

GONDOLATOK A LAGRANGE-FÜGGVÉNYEK EGYENÉRTÉKŰSÉGÉRŐL

GAMBÁR KATALIN

Összefoglalás

A leg-gel kezdődő jelzőkkel ellátott fogalmak általában felkeltik érdeklődésünket. A variációszámítás alkalmas a fizika különböző diszciplínáinak egységesítésére, akár klasszikus mechanikáról, elektrodinamikáról vagy modern térelméletekről van szó. Az egyes diszciplínák alapegyenletei valamilyen variációs elv következményeiként származtathatók. Alapvető fizikai mennyiségekből meg lehet konstruálni egy olyan mennyiséget – a hatást – amelynek a megváltozása az elképzelt fizikai folyamatok közül ott a legkisebb, amely folyamat ténylegesen megvalósul. A hatás felírásához szükséges függvényt Lagrange-függvénynek, a legkisebb hatás elvét Hamilton-elvnek, az ebből származtatható mozgásegyenleteket Euler-Lagrange egyenleteknek, és az egész kiépíthető formalizmust Hamilton-Lagrange formalizmusnak szoktuk nevezni. Egy adott rendszerhez több megfelelő Lagrange-függvényt is megadhatunk, amely visszaadja Euler-Lagrange egyenletként a mozgásegyenletet. De vajon ezek a Lagrange-függvények egyenértékűek-e egymással? Melyek a leginkább alkalmasak, ha a teljes formalizmus kihasználása célunk? A nem-relativisztikus szabad részecske mozgásának leírásához vegyünk négy olyan Lagrange-sűrűségfüggvényt, amelyek mindegyikéből származtatható variációs elvből a Schrödinger-egyenlet. Az adott Lagrange-függvényekhez felírhatjuk a megfelelő Hamilton-függvényeket. Tudjuk, hogy egy, a rendszerhez tartozó fizikai mennyiség időbeli változását úgy is megkaphatjuk, ha vesszük a Hamilton-függvénnyel a Poisson-zárójeles kifejezését. Megvizsgálva a megadott négy esetre ezeket a kifejezéseket, azt az eredményt kapjuk, hogy csak két esetben nyerjük a kívánt egyenletet. Ebből arra következtethetünk, hogy a megadott Lagrange-függvények közül a teljes és ellentmondásmentes elmélet kiépítéséhez nem minden Lagrange-függvény megfelelő, amelyekből variációval származtatható a mozgásegyenlet. Tehát a Lagrange-függvény megfelelő voltának szükséges feltétele, hogy a Hamilton-elvből lezármaztatott Euler-Lagrange egyenlet az adott probléma egyenlete legyen, de ez nem elegendő feltétel a teljes és ellentmondásmentes elmélet kidolgozásához és alkalmazásához.

Kulcsszavak: Hamilton-elv, Lagrange-függvény, Hamilton-függvény, Euler-Lagrange differenciálegyenletek, Hamilton-egyenletek, Poisson-zárójel

Bevezetés

Legszebb, legjobb, legfontosabb, legújabb, legrégebb, legnagyobb, legkisebb; ezekre a szavakra leginkább felkapjuk a fejünket. Ezek között vannak olyanok, amelyek objektíven mérhető mennyiségekre vonatkoznak. Például a síkban két pontot összekötő folytonos görbék mindegyikének megfelel egy-egy hosszúság, amelyet egy pozitív valós számmal jellemezünk. A legkisebb hosszúságot a két pontot összekötő egyenes szakaszon mérjük. A variációszámítás segítségével oldhatjuk meg a következő feladatot: adott felületen elhelyezkedő, annak két pontját összekötő görbék közül melyik hosszúsága minimális, vagyis legkisebb. A variációszámítás alkalmas a fizika különböző diszciplínáinak egységesítésére, akár klasszikus mechanikáról, elektrodinamikáról vagy modern térelméletekről van szó. Az egyes diszciplínák alapegyenletei egy variációs elv következményeiként származtathatók. Alapvető fizikai mennyiségekből meg lehet adni egy olyan mennyiséget – a hatást – amelynek a megváltozása az elképzelt fizikai

folyamatok közül ott a legkisebb, amely folyamat ténylegesen megvalósul. Ez olyan megdöbbentően hangzik, hogy a XVIII.-XIX. században olykor az isteni beavatkozás példajaként emlegették. Tény, hogy a legkisebb hatás elve, melynek alapjai a klasszikus mechanikában alakultak ki, az elemi kölcsönhatások kvantum-térelméletétől a kozmikus törvényekig érvényes. A variációszámítással és a fizikában alkalmazásával a XVIII. századtól kezdődően nagyon sokan foglalkoztak. Három tudóst szeretnék megemlíteni, akik ezen a területen kiemelkedő *leg*-ek, és akiknek a nevét viselik a témában legfontosabb alapfogalmak; Leonard Euler (1707-1783), Joseph Louis Lagrange (1736-1813), Rowan William Hamilton (1805-1865). A hatás felírásához szükséges függvényt Lagrange-függvénynek, a legkisebb hatás elvét Hamilton-elvnek, az ebből származtatható mozgásegyenleteket Euler-Lagrange-egyenleteknek, amelyek egyenértékűek az ún. Hamilton-egyenletekkel, és az egész kiépíthető formalizmust Hamilton-Lagrange formalizmusnak szoktuk nevezni (Simonyi, 1986).

Paul Dirac szerint a szépségre való törekvés a természetleírásban nem üres játék, hanem hatékony tényező a tudomány előrehaladásában. A fizika legfontosabb mozgástörvényei differenciálegyenletekben fogalmazódnak meg. Ezek többsége származtatható a legkisebb hatás elvéből. Tudjuk, hogy azoknál az elméleteknél, ahol a Hamilton-elv megfogalmazható és a Hamilton-Lagrange formalizmus kiépíthető nemcsak az elmélet 'esztétikája' megkapó, hanem a továbblépési illetve vizsgálódási lehetőségek is nagyobbak.

A hatás

Ahhoz, hogy a Hamilton-elvet az elmélet alapelveinek tekintsük, meg kell adnunk a Lagrange-függvényt, amelynek időszerinti integrálja adja a hatást. Folytonos közegek (fizikai terek) szabadsági fokainak száma végtelen. Leírásuk ezért pontról pontra, pillanatról pillanatra történik. A geometriai tér egy adott pontjához és adott időpillanathoz matematikai mennyiségeket (termennyiségeket) rendelünk. Ezen mennyiségek időbeli fejlődésének leírására szolgálnak a téregyenletek (mozgásegyenletek). Általában két alaplépésben lehet az ilyen végtelen szabadsági fokú rendszerekhez megkonstruálni a hatást: a termennyiségekből elő kell állítani a Lagrange-sűrűségfüggvényt figyelembe véve a leírt rendszer tulajdonságait; a Lagrange-sűrűségfüggvénynek a tér és az idő minden pontjában felvett értékét integrálva megkapjuk a hatást.

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dV dt \quad (1)$$

$$L = L(\psi, \dot{\psi}, \nabla\psi) \quad (2)$$

Amennyiben a Lagrange-függvény csak egy Ψ fizikai mennyiségtől és annak idő szerinti és hely szerinti deriváltjaitól függ, akkor a variálás elvégzése után kapjuk az Euler-Lagrange egyenletet, amely leírja a kérdéses mennyiség térbeli és időbeli változását. (Morse *et al.*, 1953; Gambár, 2005)

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dV dt \quad (3)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} - \nabla \frac{\partial L}{\partial \nabla \psi} = 0 \quad (4)$$

Általában mondhatjuk, hogy ha az L Lagrange-függvényben egy A lineáris operátor hat a ψ függvényre, akkor a $\tilde{A} \frac{\partial L}{\partial (A\psi)}$ kifejezés jelenik meg az Euler-Lagrange egyenletben, ahol \tilde{A} az A operátor adjungáltja. Soroljuk fel a fizikában leggyakoribb operátor-adjungált párokat:

$$A = \frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow \tilde{A} = -\frac{\partial}{\partial t} \quad (5)$$

$$A = \text{grad} (= \nabla) \longrightarrow \tilde{A} = -\text{grad} (= -\nabla) \quad (6)$$

$$A = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \longrightarrow \tilde{A} = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (7)$$

$$A = \Delta \longrightarrow \tilde{A} = \Delta \quad (8)$$

Ha az $A = \tilde{A}$ egyenlőség teljesül, úgy önadjungált operátorról beszélünk (Gambár, 2002; Gambár, 2008; Gambár *et al.*, 1991; Márkus, 2011; Morse, *et al.*, 1953). Amennyiben tehát ismerjük egy mennyiség változását leíró mozgásegyenletet (differenciálegyenletet) könnyedén tudunk Lagrange-függvényt konstruálni.

A Schrödinger egyenlet lehetséges Lagrange-függvényei

Brown és Holland (Brown *et al.*, 2004) cikkében figyeltem fel a következő Lagrange-függvényekre, amelyekből a nem-relativisztikus szabad részecske mozgásegyenlete, a Schrödinger-egyenlet származtatható a variációs-elv segítségével. A cikk állítása szerint ezek a Lagrange függvények ekvivalensek. Ez inspirált arra, hogy mélyebben átgondoljam

$$L_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \nabla \psi + \frac{i\hbar}{2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) \quad (9)$$

$$L_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \nabla \psi - i\hbar \dot{\psi}^* \psi \quad (10)$$

$$L_3 = \frac{\hbar^2}{2m} \psi \Delta \psi^* + \frac{i\hbar}{2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) \quad (11)$$

$$L_4 = \frac{\hbar^2}{2m} \psi \Delta \psi^* - i\hbar \dot{\psi}^* \psi \quad (12)$$

ahol ψ^* a ψ hullámfüggvény komplex konjugáltja. A Hamilton-elvből származtatva egyenként az Euler-Lagrange-egyenleteket mind a négy esetben a Schrödinger-egyenleteket adják

$$i\hbar\dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi \quad (13)$$

$$i\hbar\dot{\psi}^* = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* \quad (14)$$

1. A kérdés az, hogy vajon ezek a Lagrange-függvények tényleg egyenértékűek-e egymással? Melyek a leginkább alkalmasak, ha a teljes formalizmus felépítése és kihasználása a célunk?
2. Keressünk a feltett kérdésekre választ a formalizmus egyértelműségére figyelve.

Kanonikus alakok

A Lagrange-függvény ismeretében bevezethető a változó mennyiséghez kanonikusan konjugált momentum (impulzus), ezt az általános variálás elvégzése után tudjuk leolvasni. Esetünkben

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} \quad (15)$$

$$p^* = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}^*} \quad (16)$$

Ekkor felírhatjuk a részecske Hamilton-függvényét (amely a Lagrange-függvény Legendre-transzformáltja)

$$H = p\dot{\psi} + p^*\dot{\psi}^* - L \quad (17)$$

Érdeemes definiálni két mennyiség Poisson-zárójeles kifejezését, mert belátható, hogy a rendszer Hamilton-függvényével vett Poisson-zárójeles kifejezése az adott mennyiséggel éppen annak időbeli változását adja meg (Gambár, 2002; Gambár *et al.*, 2008; Vázquez *et al.*, 1996; Morse *et al.*, 1953)

$$[F, H] = \frac{\delta F}{\delta \psi} \frac{\delta H}{\delta p} - \frac{\delta F}{\delta p} \frac{\delta H}{\delta \psi} \quad (18)$$

$$\dot{F} = [F, H] \quad (19)$$

Esetünkben:

$$\dot{\psi} = [\psi, H] \quad (20)$$

$$\dot{p} = [p, H] \quad (21)$$

$$\dot{\psi}^* = [\psi^*, H] \quad (22)$$

$$\dot{p}^* = [p^*, H] \quad (23)$$

kapjuk a kanonikus egyenleteket, a Hamilton egyenleteket, melyek fizikai és matematikai értelemben is teljesen egyenértékűek az Euler-Lagrange-egyenletekkel egy adott rendszer esetén. A kanonikus egyenletek azonban szimmetriájuknál fogva számos problémánál előnyösebben alkalmazhatók.

Sorra véve a (9-12)-ben megadott Lagrange-függvényeket, mindegyikhez felírva a momentumokat, a Hamilton-függvényeket, majd kiszámolva a Poisson-zárójelas kifejezéseket a következő egyenleteket kapjuk:

L_1 esetében:

$$\dot{\psi} = -\frac{\hbar}{im} \Delta \psi \quad (24)$$

$$\dot{\psi}^* = \frac{\hbar}{im} \Delta \psi^* \quad (25)$$

L_2 esetében:

$$\dot{\psi} = -\frac{\hbar}{2im} \Delta \psi \quad (26)$$

$$\dot{\psi}^* = \frac{\hbar}{2im} \Delta \psi^* \quad (27)$$

L_3 esetében :

$$\dot{\psi} = -\frac{\hbar}{im} \Delta \psi \quad (28)$$

$$\dot{\psi}^* = \frac{\hbar}{im} \Delta \psi^* \quad (29)$$

L_4 esetében:

$$\dot{\psi} = -\frac{\hbar}{2im} \Delta \psi \quad (30)$$

$$\dot{\psi}^* = \frac{\hbar}{2im} \Delta \psi^* \quad (31)$$

A helyes egyenletek, amelyeket minden esetben meg kellene kapnunk az (13-14)-ben szereplő egyenletek. Látható, hogy ez csak (26-27) és (30-31) esetén teljesül, míg a (24-25) és (28-29) esetén hiányzik a 2 a nevezőből. Így csak az L_2 és az L_4 Lagrange-függvények helyesek, azaz alkalmazhatók az elméleti számításokhoz.

Ebből arra következtethetünk, hogy a megadott Lagrange-függvények közül a teljes és ellentmondásmentes elmélet kiépítéséhez nem minden Lagrange-függvény megfelelő, amelyekből variációval származtatható a mozgásegyenlet. Tehát a Lagrange-függvény megfelelő voltának szükséges feltétele, hogy a Hamilton-elvből leszarmaztatott Euler-Lagrange-egyenlet az adott probléma egyenlete legyen, de ez nem elegendő feltétel a teljes és ellentmondásmentes elmélet kidolgozásához és alkalmazásához. Így e tekintetben ezek a Lagrange-függvények nem ekvivalensek.

Hivatkozott források:

- Brown H. R. - Holland P. (2004): Am. J. Phys. 72, 34.
Gambár K. - Márkus F. - Nyíri B. (1991): J. Non-Equilib. Thermodyn. 16, 217.
Gambár K. (2002): Tanulmány a disszipatív folyamatokról (Pályamunka az MTA főtitkára által meghirdetett pályázatra)
Gambár K. (2005): Least Action Principle for Dissipative Processes, Variational and Extremum Principles in Macroscopic Systems (pp. 245-266), (Elsevier, Amsterdam)
Gambár K. (2008): Reports on Mathematical Physics 62, 219.
Márkus F. (2011): Can a Lorentz invariant equation describe thermal energy propagation problems? (in Heat Conduction – Basic research, ed: V. S. Vikhrenko) (InTech, Rijeka)
Morse P. H. - Feshbach H. (1953): Methods of Theoretical Physics (McGraw-Hill, New York).
Vázquez F. – del Rio J. A. – Gambár K. – Márkus F. (1996): J. Non-Equilib. Thermodyn. 21, 357.
Simonyi K. (1986): A fizika kultúrtörténete (Gondolat, Budapest)

Szerző:

Gambár Katalin, PhD.

főiskolai tanár

Gábor Dénes Főiskola, Alap- és Műszaki Tudományi Intézet

H-1119 Budapest, Mérnök u. 39.

gambar@gdf.hu