Inleiding tot de theoretische fysica

Inhoud

- Verdieping klassieke Newtoniaanse mechanica
- Klassiek = niet-relativistisch, niet-quantum
- Twee alternatieve formuleringen van Newtoniaanse mechanica: in principe geen nieuwe fysica, wel nieuwe inzichten om mechanische concepten te gebruiken en te veralgemenen naar andere velden.
- Lagrange formalisme $\rightarrow$ klassieke en quantum veldentheorie
- Hamilton formalisme $\rightarrow$ quantum mechanica, statistische mechanica
- Toepassingen

Inhoud

- Lessen gebaseerd op ”Classical Mechanics” van Goldstein: Classical Mechanics - Third Edition (Goldstein, Poole and Safko): ISBN 0321-188977
- Klassiek handboek, dat ook zijn nut houdt in hogere jaren.
- We gaan slechts een fractie van het materiaal zien in de lessen. Enkel het materiaal op de slides moet gekend zijn: cursus = slides.
- Het is perfect mogelijk om het zonder handboek te doen, enkel uitgaand van de slides. Echter...

Inhoud

Wat zien we:

- Mathematische bagage oppikken.
- Hoofdstuk 1: Mechanica van 1 en meerdere deeltjes: heropfrissing/ Gebonden beweging/ Principe van d'Alembert/ Lagrange vergelijkingen
- Hoofdstuk 2: Variationeel principe en Lagrange vergelijkingen/ Behouden grootheden.
- Hoofdstuk 3: Centrale krachten
- Hoofdstuk 4-5: Beweging van starre lichamen.
- Hoofdstuk 6: Normaaltrillingen
- Hoofdstuk 8: De vergelijkingen van Hamilton.

G2.1: Principe van Hamilton

- We hebben een systeem met N deeltjes, beschreven aan de hand van $3N$ Cartesische coördinaten, eventueel onderworpen aan n_b holonome bindingen die het aantal vrijheidsgraden reduceren tot $n_q = 3N - n_b$. In elk geval kan de toestand van het systeem beschreven worden met n_q veralgemeende coördinaten $(q_1, .., q_{n_q})$, een punt in een n_q-dimensionale ruimte die de *configuratieruimte* wordt genoemd.
- Onder invloed van de krachten evolueren de veralgemeende coördinaten in de tijd, m.a.w. het punt in de configuratieruimte $(q_1(t), .., q_{n_q}(t))$ beschrijft een *baan* of een *pad*, $\{q_k(t)\}$ in de configuratieruimte. Maar welk pad wordt gevolgd tussen een beginconfiguratie op t_1, $\{q_k(t_1)\}$, en een eindconfiguratie op t_2, $\{q_k(t_2)\}$?

G2.1: Principe van Hamilton

- De theoretische discussie blijft beperkt tot systemen met holonome bindingen en conservatieve toegepaste krachten (dit zijn de ”gegeven” krachten die geen reactiekrachten zijn op bindingen). Er zijn veel tussenvormen en speciale gevallen mogelijk, maar een behandeling is niet zinvol in een basis cursus (en kan eventueel worden uitgespit in latere jaren).
- We tonen aan dat het systeem evolueert tussen t_1 en t_2 zó, dat de actie-integraal

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L\, dt \tag{94}$$

met L de Lagrangiaan, extremaal wordt voor het fysisch gerealiseerde pad. Dit vergt enige uitleg.

G2.2: Variatie analyse

- Bekijk een (gladde) functie $y(x)$ in het 2D xy vlak. De enige voorwaarde voor $y(x)$ is dat ze een beginpunt (x_1, y_1) en een eindpunt (x_2, y_2) verbindt, m.a.w.

$$y(x_1) = y_1 \quad \text{en} \quad y(x_2) = y_2 \tag{95}$$

  Verder zal met $\dot{y}(x)$ de afgeleide functie $\frac{dy}{dx}(x)$ bedoeld worden.
- Er zijn uiteraard veel dergelijke paden $y(x)$ tussen (x_1, y_1) en (x_2, y_2) mogelijk.
- Gegeven een functie van drie variabelen $f(y, \dot{y}, x)$ dan kan voor elk pad $y(x)$ de volgende integraal berekend worden:

$$J = \int_{x_1}^{x_2} dx\, f(y(x), \dot{y}(x), x) \tag{96}$$

  De waarde van de integraal hangt duidelijk van het pad $y(x)$ af. De vraag is dan voor welk pad de integraal *stationair* wordt.

G2.2: Variatie analyse

- De integraal J is stationair voor een pad $y(x)$ als voor een kleine vervorming van het pad, de waarde van de integraal niet verandert (tot op 1e orde in de kleine vervorming). De integraal is dan extremaal (minimaal of maximaal). Mathematisch kan dit als volgt worden uitgedrukt:
- Stel dat $y(x)$ het pad is waarvoor J stationair wordt. Bekijk een familie van paden $y(x, \alpha)$, geparametrizeerd aan de hand van een parameter α:

$$y(x, \alpha) = y(x) + \alpha\eta(x) \tag{97}$$

Hierbij is $\eta(x)$ een arbitraire functie, behalve dat

$$\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0 \tag{98}$$

zodat elk pad $y(x, \alpha)$ de punten (x_1, y_1) en (x_2, y_2) verbindt.
- Het is duidelijk dat een pad $y(x, \alpha)$, voor voldoende kleine α, in de buurt ligt van $y(x)$, en ermee samenvalt als $\alpha = 0$.

G2.2: Variatie analyse

- De integraal J kan geëvalueerd worden voor alle paden $y(x,\alpha)$, en wordt zo een functie van α,

$$J(\alpha) = \int_{x_1}^{x_2} dx\, f(y(x,\alpha), \dot{y}(x,\alpha), x) \tag{99}$$

- Het stationair zijn van de integraal voor $y(x)$, m.a.w. voor $\alpha = 0$, vereist dan dat

$$\left(\frac{dJ}{d\alpha}\right)_{\alpha=0} = 0 \tag{100}$$

- De afgeleide naar α kan door het integratieteken geschoven worden,

$$\frac{dJ}{d\alpha} = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \frac{d}{d\alpha} f(y(x,\alpha), \dot{y}(x,\alpha), x) \tag{101}$$

en werkt in op de α-afhankelijkheid in het 1e argument $y(x,\alpha)$ en het 2e argument $\dot{y}(x,\alpha)$ van f.

G2.2: Variatie analyse

- Kettingregel toepassen

$$\frac{dJ}{d\alpha} = \int_{x_1}^{x_2} dx \left\{ \left[\frac{\partial f}{\partial y}(y(x,\alpha), \dot{y}(x,\alpha), x) \right] \frac{d}{d\alpha} y(x,\alpha) + \left[\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}(y(x,\alpha), \dot{y}(x,\alpha), x) \right] \frac{d}{d\alpha} \dot{y}(x,\alpha) \right\} \quad (102)$$

- Gelet op de definitie in vgl.(97), is

$$\frac{d}{d\alpha} y(x,\alpha) = \eta(x) \text{ en } \frac{d}{d\alpha} \dot{y}(x,\alpha) = \dot{\eta}(x) \quad (103)$$

Tevens moet de afgeleide $\frac{dJ}{d\alpha}$ geëvalueerd worden voor $\alpha = 0$ zodat, in het argument van $\frac{\partial f}{\partial y}$ en $\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}$, $y(x, \alpha = 0) = y(x)$ en $\dot{y}(x, \alpha = 0) = \dot{y}(x)$ kan gesteld worden.

G2.2: Variatie analyse

- Hiermee wordt

$$\left(\frac{dJ}{d\alpha}\right)_{\alpha=0} = \int_{x_1}^{x_2} dx \left\{ \left[\frac{\partial f}{\partial y}(y(x), \dot{y}(x), x)\right] \eta(x) + \left[\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}(y(x), \dot{y}(x), x)\right] \dot{\eta}(x) \right\} \tag{104}$$

- In de tweede term passen we partiële afleiding toe op het product $h(x)\dot{\eta}(x)$, waarbij

$$h(x) = \frac{\partial f}{\partial \dot{y}}(y(x), \dot{y}(x), x) \tag{105}$$

Er geldt

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\, h(x) \frac{d\eta}{dx}(x) = h(x_2)\eta(x_2) - h(x_1)\eta(x_1) - \int_{x_1}^{x_2} dx\, \eta(x) \frac{dh}{dx}(x) \tag{106}$$

Gelet op vgl.(98) verdwijnen de eerste twee termen in (106).

G2.2: Variatie analyse

- Finaal kan vgl.(104) herschreven worden als

$$\left(\frac{dJ}{d\alpha}\right)_{\alpha=0} = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \eta(x) \left\{ \left[\frac{\partial f}{\partial y}(y(x), \dot{y}(x), x)\right] - \frac{d}{dx}\left[\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}(y(x), \dot{y}(x), x)\right]\right\} \tag{107}$$

- De voorwaarde voor stationariteit was dat de integraal in vgl.(107) nul is, en dit moet gelden voor een *arbitraire* functie $\eta(x)$ (die voldoet aan vgl.(98). Dit kan enkel als de factor tussen $\{\}$ in het integrandum verdwijnt over het integratie-interval.
- We zien dus dat het pad $y(x)$ de integraal in vgl.(96) stationair maakt, als $y(x)$ voldoet aan de differentiaalvergelijking

$$\frac{\partial f}{\partial y}(y, \dot{y}, x) = \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}(y, \dot{y}, x)\right) \tag{108}$$

G2.2: Variatie analyse

- De differentiaalvergelijking (108) wordt de *Euler-Lagrange* vergelijking genoemd, geassociëerd met het variationeel probleem ”vind het pad dat de integraal in vgl.(96) extremaal maakt”.
- Het is duidelijk dat de Lagrangevergelijkingen dezelfde structuur hebben, en dus ook kunnen afgeleid worden puur op basis van een variationeel principe.
- Als toepassing bekijken we een eenvoudig voorbeeld (waar we vooraf de oplossing weten), nl. het kortste pad tussen twee punten.
- Heel krachtige techniek, bvb. het brachistochroon probleem. Misschien in een oefeningenles.

G2.2: Variatie analyse

- De infinitesimale afstand langs een curve $y(x)$ wordt gegeven door

$$ds = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} = dx\sqrt{1 + (\frac{dy}{dx})^2} = dx\sqrt{1 + (\dot{y})^2} \quad (109)$$

- De afstand van het pad $y(x)$ tussen (x_1, y_1) en (x_2, y_2) wordt dan

$$I = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{1 + (\dot{y})^2} \quad (110)$$

- Dit is een probleem van het type in vgl.(96), met $f(y, \dot{y}, x) = \sqrt{1 + (\dot{y})^2}$. We hebben in dit geval

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 0 \;\text{ en }\; \frac{\partial f}{\partial \dot{y}} = \frac{\dot{y}}{\sqrt{1 + (\dot{y})^2}} \quad (111)$$

G2.2: Variatie analyse

- De corresponderende Euler-Lagrange vergelijking wordt

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\dot{y}}{\sqrt{1+(\dot{y})^2}}\right)=0 \tag{112}$$

- Bijgevolg moet $\left(\frac{\dot{y}}{\sqrt{1+(\dot{y})^2}}\right)$ constant zijn, wat impliceert dat $\dot{y}$ constant is, dus $y(x)=ax+b$ is lineair.
- Uitdrukken dat $y(x_1)=y_1$ en $y(x_2)=y_2$ bepaalt a en b, en de oplossing is het lijnstuk door de twee punten,

$$y(x)=\frac{y_2(x-x_1)+y_1(x_2-x)}{x_2-x_1} \tag{113}$$

G2.3: Lagrange vergelijking uit het principe van Hamilton

- De uitbreiding van het probleem in vgl.(96) tot meerdimensionale functies verloopt analoog. I.p.v. $y(x)$ hebben we nu een $\mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ functie $(y_1(x), y_2(x), .., y_n(x))$ als pad dat een beginconfiguratie $(y_1(x_1), y_2(x_1), .., y_n(x_1))$ voor $x = x_1$ verbindt met een eindconfiguratie $(y_1(x_2), y_2(x_2), .., y_n(x_2))$ voor $x = x_2$.
- We vragen ons opnieuw af onder welke voorwaarden het pad $(y_1(x), y_2(x), .., y_n(x))$ een stationaire waarde oplevert voor een integraal van het type

$$J = \int_{x_1}^{x_2} dx\, f(y_1(x), .., y_n(x), \dot{y}_1(x), .., \dot{y}_n(x), x) \tag{114}$$

G2.3: Lagrange vergelijking uit het principe van Hamilton

- Voer terug een familie paden in rond $(y_1(x), y_2(x), .., y_n(x))$ aan de hand van de parametrisatie

$$y_i(x, \alpha) = y_i(x) + \alpha\eta_i(x), \;\; \text{met} \;\; i = 1, 2, ..n \qquad (115)$$

  De $\eta_i(x)$ zijn arbitraire functies, behalve dat $\eta_i(x_1) = \eta_i(x_2) = 0$.
- Evaluatie van de integraal met het pad $(y_1(x, \alpha), y_2(x, \alpha), .., y_n(x, \alpha))$ levert een functie van α

$$J(\alpha) = \int_{x_1}^{x_2} dx\, f(y_1(x, \alpha), .., y_n(x, \alpha), \dot{y}_1(x, \alpha), .., \dot{y}_n(x, \alpha), x) \quad (116)$$

G2.3: Lagrange vergelijking uit het principe van Hamilton

- Stationariteit van (114) voor het pad $(y_1(x), y_2(x), .., y_n(x))$ betekent dat

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{dJ}{d\alpha}\right)_{\alpha=0} \\ &= \int_{x_1}^{x_2} dx \left(\sum_i \frac{\partial f}{\partial y_i}\eta_i + \sum_i \frac{\partial f}{\partial \dot{y}_i}\dot{\eta}_i\right) \end{aligned} \tag{117}$$

- De termen in het integrandum met $\frac{\partial f}{\partial \dot{y}_i}\dot{\eta}_i$ worden weer omgezet met partiële integratie tot termen $-(\frac{d}{dx}\frac{\partial f}{\partial \dot{y}_i})\eta_i$. De "stoktermen" verdwijnen wegens $\eta_i(x_1) = \eta_i(x_2) = 0$.

G2.3: Lagrange vergelijking uit het principe van Hamilton

- Hiermee wordt Vgl.(117)

$$0 = \int_{x_1}^{x_2} dx \sum_i \eta_i \left(\frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \dot{y}_i} \right) \tag{118}$$

- Dit moet gelden voor arbitraire functies $\eta_i(x)$, zodat de factor die elke η_i vermenigvuldigt nul moet zijn. De corresponderende Euler-Lagrange vergelijkingen zijn dan

$$\frac{\partial f}{\partial y_i} = \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \dot{y}_i} \tag{119}$$

G2.3: Lagrange vergelijking uit het principe van Hamilton

- De actie-integraal in vgl.(94) kan nu op dezelfde manier geïnterpreteerd worden. Eisen dat

$$I = \int_{t_1}^{t_2} dt\, L(q_k(t), \dot{q}_k(t), t) \tag{120}$$

stationair is voor het fysisch gerealiseerde pad $\{q_k(t)\}$ in de configuratieruimte, is equivalent met de corresponderende Euler-Lagrange vergelijkingen voor dit variationeel probleem,

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) \tag{121}$$

wat precies de voorheen afgeleide Lagrange bewegingsvergelijkingen zijn.

G2.5: Voordelen van een variationele formulering

(Enkel het begin van dit hoofdstuk wordt behandeld)

- De variationele formulering is heel compact, in termen van de actie-integraal die uitgedrukt wordt met behulp van fysische grootheden (kinetische energie en potentialen) die een betekenis hebben zonder dat er een bepaalde keuze van de veralgemeende coördinaten moet gemaakt worden.
- Uit de variationele formulering volgt onmiddellijk dat de Lagrangiaan slechts bepaald is op een totale tijdsafgeleide van een functie van de coördinaten en de tijd na. Immers, stel dat een systeem beschreven wordt door een Lagrangiaan L. Definieer een nieuwe Lagrangiaan L' als

$$L'(q_k, \dot{q}_k, t) = L(q_k, \dot{q}_k, t) + \frac{d}{dt}(h(q_k, t)) \tag{122}$$

De actie-integraal I' van L' wordt

$$I' = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ L(q_k(t), \dot{q}_k(t), t) + \frac{d}{dt}(h(q_k(t), t)) \right\} \tag{123}$$

- De bijdrage van de laatste term in het integrandum, als totale tijdsafgeleide, reduceert zich tot

$$h(q_k(t_2), t_2) - h(q_k(t_1), t_1) \tag{124}$$

  en heeft dezelfde waarde voor alle paden die de beginconfiguratie $\{q_k(t_1)\}$ met de eindconfiguratie $\{q_k(t_2)\}$ verbinden. Het speelt dus geen rol in het variationeel probleem, en het stationair zijn van I en I' geeft dezelfde oplossing voor het fysisch gerealiseerd pad.
- Dit moet ook rechtstreeks volgen uit de Lagrange vergelijkingen (anders is er een inconsistentie), maar dit is veel lastiger. De additionele totale tijdsafgeleide in vgl.(122) is

$$\frac{d}{dt}(h(q_k, t)) = \sum_{\ell} \frac{\partial h}{\partial q_\ell}\dot{q}_\ell + \frac{\partial h}{\partial t} \tag{125}$$

G2.5: Voordelen van een variationele formulering

- De ingrediënten in de Lagrange vergelijkingen voor L' worden dan

$$\begin{aligned} \frac{\partial L'}{\partial q_k} &= \frac{\partial L}{\partial q_k} + \sum_\ell \frac{\partial^2 h}{\partial q_k \partial q_\ell}\dot{q}_\ell + \frac{\partial^2 h}{\partial q_k \partial t} \\ \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}_k} &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} + \frac{\partial h}{\partial q_k} \\ \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}_k}\right) &= \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) + \sum_\ell \frac{\partial^2 h}{\partial q_k \partial q_\ell}\dot{q}_\ell + \frac{\partial^2 h}{\partial q_k \partial t} \end{aligned} \tag{126}$$

- We zien inderdaad dat in de Lagrange vergelijkingen de termen in h wegvallen, en L en L' geven dezelfde bewegingsvergelijkingen,

$$0 = \frac{\partial L'}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}_k}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) \tag{127}$$

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

- Stel: een systeem met n_q vrijheidsgraden. De dynamica wordt beschreven met de Lagrange vergelijkingen, dus met n_q 2e orde differentiaalvergelijkingen. Een algemene oplossing vereist $2n_q$ integratieconstanten, die kunnen vastgelegd worden door bvb. de *beginvoorwaarden* op tijdstip $t = 0$ (dit zijn de veralgemeende coordinaten $q_k(t = 0)$ en veralgemeende snelheden $\dot{q}_k(t = 0)$). In de meeste gevallen zullen de bewegingsvergelijkingen overigens niet exact integreerbaar zijn, en moet men de zaak numeriek behandelen.
- Soms weet men op voorhand dat een bepaalde functie $f(q_k, \dot{q}_k, t)$ constant blijft in de tijd gedurende de beweging. Dan noemt men f een *eerste integraal van de beweging*. Dit vergemakkelijkt de analyse van de oplossingen van het probleem (zie bvb. het centrale kracht probleem in hoofdstuk 3).
- Alle behoudswetten (zie G1.1) zijn van dit type, en we zullen bekijken hoe deze in het Lagrange formalisme naar voor komen.

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

- Bekijk deeltjes interagerend met conservatieve krachten, dus $\boldsymbol{F}_i = -\nabla_i V(\boldsymbol{r}_i)$. We werken met Cartesische coördinaten, en de Lagrangiaan is dus

$$L = T - V = \frac{1}{2} \sum_i m_i (\dot{\boldsymbol{r}}_i)^2 - V(\boldsymbol{r}_j) \tag{128}$$

- De afgeleide naar de Cartesische x-component van de snelheid van deeltje i is

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m_i \dot{x}_i = p_{ix} \tag{129}$$

  niets anders dan de x-component van de impuls of *lineair moment* van deeltje i.

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

- Dit suggereert om, als we werken met veralgemeende coördinaten q_k, de definitie in te voeren

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \tag{130}$$

met het veralgemeend moment p_k het *(canonisch) toegevoegd moment* van de coördinaat q_k.

- Een veralgemeend moment heeft niet noodzakelijk de dimensie van impuls, wel moet het product $(p_k \dot{q}_k)$ de dimensie van energie hebben.
- Als een bepaalde q_k niet voorkomt in de Lagrangiaan (eventueel komt $\dot{q}_k$ wel voor!) dan noemt men q_k een *cyclische coördinaat*.

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

- Voor een cyclische coördinaat q_k geldt dus dat $\frac{\partial L}{\partial q_k} = 0$, en uit de Lagrange vergelijking volgt dan automatisch dat

$$\dot{p}_k = \frac{dp_k}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \tag{131}$$

- Bijgevolg is het toegevoegd moment van een cyclische coördinaat altijd een behouden grootheid.

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(1e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een translatie in een bepaalde richting.)

- Stel dat als een bepaalde coördinaat q_1 verandert met een infinitesimaal bedrag dq_1, het hele systeem een translatie ondergaat over dq_1 in een vaste richting langs éénheidsvector $\boldsymbol{n}$. De Cartesische coördinaten van de deeltjes, uitgedrukt met veralgemeende coördinaten, voldoen dus aan

$$\boldsymbol{r}_i(q_1 + dq_1, q_2, ..) = \boldsymbol{r}_i(q_1, q_2, ..) + (dq_1)\boldsymbol{n} \tag{132}$$

zodat een constante vector wordt bekomen voor

$$\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_1} = \boldsymbol{n} \tag{133}$$

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(1e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een translatie in een bepaalde richting.)

- Het is duidelijk dat dit overeenkomt met een verschuiving in de richting $\boldsymbol{n}$ van de oorsprong van het Cartesisch assenstelsel. De kinetische energie kan niet afhangen van de keuze van de oorsprong, zodat

$$\frac{\partial T}{\partial q_1} = 0 \tag{134}$$

- Dit volgt ook uit de formules, gelet op het verband (76) tussen Cartesische en veralgemeende snelheden

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = \sum_k \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k \tag{135}$$

Afleiden naar q_1 levert

$$\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_1} = \sum_k \frac{\partial^2 \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k \partial q_1} \dot{q}_k = \sum_k \frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial q_k} \dot{q}_k = 0 \tag{136}$$

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(1e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een translatie in een bepaalde richting.)

- Dit zegt dat de Cartesische snelheden niet afhangen van een translatiecoördinaat die voldoet aan vgl.(133), wat logisch is. De kinetische energie $T = \sum_i \frac{m_i}{2}(\dot{\boldsymbol{r}}_i)^2$ hangt dus evenmin van q_1 af, zodat, gelet op vgl.(91),

$$\frac{\partial L}{\partial q_1} = -\frac{\partial V}{\partial q_1} = Q_1 \tag{137}$$

  met Q_1 de veralgemeende kracht geassociëerd met q_1.
- De Lagrange vergelijking voor q_1 is dan equivalent met

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}\right) = \dot{p}_1 = Q_1 \tag{138}$$

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(1e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een translatie in een bepaalde richting.)

- De veralgemeende kracht Q_1 is in dit geval

$$Q_1 = \sum_i \boldsymbol{F}_i \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_1} = (\sum_i \boldsymbol{F}_i) \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{n} \tag{139}$$

  niets anders dan de component van de totale kracht $\boldsymbol{F}$ in de richting $\boldsymbol{n}$.
- We onderstellen conservatieve krachten (die enkel van de coördinaten afhangen) dus

$$\frac{\partial V}{\partial \dot{q}_k} = 0 \tag{140}$$

  Het moment toegevoegd aan q_1 is

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_1} = \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot \frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_1} \tag{141}$$

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(1e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een translatie in een bepaalde richting.)

- Gelet op vgl.(80) is

$$p_1 = \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_1} = \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{n} \qquad (142)$$

  gegeven door de component van de totale impuls $\boldsymbol{P}$ in de richting $\boldsymbol{n}$.

- De Lagrange vergelijking (138) is dus equivalent met

$$\dot{\boldsymbol{P}} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{n} \qquad (143)$$

  en reproduceert de bewegingsvergelijking (42) voor de totale impuls, geprojecteerd op een richting $\boldsymbol{n}$.

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(1e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een translatie in een bepaalde richting.)

- Als de potentiaal V niet afhangt van q_1, dan is q_1 een cyclische coördinaat. In dat geval is p_1 een behouden grootheid, m.a.w. $\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{n}$ is constant in de tijd.
- Dit hangt nauw samen met een symmetrie-eigenschap van het systeem: het feit dat de potentiaal V niet van q_1 afhangt betekent dat het systeem invariant is onder een translatie in de richting $\boldsymbol{n}$, met als gevolg dat de component $\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{n}$ behouden is.

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(2e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een rotatie rond een bepaalde as.)

- Stel dat als een bepaalde coördinaat q_1 verandert met een infinitesimaal bedrag dq_1, het hele systeem een rotatie ondergaat over een hoek dq_1 rond een as met vaste richting $\boldsymbol{n}$. De Cartesische coördinaten van de deeltjes, uitgedrukt met veralgemeende coördinaten, voldoen dus aan (zie Fig.2.8)

$$\boldsymbol{r}_i(q_1 + dq_1, q_2, ..) = \boldsymbol{r}_i(q_1, q_2, ..) + (dq_1)\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}_i(q_1, q_2, ..) \tag{144}$$

zodat

$$\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_1} = \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}_i \tag{145}$$

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(2e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een rotatie rond een bepaalde as.)

- Dit komt overeen met een rotatie van het Oxyz Cartesisch assenstelsel rond een as met richting ***n*** door de oorsprong O. De kinetische energie kan niet afhangen van de keuze van de oriëntatie van het assenstelsel, zodat

$$\frac{\partial T}{\partial q_1} = 0 \tag{146}$$

- Opnieuw kan dit afgeleid worden uit de formules, gelet op het verband (76) tussen Cartesische en veralgemeende snelheden

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = \sum_k \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k \tag{147}$$

Afleiden naar q_1 levert nu

$$\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_1} = \sum_k \frac{\partial^2 \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k \partial q_1} \dot{q}_k = \boldsymbol{n} \times \sum_k \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k = \boldsymbol{n} \times \dot{\boldsymbol{r}}_i \tag{148}$$

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(2e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een rotatie rond een bepaalde as.)

- Dit betekent dat de *groottes* van de Cartesische snelheden niet afhangen van een rotatiecoördinaat die voldoet aan vgl.(145), vermits

$$\frac{\partial}{\partial q_1}(\dot{\boldsymbol{r}}_i)^2 = 2\dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot \frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_1} = 2\dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot (\boldsymbol{n} \times \dot{\boldsymbol{r}}_i) = 0 \tag{149}$$

De kinetische energie $T = \sum_i \frac{m_i}{2}(\dot{\boldsymbol{r}}_i)^2$ hangt dus evenmin van q_1 af, zodat, gelet op vgl.(91),

$$\frac{\partial L}{\partial q_1} = -\frac{\partial V}{\partial q_1} = Q_1 \tag{150}$$

met Q_1 de veralgemeende kracht geassociëerd met q_1.

- De Lagrange vergelijking voor q_1 is dan

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}\right) = \dot{p}_1 = Q_1 \tag{151}$$

(2e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een rotatie rond een bepaalde as.)

- De veralgemeende kracht Q_1 is in dit geval

$$Q_1 = \sum_i \boldsymbol{F}_i \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_1} = \sum_i \boldsymbol{F}_i \cdot (\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r_i}) = \boldsymbol{n} \cdot \sum_i (\boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i) \tag{152}$$

  de component in de richting $\boldsymbol{n}$ van het totale krachtmoment $\boldsymbol{N} = \sum_i (\boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i)$.

- We onderstellen conservatieve krachten (die enkel van de coördinaten afhangen) dus

$$\frac{\partial V}{\partial \dot{q}_k} = 0 \tag{153}$$

  Het moment toegevoegd aan q_1 is

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_1} = \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot \frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_1} \tag{154}$$

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(2e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een rotatie rond een bepaalde as.)

- Gelet op vgl.(80) is

$$p_1 = \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_1} = \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot (\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}_i) = \boldsymbol{n} \cdot \sum_i m_i (\boldsymbol{r}_i \times \dot{\boldsymbol{r}}_i). \quad (155)$$

  Het toegevoegd moment p_1 van een rotatiecoördinaat is dus de component volgens $\boldsymbol{n}$ van het totale draaimoment $\boldsymbol{L} = \sum_i \boldsymbol{r}_i \times m_i \dot{\boldsymbol{r}}_i$.

- De Lagrange vergelijking (151) is dus equivalent met

$$\dot{\boldsymbol{L}} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{N} \cdot \boldsymbol{n} \quad (156)$$

  en reproduceert de bewegingsvergelijking voor het totaal draaimoment, geprojecteerd op een richting $\boldsymbol{n}$.

G2.6: Behoudswetten en symmetrie-eigenschappen

(2e voorbeeld: een veralgemeende coördinaat komt overeen met een rotatie rond een bepaalde as.)

- Als de potentiaal V niet afhangt van q_1, dan is q_1 een cyclische coördinaat. In dat geval is p_1 een behouden grootheid, m.a.w. $\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{n}$ is constant in de tijd.
- Dit hangt opnieuw nauw samen met een symmetrie-eigenschap van het systeem: het feit dat de potentiaal V niet van q_1 afhangt betekent dat het systeem invariant is onder een rotatie rond een as met richting $\boldsymbol{n}$, met als gevolg dat de component $\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{n}$ behouden is. Het verband tussen symmetrieën en behouden grootheden (stelling van Noether) wordt verder uitgewerkt in het hoofdstuk over Hamilton mechanica.

G2.7: Behoud van energie

- We beperken ons weer tot een systeem met hooguit holonoom-tijdsonafhankelijke bindingen, zodat de uitdrukking van de Cartesische coördinaten in termen van veralgemeende coördinaten niet expliciet van de tijd afhangt,

$$\boldsymbol{r}_i \equiv \boldsymbol{r}_i(q_1, q_2, .., q_{n_q}) \tag{157}$$

Het resulterend verband tussen Cartesische en veralgemeende snelheden

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = \sum_k \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k \tag{158}$$

betekent dat de kinetische energie T

$$T = \sum_i \frac{1}{2} m_i (\dot{\boldsymbol{r}}_i)^2 = \sum_{k,\ell} \dot{q}_k \dot{q}_\ell \left(\sum_i \frac{1}{2} m_i \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\ell} \right) \tag{159}$$

een homogene veelterm van de tweede graad in de veralgemeende snelheden is.

G2.7: Behoud van energie

- We beperken ons eveneens weer tot conservatieve gegeven krachten, zodat de potentiaal V enkel van de Cartesische posities, en dus met vgl.(157) enkel van de veralgemeende coördinaten afhangt. Met deze aannames is de Lagrangiaan $L(q_k, \dot{q}_k)$ niet expliciet van de tijd afhankelijk.
- We berekenen de totale tijdsafgeleide van de Lagrangiaan

$$\frac{d}{dt} L(q_k(t), \dot{q}_k(t)) = \sum_k \frac{\partial L}{\partial q_k} \dot{q}_k + \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \ddot{q}_k \qquad (160)$$

Hierin substitueren we de Lagrange vergelijking

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \qquad (161)$$

en vinden

$$\frac{d}{dt} L(q_k, \dot{q}_k) = \sum_k \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \dot{q}_k + \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \ddot{q}_k \qquad (162)$$

G2.7: Behoud van energie

- Het rechterlid van vgl.(162) herkennen we nu als een totale tijdsafgeleide van een andere functie, $\sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k$, vermits

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k\right) = \sum_k \left\{\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)\dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\left(\frac{d}{dt}\dot{q}_k\right)\right\} \tag{163}$$

  en $\ddot{q}_k = \frac{d}{dt}\dot{q}_k$.
- Bijgevolg is het verschil van de nieuwe functie en de Lagrangiaan een behouden grootheid:

$$\frac{d}{dt}\left\{\sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - L(q_k, \dot{q}_k)\right\} = 0 \tag{164}$$

- De functie $h = \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - L$ wordt de Hamiltoniaan van het systeem genoemd. Interpretatie?

G2.7: Behoud van energie

- Een homogene functie van graad n in meerdere variabelen is een functie $f(x_1, x_2, ..)$ die voldoet aan

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, ..) = \lambda^n f(x_1, x_2, ..) \tag{165}$$

  De stelling van Euler voor een homogene functie van graad n zegt dat

$$\sum_k x_k \frac{\partial f}{\partial x_k}(x_1, x_2, ..) = nf(x_1, x_2, ..) \tag{166}$$

  wat gemakkelijk kan ingezien worden door vgl.(165) af te leiden naar λ, en dan $\lambda = 1$ te nemen.

- Vermits (zie vgl.(159)) de kinetische energie een homogene veelterm van graad 2 in de veralgemeende snelheden is, geldt

$$\sum_k \dot{q}_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} = 2T \tag{167}$$

G2.7: Behoud van energie

- De discussie is beperkt tot conservatieve systemen, dus

$$\frac{\partial V}{\partial \dot{q}_k} = 0 \tag{168}$$

zodat

$$h = \sum_k \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - L = \sum_k \dot{q}_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - L \tag{169}$$

- Gelet op vgl.(167) en $L = T - V$ wordt de functie h:

$$h = 2T - L = 2T - (T - V) = T + V \tag{170}$$

wat correspondeert met de totale energie. Vgl.(164), m.a.w. $\frac{dh}{dt} = 0$ correspondeert dus met behoud van energie in een systeem met holonoom-tijdsonafhankelijke bindingen en conservatieve krachten.

G2.7: Behoud van energie

- Wanneer is dit *niet* geldig? Stel dat we een systeem hebben met conservatieve krachten, maar holonome bindingen die *tijdsafhankelijk* zijn. [Denk aan het kraaltje dat kan glijden over een roterende staaf].
- De transformatie naar veralgemeende coordinaten (die de tijdsafhankelijke bindingen opleggen), bevatten nu een expliciete tijdsafhankelijkheid,

$$\boldsymbol{r}_i \equiv \boldsymbol{r}_i(q_k, t) \tag{171}$$

- Het verband tussen Cartesische en veralgemeende snelheden wordt nu

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = \sum_k \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial t} \tag{172}$$

G2.7: Behoud van energie

- Uit vgl.(172) volgt dat de kinetische energie niet langer een homogene veelterm van de 2e graad is in de veralgemeende snelheden, maar ook termen van 0e en 1e graad bevat:

$$T = \sum_i \frac{1}{2} m_i (\dot{\boldsymbol{r}}_i)^2 = T_2 + T_1 + T_0 \tag{173}$$

met T_2 gegeven door vgl.(159), en

$$\begin{aligned} T_1 &= \sum_k \dot{q}_k \left(\sum_i m_i \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial t} \right) \\ T_0 &= \left(\sum_i \frac{1}{2} m_i \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial t} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial t} \right) \end{aligned} \tag{174}$$

G2.7: Behoud van energie

- De conservatieve krachten worden afgeleid uit een potentiaal $\boldsymbol{F}_i = -\nabla_i V(\boldsymbol{r}_i)$ die enkel van de Cartesische coördinaten afhangt. Uitgedrukt met behulp van veralgemeende coördinaten via vgl.(171) zien we dat de potentiaal (via de tijdsafhankelijke bindingen) nu ook expliciete tijdsafhankelijkheid bevat,

$$V \equiv V(q_k, t) \tag{175}$$

- We zien dat de Lagrangiaan $L = T - V \equiv L(q_k, \dot{q}_k, t)$ in dit geval wel expliciet van de tijd afhangt, en vgl.(160) wordt veralgemeend tot

$$\frac{d}{dt} L(q_k, \dot{q}_k, t) = \sum_k \frac{\partial L}{\partial q_k} \dot{q}_k + \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \ddot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial t} \tag{176}$$

G2.7: Behoud van energie

- De verdere redenering blijft behouden, vermits het systeem nog steeds aan de Lagrange vergelijkingen (161) voldoet, en de meer algemene vorm van vgl.(164) wordt

$$\frac{dh}{dt} + \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \tag{177}$$

met de Hamiltoniaan

$$h = \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L \tag{178}$$

- Uit vgl.(177) kan geen energiebehoud geformuleerd worden, wat logisch is vermits via de tijdsafhankelijke bindingen energie aan het systeem wordt overgedragen.

G2.7: Behoud van energie

- Ook de Hamiltoniaan *h* correspondeert niet noodzakelijk met de totale energie. Gelet op vgl.(173) geldt dat

$$\begin{aligned} h &= \sum_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - (T - V) = T_1 + 2T_2 - (T_0 + T_1 + T_2 - V) \\ &= T_2 - T_0 + V \end{aligned} \tag{179}$$

  De kinetische termen $T_2 - T_0$ corresponderen duidelijk *niet* met de kinetische energie $T = T_0 + T_1 + T_2$, tenzij $T_0 = T_1 = 0$. Hiervoor is nodig dat de transformatie die de Cartesische coördinaten uitdrukt in de veralgemeende coördinaten, niet expliciet van de tijd afhangt.

- Dus in het gewone geval (tijdsonafhankelijke bindingen, conservatieve krachten): Hamiltoniaan correspondeert met de totale energie en blijft behouden. In andere gevallen: opletten...