

Riešenia 2. kola zimnej časti

2.1 Michelinská hviezda

vzorák Lego, opravoval Lego (simon.pajger@trojsten.sk)

Tepelný tok z kuchyne do chladničky bude úmerný teplotnému rozdielu medzi nimi. Označme konštantu úmernosti k (jej jednotka je joule na sekundu na kelvin), teplotu kuchyne T_K a teplotu chladničky T_C , potom tepelný tok je $\dot{Q}_J = k(T_K - T_C)$.

Ak má chladnička držať konštantnú teplotu musí všetko toto teplo vypumpovať von. Z druhého termodynamického zákona vieme, že celková entropia nemôže klesať. Zmena entropie keď je systému s teplotou T dodané teplo Q je $\Delta S = Q/T$. Chladnička svojim fungovaním prečerpáva teplo z chladničky von, čím znižuje entropiu v chladničke a zvyšuje entropiu vonku. V ideálnom prípade teda zvýši entropiu vonku o rovnako veľa ako zníži entropiu vnútri, čiže

$$\frac{Q_K}{T_K} = \frac{Q_C}{T_C},$$

kde Q_C je teplo odpumpované z chladničky a Q_K je teplo ktoré bude vypumpované von (čiže $Q_K = Q_C + W$, kde prácu W si chladnička vytiahne z elektrickej siete).

Celková tepelná bilancia kuchyne teda je

$$\dot{U}_K = \dot{Q}_K - \dot{Q}_J,$$

kde U_K je celková (vnútorná) energia kuchyne. Ako sme už povedali, chladnička musí zo seba vypumpovať toľko tepla, koľko do nej dotečie z kuchyne, čiže $\dot{Q}_C = \dot{Q}_J$. Podosádzame

$$\dot{U}_K = \dot{Q}_J \frac{T_K}{T_C} - \dot{Q}_J = \frac{k}{T_C} (T_K - T_C)^2.$$

Predpokladajme, že energia kuchyne U_K závisí lineárne od teploty kuchyne T_K . Konštanta tejto závislosti je tepelná kapacita C . Potom $\dot{T}_K = \dot{U}_K/C$. A môžeme napísať a vyriešiť diferenciálnu rovnicu

$$\frac{dT_K}{dt} = \frac{k}{CT_C}(T_K - T_C)^2$$

$$\int_{T_K(0)}^{T_K(t)} \frac{1}{(T_K - T_C)^2} dT_K = \int_0^t \frac{k}{CT_C} dt$$

$$\frac{-1}{T_K(t) - T_C} - \frac{-1}{T_K(0) - T_C} = \frac{k}{CT_C} t$$

$$T_C + \frac{1}{\frac{1}{T_K(0) - T_C} - \frac{k}{CT_C} t} = T_K(t).$$

Teplota teda rastie ako lineárna lomená funkcia, čiže v čase

$$\frac{1}{T_K(0) - T_C} - \frac{k}{CT_C} t_\infty = 0$$

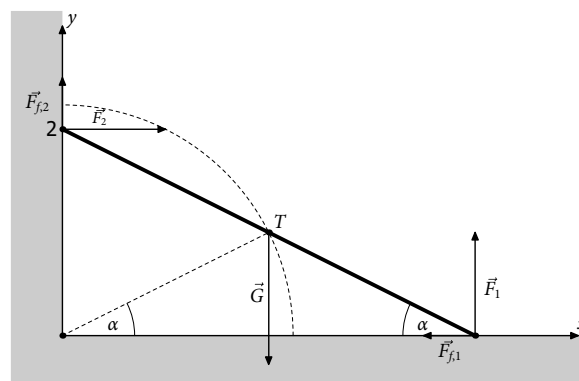
$$\frac{T_C}{T_K(0) - T_C} \frac{C}{k} = t_\infty$$

zdiverguje do nekonečna $+\infty$. Samozrejme v realite nemôže narásť do nekonečna, ale dáva nám to horné ohraničenie času, do kedy naše predpoklady (odizolovanosť kuchyne, fungovanie chladničky, to že máme dosť energie...) prestanú fungovať.

2.2 Lenivá tyčka

vzorák Janči a Jakub, opravovali Janči (jan.pulmann@gmail.com) a Jakub

Podúloha 1 – Riešenie cez klasickú mechaniku



Obrázok 2.2.1: Zakreslenie síl pôsobiacich na tyčku.

Najprv si zakreslíme všetky sily, ktoré pôsobia na tyčku (Obrázok 2.2.1). Na tyčku pôsobí 5 síl: tiažová sila G (veľkosť mg), normálová sila od podlahy F_1 , normálová sila od steny F_2 , trecia sila od podlahy $F_{f,1}$ (veľkosť

$f_1 F_1$) a tretia sila od steny $F_{f,2}$ (veľkosť $f_2 F_2$). Môžeme si všimnúť, že 2 premenné (F_1 a F_2) sú neznáme. Ich veľkosť musí byť taká, aby sa tyčka neprepadla cez stenu alebo podlahu. Môžeme si ešte všimnúť z geometrie obrázka, že ťažisko (bod T) sa pri šmýkaní tyčky pohybuje po kružnici s polomerom $L/2$ okolo rohu steny $(0, 0)$.

Z klasickej mechaniky vieme, že pre popis pohybu tuhého telesa nám postačí poznať aká celková sila F_T a celkový moment síl M_T pôsobia na teleso.

Pre náš prípad dostávame

$$\begin{aligned} F_T &= \sum_i F_i = \mathbf{G} + \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_{f,1} + \mathbf{F}_{f,2} \\ &= (-f_1 F_1 + F_2, -mg + F_1 + f_2 F_2, 0), \\ M_T &= \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i = \mathbf{0} \times \mathbf{G} + \mathbf{r}_{T1} \times \mathbf{F}_1 + \mathbf{r}_{T2} \times \mathbf{F}_2 + \mathbf{r}_{T1} \times \mathbf{F}_{f,1} + \mathbf{r}_{T2} \times \mathbf{F}_{f,2} \\ &= \left(0, 0, \frac{L}{2}(F_1 \cos \alpha - f_1 F_1 \sin \alpha - F_2 \sin \alpha - f_2 F_2 \cos \alpha)\right). \end{aligned}$$

Celková sila F_T a celkový moment síl M_T spôsobujú zrýchlenie telesa $\mathbf{a}_T$ a uhlové zrýchlenie ϵ_T podľa Newtonovho zákona

$$\mathbf{F}_T = m\mathbf{a}_T, \quad \mathbf{M}_T = I\epsilon_T \mathbf{e}_M,$$

kde I je moment zotrvačnosti telesa okolo rotačnej osi, ktorá je určená jednotkovým vektorom v smere celkového momentu síl $\mathbf{e}_M$.

Pre tyčku hmotnosti m a dĺžky L platí, že jej moment zotrvačnosti okolo ťažiska je $\frac{1}{12}mL^2$. Pre zrýchlenie ťažiska $\mathbf{a}_T$ a uhlové zrýchlenie ϵ_T dostaneme teda

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_T &= \frac{1}{m} \mathbf{F}_T = \left(-f_1 \frac{F_1}{m} + \frac{F_2}{m}, -mg + \frac{F_1}{m} + f_2 \frac{F_2}{m}, 0\right), \\ \epsilon_T &= \frac{1}{\frac{1}{12}mL^2} |\mathbf{M}_T| = \frac{6}{L} \left(\frac{F_1}{m} \cos \alpha - f_1 \frac{F_1}{m} \sin \alpha - \frac{F_2}{m} \sin \alpha - f_2 \frac{F_2}{m} \cos \alpha\right). \end{aligned}$$

Zatiaľ sme dostali iba všeobecné pohybové rovnice pre dané sily F_1 a F_2 . My však máme 2 väzobné podmienky: bod 1 nesmie prepadnúť cez podlahu a bod 2 nesmie prepadnúť cez stenu. Musíme teda najprv vypočítať pohybové rovnice pre tieto body. Keď už poznáme $\mathbf{a}_T$ a ϵ_T , tak vieme vypočítať zrýchlenie každého bodu tuhého telesa pomocou vzťahu

$$\mathbf{a}_A = \mathbf{a}_T + \epsilon_T \times \mathbf{r}_{TA} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_{TA}),$$

kde prvý člen zodpovedá celkovému zrýchleniu celého telesa, druhý člen zodpovedá uhlovému zrýchleniu a tretí člen zodpovedá odstredivému zrýchleniu.

Pre bod 1 ($\mathbf{r}_{T1} = (\frac{L}{2} \cos \alpha, -\frac{L}{2} \sin \alpha, 0)$) a bod 2 ($\mathbf{r}_{T1} = (-\frac{L}{2} \cos \alpha, \frac{L}{2} \sin \alpha, 0)$) dostávame:

$$\mathbf{a}_1 = \left(-f_1 \frac{F_1}{m} + \frac{F_2}{m}, -mg + \frac{F_1}{m} + f_2 \frac{F_2}{m}, 0 \right) + \left(+\frac{L}{2} \epsilon_T \sin \alpha, +\frac{L}{2} \epsilon_T \cos \alpha, 0 \right) + \left(-\frac{\omega^2 L}{2} \cos \alpha, +\frac{\omega^2 L}{2} \sin \alpha, 0 \right),$$

$$\mathbf{a}_2 = \left(-f_1 \frac{F_1}{m} + \frac{F_2}{m}, -mg + \frac{F_1}{m} + f_2 \frac{F_2}{m}, 0 \right) + \left(-\frac{L}{2} \epsilon_T \sin \alpha, -\frac{L}{2} \epsilon_T \cos \alpha, 0 \right) + \left(+\frac{\omega^2 L}{2} \cos \alpha, -\frac{\omega^2 L}{2} \sin \alpha, 0 \right).$$

Aby sme zabránili prepadnutiu cez podlahu, tak v každom momente predpokladáme $a_{1,y} = 0$. Podobne na stene dostávame podmienku $a_{2,x} = 0$.¹ Dostaneme teda dve rovnice (2 podmienky) o dvoch neznámych (F_1 a F_2). Aby sme si zjednodušili zápis, tak si zadefinujeme nasledujúce skratky: $a_1 := \frac{F_1}{m}$, $a_2 := \frac{F_2}{m}$, $s := \sin \alpha$, $c := \cos \alpha$.

Podmienky $a_{1,y} = 0$ a $a_{2,x} = 0$ sa dajú potom zapísať ako

$$a_1(1 + 3c^2 - 3f_1sc) + a_2(f_2 - 3sc - 3f_2c^2) = g - \frac{\omega^2 L}{2}s$$

$$a_1(-f_1 - 3sc + 3f_1s^2) + a_2(1 + 3s^2 + 3f_2sc) = -\frac{\omega^2 L}{2}c.$$

Ide o jednoduchú lineárnu sústavu rovníc, takže môžeme použiť maticový zápis

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g - \frac{\omega^2 L}{2}s \\ -\frac{\omega^2 L}{2}c \end{pmatrix},$$

kde koeficienty A , B , C a D zodpovedajú vyššie uvedením zátvorkám. Nájst a_1 a a_2 znamená vyriešiť maticovú rovnicu. Rovnicu stačí zľava vynásobiť inverznou maticou a dostaneme

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} g - \frac{\omega^2 L}{2}s \\ -\frac{\omega^2 L}{2}c \end{pmatrix}.$$

Pre inverznú maticu veľkosti 2x2 máme vzťah

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{AD - BC} \begin{pmatrix} D & -B \\ -C & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g - \frac{\omega^2 L}{2}s \\ -\frac{\omega^2 L}{2}c \end{pmatrix}.$$

¹V skutočnosti sme použili zbytočne prísnu podmienku. V realite máme podmienky $a_{1,y} \geq 0$ a $a_{2,x} \geq 0$. Tieto podmienky sa volajú jednostranné väzby a často vedú ku komplikovanejším rovniciam, ktoré sa dajú riešiť iba numericky.

Keď už poznáme premenné a_1 a a_2 , tak poznáme aj aké normálové sily F_1 a F_2 pôsobia a poznáme aj pohybové rovnice pre pohyb ťažiska.

$$\begin{aligned} a_{T,x} &= -f_1 a_1 + a_2 \\ &= \frac{gs(-6f_1s + 3c - 3f_1f_2c) + \omega^2 L(-2c + f_1f_2c + 3f_1s)}{4 - 2f_1f_2 + 6(f_2 - f_1)sc} \\ a_{T,y} &= -g + a_1 + f_2 a_2 \\ &= \frac{-gc(-6f_1s + 3c - 3f_1f_2c) + \omega^2 L(-2s + f_1f_2s - 3f_2c)}{4 - 2f_1f_2 + 6(f_2 - f_1)sc} \end{aligned}$$

Síce poznáme celkové zrýchlenie ťažiska v smeroch x a y , nás bude zaujímať rozloženie zrýchlenia podľa iných smerov. Z obrázka vieme, že ťažisko sa bude pohybovať po kružnici. Môžeme teda povedať, že zrýchlenie v normálovom smere (v smere $(0, 0) - T$) bude odstredivé zrýchlenie a zrýchlenie v tangenciálnom smere (kolmo na normálový smer v bode T) bude určovať uhlové zrýchlenie. Nesmieme zabudnúť, že tieto uhlové a odstredivé zrýchlenia sú iné od uhlového a odstredivého zrýchlenia tuhého telesa, keďže ide o zrýchlenia iba bodového objektu – ťažiska. Rozložiť vektor na normálový a tangenciálny smer sa dá urobiť aj pomocou matíc.

$$\begin{pmatrix} a_{T,N} \\ a_{T,T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +c & +s \\ -s & +c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{T,x} \\ a_{T,y} \end{pmatrix}$$

Nás zaujíma tangenciálne zrýchlenie $a_{T,T}$, pre ktoré dostaneme vzťah

$$a_{T,T} = \frac{-3g[-2f_1 \sin \alpha + (1 - f_1f_2) \cos \alpha] - 3\omega^2 L(f_1 \sin^2 \alpha + f_2 \cos^2 \alpha)}{4 - 2f_1f_2 + 6(f_2 - f_1) \sin \alpha \cos \alpha}.$$

Toto tangenciálne zrýchlenie je priamo spojené uhlovým zrýchlením uhla α (cez faktor $\frac{L}{2}$). Ak všetko prevedieme do jednej súradnice α , tak dostaneme diferenciálnu rovnicu druhého rádu

$$\ddot{\alpha} = \frac{-\frac{3g}{L}[-2f_1 \sin \alpha + (1 - f_1f_2) \cos \alpha] - 3\dot{\alpha}^2(f_1 \sin^2 \alpha + f_2 \cos^2 \alpha)}{2 - f_1f_2 + 3(f_2 - f_1) \sin \alpha \cos \alpha}.$$

Podúloha 1 – Riešenie cez parameter

Za toto riešenie ďakujeme Richardovi Dudekovi. Najprv si uvedomíme, že sklz tyčky po stene sa správa rovnako, ako keby oba konce tyčky boli pripevnené ku podlahe a stene. V takom prípade celý pohyb tyčky v každom momente je jednoznačne určeným jedným parametrom – uhlom α . Keďže sa ťažisko pohybuje po kružnici, tak jeho poloha je jasne definovaná ako

$$x_T(t) = \frac{L}{2} \cos \alpha(t),$$

$$y_T(t) = \frac{L}{2} \sin \alpha(t).$$

Tak ako pri predchádzajúcom riešení nájdeme celkovú silu a moment síl

$$\mathbf{F}_T = (-f_1 F_1 + F_2, -mg + F_1 + f_2 F_2, 0),$$

$$\mathbf{M}_T = \left(0, 0, \frac{L}{2} (F_1 \cos \alpha - f_1 F_1 \sin \alpha - F_2 \sin \alpha - f_2 F_2 \cos \alpha)\right).$$

Dostaneme 3 rovnice pre pohyb: 2 rovnice pre pohyb ťažiska (v smere x a y) a 1 rovnicu pre rotačný pohyb.

$$\ddot{x}_T = -f_1 \frac{F_1}{m} + \frac{F_2}{m},$$

$$\ddot{y}_T = -g + \frac{F_1}{m} + f_2 \frac{F_2}{m},$$

$$\epsilon = \frac{6}{L} \left(\frac{F_1}{m} \cos \alpha - f_1 \frac{F_1}{m} \sin \alpha - \frac{F_2}{m} \sin \alpha - f_2 \frac{F_2}{m} \cos \alpha \right).$$

Tieto 3 zrýchlenia sú viazané parametrom α . Zrýchlenie ťažiska dostaneme dvoma deriváciami vzťahu pre polohu

$$\dot{x}_T(t) = -\frac{L}{2} \sin \alpha \dot{\alpha},$$

$$\ddot{x}_T(t) = \frac{L}{2} (-\sin \alpha \ddot{\alpha} - \cos \alpha \dot{\alpha}^2),$$

$$\dot{y}_T(t) = \frac{L}{2} \cos \alpha \dot{\alpha},$$

$$\ddot{y}_T(t) = \frac{L}{2} (\cos \alpha \ddot{\alpha} - \sin \alpha \dot{\alpha}^2).$$

Vzťah medzi uhlovým zrýchlením ϵ a uhlom α je cez druhú časovú deriváciu s opačným znamienkom (lebo pri pozitívnom smere momentu, uhol α bude klesať a naopak).

$$\epsilon = -\ddot{\alpha}.$$

Po dosadení dostaneme 3 rovnice o 3 neznámych (F_1 , F_2 a $\ddot{\alpha}$).

$$\begin{aligned}\frac{L}{2}(-\sin \alpha \ddot{\alpha} - \cos \alpha \dot{\alpha}^2) &= -f_1 \frac{F_1}{m} + \frac{F_2}{m}, \\ \frac{L}{2}(\cos \alpha \ddot{\alpha} - \sin \alpha \dot{\alpha}^2) &= -g + \frac{F_1}{m} + f_2 \frac{F_2}{m}, \\ -\ddot{\alpha} &= \frac{6}{L} \left(\frac{F_1}{m} \cos \alpha - f_1 \frac{F_1}{m} \sin \alpha - \frac{F_2}{m} \sin \alpha - f_2 \frac{F_2}{m} \cos \alpha \right).\end{aligned}$$

Pre priehľadnosť ich vieme napísať v maticovom tvare

$$\begin{pmatrix} f_1 & -1 & -\frac{L}{2} \sin \alpha \\ -1 & -f_2 & +\frac{L}{2} \cos \alpha \\ -\cos \alpha + f_1 \sin \alpha & \sin \alpha + f_2 \cos \alpha & -\frac{L}{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{F_1}{m} \\ \frac{F_2}{m} \\ \ddot{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{L}{2} \cos \alpha \dot{\alpha}^2 \\ -g + \frac{L}{2} \sin \alpha \dot{\alpha}^2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Riešením sústavy rovníc nájdeme

$$\begin{pmatrix} \frac{F_1}{m} \\ \frac{F_2}{m} \\ \ddot{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{g[1+3f_2 \sin \alpha \cos \alpha + 3 \sin^2 \alpha] + L \dot{\alpha}^2 (-2 \sin \alpha - f_2 \cos \alpha)}{2[2-f_1 f_2 + 3(f_2-f_1) \sin \alpha \cos \alpha]} \\ \frac{g[f_1-3f_1 \sin^2 \alpha + 3 \sin \alpha \cos \alpha] + L \dot{\alpha}^2 (-2 \cos \alpha + f_1 \sin \alpha)}{2[2-f_1 f_2 + 3(f_2-f_1) \sin \alpha \cos \alpha]} \\ \frac{-\frac{3g}{L}[-2f_1 \sin \alpha + (1-f_1 f_2) \cos \alpha] - 3 \dot{\alpha}^2 (f_1 \sin^2 \alpha + f_2 \cos^2 \alpha)}{2-f_1 f_2 + 3(f_2-f_1) \sin \alpha \cos \alpha} \end{pmatrix}.$$

Podúloha 2

Aby sme dostali rovnicu pohybu kyvadla musíme dosiahnuť rovnicu v tvare

$$\ddot{\varphi} = -K \sin \varphi,$$

kde K je nejaká vlastná konštanta kyvadla a uhol φ môže byť v nejakom lineárnom vzťahu voči uhlu α .

Keď sa pozrieme na rovnicu pohybu pre α , tak pokiaľ menovateľ nebude konštantný, tak budeme mať stále komplikovanú závislosť. Menovateľ je konštantný iba za podmienky $f_1 = f_2 = f$. Vtedy sa rovnica zjednoduší na tvar

$$\ddot{\alpha} = -\frac{3g(1+f^2)}{L(2-f^2)} \left[-\frac{2f}{1+f^2} \sin \alpha + \frac{1-f^2}{1+f^2} \cos \alpha \right] - \frac{3f}{2-f^2} \dot{\alpha}^2.$$

Faktor $(1+f^2)$ sme vybrali dopredu zámerne. Keď zdefinujeme novú konštantu $\tan \phi := \frac{2f}{1-f^2}$, tak platí $\sin \phi = \frac{2f}{1+f^2}$ a $\cos \phi = \frac{1-f^2}{1+f^2}$ a rovnica sa zjednoduší na tvar

$$\ddot{\alpha} = -\frac{3g(1+f^2)}{L(2-f^2)} \cos(\alpha + \phi) - \frac{3f}{2-f^2} \dot{\alpha}^2,$$

čo sa dá interpretovať ako kyvadlo s konštantou $K = \frac{3g(1+f^2)}{L(2-f^2)}$, stabilnou polohou $\alpha_0 = -\phi - \frac{\pi}{2}$ a s odporom vzduchu, keďže odpor vzduchu závisí od druhej mocniny rýchlosti.

Ak chceme mať kyvadlo bez odporu, tak člen s druhou mocninou rýchlosti musí zmiznúť. To nastane iba pre $f_1 = f_2 = f = 0$.

$$\ddot{\alpha} = -\frac{3g}{2L} \cos \alpha.$$

Podúloha 3

Predtým, ako numericky spočítame čas pádu tyčky, tak musíme najprv spomenúť 2 dôležité aspekty. Prvý aspekt, musíme najprv zistiť, pri akých uhloch sa tyčka vôbec zošmykne (empirickým pozorovaním sme zistili, že niekedy sa tyčka nezošmykne). Druhý aspekt, musíme si overiť, že v našej simulácii sú normálové sily kladné počas celého času.

Na nájdenie kritického uhla α_k si postačíme s už nájdenými vzťahmi. Predpokladajme, že dynamické a statické koeficienty trenia sú rovnaké. Potom hraničný uhol nastane, keď rovnica pre $\ddot{\alpha}$ nám dá nulové zrýchlenie a stabilnú polohu. V stabilnej polohe nemáme rýchlosť, preto člen $\dot{\alpha} = 0$ vypadne. Po zopár algebraických úpravách dostaneme

$$\tan \alpha_k = \frac{1 - f_1 f_2}{2f_1}.$$

Vieme preto, že počiatočný uhol musí byť menší

$$\alpha(t=0) < \alpha_k = \arctan \frac{1 - f_1 f_2}{2f_1}.$$

Môžeme si všimnúť, že v prípade $f_1 f_2 > 1$ sa tyčka nikdy nezošmykne a je držaná stenou a podlahou v stabilnej polohe (predstavte si stenu, podlahu a tyčku z gumeného materiálu).

Pokiaľ ide o druhý aspekt, v každom čase simulácie vieme vypočítať normálové sily a overiť, či sú kladné. Môžeme si však všimnúť, že ak zanedbáme členy s $\dot{\alpha}^2$ (napríklad pri začiatku pádu), tak obe normálové sily budú vždy kladné.² Preto môžeme očakávať, že sa tyčka odlepí od steny/podlahy až v prípade, ak bude dostatočne rýchlo rotovať.

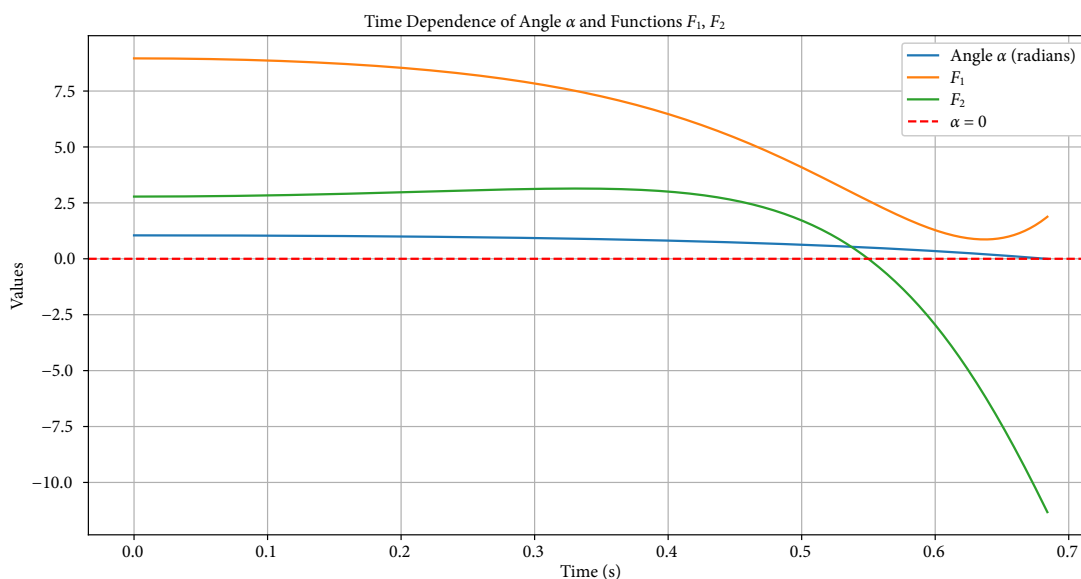
Ďalej si môžeme všimnúť, že pre parametre, keď tyčka môže spadnúť ($f_1 f_2 < 1$) je menovateľ kladný a teda nám nehrozí žiadne nefyzikálne stúpanie uhla α .

Príklad numerickej simulácie, ktorá využíva Eulerovu integračnú metódu a je implementovaná v jazyku Python, je uvedený nižšie. V skratke, simulácia zadefinuje potrebné parametre systému (g , L , f_1 , f_2),

²Pre silu F_1 je to jasné priamo zo vzťahu. Pre silu F_2 to nie je tak zrejmé. Ale ak chceme šmýkajúcu tyčku, tak uhol α musí byť menší ako $\arctan \frac{1-f_1 f_2}{2f_1}$. Vieme aj, že to je určite uhol menší ako $\arctan \frac{1}{2f_1}$. Jednoduchou analýzou už iba overíme, že na rozmedzí hodnôt od 0 po $\arctan \frac{1}{2f_1}$ naberá sila F_2 iba kladné hodnoty.

počiatočné parametre ($\alpha(t=0)$ a $\dot{\alpha}(t=0) = 0$), skontrolujeme, či sa tyčka šmýka, nastavíme si polia, kam si budeme ukladať premenné, vykonáme slučku while dokiaľ uhol neklesne pod nulu, vypočítame v každom čase zmenu uhla, rýchlosti uhla a normálové sily (F_1 a F_2) a nakoniec výsledky zobrazíme v grafe.

Napríklad pre parametre $L = 1$ m, $f_1 = 0,2$, $f_2 = 0,1$, $\alpha_0 = \frac{\pi}{3}$ dostaneme čas 0,685 s. Môžeme si však všimnúť, že normálová sila N_2 tesne pred koncom klesne ku záporným hodnotám. Takže tyčka v spodnej časti trajektórie sa pohybuje dostatočnou rýchlosťou, aby sa 'odrazila' od podlahy. Pri skúšaní iných parametrov dostávame podobné správanie. Kvalitatívne sa pri páde potenciálna energia tyčky nedokonale (kvôli treniu) premení na rotačnú kinetickú energiu až do bodu, keď na tyčku prestane pôsobiť normálová sila od podlahy. Takže naša lenivá tyčka si tesne pred koncom vyskočí.



Obrázok 2.2.2: Závislosť uhla α (modrá), normálovej sily F_1 (oranžová) a F_2 (zelená) od času. Nulový uhol je vyznačený prerušovanou červenou čiarou.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Constants
g = 9.81 # gravity, m/s^2
l = 1.0 # length, m
f1 = 0.2 # friction coefficient
f2 = 0.1 # friction coefficient

# Initial conditions
alpha_0 = np.pi / 3 # initial angle in radians
dot_alpha_0 = 0 # initial angular velocity

# Check if the initial angle is below the critical angle
critical_angle = np.arctan((1 - f1 * f2) / (2 * f1))
if alpha_0 > critical_angle:
    raise ValueError(
        f"Initial angle {alpha_0} is not below the critical angle {critical_angle:.4f} radians."
    )
```

```

# Time step and maximum time
dt = 0.001 # time step, seconds
max_time = 2 # maximum simulation time, seconds

# Initialize variables
alpha = alpha_0
dot_alpha = dot_alpha_0
time = 0
final_time = None

# Lists to store results for plotting
times = []
alphas = []
F1_values = []
F2_values = []

# Euler integration loop
while alpha > 0 and time <= max_time:
    # Calculate second derivative using the given formula
    d2alpha = (
        -(3 * g / l)
        * (
            -2 * f1 * np.sin(alpha)
            + (1 - f1 * f2) * np.cos(alpha)
            + (l / g)
            * dot_alpha**2
            * (f2 * np.cos(alpha) ** 2 + f1 * np.sin(alpha) ** 2)
        )
        / (2 - f1 * f2 + 3 * (f2 - f1) * np.sin(alpha) * np.cos(alpha))
    )

    # Calculate N1 and N2
    F1 = (
        g * (1 + 3 * f2 * np.sin(alpha) * np.cos(alpha) + 3 * np.sin(alpha) ** 2)
        + l * dot_alpha**2 * (-2 * np.sin(alpha) - f2 * np.cos(alpha))
    ) / (2 * (2 - f1 * f2 + 3 * (f2 - f1) * np.sin(alpha) * np.cos(alpha)))

    F2 = (
        g * (f1 - 3 * f1 * np.sin(alpha) ** 2 + 3 * np.sin(alpha) * np.cos(alpha))
        + l * dot_alpha**2 * (-2 * np.cos(alpha) + f1 * np.sin(alpha))
    ) / (2 * (2 - f1 * f2 + 3 * (f2 - f1) * np.sin(alpha) * np.cos(alpha)))

    # Update angular velocity and angle using Euler method
    dot_alpha += d2alpha * dt
    alpha += dot_alpha * dt

    # Append current values to lists
    times.append(time)
    alphas.append(alpha)
    F1_values.append(F1)
    F2_values.append(F2)

    # Increment time
    time += dt

    # Record the final time when the angle becomes 0
    if alpha <= 0 and final_time is None:
        final_time = time

```

```
# Print the final time
if final_time is not None:
    print(f"The angle became 0 at time {final_time:.4f} seconds.")
else:
    print("The angle did not reach 0 within the simulation time.")

# Plot the results
plt.figure(figsize=(12, 6))
plt.plot(times, alphas, label="Angle \u03b1 (radians)")
plt.plot(times, F1_values, label="F1")
plt.plot(times, F2_values, label="F2")
plt.axhline(0, color="red", linestyle="--", label="\u03b1 = 0")
plt.title("Time Dependence of Angle \u03b1 and Functions F1, F2")
plt.xlabel("Time (s)")
plt.ylabel("Values")
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()
```

2.3 Kolabujúci elektrón

vzorák Jakub, opravoval Jakub (jakocak@gmail.com)

Podúloha 1

Aby sme získali lineárny koeficient c_i pre konkrétny vlastný stav $\varphi_i(\mathbf{r})$, tak rovnicu (2.3.3) zo zadania pre násobíme $\varphi_i^*(\mathbf{r})$ a preintegrujeme cez celý priestor.

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \left(\sum_{\forall j} c_j \varphi_j(\mathbf{r}) \right) \, d\mathbf{r}$$

Následne vyberieme sumu pred integrál a použijeme rovnicu (2.3.2) zo zadania.

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = \sum_{\forall j} c_j \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = \sum_{\forall j} c_j \delta_{ij} = c_i$$

Použitím tejto rovnice vieme vypočítať všetky lineárne koeficienty a pravdepodobnosti.

Aj keď všeobecná funkcia pre stavy vyzerá veľmi zložito, pre základný stav má jednoduchý tvar. Pre pôvodný stav elektrónu ($Z = 1$, $n = 1$, $l = 0$ a $m = 0$) dostaneme

$$\Psi(\mathbf{r}) = \varphi_{1,0,0}^{Z=1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}.$$

Pre základný stav nového jadra ($Z = 2$, $n = 1$, $l = 0$ a $m = 0$) máme

$$\varphi_{1,0,0}^{Z=2}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} e^{-2r}.$$

Potom lineárny koeficient c_{100} sa dá vypočítať ako

$$\begin{aligned}
 c_{100} &= \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_{100}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sqrt{\frac{8}{\pi}} e^{-2r} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi \\
 &\stackrel{\heartsuit}{=} \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \int_0^{+\infty} r^2 e^{-3r} \, dr \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \\
 &\stackrel{\diamondsuit}{=} \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \left[e^{-3r} \left(-\frac{1}{3} r^2 - \frac{2}{9} r - \frac{2}{27} \right) \right]_0^{+\infty} [-\cos \theta]_0^\pi [\phi]_0^{2\pi} \\
 &\stackrel{\clubsuit}{=} \frac{16\sqrt{2}}{27},
 \end{aligned}$$

kde sme rozdelili integrál na tri integrály podľa jednotlivých súradníc ($\heartsuit$), použili per partes na nájdenie integrálu s exponenciálnou funkciou ($\diamondsuit$) a integrály sme vyčíslili ($\clubsuit$). Dostaneme teda, že pravdepodobnosť kolapsu do základného stavu nového systému je $|c_{100}|^2 = \frac{512}{729} \approx 70,23\%$.

Podúloha 2

Vypočítať tento koeficient pre ľubovoľný stav vo všeobecnosti bude náročnejšie. Predpokladajme, že nás zaujíma všeobecný väzobný stav φ_{nlm} . Pre lineárny koeficient dostaneme

$$\begin{aligned}
 c_{nlm} &= \int_{\mathbb{R}^3} (R_{nl}^{Z=2}(r) Y_{lm}(\theta, \phi))^* R_{10}^{Z=1}(r) Y_{00}(\theta, \phi) \, d\mathbf{r} \\
 &= \int_0^{+\infty} (R_{nl}^{Z=2}(r))^* R_{10}^{Z=1}(r) r^2 \, dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi,
 \end{aligned}$$

kde môžeme využiť to, že funkcie Y_{lm} sú na seba ortogonálne podľa vzťahu³

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \begin{cases} 1 & , l = l' \wedge m = m' \\ 0 & , l \neq l' \vee m \neq m' \end{cases}.$$

To znamená, že iba stavy $l = 0$ a $m = 0$ majú nenulovú pravdepodobnosť kolapsu.

Pokračovaním dostaneme

$$\begin{aligned}
 c_{nlm} &= \delta_{l0} \delta_{m0} \int_0^{+\infty} R_{n0}^{Z=2}(r) R_{10}^{Z=1}(r) r^2 \, dr \\
 &= \delta_{l0} \delta_{m0} \frac{8\sqrt{2}}{n^{\frac{5}{2}}} \int_0^{+\infty} L_{n-1}^{(1)}\left(\frac{4r}{n}\right) r^2 e^{-\frac{n+2}{n}r} \, dr.
 \end{aligned}$$

³Ak by niekoho zaujímal detailný dôkaz, tak tu je skrátená verzia: V prvom kroku sa ukáže, že integrál je nenulový iba pre $m = m'$. A v druhom kroku môžeme rovno uvažovať $m = m'$ dostaneme vzťah pre ortogonalitu pridružených Legendrových polynómov.

Dostávame integrál súčinu polynómu a exponenciály. Použitím vzťahu pre zovšeobecnený Laguerrov polynóm dostaneme

$$\begin{aligned} c_{nlm} &= \delta_{l0} \delta_{m0} \frac{8\sqrt{2}}{n^{\frac{5}{2}}} \int_0^{+\infty} \frac{\left(\frac{4r}{n}\right)^{-1} e^{\left(\frac{4r}{n}\right)}}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{d\left(\frac{4r}{n}\right)^{n-1}} \left(e^{-\left(\frac{4r}{n}\right)} \left(\frac{4r}{n}\right)^n \right) r^2 e^{-\frac{n+2}{n}r} dr \\ &= \delta_{l0} \delta_{m0} \frac{8\sqrt{2}}{n^{\frac{5}{2}}(n-1)!} \int_0^{+\infty} \frac{d^{n-1}}{dr^{n-1}} \left(r^n e^{-\frac{4}{n}r} \right) r e^{-\frac{n-2}{n}r} dr \end{aligned}$$

Zadefinujeme si teda hľadaný integrál ako

$$I(a, b, n) = \int_0^{+\infty} r e^{-ar} \frac{d^{n-1}}{dr^{n-1}} (r^n e^{-br}) dr.$$

Tento integrál sa dá vypočítať ako parciálna derivácia iného integrálu $J(a, b, n)$

$$I(a, b, n) = -\frac{\partial}{\partial a} J(a, b, n), \quad (2.3.1)$$

kde nový integrál je definovaný ako

$$J(a, b, n) = \int_0^{+\infty} e^{-ar} \frac{d^{n-1}}{dr^{n-1}} (r^n e^{-br}) dr.$$

Ak použijem na integrál $J(a, b, n)$ raz per partes, tak dostaneme

$$J(a, b, n) = \left[e^{-ar} \frac{d^{n-2}}{dr^{n-2}} (r^n e^{-br}) \right]_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} (-a) e^{-ar} \frac{d^{n-2}}{dr^{n-2}} (r^n e^{-br}) dr.$$

Prvý člen je nulový, keďže $(n-2)$ -tá derivácia bude mať tvar $e^{-br} P(r)$, kde P bude polynóm s nenulovými koeficientami od druhého rádu po n -tý rád. Zjednodušené dostaneme

$$J(a, b, n) = a \int_0^{+\infty} e^{-ar} \frac{d^{n-2}}{dr^{n-2}} (r^n e^{-br}) dr.$$

Opakovaným použitím tohto postupu sa postupne zbavíme všetkých derivácií a dostaneme

$$J(a, b, n) = a^{n-1} \int_0^{+\infty} e^{-ar} (r^n e^{-br}) dr = \frac{a^{n-1} n!}{(a+b)^{n+1}}.$$

Keď poznáme vzťah pre integrál $J(a, b, n)$, tak vieme vypočítať aj integrál $I(a, b, n)$ z rovnice 2.3.1a dostaneme

$$I(a, b, n) = -\frac{a^{n-2} n!}{(a+b)^{n+2}} [b(n-1) - 2a].$$

Pre naše hodnoty $a = \frac{n-2}{n}$ a $b = \frac{4}{n}$ dostaneme

$$I\left(\frac{n-2}{n}, \frac{4}{n}, n\right) = -\frac{2(n-2)^{n-2} n^4 n!}{(n+2)^{n+2}}.$$

A výsledný koeficient je⁴

$$c_{nlm} = -\delta_{l0}\delta_{m0}16\sqrt{2}n^{\frac{5}{2}}\frac{(n-2)^{n-2}}{(n+2)^{n+2}}.$$

Nasledujúca tabuľka hovorí, aké sú pravdepodobnosti, že elektrón skolabuje do stavu φ_{n00} .

n	$ c_{n00} ^2$
1	70.23%
2	25.00%
3	1.27%
4	0.39%
5	0.17%
6	0.09%

Vidíme, že pre $n = 1$ dostávame konzistentný výsledok s podúlohou 1.

Podúloha 3

Aj keď funkcie $\varphi_{nlm}(\mathbf{r})$ sú na seba kolmé, pokrývajú celý priestor a je ich nekonečne veľa, tak aj napriek tomu tvoria neúplnú bázu všetkých funkcií. Funkcie $\varphi_{nlm}(\mathbf{r})$ popisujú takzvané väzobné stavy (stavy, keď elektrón je naviazaný na jadro a neopúšťa ho). Existujú aj neväzobné stavy, ktoré popisujú odchod elektrónu z jadra – ionizáciu.⁵

Aby sme zistili pravdepodobnosť ionizácie, tak musíme spočítať všetky pravdepodobnosti kolapsu do hocikákeho väzobného vlastného stavu. Zvyšok do 100% je pravdepodobnosť ionizácie, teda kolapsu do vlastných stavov, ktoré sa pre veľké vzdialenosti správajú ako elektrónové vlny⁶ $e^{ik\cdot r}$. Tieto stavy sa volajú rozptylové vlastné stavy a zodpovedajú práve stavom popisujúce ionizáciu. Koeficienty c_{n00} s rastúcim číslom n klesajú veľmi rýchlo. Pre veľké n sa koeficient správa ako

$$\begin{aligned} c_{n00} &= -16\sqrt{2}n^{\frac{5}{2}}\frac{(n-2)^{n-2}}{(n+2)^{n+2}} = -16\sqrt{2}n^{\frac{5}{2}}e^{(n-2)\ln(n-2)-(n+2)\ln(n+2)} \\ &= -16\sqrt{2}n^{\frac{5}{2}}e^{(n-2)[\ln n + \ln(1-\frac{2}{n})]-(n+2)[\ln n + \ln(1+\frac{2}{n})]} \\ &\approx -16\sqrt{2}n^{\frac{5}{2}}e^{(n-2)[\ln n - \frac{2}{n}]- (n+2)[\ln n + \frac{2}{n}]} \\ &\approx -16\sqrt{2}e^{-4}n^{-\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

Pre pravdepodobnosť ionizácie p_{ion} teda dostávame

$$p_{\text{ion}} = 1 - \sum_{n=1}^{+\infty} |c_{n00}|^2.$$

Na výpočet tejto hodnoty môžeme spočítať niekoľko prvých členov a zvyšok vieme odhadnúť pomocou asymptotického správania. Nakoniec dostaneme $p_{\text{ion}} \approx 2,63\%$. Takže s veľkou pravdepodobnosťou 97,4%

⁴Môžeme si všimnúť, že pre $n = 2$ dostávame nedefinovaný výraz 0^0 , ktorý v našom prípade sa vyhodnotí ako 1, keďže je to najprirodzenejšie dodefinovanie vzťahu x^x pre $x = 0$. Môžeme si to overiť priamym výpočtom integrálu pre $n = 2$.

⁵Aby sme boli úplní, tak popisujú okrem odchodu aj príchod elektrónu k jadrú.

⁶V našom prípade je to ešte trochu komplikovanejšie. Pre dostatočne rýchlo klesajúce potenciály je to pravda. Ale Coulombov potenciál klesá pomaly a dodatočne tam vzniká ešte fázový posun, ktorý pridá do exponenciály člen úmerný $\sim \log(r)$.

sa elektrón zachytí a neopustí jadro, ale existuje šanca 2,6%, že elektrón slobodne újde z jadra. Nenulovosť tejto pravdepodobnosti nám dokazuje, že funkcie $\varphi_{nlm}(\mathbf{r})$ netvoria úplnú bázu.