení (7.1) pro zobecněné hybnosti

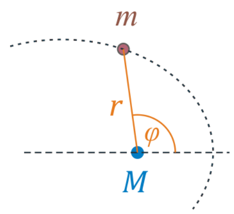
$$\frac{dp_j}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q_j}. \tag{7.3}$$

Důležitý případ nastává, **pokud lagrangián na některé zobecněné souřadnici nezávisí**, tedy když je $\frac{\partial L}{\partial q_j} = 0$. (Takovéto souřadnici říkáme ***cyklická***.) Potom z (7.3) plyne $\frac{dp_j}{dt} = 0$, takže $p_j = \text{konst.}$ To znamená, že příslušná **zobecněná hybnost se zachovává**.[5]



Příklad 1 (šikmý vrh):

Lagrangián pro pohyb hmotného bodu v homogenním tíhovém poli (viz obrázek) je $L = T - V = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right) - mgz$. Lagrangián nezávisí na souřadnicích x a y.[6] To znamená, že příslušné zobecněné hybnosti $p_x = m\dot{x}$ a $p_y = m\dot{y}$ se zachovávají.[7] Jde o kartézské složky „obyčejného“ vektoru hybnosti.



Příklad 2 (pohyb v poli centrální síly):

Pohyb hmotného bodu v poli nehybného silového centra je charakterizován lagrangiánem $L = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\right) - V(r)$.[8] Vidíme, že L nezávisí na φ (souřadnice φ je cyklická). To znamená, že se zachovává zobecněná hybnost $p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}$. Jak už víme z kapitoly 5, jde o složku momentu hybnosti.[9]

Všimněme si na uvedených příkladech ještě jedné věci:

V prvním příkladě se situace nezmění, pokud se posuneme ve směru osy x nebo y. (Když hodíme míček z nějakého místa a pak z místa o 3 metry dále ve směru osy x, letí vždy stejně; stejný je také lagrangián, pokud zaměníme x za $x + \Delta x$.) Můžeme říci, že situace je **symetrická vůči posunutí**.[10]

[5] Jinými slovy bychom mohli říci, že zobecněná hybnost sdružená s cyklickou souřadnicí je **integrálem pohybu**. (Rozmyslete si význam všech termínů v této větě a toho, co říká, aby pro vás nebyla jen změtí slov…)
[6] Tedy souřadnice x a y jsou cyklické.
[7] Fyzikálně je to jasné: ve vodorovných směrech nepůsobí žádná síla, tedy nic nemění vodorovné složky hybnosti.
[8] Srovnejte (5.16). Potenciální energie bodu $V(r)$ závisí jen na vzdálenosti od silového centra.
[9] Opět je to fyzikálně jasné: síla míří do centra, její moment je tudíž nulový a moment hybnosti se zachovává.
[10] Pojem symetrie zde užíváme v matematickém smyslu. Volně řečeno, když je něco symetrické vůči nějaké operaci resp. transformaci (zrcadlení, otočení v rovině kolem bodu, třeba o 60°, otočení kolem přímky, …) tak se to při dané operaci nemění. Běžně jsme zvyklí mluvit o zrcadlové symetrii, za symetrický vůči otočení o pevný úhel označíme třeba šestiúhelník - ale posunutí je také symetrií. Příkladem mohou být dvě rovnoběžky, když se posuneme v jejich směru, vše zůstane, jak bylo.

V druhém příkladě zůstane vše stejné při pootočení kolem silového centra o libovolný úhel. (Síla stále směřuje do centra, družice poletí stejně, pokud ji stejně vypustíte z Ekvadoru nebo libovolného jiného místa na rovníku; také lagrangián zůstává stejný při záměně φ za $\varphi + \Delta\varphi$.) Situace je **symetrická vůči otočení**.

Co je oběma příkladům společné? V obou existuje nějaká symetrie, v obou se nějaká veličina zachovává. Nejen v teoretické mechanice, ale i v dalších partiích fyziky se ukazuje, že tohle je velice obecný princip:

Symetrie souvisí se zákony zachování.

Toto tvrzení je obsahem slavného **teorému Noetherové**.[11] [12] Obecně se souvislost symetrie a zákonů zachování považuje za jeden z nejhlubších výsledků teoretické fyziky.

V příkladech výše jsme to jen naznačili, ale obecně platí:

- Se symetrií vůči posunutí, tedy s **homogenitou prostoru**, souvisí zákon **zachování hybnosti**.
- Se symetrií vůči otočení, tedy s **izotropií prostoru**, souvisí zákon zachování **momentu hybnosti**.
- Se symetrií vůči posunu v čase, tedy s **homogenitou času**, souvisí zákon **zachování energie**.[13]

I další zákony zachování ve fyzice souvisí se symetriemi, byť ne tak zjevnými, jako ve výše uvedených případech.

Bylo by jistě zajímavé pokračovat po naší odbočce o zákonech zachování; pojďme se ale vrátit zpět na cestu, která nás dovede k Hamiltonovým rovnicím.

Hamiltonián

Lagrangián, jak jsme poznali už dříve, je funkcí zobecněných souřadnic, zobecněných rychlostí a může případně explicite záviset na čase:

$$L = L\left(q_j, \dot{q}_j, t\right) \; . \tag{7.4}$$

V hamiltonovském formalismu budeme místo se zobecněnými rychlostmi pracovat se zobecněnými hybnostmi. Veličiny, s nimiž budeme dále pracovat, tedy budou funkcemi **zobecněných souřadnic** q_j, **zobecněných hybností** p_j a případně explicite i času t.

Jak od lagrangiánu přejít k něčemu, co bude záviset na q_j, p_j a t? Ukazuje se, že to lze předpisem[14]

$$\boxed{H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L \; .} \tag{7.5}$$

[15]

Veličinu H nazýváme ***Hamiltonova funkce*** nebo krátce ***hamiltonián***.

[11] Ten je ovšem formulován sofistikovaněji a matematicky exaktně, zde se ho jen zlehka dotýkáme.
[12] Emy Noetherová byla německá matematička, žačka Davida Hilberta.
[13] Tento případ se v našich příkladech neobjevil, zčásti se ho v této kapitole dotkneme dále.
[14] Obecně jde o tzv. *Legendrovu transformaci*. Vzpomeňte si na ni, až budete v termodynamice podobně přecházet mezi termodynamickými potenciály, například od vnitřní energie k volné energii, od vnitřní energie k entalpii nebo od volné energie (či od entalpie) ke Gibbsově funkci.(To jsou názvy, což? Vidíte, jak to máme v teoretické mechanice jednoduché, když jenom přecházíme od lagrangiánu k hamiltoniánu. ☺)
[15] Sčítáme přitom přes všechny stupně volnosti, *j* = 1, …, *r*; tento rozsah už dále většinou nebude vypisovat.

Jak poznáme, že hamiltonián (7.5) závisí na zobecněných hybnostech a ne na zobecněných rychlostech? Zjistíme to z totálního diferenciálu výrazu (7.5).[16] Je

$$dH = d\left(\sum_j p_j \dot{q}_j - L\right) = \sum_j d\left(p_j \dot{q}_j\right) - dL \ . \tag{7.6}$$

Totální diferenciál součinu je $d\left(p_j \dot{q}_j\right) = \left(dp_j\right)\dot{q}_j + p_j\, d\dot{q}_j$. Totální diferenciál lagrangiánu (7.4) je $dL = \sum_j \left(\partial L/\partial q_j\right) dq_j + \sum_j \left(\partial L/\partial \dot{q}_j\right) d\dot{q}_j + \left(\partial L/\partial t\right) dt$. Dosazení do (7.6) dá

$$\begin{aligned} dH &= \sum_j d\left(p_j \dot{q}_j\right) - dL = \sum_j \left(\dot{q}_j\, dp_j + p_j\, d\dot{q}_j - \frac{\partial L}{\partial q_j} dq_j - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j\right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt = \\ &= \sum_j \left(\dot{q}_j\, dp_j - \frac{\partial L}{\partial q_j} dq_j\right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \quad , \tag{7.7}$$

kde jsme využili toho, že $\partial L/\partial \dot{q}_j = p_j$, viz (7.1). V diferenciálu hamiltoniánu se vyskytují jen diferenciály dq_j, dp_j a dt, takže jsme dokázali, že hamiltonián je opravdu funkcí zobecněných proměnných, zobecněných hybností a případně času:

$$\boxed{H = H\left(q_j, p_j, t\right) \ .} \tag{7.8}$$

Hamiltonovy kanonické rovnice

Pojďme ještě zůstat u totálních diferenciálů. Ze vztahu (7.8) můžeme napsat totální diferenciál hamiltoniánu přímo jako

$$dH = \sum_j \left(\frac{\partial H}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial H}{\partial p_j} dp_j\right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt \ . \tag{7.9}$$

Totální diferenciál hamiltoniánu jsme ale výše už spočetli z definičního vztahu (7.5), výsledkem byl (7.7). Když v něm vyjádříme $\partial L/\partial q_j$ pomocí Lagrangeových rovnic 2. druhu (7.2)[17], dostaneme

$$dH = \sum_j \left(-\dot{p}_j\, dq_j + \dot{q}_j\, dp_j\right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \ . \tag{7.10}$$

Vztahy (7.9) a (7.10) ovšem určují *tentýž* totální diferenciál.[18] To znamená, že členu u stejných diferenciálů dq_j, dp_j se v obou výrazech musí rovnat[19]. Musí tedy platit:

[16] Obecně to, na čem závisí funkce, můžeme poznat z jejího totálního diferenciálu. Například pro funkci dvou proměnných je $df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy$. Vidíme, že v df se vyskytují diferenciály dx a dy proměnných x a y. Je tedy jasné, že jde o funkci proměnných x a y, $f = f\left(x, y\right)$, a nikoli třeba proměnné z (diferenciál dz se v diferenciálu df nevyskytuje).

[17] Tohle je hrozně důležitý krok – do našich úvah zde zahrnujeme pohybové rovnice!

[18] Jde o diferenciál stejné funkce H.

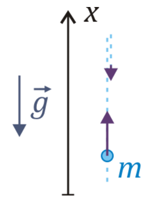
[19] Členy u dt také, k těm se ještě vrátíme.

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{p}_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} \\ \dot{q}_j &= \frac{\partial H}{\partial p_j} \end{aligned} \quad , \qquad j = 1, \ldots, r} \tag{7.11}$$

A právě tohle už jsou kýžené **Hamiltonovy kanonické rovnice**.[20] Je jich 2*r*, tedy dvakrát víc než stupňů volnosti resp. než Lagrangeových rovnic druhého druhu. Jde o obyčejné diferenciální rovnice *prvního řádu*, navíc „rozřešené vzhledem k derivacím“.[21] Hamiltonovy rovnice tedy přímo udávají rychlost změny proměnných q_j a p_j.

Při pohledu na Hamiltonovy rovnice nás může zaujmout, jak „symetricky“ v nich vystupují zobecněné souřadnice q_j a zobecněné hybnosti p_j. Mohlo by nás to přivést k myšlence, jestli náhodou nejsou tyto veličiny vlastně rovnoprávné, a zda je všechny (všech 2*r*) nevzít jako souřadnice popisující pohyb soustavy hmotných bodů. K této myšlence se ještě vrátíme, nejdříve si však Hamiltonovy rovnice a jejich řešení budeme ilustrovat na dvou příkladech.

Příklad: vrh svislý vzhůru



Vybereme si příklad co nejjednodušší, jehož řešení samozřejmě známe: vrh svislý vzhůru, viz obrázek. Lagrangián našeho problému je

$$L = T - V = \tfrac{1}{2} m \dot{x}^2 - mgx \,, \tag{7.12}$$

zobecněnou souřadnicí je svislá souřadnice *x*. S ní sdružená zobecněná hybnost je

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \ . \tag{7.13}$$

Hamiltonián našeho problému určíme z (7.5) jako

$$H = p_x \dot{q}_x - L = p_x \dot{x} - L = p_x \dot{x} - \left(\tfrac{1}{2} m \dot{x}^2 - mgx \right). \tag{7.14}$$

Teď ale přijde důležitý moment: V hamiltoniánu *nesmí zůstat zobecněná rychlost* $\dot{x}$! Musíme ji vyjádřit ze (7.13) jako $\dot{x} = p_x / m$; po dosazení do (7.14) pak dostaneme

$$H = p_x \dot{x} - L = p_x \frac{p_x}{m} - \left(\tfrac{1}{2} m \left(\frac{p_x}{m} \right)^2 - mgx \right) = \frac{p_x^2}{2m} + mgx \ . \tag{7.15}$$

Derivace, které budeme potřebovat na pravých stranách Hamiltonových rovnic, jsou $\dfrac{\partial H}{\partial x} = mg$ a $\dfrac{\partial H}{\partial p_x} = \dfrac{p_x}{m}$. Hamiltonovy rovnice popisující vrh svislý vzhůru jsou

[20] Krátce jen *Hamiltonovy rovnice*. Celému formalismu se říká *hamiltonovský formalismus* nebo také *kanonický formalismus*. Termín „kanonický“ podle Slovníku cizích slov znamená „vztahující se ke kánonu“ nebo „chovající se podle kánonu“. (To je pěkná názorné vysvětlení, což?) „Kánon“ slovník vykládá jako „pravidlo“, „soubor zásad“ a připomíná také „kanonické církevní právo“. Vcelku si asi tedy představíme něco „co by se dalo tesat do kamene“. Je vidět, že fyzikové, kteří formalismus takto nazvali, ho zjevně chovali ve značné vážnosti.

[21] Výrazy na pravé straně rovnic (7.11) jsou funkcemi q_j a p_j. Jediné derivace podle času (tedy podle nezávisle proměnné) jsou na levé straně Hamiltonových rovnic.

$$\dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad , \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} ,$$

a konkrétně po dosazení derivací hamiltoniánu

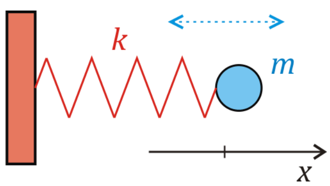
$$\begin{aligned} \frac{dp_x}{dt} &= -mg \\ \frac{dx}{dt} &= \frac{p_x}{m} \end{aligned} \quad . \tag{7.16}$$

Chceme-li, můžeme rovnice (7.16) vyřešit: Integrací první rovnice podle času okamžitě dostáváme $p_x = -mgt + p_0$, po dosazení do druhé rovnice pak integrací dostaneme $x = -\frac{1}{2}gt^2 + (p_0/m)t + x_0$, tedy výraz, o němž víme, že popisuje časovou závislost výšky hmotného bodu při svislém vrhu. Problém jsme tedy vyřešili správně. ☺ [22]

Samozřejmě, na takto jednoduchém příkladu je užívání Hamiltonových rovnic jen zbytečnou komplikací.[23] Ovšem ve složitějších případech se často hamiltonovský formalismus využívá velmi intenzivně.[24]

Ještě jeden příklad: kulička na pružině (harmonický oscilátor)

Kulička hmotnosti m kmitá na pružině tuhosti k, viz obrázek. Souřadnicí, kterou budeme používat, je x, tedy výchylka z rovnovážné polohy. Potenciální energie kuličky je $V = \frac{1}{2}kx^2$, kinetická $T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$, takže lagrangián je $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2$.



Zobecněná hybnost je $p_x = m\dot{x}$, podobně jako tomu bylo v předchozím příkladě. Hamiltonián je tedy

$$H = p_x\dot{x} - L = p_x\frac{p_x}{m} - \left(\tfrac{1}{2}m\left(\frac{p_x}{m}\right)^2 - \tfrac{1}{2}kx^2\right) = \frac{p_x^2}{2m} + \tfrac{1}{2}kx^2 . \tag{7.17}$$

Hamiltonovy rovnice vyjdou konkrétně

$$\begin{aligned} \frac{dp_x}{dt} &= -kx \\ \frac{dx}{dt} &= \frac{p_x}{m} \end{aligned} \quad .$$

Jak se můžeme přesvědčit dosazením, řešením je

$$x = A\cos(\omega t + \varphi_0) \quad , \quad p_x = -(A\omega m)\sin(\omega t + \varphi_0) , \tag{7.18}$$

kde $\omega = \sqrt{k/m}$.

[22] Připojme ještě jednu poznámku: Může být zajímavé uvědomit si, že první z rovnic (7.16) je vlastně druhý Newtonův zákon. ($-mg$ je x-ová složka síly.) Tohle nám může pomoci pamatovat si, ve které z Hamiltonových rovnic se píše znaménko mínus; ještě se k tomu vrátíme.

[23] Navíc druhá z rovnic je vlastně jen přepisem vztahu mezi rychlostí a hybností, který jsme již v průběhu konstrukce hamiltoniánu použili, takže můžeme mít dojem, že vlastně touto rovnicí nedostáváme nic nového.

[24] Například otevřete-li nějakou knihu (s výjimkou populárních), která se věnuje deterministickému chaosu, nebuďte překvapeni, když na hamiltonovský formalismus (a to i na jeho pokročilejší části, ke kterým my ani nedojdeme), narazíte hned na první či druhé stránce.

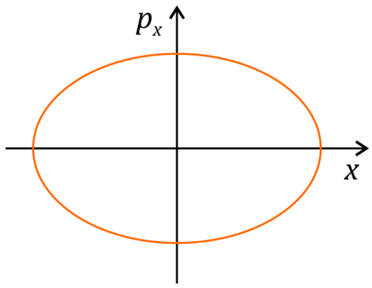
Fázový prostor

V kapitole 2 jsme zavedli konfigurační prostor, jehož souřadnicemi bylo $3N$ souřadnic všech částic. U soustav hmotných bodů s vazbami se často jako konfigurační prostor označuje prostor, jehož souřadnicemi jsou *zobecněné souřadnice*. Počet jeho dimenzí je r, tedy počet stupňů volnosti. Můžeme říci, že v takovémto konfiguračním prostoru jsme počítali pohyb soustavy hmotných bodů pomocí Lagrangeových rovnic druhého druhu.

V Hamiltonových rovnicích (7.11) jsou ovšem proměnnými jak zobecněné souřadnice, tak zobecněné hybnosti – a oboje tyto proměnné vystupují v rovnicích vlastně rovnocenně. Můžeme si tedy představit prostor, jehož souřadnicemi jsou jak zobecněné souřadnice q_j, tak zobecněné hybnosti p_j. Takovýto vícedimenzionální prostor se při popisu chování soustavy hmotných bodů opravdu používá, říkáme mu **fázový prostor**. Fázový prostor má 2r rozměrů, tedy počet jeho rozměrů je roven dvojnásobku počtu stupňů volnosti.[25]

Fázový prostor je velmi užitečným nástrojem například ve statistické fyzice, ale také například v již zmíněné teorii chaosu. My si jej budeme ilustrovat na jednom z nejjednodušších příkladů – na případu harmonického oscilátoru, který jsme si připomněli o stránku výše. Jde o systém s jedním stupněm volnosti, takže jeho fázový prostor bude dvojrozměrný.[26] Souřadnicemi tohoto fázového prostoru jsou x a p_x. Ze vztahů (7.18) pro časovou závislost těchto proměnných dostaneme

$$\frac{x^2}{A^2} + \frac{p_x^2}{(A\omega m)^2} = 1 \; . \tag{7.19}$$



To znamená, že křivkou, která ve fázovém prostoru popisuje pohyb harmonického oscilátoru (kuličky na pružině) je elipsa. V tomto grafu – v trajektorii pohybu ve fázovém prostoru – nemáme přímou informaci o časovém vývoji, jen o hodnotách souřadnice a hybnosti a o tom, jak vzájemně souvisejí. Pro stejný oscilátor ale jiné počáteční podmínky by trajektorií byla jiná elipsa.[27] Tyto elipsy by se přitom nikde neprotínaly. Vybereme-li si totiž bod v daném fázovém prostoru, určíme tím jednoznačně polohu a hybnost hmotného bodu – tedy vlastně počáteční podmínky. A jsou-li zadány parametry oscilátoru (tuhost pružiny a hmotnost kuličky), pak počáteční podmínky jednoznačně určují celý budoucí i minulý vývoj systému, tedy celou trajektorii ve fázovém prostoru.

To je velký rozdíl oproti konfiguračnímu prostoru. Zadáním bodu v konfiguračním prostoru jsme určili polohy hmotných bodů. Vůbec tím nebyly zadány zobecněné rychlosti, ty mohly být libovolné. Proto každým bodem konfiguračního prostoru může procházet libovolně mnoho křivek charakterizujících pohyb soustavy hmotných bodů. Naproti tomu ve fázovém prostoru každý bod určuje celou křivku, proto jedním bodem může procházet jen jediná trajektorie.[28]

[25] Když jsme výše napsali „můžeme si představit“, nemysleli jsme ovšem, že si lze takový prostor představit názorně. Vždyť například v případě soustavu dvou hmotných bodů (bez vazeb) jde o šestirozměrný prostor. Naše představa je tedy jen velmi abstraktní.
[26] To nám umožní znázornit jej ve dvojrozměrném grafu a získat tak přece jen trochu názorný obrázek.
[27] Pro větší amplitudu by elipsa byla vně té, která je vyznačena na obrázku, pro menší amplitudu by byla uvnitř.
[28] Tohle platí obecně, pokud vazby ani potenciální energie explicite nezávisejí na čase.

Hamiltonián a energie

U řady fyzikálních veličin je užitečné podívat se, jak se mění s časem. Jak je tomu s hamiltoniánem? Jinými slovy, jak se mění funkce $H = H\left(q_j, p_j, t\right)$ při pohybu soustavy hmotných bodů, tedy při časovém vývoji daném Hamiltonovými rovnicemi (7.11)? O rychlosti změny vypovídá derivace podle času[29]

$$\frac{dH}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{dq_j}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{dp_j}{dt} \right) + \frac{\partial H}{\partial t} \ . \tag{7.20}$$

Při časovém vývoji ovšem platí dle rovnic (7.11): $\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j}$ a $\frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$. Dosazení do (7.20) dá:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j} \right) + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \ . \tag{7.21}$$

Totální derivace hamiltoniánu podle času při časovém vývoji systému (soustavy hmotných bodů) se tedy rovná parciální derivaci podle času.[30] Navíc, porovnáme-li ve výše uvedených vztazích (7.9) a (7.10) členy u dt (nebo derivujeme-li (7.5) parciálně podle času), zjistíme, že platí

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \ . \tag{7.22}$$

Po dosazení do (7.21) dostaneme konečně

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t} \ . \tag{7.23}$$

Pro $\partial L/\partial t = 0$ odtud plyne, že $dH/dt = 0$, tedy $H = \mathrm{konst.}$ To znamená, že

pokud lagrangián systému nezávisí explicite na čase, hamiltonián se zachovává.

Znamená to, že máme nějakou další zachovávající se mechanickou veličinu?[31] To by bylo krásné, protože takovéto veličiny lze dobře využít při řešení pohybových rovnic.[32] Ovšem podíváme-li se blíže na konkrétní příklady, které jsme řešili, speciálně na to, jaký tam vyšel hamiltonián (viz (7.15) a (7.17)), vidíme, že hamiltonián H byl v obou případech roven celkové energii soustavy. To v nás může vzbudit podezření, že může jít o obecnější vlastnost.

Skutečně je tomu tak – alespoň v případě, kdy vazby explicite nezávisejí na čase. Dokážeme to pro případ holonomních skleronomních vazeb, tedy v případě, kdy $x_i = x_i\left(q_j(t)\right)$.[33] V tom případě je (viz (2.16))

---

[29] Jde o totální derivaci podle času funkce $H = H(q_j(t),\ p_j(t),\ t)$. Do této časové změny se tedy promítá nejen explicitní závislost H na čase (třeba kdyby šlo o částice ve vnějším elektrickém poli a s časem bychom měnili intenzitu a tedy i potenciál tohoto pole), ale také to, že se s časem mění polohy a hybnosti bodů.

[30] To zdaleka není samozřejmost! Jde o důsledek Hamiltonových rovnic.

[31] Řečeno poněkud „odbornějšími termíny“, že máme nějaký další *integrál pohybu*?

[32] Vzpomeňte třeba, jak se v úvodním kurzu mechaniky pomocí zákonů zachování energie a momentu hybnosti řešila Keplerova úloha.

[33] Čili x_i nezávisí explicite na čase.

$$\dot{x}_i = \sum_j \frac{\partial x_i}{\partial q_j}\dot{q}_j \quad . \tag{7.24}$$

Kinetická energie soustavy hmotných bodů je

$$\begin{aligned} T &= \sum_{i=1}^{3N} \tfrac{1}{2} m_i \dot{x}_i^{\,2} = \tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{3N}\left(m_i \sum_j \frac{\partial x_i}{\partial q_j}\dot{q}_j \sum_k \frac{\partial x_i}{\partial q_k}\dot{q}_k \right) = \\ &= \tfrac{1}{2}\sum_j \sum_k \left(\sum_{i=1}^{3N} m_i \frac{\partial x_i}{\partial q_j}\frac{\partial x_i}{\partial q_k}\right)\dot{q}_j \dot{q}_k = \tfrac{1}{2}\sum_j\sum_k M_{jk}\,\dot{q}_j\dot{q}_k \end{aligned} \tag{7.25}$$

Zde jsme označili M_{jk} výrazy, které závisejí na zobecněných souřadnicích, ale nikoli na zobecněných rychlostech. Přitom platí, že $M_{jk} = M_{kj}$. Lagrangián je

$$L = T - V = \tfrac{1}{2}\sum_j\sum_k M_{jk}\,\dot{q}_j\dot{q}_k - V \; . \tag{7.26}$$

Zobecněnou hybnost můžeme odsud vyjádřit jako

$$\begin{aligned} p_l &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_l}\left(\tfrac{1}{2}\sum_j\sum_k M_{jk}\,\dot{q}_j\dot{q}_k \right) = \tfrac{1}{2}\sum_j\sum_k M_{jk}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_l}\left(\dot{q}_j\dot{q}_k\right) = \tfrac{1}{2}\sum_j\sum_k M_{jk}\left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \dot{q}_l}\dot{q}_k + \dot{q}_j \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}_l}\right) = \\ &= \tfrac{1}{2}\sum_j\sum_k M_{jk}\left(\delta_{jl}\dot{q}_k + \dot{q}_j\delta_{kl}\right) = \tfrac{1}{2}\sum_k M_{lk}\dot{q}_k + \tfrac{1}{2}\sum_j M_{jl}\dot{q}_j = \sum_k M_{lk}\dot{q}_k \end{aligned} \tag{7.27}$$

Hamiltonián je tedy (po úpravách a s využitím (7.25)):

$$H = \sum_l p_l \dot{q}_l - L = \sum_l\sum_k M_{lk}\dot{q}_k\dot{q}_l - L = 2T - L = 2T - \left(T - V\right) = T + V \quad . \tag{7.28}$$

To znamená, že **hamiltonián je roven celkové energii**.[34]

V hamiltoniánu jsme tedy neobjevili nějakou novou zachovávající se veličinu. Na druhou stranu jsme objevili, jak hamiltonián souvisí s energií. A až v kvantové mechanice narazíme na to, že se operátoru energie[35] říká hamiltonián, budeme vědět, odkud se toto pojmenování vzalo. Takže jsme se alespoň trochu dotkli souvislost teoretické mechaniky a kvantové mechaniky.[36]

Navíc, skutečnost, že hamiltonián je (za uvedených podmínek) roven celkové energii, nám může pomoci pamatovat si nebo si rychle odvodit, proč je záporné znaménko právě v první z Hamiltonových rovnic (7.11). Je-li zobecněnou souřadnicí obyčejná kartézská souřadnice *x*, je zobecnění hybnost obyčejnou složkou hybnosti a dp_x/dt tedy musí být rovno *x*-ové složce síly, čili F_x. Pro konzervativní síly ovšem platí $F_x = -\partial V/\partial x$. A právě tohle vyjde, když je na pravé straně rovnice $-\partial H/\partial x$ (protože $H = T + V$).

[34] Pozor, toto jsme dokázali v případě holonomních skleronomních vazeb, pro vazby závislé na čase se hamiltonián může od celkové energie lišit.

[35] Proč jsou v kvantové fyzice veličinám přiřazeny operátory a jaký to má význam, to už nepatří do teoretické mechaniky. ☺

[36] Ono je těch souvislostí víc, například takzvané Poissonovy závorky v teoretické mechanice mají svou paralelu v kvantové mechanice (komutátory operátorů příslušných fyzikálních veličin), ale to už je mimo rámec tohoto textu.