

1 Odvození 1. Keplerova zákona pomocí Hamiltonovy-Jacobiho rovnice

Z Newtonova gravitačního zákona

$$F = \frac{k}{r^2}$$

odvodíme trajektorii tělesa, které je vystavené vlivu Newtonova gravitačního potenciálu $\frac{k}{r}$. Výcházíme z hamiltoniánu $H = H(r, \phi, p_r, p_\phi)$ tělesa o hmotnosti m nacházejícího se ve výše zmíněném potenciálním poli:

$$H(r, p_r, p_\phi) = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right) - \frac{k}{r}. \quad (1)$$

Všimněme si, že hamiltonián (1) explicitně nezávisí na souřadnici ϕ . Příslušná hybnost p_ϕ potom bude integrálem pohybu. V hamiltoniánu vyjádříme hybnosti pomocí akce S . Platí

$$p_r = \frac{\partial S}{\partial r}, \quad (2)$$

$$p_\phi = \frac{\partial S}{\partial \phi}. \quad (3)$$

V této chvíli můžeme sestavit Hamilton-Jacobiho rovnici:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H \left(r, \frac{\partial S}{\partial r}, \frac{\partial S}{\partial \phi} \right). \quad (4)$$

Jelikož pole gravitační síly je konzervativní, můžeme rovnici (4) rozdělit na dvě

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -E, \quad (5)$$

$$\frac{1}{m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\frac{\partial S}{\partial \phi}}{r} \right)^2 \right] - \frac{k}{r} = E \quad (6)$$

a akci hledat ve tvaru $S = S_0(r, \phi) - Et$. Pro výraz (6) platí

$$\alpha \left(\frac{\partial S_0}{\partial \phi}, \beta \left(r, \frac{\partial S_0}{\partial r} \right) \right) = 0,$$

a proto můžeme proměnné dále separovat:

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial \phi}\right)^2 = p_\phi^2, \quad (7)$$

$$r^2 \left(\frac{\partial S_r}{\partial r}\right)^2 - kr - Er^2 = -p_\phi^2. \quad (8)$$

Odtud je zřejmé, že p_ϕ je skutečně konstantní. Akci nyní zapíšeme ve tvaru

$$S = -Et + p_\phi \phi + S_r(r). \quad (9)$$

Zbývá vyjádřit $S_r(r)$ z výrazu (9). Pouhou úpravou obdržíme

$$S_r(r) = \int \sqrt{2mE + \frac{2mk}{r} - \frac{p_\phi^2}{r^2}} dr. \quad (10)$$

Derivujeme-li akci S podle zobecněných hybností p_ϕ a E obdržíme zobecněné souřadnice ϕ_0 a t_0 . Výjdeme z rovnice

$$\phi_0 = \frac{\partial S}{\partial p_\phi}. \quad (11)$$

Dosazením (9) do (11) získáme vyjádření pro ϕ_0 . Po provedení derivace budeme mít

$$\phi_0 = \phi - \int \frac{p_\phi dr}{\sqrt{2mE + 2mk/r - p_\phi^2/r^2}}. \quad (12)$$

Integrál můžeme vyřešit zavedením substituce $u = \frac{1}{r}$

$$\phi - \phi_0 = \int \frac{p_\phi}{\sqrt{2mE + 2mku - p_\phi^2 u^2}}. \quad (13)$$

Dále přímo integrujeme nebo si řešení tohoto integrálu vyhledáme. Dostáváme

$$\phi - \phi_0 = \arcsin \left[\frac{-p_\phi u + 2mk}{\sqrt{(2mk)^2 + 8p_\phi m E}} \right]. \quad (14)$$

Výraz (14) můžeme upravit do tvaru

$$u = \frac{1}{p} (1 - e \sin(\phi - \phi_0)), \quad (15)$$

kde

$$p = \frac{p_\phi^2}{mk}$$

a

$$e = \sqrt{1 + \frac{2Ep_\phi^2}{k^2 m}},$$

což je obecná rovnice kuželosečky v polárních souřadnicích.

2 Chladnutí homogenní koule

Uvažujme homogenní kouli o teplotě $T_1 = 100^\circ\text{C}$, která je od určitého okamžiku $t = 0$ ponořena do vody o teplotě $T_2 = 0^\circ\text{C}$. Na následujících řádcích budeme modelovat chladnutí této koule v čase. Vzhledem k symetrii pracujeme ve sférických souřadnicích. Je zřejmé, že problém je plně popsán hodnotami $U = U(r, t)$.

Řešíme parabolickou úlohu s homogenními okrajovými podmínkami

$$\begin{aligned}\lambda U_t &= \Delta U, \\ U(r, t) &= U(-r, t), \\ U(R, t) &= 0.\end{aligned}$$

I když má řešení fyzikální význam pouze pro $r \in (0, R)$, rovnici budeme nejprve řešit na celém intervalu a požadovat sudé řešení (první okrajová podmínka).

Laplaceův operátor rozepíšeme v polárních souřadnicích, přičemž jeho úhlovou část vynecháme. Dosazením obdržíme

$$\lambda U_t = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) U.$$

Řešení rovnice hledáme ve faktorizovaném tvaru $U = T(t) R(r)$ a navíc zavedeme substituci $R(r) = \frac{u(r)}{r}$. Vyjádříme potřebné derivace a následně dosadíme:

$$\lambda T' \frac{u}{r} = \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{u}{r} \right) T.$$

Vypočítáme pravou stranu rovnice

$$\lambda T' \frac{u}{r} = \frac{u''}{r} T$$

a separujeme proměnné

$$\lambda \frac{T'}{T} = \frac{u''}{u} = -E,$$

kde E je konstanta. Obdržíme dvě samostatné obyčejné diferenciální rovnice:

$$T' + \frac{E}{\lambda} T = 0, \tag{16}$$

$$u'' + E u = 0. \tag{17}$$

Rovnice (16) je ODR prvního řádu, jejíž řešení je ve tvaru exponenciální funkce

$$T = C_0 e^{-\frac{E}{\lambda} t}, \tag{18}$$

rovnici (17) řešíme jako ODR druhého řádu. Pomocí charakteristické rovnice nalezneme řešení a vrátíme se k $R = \frac{u}{r}$. Získáme řešení prostorové části:

$$R = \frac{C_1}{r} e^{i\sqrt{E}r} + \frac{C_2}{r} e^{-i\sqrt{E}r}, \tag{19}$$

kde C_1 a C_2 jsou libovolné konstanty.

Konstanty volíme tak, aby byly splněny i okrajové podmínky. Řešení bude sudé vzhledem k prostorové proměnné právě tehdy, když v rovnici (19) uvažujeme $C_1 = C_2 = C$. Pro jednoduchost položíme $C = \frac{1}{i}$. Dostáváme

$$R = \frac{C}{r} \left[e^{i\sqrt{E}r} - e^{-i\sqrt{E}r} \right] = \frac{1}{r} \sin \left(\sqrt{E}r \right).$$

Dále najdeme takový tvar E , aby řešení splňovalo druhou okrajovou podmínku. Vztah pro R dosadíme do podmínky a obdržíme

$$\sin \left(\sqrt{E}R \right) = 0.$$

Funkce sinus je nulová jen pro celočíselné násobky čísla π . Odtud získáme konstantu E ve tvaru

$$E = \left(\frac{k\pi}{R} \right)^2,$$

kde $k \in \mathbb{N}$.

Dostali jsme posloupnost funkcí, jež jsou řešením rovnice vedení tepla a současně splňují také okrajové podmínky:

$$U_k = e^{-(k\pi/R)^2 t} \frac{\sin(k\pi r/R)}{r}.$$

Vzhledem k principu superpozice hledáme konečné řešení (splňující počáteční podmínku) ve tvaru lineární kombinace funkcí U_k .

$$U(r, t) = \sum_k C_k e^{-(k\pi/R)^2 t} \frac{\sin(k\pi r/R)}{r},$$

konstanty C_k vypočítáme z počáteční podmínky

$$U(r, 0) = 100.$$

3 Rovnovážná poloha elektronů na sféře

3.1 Úvod

Vytvořený program v Matlabu počítá rovnovážné polohy elektronů na povrchu sféry. Pokud by byly výpočty dostatečně rychlé, je možné pomocí tohoto programu modelovat hustotu elektronů na povrchu sféry, která je umístěna do libovolného elektrického pole. Výpočty by byly zvláště užitečné v případech nehomogenních polí, kdy hustoty nelze spočítat analyticky. Je také možné zobecnit výpočty na prostor celé koule.

3.2 Popis funkce programu

Na začátku je náhodně negenerován požadovaný počet bodů sféry, které určují výchozí polohy jednotlivých elektronů ve sférických souřadnicích (ϕ, θ) . Jelikož program paralelně pracuje také s kartézskými souřadnicemi těchto bodů, jsou provedeny převody poloh do kartézských souřadnic pomocí transformačních rovnic:

$$x = R \cos(\phi) \sin(\theta),$$

$$y = R \sin(\phi) \sin(\theta),$$

$$z = R \cos(\theta).$$

Vycházíme z předpokladu, že pohyb elektronů na povrchu sféry je ovlivněn pouze tečnými složkami elektrických sil, které vznikají silovým působením nabitých elektronů. Pro daný elektron jsou nejprve spočítány příspěvky velikosti sil od jednotlivých elektronů podle Coulombova zákona:

$$F_e = k \frac{e^2}{r^2}.$$

Při výpočtu rovnovážných poloh lze konstanty volit libovolně, pro přehlednost jsou však přednastaveny hodnoty $e = 1$ a $k = 1$. Elektrická síla působí rovnoběžně ve směru spojnice obou elektronů. Z hodnot poloh elektronů v kartézských souřadnicích lze směry sil snadno zjistit dosazením do vztahu:

$$(x_2 - x_1, y_2 - y_1, z_2 - z_1)$$

Z těchto směrových vektorů program stanoví normované tečné průměty na povrch sféry. Ty jsou dále násobeny příslušnými velikostmi sil a vektorově sečteny. Dostáváme tečnou výslednici sil na daný elektron. Jeho posunutí je dáno kolmým průmětem tečné výslednice do směru souřadných sférických vektorů v daném bodě. Souřadné vektory v daném bodě definujeme:

$$v_\phi = (-\sin \phi, \cos \phi, 0),$$

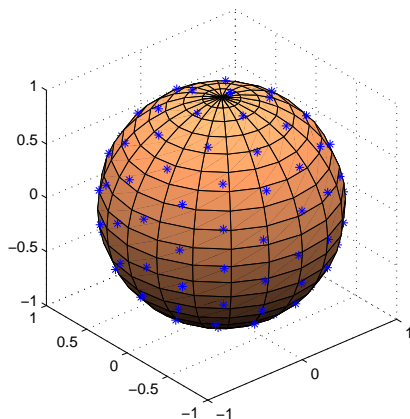
$$v_\theta = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta),$$

$$v_r = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta).$$

Z definice výslednice bude průmět do směru vektoru v_r roven 0. Vektor posunutí pak na-
definujeme jako dvourozměrný normovaný vektor. Posunutí elektronu v dané iteraci je tedy

jednotkové a má směr tečné výslednice síly na daný elektron. Velikosti sil program nezohledňuje.

Posunutí je postupně vypočítáno pro všechny elektrony a je sestavena matice posunutí polárních souřadnic elektronů, kterou program na závěr iterace přičte k matici výchozích poloh v polárních souřadnicích. Počet kroků nastavíme tak, aby byla poloha elektronů stabilní. Na konci program vrátí grafický výstup rovnovážných poloh elektronů.



Obr. 1: Rovnovážná poloha 100 elektronů na povrchu sféry

3.3 Závěr

Zatím se mi nepodařilo program navrhnout dostatečně rychlý, aby byl schopný efektivně počítat i s velkým počtem elektronů. Pro představu podle mých hrubých výpočtů by počítání s 1000 elektrony trvalo kolem 2 hodin a s 10000 se potřebný čas blíží 1 dni na běžném počítači.

Reference

- [1] Jiří Bajer: *Mechanika 2*, Univerzita Palackého v Olomouci 2004
- [2] Horský, Novotný, Štefaník: *Mechanika ve fyzice*, Academia 2001