Semana 3 teoría

Carlos Alberto Calvachi Salas

February 14, 2022

1 Colisiones 2D de duración finita (juguemos billar)

1.1 ¿Cuál es el significado físico de K?

Puede significar el coeficiente de restitución de la fuerza de la interacción partícula - partícula. De hecho, cuando las esferas interactúan, esta fuerza se puede relacionar con una fuerza de restitución pero, a diferencia de la fuerza debido a la deformación de un muelle, depende del cubo de los centros de las bolas. Por ejemplo, en una dimensión, la fuerza que sentiría una partícula es $F_{\text{hard}} = -Kx^3$, entonces K significaría el coeficiente de restitución de esta fuerza pseudoelástica.

1.2 ¿Es conservativa la fuerza?

Según la implementación del vídeo compartido en Bloque Neón, la fuerza sería una fuerza de repulsión radial. Entonces, dado que la fuerza es radial, su rotacional es cero y entonces la fuerza sería conservativa dado que su energía asociada no depende del camino.

1.3 Creación del método de fuerza en la Clase Particle

El código se encuentra especificado en el archivo `pool.py`

1.4 Energía potencial

Si se parte que la fuerza es conservativa, se puede calcular la integral

$$u(r) = -\int_{\mathcal{O}}^{r_f} \vec{f} \cdot \vec{dr}. \tag{1}$$

Al ser la fuerza independiente del camino, se puede poner $\vec{dr} = dr\hat{r}$, donde $\vec{r}$ es el vector unitario asociado al vector $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ y r su magnitud. El punto de referencia corresponde cuando las esferas no se han deformado, es decir $r = 0$. Para este caso $f(0) = 0$ en sentido radial. Además, $f = -Kr^3$.

Entonces,

$$u(r) = \frac{1}{4}Kr^4. \tag{2}$$

Esto es consistente con el hecho de que cuando no hay contacto entre las bolitas, la gráfica de energía potencial del enunciado de la tarea sea 0J.

1.5 Simulación tres bolitas de billar

La simulación se puede visualizar al correr `python pool.py`

1.6 Gráfica de las energías totales del sistema

Resulta después de cerrar la simulación y de correr `python pool.py`

2 Tiempo de vida medio

La gráfica se obtiene al correr `python freePath.py`

3 Termodinámica

3.1 Temperatura de equilibrio de la sección derecha

Para que el pistón permezca inmóvil, se deben igualar las presiones en ambas cavidades. En particular, para que la presión de ambas cavidades permanezcan iguales se debe cumplir que

$$\frac{T_1^0}{V_1} = \frac{T_2^0}{V_2}. \tag{3}$$

La anterior ecuación se desprende de la ley de los gases ideales. Ahora, según el enunciado, el pistón está más cerca al lado derecho (2). De hecho, en esta cavidad, según el enunciado, está a 1/3 de la longitud total. Por tanto, el volumen del lado izquierdo (1) es 2/3 del total, al asumir que no hay partición de las cavidades respecto al área transversal. Entonces, se cocluye de la ecuación (3) que

$$T_2^0 = \frac{V_2}{V_1} T_1^0 = \frac{T_1^0}{2} = 200\text{K}. \tag{4}$$

3.2 Establecer el sistema de ecuaciones diferenciales

Primera ley de la termodinámica

$$dU = dQ + dW \tag{5}$$

como $dW = 0$, la variación de la energía interna corresponde con el calor que entra al sistema. Como el sistema es un gas, $dQ = nc_v dT$.

Por otra parte, se tiene la ley de trasnferencia de calor de Fourier que se expresa como

$$\vec{q} = -k\vec{\nabla}T, \tag{6}$$

donde $\vec{q}$ corresponde con el calor transferido por unidad de tiempo por unidad de area. En el caso ideal, que es unidimensional, sólo hay dos extremos con temperaturas T_1 y T_2. Por tanto, $q = dQ/Adt$ y el gradiente es $dT/dx \approx \Delta T/\Delta x = \Delta T/l$. Entonces, dado que el gas es ideal, $dU = nc_v dT$. Por tanto, para el sistema 1, se concluye que

$$nc_v \frac{dT_1}{dt} = -\frac{kA}{l}(T_1 - T_2), \tag{7}$$

aquí $\Delta T = T_1 - T_2$. Por conservación de energía para todo el sistema 12, que es aislado, se cumpliría que $dU_1 = -dU_2$. Por lo tanto,

$$nc_v \frac{dT_2}{dt} = \frac{kA}{l}(T_1 - T_2). \tag{8}$$

3.3 Solución analítica del sistema de ecuaciones diferenciales

Se empieza por reescribir convenientemente el sistema de ecuaciones

$$
\begin{aligned}
\frac{dT_1}{dt} &= -C(T_1 - T_2) \\
\frac{dT_2}{dt} &= C(T_1 - T_2),
\end{aligned} \tag{9}
$$

donde $C = kA/nc_v l$ y $c_v = 3/2R$. Este sistema de ecuaciones lineales de primer orden con dos variables se puede escribir en términos de una ecuación diferencial de segundo orden. Se empieza por observar que

$$
\begin{aligned}
T_1'' &= -C(T_1' - T_2'), \\
&= -C(T_1' - C(T_1 - T_2)) \\
&= -C\left(T_1' - C\left(T_1 - \left(\frac{T_1'}{C}\right) - T_1\right)\right) \\
&= -2CT_1'
\end{aligned} \tag{10}
$$

Una solución se da cuando T_1 es una constante. Sin embargo, al ser T_1 y T_2 diferentes, se espera que no aplique esta solución. Entonces, la ecuación diferencial se reduce a

$$
\frac{d}{dt}(T_1' + 2CT_1) = 0 \tag{11}
$$

Por lo tanto, al usar que la solución diferencial dentro del paréntesis es

$$
T_1' + 2CT_1 = a_1, \tag{12}
$$

donde a_1 es una constante. Ahora, se procede con la solución de la ecuación diferencial

$$
\begin{aligned}
\frac{dT_1}{dt}e^{2Ct} + 2CT_1e^{2Ct} &= a_1e^{2Ct} \\
\frac{d}{dt}\left(T_1e^{2Ct}\right) &= a_1e^{2Ct} \\
T_1e^{2Ct} &= \frac{a_1}{2C}e^{2Ct} + a_2 \\
T_1 &= a_1 + a_2e^{-2Ct},
\end{aligned} \tag{13}
$$

donde la constate a_1 absorbió el $2C$. Las condiciones iniciales para esta ecuación son $T_1(t=0) = T_1^0$ y $T_1'(t=0) = -C(T_1^0 - T_2^0)$. Estas condiciones imponen

$$
\begin{aligned}
a_1 + a_2 &= T_1^0 \\
-2Ca_2 &= -C(T_1^0 - T_2^0).
\end{aligned} \tag{14}
$$

Por lo tanto,

$$
\begin{aligned}
a_1 &= \frac{1}{2}(T_1^0 + T_2^0). \\
a_2 &= \frac{1}{2}(T_1^0 - T_2^0).
\end{aligned} \tag{15}
$$

Entonces, se obtiene la solución

$$T_1 = \frac{1}{2}(T_1^0 + T_2^0) - \frac{1}{2}(T_1^0 - T_2^0)e^{-2Ct}. \tag{16}$$

Por razones que se comentan en la sección 3.5, $T_1 + T_2$ es una constante en el tiempo por lo que

$$T_2 = T_1^0 + T_2^0 - T_1 = \frac{1}{2}(T_1^0 + T_2^0) + \frac{1}{2}(T_1^0 - T_2^0)e^{-2Ct}. \tag{17}$$

3.4 Solución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales

Se utiliza el método Runge Kutta. La solución y las gráficas se encuentran al ejectuar `python ODEsolver.py`

3.5 Límites termodinámicos

Si se suman las ecuaciones diferenciales 9, se tiene que

$$\frac{d(T_1 + T_2)}{dt} = 0. \tag{18}$$

Es decir, T_1+T_2 es una constante ene el tiempo. Ahora, en el límite termodinámico, $dT_1/dt = dT_2/dt = 0$, dado que las temperaturas en el límite termodinámico son independientes del tiempo. Entonces, al referirse de nuevo a la ecuación 9, se concluye que $T_1 = T_2$. Finalmente, dado que $T_1 = 400\text{K}$ y $T_2 = 200\text{K}$, se concluye que

$$\lim_{t\to\infty} T_1 = \lim_{t\to\infty} T_2 = \frac{T_1 + T_2}{2} = 300\text{K}. \tag{19}$$

4 Cython

La gráfica se obtiene al compilar y ejecutar `main.cpp`, que produce el archivo `gaussianDerivative.txt`, que a su vez es leído por `graphGaussianDerivative.py`.