

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

TESIS DE DOCTOR EN MATEMÁTICA

Introducción a los sistemas termo-mecánicos desde una perspectiva simpléctica

Maximiliano A. Palacios Amaya

BAHÍA BLANCA

ARGENTINA



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

TESIS DE DOCTOR EN MATEMÁTICA

Introducción a los sistemas termo-mecánicos desde una perspectiva simpléctica

Maximiliano A. Palacios Amaya

BAHÍA BLANCA

ARGENTINA

Prefacio

Esta Tesis se presenta como parte de los requisitos para optar al grado académico de Doctor en Matemática, de la Universidad Nacional del Sur, y no ha sido presentada previamente para la obtención de otro título en esta Universidad u otra. La misma contiene los resultados obtenidos en investigaciones llevadas a cabo en el Departamento de Matemática durante el período comprendido entre el 1 de abril de 2008 y el 20 de abril de 2014, bajo la dirección del Dr. Hernán Cendra, Profesor Titular del Departamento de Matemática, y bajo la co-dirección del Dr. Sergio Grillo, Profesor Asociado del Instituto Balseiro e Investigador Adjunto del CONICET, Universidad Nacional de Cuyo.

Maximiliano A. Palacios Amaya

Bahía Blanca, 20 de Abril de 2014 Departamento de Matemática UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

Agradecimientos

a mi familia ...

Es larga la lista de las personas a quienes debo mi agradecimiento. Primero quiero agradecer a toda mi familia por su apoyo constante e incondicional, a Nati por acompañarme en todos estos años. Agradezco a mi director Hernán Cendra y co-director Sergio Grillo por su guía certera, su constante presencia, por confiar en mí y brindarme también su amistad.

Agradezco también a todo el magnífico Departamento de Matemáticas, a toda de gente que me a brindado su apoyo tanto desde lo académico como lo personal. A mis compañeros de estudio y a los docentes en todas las unidades académicas que tuve la oportunidad de estudiar.

Por último, agradezco a las instituciones que intervinieron en el apoyo académico y financiero: Universidad Nacional del Sur, Universidad Nacional de Cuyo (Instituto Balseiro), Centro Atómico Bariloche- Comisión Nacional de Energía Atómica(CNEA), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Universidad Nacional del Comahue (CRUB) y Universidad Nacional de Córdoba (FaMAF), sin las cuales no podría haber desarrollado esta tesis.

Maxi, Abril de 2014.

Resumen

El objeto de estudio de esta tesis son los sistemas "termo-mecánicos", sistemas que admiten una descripción termodinámica y una mecánica, en primera instancia, luego de introducir un contexto adecuado, se procede a introducir estos sistemas en un lenguaje físico vía la descripción, pensando en experimentos plausibles, de ejemplos elementales que involucran fenómenos disipativos. Luego se procederá a plantear las ecuaciones de evolución temporal, de los observables involucrados, a partir de un principio variacional, desde la perspectiva de los sistemas no-holónomos generalizados (SNHG).

En los últimos tres capítulos, se continua con la descripción de dichos sistemas, ahora en el contexto de la geometría simpléctica y de contacto, describiendo la parte mecánica y termodinámica respectivamente. Mostraremos los ejemplos ya presentados bajo estas dos perspectivas geométricas para finalmente optar por un formalismo simpléctico que unifica ambas descripciones.

Abstract

The object of study in this thesis are "thermo-mechanical" systems, systems which admits a thermodynamical and a mechanical description. At the beginning, after setting the convenient context, we will proceed to introduce these systems in a physical language, via the description of elementary examples that takes into account dissipative phenomena, also experimentally factible. Then the equations of temporal evolution of the observables will be written, considering a variational principle from the perspective of the generalized non-holonomic systems (GNHS).

In the last three chapters we will continue with the description of these systems, now in the context of symplectic and contact geometry, describing the mechanic and thermodynamic parts respectively. The already seen examples will be shown under both geometric perspectives. Finally, a symplectic view will be kept for a unified description.

Índice general

1.	Intr	oducción a la Mecánica Clásica	1
	1.1.	Repaso sobre la mecánica de una partícula	1
	1.2.	Mecánica de un sistema de partículas	4
	1.3.	Vínculos	7
	1.4.	Principio de D'Alembert y las ecuaciones de Lagrange	8
	1.5.	Principio de Hamilton	11
	1.6.	Extensión del principio de Hamilton a sistemas no-holónomos y no conser-	
		vativos	12
	1.7.	Sistemas no-holónomos (generalizados)	14
2.	Bre	ve introducción a la termodinámica	17
	2.1.	Sistemas macroscópicos y termodinámica	18
	2.2.	La energía interna U	20
	2.3.	Equilibrio termodinámico	21
	2.4.	Paredes, vínculos y medición de la energía	22
		2.4.1. Medición del calor Q	23
	2.5.	El problema básico de la termodinámica	24
	2.6.	Los postulados de entropía máxima	25
	2.7.	Condiciones de equilibrio	26
		2.7.1. Parámetros intensivos	26
		2.7.2. Ecuaciones de estado \ldots	27
	2.8.	La relación de Gibbs-Duhem	28
	2.9.	Resumen de la estructura formal	29
	2.10	El gas ideal	30
	2.11	Procesos posibles y procesos imposibles	31
		2.11.1. Cuasi-estaticidad y procesos reversibles	31
		2.11.2. Tiempos de relajación e irreversibilidad	32
	2.12	Formulaciones alternativas	33
		2.12.1. Transformada de Legendre	35
	2.13	. Estabilidad de los sistemas termodinámicos	35

		2.13.1. Condiciones de estabilidad para potenciales termodinámicos	35
3.	\mathbf{Sist}	emas termo-mecánicos	37
	3.1.	Ejemplos de sistemas termo-mecánicos	37
		3.1.1. Sistemas termo-mecánicos finito dimensionales	44
	3.2.	Un planteo variacional	44
		3.2.1. Descripción Lagrangiana del carrito con fricción interna	45
		3.2.2. Descripción Lagrangiana del émbolo vertical adiabático	46
	3.3.	Una familia de ejemplos paradigmáticos	47
		3.3.1. Émbolo vertical isotérmico	48
		3.3.2. Émbolo vertical moviéndose con velocidad constante	52
		3.3.3. Émbolo horizontal adiabático con viscosidad	54
		3.3.4. Émbolo vertical con disipación térmica por conducción	60
		3.3.5. Émbolo vertical disipativo con fricción	62
	3.4.	Comentarios	64
4.	Geo	metría simpléctica y sistemas mecánicos	65
	4.1.	Geometría simpléctica	65
	4.2.	Campos Hamiltonianos	68
	4.3.	Corchetes de Poisson	69
	4.4.	Sistemas Lagrangianos y Hamiltonianos	71
	4.5.	Lagrangianos hiperregulares	73
	4.6.	Planteo geométrico de algunos ejemplos	74
		4.6.1. Carrito con fricción interna	76
		4.6.2. Émbolo vertical adiabático	77
		4.6.3. Émbolo isotérmico	79
		4.6.4. Émbolo vertical moviéndose con velocidad constante	80
		4.6.5. Émbolo horizontal adiabático con viscosidad	81
		4.6.6. Émbolo vertical con disipación térmica por conducción	82
	4.7.	Subvariedades Lagrangianas	83
	4.8.	Fibrados tangente iterados (Sistemas mecánicos á la $Tulczyjew$)	86
	4.9.	Dinámica de sistemas mecánicos (à la Tulczyjew)	87
		4.9.1. Sistemas sin vínculos externos	88
		4.9.2. Sistemas con vínculos externos	90
	4.10	Sistemas dinámicos equivalentes	92
	4.11	Producto cartesiano de variedades simplécticas	92
5.	Geo	metría de contacto y sistemas termodinámicos	95
	5.1.	Estructuras de contacto	95
	5.2.	Derivada covariante asociada a una 1-forma de contacto	98

	5.3.	Difeomorfismos y campos vectoriales de contacto	99		
	5.4.	Subvariedades de Legendre	102		
	5.5.	Variedades de contacto en termodinámica	103		
		5.5.1. Ejemplos \ldots	104		
		5.5.2. Carrito con fricción interna	104		
		5.5.3. Émbolo vertical adiabático	105		
		5.5.4. Émbolo vertical isotérmico	107		
		5.5.5. Émbolo vertical moviéndose con "velocidad constante"	107		
		5.5.6. Émbolo vertical con disipación térmica por conducción \ldots	108		
	5.6.	Simplectificación	108		
		5.6.1. Simplectificación de difeomorfismos y campos vectoriales de contacte	o109		
	5.7.	Hamiltonianos de contacto	110		
		5.7.1. Coordenadas locales	110		
	5.8.	Variedades simplécticas en termodinámica	111		
		5.8.1. Sistemas termodinámicos restringidos (con procesos distinguidos)	114		
	5.9.	Comentarios globales de las variedades de contacto en termodinámica	115		
		5.9.1. Sistemas estándar	116		
		5.9.2. Existencia de una uno forma relacionada con la energía interna ${\cal U}$	117		
		5.9.3. Comentarios	120		
6.	\mathbf{Sist}	emas Termo-Mecánicos en un contexto simpléctico	121		
	6.1.	Sistemas termo-mecánicos en una variedad simpléctica producto	121		
		6.1.1. Revisión de los ejemplos	125		
		6.1.2. Sistemas desacoplados y campos Hamiltonianos	127		
	6.2.	Producto de sistemas termo-mecánicos simples	129		
	6.3.	Comentarios finales	131		
А.	Tra	nsformada de Legendre	133		
в.	Ecu	ación de Euler	137		
C.	C. Capacidad calórica molar y otras derivadas				
D.	Pot	enciales termodinámicos alternativos	143		
		D.0.1. Los principios del mínimo para los potenciales	144		
Bibliografía					

Introducción

En lineas generales, el tema central del que trata esta tesis es el estudio de las ecuaciones de movimiento de los sistema termo-mecánicos en un contexto simpléctico. Para ello, en los primeros capítulos, se presenta de una manera breve e introductoria temas relacionados con la física involucrada, como se expone en [14] y [8], necesaria para que los sistemas temo-mecánicos tengan un significado más amplio que una construcción matemática formal. Es por esto que, a modo de introducción, se presentan los dos primeros capítulos que contextualizan un dominio de validez para lo que sigue. La presencia de esos primeros capítulos también contribuyen a la intención de que lo aquí expuesto se encuentre, de alguna forma, autocontenido. Se han incluido varios apéndices para complementar la lectura y facilitar el entendimiento de lo expuesto a lo largo de la tesis, y esencialmente reforzar el contenido termodinámico. En lo que resta del texto se encuentran los contenidos más originales de esta tesis.

El estudio de sistemas mecánicos desde una perspectiva geométrica es muy extenso. Unas pocas referencias relacionadas con ello son [19], [7], [2],[1], [5], [16], [33], [31], [32], [21], [18], [10], [9] y [11], vinculadas con el contenido de esta tesis. Un contexto cómodo para este planteo es el de la geometría simpléctica, de la cual se han incorporado definiciones y resultados conocidos a modo de facilitar la comprensión de los últimos capítulos. Previamente, se utiliza el enfoque expuesto en [16] de los sistemas no-holónomos generalizados (SNHG), para una construcción intermedia de los sistemas termo-mecánicos. Como punto de partida de la última parte se podría mencionar la identificación de un sistema mecánico con una subvariedad de un espacio adecuado, como lo hace Tulczyjew identificando a dichos sistemas con subvariedades Lagrangeanas del tangente de una variedad simpléctica.

En el estudio de la termodinámica en un contexto geométrico, un pionero en la introducción de la geometría de contacto para su estudio fue Hermann en [17]. Nosotros tomaremos como punto de partida lo escrito por Mrugala ([24], [25] y [26]), quién sigue esa idea, haciendo una descripción de los procesos termodinámicos en término de transformaciones de contacto asociadas a una función que los generan, así como en mecánica se asocia la dinámica de un sistema a un Hamiltoniano. Dicho esquema tiene lugar en el espacio de fase termodinámico (EFT o TPS) y su planteo de la termodinámica apunta a tratar incluso problemas del no equilibrio. Nosotros, en cambio, solo consideraremos casos de cuasi estaticidad y sólo tendremos en cuenta procesos que caigan dentro de una de las subvariedades mencionadas.

A continuación daremos una descripción de contenidos de los capítulos que constituyen esta tesis.

En el primer capítulo se hace una breve referencia a la mecánica de sistemas de partículas como se introduce en [14]. La intención es refrescar la memoria del lector sobre estos asuntos y poner en foco de atención el estudio de sistemas mecánicos con fricción, junto con una noción de sistemas macroscópicos (relevantes para la introducción de la termodinámica en el segundo capítulo). Finalizando el capítulo se apunta a una descripción, como la sugerida en [16], [10], [9], [11], de sistemas dinámicos con vínculos. Se recomienda, al lector ajeno a dicha literatura, la lectura de al menos [16] para una mayor claridad sobre los sistemas no-holónomos generalizados. Dichos sistemas servirán más adelante a describir los sistemas termo-mecánicos.

El segundo capítulo de esta tesis es esencialmente una introducción a la termodinámica muy resumida. Obviamente, no se pretende abarcar todo lo que esta disciplina involucra, pero dada la naturaleza de los sistemas a estudiar en esta tesis, resulta oportuna una presentación de los sistemas termodinámicos en términos físicos, junto con su formalismo matemático. Se ha seguido esencialmente el libro de Callen por varias razones, una es porque en los trabajos de Mrugala [24] [25] [26] en los cuales se presenta la geometría de contacto en termodinámica, la referencia en cuanto a esta disciplina, es [8]. Otra razón, es evitar discrepancias en cuanto a las distintas definiciones que encuentran en la bibliografía. Además, el enfoque que allí se presenta sigue una linea constructiva de la termodinámica a partir de postulados, lo cual acorta, en cierta forma, el contenido a presentar manteniendo siempre una lectura de la física involucrada. Cabe aclarar, que si bien en esta introducción de la termodinámica se mencionan posibles potenciales químicos, en lo que sigue de la tesis no consideraremos reacciónes químicas. Se incorporó dicho formalismo pensando que puede existir algún intercambio de materia entre subsistemas. Se recomienda al lector ávido de conocimiento termodinámico, y que no haya tenido contacto con esta disciplina, la lectura de las referencias [13], [23], [27], [28], [6], [35], [12], [3], [20] y [29]. En particular, al lector proveniente de una formación matemática, se le recomienda la lectura de [20].

En el tercer capítulo se introducirán ejemplos, como experimentos posibles, que inspiran la definición de sistemas termo-mecánicos (finito dimensionales), junto con dos posibles descripciones: una fijando un sistema de coordenadas inercial y resolviendo las ecuaciones de movimiento utilizando las leyes de Newton y un principio de conservación de la energía total, y otra que podríamos llamar Lagrangiana. Se mantendrá una mirada física de los mismos, a fin de ser explícitos en lo que se busca estudiar. Una pregunta latente en cada uno de los fenómenos descriptos, y que no indagaremos, es si existe una forma de estimar la cuasi-estaticidad del fenómeno. Un posible trabajo a futuro que tiene que ver con este interrogante, sería calcular experimentalmente los margenes de error de las predicciones aquí propuestas.

En el cuarto capítulo se procederá, en una primera instancia, a introducir conceptos y resultados básicos de geometría simpléctica, necesarios para luego plantear los sistemas mecánicos geométricos como lo hace Tulczyjew en las referencias. Un interés particular de esta tesis con respecto a la formulación de la mecánica hecha por este autor, es la identificación de los sistemas mecánicos con subvariedades Lagrangianas de una variedad simpléctica. Se aporta, al final de este capítulo, una vinculación entre los SNHG y los sistemas con vínculos internos expresados como subvariedades Lagrangianas.

En el quinto capítulo, de manera análoga al capítulo anterior, se introducen conceptos y resultados básicos de la geometría de contacto. Luego se presenta lo planteado por Mrugala, identificando a un sistema termodinámico como una subvariedad de Legendre de una variedad de contacto, donde esta última representa un espacio de fase termodinámico (EFT). Se plantean los ejemplos ya vistos desde esta otra perspectiva, para luego proceder a simplectificar el espacio de fase termodinámicos con la dinámica de un sistema mecánico (del capítulo 4). Se plantea una relación entre la subvariedad Lagrangeana, del espacio de fase termodinámico, y una subvariedad Legendreana, del tangente del espacio de fase simplectificado. Finalmente, se abordan algunos comentarios globales de las variedades de contacto en termodinámica, presentado la existencia de una 1-forma asociada a la energía interna.

En el sexto capítulo, se utilizará lo ya construido en los capítulos anteriores para dar una descripción de sistemas termo-mecánicos, en un contexto simpléctico, similar a los SNHG. Esto último también permitirá construir sistemas termo-mecánicos acoplados.



Capítulo 1

Introducción a la Mecánica Clásica

En este capítulo la intención es resumir los conceptos básicos de lo que se conoce como mecánica clásica para que luego, tanto la introducción a la termodinámica, que se dará en el próximo capítulo, como la introducción a los que llamaremos *sistemas termo-mecánicos*, tengan como referencia lo aquí expuesto. La intención no es solamente enfocarnos en los aspectos del formalismo matemático de esta disciplina, sino que también conservar, en paralelo, una lectura de la física involucrada.

Lo expuesto en este capítulo puede encontrarse, en parte, en el libro de Goldstein [14], aunque para un conocimiento más profundo de esta disciplina se recomienda también la lectura de, por ejemplo [5], [2] y [18] entre otros. Para complementar el contenido la última sección de este capítulo, se recomienda la lectura de [10] y [16].

Asumiremos que el lector se encuentra familiarizado con las leyes de Newton. El planteo que desarrollaremos partirá de considerar coordenadas en \mathbb{R}^3 .

1.1. Repaso sobre la mecánica de una partícula

Sea $r(t) \in \mathbb{R}^3$ un vector que representa la posición espacial, en un tiempo $t \in I$, de una partícula para un origen de coordenadas O dado, donde I es un intervalo real. Luego

$$v = \frac{dr}{dt}, \qquad v \in \mathbb{R}^3$$

es su vector velocidad. La física esencial que involucra la mecánica de una partícula está contenida en la *segunda ley de movimiento de Newton*, la cual define conceptos básicos como **fuerza** y **masa**.

Definición 1.1.1. (*Momento lineal*) El momento lineal de una partícula se define como el producto de su masa m con su velocidad v, i.e. p = mv.

Para un sistema de una partícula la segunda ley es la siguiente:

$$F = \frac{dp}{dt}$$
 o $F = \frac{d}{dt}(mv)$ (Ecuación de Newton)

donde $F : I \to \mathbb{R}^3$ es la **fuerza** total actuando en la partícula y las coordenadas pertenecen a un **sistema de referencia inercial**.

Nota. En muchos casos la masa de la partícula se considerara constante y entonces la ecuación de más arriba se reduce a

$$F = m \frac{dv}{dt}$$

y si F no depende de derivadas superiores, es decir F depende solo de r y v, entonces la ecuación de movimiento es una ecuación diferencial de segundo orden.

Definición 1.1.2. (*Trayectoria*) Llamaremos trayectoria de la partícula (o simplemente trayectoria) a la curva $\gamma_{r_0,v_0}(t) : I \to \mathbb{R}^3$ que es solución de la ecuación de Newton que pasa por el punto r_0 con velocidad v_0 .¹

De esta última definición llegamos al siguiente razonamiento, lo que nos interesa de un sistema mecánico es la evolución temporal de las posiciones, que resulta equivalente a dar una posición y velocidad inicial. Dicho de otra manera, si las trayectorias $\gamma_{r_0,v_0}(t)$ son los distintos "estados" del sistema, y existe una biyección entre estas trayectorias y algún conjunto $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}^m$ relacionado con m observables^{II} del sistema, entonces podemos identificar dichos estados con \mathcal{O} . Esto último motiva la siguiente definición.

Definición 1.1.3. (Estados de un sistema mecánico de una partícula) Llamaremos estados clásicos de un sistema de una partícula al conjunto $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ relacionado con los observables posición r y velocidad inicial v, donde la primera terna son las coordenadas de la posición y la segunda las de la velocidad.

Definición 1.1.4. (*Trabajo*) El trabajo hecho por una fuerza F sobre una partícula en ir de un punto r_1 a un punto r_2 se define como una integral de linea

$$W_{r_1r_2} = \int_{r_1}^{r_2} F \cdot ds$$

Definición 1.1.5. (*Energía cinética*) Llamaremos energía cinética de la partícula a la cantidad escalar $mv^2/2$ y la denotaremos por T. También vale que

$$W_{12} = T_2 - T_1.$$

^IAquí estamos suponiendo que para toda condición inicial de posición y velocidad, la ecuación de Newton tiene solución y es única.

^{II}El término observable se refiere a magnitudes que pueden ser medidas en un laboratorio y pueden poderse en biyección con un subconjunto de \mathbb{R} , por ejemplo la distancia entre dos puntos en el espacio.



Figura 1.1: Regímenes de la fricción seca

Definición 1.1.6. (Sistema conservativo) Si las fuerzas que actúan sobre la partícula, son tales que para cualquier trayectoria posible entre el par de puntos r_1 y r_2 el trabajo realizado es el mismo, entonces diremos que la fuerza (y el sistema de una partícula) es conservativa (conservativo).

Observación. Físicamente es claro que un sistema no puede ser conservativo si existe fricción u otro tipo de fuerza disipativa en el sistema.

A continuación mostraremos un ejemplo de un sistema con *fricción seca* entre dos superficies sólidas. Dicho ejemplo se relaciona con un fenómeno particular, la fricción, relevante para lo que se va a estudiar en esta tesis en los próximos capítulos.

En la fricción seca se reconocen dos regímenes, uno estático y uno dinámico como se muestra en la figura 1.1. Recordemos que la fuerza de fricción seca entre dos cuerpos en contacto esta gobernada por la siguiente condición

 $F_{fs} \leq \mu F_{normal}$ Fricción (seca) de Coloumb,

donde la fuerza de fricción F_{fs} es la fuerza que ejerce cada superficie, una sobre la otra, en dirección paralela a la superficie, en sentido opuesto a la fuerza neta aplicada^{III}.

Ejemplo 1.1.1. (Borrador deslizando con fricción seca) Consideremos el caso sencillo, donde puede apreciarse la fricción seca, de un borrador de masa m que descansa sobre una mesa horizontal fija a un sistema inercial. Si no ejercemos ninguna fuerza sobre él, éste permanecerá inmóvil, pero aún si ejercemos una fuerza paralela a la superficie de la mesa con magnitud menor a $\mu F_{normal} = \mu mg$, no veremos movimiento alguno (desde el sistema inercial de la mesa). En cambio si aplicamos una fuerza constante F_0 con mayor

^{III}Para más información sobre este fenómeno referirse a [30].

magnitud, la ecuación de Newton correspondiente al borrador es la siguiente,

$$m\ddot{r} = F_0 - F_{fs} = F_0 - \mu_d mg,$$

y su solución es una cuadrática en el tiempo t.

Un resultado matemático al respecto de estos campos conservativos nos dice que para que un campo sea conservativo es necesario que exista una función V tal que

$$F = -\nabla V.$$

Obviamente también es una condición suficiente.

Definición 1.1.7. (*Energía potencial*) Llamaremos energía potencial (asociado a la fuerza F) a la función V que vimos más arriba.

Acabamos de enunciar que dicha V existe para la familia de las fuerzas conservativas. *Observación.* El trabajo realizado por una fuerza conservativa asociada con una energía potencial V es

$$W_{r_1 r_2} = V_{r_1} - V_{r_2}$$

Recordemos que muchas conclusiones importantes de la mecánica pueden expresarse en la forma de teoremas de conservación que muestran bajo qué condiciones ciertas cantidades mecánicas se mantienen constantes en el tiempo. Por ejemplo:

- (Conservación del momento lineal de una partícula) Si la fuerza total F es nula entonces el momento lineal p se conserva.
- (Conservación de la energía de una partícula) Si todas las fuerzas que actúan en la partícula son conservativas entonces la energía total de la partícula, T + V, se conserva.

1.2. Mecánica de un sistema de partículas

En esta sección se generalizara lo visto en la sección anterior.

Definición 1.2.1. (Sistema de partículas) Llamaremos sistema de n partículas a la n-úpla de vectores $r_i \in \mathbb{R}^3$ con $i \in 1, ..., n$ donde cada r_i representa la posición de una partícula y la ecuación de Newton sigue valiendo individualmente para todas las partículas, i.e.,

$$F_i = m_i \dot{p}_i \quad \forall i \in \{1, ..., n\}.$$
 (1.1)

Definición 1.2.2. (Fuerzas internas y fuerzas externas) Llamaremos fuerzas internas (y la notaremos F_{ji}) a las fuerzas que ejerce la partícula *j*-ésima sobre la partícula *i*-ésima, (donde $F_{ii} = 0$).

Llamaremos fuerzas externas (y la notaremos $F_i^{(e)}$) al complemento de la fuerza total F_i , es decir, $F_i^{(e)} = F_i - \sum_j F_{ji}$.

Observación. (Acción y reacción) Asumiremos que todas estas fuerzas aquí expuestas obedecen a la tercera ley de Newton conocida también como *ley fuerte de acción y reacción* que dice que por cada fuerza que actúa sobre un cuerpo, este realiza una fuerza de igual intensidad, pero de sentido contrario sobre el cuerpo que la produjo.

Si ahora observamos la sumatoria de las n ecuaciones de Newton expuesta más arriba, esto nos da

$$\frac{d^2}{dt^2} \sum_{i} m_i r_i = \sum_{i} F_i^{(e)} + \sum_{\substack{i,j\\i\neq j}} F_{ji}$$
(1.2)

donde, por la tercera ley Newton, la última sumatoria es igual a cero. No todas las fuerzas gozan de esta propiedad, por ejemplo las fuerzas predichas por la ley de Biot-Savart (ver [15]) en un sistema de cargas móviles.

Definición 1.2.3. (Centro de masa) Definiremos al vector R como el promedio de los vectores posición de las partículas del sistema, pesados en proporción a sus masas, esto es

$$R = \frac{\sum m_i r_i}{M}, \qquad \text{donde } M = \sum m_i, \tag{1.3}$$

y al punto que define R lo llamaremos centro de masa (o centro de gravedad).

La definición anterior nos permite una segunda lectura de la ecuación (1.2) que queda reducida a

$$M\frac{d^2R}{dt^2} = \sum F_i^{(e)} \equiv F^{(e)}$$
(1.4)

También podemos calcular el momento lineal total P del sistema de la siguiente manera

$$P = \sum m_i \frac{dr_i}{dt} = M \frac{dR}{dt} \qquad (Momento \ lineal \ del \ sistema) \tag{1.5}$$

quedando expresado como la masa total del sistema multiplicado por la velocidad del centro de masa, y en consecuencia se puede expresar el siguiente resultado.

Teorema 1.2.1. (Conservación del momento lineal de un sistema de partículas) Si la fuerza total externa $F^{(e)}$ es nula entonces el momento lineal total P se conserva.

Nota. A pesar de que un sistema de partículas sea numeroso podríamos estar interesados solo en estudiar el comportamiento de unos pocos observables, como por ejemplo, la evolución temporal del centro de masa del sistema R. Luego, una vez que llegamos de las

3n ecuaciones iniciales (1.2) a la ecuación reducida (1.4) no nos interesará volver a resolver las 3n ecuaciones iniciales. Puede que la ecuación reducida refleje propiedades globales del sistema que no sean evidentes si se miran solo las trayectorias de las partículas, además evitamos el costo de resolver 3n ecuaciones.

Siguiendo esta linea de pensamiento, daremos una definición de los llamados "sistemas macroscópicos", que nos será útil para entender la perspectiva en la que se presenta la termodinámica en el próximo capítulo.

Dado un sistema de n partículas y sus estados mecánicos clásicos, es posible construir un nuevo conjunto de k observables a estudiar, que llamaremos \mathcal{O} , que estén en correspondencia con los estados de un nuevo sistema, que llamaremos macroscópico.

Definición 1.2.4. (Sistema macroscópico proveniente de un sistema de partículas clásico) Llamaremos sistema macroscópico a un sistema de n partículas, donde n es lo suficientemente grande (digamos de al menos 10^{23}), cuya descripción dinámica se aproxima mediante el uso de las ecuaciones de Newton. Los k observables que están en correspondencia con los estados del sistema macroscópico se construyen a partir de los observables clásicos de un sistema de partículas, donde $k \ll 6n$.

Observación. Esta última definición obviamente abre las puertas a la construcción de la teoría de los sistemas macroscópicos, en esta tesis, sólo utilizaremos lo expuesto como punto de apoyo para una introducción a la termodinámica.

Ejemplo 1.2.1. Estudiar la evolución temporal del centro de masa de un sistema de partículas muy numeroso resolviendo la ecuación diferencial expuesta en (1.4), es un caso de un sistema macroscópico cuyos estados se corresponden con 6 observables.

Para finalizar esta sección presentaremos las siguientes definiciones análogas a las anteriores.

Definición 1.2.5. (*Trabajo*) El trabajo hecho por una fuerza F sobre un sistema de partículas en ir de una configuración c_1 a una configuración c_2 se define como una sumatoria de integrales de linea, de la siguiente manera

$$W_{c_1c_2} = \sum \int_{c_1}^{c_2} F_i \cdot ds_i = \sum \int_{c_1}^{c_2} F_i^{(e)} \cdot ds_i + \sum \int_{c_1}^{c_2} F_{ji} \cdot ds_i.$$

Definición 1.2.6. (*Energía cinética*) Llamaremos energía cinética de un sistema de partículas a la cantidad escalar $\sum mv_i^2/2$ y la denotaremos por T.

Análogo al caso donde tenemos una partícula, también vale que

$$W_{c_1c_2} = T_{c_2} - T_{c_1},$$

donde $W_{c_1c_2} = \sum_{c_1} \int_{c_1}^{c_2} d(\frac{m_i v_i^2}{2}).$

Observación. (*Sistema conservativo*) Si las fuerzas internas y externas que actúan sobre el sistema provienen de un potencial, entonces es posible definir una energía potencial del sistema como

$$V = \sum V_i + \frac{1}{2} \sum V_{ij}.$$
(1.6)

Si ocurre que la energía total T + V se conserva, diremos que el sistema de partículas es conservativo.

Observación. El segundo término en (1.6) se llama *energía potencial interna* de un sistema. En general, dicho término no necesariamente es nulo, más aún, puede variar con el tiempo. Sólo para una clase de sistemas conocidos como *cuerpos rígidos*, cuya definición se dará más adelante, el potencial interno se mantiene siempre constante.

1.3. Vínculos

De las secciones anteriores puede quedar la impresión de que todos los problemas en la mecánica se reducen a resolver ecuaciones del tipo que aparecen en 1.2, pero incluso desde un punto de vista meramente físico este planteo está sobre simplificado. Por ejemplo, resulta necesario en ocasiones tener en cuenta *vínculos* que restrinjan los movimientos de las partículas, como ocurre en un cuerpo rígido. Dicho de otra manera, existen restricciones cinemáticas al sistema que prohíben que ciertos estados sean accesibles.

Definición 1.3.1. (*Cuerpo rígido*) Llamaremos cuerpo rígido a un sistema de partículas en el cual las distancias r_{ij} se mantienen fijas, i.e., no varían con el tiempo.

Los vínculos pueden clasificarse de distintas formas, nosotros utilizaremos la siguiente.

Definición 1.3.2. (Vínculos holónomos y no-holónomos) Diremos que los vínculos son holónomos si pueden expresarse como funciones que dependen de las coordenadas de las partículas y del tiempo. En caso que dichas funciones no existan diremos que los vínculos son no-holónomos.

Ejemplo 1.3.1. Nuevamente, quizás el ejemplo más simple de un sistema con vínculos holónomos es un cuerpo rígido donde las ecuaciones buscadas son de la forma

$$(r_i - r_j)^2 - c_{ij}^2 = 0.$$

Supongamos que sobre nuestro sistema original (1.1) imponemos vínculos. En general, las fuerzas F_i no son suficientes para implementar los vínculos mencionados para cualquier condición inicial, en el sentido que las soluciones de 1.1 no tienen porqué satisfacer las vínculos impuestos. Por esto último es que resulta conveniente introducir la siguiente definición. **Definición 1.3.3.** (Fuerzas de vínculo) Llamaremos fuerzas de vínculo, y las notaremos como F_i^v , a las fuerzas que actúan sobre cada partícula del sistema obligando a que las soluciones del sistema

$$m_i \dot{p}_i = F_i + F_i^v \quad i \in \{1, ..., n\}, \tag{1.7}$$

satisfagan los vínculos impuestos.

Los vínculos introducen dos tipos de inconvenientes, uno es que las coordenadas r_i ya no son necesariamente independientes, pues pueden estar relacionadas por ecuaciones de vínculos. El otro inconveniente es que las fuerzas de vínculo son incógnitas a priori. En efecto, imponer vínculos en un sistema es una forma de expresar que existen fuerzas que no pueden especificarse directamente, pero que se conocen en término de sus efectos sobre el movimiento del sistema.

En el caso de un sistema con vínculos holónomos, el primer inconveniente se resuelve introduciendo "coordenadas generalizadas". Un sistema de N partículas sin vínculos tiene 3N coordenadas independientes o **grados de libertad**. Si existen vínculos holónomos expresados en k ecuaciones independientes, entonces podemos utilizar esas k ecuaciones para eliminar k grados de libertad, es decir, se eliminan las coordenadas dependientes quedando solo 3N-k variables independientes. Usualmente las coordenadas generalizadas no se agrupan de a tres para formas algún vector en \mathbb{R}^3 , y cualquier tipo de cantidad puede servir como coordenada generalizadas.

En el caso que los vínculos sean no-holónomos, las ecuaciones que expresan los vínculos no pueden usarse para eliminar coordenadas dependientes.

Las ecuaciones diferenciales no integrables no son el único caso de vínculos no-holónomos, también las condiciones donde se ven involucradas derivadas de orden superior o desigualdades también son vínculos de este tipo.

Para sobrepasar la segunda dificultad que planteamos anteriormente, es decir, que las fuerzas de vínculo se desconocen a priori, nos convendría poder formular la mecánica de forma tal que las fuerzas de vínculo no aparezcan. Luego solo tendríamos que lidiar con las fuerzas aplicadas conocidas.

1.4. Principio de D'Alembert y las ecuaciones de Lagrange

Un desplazamiento virtual de un sistema hace referencia a un cambio en la configuración del sistema como resultado de cualquier cambio arbitrario de las coordenadas δr_i consistentes con los vínculos impuestos en el sistema para un tiempo t. El desplazamiento se llama virtual para distinguirlo del desplazamiento a lo largo de la trayectoria del sistema en un intervalo de tiempo dt, durante el cual las fuerzas y los vínculos pueden ir cambiando. Supongamos que el sistema se encuentra en equilibrio estático ^{IV}lo cual implica que la fuerza total sobre cada partícula se anula ($F_i = 0 \forall i$). Luego, el producto $F_i \cdot \delta r_i$ que representa el **trabajo virtual** en el desplazamiento δr_i también se anula, como también la sumatoria sobre todas las partículas $\sum F_i \cdot \delta r_i$. Hasta ahora no se ha dicho nada que tenga algún nuevo contenido físico. Si descomponemos las fuerza F_i en fuerzas aplicadas $F_i^{(a)}$ y fuerzas de vínculo F_i^v tales que $F_i = F_i^{(a)} + F_i^v$, lo escrito más arriba se expresa de la siguiente manera

$$\sum F_i^{(a)} \cdot \delta r_i + \sum F_i^v \cdot \delta r_i = 0 \tag{1.8}$$

Ahora nos mantendremos restringidos a los sistemas donde el trabajo virtual neto de las fuerzas de vínculo es cero. Ya hemos visto que esta condición se mantiene para cuerpos rígidos y también vale para un gran numero de vínculos de otro tipo. Luego si una partícula se mueve sobre una superficie, las fuerzas de vínculo son perpendiculares a dicha superficie, mientras que el desplazamiento virtual debe mantenerse tangente y entonces el trabajo virtual se anula. Esto último deja de ser cierto en casos donde se presentan fuerzas de fricción por deslizamiento, y debemos, por el momento, excluir estos sistemas de nuestra formulación. Por otro lado, las fuerzas de fricción por rodadura no violan esta condición, pues las fuerzas actúan sobre un punto que esta momentáneamente en reposo y no realiza trabajo alguno en ningún desplazamiento infinitesimal consistente con el vínculo de rodadura. Podemos entonces enunciar el siguiente principio como condición necesaria para que un sistema se encuentre en equilibrio.

Definición 1.4.1. (*Principio de trabajo virtual*) Llamaremos principio de trabajo virtual a la ecuación

$$\sum F_j^{(a)} \cdot \delta r_j = 0$$

donde $F_j^{(a)}$ es la fuerza aplicada sobre la partícula *j*-ésima.

Este último principio logra nuestro objetivo parcialmente, pues nos da una condición que no involucra a las fuerzas de vínculo f_i^v , pero con la desventaja de que sirve para los casos donde $\dot{p}_i = 0 \forall i$. Para obtener un principio más general partiremos de la ecuación de movimiento expresada de la siguiente manera $F_i - \dot{p}_i = 0$. Luego estamos en condiciones de aplicar lo mismo que antes, y llegamos a la siguiente expresión

$$0 = \sum (F_i - \dot{p}_i) \cdot \delta r_i = \sum (F_i^{(a)} - \dot{p}_i) \cdot \delta r_i + \sum f_i \cdot \delta r_i.$$
(1.9)

Definición 1.4.2. (*Principio de D'Alembert*) Llamaremos principio de D'Alembert a la condición

$$\sum (F_i^{(a)} - \dot{p}_i) \cdot \delta r_i = 0, \qquad (1.10)$$

^{IV}Diremos que un sistema de partículas se encuentra en equilibrio estático cuando todas las partículas están en reposo y la fuerza total de cada partícula es cero.

donde el trabajo virtual de las fuerzas de vínculo se anulan.

En términos de coordenadas generalizadas, el trabajo virtual de las F_i se expresa de la siguiente manera

$$\sum F_i \cdot \delta r_i = \sum Q_j \delta q_j$$

donde $Q_j = \sum F_i \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_j}$ son las componentes de la fuerza generalizada.

Luego si identificamos $\sum \frac{1}{2}m_i v_i^2$ con la energía cinética T, el principio de D'Alembert queda expresado de la siguiente forma

$$\sum \left(\left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_j} \right) - Q_j \right) \delta q_j = 0$$
(1.11)

Hasta este punto, sólo hemos pedido que las fuerzas de vínculo no realicen trabajo virtual, no se ha hecho ninguna otra suposición sobre el tipo de vínculo que estamos considerando. Si los vínculos son holónomos, como hemos visto anteriormente, la ecuación de más arriba se puede simplificar al siguiente sistema de ecuaciones,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_j} = Q_j \tag{1.12}$$

pues existen k ecuaciones independientes que provienen de los vínculos y entonces existen 3N - k coordenadas generalizadas $\{q_i\}$ independientes.

Cuando las fuerzas provienen de un potencial, es decir, $F_i = \nabla_i V$, entonces las componentes de la fuerzas generalizadas verifican que

$$Q_j = -\sum \nabla_i V \cdot \frac{\partial r}{\partial q_j}$$

y la ecuación se puede escribir de la siguiente manera

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j}\right) - \frac{\partial (T-V)}{\partial q_j} = 0 \tag{1.13}$$

Observación. La ecuación de movimiento anterior no sólo es válida para sistemas conservativos; sólo si V no depende explícitamente del tiempo resulta ser conservativo.

Otra forma equivalente de obtener las ecuaciones de movimiento del sistema si el potencial V no depende de las velocidades generalizadas, es considerar el Lagrangiano L = T - V y las siguientes ecuaciones

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 \qquad Ecuaciones \ de \ Euler-Lagrange \tag{1.14}$$

Nota. Cabe remarcar que para un conjunto particular de ecuaciones de movimiento el Lagrangiano no es único.

1.5. Principio de Hamilton

Para arribar a las ecuaciones de Lagrange (1.14) que se presentaron en la sección anterior fue necesario considerar el principio de D'Alembert (1.4.2). Por otra parte, lo que presentaremos a continuación es que también es posible obtener dichas ecuaciones partiendo de un principio integral como lo es el *principio de Hamilton*.

La configuración de un sistema se describe por n coordenadas generalizadas $q_1, ..., q_n$ correspondientes a un punto en un espacio Cartesiano. Este espacio n dimensional es conocido como el espacio de configuración. A medida que el tiempo crece, el estado del sistema cambia y el punto del sistema se mueve en el espacio de configuración trazando así una curva que describe la trayectoria del movimiento del sistema. Luego, el movimiento del sistema se refiere al movimiento del punto a lo largo de dicha trayectoria en el espacio de configuración. El tiempo puede considerarse formalmente como un parámetro de la curva. Cabe notar que el espacio de configuración no necesariamente tiene una conexión con el espacio físico tridimensional, así como las coordenadas generalizadas no son necesariamente coordenadas de posición. Cada punto de la trayectoria representa la configuración total del sistema en un instante de tiempo dado.

El principio de Hamilton describe el movimiento de aquellos sistemas mecánicos para los cuales todas las fuerzas (excepto las fuerzas de vínculo) se derivan de un potencial escalar generalizado que puede ser función de coordenadas, velocidades y del tiempo. Tales sistemas se llaman monogénicos, y si el potencial sólo es función de las coordenadas tales sistemas son también conservativos.

Para un sistema monogénico, el principio de Hamilton es el siguiente,

El movimiento de un sistema de un tiempo t_1 a un tiempo t_2 es tal que la integral de linea o acción

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt$$

donde L = T - V, considerando variaciones con extremos fijos, tiene un valor estacionario para la trayectoria del sistema.

Esto nos está diciendo que de todas las posibles trayectorias por las cuales el sistema puede evolucionar de su posición inicial a tiempo t_1 a un tiempo final t_2 , el movimiento va a efectuarse por la trayectoria cuyo valor en la integral sea estacionario, donde la noción de valor estacionario para una integral de linea se corresponde, en la teoría de funciones ordinarias, con los ceros de la primer derivada.

Podemos resumir el principio de Hamilton diciendo que el movimiento es tal que la variación de la integral de linea S para t_1 y t_2 fijos es cero, i.e.,

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_1, ..., q_n, \dot{q}_1, ..., \dot{q}_n, t) dt = 0.$$
(1.15)

Observación. (*Derivación de la ecuaciones de Lagrange del principio de Hamilton*) Puede probarse que cuando los vínculos del sistema son holónomos el principio de Hamilton es una condición necesaria y suficiente para las ecuaciones de Lagrange (1.14) ^v. Luego esto nos permite la construcción de la mecánica a partir del principio de Hamilton y no de las ecuaciones de Newton, con claras ventajas.

1.6. Extensión del principio de Hamilton a sistemas no-holónomos y no conservativos

Es posible extender el principio de Hamilton, al menos formalmente, para ciertos sistemas no-holónomos. Para la construcción de las ecuaciones de Lagrange partiendo de cualquiera de los principios expuestos anteriormente, no se requirió que los vínculos fuesen holónomos sino hasta último momento, donde se consideró que las variaciones de las q_i son independientes. En el caso donde los vínculos son no-holónomos esto último no es cierto. Cuando las coordenadas no son independientes, pero están sujetas a vínculos, se torna importante el hecho de si la variación de la trayectoria es o no construida por desplazamientos consistentes con los vínculos. Los desplazamientos virtuales pueden, o no, satisfacer los vínculos.

Es razonable un tratamiento directo de los sistemas no-holónomos, en término de un principio variacional, cuando las ecuaciones de vínculo pueden escribirse de la forma

$$f_{\alpha}(q_1, ..., q_n, \dot{q}_1, ..., \dot{q}_n) = 0 \qquad \text{con } \alpha \in \{1, ..., m\}$$
(1.16)

y además, puede expresarse de la siguiente manera

$$f_{\alpha} = \sum a_{\alpha k}(q_1, ..., q_n, t)\dot{q}_k + b_{\alpha}(q_1, ..., q_n, t) = 0,$$

es decir, los vínculos son lineales en las velocidades y afines. A esta clase de vínculos los llamaremos **semi-holónomos**.

Para encontrar efectivamente las trayectorias de variación de la expresión anterior es necesario que el sistema sea integrable, pero entonces el sistema sería holónomo. Sin embargo, se puede obtener un principio que nos lleve a las ecuaciones de movimiento.

^vPuede verse la prueba de que el principio de Hamilton se deduce de la ecuaciones de Lagrange en Whittaker [34, p. 245], y su recíproca en Goldstein [14, p. 44].

El procedimiento para eliminar estos desplazamientos virtuales de más, son los *mul*tiplicadores de Lagrange, pues si valen las ecuaciones de (1.16), también vale lo siguiente

$$\sum \lambda_{\alpha} f_{\alpha} = 0 \tag{1.17}$$

donde las indeterminadas λ_{α} son, en general, funciones de las coordenadas y el tiempo. Las variaciones no se pueden considerar independientes, pues los q_k no lo son, sin embargo, podemos obtener el siguiente principio

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(L + \sum \lambda_\alpha f_\alpha \right) dt = 0 \tag{1.18}$$

y ahora estamos en condiciones de tomar variaciones con respecto a las $n \ \delta q_i$ y los $m \ \lambda_{\alpha}$, es decir tenemos n + m variables independientes. Si simplificamos imponiendo que $\lambda_{\alpha} = \lambda_{\alpha}(t)$, obtenemos las siguientes ecuaciones

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}k}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = Q_k \tag{1.19}$$

donde

$$Q_k = \sum \left[\lambda_\alpha \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} (\frac{\partial f_\alpha}{\partial \dot{q}_k}) \right) - \frac{d\lambda_\alpha}{dt} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \dot{q}_k} \right]$$
(1.20)

Ahora el sistema puede interpretarse como un sistema holónomo con Q_k como fuerzas generalizadas. (La generalización para $\lambda_{\alpha} = \lambda_{\alpha}(q_1, ..., q_n, \dot{q}_1, ..., \dot{q}_n, t)$ es inmediata) También es fácil de ver que esta formulación incluye a los sistemas con vínculos holónomos.

Observación. En este tipo de problemas las fuerzas de vínculo no son retiradas de la formulación y se suministran como parte de la respuesta.

Observación. A pesar de no ser obvio, la versión del principio de Hamilton que se adoptó para sistemas semi-holónomos también supone que los vínculos no hacen trabajo en los los desplazamientos virtuales, es decir, vale el principio de D'Alembert.

Ejemplo 1.6.1. (*Vínculos lineales en la velocidades*) Supongamos que los vínculos satisfacen que

$$f_{\alpha}(r(t), \dot{r}(t)) = a_{\alpha}(r(t)) \cdot \dot{r}(t) = 0.$$

El principio de D'Alembert nos dice que

$$F^{v} \rfloor_{r(t)} \cdot \delta r = 0, \qquad \forall \ \delta r \ \text{tal que } a_{\alpha}(r(t)) \cdot \delta r = 0$$

Si consideramos el conjunto $\mathcal{F}_{r(t)} = \langle \{a_{\alpha}\} \rangle$, se satisface que $F^{v} \rfloor_{r(t)} \in \mathcal{F}_{r(t)}$ y se tiene que las ecuaciones de movimiento son

$$m\ddot{r}(t) = F_i(q(t), \dot{q}(t)) + F^v(t), \qquad F^v \in \mathcal{F}_{r(t)}, \qquad \dot{r}(t) \in \mathcal{F}_{r(t)}^{\perp}$$

1.7. Sistemas no-holónomos (generalizados)

A continuación se resume lo expuesto en este capítulo desde una perspectiva formal. Se partió de una ecuación de Newton para n partículas en \mathbb{R}^3 sujetas a ciertos vínculos semi-holónomos que en un comienzo podrían plantearse de la siguiente manera,

$$m\frac{d^2r_i}{dt^2} = F_i + F_i^a$$

donde las F_i^v son las fuerzas de vínculo. Hemos visto cómo estas fuerzas de vínculo por lo general no son datos a priori y se deducen a posteriori, habiendo asumiendo el principio de D'Alembert. Por lo tanto, en estos sistemas, basta con conocer las fuerzas F_i y los vínculos $f_{\alpha} = 0$ (o las fuerzas de vínculo $F_i^v \in \mathcal{F}$) para poder plantear las ecuaciones de movimiento.

Ejemplo 1.7.1. Consideremos una partícula de masa m en el espacio, cuyas coordenadas denotaremos $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$, sometida a la fuerza de la gravedad mg y sujeta al vínculo lineal

$$f(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = \alpha \dot{x} + \beta \dot{y} = 0 \qquad \text{con } \alpha \neq 0 \neq \beta.$$

Podemos reescribir el vínculo de la siguiente manera identificando a la función $a(x, y, z) = (\alpha, \beta, 0)$, pues

$$f(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = a(x, y, z) \cdot {}^{\mathrm{vI}}(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = \alpha \dot{x} + \beta \dot{y} \Leftrightarrow a(x, y, z) = (\alpha, \beta, 0).$$

El principio de D'Alembert nos dice que las fuerzas de vínculo viven en el subespacio generado por $\{(\alpha, \beta, 0)\}$ para todo punto del espacio, de decir,

$$F^v = \lambda(\alpha, \beta, 0).$$

Sin embargo, también es posible implementar dicho vínculo con fuerzas viviendo en el subespacio generado por $\{(1,0,0)\}$.

Nota. Este principio es simplemente un postulado que hace referencia al espacio donde viven las fuerzas responsables de implementar determinado conjunto de vínculos. No hay razones desde un punto de vista físico para que tal postulado sea siempre válido. Sin embargo, los sistemas mecánicos con vínculos más estudiados, que involucran la articulación y el contacto de masas puntuales, lo satisfacen.

Observación. Se pueden construir ejemplos donde este principio no se cumple, ver [10].

Dado que la complejidad de los sistemas no-holónomos puede ser muy grande, es conveniente para un estudio más claro hacer la siguiente discriminación.

^{VI}Producto interno euclídeo de \mathbb{R}^3

Definición 1.7.1. (SNHG) Llamaremos sistema no-holónomo generalizado a un sistema no-holónomo donde no necesariamente se satisface el principio de D'Alembert.

Una manera de tratar estos sistemas es considerar, además de las fuerzas F_i y los vínculos cinemáticos, más información, como las fuerzas de vínculo \mathcal{F} o los desplazamientos virtuales que denotaremos $C_{\mathcal{V}}$.

Resumiendo, plantearemos a un SNHG mediante una terna $(F, \mathcal{C}_{\mathcal{K}}, \mathcal{F})$ relacionada con las ecuaciones de movimiento del sistema

$$m_i r_i = F_i + F_i^v$$

donde $C_{\mathcal{K}}$ representa los vínculos cinemáticos del sistema y \mathcal{F} las fuerzas de vínculo. También es posible una formulación Lagrangiana en término de principios variacionales y desplazamientos virtuales, ver [16].

En el capítulo 4 sección 4.6 de esta tesis abordaremos estos sistemas en más detalle desde una perspectiva geométrica. En esta instancia sólo los definimos debido a que el contexto así lo demanda.

Observación. De ahora en más, nos reservaremos el término de **sistema no-holónomo** (SNH) sólo a los sistemas donde es válido el principio de D'Alembert.


Capítulo 2

Breve introducción a la termodinámica

La entropía del universo tiende a un máximo Rudolf Clausius

En este capítulo la intención es resumir conceptos básicos de la disciplina, para que lo relacionado con la termodinámica esté, de alguna manera, autocontenido en la tesis. Para un acercamiento raudo a esta disciplina es práctico un planteo más axiomático y menos histórico, como se hace en el libro de texto de H. Callen ([8]), el cuál hemos seguido en esta tesis.

El objetivo principal de este capítulo es permitir un manejo útil de la matemática vinculada con la termodinámica, y entender el corpus básico de la teoría. Es oportuno mencionar que durante el estudio de esta disciplina se tuvo en cuenta una variada bibliografía relacionada ([13], [29], [23], [27], [28], [6], [35], [12], [3]), y aunque aquí no nos apartaremos de lo escrito en ([8]), se recomienda para un entendimiento más profundo del tema la lectura de los textos antedichos. Otra referencia que consideramos útil para entender estos temas, desde un punto de vista más constructivo y matemático, es el paper de E. Lieb ([20]), de donde también consideraremos algunos conceptos y observaciones para complementar lo escrito por Callen.

Otra razón por la que se optó por dicho texto es que en la descripción geométrica de la termodinámica, que se verá en el capítulo 3, los papers de Mrugala [24], [25], [26] relacionados con el tema hacen referencia al mismo autor en cuanto a lo que se menciona de termodinámica. Y de esta manera evitaremos discrepancias, a lo largo de la tesis, en cuanto a los conceptos empleados por otros autores.

Todo lo que se expresa referido a objetos macroscópicos en este capítulo apunta efectivamente a conceptos termodinámicos.

2.1. Sistemas macroscópicos y termodinámica

Como punto de partida, en esta instancia, retomamos lo planteado en el capítulo anterior de sistemas macroscópicos 1.2.4, y en esta primer sección la intención es poner en foco de atención la naturaleza de los observables macroscópicos que estudia la termodinámica.

Quizás la característica más sorprendente de la materia macroscópica es la simplicidad con la que puede caracterizarse. Por ejemplo, podemos ir a una farmacia y pedir un litro de alcohol etílico, y esa información es prácticamente suficiente para obtener lo que buscamos. Mientras que desde un punto de vista atomisista dimos muy poca información. Una caracterización completa en este sentido requeriría de un número de al menos 10²³ coordenadas atómicas. Es decir, las coordenadas macroscópicas o "termodinámicas" son muy pocas comparadas con las coordenadas microscópicas mecánicas del sistema.

Las mediciones macroscópicas ocurren lentamente en la escala de tiempo atómica, y son extremadamente burdas en la escala atómica de distancia.

Observación. Mientras se hace medición macroscópica, los átomos del sistema se mueven de forma compleja y extremadamente rápido. Por ejemplo, medir la longitud de una barra de metal en reposo tiene la particularidad de que los átomos en sus extremos tienen una vibración característica del orden de 10^{-15} segundos.

Solo unas pocas combinaciones de coordenadas atómicas promediadas estadísticamente, que son *esencialmente* independientes del tiempo, son observables macroscópicamente. Como definición, sugerida por la naturaleza de las observaciones macroscópicas, podríamos decir que la termodinámica describe los estados estáticos de sistemas macroscópicos. Es decir, en la determinación de los observables macroscópicos termodinámicos de un sistema de n partículas se calculan ciertos promedios que además tienen que mantenerse constantes en el tiempo, si el sistema se haya en un estado estático o "de equilibrio".

Nota. Observables candidatos a ser observables termodinámicos, es decir , independientes del tiempo (o en equilibrio), son la energía, las componentes del momento total y del momento angular total. Pero también surgen nuevos observables termodinámicos que presentaremos más adelante.

Observación. Un sistema "macroscópico" formado por nueve átomos no hay una forma precisa de distinguir lo "macroscópico" de lo "atómico". Por cosas como esta es común oír decir que un sistema "macroscópico" es un sistema "no muy chico".

Observación. Por contra-parte si se considera un sistema demasiado grande también se encuentran problemas. Dos soles no pueden unirse (o juntarse) para formar un sol más grande con las mismas propiedades como si ocurre con dos vasos de agua que unidos se vuelven un vaso de agua más grande. Para más detalle de esto ver [20, p.13].

La termodinámica se enfoca en las consecuencias macroscópicas que provienen de las numerosas coordenadas atómicas, que no aparecen explícitamente en una descripción macroscópica del sistema, gracias a la rudeza de las mediciones macroscópicas.

Entre las muchas consecuencias de los modos atómicos ocultos del movimiento, la más evidente, es la habilidad de actuar como repositorio de energía. Por ejemplo, la energía transferida vía un modo mecánico, es decir asociada a un observable macroscópico mecánico, se llama **trabajo mecánico** (simbolizado por el término -PdV, donde P es la presión y V el volumen). La energía transferida vía un modo eléctrico se llama trabajo eléctrico (simbolizado por el por $-E_e d\mathcal{P}$, donde E_e es el campo eléctrico y \mathcal{P} es el momento de dipolo eléctrico) que, como el anterior, es macroscopicamente observable. También es posible la transferencia de energía mediante los modos atómicos ocultos del movimiento en ausencia de un trabajo macroscópico e incluso una transferencia de materia. Llamaremos **calor** a la energía que se transfiere vía estos modos ocultos. Obviamente esta caracterización descriptiva no es suficiente para un desarrollo formal de la termodinámica. Más adelante se formulará una definición operacional apropiada.

La termodinámica es una disciplina muy general, aplicable a sistemas de estructura elaborada con todo tipo de propiedades complejas de tipo mecánica, eléctrica o térmica. Nuestra intención, en este capítulo, es enfocar nuestra atención en las propiedades térmicas, por lo tanto es conveniente, al principio, idealizar y simplificar las propiedades mecánicas y eléctricas del sistema que se pretende estudiar.

Nota. Dicha idealización no reduce esencialmente la generalidad de esta disciplina. La mecánica y el electromagnetismo se estudian de manera análoga.

Luego de haber desarrollado el contenido esencial de la termodinámica en estos casos simples, será más sencillo poder extender el análisis a sistemas con estructura mecánica o eléctrica más compleja. Por el momento nos restringiremos al estudio de los llamados sistemas simples.

Definición 2.1.1. (*Sistema simple*) Llamaremos sistema simple a un sistema que es macroscópicamente homogéneo, isotrópico, descargado, lo suficientemente grande como para que los fenómenos superficiales sean obviados, y tal que no actúa ningún campo eléctrico, magnético, o gravitacional.

Observación. Esto último limita a que las masas de los objetos no pueden ser muy grandes, como ya se advirtió anteriormente.

Observación. Para tal tipo de sistemas no existen coordenadas eléctricas ni magnéticas. Todas las componentes de corte elástico o componentes mecánicas son cero, solo el volumen V sobrevive como parámetro mecánico relevante. Asumiremos en esta tesis que, más aún, dicho sistema simple tiene una composición química definida, la cual debe ser descripta por un conjunto de parámetros apropiados. Un conjunto razonable de parámetros es el número de moléculas^I (o moles) N_j de cada componente químico puro del cual esta compuesto el sistema.

Como es de esperarse podemos considerar objetos un poco más complejos que los anteriores que llamaremos sistemas compuestos.

Definición 2.1.2. *(Sistema compuesto)* Un sistema compuesto es un sistema en donde pueden identificarse dos o más sistemas simples que lo constituyen.

Ejemplo 2.1.1. Por ejemplo, si tomamos una sección de pared hecha con ladrillos cerámico, el cerámico es un subsistema, las burbujas de aire otro y el revoque otro, del sistema compuesto que llamamos pared.

Los parámetros $V, N_1, ..., N_r$ comparten una propiedad significativa. Supongamos que tenemos dos sistemas idénticos y luego consideramos un sistema más grande poniendo ambos sistemas juntos, como por ejemplo dos recipientes idénticos llenos de agua que juntos llenan un recipiente con el doble de volumen. El valor del volumen para tal sistema compuesto es simplemente el doble del subsistema simple. Análogamente cada número de moles del sistema compuesto se ve duplicado.

Definición 2.1.3. Los parámetros que toman como valor en un sistema compuesto igual a la suma de los valores en cada subsistema se llaman *parámetros extensivos* (o *variables extensivas*).

2.2. La energía interna U

El desarrollo del principio de la conservación de la energía ha sido uno de los logros más significativos en la evolución de la física.

Si miramos a un sistema macroscópico como un aglomerado de un número enorme de electrones y núcleos, interactuando mediante complejas fuerzas para las cuales el principio de conservación de la energía se aplica, se podría concluir que el sistema tiene una precisa energía, sujeta a determinado principio de conservación. Esto nos lleva a postular la existencia de una energía termodinámica U bien definida como la manifestación macroscópica de una ley de conservación, muy desarrollada, corroborada con extrema precision y aparentemente de completa generalidad a nivel atómico.

Postulado. Dado un sistema termodinámico existe un parámetro extensivo llamado energía interna U que es variable de estado del sistema.

Observación. Hasta aquí tenemos esbozadas como variables de estado a la energía interna U, al volumen V y al número de moléculas que constituyen la materia N_j . A continuación se utilizaran estos observables independientes como suficientes para describir los estados de equilibrio de sistemas termodinámicos simples.

^IAsumiremos que estas magnitudes son números reales

2.3. Equilibrio termodinámico

Los sistemas macroscópicos frecuentemente muestran algo de memoria de su historia reciente, pero la memoria eventualmente de esfuma y los sistemas tienden a estados más simples, independientes de su historia específica. En todos los sistemas hay una tendencia a evolucionar hacia estados en donde las propiedades están determinadas por "factores intrínsecos" y no por influencias externas, como podrían ser un potencial eléctrico o mecánico. Tales estados finales son , por definición, independientes del tiempo y se llaman **estados de equilibrio**^{II}, donde no hay flujo de materia o energía, ni cambios de fase; un sistema en un estado de equilibrio termodinámico no experimenta cambio alguno cuando es aislado de su entorno.

La termodinámica busca describir estos estados simples a los cuales un sistema evoluciona eventualmente. Es plausible adoptar el siguiente postulado, sugerido por observaciones experimentales y simplicidad formal ,pues hay muy pocas coordenadas , y será verificado en última instancia por el éxito de la teoría desencadenada.

Postulado 1. (Estados de equilibrio): Existen estados particulares de un sistema simple (llamados estados de equilibrio) que se pueden caracterizar completamente por la energía interna U, el volumen V y el número de moles $N_1, ..., N_r$ de los componentes químicos.

Un problema persistente de los experimentalistas es la determinación de cuando un sistema esta en un estado de equilibrio, donde se puede aplicar un análisis termodinámico. Mientras que un estado se asume de estar caracterizado completamente por sus parámetros extensivos $U, V, N_1, ..., N_r$, sigue que estas propiedades deben ser independientes de su historia pasada, lo cual da una introspección al significado de equilibrio. Luego si un sistema no esta en equilibrio y es analizado basándose en lo que predice un formalismo termodinámico bajo la suposición de un equilibrio, aparecerán inconsistencias entre lo que esta teoría es útil para los experimentales como un criterio a posteriori de estados de no equilibrio.

Observación. En efecto, muy pocos sistemas se encuentran en un equilibrio certero y absoluto (ignorando procesos que toman tiempos cósmicos para completarse). Un sistema que ha completado los procesos relevantes de su evolución espontánea, y que pueden ser descriptos por un número razonablemente pequeño de parámetros, puede considerarse que este en un equilibrio meta-estable, y tal equilibrio limitado es suficiente para aplicar la termodinámica.

El postulado que acabamos de enunciar identifica lo antes escrito, es decir, hemos puesto en correspondencia las variables de estado extensivas con los estados de equilibrio del sistema o lo que hasta recién estuvimos llamando estados termodinámicos.

^{II}Este es un concepto central en la teoría del cual se sugiere una lectura más detallada en [13], [29], [23], [27], [28], [6], [35], [12], [3]

2.4. Paredes, vínculos y medición de la energía

La descripción de una sistema termodinámico requiere de la especificación de las paredes que lo separan de sus alrededores y proveen condiciones de contorno. Es a través de las manipulaciones de las paredes que los parámetros extensivos del sistema se alteran y los procesos se inician.

Los procesos que provienen de la manipulación de las paredes generalmente están asociados con la redistribución de alguna cantidad entre varios sistemas o entre varias porciones de un sistema. Una clasificación formal de las paredes termodinámicas puede basarse en la propiedad que la pared permite o prohíbe. Por ejemplo, un cilindro con un pistón rígidamente fijo se puede decir que la pared es restrictiva con respecto al **volumen**.

Una pared que es impermeable a algún componente químico es restrictivo con respecto al correspondiente número de moles; mientras que no es restrictivo con respecto al número total de moles ya que el material puede estar compuestos de distintos componentes.

En los parámetros energéticos del sistemas podemos dar la siguiente definición que describe distintos tipos de paredes cruciales en la teoría.

Definición 2.4.1. Es convencional referirse a las paredes que son impermeables con respecto al flujo de calor como **adiabáticas**, mientras que si permite dicho flujo la llamaremos **diatérmica**. Si la pared no permite el flujo calor ni el de trabajo, entonces diremos que la pared es **restrictiva con respecto a la energía**.

Observación. En el discurso clásico, el calentamiento por fricción se considera un proceso adiabático, no así el calentamiento eléctrico pues este último requiere la introducción de cables a través del "cerramiento adiabático". Nosotros consideraremos a este último también como adiabático, pues para acceder de un estado a otro solo basta con un desplazamiento de pesas. Para lograr dicho calentamiento eléctrico se introducen cables al recinto vía una perforación y se conectan al calentador quedando así, enchufado a un generador conectado a una pesa que lo activa. Una vez realizado el calentamiento se retiran los cables junto con el generador, se sella el hoyo y el sistema alcanza un nuevo estado. Mientras que el generador, y el resto de los componentes, quedan en su estado previo y lo único que cambio fue el desplazamiento de la pesa.

Definición 2.4.2. *(Sistema cerrado)* Un sistema se dice *cerrado* si se encuentra rodeado de una pared restrictiva con respecto a la energía interna, el volumen total , y el número de moles de cada componente.

Observación. La existencia de estas paredes muestran que la energía es macroscópicamente controlable (medible).

Una conclusión importante al respecto es que es posible medir la diferencia de energía entre dos estados asumiendo que un estado es accesible desde otro mediante un proceso mecánico mientras el sistema se encuentra encerrado por paredes adiabáticas. Dicho de otra manera, existen paredes, llamadas adiabáticas, con la propiedad de que el trabajo hecho en llevar el sistema de un estado a otro esta solo determinado por esos dos estados, independientemente de las condiciones externas. El trabajo hecho es la diferencia en la energía interna U.

Aun queda el interrogante de cuando son posibles dichos procesos. Para dar una respuesta a este asunto nos remontaremos a los experimentos de Joule. Sus trabajos pueden interpretarse como una demostración de que para un sistema encerrado en paredes adiabáticas, dos estados de equilibrio con el mismo número de moles puede ser "unido" por un proceso mecánico. Es decir, asumiremos como principio que para cualquier par de estados $A ext{ y } B$ de un sistema dado con el mismo número de moles, existe el proceso adiabático que lleva el sistema de $A ext{ a } B (A \prec B)$ o el que lleva de $B ext{ a } A (B \prec A)$. El "o" anterior es no excluyente, es decir , puede ser que existen ambos procesos y dicha condición esta relacionada con la reversibilidad de los estados del sistema. Esto se verá más adelante con más detalle.

Observación. Los métodos de la mecánica nos permiten medir la diferencia de energía entre dos estados con el mismo número de moles.

Todavía existe un inconveniente con la medición de la diferencia de energía entre dos estados, pero es una dificultad fácil de resolver. Si un sistema no conserva constante su número de moles, es decir, existe alguna pared permeable con respecto a alguno de los moles que constituyen el sistema, entonces podemos considerar un sistema más grande, en el cual dicho número si se mantiene constante, y luego la energía final del sistema es la suma de las energía de los subsistemas; esta técnica nos permite relacionar las energías de los estados con diferentes números de moles.

Resumiendo, hemos visto que mediante el uso de paredes adiabáticas y haciendo solo mediciones mecánicas, la energía de un sistema termodinámico puede ser medida (relativa a un estado de referencia).

2.4.1. Medición del calor Q

De lo visto anteriormente, la posibilidad de medir la diferencia entre dos estados de equilibrio cualesquiera, nos provee una forma directa de medir el calor.

Consideremos un proceso especifico que lleva un sistema de un estado inicial A a un estado final B.Combinando la diferencia de la energía total $U_A - U_B$, que se mide como se dijo anteriormente, junto con el trabajo mecánico, que es fácil de medir con métodos de la mecánica, se puede obtener la diferencia entre ambas para obtener el flujo de calor ΔQ , i.e. $\Delta Q = \delta U - \delta W$ (En esto consiste la primera ley de la termodinámica).

Observación. El flujo de calor a lo largo de cualquier proceso (con un número de moles constante) de un sistema, es la diferencia entre la variación de la energía y el trabajo

hecho en tal proceso.

Cabe notar que la cantidad de trabajo cambia según como sea el proceso. A pesar de que los estados iniciales y finales coincidan, el trabajo puede ser muy distinto. En cambio la diferencia de energía solo depende de esos dos estados, inicial y final. Por lo tanto, si se desea estudiar el flujo de calor entre estados, no basta con los estados inicial y final , también es necesario especificar el proceso.

Si restringimos nuestra atención a los procesos termodinámicos de los sistemas simples, las siguientes definiciones son de gran utilidad.

Definición 2.4.3. (*Trabajo cuasi-estático*) El *trabajo cuasi-estático* esta asociado con el cambio del volumen de la siguiente forma

$$dW = -PdV,$$

donde P es la presión.

Observación. (Convención del signo) El trabajo se esta definiendo de forma tal que es positivo si la energía del sistema aumenta. Si el volumen del sistema decrece es porque se esta haciendo trabajo sobre el sistema, por eso esta el signo negativo en la igualdad anterior.

Definición 2.4.4. (Calor cuasi-estático donde el número de moles permanece constante) En un proceso cuasi-estático el calor cuasi-estático dQ esta definido por

dQ = dU - dW (con un número constante de moles)

La definición de proceso cuasi-estático se verá más adelante, por el momento podemos quedarnos con la idea intuitiva de que el proceso ocurre muy despacio.

2.5. El problema básico de la termodinámica

Hay un problema central que define el corazón de la teoría termodinámica. Todos los resultados de la termodinámica se desprenden de su solución.

El problema simple y abarcador de la termodinámica es la determinación del estado de equilibrio que eventualmente resulta de la remoción de los vínculos internos en un sistema compuesto cerrado.

Para que esta frase tenga sentido hace falta definir lo siguiente.

Definición 2.5.1. (Vínculos internos) Los vínculos que impiden el flujo de energía, volumen y materia entre los sistemas simples que forman el sistema compuesto son llamados vínculos internos. Si un sistema cerrado compuesto esta en equilibrio con respecto a un vínculo interno, y si alguno de estos vínculos es removido algunos procesos anteriormente imposibles se vuelven posibles. La predicción de estos nuevos estados de equilibrio es el problema central de la termodinámica.

2.6. Los postulados de entropía máxima

La solución del problema básico de la termodinámica se formulará en un conjunto de postulados que dependen de una justificación a posteriori en lugar de a priori. Estos postulados son, de hecho, el intento más natural que podríamos hacer, de forma tal que obtengamos la solución formal más simple del problema. Es de esperarse que una forma económica de encontrar el estado final de equilibrio de un sistema sea a través de un principio de extremos. Esto es, podremos anticipar los valores extensivos del estado de equilibrio final maximizando cierta función. La solución propuesta se desarrolla en los próximos postulados.

Postulado 2. (Existencia de S): Para todo sistema compuesto existe una función entropía S, definida en todos sus estados de equilibrio, dependiente sólo de los parámetros extensivos del sistema y que además satisface la siguiente propiedad: los valores que alcanzan los parámetros extensivos en la ausencia de un vínculo interno, maximizan la entropía en la variedad dada por los estados de equilibrio.

Observación. Es propicio remarcar que se postuló la existencia de la entropía sólo en los estados de equilibrio del sistema y que este postulado no hace referencia en lo más mínimo a los estados de no-equilibrio del sistema.

En la ausencia de vínculos el sistema se encuentra en la libertad de tomar distintos estados, que también son alcanzables en la presencia de un vínculo adecuado.

El problema básico puede resolverse completamente con la ayuda del principio del extremo si la entropía del sistema es conocida como función de los parámetros extensivos.

Definición 2.6.1. *(Relación fundamental)* La relación que da a la entropía como función de parámetros extensivos es conocida como "relación fundamental".

Observación. ¡Si la relación fundamental de un sistema particular es conocida toda la información termodinámica concebible del sistema se deduce a partir de ella!

De la relación fundamental también se deprende la siguiente definición practica si se piensa en trabajar con funciones y en usar la representación energética.

Definición 2.6.2. (Ecuación fundamental) Se llama ecuación fundamental de un sistema a la ecuación que se desprende de la relación fundamental, y en términos energéticos es $U = U(S, V, N_1, ..., N_r)$.

Del siguiente postulado se desprenden importantes propiedades matemáticas de la función S.

Postulado 3. La entropía de un sistema compuesto es aditiva con respecto a los subsistemas que lo constituyen, es decir, $S = \sum_{\alpha} S^{(\alpha)}$. Además la entropía es diferenciable en su dominio y monótona creciente con respecto U.

Observación. Se obtiene de la aditividad y continuidad que la entropía de un sistema simple es homogénea de primer orden en las variables extensivas.

La propiedad de monotonía implica que la derivada parcial es positiva; la continuidad, diferenciabilidad y monotonía implican que la entropía como función se puede invertir con respecto a la energía y la energía también es una función, continua y diferenciable de $(S, V, N_1, ..., N_r)$. Ambas ecuaciones son formas alternativas de expresar la relación fundamental. Cabe notar que si se opta por encontrar la solución buscando los extremos de la energía en vez de la entropía, en la primera la solución es un mínimo mientras que en la última es un máximo.

Postulado 4. La entropía de cualquier sistema se anula en el estado que satisface $\partial_S U = 0$ (esto es cuando la temperatura absoluta se anula).

Observación. Este postulado es una extension, debida a Planck, del conocido postulado de Nernst o tercera ley de la termodinámica. La mayor parte de la termodinámica no requiere de este postulado.

Nota. Una implicación inmediata de este último postulado es que S (como V y N, pero no como U) tiene un único cero definido.

2.7. Condiciones de equilibrio

2.7.1. Parámetros intensivos

Si fijamos nuestro interés en los procesos y en los cambios en los parámetros extensivos, sera de utilidad la forma diferencial de la ecuación fundamental $U = U(S, V, N_1, ..., N_r)$, esto es,

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right) dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right) dV + \left(\frac{\partial U}{\partial N_j}\right) dN_j \tag{2.1}$$

Las derivadas parciales en la expresión anterior son tan útiles que es conveniente introducir nuevos símbolos para ellas. Son llamadas parámetros intensivos y la siguiente notación es convencional:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right) \equiv T \quad (\text{ la temperatura}) \tag{2.2}$$

$$-\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right) \equiv P \quad (\text{ la presión}) \tag{2.3}$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial N_j}\right) \equiv \mu_j \quad (\text{ el j-ésimo potencial electroquímico}). \tag{2.4}$$

Nota. La definición formal de la temperatura y presión concuerdan con los conceptos intuitivos, que se basan en las sensaciones físicas de "calor" y "frío" y presión mecánica respectivamente.^{III}

Con respecto a la los potenciales electroquímicos no tenemos definiciones anteriores o conceptos relacionados y somos libres de adoptar las definiciones anteriores.

Con esta notación la ecuación (2.1) se convierte en

$$dU = TdS - PdV + \mu_1 dN_1 + \dots + \mu_r dN_r$$
(2.5)

Observación. El termino -PdV en la ecuación (2.5) se identifica como el trabajo cuasiestático.

En el caso especial donde el número de moles es constante la ecuación (2.5) puede escribirse como

$$TdS = dU - dW \tag{2.6}$$

Observación. Un flujo cuasi-estático de calor en un sistema esta asociado con un incremento de entropía del sistema por 2.4.4 y lo anterior.

Llamaremos trabajo electroquímico cuasi-estático a $\sum_{j} \mu_{j} dN_{j}$.

2.7.2. Ecuaciones de estado

La temperatura, presión, y los potenciales electroquímicos son derivadas parciales de funciones que dependen de $S, V, N_1, ..., N_r$ y en consecuencia también son funciones de $S, V, N_1, ..., N_r$

$$T = T(S, V, N_1, ..., N_r)$$
(2.7)

$$P = P(S, V, N_1, ..., N_r)$$
(2.8)

$$\mu_j = \mu_j(S, V, N_1, ..., N_r) \tag{2.9}$$

Definición 2.7.1. (*Ecuaciones de estado*) Las relaciones que expresan parámetros intensivos en términos de parámetros extensivos independientes se dicen ecuaciones de estado.

El conocimiento de una ecuación de estado no constituye un conocimiento completo de las propiedades termodinámicas del sistema. Veremos que el conocimiento de todas

^{III}No se dará una explicación de esto en esta tesis por motivos de extensión, para más información ver [8, p.45].

las ecuaciones de estado del sistema es equivalente al conocimiento de la ecuación fundamental y consecuentemente es termodinámicamente completo.

El hecho de que la ecuación fundamental es homogénea de primer orden tiene implicaciones directas para la forma funcional de las ecuaciones de estado. Se desprende inmediatamente que las ecuaciones de estado son homogéneas de orden cero.

Observación. Luego la temperatura (presión o potencial electroquímico) de una porción de un sistema es igual a la temperatura (presión o potencial electroquímico) de todo el sistema; esto concuerda con el concepto intuitivo de estas magnitudes intensivas.

2.8. La relación de Gibbs-Duhem

Es interesante notar que los parámetros intensivos no son todos independientes. Existe una relación entre los parámetros intensivos y, por ejemplo, para un sistema formado por un solo componente, μ es una función de T y P. La existencia de dicha relación se debe, nuevamente, a la propiedad de homogeneidad de U con respecto a los parámetros extensivos. En el apéndice A se muestran resultados, sobre funciones homogéneas, suficientes para la lectura de lo que sigue.

Supongamos que tenemos una ecuación fundamental con k + 1 variables extensivas

$$U = U(S, X_1, ..., X_k) \tag{2.10}$$

de la cual se obtienen k + 1 ecuaciones de estado

$$P_l = P_l(S, X_1, ..., X_k).$$

Si elegimos el parámetro λ de la forma $\lambda = 1/X_k$, entonces obtenemos que

$$P_k = P_k(S/X_k, X_1/X_k, ..., X_{k-1}/X_k, 1)$$

Luego, cada uno de los k + 1 parámetros intensivos depende sólo de k variables, que son los P_k , y eliminando esos k parámetros de las k + 1 ecuaciones obtenemos la relación buscada entre los parámetros intensivos.

Una forma diferencial de ver dicho resultado se desprende de la relación de Euler (ver apéndice B) y es conocida como la relación de Gibbs-Duhem. Tomando la variación infinitesimal de la ecuación obtenemos que

$$dU = TdS + SdT + \sum P_j dX_j + \sum X_j dP_j$$

por (2.10) y $(B.0.3)^{IV}$, para conciliar esta última expresión con (2.5) obtenemos la siguiente relación

 $SdT + \sum X_j dP_j = 0$ relación de Gibbs-Duhem.

2.9. Resumen de la estructura formal

Resumamos los visto anteriormente en el formalismo de la representación energética. Consideraremos sistemas simples formados por un solo componente para que lo expuesto sea más claro.La ecuación fundamental

$$U = U(S, V, N)$$

contiene toda la información termodinámica del sistema. Con la definición de los **parámetros intensivos** a partir de las derivadas parciales de la anterior ecuación fundamental tenemos las siguientes **ecuaciones de estado**

$$T = T(S, V, N)$$
$$P = P(S, V, N)$$
$$\mu = \mu(S, V, N)$$

Si todas las ecuaciones de estado son conocidas entonces pueden ser reemplazadas en la relación de Euler y así obtener la ecuación fundamental. Y es fácil de ver que una sola ecuación de estado contiene menos información termodinámica que la ecuación fundamental.

Nota. Por otra parte, si dos ecuaciones de estado son conocidas, la relación de Gibbs-Duhem puede ser integrada para obtener la tercera, y entonces se obtiene una ecuación de estado con una constante de integración indeterminada. Por lo tanto, dos ecuaciones de estado son suficientes para determinar la ecuación fundamental del sistema salvo por una constante.

Nota. Siempre es posible expresar a la energía interna como una función de otros parámetros que no sean $S, V \neq N$, por ejemplo $T, V, \neq N$. Sin embargo tal ecuación U = U(T, V, N) no es una ecuación fundamental y no contiene toda la información termodinámica del sistema. En efecto, si retomamos la definición de T veremos que es una derivada parcial, y aunque dicha ecuación sea integrable, nos daría una ecuación fundamental con una indeterminación. Por lo tanto de U(S, V, N) podemos conocer U(T, V, N)pero no al revés.

^{IV}ver (B.1)

2.10. El gas ideal

Un gas ideal simple esta caracterizado por las siguientes dos ecuaciones

$$PV = NRT \quad y \quad U = \alpha NRT \tag{2.11}$$

donde R es la constante universal de los gases.

Observación. Notemos que las ecuaciones de arriba escritas de esa forma no son ecuaciones de estado, como se definió en (2.7.1), pero sí son equivalente a las siguientes ecuaciones de estado

$$T = \frac{U}{\alpha NR} \text{ y } P = \frac{U}{\alpha V}.$$
(2.12)

En los gases compuestos de átomos monoatómicos (tales como He, Ar, Ne) puede observarse que satisfacen las ecuaciones de (2.11) en temperaturas tales que $k_b T$ es pequeña comparado con las energías de excitación electrónica (i.e. $T \leq 10^4$ K) y a presiones bajas o moderadas. Todos tales gases monoatómicos ideales tienen un valor de $\alpha = 3/2$.

Bajo condiciones más restringidas de temperatura y presión otros gases reales pueden verificar las ecuaciones de estado del gas ideal pero con otros valores de α .

De las ecuaciones (2.11) podemos aspirar a determinar la ecuación fundamental del sistema. La presencia de U en una ecuación de estado nos sugiere utilizar una representación entrópica del sistema y reescribiendo de forma apropiada tenemos

$$\frac{1}{T} = \alpha R \frac{N}{U} \quad \text{y} \quad \frac{P}{T} = R \frac{N}{V} \tag{2.13}$$

integrando la relación de Gibbs-Duhem obtenemos la tercer ecuación de estado $\frac{\mu}{T} = f(U/N, V/N)$, es decir, integrando la siguiente expressión

$$d\left(\frac{\mu}{T}\right) = \frac{U}{N}d\left(\frac{1}{T}\right) + \frac{V}{N}d\left(\frac{P}{T}\right)$$
(2.14)

Resta luego utilizar dichas tres ecuaciones de estado para reemplazarlas en la ecuación de Euler

$$S = \left(\frac{1}{T}\right)U + \left(\frac{P}{T}\right)V - \left(\frac{\mu}{T}\right)N \tag{2.15}$$

De la relación de Gibbs-Duhem de (2.14) se obtiene que

$$Nd\left(\frac{\mu}{T}\right) = U\left(\frac{-\alpha R}{U^2}\right)dU + V\left(\frac{-R}{V^2}\right)dV = -\alpha NR\frac{dU}{U} - NR\frac{dV}{V},$$

luego integrando

$$\frac{\mu}{T} - \left(\frac{\mu}{T}\right)_0 = -\alpha R \frac{U}{U_0} - R \frac{V}{V_0}$$

Finalmente por la relación de Euler (2.15) obtenemos que

$$S = S_0 + NRln\left(\left(\frac{U}{U_0}\right)^{\alpha} \left(\frac{V}{V_0}\right) \left(\frac{N}{N_0}\right)^{-(\alpha+1)}\right)$$
(2.16)

donde $S_0 = N\left((\alpha + 1)R - \left(\frac{\mu}{T}\right)\right)$, y la ecuación (2.16) es la ecuación fundamental que buscábamos.

2.11. Process possibles y process imposibles

Un ingeniero podría enfrentarse con el problema de diseñar un dispositivo para realizar una tarea específica, por ejemplo, elevar un ascensor a distintos pisos de un edificio. Es así que el ingeniero procede diseñar un artefacto (o motor) que permite condicionalmente una transferencia de energía desde un horno al ascensor; si el calor fluye desde el horno entonces gracias a las interconexiones entre varios pistones, palancas y levas el ascensor debería elevarse. Pero es la naturaleza (las leyes de la física) quien decide si el dispositivo va a funcionar o no. En primera instancia el dispositivo tiene que obedecer a las leyes de la mecánica. En segunda instancia los procesos involucrados deben maximizar la entropía paso a paso.

Es sabido que en las oficinas de registro de patentes existen ingeniosos dispositivos que presumen de una lógica elegante y que obedecen a todas las leyes de la mecánica, pero sin embargo permanecen obstinadamente inertes encaprichados en disminuir la entropía. Mientras que otros operan aumentando la entropía más de lo esperado.

2.11.1. Cuasi-estaticidad y procesos reversibles

El principio de maximización de la entropía arroja resultados de contenido específico cuando se particulariza a cierta clase de procesos. Centraremos nuestra atención a tales teoremas luego de refinar la descripción de los estados y los procesos de un sistema termodinámico.

Para describir y caracterizar estados termodinámicos, y luego describir los procesos posibles es útil definir lo que es el **espacio de configuración termodinámico**.

Definición 2.11.1. El espacio de configuración termodinámico de un sistema simple es el espacio abstracto generado por los ejes coordenados que corresponden con los parámetros extensivos $S, U, V, N_1, ..., N_r$ del sistema.

La ecuación fundamental del sistema $S = S(U, V, N_1, ..., N_r)$ define una superficie (al menos localmente) en el espacio de configuración termodinámico. Notemos que dicha superficie satisface los requerimientos de que $\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{T} \ge 0$ y que hay una función $U = U(S, V, N_1, ..., N_r)$ (al menos localmente).

Por definición cada punto en el espacio de configuración representa un estado de equilibrio.

Observación. La representación de un estado de no equilibrio requiere un espacio de dimension más grande.

Nota. En este contexto, un proceso cuasi-estático se define en términos de una sucesión densa de estados de equilibrio.

A pesar de que ningún proceso real es cuasi-estático, es posible planear procesos reales que tienen una estrecha relación con los procesos cuasi-estáticos

Consideremos un sistema cerrado en el que ocurre una sucesión de estados A, B, C, ..., H próximos a puntos cuasi estáticos.El sistema es inducido a ir de A a B por medio de la remoción de un vínculo interno. El sistema cerrado va a terminar en B si y sólo si el estado B maximiza la entropía para los nuevos estados accesibles del sistema, en particular la entropía para el estado B debe ser mayor (o igual) que la entropía en el estado A. En este contexto diremos que si paso de un estado A de menor entropía a B de mayor entropía tal proceso es *irreversible*.

Observación. Un estado cuasi-estático puede aproximarse por un proceso real en un sistema cerrado si la entropía es monótona no decreciente a lo largo de los estados cuasiestáticos.

Observación. (Segunda ley de la termodinámica) Una forma de expresar la segunda ley consta en decir que la entropía de un sistema cerrado nunca decrece. Es decir, si el sistema (cerrado) se encuentra en un estado de equilibrio A correspondiente a una entropía S_A y existe algún estado de equilibrio B donde la entropía es S_B y $S_B < S_A$, entonces no existe ningun proceso que lleve al sistema del estado A al estado B. Inversamente siempre existe.

Definición 2.11.2. El caso límite de un proceso cuasi-estático (en un sistema cerrado) en donde el incremento de la entropía tiende a anularse se dice **proceso reversible**. Diremos que dS = 0 en un proceso cuasi-estático donde el sistema es cerrado implica que el proceso es reversible.

2.11.2. Tiempos de relajación e irreversibilidad

Consideremos un sistema y un proceso diseñado de forma tal que atraviesa estados de equilibrio cuasi-estáticamente. Los vínculos internos se quitan paso a paso de forma tal que el sistema en cada paso alcanza un nuevo estado de equilibrio. Luego de cada remoción de un vínculo debemos esperar hasta que el sistema alcanza el equilibrio en su totalidad y entonces recién se procede con la remoción del próximo vínculo y así siguiendo. A pesar de que esta es la prescripción teórica del proceso, en la practica los vínculos usualmente se remueven de forma continua variando a un ritmo lo "suficientemente lento".

Definición 2.11.3. El ritmo al cual los vínculos se pueden relajar mientras el sistema se acerca a un estado cuasi-estático se caracteriza por el **tiempo de relajación** τ del sistema.

Para un sistema dado con cierto tiempo de relajación τ , los proceso que ocurren en un tiempo corto comparado con τ no son cuasi-estático, mientras que los procesos que ocurren en tiempos grandes comparados con τ pueden aproximarse cuasi-estáticamente.

Las consideraciones físicas que determinan el tiempo de relajación se puede ilustrar mediante la expansión adiabática de un gas dentro de un cilindro, donde una de las tapas de dicho cilindro es un pistón. Si el pistón se mueve extremadamente lento, el proceso seguramente sera cuasi-estático e incluso reversible. Por otro lado, si la presión externa decrece muy rápido el movimiento resultante del pistón se ve acompañado por turbulencia y un flujo inhomogeneo dentro del cilindro (y por un notable incremento de la entropía). Resultando así en un proceso que no es ni cuasi-estático y menos reversible.

Para estimar el tiempo de relajación primero debemos admitir que un movimiento del pistón hacia afuera reduce la densidad del gas en la región adyacente al pistón. Si la expansión es reversible, esta rarificación" local en el gas debe homogeneizarse por el proceso de flujo hidrodinámico antes de que el pistón vuelva a moverse. La rarificación se propaga a través del gas a la velocidad del sonido, se refleja en las paredes del cilindro y se disipa gradualmente. El mecanismo de disipación involucra tanto reflexión difusiva de las paredes como una amortiguación viscosa del gas. El caso más simple es tal vez donde las paredes del cilindro son tan ásperas que basta una sola reflexión para disipar efectivamente la rarificación. Luego el tiempo de relajación sera del orden del tiempo requerido par que la rarificación se propague a través del sistema, esto es $\tau \simeq V^{\frac{1}{3}}/c$, donde el la raíz cubica del volumen es tomada como medida de "longitud" del sistema y c es la velocidad del sonido en el gas. Entonces si la expansión adiabática del gas en el cilindro se realizan en tiempos mucho más grandes que este tiempo de relajación la expansión ocurre de forma reversible e isoentrópica. Si la expansión se realiza en tiempos comparables o más chicos que el tiempo de relajación entonces tiene lugar un incremento de la entropía dentro del sistema y la expansión, a pesar de ser adiabática, no es isoentrópica.

2.12. Formulaciones alternativas

En las secciones anteriores se infirieron algunas de las consecuencias inmediatas del principio de máxima entropía. Las próximas consecuencias darán lugar a un horizonte más amplio de resultados útiles y fundamentales. Para facilitar dicha tarea es de utilidad reconsiderar los aspectos formales de la teoría y notar que el mismo contenido puede reformularse de distintas formas matemáticamente equivalentes. Cada una de estas formulaciones alternativas resulta conveniente para alguna familia particulares de problemas, y el arte de los cálculos de la termodinámica yace en la elección de la formulación teórica que mejor se adapte al problema dado. En la formulación apropiada los problemas termodinámicos tienden a ser notablemente simples. Por esta razón la teoría de transformaciones entre las representaciones equivalentes se incorpora aquí como un aspecto fundamental de la teoría termodinámica.

Hasta el momento sólo consideramos dos representaciones equivalentes, la energética y la entrópica. Pero el principio del extremo sólo se formuló en la representación entrópica. Si trasformamos dicho principio a una representación energética, lo que se obtiene es que el principio de máximo de entropía se traduce en el principio de mínima energía (análogo al de la mecánica). Y ambos son equivalentes. Dichos principios pueden enunciarse de la siguiente manera:

Principio. (Máximo de la entropía) El valor de equilibrio de cualquier parámetro interno sin restricciones es tal que maximiza la entropía para un dado valor total de energía interna.

Principio. (Mínimo de la energía) El valor de equilibrio de cualquier parámetro interno sin restricciones es tal que minimiza la entropía para un dado valor total de entropía.

No incluiremos la demostración de esta equivalencia en esta tesis, pero el lector entusiasta puede seguirla en [8, p.134].

Como una ilustración de estos dos acercamientos al equilibrio consideremos un pistón originalmente fijo en algún punto de un cilindro. Nos interesamos en llevar el sistema al equilibrio sin la condición de restricción en la posición del pistón. Podemos remover la restricción y dejar que el equilibrio se establezca por si solo espontáneamente; la entropía crece y la energía se mantiene constante por la condición de clausura. Este es el proceso sugerido por el principio de la máxima entropía.

Alternativamente podemos permitir que el pistón se mueva muy lentamente, de manera reversible hasta que se alcanza a la posición donde se iguala la presión a ambos lados. En este proceso la energía se retira del sistema, pero la entropía se mantiene constante. Este es el proceso sugerido por el principio de la mínima energía.

El punto clave que se quiere enfatizar es que, independientemente del procedimiento por el cual se llega al equilibrio, el punto de equilibrio final satisface ambas condiciones de extremo.

2.12.1. Transformada de Legendre

En ambas representaciones (entrópica y energética), los parámetros extensivos juegan los roles de variables independientes, y los parámetros intensivos aparecen como conceptos derivados. Esta situación esta en directo contraste con lo que es más conveniente en un laboratorio. El experimental suele encontrar que los parámetros intensivos son más fáciles de medir y controlar, y por eso es mejor pensar como variables operacionales independientes a los parámetros independientes y a los parámetros extensivos como cantidades operacionales derivadas. Un ejemplo extremo de esta situación son la variables conjugadas temperatura y entropía. No existen instrumentos prácticos para medir y manejar la entropía, mientras que los termostatos y termómetros para medir y controlar la temperatura son equipamiento común de un laboratorio. La pregunta emergente es si existe una posibilidad de replantear el formalismo matemático de manera tal, que se reemplacen las variables independientes extensivas por variables independientes intensivas sin sacrificar información de la relación fundamental. La solución a este problema viene dada por la *transformada de Legendre* que relaciona de una forma natural las distintas representaciones. Para mayor información ver apéndice A.

2.13. Estabilidad de los sistemas termodinámicos

El principio del extremo de la termodinámica implica, bajo ciertas condiciones de regularidad, las condiciones dS = 0 y $d^2S < 0$, la primera dice que es un extremo y la segunda que es un máximo. Aún no hemos explotado del todo la segunda condición la cual determina la *estabilidad* de los estados de equilibrio predichos. Justamente la estabilidad conduce a algunas de los predicciones más significativas de la termodinámica. A continuación mostraremos las condiciones bajo las cuales un sistema es estable. Por otra parte, las llamados **cambios de fase** de un sistema están estrechamente relacionados con la inestabilidad del mismo.

Nota. En lo que concierne a esta tesis cabe aclarar que, si bien el estudio de los cambios de fase son centrales en la termodinámica contemporánea, no es nuestra intención abordar estos temas aquí y nos centraremos en sistemas más bien regulares para hacer esta primera incursión en los sistemas termo-mecánicos que presentaremos más adelante.

2.13.1. Condiciones de estabilidad para potenciales termodinámicos

La reformulación de los criterios de estabilidad en la representación energética sólo requiere una transcripción directa de lenguaje. Mientras la entropía es un máximo, la energía es un mínimo. Luego la concavidad de la superficie de la entropía se reemplaza por convexidad de la superficie de la energía pues,

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} = \frac{\partial T}{\partial S} \ge 0, \quad \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} = -\frac{\partial P}{\partial V} \ge 0 \quad \text{(condiciones de convexidad local)}$$

junto con

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V}\right)^2 \ge 0.$$

Este resultado puede extenderse fácilmente a las transformadas de Legendre de la entropía (o energía) de la siguiente manera: Para N constante los potenciales termodinámicos (la energía U y sus transformadas de Legendre) son funciones convexas en sus parámetros extensivos y funciones cóncavas en sus variables intensivas.

Capítulo 3

Sistemas termo-mecánicos

La intención de este capítulo es presentar un primer acercamiento a lo que llamaremos sistemas termo-mecánicos, en esta instancia no pretendemos incluir una definición formal de dichos objetos, sino que más bien recurriremos a la intuición de lo conocido de sistemas dinámicos mecánicos y termodinámicos, para proceder a construir un sistema dinámico que albergue a "todos" los observables del sistema. En este contexto los observables serán: los mecánicos de un sistema de partículas (posición, velocidad, etc.), como los que se presentaron en el capítulo 1, y los de un sistema termodinámico clásico (energía interna, entropía, temperatura, volumen, presión, etc.), como los que se vieron en el capítulo anterior. Nuestra meta es obtener la evolución temporal del sistema y encontrar ecuaciones de movimiento nos aproxima a una respuesta.

Todo el contenido de este capítulo es original de esta tesis.

3.1. Ejemplos de sistemas termo-mecánicos

A continuación consideraremos un par de ejemplos, que pueden visualizarse a modo de experimentos, de lo que llamaremos un sistema termo-mecánico. El primero de ellos es un carrito con fricción interna y el segundo un émbolo que encierra a un gas ideal. La intención es responder cuál será la evolución temporal de cada uno de los observables del sistema. Para ello procederemos de una manera ad-hoc muy elemental utilizando sólo las leyes de Newton y el principio de la conservación de la energía.

Ejemplo 3.1.1. (Carrito con fricción interna) Este ejemplo consiste en un carrito de masa m que rueda sobre una mesa lisa sin deslizar como se muestra en la figura (3.1). Las ruedas del carrito están conectadas de a pares por un eje que atraviesa el chasis de lado a lado y éste no gira libremente sino que hay fricción. Asumiremos que las ruedas son aislantes térmicos perfectos de masa despreciable, y que el sistema está aislado, es decir, si se libera al carrito con sólo un impulso inicial sobre una mesa diremos que el proceso será termodinamicamente adiabático, donde el sistema termodinámico es sólo el carro sin



Figura 3.1: Carrito con fricción

las ruedas, y los alrededores del sistema son las ruedas (o las ruedas y la mesa, aunque esta última no es relevante en la descripción termodinámica). También asumiremos que el material del que está hecho el chasis tiene una conductividad térmica muy grande, y que sus magnitudes termodinámicas como la entropía S, la temperatura T y la energía interna U están bien definidas y uniformemente distribuidas en todo momento.

Con respecto a las ecuaciones de estado del sistema termodinámico, estaremos suponiendo que en todo momento el sistema se encuentra en equilibrio, es decir el proceso es cuasi-estático y además que el calor específico^I ν del carrito es independiente del tiempo.

En cuanto a la descripción mecánica del ejemplo, consideraremos que al carrito se le proporciona una velocidad inicial \dot{q}_0 y se lo deja rodar libremente sobre la mesa. Lo que sucederá a continuación es que la fricción interna de los ejes irá frenándolo hasta detenerlo por completo; claramente es un sistema mecánico disipativo.

En términos energéticos lo que está ocurriendo es que la energía cinética se transforma totalmente en energía calórica (o calor), incrementando así la energía interna del carrito. Como el carrito, sin las ruedas, está aislado energéticamente, se utilizará el principio de conservación de la energía como vínculo clave para encontrar la evolución temporal de los observables termodinámicos.

Resolución ad-hoc:

Las ecuaciones de estado de la parte termodinámica del sistema son:

$$U = \nu T$$
 y $S = \nu ln \left(\frac{T}{T_0}\right) + S_0$ (3.1)

donde ν es el calor específico del material del que está hecho el chasis del carrito. Por otra parte, la expresión de la entropía se dedujo de considerar que el sistema es *cuasi-estático*.

^IVer apéndice D.

de T y no de S, y de ahí proviene dicha degeneración.

La ecuación de Newton asociada con el problema es:

$$m\ddot{q} = -\mu \operatorname{Signo}(\dot{q}) \tag{3.2}$$

y su solución es

$$q(t) = -\mu \operatorname{Signo}(\dot{q}) \frac{t^2}{2} + \dot{q}_0 t + q_0 \operatorname{si} \dot{q} \neq 0$$

Como el sistema está aislado la condición que me permite vincular la evolución temporal mecánica con la evolución temporal termodinámica es la conservación de la energía total $\mathcal{E} = \frac{m\dot{q}^2}{2} + U$, esto es,

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{m\dot{q}^2}{2} + \nu T\right) = m\ddot{q}\dot{q} + \nu\dot{T} = 0 \tag{3.3}$$

y así obtenemos la siguiente evolución temporal de la temperatura y la entropía

$$\begin{cases} \dot{T} = \frac{\mu \mid \dot{q} \mid}{\nu} \\ \dot{S} = \frac{\nu T}{T} \end{cases}$$
(3.4)

Observación. Tanto la temperatura como la entropía crecen cuando existe una variación en q.

En resumen, como respuesta a cuál será la evolución temporal de los observables q, S y T obtuvimos las ecuaciones (3.2), (3.4) y (3.3); de estas últimas junto con (3.1) es posible también obtener la evolución temporal del observable U. Dicho esto, hemos dado la evolución temporal de todos los observables que dijimos que constituían nuestro sistema, y dar por finalizada nuestra tarea.

Acabada la instancia anterior, resta discutir qué es lo que ocurre con la estabilidad del sistema y describirlo cualitativamente para así extraer, de ser posible, alguna interpretación en términos de comportamiento relacionado con las ecuaciones expuestas.

Análisis cualitativo del sistema dinámico

Analicemos por un momento el espacio de fase^{Π} de este ejemplo con el siguiente campo relacionado,

^{II}Si bien no hemos definido lo que es el espacio de fase, en este capítulo podemos pensar que es simplemente un cambio de variables, para expresar la información de una ecuación diferencial de segundo orden como una de primer orden.



Figura 3.2: Campo en el espacio de fase.

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -\mu \text{ Signo}(p) \end{cases}$$

Los puntos de equilibrio del sistema son los de la forma $(q^*, p^*) = (q, 0)$ y la matriz asociada con la estabilidad lineal es la siguiente

$$S(q,p) = \left(\begin{array}{cc} 0 & \frac{1}{m} \\ 0 & 0 \end{array}\right)$$

y tanto su traza como su determinante son nulos, es decir, es un sistema singular desde el punto de vista de la estabilidad, y ocurre que dicha singularidad está presente para toda posición q. Miremos por un momento la figura (3.2) donde podemos apreciar al campo en cuestión, las abscisas representan a q y las ordenadas a p. Claramente el gráfico muestra, lo que se intuye en primera instancia, que existe un atractor que es una variedad caracterizada por p = 0.

Observación. La fuerza de fricción presenta una discontinuidad en un entorno de p = 0, donde se refleja una simetría impar del problema y esto va de la mano con la imposibilidad de una curva integral continua que conecte ambos lados del espacio de fase.

Ejemplo 3.1.2. (Émbolo vertical adiabático) Este ejemplo consiste en el estudio de la evolución temporal de observables tanto mecánicos como termodinámicos de un émbolo vertical de masa m, que aloja en su interior a un gas ideal, como se muestra en la figura (3.3). Los observables que consideraremos en este ejemplo son la posición q del émbolo, el volumen V, la presión P, la temperatura T y la entropía S del gas ideal. Supondremos que el sistema se encuentra totalmente aislado energéticamente, no hay disipación calórica para el gas confinado, y además el émbolo de masa m se mueve sin fricción. Se asumirá que el proceso se realiza satisfaciendo las ecuaciones de estado termodinámico para todo tiempo, esto presupone que el gas ideal como un fluido compresible no tiene viscosidad. La presión se encuentra uniformemente distribuida en todo tiempo y por ello



Figura 3.3: Esquema mecánico y termodinámico del émbolo.

existe una presión macroscópica P. En cuanto a los tiempos de relajación, estamos suponiendo que los tiempos de relajación internos del gas son mucho mayores a las velocidades del movimiento del émbolo.

Como primera aproximación a la resolución del sistema termo-mecánico, se considerarán las ecuaciones de estado, junto con la ecuación de Newton, y la definición del volumen del gas en función de la posición del émbolo, para así obtener de manera ad-hoc la evolución temporal de todos los observables.

Resolución ad-hoc:

En las variables termodinámicas energía interna, volumen, entropía, presión y temperatura (U, V, S, P, T) involucradas en la descripción, se cumplen las siguientes igualdades o ecuaciones de estado:

$$PV = NRT, (3.5)$$

$$U = \alpha NRT, \tag{3.6}$$

$$S = S_0 + NR \ln\left(\frac{T^{\alpha}V}{T_0^{\alpha}V_0}\right), \qquad (3.7)$$

donde N es el número de moles que se mantiene constante, y R es una constante de los gases.

Observación. La ecuaciones (3.5) y (3.6) son ecuaciones conocidas que verifican los gases ideales. Mientras que la ecuación (3.7) se obtiene de considerar que todo el proceso es *cuasi-estático*, como se expuso en el capítulo 1.

Como el proceso que estamos considerando es adiabático, entonces también vale que

donde $\frac{\alpha + 1}{\alpha} = \gamma$.

Observación. Las ecuaciones (3.8) y (3.5) implican en (3.7) que el proceso es isoentrópico $(S = S_0)$.

En la parte mecánica tenemos la siguiente ecuación de movimiento del émbolo

$$m\ddot{q} = -mg + PA$$

donde A es el área de la sección horizontal del émbolo.

Para despejar P(q) notemos que en la configuración geométrica vale que Aq = V y de (3.8) se obtiene que $P(q) = \frac{k}{(Aq)^{\gamma}}$ y así finalmente llegamos a la ecuación de Newton:

$$m\ddot{q} = -mg + \frac{kA}{(Aq)^{\gamma}} \tag{3.9}$$

cuya solución se puede encontrar por cuadratura, empezando por multiplicar ambos lados de la igualdad por \dot{q} , esto es,

$$m\ddot{q}\dot{q} = -mg\dot{q} + \frac{kA}{(Aq)^{\gamma}}\dot{q}.$$

Luego la siguiente integración resulta sencilla,

$$\frac{d(\dot{q}^2)}{dt} = -g\dot{q} + \frac{kA}{m(Aq)^{\gamma}}\dot{q} \Rightarrow \dot{q}^2 = \int (-gq + \frac{kA}{Am}q^{-\gamma}\dot{q})dt,$$

y finalmente por cuadratura la expresión de la solución es

$$\left(\int_{1}^{q(t)} \frac{1}{\sqrt{c_1 + 2\left(-g\tilde{q} + \frac{kA}{mA^{\gamma}(1-\gamma)}\tilde{q}^{1-\gamma}\right)}} d\tilde{q}\right)^2 = (t+c_2)^2, \quad (3.10)$$

donde c_1 y c_2 son constantes de integración. Por lo tanto la solución de la parte termodinámica del sistema es:

$$\begin{cases} V(t) = Aq(t) \\ S(t) = S_0 \\ P(t) = \frac{kq(t)^{-\gamma}}{A^{\gamma}} \\ T(t) = \frac{kq(t)^{1-\gamma}}{NRA^{\gamma-1}} \end{cases}$$
(3.11)

donde q(t) es la solución expuesta en (3.10).

Nuevamente hemos arribado a una solución explícita de la evolución temporal de todos los observables que consideramos involucrados en la descripción del sistema físico.

Análisis cualitativo del sistema dinámico

Veamos que la solución representa a una oscilación periódica. Para ello analizaremos el siguiente sistema dinámico:

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -mg + kA^{-\gamma+1}q^{-\gamma} \end{cases}$$

Visto como un sistema físico conservativo, donde $H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + mgq + \frac{\alpha k}{A^{\gamma-1}}q^{1-\gamma}$ representa la energía total del sistema, las soluciones del par de ecuaciones expuestas verifican que H = c, donde c es una constante.

Analizando la estabilidad de este sistema se puede observar que sólo tiene un punto de equilibrio $(q^*, p^*) = (\frac{kA^{1-\gamma}}{mg}, 0)$, que es un centro, pues analizando la estabilidad local del sistema en un entorno del único punto de equilibrio tenemos que

$$S(q,p) = \begin{pmatrix} \partial_q \dot{q} & \partial_p \dot{q} \\ \partial_q \dot{p} & \partial_p \dot{p} \end{pmatrix} \Rightarrow S\left(\frac{kA^{1-\gamma}}{mg}, 0\right) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ \frac{-\gamma kq^{*-\gamma-1}}{A^{\gamma-1}} & 0 \end{pmatrix},$$

de esta última expresión es evidente que la traza de S es nula y su determinante positivo. Además en las proximidades de dicho centro las soluciones son órbitas cerradas. Esto es fácil de observar teniendo que cuenta que el sistema se comporta cualitativamente de manera similar al sistema particular $H_0 = \frac{p^2}{2} + q + \frac{3}{2}q^{\frac{-2}{3}}$ que mostraremos gráficamente a continuación.



Figura 3.4: Gráfica de H_0



 H_0 es el caso particular cuando en H consideramos que $m = 1, g = 1, A = 1, \alpha = \frac{3}{2}, \gamma = \frac{5}{3}$ y k = 1.

Observación. Este es un caso de un sistema termo-mecánico conservativo (la energía total del sistema se conserva), y reversible, pues satisface los expuesto en 2.11.2.

Este ejemplo puede interpretarse físicamente como un sistema muy cercano al equilibrio (q^*, p^*) y las oscilaciones periódicas que se obtienen como solución del sistema simplemente son perturbaciones a dicho estado de equilibrio. Si la teoría y el fenómeno son lo suficientemente robustos, entonces es de esperarse que dichas soluciones sean buenas aproximaciones para el fenómeno real. Esta presentación muestra un camino en la elaboración de experimentos que sirvan para validar las leyes de la termodinámica donde las velocidades sean grandes y no haya uniformidad en la presión.

3.1.1. Sistemas termo-mecánicos finito dimensionales

Visto los anteriores ejemplos y considerando los comentarios finales de la sección anterior, estamos en condiciones de dar la siguiente definición.

Definición 3.1.1. Llamaremos sistema temo-mecánico finito dimensional a un sistema físico cuya descripción de estados involucra sólo a un número finito de observables mecánicos y/o termodinámicos, y obedecen tanto a las leyes de la termodinámica (clásica) como de la mecánica clásica.

Observación. Tanto los sistemas mecánicos de partículas como los sistemas termodinámicos (clásicos) se hallan incluidos en esta definición (trivialmente), con un espíritu integrador. Esta visión integrada de un sistema físico, busca enriquecer ambas descripciones simultáneamente.

En los dos ejemplos anteriores se expusieron de manera simple fenómenos elementales de fricción seca y conservación. En lo que sigue ampliaremos el horizonte, considerando otro tipo de fenómenos disipativos que también pueden describirse termo-mecánicamente.

3.2. Un planteo variacional

En esta sección lo que se hará es una reformulación de los ejemplos anteriores, dando un primer paso en nuestro objetivo de geometrizar los sistemas en cuestión.

Otra forma de obtener las ecuaciones de movimiento del sistema es la que se expondrá a continuación, haciendo uso de la formulación variacional presentada en el capítulo 1. Pues, además de una descripción ad-hoc de los ejemplos que consideramos elementales, también es conveniente presentar una descripción de dichas soluciones en un formalismo Lagrangiano para lo que se desarrollará más adelante.

Por el momento sólo hablaremos de Lagrangianos de la parte mecánica de los ejemplos, y de la parte termodinámica nos quedaremos por el momento con la idea de que existe una función energía interna U (o bien un potencial Φ), definida en el **espacio** de fase termodinámico reducido (EFTR) que identificaremos con las coordenadas $(S, V, N_1, ..., N_r, T, P, \mu_1, ..., \mu_r)$. Es conveniente aclarar que consideraremos independientes a estas últimas, y que pueden interpretarse como las variables que cumplen un rol similar al de las "posiciones" en mecánica. Notemos que si en este espacio hay r + 2 coordenadas extensivas, entonces identificaremos a dichas coordenadas con \mathbb{R}^{r+2}_+ y al EFTR con $\mathbb{R}_+^{2(r+2)}$. Dicho esto, cuando hablemos de vínculos holónomos en la parte termodinámica^{III}, éstos se podrán expresar como funciones en las coordenadas del EFTR.

Para más información con respecto a esta formulación de los sistemas dinámicos se puede recurrir a la bibliografía sugerida.

3.2.1. Descripción Lagrangiana del carrito con fricción interna

Teniendo en cuenta que la coordenada q representa la posición horizontal paralela a las ruedas del carrito, el Lagrangiano mecánico queda expresado sólo como energía cinética, esto es,

$$L_M(q, \dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2},$$

y por el momento consideraremos que el Lagrangiano del sistema termo-mecánico es la siguiente propuesta

$$L_{TM}: \mathbb{R}^{2}_{\{(q,\dot{q})\}} \times \mathbb{R}^{2}_{\{(S,T)\}} \to \mathbb{R}, \qquad L_{TM}(q,\dot{q},S,T):=L_{M}(q,\dot{q})-U(S,T).$$

Hemos propuesto un posible Lagrangiano del sistema total, donde se introdujo a la energía interna del sistema termodinámico subyacente, operando como un potencial.

Realicemos el cálculo variacional correspondiente a los SNHG que se mencionó en el capítulo 1 para resolver la trayectoria incógnita. Para ello, se introducirán las ecuaciones de estado (3.1) a modo de vínculos holónomos en las coordenadas termodinámicas. Otro vínculo evidente, desde la construcción del ejemplo, es la conservación de la energía total. También nos resultará conveniente introducir la fuerza de fricción como fuerza de vínculo asociada a la energía interna termodinámica U, como se detalla a continuación.

Vinculos:
$$C_{\mathcal{K}} := \{ \dot{\mathcal{E}} = m \ \ddot{q} \ \dot{q} + \nu \dot{T} = 0, \ S = \nu \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + S_0 \}.$$
 (3.12)

La fuerzas de vínculo μ Signo (\dot{q}) verifica el siguiente desplazamiento virtual

$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \{ \mu \text{ Signo}(\dot{q}) \ \delta q = \nu \delta T \}.$$
(3.13)

^{III}Si bien no se introdujo el concepto de vínculo holónomo en el capítulo 2, no lo consideramos necesario en esta instancia ya que es fácil extrapolarlo desde la mecánica.

Busquemos, utilizando la expresión del Lagrangiano anterior y el principio de Hamilton, los puntos críticos de la acción, esto es,

$$\int_{t_1}^{t_2} [-m\ddot{q} \,\,\delta q - \nu \,\,\delta T] dt = 0. \tag{3.14}$$

Luego, utilizando los desplazamientos virtuales (3.13) en (3.14) obtenemos la segunda ley de Newton para este ejemplo, es decir, de lo anterior se deduce que

$$m\ddot{q} = -\mu \operatorname{Signo}(\dot{q}). \tag{3.15}$$

Finalmente, de las ecuaciones de los vínculos planteados, obtenemos lo mismo que en (3.4), esto es,

$$\begin{cases} \dot{T} = \frac{\mu \mid \dot{q} \mid}{\nu} \\ \dot{S} = \frac{\nu T}{T}. \end{cases}$$

Observación. Esta última ecuación nos está diciendo que el proceso es irreversible, según lo visto en el capítulo 2. Es decir, en un sistema aislado como se encuentra éste, es necesario que la variación de la entropía sea nula para que sea reversible, y el comportamiento de las soluciones nos dicen que si hay un movimiento entonces hay un incremento en la entropía. Por lo tanto, la única solución reversible es la que nos dicta nuestra intuición donde todos los observables se mantienen constantes y la velocidad inicial es cero.

En la construcción de este ejemplo se empleó lo expuesto en el capítulo 1 en cuanto a una formulación variacional, y fue posible plantear el sistema de la misma manera que se plantearon los sistemas semi-holónomos; no se tuvo que recurrir a un planteo con fuerzas externas, para ello fue clave relacionar las fuerzas de vínculo con la energía interna U. Hemos podido expresar de esta manera, lo que como sistema mecánico sería un sistema con fuerzas externas.

3.2.2. Descripción Lagrangiana del émbolo vertical adiabático

Para la resolución de este problema se procederá, antes de utilizar el principio variacional, reduciendo las coordenadas dependientes en la parte termodinámica, interpretando a las ecuaciones de estado como vínculos holónomos, quedando así sólo el volumen V como única variable termodinámica independiente. En la parte mecánica la configuración es lo suficientemente sencilla como para no tener que simplificar nada de antemano; existe una sola coordenada, la posición q del émbolo, que es la altura vertical que éste puede adoptar en el cilindro.

Consideremos la reducción propuesta anteriormente, es decir, tenemos sólo dos va-

riables independientes (q, V). Procediendo de manera análoga a lo hecho en el ejemplo anterior, estamos considerando el Lagrangiano mecánico $L_M(q, \dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq$ y el Lagrangiano termo-mecánico $L_{TM}(q, \dot{q}, V) = L_M(q, \dot{q}) - U(V)$, esto es,

$$L_{TM}(q, \dot{q}, V) := \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq - \alpha k V^{1-\gamma}, \qquad (3.16)$$

junto con la siguiente información:

$$\mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \{ Aq = V \} \quad (vinculo \ geométrico) \tag{3.17}$$

(en las coordenadas convenientes) y la fuerza de vínculo PA relacionada con los siguientes desplazamientos virtuales

$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \{ PA \ \delta q = P \ \delta V \}. \tag{3.18}$$

Resolvamos lo siguiente de manera análoga al ejemplo anterior, esto es,

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L_{TM}(q, \dot{q}, V) dt = 0.$$

De esto último junto con el Lagrangiano (3.16) se tiene la siguiente ecuación

$$\int_{t_1}^{t_2} [(-m\ddot{q} - mg)\delta q + kV^{-\gamma}\delta V]dt = 0, \qquad (3.19)$$

si consideramos (3.18) y lo reemplazamos en (3.19) obtenemos que

$$\int_{t_1}^{t_2} (-m\ddot{q} - mg + AkV^{-\gamma})\delta q \ dt = 0.$$

Si ahora usamos (3.17), obtenemos (3.9), como lo habíamos resuelto de manera ad-hoc. Luego, la evolución temporal es la misma que antes.

Nota. El vínculo (3.17) se podría haber reemplazado por la conservación de la energía total \mathcal{E} y seguiría valiendo la evolución temporal. Notemos que, de alguna manera, la ecuación (3.18) está relacionada con la conservación de la energía total. Observemos también que en este ejemplo se tienen muchas ecuaciones de estado y pocos grados de libertad, y por eso plantear un vínculo geométrico o uno energético resulta equivalente.

3.3. Una familia de ejemplos paradigmáticos

A continuación se presentará una familia de ejemplos termo-mecánicos muy elementales que más adelante podrán ser interpretados como subsistemas de un sistema más grande y complejo, tal como se procedió con la definición de sistemas simples para la parte termodinámica expuesta en el capítulo 2.

Los ejemplos buscan expandir los casos anteriores considerando distintas situaciones básicas, pero de gran interés, ya que permiten un acolpamiento similar al expuesto anteriormente, pero con fenómenos disipativos de distinta naturaleza. Como por ejemplo, un sistema donde exista un amortiguamiento debido a la viscosidad, o disipación energética por conducción térmica. Se presentarán siguiendo el mismo tipo de descripción expuesto hasta aquí.

3.3.1. Émbolo vertical isotérmico

Este ejemplo consiste en considerar un émbolo similar al del ejemplo anterior, pero esta vez el proceso, en vez de ser adiabático, es isotérmico, es decir, la ecuación (3.8) es reemplazada por $T = T_0$. Intuitivamente se puede apreciar que dicho sistema no puede estar aislado, es decir, como el émbolo sólo intercambia trabajo mecánico con el gas, y dicho gas se va a expandir y comprimir, es necesario acoplarlo a un sistema que controle su temperatura. Bajo estas circunstancias es razonable que los vínculos no contengan a la conservación de la energía. Más adelante veremos que esta situación describe el caso de un subsistema de un sistema más grande, en el cual sí es válido el vínculo de conservación de la energía.

Resolución ad-hoc:

Consideremos ahora el caso análogo al anterior donde valen (3.5), (3.6), (3.7) y $\dot{T} = 0$. Nuestra ecuación de Newton ahora es $m\ddot{q} = -mg + PA$ donde $P = \frac{NRT_0}{Aq}$ pues Aq = V. En concreto, la ecuación de Newton del nuevo problema es

$$m\ddot{q} = -mg + \frac{NRT_0}{q} \tag{3.20}$$

procediendo de manera análoga al ejemplo anterior, es decir integrando por cuadratura, se llega a calcular la solución

$$q(t) = \left(\int_{1}^{q(t)} \frac{1}{\sqrt{c_1 + 2(-g\tilde{q} + \frac{NRT_0}{m}ln(\tilde{q}))}} d\tilde{q}\right)^2 = (t + c_2)^2, \quad (3.21)$$

donde c_1 y c_2 son constantes de integración. Luego, la solución de la ecuación (3.20) junto con las ecuaciones anteriores determinan la evolución temporal de todos los obser-

vables. La solución completa del sistema es la siguiente:

$$q(t) = (3.21)$$

$$V(t) = Aq(t)$$

$$S(t) = S_0 + NRln(\frac{q(t)}{q_0})$$

$$P(t) = \frac{NRT_0}{Aq(t)}$$

$$T(t) = T_0$$
(3.22)

Cabe agregar que la entropía en este proceso está dada por $S = S_0 + NRln(\frac{V}{V_0})$, lo cual nos será útil más adelante para reducir el problema en la presentación Lagrangeana.

Análisis cualitativo del sistema dinámico

Las soluciones de este sistema también son oscilaciones periódicas en torno a un punto $(q^*, p^*) = (\frac{NRT_0}{mg}, 0)$ de equilibrio inestable, como veremos a continuación. El análisis dinámico se realiza a partir del campo Hamiltoniano^{IV} que se deprende del Hamiltoniano $H_{TM} = H_M + U = \frac{p^2}{2m} + mgq + \frac{NRT_0}{q}$ cuyo campo es el siguiente:

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -mg + NRT_0 q^{-1} \end{cases}$$
(3.23)

 (q^*, p^*) es un centro, pues analizando la estabilidad local del sistema en un entorno del único punto de equilibrio, tenemos que

$$S(q,p) = \begin{pmatrix} \partial_q \dot{q} & \partial_p \dot{q} \\ \partial_q \dot{p} & \partial_p \dot{p} \end{pmatrix} \Rightarrow S\left(\frac{NRT_0}{mg}, 0\right) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ \frac{-NRT_0}{q^{*2}} & 0 \end{pmatrix},$$

de esta última expresión es evidente que la traza de S es nula y su determinante positivo. Además en las proximidades de dicho centro las soluciones son órbitas cerradas.

Como se puede apreciar haciendo un análisis similar al ejemplo anterior, considerando las figuras (3.6) y (3.7), obtenemos gráficamente lo siguiente para el caso particular donde m = 1, g = 1 y $NRT_0 = 1$, es decir, estamos considerando que $H_0 = \frac{p^2}{2} + q + q^{-1}$,

Al igual que en el ejemplo anterior, existe un punto de equilibrio que es un centro, y las condiciones iniciales correspondientes a niveles de energía cercanos a dicho equilibrio, dan como resultado órbitas cerradas.

^{IV}No hemos introducido aún la definición de Hamiltoniano H o campo Hamiltoniano X_H , en esta instancia es conveniente pensar que $H : \mathbb{R}^{6n} \to \mathbb{R}$ es una función de las variables independiente $(q, p) \in \mathbb{R}^{6n}$ proveniente de un cambio de coordenadas de las variable $q \neq \dot{q}$. El campo Hamiltoniano X_H verifica, en estas coordenada, que $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \neq \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$. Más adelante, en el próximo capítulo 4.2, se dará una definición geométrica de esto.



Figura 3.6: Gráfica de H_0

Observación. Del campo expuesto en (3.23) se puede observar que en este ejemplo, a diferencia del ejemplo adiabático anterior, la constante α relacionada con la naturaleza particular del gas ideal, no es relevante en el movimiento del émbolo. En otras palabras, el movimiento es el mismo para todos los gases ideales si el proceso es isotérmico.

Nota. Desde un punto de vista cualitativo, entre este sistema y el sistema adiabático anterior no hay una diferencia notoria. Sin embargo, desde lo conceptual, son procesos bien diferenciados.

Descripción Lagrangiana

La reducción en este caso, consistirá en no considerar la entropía ni la temperatura, es decir, utilizando las ecuaciones de estado del gas ideal, tendremos como coordenadas independientes a (q, V, P) en vez de tener a (q, V, S, P, T). El Lagrangiano termo-mecánico que consideraremos es

$$L_{TM} = L_M - U$$

con $L_M = \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq$, procediendo así de manera análoga a lo ya planteado en este capítulo.

El Lagrangiano asociado a este ejemplo es:

$$L_{TM}(q, \dot{q}, V, P) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq - \alpha PV$$
(3.24)

La siguiente información nos será útil en la resolución variacional,

Vínculos:
$$C_{\mathcal{K}} := \{Aq = V \ y \ PV = c \ \text{constante}\}$$

Desplazamientos virtuales:
$$C_{\mathcal{V}} := \left\{ A \delta q = \delta V \ y \ \frac{\delta P}{P} = \frac{-\alpha - 1}{\alpha} \frac{\delta q}{q} \right\}.$$

Observación. La última igualdad muestra la fuerza de vínculo asociada al proceso isotérmico.

Aplicando el principio variacional a el Lagrangeano (4.6) se tiene la siguiente ecuación

$$\int_{t_1}^{t_2} [(-m\ddot{q} - mg)\delta q - \alpha (P\delta V + V\delta P)]dt = 0.$$
(3.25)

Si consideramos las fuerzas de vínculo de más arriba y las utilizamos en (3.25) tenemos

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[-m\ddot{q} - mg - \alpha PA - V(-\alpha - 1)\frac{P}{q} \right] \delta q \ dt = 0$$

y junto con los vínculos obtenemos como solución el sistema (3.22), como lo habíamos hecho de manera ad-hoc.

Se puede observar que la evolución temporal de la entropía es la siguiente

$$\dot{S} = \frac{NR\dot{V}}{V}$$

Observación. En este caso la entropía decrece y aumenta junto con el volumen, esto nos dice que el sistema no puede estar aislado. Para que esta órbita exista tiene que haber otro sistema que colabore, cumpliéndose así la segunda ley de la termodinámica en el sistema más grande.

Descripción Lagrangiana utilizando potencial alternativo

En las descripciones anteriores se utilizó, en la expresión del Lagrangeano, la energía interna U del sistema termodinámico. Como forma alternativa, a continuación emplearemos el potencial de Helmholtz^v \mathcal{A} y procederemos de una forma similar a lo ya visto en su descripción.

Notemos que para resolver este problema, en lo anterior tuvimos que proponer una fuerza de vínculo para nada obvia en las variables termodinámicas. Esto no ocurre si se plantea otro potencial, en este caso el potencial de Helmholtz $\mathcal{A} = U - TS$ en lugar de U. Esta vez consideraremos el espacio de configuración sin ninguna reducción previa, esto significa que representaremos al sistema con la 5-upla (q, V, S, P, T), y el nuevo Lagrangeano^{VI} es el siguiente,

$$L_{TM}(q, \dot{q}, S, T) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq - (\alpha NRT - TS)$$

^vPara más información sobre este potencial referirse al apéndice D.

^{VI}Como se enunció anteriormente estamos llamando Lagrangeano a una función que consiste en $\mathcal{K} - \mathcal{V} - \Phi$ donde \mathcal{K} es el potencial cinético mecánico, \mathcal{V} la energía potencial mecánica y Φ un potencial termodinámico.

Observación. Por más que $L \neq \mathcal{K} - \mathcal{V} - U$ seguiremos utilizando la misma notación.

Vínculos:

$$\mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \left\{ Aq = V, \dot{T} = 0, \ PV = c \text{ (constante)}, \ y \ S = S_0 + NRln\left(\frac{V}{V_0}\right) \right\}.$$

Desplazamientos virtuales:

$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \left\{ A\delta q = \delta V, \delta T = 0, \delta P V + P \delta V = 0 \text{ y } \delta S = \frac{NR\delta V}{V} \right\}.$$

Resolvamos ahora lo siguiente:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L_{TM}(q, \dot{q}, S, T) dt = 0.$$

Procediendo de manera análoga a lo anterior tenemos que

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[(-m\ddot{q} - mg)\delta q + (\alpha NR + S)\delta T + T\delta S \right] dt = 0,$$

y utilizando los desplazamientos virtuales obtenemos la siguiente ecuación

$$m\ddot{q} = -mg + rac{NRT_0A}{V}$$
 (Ecuación de Newton)

correspondiente a la ecuación esperada.

Observación. En este sistema es fácil observar que la cantidad $H_0 + \mathcal{A}$ se conserva, donde H_0 es la suma $\mathcal{K} + \mathcal{V}$ expresado en las coordenadas (q, \dot{q}) .

3.3.2. Émbolo vertical moviéndose con velocidad constante

Este ejemplo, similar a los dos anteriores, consiste en un émbolo que encierra a un gas ideal de volumen V, y el proceso que estamos considerando es tal que el movimiento del émbolo resulta constante en el sistema de coordenadas inercial fijo al laboratorio. Para ello, basta considerar que el sistema se encuentra acoplado a un sistema termodinámico que permite controlar la temperatura del gas, de forma tal que su presión se mantiene constante y además anula la aceleración del émbolo.

Resolución ad-hoc

La ecuación de Newton en este ejemplo es muy simple $m\ddot{q} = 0$, y la ecuación de movimiento del émbolo es

$$q(t) = q_0 + v_0 t,$$
igual que en los casos anteriores se tiene que vale V = Aq. De las ecuaciones de estado (3.5), (3.6), (3.7) sumado al hecho de que las fuerzas satisfacen que mg = PA, más lo anterior, se puede inferir cuál es el proceso termodinámico dependiendo del tiempo. Esto es:

$$\begin{cases} V(t) = A(q_0 + v_0 t) \\ S(t) = S_0 + NRln\left(\frac{(mg)^{\alpha}(q_0 + v_0 t)^{1+\alpha}}{q_0(T_0 NR)^{\alpha}}\right) \\ P(t) = \frac{mg}{A} \text{ (constante)} \\ T(t) = \frac{mg(q_0 + v_0 t)}{NR} \end{cases}$$
(3.26)

Descripción Lagrangiana

El Lagrangiano mecánico es el mismo que en los ejemplos anteriores, y el Lagrangiano termo-mecánico que consideraremos es el siguiente,

$$L_{TM}(q, \dot{q}, V) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq - \alpha NRT$$

completando la descripción del sistema en este lenguaje tenemos los siguientes vínculos y desplazamientos virtuales,

Vínculos:

$$\mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \{ m\ddot{q}\dot{q} + mg\dot{q} - P\dot{V} = 0, \ PV = NRT, \dot{P} = 0 \ y \ S = S_0 + \alpha NRln\left(\frac{T}{T_0}\right) + NRln\left(\frac{V}{V_0}\right) \}$$

Desplazamientos virtuales:

$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \left\{ PA\delta q = \alpha NR\delta T, \ \delta PV + P\delta V = NR\delta T, \ \delta S = \frac{\alpha NR\delta T}{T} + \frac{NR\delta V}{V} \right\}.$$

Resolvamos lo siguiente:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L_{TM}(q, \dot{q}, T) dt = 0$$

esto nos da

$$\int_{t_1}^{t_2} [(-m\ddot{q} - mg)\delta q + \alpha NR\delta T]dt = 0$$

Si consideramos los desplazamientos virtuales de más arriba y lo reemplazamos en lo anterior obtenemos

$$\int_{t_1}^{t_2} [(-m\ddot{q} - mg + PA)\delta q \ dt = 0.$$
(3.27)

Si ahora usamos los vínculos obtenemos

$$m\dot{q}\ddot{q} + mg\dot{q} - PV = 0$$

y junto con (3.27) llegamos a que

$$A\dot{q} = V.$$

Con todas las ecuaciones de estado tenemos el siguiente campo en el resto de las variables termodinámicas

$$\begin{cases} \dot{T} = \frac{P_0}{NR} \dot{V} \\ \dot{S} = \left(\frac{\alpha P_0}{T} + \frac{NR}{V}\right) \dot{V} \end{cases}$$

Notemos aquí que la variación de la entropía puede ser positiva o negativa y eso depende de \dot{V} que no tiene ninguna restricción.

Observación. En este ejemplo se está suponiendo que el sistema no está aislado, lo cual hace posible que ocurra como evento físico, tanto en el caso cuando $dS \ge 0$ como cuando dS < 0. El calentamiento y enfriamiento que sufre el sistema para mantener la presión constante es lo que permite al émbolo disminuir eventualmente su entropía.

3.3.3. Émbolo horizontal adiabático con viscosidad

En este ejemplo, a diferencia de los ejemplos anteriores, el cilindro se encuentra horizontal y en los vínculos mecánicos estamos considerando que hay viscosidad en el movimiento del émbolo. En la configuración termodinámica estamos considerando que el gas ideal sufre un proceso adiabático, es decir, las ecuaciones de estado en el espacio de fase termodinámico son (3.5), (3.6), (3.7) y (3.8); expuestas anteriormente en el ejemplo del émbolo vertical adiabático.

Resolución ad-hoc cualitativa

El sistema mecánico en cuestión presenta la siguiente ecuación de Newton:

$$m\ddot{q} = -\nu\dot{q} + \underbrace{\frac{kq^{-\gamma}}{A^{\gamma-1}}}_{PA}$$

esto se deduce del hecho de que las fuerzas del sistema son la fuerza de viscosidad $f_v = -\nu \dot{q}$, que depende de la velocidad del movimiento, y la fuerza PA que ejerce el gas sobre el émbolo. En este caso la ecuación a resolver es más compleja que en los ejemplos anteriores, por lo tanto para entender el fenómeno representado se recurrió a una interpretación

$$\ddot{q} = -\nu\dot{q} + \frac{1}{q^{5/3}}$$

donde $\gamma = 5/3$, m = 1, k = 1 = A y al coeficiente de fricción viscosa ν lo consideraremos un parámetro.

Antes de ver las tablas con la información numérica, miremos por un instante el campo Hamiltoniano del sistema dinámico, esto es,

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\nu}{m} p + B q^{-\gamma} \qquad \text{donde } B &= \frac{k}{A^{\gamma - 1}} \end{aligned}$$

El estudio de su estabilidad lineal nos lleva al análisis de la siguiente matriz,

$$S(q) = \left(\begin{array}{cc} 0 & \frac{1}{m} \\ -\gamma B q^{-\gamma - 1} & \frac{-\nu}{m} \end{array}\right)$$

en una primera mirada, se puede observar que sólo depende de q y que el punto de estabilidad ocurre en $q \to \infty$. La traza es siempre negativa y el determinante positivo y tiende a cero cuando q tiende a infinito. Esto está diciendo que el sistema va a experimentar una expansión y el proceso cuasi-estático que queremos describir se va a satisfacer para algún q_1 lo suficientemente grande, y de allí en más se espera que la solución encontrada sea una buena aproximación del fenómeno real.

En las tablas que se exponen a continuación se puede observar el comportamiento bajo distintas condiciones iniciales y distintos valores del parámetro de fricción viscosa.



Cuadro 3.1: Tabla donde la posición inicial es $q_0=0,5$

Las distintas tablas están ordenadas por su posición inicial q_0 y la intención es mostrar numéricamente que estos cambios en los datos, tanto de posición inicial, de velocidad inicial \dot{q}_0 y de coeficiente de fricción ν , no alteran cualitativamente el fenómeno para cierta regularidad o "quietud" del sistema.



Figura	ν	\dot{q}_0
T211	0.4	-1
T221	1.4	-1
T212	0.4	0
T222	1.4	0
T213	0.4	1
T223	1.4	1



Aunque pueden observarse comportamientos distintos en una primera instancia (para valores de t pequeños), en todos los casos el sistema tiende asintóticamente a una evolución donde la aceleración tiende a anularse. Particularmente para t > 10 se puede apreciar un mismo comportamiento y para t aún mayores el fenómeno se vuelve más *estático*, es decir, resulta razonable un acercamiento al fenómeno real por esta vía.

Descripción Lagrangiana

Consideremos el siguiente SNHG, donde se procederá de manera análoga a lo hecho en el ejemplo anterior. Estamos considerando el Lagrangiano mecánico $L_M(\dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2}$ y la siguiente terna es el SNHG del sistema termo-mecánico donde $L_{TM} = L_M - U(V)$, esto es,

$$L_{TM}(\dot{q},T) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - \alpha NRT$$

Vínculos:

 $\mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \{Aq = V, PV = NRT, \dot{S} = 0, PV^{\gamma} = k \text{ (constante) y } m\ddot{q} + \alpha NR\dot{T} = -\nu\dot{q}\}$

Desplazamientos virtuales:

$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \{ A \delta q = \delta V, \ \delta P V + P \delta V = N R \delta T, \ -\nu \dot{q} \delta q = 0 \ \delta P V^{\gamma} + \gamma P V^{\gamma - 1} \delta V = 0, \\ \delta S = 0 \}$$

Observación. La última ecuación de la linea anterior nos permitirá introducir multiplicadores de Lagrange en la resolución del principio variacional, de una forma similar a lo expuesto en 1.6, y de esta manera podremos encontrar las ecuaciones de movimiento sin utilizar fuerzas externas. La intención de esta resolución es mostrar un camino alternativo aunque luego sigamos una linea más definida.

Resolvamos lo siguiente

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L_{TM}(q, \dot{q}, T) dt = 0$$

procediendo de forma similar a lo hecho más arriba obtenemos

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[-m\ddot{q}\delta q - \alpha NR\delta T\right]dt = 0$$

y teniendo en cuenta los desplazamientos virtuales obtenemos lo siguiente

$$\delta P V^{\gamma} = -\gamma P V^{\gamma-1} \delta V \Rightarrow \delta P V = -\gamma P \delta V$$
$$NR\delta T = \delta P V + P \delta V = (1 - \gamma) P \delta V$$
$$\alpha NR\delta T = -P \delta V$$
$$-m\ddot{q}\delta q - \alpha NR\delta T = (-m\ddot{q} + PA)\delta q$$
$$m\ddot{q} = -\lambda \nu \dot{q} + PA$$

Finalmente, sumando a las ecuaciones expuestas los vínculos de más arriba, se deduce que $\lambda = 1$ y llegamos a que vale lo siguiente

$$m\ddot{q} = -\nu\dot{q} + rac{1}{q^{\gamma}}$$
 (Ecuación de Newton)

por lo tanto el sistema descripto es el mismo que el de más arriba.

3.3.4. Émbolo vertical con disipación térmica por conducción

En este ejemplo consideraremos el esquema donde, como en los ejemplos anteriores, las paredes interiores del cilindro son adiabáticas, pero el contacto del gas ideal con el émbolo permite una disipación del calor por conducción. Se considerará que la temperatura en dicha frontera del gas es la misma temperatura del gas para todo instante, es decir, consideraremos que la temperatura satisface la siguiente ecuación $\dot{T} = -\kappa(T - T_S)$ donde κ es la constante de difusión que dependerá de qué materiales esté hecho el émbolo y de características del gas ideal que no consideraremos relevantes. También consideraremos que la conductividad térmica de dicho émbolo es muy alta y que, además, esté conectado a un sumidero calórico que absorbe todo el calor que se transmite desde el gas, manteniéndose (el sumidero) siempre a la misma temperatura constante T_S .

Resolución ad-hoc cualitativa:

La ecuación de Newton de este ejemplo es la misma que se vió en ejemplos anteriores

$$m\ddot{q} = -mg + PA,$$

De la ecuación de la transmisión del calor se tiene como solución que $T(t) = T_0 e^{-kt} + T_S$, esta solución junto al vínculo geométrico Aq = V y las ecuaciones de estado del gas ideal nos dan una cantidad suficiente de datos para resolver el sistema, resta resolver la siguiente ecuación de Newton

$$m\ddot{q} = -mg + \frac{NR(T_0e^{-kt} + T_S)}{q}$$

Las soluciones de esta ecuación las podemos visualizar integrando numéricamente el campo Hamiltoniano asociado a dicha ecuación de Newton

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -mg + \frac{NR(T_0e^{-kt} + T_S)}{q} \end{cases}$$

como se muestra en las siguientes figuras. Los valores que se tomaron son T_0 , T_S , m, g, N, R iguales a 1 y k = 1.



Figura 3.8: Espacio de fase del émbolo con disipación térmica

Figura 3.9: Émbolo con disipación térmica

En la figura 3.8 se puede apreciar un comportamiento oscilatorio en el espacio de fase mecánico (q, p), dicha gráfica no contempla lo que ocurre con la temperatura. Por otra parte, en la figura 3.9, podemos observar que la curva monótona decreciente representa el decaimiento en la temperatura en función del tiempo y la otra curva representa las oscilaciones de la posición en función del tiempo que se mostraron en la figura anterior.

Descripción Lagrangiana

En la resolución de este ejemplo consideraremos coordenadas (q, \dot{q}, V, S, P, T) y el Lagrangiano mecánico es $L_M = \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq$. El planteo es el siguiente:

$$L_{TM}(q, \dot{q}, T) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq - \alpha NRT$$

Vínculos:

$$\mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \left\{ Aq = V, \ PV = NRT, \ \dot{T} = -k(T - T_S), S = S_0 + \alpha NRln\left(\frac{T}{T_0}\right) + NRln\left(\frac{V}{V_0}\right) \right\}.$$

Desplazamientos virtuales:

$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \left\{ A\delta q = \delta V, \ V\delta P + P\delta V = NR\delta T, \ \frac{\delta P}{P} = \frac{-\alpha - 1}{\alpha} \frac{\delta q}{q}, \ \delta S = \frac{\alpha NR\delta T}{T} + \frac{NR\delta V}{V} \right\}.$$

Resolvamos lo siguiente:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L_{TM}(q, \dot{q}, T) dt = 0,$$

esto nos da

$$\int_{t_1}^{t_2} [(-m\ddot{q} - mg)\delta q + \alpha NR\delta T]dt = 0$$

Si consideramos los desplazamientos virtuales de más arriba y los reemplazamos en la última expresión obtenemos

$$\int_{t_1}^{t_2} [(-m\ddot{q} - mg + PA)\delta q \ dt = 0,$$

esto es,

$$m\ddot{q} = -mg + PA.$$

Luego, con los vínculos del problema obtenemos las mismas evoluciones temporales de los observables que ya mostramos en la solución ad-hoc.

3.3.5. Embolo vertical disipativo con fricción

Este ejemplo consiste de un sistema similar al anterior, sólo que además de considerar una disipación de la energía interna del gas por conducción, el gas también incrementa su temperatura por la fricción que existe al deslizar el émbolo. Es decir, estamos considerando una combinación de ejemplos anteriores, a saber, el ejemplo del émbolo con disipación térmica por conducción y el ejemplo del carrito.

La intención de este ejemplo es exhibir un sistema compuesto con cierta complejidad, que a su vez, motiva las construcciones en los próximos capítulos. En este capítulo sólo mostraremos su resolución ad-hoc.

Como planteo de este fenómeno se utilizarán las expresiones que se mostraron en ejemplos anteriores, por ejemplo, se modelará la fricción seca con las ecuaciones del ejemplo del carrito. Llamaremos T_f a la temperatura generada por la fricción del émbolo, y T a la temperatura del gas ideal. Los observables que consideraremos forman nuestro sistema compuesto son: el volumen, la entropía, la energía interna, la temperatura y la presión del gas ideal, junto con la posición y la temperatura del émbolo. Notemos que esta descripción inicial está simplificada, pues el émbolo con fricción se comporta como el anterior, y entonces el sistema termodinámico se ve reducido en observables.

Para una descripción más detallada, es necesario mencionar que por más que nos concierne la descripción termodinámica del gas, no hay que despreciar lo que ocurre en el émbolo. Estamos suponiendo que la fricción ocurre en las paredes laterales del émbolo y que dicho fenómeno es cuasi-adiabático, con esto queremos decir que consideraremos que la energía que se transmite por conducción es despreciable, esto se puede argumentar pensando que la superficie (o pared) en contacto con el gas es mucho menos densa que el volumen "interior" (que no se encuentran en contacto con el gas) del émbolo. El émbolo es tal, que las paredes laterales absorben calor más velozmente que lo que tarda en escaparse por la pared en contacto con el gas, y por ello supondremos que la cantidad $H_M + U_f$ se conserva, donde H_M es el Hamiltoniano mecánico del émbolo y U_f es la energía interna de fricción que verifica que $dU_f = T_f dS_f$.

Resolución ad-hoc

Para resolver este problema, dada la cantidad de ecuaciones de estado, podemos reducir el problema a resolver el siguiente sistema de EDOs acopladas.

La ecuación de Newton del émbolo

$$m\ddot{q} = -mg + PA - \mu Signo(\dot{q}), \text{ donde } P = \frac{NRT}{Aq},$$
(3.28)

y la ecuación de transmisión de la temperatura

$$\dot{T} = -kT + kT_f \text{ donde } \dot{T}_f = \frac{\mu |\dot{q}|}{\nu}.^{\text{VII}}$$
(3.29)

- - - -

Como solución a este sistema obtendremos la evolución temporal del observable q y del observable T. Esto último, junto al vínculo geométrico V = Aq nos permite obtener la evolución temporal del volumen y de la presión (gracias a (3.5)). Finalmente, la evolución temporal de la entropía del gas se obtiene de (3.6) junto con las evoluciones temporales anteriores, es decir, resolviendo el sistema planteado por (3.28) y (3.29) podemos despejar la evolución temporal del sistema completo.

En el siguiente gráfico puede observarse una solución numérica del sistema para los valores mq = 1, k = 1, $\mu = 0.2$ y $\nu = 2/5$ que dan el siguiente sistema,

$$\ddot{q}[t] = -1 + T(t)/q(t) - (0,2)$$
 Signo $(\dot{q}(t))$ $q(0) = 1, \ \dot{q}(0) = 1,$
 $T'(t) = -T(t) + (0,5) | q(t) |$ $T(0) = 10.$



Figura 3.10: Evolución temporal de la temperatura del gas y la posición del émbolo

VII Ver 3.4.

3.4. Comentarios

Para finalizar este capítulo son propicios algunos comentarios. A lo largo de estas secciones se vieron distintos ejemplos resueltos de diversas maneras, a modo de introducción para lo que continua. Se mantuvo una mirada amplia con respecto a la formulación variacional, de donde surge el interrogante de cómo podría plantearse un formalismo que siga cierta metodología y sea análogo a los planteos variacionales que existen en otras ramas de la física.

Capítulo 4

Geometría simpléctica y sistemas mecánicos

En este capítulo se pueden identificar tres partes unidas por un hilo conductor. La primera es una introducción a la geometría simpléctica, donde se presentan definiciones y resultados básicos de la teoría, que se encuentran mayormente en el libro de Abraham-Marsden [1], seguido por una reformulación de los ejemplos ya vistos en un lenguaje geométrico como lo son los GNHS. La segunda parte es una introducción a la construcción de Tulczyjew de los sistemas mecánicos proveniente principalmente de [32], [31] y [33]. Allí se llega a una identificación en términos de subvariedades Lagrangianas de los sistemas dinámicos, y esta geometrización permite, en una tercera parte, unificar el formalismo de Tulczyjew con el de los SNHG; enriqueciendo a ambos. Dicha tercera y última parte es original de esta tesis, junto con un planteo geométrico de los ejemplos.

Las primeras secciones presentan definiciones y resultados medulares de la geometría simpléctica. No se incluyen las demostraciones de los mismos para no alargar innecesariamente el contenido. La intención es que el lector pueda contextualizar rápidamente los objetivos e ideas que se presentan al final del capítulo.

Desde aquí en adelante, se asumirá también que el lector se encuentra familiarizado con los contenidos de geometría diferencial, tales como los que se exponen en [5], [19], [2] y [21], sobre variedades diferenciales, cartas locales, difeomorfismos, etc.

4.1. Geometría simpléctica

Una forma de presentar la geometría simpléctica es pensar en variedades simplécticas, y no en estructuras simplécticas. Más adelante cuando hablemos de geometría de contacto, optaremos por darle un enfoque "más geométrico", introduciendo en primera instancia una estructura de contacto.

Definición 4.1.1. Sea M una variedad y ω una 2-forma no degenerada en M. Entonces

se define el mapeo

$$\flat: \mathfrak{X}(M) \to \mathfrak{X}^*(M)$$
$${}_{X \longmapsto X^{\flat} = i_X \omega}$$

y el mapeo

$$\sharp: \mathfrak{X}^*(M) \to \mathfrak{X}(M)$$
$${}^{\alpha \longmapsto \alpha^{\sharp} = \omega^{\sharp}(\alpha)}$$

Observación. En el caso finito dimensional M tiene que tener dimensión par 2n para que la 2-forma ω sea no degenerada.

El siguiente teorema es clave para una identificación local amena de estos objetos.

Teorema 4.1.1. (Darboux) Sea ω una 2-forma no degenerada en una variedad de dimensión 2n. Entonces $d\omega = 0$ si y sólo si existe una carta (U, φ) en cada $m \in M$ tal que $\varphi(m) = 0, y \operatorname{con} \varphi(u) = (x_1(u), ..., x_n(u); y_1(u), ..., y_n(u))$ tenemos que

$$\omega \rfloor_U = \sum_1^n dx_i \wedge dy_i$$

Definición 4.1.2. Una forma simpléctica (o estructura simpléctica) en M es una 2-forma no-degenerada cerrada en M.

Definición 4.1.3. Una variedad simpléctica (M, ω) es una variedad M junto con una forma simpléctica ω .

Observación. Llamaremos cartas simplécticas (o cartas de Darboux) a las que garantiza el teorema de Darboux, y coordenadas canónicas a las funciones $x_i y_i$.

Ejemplo 4.1.1. (\mathbb{R}^{2n} , $dx_i \wedge dy_i$) es una una variedad simpléctica y las coordenadas cartesianas son, a la vez, coordenadas canónicas.

Definición 4.1.4. Sean (M, ω) y (N, ω') variedades simplécticas. Un mapeo $C^{\infty} f$: $M \to N$ se dice simpléctico (o transformación canónica) si $f^*\omega' = \omega$.

Proposición 4.1.2. Si (M, ω) son (N, ω') variedades simplécticas y f es simpléctico, entonces $f : M \to N$ preserva el volumen y f es un difeomorfismo local.

Proposición 4.1.3. Supongamos que (M, ω) son (N, ω') variedades simplécticas y f es de clase C^{∞} , $y \operatorname{sean} \varphi : M \to \overline{M} y \psi : N \to \overline{N}$ difeomorfismos. Entonces f es simpléctico si y sólo si $\psi \circ f \circ \varphi^{-1}$ es un mapeo simpléctico de $(\overline{M}, \varphi_* \omega)$ a $(\overline{N}, \psi_* \omega')$. En particular, f es simpléctico si y sólo si los representantes locales de f son simplécticos.

Proposición 4.1.4. Sean (M, ω) son (N, ω') variedades simplécticas de dimensión 2n y $f: M \to N$ un mapeo simpléctico. Entonces para todo $m \in M$ existen cartas simplécticas (U, φ) en m y (V, ψ) en f(m) tales que f(U) = V, $\varphi(U) = \psi(V)$, y el representante local $f_{\varphi\psi}$ de f es la identidad.

En muchos problemas mecánicos, la variedad simpléctica básica es el espacio de fase del espacio de configuración. De hecho, si el espacio de configuración es la variedad Q, el espacio de fase es el fibrado cotangente T^*Q , el cual tiene una forma simpléctica estándar como se mostrará a continuación.

Teorema 4.1.5. ¹ Sea Q una variedad de dimensión $n \ y \ M = T^*Q$. Consideremos $\pi_Q : M \to Q \ y \ T\pi_Q : TM \to TQ$. Sea $\alpha_q \in M$, con $q \in Q$, un punto de $M \ y \ w_{\alpha_q}$ un punto de TM en la fibra sobre α_q . Definimos

$$\theta_{\alpha_q}: T_{\alpha_q}M \to \mathbb{R}: w_{\alpha_q} \to \alpha_q \circ T\pi_Q(w_{\alpha_q}) \qquad y \qquad \theta_0: \alpha_q \to \theta_{\alpha_q}$$

Entonces $\theta_0 \in \mathfrak{X}^*(M)$, $y \,\omega_0 = -d\theta_0$ es una forma simpléctica en M; $\theta_0 \, y \,\omega_0$ se llaman formas canónicas en M.

Observación. En coordenadas locales canónicas, donde $(x_1, ..., x_n)$ son coordenadas de Qy $(x_1, ..., x_n, y_1, ..., y_n)$ de T^*Q , obtenemos la siguiente expresión para θ_0

$$\theta_0 = \sum_{i=1}^n y_i dx_i.$$

Proposición 4.1.6. La 1-forma canónica θ_0 en T^*Q es la única 1-forma que verifica que para toda 1-forma β en Q que

$$\beta^*\theta_0 = \beta$$

Corolario. $\beta^* \omega_0 = -d\beta$.

Teorema 4.1.7. Sea Q una variedad $y f : Q \to Q$ un difeomorfismo; definimos el levantamiento de f como

$$T^*f: T^*Q \to T^*Q; \quad T^*f(\alpha_q)v = \alpha_q(Tf \cdot v)$$

donde $q \in Q$ y $v \in T_{f^{-1}(q)}Q$. Entonces T^*f es simpléctico, en efecto $(T^*Q)^*\theta_0 = \theta_0$, donde θ_0 es la 1-forma canónica.

Observación. Notemos que el levantamiento de difeomorfismos satisface el siguiente diagrama conmutativo

$$\begin{array}{c} T^*Q \xrightarrow{T^*f} T^*Q \\ \pi_Q \bigvee & & & & \\ q \xleftarrow{f} & Q \end{array}$$

¹La definición de la 1-forma canónica se puede escribir de la siguiente forma alternativa:

$$\langle \theta(\alpha_q), w_{\alpha_q} \rangle = \langle T \pi_Q(w_{\alpha_q}), \alpha_q \rangle$$

donde \langle , \rangle denota la contracción natural entre vector y covector.

esto es, $f^{-1} \circ \pi_Q = \pi_Q \circ T^* f$.

4.2. Campos Hamiltonianos

Definición 4.2.1. Sea (M, ω) una variedad simpléctica y $H : M \to \mathbb{R}$ una función C^r dada. El campo vectorial determinado por

$$i_{X_H}\omega = dH_{E}$$

se llama **campo vectorial hamiltoniano**, y *H* es su Hamiltoniano asociado o **función** energía.

Observación. La condición de no degeneración de ω garantiza la existencia de X_H . Claramente, en una variedad simpléctica conexa dos Hamiltonianos difieren en una constante.

Proposición 4.2.1. En coordenadas canónicas (x_i, y_i) donde $\omega = \sum_{i=1}^n dx_i \wedge dy_i$, vale la siguiente expresión

$$X_H = \left(\frac{\partial H}{\partial y_i}, -\frac{\partial H}{\partial x_i}\right)$$

Luego $(x_i(t), y_i(t))$ es una curva integral de X_H si y sólo si

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial y_i}$$
 $\dot{y}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$

Proposición 4.2.2. Sea (M, ω, H) un sistema Hamiltoniano y sea c(t) una curva integral de X_H . Entonces H(c(t)) es constante en t.

Proposición 4.2.3. Sea (M, ω, H) un sistema Hamiltoniano, y F_t el flujo de X_H . Entonces para todo t, $F_t^*\omega = \omega$, es decir, F_t es simpléctico. Por lo tanto F_t también preserva el volumen del espacio de fase Ω_{ω} (Teorema de Liouville).

Definición 4.2.2. Un campo vectorial X en una variedad simpléctica (M, ω) se dice localmente Hamiltoniano si para cada $m \in M$ existe un entorno U de m tal que Xrestringido a U es Hamiltoniano.

Proposición 4.2.4. 1. X es localmente Hamiltoniano si y sólo si $i_X \omega$ es cerrado.

- 2. X es localmente Hamiltoniano si y sólo si $L_X \omega = 0$ si y sólo si su flujo consiste de mapeos simplécticos.
- X es localmente Hamiltoniano si y sólo si en un cubrimiento por cartas simplécticas, DX es anti-simétrico con respecto a ω; esto es,

$$\omega(DX(m) \cdot e, f) = -\omega(e, DX(m) \cdot f)$$

4.3. Corchetes de Poisson

En mecánica, una de las operaciones más importantes por la estructura simpléctica del espacio de fase es el corchete de Poisson. En primera instancia definiremos el corchete de Poisson para 1-formas, y luego para funciones.

Definición 4.3.1. Sea (M, ω) una variedad simpléctica y $\alpha, \beta \in \mathfrak{X}^*(M)$. El corchete de Poisson de α y β es la 1-forma $\{\alpha, \beta\} = -[\alpha^{\sharp}, \beta^{\sharp}]^{\flat}$.

Observación. Como $(\mathfrak{X}(M), +, [,])$ es un álgebra de Lie y \flat es lineal, entonces $\mathfrak{X}^*(M)$ como espacio vectorial real junto con $\{,\}$ es un álgebra de Lie.

Proposición 4.3.1. Sea (M, ω) una variedad simpléctica $y \ \alpha, \beta \in \mathfrak{X}^*(M)$. Entonces $\{\alpha, \beta\} = -L_{\alpha^{\sharp}}\beta + L_{\beta^{\sharp}}\alpha + d(i_{\alpha^{\sharp}}i_{\beta^{\sharp}}\omega).$

Corolario. Si $\alpha, \beta \in \mathfrak{X}^*(M)$ son cerradas, entonces $\{\alpha, \beta\}$ es exacta.

Definición 4.3.2. Sea (M, ω) una variedad simpléctica y $f, g \in \mathfrak{F}(M)$, con $X_f = (df)^{\sharp}$. El corchete de Poisson de f y g es la función

$$\{f,g\} = -i_{X_f}i_{X_g}\omega(=\omega(X_f,X_g))$$

Proposición 4.3.2. Sea (M, ω) una variedad simpléctica $y \ f, g \in \mathfrak{F}(M)$. Valen los siguientes resultados:

- 1. $\{f, g\} = -L_{X_f}g = L_{X_g}f$
- 2. El mapeo $g \mapsto \{f_0, g\}$ es una derivación, para un $f_0 \in \mathfrak{F}(M)$.
- 3. f es constante en la órbitas de X_g si y sólo si $\{f, g\} = 0$ si y sólo si g es constante en las órbitas de X_f .

Observación. La identidad $\{H, H\} = 0$ corresponde a la conservación de la energía.

Corolario. En coordenadas canónicas se tiene la siguiente expresión

$$\{f,g\} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial y_i} - \frac{\partial f}{\partial y_i} \frac{\partial g}{\partial x_i} \right)$$

 $(\{x_i, x_j\} = 0, \{y_i, y_j\} = 0, \{x_i, y_j\} = \delta_{ij}).$

Corolario (Ecuaciones de movimiento en la notación de corchetes de Poisson). Sea X_H un campo vectorial en una variedad simpléctica (M, ω) con Hamiltoniano $H \in \mathfrak{F}(M)$ y flujo F_t . Entonces para $f \in \mathfrak{F}(M)$ vale que

$$\frac{\partial}{\partial t}(f \circ F_t) = \{f \circ F_t, H\}$$

El corchete de Poisson de funciones se relaciona con el corchete de 1-formas de la siguiente forma.

Proposición 4.3.3. Sea (M, ω) una variedad simpléctica $y \ f, g \in \mathfrak{F}(M)$. Entonces $d\{f, g\} = \{df, dg\}.$

Proposición 4.3.4. El espacio vectorial real $\mathfrak{F}(M)$, junto con el corchete de Poisson forman un álgebra de Lie.

Corolario. $X_{\{f,g\}} = -[X_f, X_g]$, en particular, los campos Hamiltonianos globales \mathfrak{X}_H forman un álgebra de Lie.

Proposición 4.3.5. (Jacobi) Sean (M, ω) son (N, ω') variedades simplécticas $y \ f : M \to N$ un difeomorfismo. Entonces f es simpléctico si y sólo si para todo $h \in \mathfrak{F}(N)$ vale que $f^*X_h = X_{h \circ f}$.

Los mapeos simplécticos también se ven caracterizados porque preservan los corchetes de Poisson.

Proposición 4.3.6. Sean (M, ω) y $(N, \bar{\omega})$ variedades simplécticas y $F : M \to N$ un difeomorfismo. Entonces F es simpléctico si y sólo si F preserva el corchete de funciones (respectivamente 1-formas); i.e. $\{F^*f, F^*g\} = F^*\{f, g\}$ $(\{F^*\alpha, F^*\beta\} = F^*\{\alpha, \beta\})$

Una caracterización útil de las cartas simplécticas en términos de coordenadas se enuncia a continuación.

Proposición 4.3.7. Sean (M, ω) una variedad simpléctica, $y(U, \varphi)$ una carta con $\varphi(u) = (x_1(u), ..., x_n(u), y_1(u), ..., y_n(u))$. Entonces (U, φ) es simpléctica si y sólo si $\{x_i, x_j\} = 0, \{y_i, y_j\} = 0, y\{x_i, y_j\} = \delta_{ij}$ en U.

Definición 4.3.3. Si (M, ω) es una variedad simpléctica y $X, Y \in \mathfrak{X}(M)$, el corchete de Lagrange de los campos X e Y es la función escalar

$$[X,Y] = \omega(X,Y).$$

Si (U, φ) es una carta de M, el corchete de Lagrange de φ es la matriz de funciones en U dada por

$$[u^i, u^j] = \left[rac{\partial}{\partial u^i}, rac{\partial}{\partial u^j}
ight]$$

donde $\frac{\partial}{\partial u^i}$ son la base estándar de vectores asociados a la carta (U, φ) .

Proposición 4.3.8. Sean (M, ω) una variedad simpléctica de dimensión 2n, (U, φ) una carta con $\varphi(m) = (u^1(u), ..., u^{2n})$. Entonces

1. $\omega \rfloor_U = \sum du^i \wedge du^j$

2. (U, φ) es simpléctica si y sólo si $\omega_{ij} = [u^i, u^j]$ es la matriz

$$J = \left(\begin{array}{cc} 0 & I \\ -I & 0 \end{array}\right)$$

3. Si $\omega_{\varphi} = \varphi_* \omega$ es el push-forward de $\omega \rfloor_U$ a $\overline{U} = \varphi(U)$, entonces

$$[u^i, u^j] \circ \varphi^{-1} = \omega_\varphi(e_i, e_j)$$

donde e_i es la base estándar de \mathbb{R}^{2n}

4. Si $f: M \to M$ es un difeomorfismo, $(U, \phi) y (V, \psi)$ son cartas en M, F(U) = V, donde (U, ϕ) simpléctica, y si escribimos

$$\phi(u) = (q^1, ..., q^n, p_1, ..., p_n),$$

$$\psi(v) = (Q^1, ..., Q^n, P_1, ..., P_n)$$

y

$$f^{-1}(Q^1, ..., Q^n, P_1, ..., P_n) = (q^1, ..., q^n, p_1, ..., p_n)$$

entonces

$$[Q, P] = \sum \left(\frac{\partial q^i}{\partial Q} \frac{\partial p_i}{\partial P}, \frac{\partial q^i}{\partial P} \frac{\partial p_i}{\partial Q} \right).$$

5. Supongamos que en (4), f es un difeomorfismo simpléctico y (V, ψ) una carta simpléctica. Entonces

$$[q,p] \circ f^{-1} = [Q,P]$$

Proposición 4.3.9. Sean X un campo Hamiltoniano local en una variedad simpléctica $(M, \omega), (U, \varphi)$ una carta simpléctica, y F_t el flujo local de X en U. Notamos $\overline{U}_t = F_t(U), (\varphi \circ F_{-t})(\overline{u}) = (Q_t^1, ..., P_{nt})$ y obtenemos que relativo a la carta $(\overline{U}_t, \varphi \circ F_{-t}))$ vale que

$$[Q, P]_t = \omega \left(\frac{\partial}{\partial Q_t}, \frac{\partial}{\partial P_t} \right)$$

Entonces $[Q, P] \circ F_t$ es independiente de t.

4.4. Sistemas Lagrangianos y Hamiltonianos

La estrucutra simpléctica canónica ω_Q del espacio T^*Q está asociada con una descripción Hamiltoniana de las ecuaciones de movimiento de un sistema mecánico físico (como se vió en la secciones anteriores). Una descripción alternativa es la asociada al espacio TQ y a un Lagrangiano $L: TQ \to \mathbb{R}$, y para ello introduciremos la "derivación con respecto a la fibra" de $L, \mathbf{F}L: TQ \to T^*Q$, que no es más que una transformada de Legendre adecuada. En términos generales, dicha transformada relaciona una descripción con la otra bajo ciertas condiciones de regularidad, vinculando un objeto canónico, como lo es la forma simpléctica de T^*Q , con una dos forma no canónica que notaremos ω_L ; es decir, la transformada de Legendre no es sólo un cambio de variables.(Ver apéndice A).



En este diagrama se puede observar la relación entre el Hamiltoniano H (comúnmente llamado energía por abuso) y lo que si es la energía del sistema E en el espacio TQ donde se plantea una ecuación de segundo orden.

Definición 4.4.1. Sea Q una variedad y $L \in \mathfrak{F}(TQ)$. El mapeo $\mathbf{F}L : TQ \to T^*Q : w_q \to DL_q(w_q)$ se dice la **derivada de** L **con respecto a la fibra**. (L_q denota la restricción de L a la fibra sobre $q \in Q$).

Definición 4.4.2. Sea ω la forma simpléctica canónica en T^*Q y sea $L \in \mathfrak{F}(TQ)$, se dice **2-forma de Lagrange** a

$$\omega_L = (\mathbf{F}L)^* \omega.$$

Definición 4.4.3. Sea Q una variedad y $L \in \mathfrak{F}(TQ)$, llamaremos L un **Lagrangiano** regular si $\mathbf{F}L$ es regular en todo punto, es decir $T_{w_q}\mathbf{F}L$ es suryectiva $\forall w_q = \mathbf{F}L^{-1}(v_q)$.

Definición 4.4.4. Dado L se define una **acción** $A : TQ \to \mathbb{R}$ como $A(w_q) = FL(w_q) \cdot w_q$ y una **energía** como E = A - L. Un campo vectorial Lagrangiano $X_E \in \mathfrak{X}(TQ)$ verifica que $i_{X_E}\omega_L = dE$. Si X_E existe diremos que podemos definir ecuaciones de movimiento consistentes.

Observación. Si L es regular entonces X_E existe y es único.

Una de las principales diferencias entre la formulación Hamiltoniana y la formulación Lagrangiana es que las **ecuaciones de segundo orden** son posibles en TQ pero no en T^*Q .

Definición 4.4.5. Una ecuación de segundo orden en la variedad M es un campo vectorial X en TM tal que $T\tau \circ X$ es la identidad en TM.

Definición 4.4.6. Si $c : I \to M$ es una curva integral del campo vectorial X en TM, diremos que $\tau \circ c : I \to M$ es una **curva integral básica** de X.(ídem para T^*Q).

Observación. Luego X es una ecuación de segundo orden en M si y sólo si para toda curva integral c de X, c es igual a la derivada de su curva integral básica.

Proposición 4.4.1. Sean $L y \bar{L}$ Lagrangianos regulares en $TQ y X_E$, $X_{\bar{E}}$ sus campos Lagrangianos correspondientes. Las siguientes dos afirmaciones son equivalentes:

• $L = \overline{L} + \alpha + c$ donde c una constante y α es una 1-forma cerrada en Q.

•
$$X_E = X_{\bar{E}} \ y \ \omega_L = \omega_{\bar{L}}$$

Observación. De este último resultado es que se dice que las 1-formas cerradas en Q forman el grupo de gauge de la mecánica Lagrangiana. Puede ocurrir que $E \neq \overline{E} + c$ y sin embargo $X_E = X_{\overline{E}}$.

Proposición 4.4.2. Sea $L : TM \to \mathbb{R}$ un Lagrangiano con campo Lagrangiano X_E , $y \Phi : M \to N$ un difeomorfismo. Entonces un campo Lagrangiano para $\overline{L} = L \circ T\Phi^{-1}$ es $(T\Phi)_*X_E$.

4.5. Lagrangianos hiperregulares

Definición 4.5.1. Sea Q una variedad y $L \in \mathfrak{F}(TQ)$, se dice que L es un **Lagrangiano** hiperregular si $\mathbf{F}L : TQ \to T^*Q$ es un difeomorfismo.

Teorema 4.5.1. Sea L un Lagrangiano hiperregular en Q y sea $H = E \circ (FL)^{-1}$: $T^*Q \to \mathbb{R}$ donde E es la energía de L. Entonces X_E y X_H están relacionados por FL, *i.e.* $(FL)_*X_E = X_H$. Las curvas integrales de X_E se mapean por medio de FL a curvas integrales de X_H . Más aún, X_E y X_H tienen la misma curva integral básica.

Proposición 4.5.2. Sea L un Lagrangiano hiperregular en $Q \ y \ H = E \circ (\mathbf{F}L)^{-1}$. Entonces $\theta(X_H) = A \circ (\mathbf{F}L)^{-1}$, donde A es la acción de L y θ es la 1-forma canónica.

Corolario. Sea L un Lagrangiano hiperregular en Q y $\theta_L = \mathbf{F}L^*\theta$. Entonces $A = \theta_L(X_E)$, donde E es la energía y A es la acción de L.

Proposición 4.5.3. Sea $H \in \mathfrak{F}(T^*Q)$, FH es un difeomorfismo local si y sólo si F^2H es no degenerado y en dicho caso diremos que H es un **Hamiltoniano regular**.

Definición 4.5.2. Sea Q una variedad y $H \in \mathfrak{F}(T^*Q)$, se dice que H es un **Hamilto**niano hiperregular si $\mathbf{F}H : T^*Q \to TQ$ es un difeomorfismo.

Proposición 4.5.4. Sea H un Hamiltoniano hiperregular en T^*Q , definiendo $E = H \circ (\mathbf{F}H)^{-1}$, $A = G \circ (\mathbf{F}H)^{-1}$ y L = A - E se tiene que L es un Lagrangiano hiperregular en TQ y $\mathbf{F}L = (\mathbf{F}H)^{-1}$.

Análogamente se tiene un resultado de un Lagrangiano hiperregular.

Proposición 4.5.5. Sea *L* un Lagrangiano hiperregular en TQ, definiendo $H = E \circ (\mathbf{F}L)^{-1}$, entonces *H* es un Hamiltoniano hiperregular en T^*Q y $\mathbf{F}H = (\mathbf{F}L)^{-1}$.

Teorema 4.5.6. Los Lagrangiano hiperregulares en TQ y los hamiltonianos hiperregulares H en T^*Q se corresponden biyectivamente. El siguiente diagrama conmuta:



Observación. Puede verse en el apéndice A ejemplo A.0.2 cómo se relaciona esto con la *transformada de Legendre.*

4.6. Planteo geométrico de algunos ejemplos

Antes de reformular los ejemplos que se han presentado en el capítulo 3, resulta conveniente introducir brevemente las siguientes definiciones, pues tomaremos como punto de partida el planteo de SNHG sugerido en [16].

Definición 4.6.1. Dada una variedad Q, consideremos los triples $(L, \mathcal{C}_{\mathcal{K}}, \mathcal{C}_{\mathcal{V}})$ con

$$L: TQ \to \mathbb{R}, \quad \mathcal{C}_{\mathcal{K}} \subset TQ, \quad \mathcal{C}_{\mathcal{V}} \subset TQ \oplus TQ$$

siendo $\mathcal{C}_{\mathcal{K}}$ y $\mathcal{C}_{\mathcal{V}}$ subvariedades tales que, para cada $q \in Q$ y $\eta \in (\mathcal{C}_{\mathcal{K}})_q$, el subconjunto

$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}}(\eta) = \mathcal{C}_{\mathcal{V}} \cap (\{\eta\} \times T_q Q),$$

es un subespacio lineal, que puede identificarse naturalmente con uno de T_qQ . Nos referiremos a tales triples como sistemas no-holónomos generalizados (SNHG), con función Lagrangiana \mathcal{L} , subvariedad de vínculos cinemáticos $\mathcal{C}_{\mathcal{K}}$ y vínculos variacionales $\mathcal{C}_{\mathcal{V}}$. A los elementos de $\mathcal{C}_{\mathcal{V}}$ los llamaremos desplazamientos virtuales. Diremos que $\gamma : [t_1, t_2] \to Q$ es una trayectoria de $(\mathcal{L}, \mathcal{C}_{\mathcal{K}}, \mathcal{C}_{\mathcal{V}})$ si:

- 1. $\gamma'(t) \in \mathcal{C}_{\mathcal{K}}, \forall t \in (t_1, t_2);$
- 2. para toda variación $\delta \gamma \in \mathcal{C}_{\mathcal{V}}$ y para todo $t \in (t_1, t_2)$, vale que

$$\int_{t_1}^{t_2} < dL(\gamma'(t)), \kappa^{\mathrm{II}}(\delta\gamma'(t)) > dt = 0$$

 $^{{}^{\}rm II}\kappa:TTQ\to TTQ \text{ es la involución canónica.}$

Sea $Q_1 = \tau(\mathcal{C}_{\mathcal{K}})$, si para todo $q \in Q_1$ ocurre que $\mathcal{C}_{\mathcal{V}}(\eta) = \mathcal{C}_{\mathcal{V}}(\eta') \ \forall \eta, \eta' \in \mathcal{C}_{\mathcal{K}q}$, entonces $\mathcal{C}_{\mathcal{V}}$ define una distribución a lo largo de Q_1 . Si llamamos D a esta última, luego

$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}}\rfloor_{Q_1} = \mathcal{C}_{\mathcal{K}} \times_{Q_1} D,$$

y diremos en tal caso que los desplazamientos virtuales no dependen de la velocidad.

Observación. En el caso recién descripto, identificaremos a $C_{\mathcal{V}}$ con su distribución asociada D, es decir, veremos a $C_{\mathcal{V}}$ contenida en TQ a pesar de lo escrito más arriba. Y la condición $(\gamma'(t), \delta\gamma(t)) \in C_{\mathcal{V}}$ será simplificada a $\delta\gamma(t) \in C_{\mathcal{V}}$.

De esta manera estamos codificando en un formalismo geométrico lo expuesto de sistema no-holónomos en el capítulo 1.

Observación. En este contexto diremos que vale el principio de D'Alembert^{III} cuando $C_{\mathcal{K}} = C_{\mathcal{V}}.$

A partir de los datos anteriores se puede definir un SNHG Hamiltoniano cuando el Lagrangiano L es hiperregular y $\mathbf{F}L : TQ \to T^*Q$ su transformada de Legendre asociada a L.

Definición 4.6.2. La terna $(H, \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}}, \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}})$ donde

- $H(\sigma) \equiv <\sigma, \mathbf{F}L^{-1}(\sigma) > -L \circ \mathbf{F}L^{-1}(\sigma)$ es la transformada de Legendre del Lagrangiano L,
- $\mathbf{F}L(\mathcal{C}_{\mathcal{K}}) = \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}}$ es una subvariedad de T^*Q ,
- $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}} \subset T_{\tilde{\mathcal{C}}_{\kappa}}T^*Q$ es una distribución a lo largo de $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}}$,

define el SNHG Hamiltoniano asociado al dado por $(L, \mathcal{C}_{\mathcal{K}}, \mathcal{C}_{\mathcal{V}})$.

A continuación expondremos los ejemplos estudiados en el capítulo anterior bajo esta perspectiva, es decir, se re-formularán los ejemplos anteriores ahora descriptos geométricamente mediante ternas del tipo $(L, C_{\mathcal{K}}, C_{\mathcal{V}})$. También resulta oportuno este contexto para presentarlos en un formalismo Hamiltoniano apropiado, con esto queremos expresar que la versión Hamiltoniana^{IV} de un sistema termo-mecánico, que consideramos coherente, consiste en transformar el espacio tangente mecánico TQ_M en su cotangente T^*Q_M mientras que por la parte termodinámica nada se ve modificado, pues ya estábamos considerando un espacio de fase termodinámico, que en los proximos ejemplos notaremos como $(T^*Q_T)_0$. Es clara la conveniencia de esta última re-formulación para la utilización de la geometría simpléctica y de contacto en lo que sigue de la tesis.

^{III}En este contexto enunciaremos tal principio de la siguiente manera: En un sistema mecánico con restricciones cinemáticas definidas por una subvariedad Q, las fuerzas de vínculo $f^v(t)$ sobre una trayectoria $\Gamma(t)$ debe pertenecer a $(T_{\Gamma(t)}Q)^{\circ} \forall t$.

^{IV}No hemos encontrado en la literatura una definición de sistema termo-mecánico Hamiltoniano.

Observación. En este formalismo identificamos los desplazamientos virtuales del capítulo 1 con los vínculos variacionales $C_{\mathcal{V}}$ y los vínculos (del capítulo 1) con vínculos cinemáticos $C_{\mathcal{K}}$.

4.6.1. Carrito con fricción interna

Descripción geométrica Lagrangiana

La siguiente terna $(L, \mathcal{C}_{\mathcal{K}}, \mathcal{C}_{\mathcal{V}})$ define el sistema termo-mecánico como SNHG, donde la variedad de configuración por la parte mecánica esta descripta localmente por la coordenada $q \in \mathbb{R} = Q_M$, y por la parte termodinámica por $S \in \mathbb{R} = Q_T$. Como variedad de configuración del sistema termo-mecánico se considerará la variedad producto $Q_{TM} = Q_M \times Q_T \equiv \{(q, S)\}$. Luego el Lagrangiano mecánico es

$$L_M(q, \dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2}$$
$$L_M: TQ_M \to \mathbb{R}$$

y por el momento consideraremos que el Lagrangiano del sistema termo-mecánico es $L_{TM}(q, \dot{q}, S, T) = L_M(q, \dot{q}) - U(S, T)$ donde se propone lo siguiente

$$L_{TM}: TQ_M \times (T^*Q_T)_0 \equiv \{(q, \dot{q})\} \times \{(S, T)\} \to \mathbb{R}$$

Realizando el cálculo variacional correspondiente para resolver la trayectoria incógnita utilizando lo anterior y lo sabido de los SNHG con la siguiente terna,

$$\begin{cases} L_{TM}(\dot{q},T) := \frac{m\dot{q}^2}{2} - \nu T \\ \mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \{ \dot{\mathcal{E}} = m \ \ddot{q} \ \dot{q} + \nu \dot{T} = 0, \ \dot{S} = \frac{\nu \dot{T}}{T} \} \\ \mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \{ \mu \ \text{Signo}(\dot{q}) \ \delta q = \nu \delta T \}, \end{cases}$$
(4.1)

obtendremos lo mismo que en (3.4) ya que las cuentas son las mismas que en 3.2.1.

Para la construcción de este SNHG observemos que en los vínculos cinemáticos lo que se consideró fueron las ecuaciones de estado (3.1) y el hecho de que el sistema está aislado y por lo tanto se conserva la energía total $\mathcal{E} = L_M + U$. En la construcción de los vínculos variacionales consideramos que la fuerza de fricción tiene que corresponderse con el incremento de la energía interna.

Formulación Hamiltoniana

La siguiente terna $(H, \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}}, \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}})$ definen el sistema termo-mecánico como un SNHG visto en su representación Hamiltoniana; nótese que el Lagrangiano es hiperregular y resulta que $H_M = \frac{p^2}{2m}$. Y a partir de esto naturalmente se puede proponer un Hamiltoniano termo-mecánico H_{TM} resultante de la suma de la energía total del sistema, i.e.,

$$H_{TM} = H_M + U = \frac{p^2}{2m} + \nu T$$

El cotangente de la variedad de configuración $(T^*Q_{TM})_0 = T^*Q_M \times (T^*Q_M)_0$ está descripta localmente por coordenadas (q, p, S, T), y allí calcularemos la solución del siguiente SNHG:

$$\begin{cases} H_{TM}(p,T) := \frac{p^2}{2m} + \nu T \\ \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}} := \{ \dot{\mathcal{E}} = \dot{p} \; \frac{p}{m} + \nu \dot{T} = 0 \; \text{ y } \dot{S} = \frac{\nu \dot{T}}{T} \} \\ \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}} := \{ \mu \; \text{Signo}(p) \; \delta q = \nu \delta T \; \text{y} \; \delta p \; \text{arbitrario} \} \end{cases}$$
(4.2)

Procediendo de manera análoga al planteo Lagrangiano anterior, cuando buscamos los puntos críticos de la acción obtenemos

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} p\dot{q} - \frac{p^2}{2m} - \nu T dt = \int_{t_1}^{t_2} -\dot{p}\delta q - \nu \,\,\delta T + (\dot{q} - \frac{p}{m})\delta p dt = 0$$

y si utilizamos el $\tilde{C}_{\mathcal{V}}$ de (4.2) en lo anterior obtenemos la segunda ley de Newton para este ejemplo

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -\mu \operatorname{Signo}(p) \end{cases}$$

$$\tag{4.3}$$

Ahora utilizamos el $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}}$ junto con (4.3) y obtenemos lo mismo que en (3.4), y las soluciones de todos estos planteos coinciden.

4.6.2. Embolo vertical adiabático

En esta instancia se considerara una resolución sistemática del problema planteado como SNHG sin hacer ninguna reducción previa en los grados de libertad del sistema a diferencia de lo que se expuso en 3.2.2.

Descripción Lagrangiana sin reducción previa

En este caso se considera que la variedad $TQ_M \times (T^*Q_T)_0$ esta dada localmente por (q, \dot{q}, V, S, P, T) donde el SNHG es el siguiente:

$$L_{TM}(q, \dot{q}, T) := \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq - \alpha NRT$$
$$\mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \{A\dot{q} = \dot{V}, \ \dot{P}V + P\dot{V} = NR\dot{T}, \ \dot{P}V^{\gamma} + \gamma PV^{\gamma-1}\dot{V} = 0, \ \dot{S} = 0\}$$
$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \{A\delta q = \delta V, \ \delta PV + P\delta V = NR\delta T, \ \delta PV^{\gamma} + \gamma PV^{\gamma-1}\delta V = 0, \ \delta S = 0\}$$

Resolvamos lo siguiente

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, T) dt = 0$$

Procediendo de forma similar a lo hecho anteriormente, obtenemos que

$$\int_{t_1}^{t_2} [(-m\ddot{q} - mg)\delta q - \alpha NR\delta T]dt = 0,$$

y teniendo en cuenta los vínculos variacionales obtenemos

$$\begin{split} \delta P V^{\gamma} &= -\gamma P V^{\gamma-1} \delta V \Rightarrow \delta P V = -\gamma P \delta V \\ N R \delta T &= \delta P V + P \delta V = (1 - \gamma) P \delta V \\ \alpha N R \delta T &= -P \delta V \\ (-m\ddot{q} - mg) \delta q - \alpha N R \delta T = (-m\ddot{q} - mg + PA) \delta q \\ m\ddot{q} &= -mg + P A \quad Ecuacion \ de \ Newton. \end{split}$$

Junto con las demás ecuaciones de los vínculos cinemáticos se obtienen las mismas soluciones que en (3.11).

Formulación Hamiltoniana con previa reducción

Consideremos el mismo ejemplo reducido, como se presentó en 3.2.2, luego utilizando la condición de hiperregularidad del Lagrangiano anterior es posible la siguiente representación Hamiltoniana,

$$H + U = \mathcal{E}(q, p, V) := \frac{p^2}{2m} + mgq + \alpha k V^{1-\gamma}$$
$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}} := \{ \dot{\mathcal{E}} = \frac{p\dot{p}}{m} + mg\dot{q} - kV^{-\gamma}\dot{V} = 0 \}$$
$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}} := \{ A\delta q = \delta V, \quad \delta p \text{ arbitrario} \}$$

Nota. En esta resolución a diferencia de la anterior, se cambió el vínculo geométrico por uno energético. Veremos a continuación que los resultados son equivalentes.

Resolvamos lo siguiente

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} p \dot{q} - \mathcal{E}(q, p, V) dt = 0,$$

esto nos da

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[(\dot{q} - \frac{p}{m})\delta p + p \ \delta \dot{q} - mg \ \delta q + kV^{-\gamma}\delta V \right] dt = 0.$$

$$(4.4)$$

Si consideramos los vínculos $\tilde{C}_{\mathcal{V}}$ de más arriba y reemplazamos en (4.4) tenemos

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -mg + AkV^{-\gamma} \end{cases}$$

$$\tag{4.5}$$

Esto nos conduce hasta lo obtenido de manera ad-hoc, sólo nos resta despejar V como función de q.

Si ahora usamos el $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}}$ junto con (4.5) se obtiene

$$A\dot{q} = \dot{V},$$

y así obtenemos la misma ecuación que en (3.9). Se puede corroborar fácilmente que las soluciones que se obtienen con este planteo son consistentes con las de (3.11).

4.6.3. Émbolo isotérmico

Descripción Lagrangiana sin reducción previa

La variedad de configuración $Q_M \times Q_T = \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2$ tendrá como coordenadas locales a (q, V, S), y la terna que define al SNHG de este ejemplo es la siguiente

$$L_{TM}(q,\dot{q},T) := \frac{m\dot{q}^2}{2} - mgq - \alpha NRT$$

$$\tag{4.6}$$

$$\mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \left\{ A\dot{q} = \dot{V}, \ V\dot{P} + P\dot{V} = NR\dot{T}, \ \dot{T} = 0, \ \dot{S} = \frac{\alpha NR\dot{T}}{T} + \frac{NR\dot{V}}{V} \right\}$$
$$\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \left\{ A\delta q = \delta V, \ V\delta P + P\delta V = NR\delta T, \ \frac{\delta P}{P} = \frac{-\alpha - 1}{\alpha} \frac{\delta q}{q}, \ \delta S = \frac{\alpha NR\delta T}{T} + \frac{NR\delta V}{V} \right\}.$$

La resolución es la igual a la expuesta en 3.3.1 y su solución es (3.22), como lo habíamos hecho de manera ad-hoc.

Observación. En este caso se tuvo que plantear un sistema no-holónomo generalizado donde no es posible plantear de manera sistemática que $C_{\mathcal{V}} = C_{\mathcal{K}}$ en lo que involucra a las ecuaciones de estado; plantear $\frac{\delta P}{P} = \frac{-\alpha - 1}{\alpha} \frac{\delta q}{q}$ obliga a que $C_{\mathcal{V}} \neq C_{\mathcal{K}}$.

Formulación Hamiltoniana

Consideremos el sistema SNHG Hamiltoniano que se obtiene del Lagrangiano hiperregular anterior, esto es,

$$H_{TM}(q, p, T) := \frac{p^2}{2m} + mgq + \alpha NRT$$

$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}} := \{\frac{p}{m}\dot{p} + mg\dot{q} - P\dot{V} = 0, \ P\dot{V} + \dot{P}V = NR\dot{T}, \ \dot{T} = 0, \ \dot{S} = \frac{\alpha NR\dot{T}}{T} + \frac{NR\dot{V}}{V}\}$$

 $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}} := \{ PA\delta q = \alpha NR\delta T (= \delta U), \ P\delta V + \delta PV = NR\delta T, \ \frac{\delta P}{P} = \frac{-\alpha - 1}{\alpha} \frac{\delta q}{q}, \ \delta S = \frac{\alpha NR\delta T}{T} + \frac{NR\delta V}{V}, \\ \delta p \text{ arbitrario} \}.$

y resolvamos ahora lo siguiente

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} p\dot{q} - \left(\frac{p^2}{2m} + mgq + \alpha NRT\right)dt = 0$$

esto nos da

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[(\dot{q} - \frac{p}{m})\delta p + p \ \delta \dot{q} - mg \ \delta q + \alpha NR\delta T \right] dt = 0 \tag{4.7}$$

si consideramos el $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}}$ de más arriba y lo reemplazamos en (4.7) obtenemos lo siguiente

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -mg + PA. \end{cases}$$
(4.8)

Si ahora usamos el $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}}$ junto con (4.8) obtenemos que

$$A\dot{q} = \dot{V}.$$

Arribamos así a la mismas soluciones que en (3.22).

4.6.4. Émbolo vertical moviéndose con velocidad constante

La descripción Lagrangiana ya fue expuesta en 3.3.2 y la variedad termo-mecánica es idéntica a la expuesta en el ejemplo anterior.

Formulación Hamiltoniana

Como ya vimos en los ejemplos anteriores, el Lagrangiano mecánico que estamos considerado es hiperregular lo cuál nos permite llevar a cabo una resolución en la representación Hamiltoniana del SNHG, donde

$$H_{TM}(q,\dot{q},V) := \frac{p^2}{2m} + mgq + \alpha NRT$$
$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}} := \left\{ \dot{p}\frac{p}{m} + mg\dot{q} - P\dot{V} = 0, \ \dot{P}V + P\dot{V} = NR\dot{T}, \ \dot{S} = \frac{\alpha NR\dot{T}}{T} + \frac{NR\dot{V}}{V}, \ \dot{P} = 0 \right\}$$

$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}} := \left\{ PA\delta q = \alpha NR\delta T, \ \delta PV + P\delta V = NR\delta T, \ \delta S = \frac{\alpha NR\delta T}{T} + \frac{NR\delta V}{V}, \ \delta p \text{ arbitrario} \right\}$$

Resolvamos lo siguiente:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} p\dot{q} - \left(\frac{p^2}{2m} + mgq + \alpha NRT\right) dt = 0$$

esto nos da

$$\int_{t_1}^{t_2} [(\dot{q} - \frac{p}{m})\delta p + p\delta\dot{q} - mg\delta q + \alpha NR\delta T]dt = 0.$$
(4.9)

Si consideramos el $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}}$ de más arriba y lo reemplazamos en (4.9) obtenemos

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -mg + PA \end{cases}$$
(4.10)

del hecho de que el proceso se produce a presión constante y aceleración mecánica nula se deduce que $P = \frac{mg}{A}$ (constante).

Si usamos los $C_{\mathcal{K}}$ junto con (4.10) obtenemos que

$$A\dot{q} = \dot{V}.$$

Finalmente llegamos a que la solución de este sistema es consistente con las soluciones en (3.26).

4.6.5. Émbolo horizontal adiabático con viscosidad

Formulación Hamiltoniana

La variedad $T^*Q \times (T^*Q)_0$ está dada localmente por (q, p, V, S, P, T), y la terna que define el SNHG es la siguiente

$$H_{TM}(p,T) := \frac{p^2}{2m} + \alpha NRT$$

 $\mathcal{C}_{\mathcal{K}} := \{ A\dot{q} = \dot{V}, \ \dot{P}V + P\dot{V} = NR\dot{T}, \ \dot{S} = 0, \ \dot{P}V^{\gamma} + \gamma PV^{\gamma-1}\dot{V} = 0, \ m\ddot{q} + \alpha NR\dot{T} = -\nu\dot{q} \}$ $\mathcal{C}_{\mathcal{V}} := \{ A\delta q = \delta V, \ \delta PV + P\delta V = NR\delta T, \ \delta PV^{\gamma} + \gamma PV^{\gamma-1}\delta V = 0, \ \delta S = 0, \ -\nu\dot{q}\delta q = 0 \}$

Resolvamos el siguiente planteo,

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} p\dot{q} - H_{TM}(p,T)dt = 0,$$

esto nos da

$$\int_{t_1}^{t_2} [(\dot{q} - \frac{p}{m})\delta p + (-\dot{p}\dot{q})\delta q - \alpha NR\delta T]dt = 0.$$

Si consideramos el $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}}$ de más arriba obtenemos

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[(\dot{q} - \frac{p}{m})\delta p + (-\dot{p}\dot{q} + PA - \lambda\nu\dot{q})\delta q \right] dt = 0.$$

Luego utilizando los $\tilde{C}_{\mathcal{K}}$ obtenemos que $\lambda = 1$ y las ecuaciones para la evolución temporal de los observables son las mismas que en la solución ad-hoc de 3.3.3.

4.6.6. Émbolo vertical con disipación térmica por conducción

Formulación Hamiltoniana

En la resolución de este ejemplo consideraremos que la variedad $T^*Q \times (T^*Q)_0$ esta dada localmente por (q, p, V, S, P, T), y la terna que define al SNHG es la siguiente

$$H_{TM}(q, p, T) := \frac{p^2}{2m} + mgq + \alpha NRT$$
$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}} := \{A\dot{q} = \dot{V}, \ V\dot{P} + P\dot{V} = NR\dot{T}, \ \dot{T} = -kT, \ \dot{S} = \frac{\alpha NR\dot{T}}{T} + \frac{NR\dot{V}}{V}\}$$

$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}} := \{A\delta q = \delta V, \ V\delta P + P\delta V = NR\delta T, \ \frac{\delta P}{P} = \frac{-\alpha - 1}{\alpha} \frac{\delta q}{q}, \ \delta S = \frac{\alpha NR\delta T}{T} + \frac{NR\delta V}{V},$$

 ∂p arbitrario $\}$.

Resolvamos lo siguiente:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} p\dot{q} - H_{TM}(q, p, T)dt = 0$$

esto nos da

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[(\dot{q} - \frac{p}{m})\delta p + (-\dot{p}\dot{q} - mg)\delta q - \alpha NR\delta T \right] dt = 0.$$

$$(4.11)$$

Si consideramos el $\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}}$ de más arriba y lo reemplazamos en (4.11) obtenemos

$$\int_{t_1}^{t_2} [(\dot{q} - \frac{p}{m})\delta p + (-\dot{p}\dot{q} - mg + PA)\delta q] dt = 0.$$

Luego utilizando los $\tilde{C}_{\mathcal{K}}$ obtenemos las mismas ecuaciones para la evolución temporal de los observables que en la solución ad-hoc de 3.3.4.

Observación. Hasta aquí hemos podido observar como se relacionan los distintos formalismos. En particular, el formalismo Hamiltoniano presenta un punto favorable en la descripción geométrica, pues la dinámica tiene lugar en el fibrado co-tangente de cierta variedad.

4.7. Subvariedades Lagrangianas

Lo que sigue de esta sección y la siguiente se encuentra esencialmente en [31] y [33].

Definición 4.7.1. Sea (M, ω) una variedad simpléctica y p un punto de M. Un subespacio isotrópico de T_pM es el subespacio lineal E de T_pM tal que para todo par $u, v \in E$ se satisface que $\omega_p(u, v) = 0$.

Definición 4.7.2. ^v Una subvariedad isotrópica de una variedad simpléctica (M, ω) , es una subvariedad S de M, tal que para todo $p \in S$, T_pS es un subespacio isotrópico de T_pM .

Definición 4.7.3. Una subvariedad Lagrangiana \mathcal{L} de un espacio simpléctico (M, ω) es una subvariedad isotrópica tal que para todo $p \in \mathcal{L}$, $T_p\mathcal{L}$ tiene un complemento isotrópico en T_pS .

Una proposición evidente que se desprende de lo anterior es la siguiente.

Proposición 4.7.1. Supongamos que dim(M) = 2n. Si \mathcal{L} es una subvariedad de (M, ω) que verifica que $\omega \rfloor_{\mathcal{L}} = 0$ y $dim(\mathcal{L}) = n$, entonces \mathcal{L} es una subvariedad Lagrangeana de (M, ω) .

En todo lo que continua consideraremos variedades de dimensión finita. Cabe destacar que el próximo ejemplo es paradigmático para el planteo *a la Tulczyjew* de los sistemas mecánicos, termodinámicos y termo-mecánicos, que se expondrán en los siguientes capítulos. Por eso es relevante describir con detalle las subvariedades Lagrangianas de un fibrado cotangente T^*Q , como haremos a continuación.

Ejemplo 4.7.1. Una subvariedad del fibrado cotangente (T^*Q, ω_Q) es una subvariedad $S \subset T^*Q$ de dimensión n. Si S es la imagen de una inmersión $\sigma : R \to T^*Q$ de una variedad R con coordenadas (t^{α}) y

$$(q^{\kappa}, p_{\lambda}) \circ \sigma = (\sigma^{\kappa}, \sigma_{\lambda})$$

entonces

$$\sigma^*\omega_Q = \partial_\alpha \sigma_\kappa \partial_\beta \sigma^\kappa dt^\alpha \wedge dt^\beta = \frac{1}{2} (\partial_\alpha \sigma_\kappa \partial_\beta \sigma^\kappa - \partial_\beta \sigma_\kappa \partial_\alpha \sigma^\kappa) dt^\alpha \wedge dt^\beta$$

^vOtra forma de caracterizar una subvariedad isotrópica: Una subvariedad isotrópica si y sólo si $i_S^*\omega = 0$, donde $i_S : S \to M$ es el imbedding de S en M.

Si S es una subvariedad Lagrangeana, entonces se anula su corchete de Lagrange

$$\partial_{\alpha}\sigma_{\kappa}\partial_{\beta}\sigma^{\kappa} - \partial_{\beta}\sigma_{\kappa}\partial_{\alpha}\sigma^{\kappa}$$

Sea $s \in S$ y notemos $T_s S \subset TT^*Q$ al espacio de vectores tangentes a S en el punto s. Sea

$$T_s^{\circ}S = \{a \in T_s^*T^*Q; \ \langle w, a \rangle = 0 \ \forall w \in T_sS\}$$

el **anulador** de T_sS . Si $u \in T_sS$, entonces

$$\langle \flat(u), w \rangle = u^{\flat}(w) = \omega_Q(u, w) = 0 \quad \forall w \in T_s S.$$

Entonces $(T_sS)^{\flat} \subset T_s^{\circ}S$. Como $dim((T_sS)^{\flat}) = dim(T_sS) = n \text{ y } dim(T_s^{\circ}S) = dim(T_s^{*}T^{*}Q) - dim(T_sS) = n$, los espacios $(T_sS)^{\flat}$ y $T_s^{\circ}S$ son iguales.

Observaciones. • Si F y G son funciones en T^*Q constantes en S, entonces dF(s) y dG(s) están en $T^\circ_s Q$ para todo $s \in S$. Luego se tiene que

$$\{F,G\}\rfloor_S = 0.$$

• Si S está determinada por ecuaciones independientes $F_i = 0$ en T^*Q , con $i \in \{1, ..., n\}$, entonces

$$\{F_i, F_j\} \rfloor_S = 0.$$

Hay tres categorías de subvariedades Lagrangianas de fibrados cotangentes, generadas por objetos cada vez más complejos.

I Subvariedades Lagrangianas generadas por funciones.

Definición 4.7.4. Sea U una función en Q. La imagen S del diferencial $dH : Q \to T^*Q$ es una subvariedad Lagrangiana de (T^*Q, ω_Q) , pues dim(S) = n y

$$(dU)^*\omega_Q = (dU)^*d\theta_Q = d(dU)^*\theta_Q = ddU = 0.$$

Diremos que la subvariedad S es **generada** por U, o que U es una **función gene**ratriz de S.

II Subvariedades Lagrangianas generadas por funciones restringidas.

Se
a $C\subset Q$ una subvariedad de dimensión ky se
a $U:C\to \mathbb{R}$ una función diferenciable. El conjunto

$$S = \{ p \in T^*Q; q = \pi_Q(p) \in C, \ \langle p, v \rangle = \langle dU, v \rangle \ \forall v \in T_qC \}$$

es un subfibrado afín del fibrado cotangente restringido a C. En todo punto $q \in C$ la fibra $S_q = S \cup T_q^*Q$ es un subespacio afín de T^*Q de dimensión n - k. Luego Ses un subvariedad de T^*Q de dimensión n.

Elegimos una función $\overline{U} : Q \to \mathbb{R}$ tal que $\overline{U} |_C = U$ y definimos funciones $\overline{U} = \overline{U} \circ \pi_Q : T^*Q \to \mathbb{R}$ y $\widetilde{U} = \overline{U} |_S : S \to \mathbb{R}$. La función \widetilde{U} no depende de la elección de \overline{U} , puede definirse directamente por $\widetilde{U}(p) = U(\pi_Q(p)) \forall p \in S$. Si $w \in TS$, entonces $T\pi_Q(w) \in TC$, pues $\pi_Q(S) = C$.

De las siguientes igualdades

$$\langle \theta_Q, w \rangle = \langle \tau_{T^*Q}(w), T\pi_Q(w) \rangle = \langle dU, T\pi_Q(w) \rangle = \langle d\bar{U}, T\pi_Q(w) \rangle = \langle d\bar{U}, w \rangle$$

se tiene que

$$\theta_O|_S = d\tilde{U}$$

luego

$$\omega_Q \rfloor_S = d\theta_Q \rfloor_S = dd\tilde{U} = 0$$

Por lo anterior se obtiene que S es una subvariedad Lagrangeana de (T^*Q, ω_Q) .

Observación. Dada una función $\overline{U}(q^{\kappa})$ y n-k funciones independientes $F_i(q^{\kappa})$ tales que C se describe por las ecuaciones $F_i(q^{\kappa}) = 0$, y el principio de trabajo virtual se escribe de la siguiente forma para el conjunto S

$$F_i(q^{\kappa}) = 0, \ p_{\lambda}\delta q^{\lambda} = \partial_{\lambda}\bar{U}(q^{\kappa})\delta q^{\lambda}, \ \partial_{\lambda}F_i(q^{\kappa})\delta q^{\lambda} = 0.$$
(4.12)

Las coordenadas $(q^{\kappa}, p_{\lambda})$ de los elementos de S satisfacen el principio variacional con desplazamientos virtuales δq^{λ} arbitrarios que satisfacen la última igualdad. La última igualdad nos está indicando que los desplazamientos virtuales son coordenadas de vectores tangentes a C. Si usamos multiplicadores de Lagrange λ^i las ecuaciones de más arriba se escriben de la siguiente forma

$$F_i(q^{\kappa}) = 0, \ p_{\lambda} = \partial_{\lambda} \bar{U}(q^{\kappa}) + \partial_{\lambda} F_i(q^{\kappa}) \lambda^i.$$
(4.13)

III Subvariedades Lagrangianas generadas por familias de Morse.

Introduciremos la siguiente definición sólo para completar esta caracterización en tres items de las subvariedades Lagrangianas expuesta en el trabajo antes mencionado. En lo que sigue de la tesis no será de gran utilidad.

Se
a $\eta:Y\to Q$ una fibración con coordenadas (q^κ,y^A) adaptadas en el siguiente sentido

$$(q^{\kappa}) \circ \eta = (q^{\kappa}).$$

Definición 4.7.5. Sea $U_k : Y \to \mathbb{R}$ una familia de funciones definida en las fibras de la fibración η . La familia se dice una **familia de Morse** si la matriz

$$\left(\frac{\partial^2 U_k}{\partial y^A \partial y^B} \quad \frac{\partial^2 U_k}{\partial y^A \partial q^\kappa}\right) \in M_{k \times (m+k)}(\mathbb{R})$$

es de rango máximo.

4.8. Fibrados tangente iterados (Sistemas mecánicos á la Tulczyjew)

Para una mejor comprensión de lo que se expondrá relacionado con lo escrito por Tulczyjew en [33], [31] y [32]. A continuación definiremos las operaciones i_T y d_T , donde i_T es un levantamiento de una k-forma en M a una (k-1)-forma en TM y d_T es una aplicación que mapea k-formas de M a k-formas en TM; ambas operan "naturalmente". Serán de utilidad más adelante en el planteo de sistemas termo-mecánicos, de alguna manera, similar a lo planteado por Tulczyjew en mecánica.

Notación: Notaremos a las variedades simplécticas de interés en coordenadas locales de la siguiente forma:

$$\begin{split} TQ &\equiv (q,\dot{q}) \qquad \omega_L = \frac{1}{2} (\frac{\partial^2 L}{\partial q_i \partial u_j} - \frac{\partial^2 L}{\partial u_i \partial q_j}) dq_i \wedge dq_j + \frac{\partial^2 L}{\partial u_i \partial u_j} du_i \wedge d\dot{q}_j \\ T^*Q &\equiv (q,p) \qquad \omega_Q = dp \wedge dq \\ T^*T^*Q &\equiv (q,p,u,v) \qquad \omega_{T^*Q} = du \wedge dq + dv \wedge dp \\ TT^*Q &\equiv (q,p,\dot{q},\dot{p}) \qquad d_T\omega_Q = d\dot{q} \wedge dp + dq \wedge d\dot{p} \\ T^*TQ &\equiv (q,\dot{q},a,b) \qquad \omega_{TQ} = da \wedge dq + db \wedge d\dot{q}. \end{split}$$

Se
aAuna 1-forma en Q,entonce
s i_TA es una 0-forma en TQ definida de la siguiente forma

$$i_T A(v) = \langle A, v \rangle = A(v)$$

Sea B una 2-forma en Q y $w \in TTQ$ entonces $(\tau_{TQ}(w), T_{\tau_Q}(w)) \in TQ \times TQ$ pues $\tau_Q \circ T_{\tau_Q} = \tau_Q \circ \tau_{TQ}$. La 1-forma $i_T B$ en TQ se define de la siguiente forma

$$\langle i_T B, w \rangle = \langle B, \tau_{TQ}(w) \wedge T_{\tau_Q}(w) \rangle = B(\tau_{TQ}(w), T_{\tau_Q}(w))$$

Sean F, $A \neq B = dA$ una 0-forma, una 1-forma y una 2-forma exacta en Q respectivamente. Definiremos una 0-forma $d_T F$, una 1-forma $d_T A \neq una$ 2-forma $d_T B$ en TQ de

la siguiente forma

$$d_T F = i_T dF$$
$$d_T A = i_T dA + di_T A$$
$$d_T B = di_T B = di_T dA = dd_T A$$

En coordenadas locales, lo anterior se expresa de la siguiente manera

$$d_T F(q_\kappa, \dot{q}_\lambda) = \partial_\lambda F(q_\kappa) \dot{q}_\lambda$$

Si $A = A_{\kappa}(q_{\mu}, p_{\nu})dq_{\kappa}$ y $B = \frac{1}{2}B_{\kappa\lambda}(q_{\mu}, p_{\nu})dq_{\kappa} \wedge dq_{\lambda}$ entonces

$$\begin{split} i_T A &= A_{\kappa}(q_{\mu}, p_{\nu}) \dot{q}_{\kappa} \\ d_T A &= \partial_{\lambda} A_{\kappa} \dot{q}_{\lambda} dq_{\kappa} \\ i_T B &= B_{\kappa\lambda}(q_{\mu}, p_{\nu}) \dot{q}_{\kappa} dq_{\lambda} \\ di_T dA &= \frac{1}{2} \partial_{\mu} (\partial_{\kappa} A_{\lambda} - \partial_{\lambda} A_{\kappa}) \dot{q}_{\mu} dq_{\kappa} \wedge dq_{\lambda} + (\partial_{\kappa} A_{\lambda} - \partial_{\lambda} A_{\kappa}) d\dot{q}_{\kappa} \wedge dq_{\lambda} \end{split}$$

Proposición 4.8.1. Sea ω una 2-forma simpléctica en la variedad M de dimensión 2n, entonces $(TM, d_T\omega)$ es una variedad simpléctica.

Demostración. En coordenadas de Darboux de (M, ω) tenemos la siguiente expresión para la forma simpléctica

$$\omega = dp \wedge dq.$$

Luego de aplicar d_T obtenemos la siguiente expresión local

$$d_T\omega = d\dot{q} \wedge dp + dq \wedge d\dot{p},$$

donde claramente el rango de dicha 2-forma es 4n, y por lo tanto es no-degenerada.

También es cerrada pues $d_T \omega = di_T \omega + i_T d\omega = di_T \omega$. Luego se concluye que $d_T \omega$ es una forma simpléctica de TM.

4.9. Dinámica de sistemas mecánicos (à la Tulczyjew).

En esta sección comenzaremos exponiendo la descripción de la mecánica en término de triples de Tulczyjew para luego conectar dicha descripción con lo visto de SNHG en secciones anteriores.

4.9.1. Sistemas sin vínculos externos

El siguiente diagrama conmutativo contiene las estructuras geométricas usadas por Tulczyjew para formular la dinámica de sistemas mecánicos.



El fibrado cotangente T^*Q es el espacio de fase del sistema. La dinámica del sistema es una ecuación diferencial $E \subset TT^*Q$ y una solución $\gamma : I \to T^*Q$ de dicha ecuación es una trayectoria del sistema. Las trayectorias del sistema en la variedad de configuración son las soluciones de la ecuación de segundo orden de Euler Lagrange. Se reconoce en [33] la presencia de una estructura simpléctica canónica en TT^*Q , notada $d_T\omega_Q$. En la mayoría de los casos de interés en física relativista, la dinámica es una subvariedad Lagrangiana \mathcal{L} de (TT^*Q, ω) . Los simplectormorfismos canónicos $\alpha \neq \beta$ brindan la posibilidad de generar la dinámica a partir de Lagragianos y Hamiltonianos generalizados.

Un sistema mecánico sin vínculos externos, en este esquema, se puede identificar con una subvariedad de Lagrange \mathcal{L} del espacio T^*P^{VI}

Teniendo en cuenta el diagrama escrito más arriba tenemos que

$$\beta^{-1}(\mathcal{L}) = \mathcal{L}_M = \{ u \in T_D P \text{ tales que } \omega_Q(u, v) = \langle dH, v \rangle \forall v \in T_D P \}$$

donde ω_Q es la forma simpléctica canónica de T^*Q .

Un sistema mecánico (sin vínculos externos) sobre una variedad simpléctica (P, ω) es una subvariedad de Lagrange $\mathcal{L}_M \subset TP$ con respecto a la estructura simpléctica $d_T\omega$. Las trayectorias (débiles) del sistema son las curvas $\Gamma : I \to P$ tales que

$$\Gamma'(t) \in \mathcal{L}, \quad \forall t \in I$$

Escribamos $\tau_P(\mathcal{L}_M) = K$. Si $K \subsetneq P$, notemos que toda trayectoria Γ debe cumplir $\Gamma(t) \in K$, o equivalentemente

$$\Gamma'(t) \in TK, \forall t \in I.$$

^{VI}Tulczyjew desarrolla dicho esquema para variedades simplécticas especiales (P, Q, π, θ) , pero la construcción de la variedad simpléctica $(TP, d_T\omega)$ se puede generalizar para cualquier variedad simpléctica (P, ω) .
En consecuencia,

$$\Gamma'(t) \in \mathcal{L} \cap TK, \forall t \in I.$$

Es por eso que se dice que K define vínculos internos (o Lagrangianos) para el sistema.

Si $\Gamma : I \to P$ es curva integral de algún campo $X \in \mathfrak{X}(N)$ tal que $N \subset K$ y Im $X \subset \mathcal{L}_M$, diremos que Γ es una **trayectoria fuerte**.

Corolario. Sigue valiendo el siguiente diagrama conmutativo para una variedad simpléctica arbitraria (P, ω) localmente



Demostración. Es consecuencia de la construcción del morfismo β y la estructura simpléctica $d_T \omega$ junto con (4.8.1).

Ejemplo 4.9.1. Si $(P, \omega)^{\text{vII}}$ es una variedad simpléctica y $H : P \to \mathbb{R}$ una función sobre P, luego

$$\mathcal{L}_M = \operatorname{Im} X_H \subset TP$$

es una subvariedad Lagrangiana de $(TP, d_T\omega)$. Por X_H estamos denotando al campo vectorial Hamiltoniano de H con respecto a ω , es decir

$$\omega^{\flat}(X_H(p)) = dH(p), \ \forall p \in P.$$

En otras palabras,

$$X_H(p) = \omega^{\sharp}(dH(p)), \ \forall p \in P$$

o en una notación más compacta

$$X_H = (dH)^{\sharp}$$

En esta notación es posible escribir $\mathcal{L}_M = (\text{Im } dH)^{\sharp}$.

La función H es una función generatriz de \mathcal{L}_M . El sistema mecánico que define $\mathcal{L}_M =$ Im X_H tiene como trayectorias a las curvas integrales de X_H , pues

$$\Gamma'(t) \in \operatorname{Im} X_H$$

si y sólo si

$$\Gamma'(t) = X_H(\Gamma(t))$$

Notemos que, en consecuencia, todas las trayectorias del sistema son fuertes. Por otro

 $^{^{\}rm VII} {\rm En}$ este ejemplo estamos considerando una variedad simpléctica más general que una simpléctica especial.

lado, como $\tau_P(\mathcal{L}_M) = P$, se trata de un sistema sin vínculos.

Ejemplo 4.9.2. Si en lugar de fijar una función H, o su diferencial asociado dH, fijamos una 1-forma cerrada $\Omega: P \to T^*P$, luego

$$\mathcal{L}_M = (\mathrm{Im} \ \Omega)^{\sharp}$$

también es una subvariedad Lagrangeana de $(TP, d_T\omega)$. Definiendo $X_{\Omega} = \omega^{\sharp} \circ \Omega$, tendremos que

$$\mathcal{L}_M = \operatorname{Im} X_\Omega$$

y que las trayectorias del sistema definido por \mathcal{L}_M serán las curvas integrales de X_{Ω} .

Ejemplo 4.9.3. Consideremos ahora una subvariedad $K \subsetneq P$ y una 1-forma cerrada $\Omega: K \to T^*K$. Luego

$$\mathcal{L}_M = \operatorname{Im} X_\Omega + (TK)^{\perp},$$

es una subvariedad Lagrangiana de $(TP, d_T\omega)$, donde " \perp " simboliza el ortogonal simpléctico de un conjunto con respecto a ω , y $X_{\Omega} : K \to TP$ es una sección de TP a lo largo de K que cumple

$$i^* \circ \omega^{\flat}(X_{\Omega}(k)) = \Omega(k), \ \forall k \in K,$$

siendo $i: K \hookrightarrow P$ la inclusión de K en P. Estamos identificando $TK \in i_*(TK)$.

Dado que $K \subsetneq P$, se trata de un sistema con vínculos internos K. Notemos que las trayectorias del sistema tendrán que cumplir

$$\Gamma'(t) \in (\text{Im } X_{\Omega} + (TK)^{\perp}) \cap TK, \ \forall t \in I.$$

Observación. Una subvariedad Lagrangeana trivial en este esquema es la siguiente, consideremos una subvariedad $K \subsetneq P$ junto con la función nula $0: K \to \{0\}$, luego, como hemos visto en los ejemplos precedentes, tenemos que la subvariedad Lagrangeana generada por d0 es

$$\mathcal{L} = (TK)^{\perp} \tag{4.14}$$

4.9.2. Sistemas con vínculos externos

De lo visto anteriormente estamos en condiciones de dar una definición que generaliza y vincula lo expuesto por Tulczyjew con lo conocido de SNHG. **Definición 4.9.1.** Un sistema mecánico con vínculos (externos -de orden a lo sumo 2-) sobre una variedad simpléctica (P, ω) es una terna $(\mathcal{L}, \mathcal{W}, \mathcal{P})$ con $\mathcal{L}, \mathcal{W}, \mathcal{P} \subset TP$ tales que:

- \mathcal{L} es una subvariedad Lagrangiana con respecto a $d_T \omega$: el sistema mecánico (con eventuales vínculos internos);
- \mathcal{P} es una subvariedad: los vínculos externos;
- \mathcal{W} es una distribución sobre P : el espacio de las "fuerzas de vínculo" (externas).

Para aclarar lo recién expuesto daremos la siguiente definición de lo que son las fuerzas de vínculo en este contexto.

Definición 4.9.2. Una **fuerza de vínculo** asociada a la trayectoria Γ es una función $F: I \to TP$ tal que

$$F(t) \in \mathcal{W}_{\Gamma(t)} \ y \ \Gamma'(t) - F(t) \in \mathcal{L} \cap \mathcal{P}, \ \forall t \in I,$$

donde $\mathcal{W}, \mathcal{L} \neq \mathcal{P}$ son los de la definición anterior.

La interpretación física de esta cantidad es la siguiente. Para que el sistema se mueva según la curva Γ , basta con aplicar la fuerza F. Notamos que es posible que se produzca tal movimiento para distintos valores de F, e incluso para F nulo. En el último caso, diremos que el sistema puede moverse según Γ (cumpliendo los vínculos \mathcal{P}) sin necesidad de aplicar fuerzas de vínculo.

Definición 4.9.3. Una trayectoria (débil) del sistema es una curva $\Gamma : I \to P$ tal que

$$\Gamma'(t) \in (\mathcal{L} + \mathcal{W}) \cap \mathcal{P}, \ \forall t \in I.$$

Las trayectorias fuertes serán las curvas integrales de los campos $X \in \mathfrak{X}(N)$ que cumplan

$$N \subset K \cap \tau_P(\mathcal{P}) \ y \ \operatorname{Im} X \subset (\mathcal{L} + \mathcal{W}) \cap \mathcal{P}.$$

La suma $\mathcal{L} + \mathcal{W} \subset TP$ debe ser entendida a lo largo de $\tau_P(\mathcal{L}) \cap \tau_P(\mathcal{W}) \subset P$. Vamos a suponer de ahora en más que

$$\tau_P(\mathcal{L}) = K \subset \tau_P(\mathcal{W}) \ y \ TK \cap \mathcal{P} = \emptyset.$$

Notemos que, para las trayectorias fuertes definidas por X, todo campo $Y \in \mathfrak{X}(P)$ tal que

Im
$$Y|_{\tau_P(\mathcal{W})} \subset \mathcal{W}$$
 y $X(k) - Y(k) \in \mathcal{L}_k, \ \forall k \in K \cap N,$

define fuerzas de vínculo, en el sentido que si Γ es una curva integral de X, luego $F = Y \circ \Gamma$ es una fuerza de vínculo asociada a Γ .

4.10. Sistemas dinámicos equivalentes

A continuación definiremos una relación de equivalencia que nos será de utilidad en la descripción de los sistemas de estudio en término de subvariedades y distribuciones.

Definición 4.10.1. Diremos que dos ternas $(\mathcal{L}, \mathcal{W}, \mathcal{P})$ y $(\tilde{\mathcal{L}}, \tilde{\mathcal{W}}, \tilde{\mathcal{P}})$ son equivalentes si

$$(\mathcal{L} + \mathcal{W}) \cap \mathcal{P} = (\tilde{\mathcal{L}} + \tilde{\mathcal{W}}) \cap \tilde{\mathcal{P}}.$$

En tal caso escribiremos

$$(\mathcal{L}, \mathcal{W}, \mathcal{P}) \sim (\tilde{\mathcal{L}}, \tilde{\mathcal{W}}, \tilde{\mathcal{P}}).$$

Es claro que como consecuencia de esta definición dos sistemas equivalentes brindarán las mismas trayectorias del sistema.

Un sistema mecánico (sin vínculos externos) definido por \mathcal{L} puede describirse por la terna $(\mathcal{L}, 0, TP)$, o equivalentemente por $(\mathcal{L}, 0, \mathcal{L})$. Por otro lado, si $\tau_P(\mathcal{L}) = K$ define los vínculos internos, también podemos usar la terna $(\mathcal{L}, 0, TK)$.

En todos estos casos, estamos viendo al sistema en cuestión como un sistema con vínculos externos, pero sin fuerzas de vínculo. No obstante, se puede pensar que $(TK)^{\perp}$ es el espacio de fuerzas de vínculo para el sistema, ya que $(\mathcal{L}, (TK)^{\perp}, TK)$ tiene las mismas trayectorias que las ternas anteriores. Tenemos entonces que $(\mathcal{L}, 0, TP) \sim (\mathcal{L}, 0, \mathcal{L}) \sim$ $(\mathcal{L}, 0, TK) \sim (\mathcal{L}, (TK)^{\perp}, TK)$.

Ejemplo 4.10.1 (HOCS). Las ternas definidas por una subvariedad Lagrangiana $\mathcal{L} =$ Im X_H , como en el Ejemplo 4.9.1, y por \mathcal{W} , \mathcal{P} arbitrarios, que podrían describirse por ternas $(H, \mathcal{W}, \mathcal{P})$, tienen como trayectorias a las curvas $\Gamma : I \to P$ tales que

$$\Gamma'(t) \in \mathcal{P} \quad \text{y} \quad \Gamma'(t) - X_H(\Gamma(t)) \in \mathcal{W}.$$

Sus trayectorias fuertes están dadas por las curvas integrales de los campos $X \in \mathfrak{X}(P)$ que cumplan $X \subset \mathcal{P}$ y $X - X_H \subset \mathcal{W}$.

4.11. Producto cartesiano de variedades simplécticas

No es difícil de concebir a un sistema mecánico como la "unión" de subsistemas. Particularmente nos interesa, en el contexto de las variedades simplécticas, la construcción de variedades como producto cartesiano de subvariedades. El objetivo es proporcionar una herramienta sistemática para acoplar un número finito de objetos, en un principio independientes, en un objeto "más grande" que los contenga, y que además puedan utilizarse para su estudio las mismas herramientas que se utilizan en los objetos independientes. **Definición 4.11.1.** Sean (M, ω_M) y (N, ω_N) dos variedades simplécticas, llamaremos **producto cartesiano de variedades simplécticas** y lo notaremos $(M \times N, \omega_M \oplus \omega_N)$, a la variedad simpléctica dada por el producto cartesiano de las variedades M y N y cuya forma simpléctica es la suma directa de las formas simplécticas respectivas,

$$(\omega_M \oplus \omega_N)((x_1, y_1), (x_2, y_2)) = \omega_M(x_1, x_2) + \omega_N(y_1, y_2)$$

donde $x_1, x_2 \in TM, y_1, y_2 \in TN$ y se esta identificando $T(M \times N) \cong TM \times TN$.

Proposición 4.11.1. Sean (M, ω_M) y (N, ω_N) dos variedades simplécticas. La 2-forma $\omega_M \oplus \omega_N$ en $M \times N$ es simpléctica.

Demostración. Veamos que es cerrada, esto es,

$$d(\omega_M \oplus \omega_N) = d(\omega_M + \omega_N) = \underbrace{d\omega_M}_{=0} + \underbrace{d\omega_N}_{=0} = 0 = 0.$$

Veamos que es no degenerada. Sea $(x, y) \in T(M \times N)$ donde $x_1 \in TM$ y $y_1 \in TN$

$$\omega((x_1, y_1), (x_2, x_2)) = 0 \quad \forall (x_2, y_2) \in TM \times TN \iff$$
$$\Leftrightarrow \ \omega_M(x_1, x_2) + \omega_N(y_1, y_2) = 0 \quad \forall x_2 \in TM \text{ y } \forall y_2 \in TN$$

Lema 4.11.2. $(M \times N, \omega_M \oplus \omega_N)$ es isomorfa, como variedad simpléctica, a $(N \times M, \omega_N \oplus \omega_M)$.

Demostración. El morfismo $\varphi : TM \times TN \to TN \times TM$ es un simplectomorfismo y transforma $\omega_M \oplus \omega_N$ en $\omega_N \oplus \omega_M$.

Lema 4.11.3. ^{VIII} El producto cartesiano de variedades simplécticas definido en 4.11.1 es asociativo.

Demostración. Sean (M_1, ω_1) , (M_2, ω_2) y (M_3, ω_3) variedades simplécticas, lo siguiente vale por ser producto cartesiano de variedades

$$(M_1 \times M_2) \times M_3 = M_1 \times (M_2 \times M_3),$$

y la validez de

$$(\omega_1 \oplus \omega_2) \oplus \omega_3 = \omega_1 \oplus (\omega_2 \oplus \omega_3),$$

se debe a la asociatividad de la suma de k-formas.

 $^{^{\}rm VIII}$ La forma simpléctica con la suma directa, a diferencia de la escrita por distintos autores como en [1] y [32] , sí es asociativa.

Estos resultados nos permiten la construcción de una variedad simpléctica ($M = \prod_{i=1}^{n} N_i, \Omega = \bigoplus_{i=1}^{n} \omega_{N_i}$) a partir de una *n*-úpla de variedades simplécticas, independientemente del orden de los términos.

Capítulo 5

Geometría de contacto y sistemas termodinámicos

Este capítulo consta de unas primeras secciones introductorias a la geometría de contacto, planteado en paralelo en términos de estructuras de contacto y 1-formas de contacto, como se hacen en Arnold [5] y Mrugala [25], [24] y [26] respectivamente. Luego se define el proceso de simplectificación de una variedad de contacto como herramienta clave para vincular lo expuesto en el capítulo anterior con lo que presentaremos en éste. Abordaremos a continuación variedades termodinámicas como las presenta Mrugala, y explotaremos lo ya construido para contrastar lo termodinámico (o de contacto) con lo mecánico (o simpléctico). La última parte de este capítulo es original de esta tesis.

5.1. Estructuras de contacto

Definición 5.1.1. Sea M una variedad de dimensión 2n + 1, una *estructura de contacto* A en M es un campo de hiperplanos $\{A_m\}$ de dimensión 2n donde $A = \{A_m \in T_m M, m \in M\}$ que satisfacen las siguientes propiedades:

- Para todo punto $m_0 \in M$ existen coordenadas locales $(x_1, ..., x_n, y_1, ..., y_n, z)$ tales que $m_0 = (0, ..., 0)$.
- Para cada entorno coordenado existe la 1-forma $\theta = x_i dy_i + dz$ (1-forma de contacto) que satisface:
 - i $Ker(\theta(x, y, z)) = A_{(x,y,z)}$.
 - ii $d\theta(x, y, z) \rfloor_{A_{(x,y,z)}}$ es simpléctico para todo (x, y, z), (que es cerrada es inmediato, por lo tanto basta con que sea de rango máximo).

Observaciones. • $A_{(x,y,z)} = Ker(dz)$

- Para todo punto $m \in M$, vale que $T_m M = \underset{dim \ 2n}{ker(\theta_m)} \oplus \underset{dim \ 1}{ker(d\theta_m)} = A_p \oplus \langle e_\theta \rangle.$
- Si θ es una forma de contacto global, entonces $\theta \wedge (d\theta)^n$ es una forma de volumen en M.

Nota. Si M es una variedad, A es una estructura de contacto en M y si $\theta_1, \theta_2 \in T_m^* M$ satisfacen $\theta_1 \rfloor A_m = \theta_2 \rfloor A_m = 0$ con $\theta_1 \neq 0 \neq \theta_2$, entonces $\theta_1 = \lambda \theta_2$ donde $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$.

Proposición 5.1.1. Sea A un campo de hiperplanos tangentes a M. Entonces A es una estructura de contacto si y sólo si

$$\theta \wedge (d\theta)^n \neq 0$$
 (no degeneración) (5.1)

para toda 1-forma de contacto local.

Demostración. \Rightarrow) Sea θ_m una 1-forma de contacto local en torno al punto $m \in M$, sabemos que $d\theta_m \rfloor_{A_m}$ es no degenerada $\Rightarrow (d\theta_m)^n \rfloor_{A_m} \neq 0$.

Además $\theta_m \rfloor_{ker(d\theta)}$ es no degenerada, pues vale la partición de TM que se muestra en la segunda observación de más arriba. Por lo tanto se concluye que $\theta_m \wedge (d\theta_m)^n \neq 0$

 \Leftarrow) Supongamos que localmente $A = Ker(\theta)$, basta con probar que

$$d\theta|_A$$
 es no degenerada $\Leftrightarrow \theta \wedge (d\theta)^n \neq 0.$

Tomemos una base local $\mathcal{B} = \{e_0, e_i, f_i\} \ i \in \{1, ..., n\}$ de $TM = ker(\theta) \oplus ker(\theta)^{\perp}$ donde $ker(\theta) = span\{e_i, f_i\} \ y \ ker(\theta)^{\perp} = span\{e_0\},$

$$(\theta \wedge (d\theta)^n)(e_0, e_i, f_i) = \underset{\neq 0}{\theta(e_0)} (d\theta)^n(e_i, f_i)$$

 $\therefore \theta \wedge (d\theta)^n \neq 0 \Leftrightarrow d\theta \rfloor_A \neq 0$, i.e. $d\theta \rfloor_A$ es no degenerado.

Lema 5.1.2. La 1-forma $\alpha = x_i dy_i + dz$ define una estructura de contacto en \mathbb{R}^{2n+1} . Demostración. Por la proposición anterior basta con calcular $\alpha \wedge (d\alpha)^n$, esto nos da

$$\alpha \wedge (d\alpha)^n = dx_1 \wedge \ldots \wedge dx_n \wedge dy_1 \wedge \ldots \wedge dy_n \wedge dz$$

que claramente es no degenerada en \mathbb{R}^{2n+1} , por lo tanto, por 5.1.1 es una estructura de contacto.

Observación. Notemos que una estructura de contacto no se corresponde con una única 1forma θ , pues si consideramos una función f no nula en M, la forma $f\theta$ también satisface la condición de la proposición anterior y da el mismo campo de hiperplanos. Algo parecido sucede si en el contexto de la geometría simpléctica multiplicamos la uno forma canónica θ por una función no nula. En geometría simpléctica se suele hablar de variedades simplécticas más que de estructuras simplécticas, y es por ello que es conveniente en esta instancia vincular dicho paralelismos entre lo simpléctico y lo de contacto.

Una forma alternativa de trabajar con estructuras de contacto tiene que ver con las llamadas variedades de contacto como se definen a continuación.

Definición 5.1.2. Un par (M, θ) , donde M es una variedad de dimensión $2m + 1 \ge \theta$ una 1-forma que satisface (5.1) se dice **variedad de contacto**.

Observación. Es claro que también la dupla (M, A) es una variedad de contacto, puesto que se está vinculando a la estructura de contacto con el núcleo de una 1-forma de contacto. De ahora en más utilizaremos ambas notaciones según sea más conveniente hablar de estructuras de contacto o 1-formas de contacto.

El siguiente resultado relaciona la definición (5.1.1) anterior con el planteo en términos de 1-formas de contacto.

Teorema 5.1.3. (Darboux) Sea (M, θ) una variedad de contacto de dimensión 2m + 1, entonces existen coordenadas canónicas locales donde

$$\theta = x_i dy_i + dz.$$

Es decir, considerar una variedad de contacto no dista de pensar en una variedad junto con una estructura de contacto. Veremos a continuación como este último planteo es más cómodo en algunas circunstancias.

Las siguientes observaciones son algunos resultados que se desprenden de las construcciones vistas hasta ahora.

Observación. (Orientabilidad) Sea (M, A) una variedad de contacto. Una forma de contacto global existe si y sólo si el fibrado de linea cociente TM/A es orientable. Como Aes también orientable, esto implica que M es orientable.

Observación. (No unicidad) Sea M una variedad y T^*M su fibrado cotangente. Existen dos variedades de contacto canónicas asociadas a M:

 $\mathbb{P}(T^*M) = \text{la proyectivización de } T^*M$ y

 $\mathbb{S}(T^*M) =$ el fibrado esférico cotangente.

Es decir, las variedades de contacto canónicas asociadas a una variedad M no es única.

5.2. Derivada covariante asociada a una 1-forma de contacto

Definición 5.2.1. Asociada a la forma de contacto θ , existe un único campo vectorial ξ definido por

$$i_{\xi}d\theta = 0$$
 y $i_{\xi}\theta = 1$

a dicho campo lo llamaremos **campo vectorial característico** (también conocido en la literatura como **campo de Reeb**) asociado a θ . (En coordenadas canónicas $\xi = \frac{\partial}{\partial z}$).

Las curvas integrales de este campo vectorial nos permiten introducir una estructura de fibrado vectorial en M, es decir, dos puntos pertenecen a la misma fibra si y sólo si pertenecen a la misma curva integral. Tomamos dichas fibras isomorfas al grupo aditivo de números reales y el fibrado es un fibrado principal cuya estructura depende de la elección de la forma de contacto θ . Dentro de dicho fibrado principal podemos interpretar a θ como una conexión, y entonces podemos descomponer cada campo vectorial en componentes horizontales y verticales X = vX + hX donde

$$vX = \theta(X)\xi$$
 y $hX = X - vX$.

De esto último se desprende que $\theta(hX) = 0$, y entonces hX cae en el hiperplano de contacto, mientras que vX es tangente a la fibra.

Asociada a la forma de contacto hay una derivada covariante D definida de la siguiente manera. Sea $f \in \mathfrak{F}(M)$, entonces

$$Df(X) = df(hX) \quad X \in \mathfrak{X}(M).$$
 (5.2)

Proposición 5.2.1. Una forma alternativa para expresar la derivada covariante es la siguiente

$$Df = df - (\xi f)\theta. \tag{5.3}$$

Demostración. Partiendo de la expresión X = vX + hX y del hecho de que Df(X) es lineal, por un lado tenemos que

$$Df(vX) = df(hvX) = 0 = df(vX) - (\xi f)\theta(vX),$$
(5.4)

esto último es cierto pues vX es paralelo a ξ , es decir, existe g tal que $vX = g\xi$ y entonces $df(g\xi) - (\xi f)\theta(g\xi) = g(\xi f - \xi f) = 0.$

Por otro lado

$$Df(hX) = df(hhX) = df(hX) = df(hX) - (\xi f)\theta(hX),$$
(5.5)

y la última igualdad se mantiene pues $\theta(hX) = 0$. Finalmente de (5.4) y (5.5) obtenemos lo que queríamos demostrar.

En coordenadas canónicas dicha derivada se expresa de la siguiente manera:

$$Df = \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i + \left(\frac{\partial f}{\partial y_i} - x_i \frac{\partial f}{\partial z}\right) dy_i.$$

Ahora estamos en condiciones de dar la siguiente definición utilizando la derivada covariante.

Definición 5.2.2. Llamaremos campo vectorial de contacto asociado con una función $f \in \mathfrak{F}(M)$ y lo notaremos X_f , al campo cuyas componentes vertical y horizontal están determinadas por las siguientes ecuaciones respectivamente,

$$i_{X_f} d\theta = -Df \tag{5.6}$$

$$i_{X_f}\theta = f. \tag{5.7}$$

En coordenadas canónicas X_f se expresa como sigue

$$X_{f} = \left(f - x_{i}\frac{\partial f}{\partial x_{i}}\right)\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial x_{i}}\frac{\partial}{\partial y_{i}} + \left(x_{i}\frac{\partial f}{\partial z} - \frac{\partial f}{\partial y_{i}}\right)\frac{\partial}{\partial x_{i}}$$

Observación. Notemos que las ecuaciones dicen que X_f es un campo horizontal sólo cuando f = 0.

Esta construcción del campo X_f se corresponde de alguna forma con la construcción de los campos Hamiltonianos en la formulación simpléctica de la mecánica clásica, ver 4.2.1.

5.3. Difeomorfismos y campos vectoriales de contacto

Las definiciones generales de estos objetos se puede enunciar naturalmente de la siguiente manera.

Definición 5.3.1. $\phi : (M, A) \to (N, B)$ es un **difeomorfismo de contacto** si y sólo si $\phi_*(A_m) = B_{\phi(m)}$.

Definición 5.3.2. Diremos que $X \in \mathfrak{X}(M, A)$ es un **campo vectorial de contacto** si para todo $m \in M$ existe un grupo uniparamétrico de difeomorfismos de contacto $\phi_t : (M, A) \to (N, B)$ definido en un entorno de m tal que $X(m) = \frac{d\phi_t(m)}{dt} \Big|_{t=0}$. Una clase de transformaciones de contacto de particular interés son las que van de la variedad M a la variedad M. Consideramos la variedad (M, θ) y un difeomorfismo $\phi: M \to M$, en este contexto la condición $\phi^*(\theta) = \mu \theta$ es equivalente a decir que ϕ es un difeomorfismo de contacto^I, por lo tanto, en lo que sigue donde estudiemos transformaciones de contacto en una variedad M adoptaremos este manejo de la información.

Así como en mecánica un Hamiltoniano genera un grupo uniparamétrico de una variedad N en sí misma, que deja invariante la estructura simpléctica, en el contexto de la geometría de contacto se puede construir algo similar utilizando la estructura de contacto.

En términos de la derivada covariante definida en (5.2) asociada a una 1-forma de contacto se tienen los siguientes resultados.

Teorema 5.3.1. Sea $f \in \mathfrak{F}(M)$, el campo vectorial X_f induce una transformación de contacto. En efecto X_f satisface que $L_{X_f}\theta = \tau_t\theta$ con $\tau_t = \xi f$.

Demostración. Utilizando la fórmula mágica de Cartan asociada con la derivada de Lie obtenemos lo buscado, en efecto,

$$L_{X_f}\theta = \underbrace{i_{X_f}(d\theta)}_{(5.6)} + d\underbrace{(i_{X_f}\theta)}_{(5.7)} = -Df + df\underbrace{=}_{(5.2.1)}(\xi f)\theta.$$

Teorema 5.3.2. Los campos vectoriales X_f forman un álgebra de Lie.

Demostración. Basta con ver que el corchete de dos campos de contacto es un campo de contacto, y eso se verifica pues

$$L_{[X_f, X_g]}\theta = [L_{X_f}, L_{X_g}]\theta = L_{X_f}((\xi f)\theta) - L_{X_g}((\xi f)\theta) = (L_{X_f}(\xi g) - L_{X_g}(\xi f))\theta.$$

En vista de los teoremas recién expuestos, podemos definir un análogo al corchete de Poisson, ahora en dimensión impar, para un par de funciones f y g como $h = \{f, g\} = \theta([X_f, X_g])$, y en coordenadas locales la expresión de dicho corchete es la siguiente:

$$\{f,g\} = \left(f\frac{\partial g}{\partial z} - g\frac{\partial f}{\partial z}\right) + p_i\left(\frac{\partial f}{\partial z}\frac{\partial g}{\partial x_i} - \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial y_i} - \frac{\partial f}{\partial y_i}\frac{\partial g}{\partial x_i}\right)$$
(5.8)

Observación. Nótese que si $\frac{\partial f}{\partial z} = 0$ y $\frac{\partial g}{\partial z} = 0$ se reduce al caso de un corchete de Poisson 2*n*-dimensional.

^IAsí podría definirse alternativamente a 5.3.1.

Proposición 5.3.3. Sean $f, g \in \mathfrak{F}(M)$, entonces las siguientes propiedades son válidas:

- $i) \ X_{f+g} = X_f + X_g,$
- $ii) X_{fg} = fX_g + gX_f fg\xi,$
- iii) $X_f(f) = f(\xi f).$

Demostración. i) Utilizando (5.6) y (5.7) y por linealidad tanto de la derivada covariante D como de i obtenemos lo siguiente

$$i_{X_{f+g}}d\theta = -D(f+g) = -Df - Dg = i_{X_f}d\theta + i_{X_g}d\theta = i_{X_f+X_g}d\theta$$
$$i_{X_{f+g}}\theta = f + g = i_{X_f}\theta + i_{X_g}\theta = i_{X_f+X_g}\theta$$

por lo tanto vale i).

ii) Utilizando nuevamente (5.6) y (5.7), si proponemos $X_f g = g X_f + f X_g - g f \xi$, veamos que satisface tanto

$$i_{X_fg}d\theta = i_{gX_f + fX_g - gf\xi}d\theta$$

 como

$$i_{X_fg}\theta = i_{gX_f + fX_g - gf\xi}\theta.$$

Efectivamente,

$$i_{gX_f+fX_g-gf\xi}d\theta = i_{fX_g}d\theta + i_{gX_f}d\theta + \overbrace{i_{gf\xi}d\theta}^{=0} = fi_{X_g}d\theta + gi_{X_f}d\theta$$
$$= -fDg - gDf = -Dfg = i_{X_{fg}}d\theta$$

у

$$i_{gX_f+fX_g-fg\xi}\theta = gi_{X_f}\theta + fi_{X_g} - i_{fg\xi}\theta = gf + fg - fg = fg,$$

por lo tanto vale *ii*).

iii)Sabemos que $\left[X_{f},X_{f}\right]=0,$ luego vale lo siguiente,

$$0 = i_{[X_f, X_f]}\theta = L_{X_f}(i_{X_f}\theta) - i_{X_f}(L_{X_f}\theta),$$

y por 5.3.1 junto con 5.7 se obtiene finalmente que vale iii), pues

$$L_{X_f}(f) = i_{X_f}((\xi f)\theta) = f(\xi f)$$

5.4. Subvariedades de Legendre

Definición 5.4.1. Se dice subvariedad de Legendre o Legendreana \mathcal{N} de una variedad de contacto (M, A) a una subvariedad integral maximal.

Observación. Las subvariedades de Legendre \mathcal{N} de una variedad de contacto de dimensión 2n+1 son subvariedades integrables de dimensión n. Son análogas a las subvariedades de Lagrange en mecánica, sólo que en vez de relacionarse con una 2-forma simpléctica están relacionadas con la 1-forma de contacto θ . Luego \mathcal{N} verifica que $\theta|_{\mathcal{N}} = 0$ y $dim(\mathcal{N}) = n$.

Ejemplo 5.4.1. Consideremos el caso en que $\theta = x_i dy_i + dz$ y sea f(y) una función dada, entonces en los puntos de la *n*-subvariedad de *M*

$$z = -f(y) \quad x = \frac{\partial f}{\partial y}$$

se tiene que $Ker(\theta(x, y, z))$ es tangente a esa subvariedad.

Observación. Se mostrará a continuación que todas las subvariedades de Legendre son como las mostradas en el ejemplo anterior.

Teorema 5.4.1. Para cualquier partición I+J en dos subconjuntos disjuntos del conjunto de índices (1, ..., n), y para cualquier función $S(x_I, y_J)$ de las n variables x_i , $i \in I$ y $j \in J$, las fórmulas

$$y_I = \frac{\partial S}{\partial x_I}$$
 $x_J = -\frac{\partial S}{\partial y_J}$ $z = S - x_I \frac{\partial S}{\partial x_I}$

definen una subvariedad de Legendre de \mathbb{R}^{2n+1} . Recíprocamente, toda subvariedad de Legendre de \mathbb{R}^{2n+1} está definida localmente por una de las posibles 2^n elecciones del subconjunto I.

Demostración. Ver Arnold [5, pág. 367].

El siguiente teorema muestra como los campos de contacto X_f asociados a una función f se relacionan con cantidades conservadas en la subvariedad de Legendre.

Teorema 5.4.2. Sea \mathcal{N} una subvariedad de Legendre. Entonces X_f es tangente a \mathcal{N} si y sólo si f se anula en \mathcal{N} ($\mathcal{N} \subset f^{-1}(0)$).

- Demostración. \Rightarrow) Como X_f es tangente a la subvariedad de Legendre entonces $i_{X_f}\theta = 0$ y como ya sabemos por (5.7) vale que $i_{X_f}\theta = f$, luego $\mathcal{N} \subset f^{-1}(0)$.
 - \Leftarrow) Recíprocamente, queremos probar que si $\mathcal{N} \subset f^{-1}(0)$ entonces $\theta(X_f) = 0$. Sea $\{X_1, ..., X_n\}$ una base de $T\mathcal{N}$, como \mathcal{N} es una subvariedad integral de θ por teorema de Frobenius tenemos que $\theta(X_i) \rfloor_{\mathcal{N}} = 0 \ \forall i$ y también $d\theta(X_i, X_j) \rfloor_{\mathcal{N}} = 0 \ \forall i, j$.

De (5.6) y (5.3) obtenemos que

$$d\theta(X_f, X_j) = (i_{X_f} d\theta)(X_j) = -Df(X_j) = -df(X_j) + \xi f\theta(X_j) = 0 \quad \forall j,$$

por lo tanto, para todos los campos $Y, Y_1, Y_2 \in \text{span}\{X_1, ..., X_n, X_f\}$ vale que $\theta(Y) = d\theta(Y_1, Y_2) = 0$. Resta ver que X_f es combinación lineal de $\{X_1, ..., X_n\}$.

Supongamos que el conjunto $X_1, ..., X_n, X_f$ es linealmente independiente, luego podemos extenderla a una base de $\{X_1, ..., X_n, X_f, Z_1, ..., Z_n\}$ de $T_m M$ donde $m \in \mathcal{N}$. Como θ es no degenerada entonces tiene que valer que

$$\theta \wedge (d\theta)^n (X_1, \dots, X_n, X_f, Z_1, \dots, Z_n) \neq 0,$$

pero esto no ocurre por lo expuesto anteriormente. Esta contradicción provino de suponer que el conjunto en cuestión es linealmente independiente. Por lo tanto, podemos afirmar que X_f es combinación lineal de $\{X_1, ..., X_n\}$ y así finaliza la demostración.

5.5. Variedades de contacto en termodinámica

Para comenzar a vincular lo expuesto hasta aquí con la termodinámica, procederemos siguiendo lo escrito por Mrugala en [24], [25] y [26], donde se sugiere la siguiente definición para un sistema termodinámico en términos de una subvariedad de Legendre de la variedad M (espacio de fase termodinámico). Siguiendo en la tesitura de lo escrito por Callen se propone el siguiente postulado, sugerido en [24, p. 170], para conectar lo geométrico con lo físico.

Observación. (Primera Ley de la Termodinámica) En esta instancia podríamos adoptar como principio lo siguiente: Todo sistema termodinámico en equilibrio^{II} está representado en un **espacio de fase** (M, θ) adecuado por una subvariedad de Legendre.

Es decir, en este esquema se puede plantear la termodinámica en términos geométricos y la condición $\theta \rfloor_{\mathcal{N}} = 0$ codifica la primera ley de la termodinámica. Más adelante se propondrá cómo introducir el resto de las leyes en este contexto.

Definición 5.5.1. Un sistema termodinámico sobre una variedad de contacto (M, θ) de dimensión 2m + 1, con m > 0 es una subvariedad $\mathcal{N} \subset M$ de Legendre.

Esto puede ser entendido de la siguiente forma en términos termodinámicos: Todo sistema termodinámico clásico tiene asociada una ecuación fundamental del tipo $U(y_i)$

 $^{^{\}rm II}{\rm Aquí}$ se refiere a los estados de equilibrio de un sistema termodinámico.

con $i \in \{1, ..., n\}$ donde U representa la energía interna y las variables y_i son variables independientes extensivas. De dicha ecuación fundamental es posible definir nuevas magnitudes intensivas x_i resolviendo $x_i = \partial_i U$, de esta forma identificamos localmente a My naturalmente se puede asociar una 1-forma θ a la primera ley de la termodinámica y así de esta construcción se tiene que \mathcal{N} es una subvariedad de Legendre de (M, θ) . En coordenadas locales $\mathcal{N} = \{(z, y_i, x_i) \in \mathbb{R}^{2n+1} \text{ tales que } z = U(y_i) \text{ y } x_i = \partial_i U\}$, y de una manera natural se tiene que $\theta|_{\mathcal{N}} = 0$.

Análogamente a lo presentado en el capítulo anterior sobre trayectorias en un sistema sin vínculos internos en términos de una subvariedad Lagrangiana, podemos definir en este contexto los procesos cuasi-estáticos de un sistema termodinámico, en términos de una subvariedad Legendreana de la siguiente manera.

Definición 5.5.2. Los procesos cuasi-estáticos del sistema son las curvas $\Gamma : I \to M$ con imagen en \mathcal{N} , i.e.

$$\Gamma'(t) \in T\mathcal{N} \ \forall t \in I.$$

Observación. Los procesos cuasi-estáticos están íntimamente relacionados con la subvariedad de Legendre, y ésta con un objeto termodinámico. A su vez, de lo expuesto sobre campos de contacto generados por una función, es posible asociar a los dichos procesos una función que juega un rol similar al de los Hamiltonianos en geometría simpléctica.

5.5.1. Ejemplos

De lo expuesto en esta sección se puede hacer una segunda lectura de los ejemplos vistos en el capítulo 3, sólo que esta vez miraremos únicamente la parte termodinámica en el contexto de la geometría de contacto. Es decir, consideraremos que la dinámica ocurre en una variedad de contacto y llamaremos **campo termodinámico** al campo de contacto asociado a la evolución de los observables termodinámicos, como se muestra a continuación en los ejemplos.

5.5.2. Carrito con fricción interna

De lo visto en 3.1.1, el campo termodinámico correspondiente a este ejemplo lo podemos expresar de la siguiente manera,

$$U' = \nu T' \qquad S' = \frac{\nu T'}{T} \qquad (-T)' = -\frac{\mu}{\nu}$$
(5.9)

El espacio de fase termodinámico de este ejemplo está caracterizado por los observables (U, S, -T) identificados con (z, y_1, x_1) respectivamente. Usando esta identificación tenemos que un campo de contacto asociado a una función f verifica la siguiente expresión

general

$$X_f = \left(f + T\frac{\partial f}{\partial (-T)}\right)\frac{\partial}{\partial U} + \frac{\partial f}{\partial (-T)}\frac{\partial}{\partial S} + \left(-T\frac{\partial f}{\partial U} - \frac{\partial f}{\partial S}\right)\frac{\partial}{\partial (-T)}$$

Si consideramos la función f que daremos a continuación es posible identificar a el campo expuesto en (5.9) con un campo de contacto asociado a

$$f(T,S) = \frac{\mu}{\nu} \left(S - \nu ln(T) \right),$$

en efecto, sus derivadas parciales son

$$\frac{\partial f}{\partial U} = 0 \quad \frac{\partial f}{\partial S} = \frac{\mu}{\nu} \quad \frac{\partial f}{\partial (-T)} = \frac{\mu}{T},$$

que reemplazadas en la expresión de más arriba nos da como resultado

$$X_f = \left(f + \mu, \frac{\mu}{T}, -\frac{\mu}{\nu}\right) = (U', S', -T'),$$

luego cuando f = 0 obtenemos finalmente que el campo X_f es igual al campo en (5.9).

Miremos un momento las funciones $f_1 = U - \nu T$ y $f_2 = S - \nu ln(\frac{T}{T_0}) + S_0$ cuyos ceros definen la subvariedad de Legendre del gas ideal que caracterizan el sistema termodinámico. Notaremos \mathcal{N}_C a dicha subvariedad.

Los campos de contacto asociados a estas dos funciones son

$$X_{f_1} = (f_1 + \nu T, \nu, -T) \quad X_{f_2} = \left(f_2 + \nu, \frac{\nu}{T}, -1\right)$$

y resulta sencillo ver que $X_f = \frac{\mu}{\nu} X_{f_2} = X_{\frac{\mu}{\nu} f_2}$ cuando $f = 0 = f_2$ y por teorema 5.4.2 expuesto previamente tenemos que $\mathcal{N} \subset f^{-1}(0) = f_2^{-1}(0)$.

5.5.3. Embolo vertical adiabático

El espacio de fase termodinámico de este ejemplo está caracterizado por los observables (U, S, V, -T, P) identificados con (z, y_1, y_2, x_1, x_2) respectivamente. Usando esta identificación tenemos que el campo de contacto es el siguiente

$$X_{f} = \left(f - P\frac{\partial f}{\partial P} + T\frac{\partial f}{\partial (-T)}\right)\frac{\partial}{\partial U} + \frac{\partial f}{\partial (-T)}\frac{\partial}{\partial S} + \frac{\partial f}{\partial P}\frac{\partial}{\partial V} + \left(-T\frac{\partial f}{\partial U} - \frac{\partial f}{\partial S}\right)\frac{\partial}{\partial (-T)} + \left(P\frac{\partial f}{\partial U} - \frac{\partial f}{\partial V}\right)\frac{\partial}{\partial P}$$
(5.10)

para cierta f, además el campo es tangente a una subvariedad de Legendre si y sólo si f = 0, por 5.4.2.

Consideremos por un momento los campos de contacto relacionados con las ecuaciones de estado del gas ideal que nos serán de utilidad para muchos de los ejemplos a continuación.

Etiquetemos de la siguiente manera a las funciones relacionadas con las ecuaciones de estado vistas en 3.1.2,

$$f_1 = PV - NRT \qquad f_2 = U - \alpha NRT \qquad f_3 = S - S_0 - NRln\left(\frac{T^{\alpha}V}{T_0^{\alpha}V_0}\right) \tag{5.11}$$

cuyos ceros proporcionan la subvariedad de Legendre que caracteriza al gas ideal. Notemos a dicha subvariedad \mathcal{N}_{GI} . Los campos de contacto asociados a (U', S', V', -T', P')son los siguientes

$$X_{f_1} = (0, NR, V, 0, -P) \qquad X_{f_2} = (U, \alpha NR, 0, -T, P)$$
$$X_{f_3} = \left(\alpha NR + S - S_0 - NR ln\left(\frac{T^{\alpha}V}{T_0^{\alpha}V_0}\right), \frac{\alpha NR}{T}, 0, -1, \frac{NR}{V}\right)$$
(5.12)

La función $f_4 = PV^{\gamma} - k$ cuyo campo de contacto es

$$X_{f_4} = (-k, 0, V^{\gamma}, 0, -\gamma P V^{\gamma - 1})$$
(5.13)

tiene particular relevancia en la descripción de este ejemplo, como veremos a continuación. Un campo termodinámico relacionado con el proceso descripto en el ejemplo es el siguiente

$$U' = \alpha NRT' \quad S' = 0 \quad V' = 1 \quad -T' = \frac{-1}{NR}(P'V + P) \quad P' = -\gamma kV^{-\gamma - 1}V'$$

y la función en el espacio de fase termodinámico que está relacionada con el campo termodinámico es $(s-s_0)^{-(1-\gamma)}$

$$f(V, S, P) = P - kV^{-\gamma} \left(e^{\frac{S-S_0}{NR}}\right)^{-(1-\gamma)}$$

sus derivadas parciales son

esto nos da

$$X_f = \left(-kV^{-\gamma}, 0, 1, \frac{(-1+\gamma)k}{NR}V^{\gamma}, -\gamma kV^{-\gamma-1}\right).$$

Veamos ahora la relación entre la función f con las funciones f_1 , f_2 , f_3 y f_4 . Para ver

que el campo X_f es tangente a la subvariedad de Legendre \mathcal{N}_{GI} que identifica al gas ideal, por el teorema 5.4.2, basta con ver que $\mathcal{N}_{GI} \subset f^{-1}(0)$, donde $\mathcal{N}_{GI} = f_1^{-1}(0) \cap f_2^{-1}(0) \cap f_3^{-1}(0)$. Ésto es fácil de verificar utilizando las ecuaciones de estado.

5.5.4. Émbolo vertical isotérmico

Como en los ejemplos anteriores el espacio de fase termodinámico es el mismo y las coordenadas están expuestas en el mismo orden. Para este ejemplo particular, un campo termodinámico relacionado con el proceso descripto es el siguiente

$$U' = 0$$
 $S' = \frac{NR}{V}$ $V' = 1$ $-T' = 0$ $P' = \frac{-NRT}{V^2}$

La función, en el espacio de fase termodinámico, que está relacionada con dicho campo termodinámico es

$$f(V, P, T) = \left(P - \frac{NRT}{V}\right),$$

sus derivadas parciales son

$$\frac{\partial f}{\partial U} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial S} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial V} = \frac{NRT}{V^2}, \quad \frac{\partial f}{\partial (-T)} = \frac{NR}{V}, \quad \frac{\partial f}{\partial P} = 1,$$

y por lo tanto el campo de contacto asociado a f es

$$X_f = \left(0, \frac{NR}{V}, 1, 0, \frac{-NRT}{V^2}\right).$$

Es claro que $\mathcal{N}_{GI} \subset f^{-1}(0)$, pues $f = 0 = f_2$.

5.5.5. Émbolo vertical moviéndose con "velocidad constante"

Si bien en el ejemplo que se presentó en 3.3.2 se habla de un proceso que ocurre a velocidad constante, en termodinámica no hay un tiempo definido y como en esta instancia sólo nos incumbe la descripción termodinámica, resulta razonable incorporar la condición de presión constante a las ya conocidas ecuaciones de estado del gas ideal. De este modo estamos considerando cuatro ecuaciones en un espacio donde hay sólo cinco grados de libertad y por lo tanto tenemos definida la trayectoria sobre la subvariedad de Legendre y el acoplamiento con la parte mecánica proporcionaría, bajo esta perspectiva, sólo la información del tiempo que en este momento estamos obviando.

Un campo termodinámico relacionado con el proceso descripto en tal ejemplo es el siguiente

$$U' = \alpha NRT' \quad S' = \frac{\alpha NRT'}{T} + \frac{NRV'}{V} \quad V' = V \quad -T' = -\frac{(PV' + P'V)}{NR} \quad P' = 0$$

La función en el espacio de fase termodinámico que está relacionada con el campo termodinámico es

$$f(U, V, P, -T) = f_1(V, -T, P) + f_2(U, -T)$$

esto último es fácil de verificar utilizando las expresiones de (5.12).

5.5.6. Émbolo vertical con disipación térmica por conducción

Un campo termodinámico relacionado con el proceso descripto que se desprende de los $C_{\mathcal{K}}$ expuestos en 4.6.6 es el siguiente

$$U' = \alpha NRT \quad S' = \frac{\alpha NRT'}{T} + \frac{NRV'}{V} \quad V' = \lambda_2$$
$$-T' = kT \quad P' = \frac{NRT' - PV'}{V}$$

La función en el espacio de fase termodinámico que está relacionada con el campo termodinámico es

$$f(U, V, P, T) = -kU + T\left(\alpha NRk - \frac{NRA\dot{q}}{V}\right) + PA\dot{q}$$
$$\frac{\partial f}{\partial U} = -k, \quad \frac{\partial f}{\partial S} = 0 \quad \frac{\partial f}{\partial V} =, \quad \frac{\partial f}{\partial T} = \alpha NRk - \frac{NRA\dot{q}}{V}, \quad \frac{\partial f}{\partial P} = A\dot{q}.$$

Aquí para hallar f se procedió utilizando la propiedad $X_{\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2} = \lambda_1 X_{f_1} + \lambda_2 X_{f_2}$ donde se utilizó como f_1 a la función del caso del émbolo isotérmico, se le adicionó $f_2 = -k(U - \alpha NRT)$, que está relacionada con un proceso a volumen constante con disipación térmica por conducción, y finalmente se dedujo que $\lambda_1 = 1$ y $\lambda_2 = A\dot{q}$. Puede verificarse fácilmente que

$$X_{f_2} = -\alpha k N R T \frac{\partial}{\partial U} - k \alpha k N R \frac{\partial}{\partial S} - k P \frac{\partial}{\partial P} - k T \frac{\partial}{\partial T}.$$

5.6. Simplectificación

Definición 5.6.1. Sea (M, A) una variedad de contacto, la simplectificación de (M, A) se define por

$$\mathcal{S}(M,A) = \bigcup_{m \in M} \{\theta_m \in T_m^*M \mid Ker(\theta_m) = A_m\}$$

En coordenadas locales esto es,

$$\mathcal{S}(M,A) = \{\lambda x_i dy_i + \lambda dz \mid \lambda \in \mathbb{R} - \{0\}\}.$$

Definiendo para $i = 1, ..., m \ \lambda \neq 0$

 $q_i = y_i, \quad q_0 = z, \quad p_i = \lambda x_i, \quad \mathbf{y} \quad p_0 = \lambda,$

luego (q, p) son coordenadas locales de $\mathcal{S}(M, A)$.

La 1-forma $\theta_A = p_i dq^i$ define una estructura simpléctica exacta en el dominio coordenado de la siguiente forma $\Omega_A = d\theta_A$.

Lema 5.6.1. θ_A está intrínsecamente definida en $\mathcal{S}(M, A)$ por $\theta_A(V_{q_m}) = \theta_m(T\pi_A V_{q_m})$. Demostración. Ver Arnold [5, pág. 357].

5.6.1. Simplectificación de difeomorfismos y campos vectoriales de contacto

Definición 5.6.2. Sea $\phi : (M, A) \to (N, B)$ un difeomorfismo de contacto. La simplectificación se define por $S\phi(q_m)(V_{q_m}) = \theta_m T_{\phi(m)}\phi^{-1}(V_{\phi(m)}).$

Lema 5.6.2. $(S\phi)^*\theta_B = \theta_A$

Demostración. Ver Arnold [5, pág 360].

Corolario. $(\mathcal{S}\phi)^*\Omega_B = \Omega_A$

La proyección $\pi_A : \mathcal{S}(M, A) \to M$ es un fibrado principal con grupo $\mathbb{R} - \{0\}$ y la simplectificación $\mathcal{S}\phi$ de ϕ es un mapeo de fibrados principales, esto es, $\mathcal{S}\phi(\lambda\theta_m) = \lambda\phi(\theta_m) \ \forall \theta_m \in \mathcal{S}(M, A).$

Teorema 5.6.3. Sea $\tilde{\phi}$ un simplectomorfismo tal que $\tilde{\phi}(\lambda\theta_m) = \lambda\tilde{\phi}(\theta_m)$, entonces el mapeo $\phi: (M, A) \to (N, B)$ dado por $\phi(m) := \pi_B \tilde{\phi}(\theta_m)$ es un difeomorfismo de contacto bien definido y $\tilde{\phi} = \mu \mathcal{S} \phi$ para algún $\mu \in \mathbb{R}$.

Demostración. Ver Arnold [5, pág. 361].

La simplectificación de un campo vectorial de contacto $X \in \mathfrak{X}(M, A)$ dado localmente por $X(m) = \frac{d\phi_t}{dt} \rfloor_{t=0}$, es el campo vectorial $\mathcal{S}X$ dado por $\mathcal{S}X(m) = \frac{d\mathcal{S}\phi_t}{dt} \rfloor_{t=0}$.

Lema 5.6.4. SX es un campo Hamiltoniano con Hamiltoniano $H : S(M, A) \to \mathbb{R}$ que satisface la siguiente propiedad

$$H(\lambda x) = \lambda H(x) \tag{5.14}$$

Recíprocamente, un campo vectorial X_H donde H satisface (5.14) se proyecta en un campo vectorial de contacto $X_K = \pi_{A^*} X_H$

Lema 5.6.5. Sean $X, Y \in \mathfrak{X}(M)$ entonces $\mathcal{S}[X, Y] = [\mathcal{S}X, \mathcal{S}Y]$.

5.7. Hamiltonianos de contacto

Sea (M, A) dada por una 1-forma $\theta \in \Omega(M)$. Esto es, por definición, que para todo $m \in M$ vale $Ker(\theta(m)) = A_m$.

Observación. Localmente θ se expresa de la siguiente forma

$$\theta = x_i dy_i + dz.$$

El θ -embedding es por definición

$$j_{\theta}: M \to \mathcal{S}(M, A)$$

$$_{m \to Ker(\theta(m))}$$
(5.15)

El Hamiltoniano de contacto de un campo vectorial de contacto $X \in \mathfrak{X}(M, A)$ se define como una función $K: M \to \mathbb{R}$ de la siguiente manera

$$K(m) = H(\theta(m))$$

donde H es el Hamiltoniano homogéneo de $\mathcal{S}X$.

Lema 5.7.1. El Hamiltoniano de contacto K de un campo vectorial X en (M, A), donde A está definido por $A_m = Ker(\theta(m))$, está dado por

$$K(m) = \theta(X(m))$$

5.7.1. Coordenadas locales

 $\mathcal{S}M$ tiene coordenadas locales (p, q, p_0, q_0) , $\theta = xdy + dz$ y el j_{θ} -embedding está dado por $j_{\theta}(x, y, z) = (p, q, p_0, q_0)$ donde $p = x, q = y, p_0 = 1$ y $q_0 = z$. Para un K(x, y, z) dado el Hamiltoniano en $\mathcal{S}(M, A)$ es

$$H(p, q, p_0, q_0) = p_0 K\left(\frac{p}{p_0}, q, q_0\right)$$

y de las ecuaciones Hamiltonianas

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p_0} = -\frac{\partial H}{\partial q_0}, \quad \dot{q_0} = \frac{\partial H}{\partial p_0}$$

se obtiene

$$\dot{p} = -p_0 \frac{\partial K}{\partial y}, \quad \dot{q} = \frac{\partial K}{\partial x}, \quad \dot{p_0} = -p_0 \frac{\partial K}{\partial z}, \quad \dot{q_0} = K - x \frac{\partial K}{\partial x}$$

Luego para obtener X_K consideremos el caso cuando $p_0 = 1$, esto nos da

$$\dot{x} = x \frac{\partial K}{\partial z} - \frac{\partial K}{\partial y}, \quad \dot{y} = \frac{\partial K}{\partial x}, \quad \dot{p}_0 = -\frac{\partial K}{\partial z}, \quad \dot{z} = K - x \frac{\partial K}{\partial x}$$
 (5.16)

A continuación se expondrá la simplificación de alguno de los ejemplos que estuvimos exhibiendo hasta el momento.

Ejemplo 5.7.1. (Carrito con fricción) Simplectificando la variedad $(M, \theta) \equiv ((-T, S, U), -T dS + dU)$ obtenemos un espacio simpléctico de dimensión 4 donde las coordenadas canónicas de SM se identifican como sigue

$$(p_1, q_1, p_0, q_0) \equiv (\lambda(-T), S, \lambda, U)$$

y la forma simpléctica en coordenadas canónicas es

$$dp_1 \wedge dq_1 + dp_0 \wedge dq_0 = d(\lambda(-T)) \wedge dS + d\lambda \wedge dU.$$

Simplectificando el Hamiltoniano de contacto que en este caso es $K(\frac{p_1}{p_0}, q_1, q_0) = f(-T, S, U)$ obtenemos lo siguiente

$$H(p_1, q_1, p_0, q_0) = \lambda f(-T, S, U) = \lambda \frac{\mu}{\nu} (S - \nu ln(T)) \text{ donde } -T = \frac{p_1}{p_0}.$$

Luego, si f = 0, el campo Hamiltoniano es

$$\begin{split} (p_1', q_1', p_0', q_0') &= \left((\lambda(-T))', S', \lambda', U' \right) \\ &= \left(-\lambda \frac{\partial f}{\partial S}, \frac{\partial f}{\partial (-T)}, -\lambda \frac{\partial f}{\partial U}, f + T \frac{\partial f}{\partial (-T)} \right) \\ &= \left(-\lambda \frac{\mu}{\nu}, \frac{\mu}{T}, 0, \mu \right) \end{split}$$

Finalmente utilizando las ecuaciones de (5.16) con la información ya expuesta, arribamos a

$$((-T)', S', \lambda', U') = \left(-\frac{\mu}{\nu}, \frac{\mu}{T}, 0, \mu\right).$$

Si miramos (5.9) podemos apreciar la correspondencia existente entre este campo Hamiltoniano y el campo de contacto. Notemos que dado que $\partial_U f = 0$ el campo resulta igual para todo λ , no fue necesario restringir $\lambda = 1$ para observar lo anterior.

5.8. Variedades simplécticas en termodinámica

De manera análoga a lo visto en la descripción *a la Tulczyjew* de un sistema dinámico mecánico, se puede identificar un sistema termodinámico clásico con la terna $(SM, d_T\omega_T, (TN)^{\perp})$ como veremos a continuación.

Consideremos el siguiente diagrama conmutativo:



donde $(\mathcal{S}M, \omega_T)$ es la simplectificación de la variedad de contacto (M, θ) que identifica al espacio de fase termodinámico. Además del esquema anterior tenemos el siguiente esquema que proviene del proceso de simplectificación de la variedad M,

$$\mathcal{N} \stackrel{i_{\mathcal{N}}}{\hookrightarrow} M \stackrel{i_{M}}{\hookrightarrow} \mathcal{S}M \stackrel{\Pi_{\mathcal{M}}}{\to} M \stackrel{j_{\mathcal{N}}}{\to} \mathcal{N}$$

donde $j_{\mathcal{N}} \circ i_{\mathcal{N}} = id_{\mathcal{N}}$. De ahora en más haremos el siguiente abuso de notación $(i_M \circ i_{\mathcal{N}})(\mathcal{N}) = i_{\mathcal{N}}(\mathcal{N}) = \mathcal{N}$.

Notaremos en coordenadas locales de la siguiente forma:

$$\begin{split} \mathcal{S}M &\equiv (x_i, x_0, \lambda y_i, \lambda), & \omega_T = d\lambda \wedge dx_0 + y_i d\lambda \wedge dx_i + \lambda dy_i \wedge dx_i \\ &= d(\lambda \theta), \\ T\mathcal{S}M &\equiv (x_i, x_0, \lambda y_i, \lambda, \dot{x_i}, \dot{x_0}, \dot{\lambda} \dot{y_i}, \dot{\lambda}), \quad d_T \omega_T = d\dot{x_i} \wedge d(\lambda y_i) + d\dot{x_0} \wedge d\lambda + dx_i \wedge d(\dot{\lambda} \dot{y_i}) \\ &+ dx_0 \wedge d\dot{\lambda}, \\ T^*\mathcal{S}M &\equiv (x_i, x_0, \lambda y_i, \lambda, u_i, u_0, v_i, v_0), \quad \omega_{SM} = du_i \wedge dx_i + du_0 \wedge dx_0 + dv_i \wedge d(\lambda y_i) \\ &+ dv_0 \wedge d\lambda. \end{split}$$

Lema 5.8.1. \mathcal{N} es una subvariedad de $\mathcal{S}M$.

Demostración. Se puede ver esto claramente localmente. Ya sabemos que \mathcal{N} es una subvariedad de M donde \mathcal{N} esta dado localmente por n + 1 ecuaciones. Luego en el espacio simplectificado para identificar la nueva subvariedad se añade a las n + 1 ecuaciones la condición $\lambda = 1$.

Proposición 5.8.2. \mathcal{N} y $T\mathcal{N}$ son subvariedades isotrópicas de $(\mathcal{S}M, \omega_T)$ y $(T\mathcal{S}M, d_T\omega_T)$, respectivamente.

Demostración. Consideremos la forma simpléctica

$$\omega_T = d(\lambda\theta) = (d\lambda \wedge \theta) + (\lambda d\theta).$$

Sabemos que

$$\theta|_{\mathcal{N}} = 0 \Leftrightarrow \theta(v) = 0 \ \forall v \in T\mathcal{N}$$

pues \mathcal{N} en una subvariedad de Legendre de (M, θ) , y esto implica que

$$d\theta(v_1, v_2) = 0$$

y que

$$(d\lambda \wedge \theta)(v_1, v_2) = 0, \quad \forall (v_1, v_2) \in T\mathcal{N} \times T\mathcal{N}$$

Por lo tanto podemos concluir que

$$\omega_T \rfloor_N = (d\lambda \wedge \theta) \rfloor_N + (\lambda d\theta) \rfloor_N = 0,$$

i.e., \mathcal{N} es una subvariedad isotrópica de $\mathcal{S}M$. Por argumentos similares vale que

$$d_T \omega_T |_{T\mathcal{N}} = 0,$$

en efecto,

$$(i_T d\lambda \wedge \theta) \rfloor_{T\mathcal{N}} = 0$$
 and $i_T d\theta \rfloor_{T\mathcal{N}} = 0.$

Observación. \mathcal{N} no es una subvariedad co-isotrópica pues $dim(\mathcal{N}) < \frac{1}{2}dim(\mathcal{S}M)$, lo mismo ocurre con $T\mathcal{N} \subset T\mathcal{S}M$

De la proposición previa y de la observación anterior se obtiene este resultado.

Corolario. Sea \mathcal{N} una subvariedad de Legendre de (M, θ) , entonces $T_n \mathcal{N} \subsetneq (T_n \mathcal{N})^{\perp}$ para todo $n \in \mathcal{N}$ con respecto a ω_T , $y T_{v_n} T \mathcal{N} \subsetneq (T_{v_n} T \mathcal{N})^{\perp}$ para todo $v_n \in T \mathcal{N}$ con respecto a $d_T \omega_T$.

Como ya se mostró en 4.9.1, $(T\mathcal{N})^{\perp}$ es una subvariedad Lagrangiana de la variedad simpléctica $(T\mathcal{S}M, d_T\omega_T)$, si consideramos la función generatriz nula.

Ahora replicando lo expuesto en 4.9, estamos en condiciones de proporcionar una nueva lectura de lo construido hasta aquí. Como ya mencionamos en 5.5.1, podemos identificar a un sistema termodinámico como una subvariedad de Legendre \mathcal{N} de (M, θ) , luego ésta introduce naturalmente una subvariedad isotrópica $T\mathcal{N}$ en la variedad simpléctica $(T\mathcal{S}M, d_T\omega_T)$, y es en esta variedad donde podemos identificar a la subvariedad $(T\mathcal{N})^{\perp}$ como la subvariedad Lagrangeana asociada a la Legendreana \mathcal{N} , es decir, es posible vincular a los procesos cuasi-estáticos 5.5.2 con las trayectorias de un sistema dinámico 4.9.3.

En términos de sistemas dinámicos podríamos dar la siguiente definición de trayectoria termodinámica,

Definición 5.8.1. Diremos que Γ es una trayectoria termodinámica si y sólo si

$$\Gamma'(t) \in (T\mathcal{N})^{\perp}, \ \forall t \in I.$$

Observación. En este contexto, con esta interpretación, resulta evidente que el Hamiltoniano es singular e imposibilita una construcción Lagrangeana de un sistema termodinámico.

O sea, podemos ver a un sistema termodinámico \mathcal{N} definido en la variedad de contacto (M, θ) como un sistema mecánico $(T\mathcal{N})^{\perp}$ definido en la variedad simpléctica $(T\mathcal{S}M, d_T\omega_T)$.

Ejemplo 5.8.1. (Carrito con fricción) En el ejemplo del carrito con fricción la subvariedad Lagrangeana $(T\mathcal{N})^{\perp}$, que verifica que $T\mathcal{N} \subset (T\mathcal{N})^{\perp}$, donde $dim(T\mathcal{N}) = 2$, se identifica en coordenadas canónicas con

$$\{(\lambda(-T), S, \lambda, U; -(\lambda T)', S', \lambda', U') \in TSM \text{ tales que } U = \nu T, \\ U' = \nu T', \ S = \nu \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) + S_0, \ S' = \frac{\nu T'}{T}\},$$

es decir, $(T\mathcal{N})^{\perp}$ es $T\mathcal{N}$ más dos grados de libertad asociados a la variable λ construida por simplectificación.

5.8.1. Sistemas termodinámicos restringidos (con procesos distinguidos)

Con lo expuesto hasta aquí se puede apreciar que estamos en igualdad de contexto, geométricamente, que en (4.9), es decir, tenemos una variedad simpléctica que aloja al sistema dinámico de interés, caracterizado por una subvariedad de Lagrange. En lo que sigue procederemos de manera análoga al capítulo anterior, enriqueciendo la descripción de los sistemas termodinámicos, considerando vínculos externos o procesos distinguidos. Notemos también que la relación de equivalencia definida en 4.10.1 es compatible con lo construido hasta aquí, pues los procesos cuasi-estáticos termodinámicos (o trayectorias termodinámicas (5.8.1)) y las trayectorias solución de un sistema mecánicos 4.9.3 son esencialmente idénticas.

Toda variedad $\mathcal{D} \subset TM$ define una subclase de procesos: la dada por las curvas cuyas velocidades pertenecen \mathcal{D} . Esto motiva la siguiente definición.

Definición 5.8.2. Un sistema termodinámico restringido (con procesos distinguidos) es un par $(\mathcal{N}, \mathcal{D})$ de subvariedades de (M, θ) y del tangente TM respectivamente, donde \mathcal{N} es una subvariedad de Lagrange. Sus procesos cuasi-estáticos (restringidos) son curvas $\Gamma: I \to M$ tales que

$$\Gamma'(t) \in T\mathcal{N} \cap \mathcal{D}.\tag{5.17}$$

Por supuesto, un sistema termodinámico \mathcal{N} (sin procesos distinguidos) puede verse como un caso particular de estos sistemas. Basta considerar el par (\mathcal{N}, TM) o el par $(\mathcal{N}, T\mathcal{N})$.

Por otro lado, a los sistemas termodinámicos restringidos (con procesos distinguidos) los podemos ver como sistemas mecánicos con vínculos externos, definidos sobre la variedad simpléctica $(\mathcal{S}M, \omega_T)$. De hecho, las trayectorias de la terna $((T\mathcal{N})^{\perp}, 0, \mathcal{D})$ coinciden exactamente con los procesos cuasi-estáticos del par $(\mathcal{N}, \mathcal{D})$, dados por (5.17), ya que $T\mathcal{N} \subset (T\mathcal{N})^{\perp}, T\mathcal{N} \cap (T\mathcal{N})^{\perp} = T\mathcal{N}$. Es claro que

$$((T\mathcal{N})^{\perp}, 0, \mathcal{D}) \sim ((T\mathcal{N})^{\perp}, (T\mathcal{N})^{\perp}, \mathcal{D}).$$

Asimismo, un sistema termodinámico \mathcal{N} sin restricciones (sin procesos distinguidos) puede describirse a partir de cualquiera de las ternas equivalentes

$$((T\mathcal{N})^{\perp}, 0, T(\mathcal{S}M)) \sim ((T\mathcal{N})^{\perp}, 0, TM) \sim ((T\mathcal{N})^{\perp}, 0, T\mathcal{N}) \sim ((T\mathcal{N})^{\perp}, (T\mathcal{N})^{\perp}, T\mathcal{N})$$

que es el caso que se mostró anteriormente.

Ejemplo 5.8.2. Consideremos nuevamente el gas ideal. Si nos concentramos en procesos en los cuales S se mantiene constante, tendremos un par $(\mathcal{N}, \mathcal{D})$ con

$$\mathcal{D} = \{ (U, S, V, T, P, \dot{U}, \dot{S}, \dot{V}, \dot{T}, \dot{P}) \in M : \dot{S} = 0 \}.$$

Tales procesos serán curvas $\Gamma : t \to (U(t), S(t), V(t), T(t), P(t))$ tales que, para algún c > 0,

$$U(t) = \alpha NRT(t), \ S(t) = c, \ P(t)V(t) = NRT(t) \ \text{y} \quad (V(t))^{1/\alpha} = \frac{\alpha}{\beta} NRT(t)e^{\frac{c}{\alpha}NR}$$

5.9. Comentarios globales de las variedades de contacto en termodinámica

Hasta aquí hemos considerados la descripción de los sistemas en coordenadas y localmente. En esta sección la intención es responder algunas preguntas que surgen de pensar en una descripción geométrica global de los sistemas termodinámicos en términos de variedades de contacto. Será clave en esta instancia traer a flote parte de la teoría de la termodinámica presentada en el capítulo 2. En la subsección siguiente consideraremos, como se consideró en [26], sólo una variedad de contacto, donde la 1-forma de contacto se relaciona con la primera ley de la termodinámica.

5.9.1. Sistemas estándar

Definición 5.9.1. Toda variedad de contacto (M, θ) tiene un atlas $A = \{(\varphi_{\alpha}, V_{\alpha})\}$ tal que $(\varphi_{\alpha}^{-1})^* \theta = x_i dy_i + dz$, donde $x_1, ..., x_m, y_1, ..., y_m, z$ denotan las componentes de φ_{α} . A tales atlas los llamaremos **canónicos**.

Definición 5.9.2. Diremos que una variedad de Legendre $\mathcal{N} \subset M$ define un sistema termodinámico estándar si existe un atlas canónico A de M tal que, para todo α , la función

$$(y_1, \dots, y_m)|_{\mathcal{N} \cap V_\alpha} : \mathcal{N} \cap V_\alpha \to \mathbb{R}^m \tag{5.18}$$

es inyectiva y llamemos $I_{\alpha} \subset \mathbb{R}^m$ a su imagen.

Por el teorema 5.4.1, existe una única función $\Phi_{\alpha} : I_{\alpha} \to \mathbb{R}$ tal que los puntos de $\varphi_{\alpha}(\mathcal{N} \cap V_{\alpha})$ pueden describirse como las 2m + 1-uplas $(z, y_1, ..., y_m, x_1, ..., x_m)$ tales que

$$(y_1, ..., y_m) \in I_{\alpha}, \ z = \Phi_{\alpha}(y_1, ..., y_m) \ y \ x_i = \partial_i \Phi_{\alpha}(y_1, ..., y_m).$$

Definición 5.9.3. Llamaremos **energía interna** de un sistema termodinámico estándar \mathcal{N} a la función Φ_{α} , cuando exista una carta local canónica en la cual Φ_{α} sea una función homogénea de orden cero en las variables canónicas $y_1, ..., y_m$.

Definición 5.9.4. Llamaremos variables extensivas de un sistema termodinámico estándar a las m variables canónicas $y_1, ..., y_m$, donde Φ_{α} es homogénea de orden 1, y llamaremos variables intensivas a sus conjugadas según θ .

Notemos que, si llamamos $E_{\alpha, \mathcal{N}}$ al difeomorfismo $\mathcal{N} \cap V_{\alpha} \to I_{\alpha}$ definido por (5.18), luego

$$\Phi_{\alpha} = z|_{\mathcal{N} \cap V_{\alpha}} \circ E_{\alpha, \mathcal{N}}^{-1}.$$

A un atlas canónico como el de arriba lo llamaremos **atlas** \mathcal{N} -estándar, con el cual estamos describiendo los estados de equilibrio de un sistema termodinámico.

Ejemplo 5.9.1. Consideremos la variedad $M = \mathbb{R} \times (\mathbb{R}^+)^4$ (de dimensión 5) y sus coordenadas globales naturales, dadas por la inclusión $i : M \hookrightarrow \mathbb{R}^5$, es decir, las coordenadas definidas por la carta global (i, M). Denotemos por (U, S, V, T, P) a las componentes de i y también a los puntos de M. Es claro que la 1-forma

$$\theta = dU - TdS + PdV$$

define una estructura de contacto sobre M. También es claro que la carta (i, M) es una carta canónica para (M, θ) . Si definimos \mathcal{N} como los puntos $(U, S, V, T, P) \in M$ tales que

$$U - \Phi(S, V) = 0, \ T = \frac{\partial \Phi}{\partial S}(S, V) \ y \ P = \frac{\partial \Phi}{\partial V}(S, V)$$

para cierta función $\Phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ tendremos que \mathcal{N} es una subvariedad de Legendre de (M, θ) y que el atlas $A = \{(i, M)\}$ es N -estándar. De hecho, la función

$$(S, V)|_{\mathcal{N}} : \mathcal{N} \to \mathbb{R}^2$$

es inyectiva. Luego, \mathcal{N} define un sistema termodinámico estándar. Por otro lado, como la imagen de $(S, V)|_{\mathcal{N}}$ es $I = (\mathbb{R}^+)^2$ y la inversa del difeomorfismo $E : \mathcal{N} \to I$, asociado a la carta (i, M), está dada por

$$E^{-1}(S,V) = (\Phi(S,V), S, V, \frac{\partial \Phi}{\partial S}(S,V), \frac{\partial \Phi}{\partial V}(S,V)),$$

se sigue que $U \circ E^{-1}(S, V) = \Phi(S, V)$. Es decir, Φ es exactamente la energía interna del sistema respecto de la carta (i, M).

Los procesos cuasi-estáticos serán curvas

$$\Gamma: t \to (U(t), S(t), V(t), T(t), P(t))$$

$$_{I \to M}$$

tales que

$$U(t) - \Phi(S(t), V(t)) = 0, \ T(t) = \frac{\partial \Phi}{\partial S}(S(t), V(t)) \quad \mathbf{y} \quad P(t) = \frac{\partial \Phi}{\partial V}(S(t), V(t)).$$

Ejemplo 5.9.2. Si en el ejemplo anterior tomamos

$$\Phi(S,V) = \beta (V e^{S/NR})^{1/\alpha},$$

para ciertas constantes positivas α , β , N y R, tendremos que \mathcal{N} es un gas ideal. Se verifica que dos ecuaciones que definen \mathcal{N} son

$$U = \alpha NRT$$
 y $PV = NRT$.

5.9.2. Existencia de una uno forma relacionada con la energía interna U

Presentaremos a continuación un resultado que muestra la existencia de una 1-forma que relacionaremos con la energía interna U sobre una subvariedad de Legendre \mathcal{N} , representada localmente por una función generatriz Φ_i en el abierto U_i , con i = 1, 2. **Proposición 5.9.1.** Dadas dos representaciones locales canónicas en cercanías de un punto $m \in \mathcal{N} \subset \mathcal{M}$, $(\varphi_1, \overline{U}_1 \equiv (\mathsf{z}, \mathsf{y}_i, \mathsf{x}_i)) \ y \ (\varphi_2, \overline{U}_2 \equiv (Z, Y_i, X_i)) \ con \ i \in 1, ..., m$, donde M es una variedad de contacto de dimensión 2m + 1, $y \ \mathcal{N}$ un sistema termodinámico estándar. Un cambio de coordenadas $\varphi_2^{-1} \circ \varphi_1 : U_1 \to U_2$, que preserva la 1forma de contacto $\theta = \mathsf{x}_i d\mathsf{y}_i + d\mathsf{z}$, restringido a una subvariedad de Legendre \mathcal{N} , tal que las funciones generatrices de la subvariedad, $\Phi_1 \ y \ \Phi_2$, son homogéneas de grado 1 en las variables extensivas y de clase C^2 , verifica que $\partial_{\mathsf{y}_i} \Phi_2 = \mathsf{x}_i = \partial_{\mathsf{y}_i} \Phi_1$.

Demostración. Notación: Notaremos de la siguiente manera las derivadas parciales de una función $F(\bar{\mathbf{x}}_0, \bar{\mathbf{x}}_j, \bar{\mathbf{y}}_j) : V \subset \mathbb{R}^{2n+1} \to \mathbb{R}, \ \partial_{\bar{\mathbf{z}}} = \partial_0, \ \partial_{\bar{\mathbf{y}}_j} = \partial_j \ \mathrm{y} \ \partial_{\bar{\mathbf{x}}_j} = \partial^j.$

Las 2m+1 ecuaciones que se desprenden de la conservación de la 1-forma de contacto son

$$\begin{cases} d\mathbf{z} : \quad \partial_0 Z + \sum_{\substack{i=1\\m}}^m X_i \partial_0 Y_i = 1 \\ d\mathbf{y}_j : \quad \partial_j Z + \sum_{\substack{i=1\\m}}^m X_i \partial_j Y_i = \mathbf{x}_j \quad (m \ ecuaciones) \\ d\mathbf{x}_j : \quad \partial_j Z + \sum_{\substack{i=1\\m}}^m X_i \partial^j Y_i = 0 \quad (m \ ecuaciones) \end{cases}$$
(5.19)

Por el teorema de Arnold 5.4.1 se identifica en cada una de las cartas a la subvariedad de Legendre con funciones generatrices $\Phi_1(\mathbf{x}_i)$ y $\Phi_2(X_i)$ en U_1 y U_2 respectivamente, de la siguiente forma

$$\begin{cases} z = \Phi_1(y_i) \\ y_i = y_i \\ x_i = \partial_{y_i} \Phi_1(y_i) \end{cases} \begin{cases} Z = \Phi_2(Y_i) \\ Y_i = Y_i \\ X_i = \partial_{Y_i} \Phi_2 \end{cases}$$
(5.20)

Como las funciones generatrices Φ_1 y Φ_2 son homogéneas de orden 1, por teorema de Euler B.0.3 podemos escribirlas de las siguiente forma

$$\Phi_1(\vec{\mathbf{y}}) = \nabla \Phi_1(\vec{\mathbf{y}}) \cdot \vec{\mathbf{y}} \qquad \Phi_2(\vec{Y}) = \nabla \Phi_2(\vec{Y}) \cdot \vec{Y}$$
(5.21)

De esto último llegamos a que

$$\begin{cases} \mathbf{z} = \Phi_1(\vec{\mathbf{y}}) = \nabla \Phi_1(\vec{\mathbf{y}}) \cdot \vec{\mathbf{y}} = \vec{\mathbf{x}} \cdot \vec{\mathbf{y}} \\ \vec{\mathbf{x}} = \nabla \Phi_1(\vec{\mathbf{y}}) \end{cases} \begin{cases} Z = \Phi_2(\vec{Y}) = \nabla \Phi_2(\vec{Y}) \cdot \vec{Y} = \vec{X} \cdot \vec{Y} \\ \vec{X} = \Phi_2(\vec{Y}) \end{cases}$$
(5.22)

Luego por teorema de Euler B.0.3 también vale que

$$\sum_{i=1}^{2m+1} \partial_{\mathbf{x}_i} \mathbf{y}_j \mathbf{x}_i = 0 \text{ y } \sum_{i=1}^{2m+1} \partial_{X_i} Y_j X_i = 0 \quad \forall j,$$

pues tanto $y_j(\vec{x})$ como $Y_j(\vec{X})$ son homogéneas de orden $0 \ \forall j$.

Utilizando las expresiones en coordenadas de la condición de homogeneidad en la función Φ_2 restringida a la subvariedad de Legendre nos queda que

$$Z((\vec{\mathbf{x}}\cdot\vec{\mathbf{y}},\mathbf{y}_{i},\mathbf{x}_{i})) = \Phi_{2}(\vec{\mathbf{x}}\cdot\vec{\mathbf{y}},\mathbf{y}_{i},\mathbf{x}_{i}) = \vec{X}(\vec{\mathbf{x}}\cdot\vec{\mathbf{x}},\mathbf{y}_{i},\mathbf{x}_{i})\cdot\vec{Y}(\vec{\mathbf{x}}\cdot\vec{\mathbf{y}},\mathbf{y}_{i},\mathbf{x}_{i})$$
(5.23)

Del primer término de esta última ecuación se desprende que

$$\partial_{\mathbf{y}_{i}} Z = \partial_{0} Z \ \partial_{\mathbf{y}_{i}} (\vec{\mathbf{x}} \cdot \vec{\mathbf{y}}) + \partial_{i} Z + \sum_{j=1}^{n} \partial^{j} Z \ \partial_{\mathbf{y}_{i}} \mathbf{x}_{j}$$
(5.24)

Luego empleando la igualdad de (5.23)

$$(5.24) = \sum_{j=1}^{n} Y_j \left(\partial_0 X_j (\partial_{\mathsf{y}_i} (\vec{\mathsf{y}} \cdot \vec{\mathsf{x}})) + \partial_i X_j + \sum_{k=1}^{n} \partial^k X_k \partial_{\mathsf{y}_i} X_k \right) + \sum_{j=1}^{n} X_j \left(\partial_0 Y_j (\partial_{\mathsf{y}_i} (\vec{\mathsf{y}} \cdot \vec{\mathsf{x}})) + \partial_i Y_j + \sum_{k=1}^{n} \partial^k Y_k \partial_{\mathsf{y}_i} Y_k \right) = \sum_{j=1}^{n} (Y_j \nabla X_j + X_j \nabla Y_j) \cdot \vec{v}_{\mathsf{y}_i}$$

Donde $\vec{v}_{y_i} = (\partial_{y_i}(\vec{y} \cdot \vec{x}), \dots, \underbrace{1}_{(i)}, \dots, \partial_{y_1} x_1, \dots, \partial_{y_n} x_n).$ (Observemos que $\vec{v}_{y_i} \in T\mathcal{N}$).

Utilizando la condición de que se preserva la 1-forma de contacto (5.19) se obtiene la siguiente ecuación

$$\left(\nabla Z + \sum_{j=1}^{n} X_j \nabla Y_j\right) \cdot \vec{v}_{y_i} = \partial_{y_i} (\vec{y} \cdot \vec{x}) + x_i$$
(5.25)

Luego de (5.25) y la igualdad de (5.24) obtenemos que

$$2\partial_{\mathbf{y}_{\mathbf{i}}}Z - \left(\sum_{j=1}^{n} Y_{j}\nabla X_{j}\right) \cdot \vec{v}_{\mathbf{y}_{\mathbf{i}}} = \partial_{\mathbf{y}_{\mathbf{i}}}(\vec{\mathbf{y}} \cdot \vec{\mathbf{x}}) + \mathbf{x}_{\mathbf{i}}$$
(5.26)

No perdamos de vista que $x_i = \partial_{y_i} \Phi_1$ y si asumimos que dichas funciones generatrices $\Phi_{1,2}$ son de clase C^2 entonces vale la igualdad de las derivadas mixtas $\partial_i \partial_j = \partial_j \partial_i$ y esto

nos da como resultado la igualdad buscada,

$$\partial_{\mathbf{y}_i} Z = \mathbf{x}_{\mathbf{i}} = \partial_{\mathbf{y}_i} \Phi_2.$$

De esta última proposición se demuestra el siguiente resultado.

(

Corolario. Sea \mathcal{N} una subvariedad de Legendre de la variedad de contacto (M, θ) , con altas canónico $\{\phi_{\alpha}, V_{\alpha}\}$. Si existe una función generatriz local $\Phi_{\alpha}^{(n)}(y_1, ..., y_m) : \mathcal{N} \cap V_{\alpha} \to \mathbb{R}$ de \mathcal{N} , para todo $n \in \mathcal{N}$, homogénea de grado 1 en las variables extensivas y de clase C^2 , entonces existe una 1-forma Υ definida en \mathcal{N} tal que $\Upsilon|_{V_{\alpha}} = d\Phi_{\alpha}^{(n)}$ localmente.

Demostración. Es posible construir una 1-forma Υ , pues localmente sabemos que existe una función $\Phi_{\alpha}^{(n)}$ con las hipótesis de la proposición anterior, luego $\Phi_{\alpha}^{(n)}$ está definida módulo una constante entre cartas canónicas, por lo tanto la 1-forma está bien definida.

Observación. En el contexto termodinámico donde existe (en coordenadas locales) una energía interna con las propiedades enunciadas en 5.9.2, es posible la construcción de una 1-forma Υ relacionada con la función energía interna local U, donde $\Upsilon = dU$.

5.9.3. Comentarios

Finalizando este capítulo cabe mencionar que no hemos incluido aún ninguna construcción que introduzca a la segunda ley de la termodinámica en este esquema, y no lo haremos en esta tesis. Este asunto lo consideramos como trabajo a futuro de interés, vinculado a un estudio global de las variedades de contacto en termodinámica.

La cuarta ley de la termodinámica no ha sido utilizada en este capítulo, dicha ley sugiere proponer la existencia de una función entropía (al en las subvariedades de Legendre). Otro aspecto importate es la convexidad del espacio de fase termodinámico planteado por [20], por el cual se podría sugerir que la variedad de contacto sea convexa y continuar el estudio de dichos objetos.

Capítulo 6

Sistemas Termo-Mecánicos en un contexto simpléctico

En este capítulo definiremos lo que son los sistemas termo-mecánicos en un contexto de geometría simpléctica, utilizando lo expuesto en los capítulos 4 y 5. Daremos también una forma sistemática de cómo combinar distintos sistemas para construir un sistema acoplado.

De lo expuesto anteriormente, es natural presentar a un sistema termo-mecánico de la siguiente manera, donde inicialmente contamos con dos variedades simplécticas, una representando un sistema mecánico, y la otra un sistema termodinámico simpléctificado. De este modo considerando el producto cartesiano de las dos variedades, siguiendo lo expuesto en 4.11, obtenemos una nueva variedad simpléctica donde representar a un sistema termo-mecánico. Gracias al formalismo adoptado, dos sistemas termo-mecánicos representados en variedades simplécticas se pueden acoplar de manera análoga al acoplamiento entre mecánica y termodinámica. Todo lo expuesto en este capítulo es original de esta tesis.

6.1. Sistemas termo-mecánicos en una variedad simpléctica producto

Se busca dar una descripción de los procesos termodinámicos en término de la siguiente terna $(\mathcal{L}_M \times \mathcal{L}_T, \mathcal{W}_M \times \mathcal{W}_T + \tilde{\mathcal{W}}_{TM}, \mathcal{D}_M \times \mathcal{D}_T \cap \mathcal{D}_{TM})$ y nuestro proceso termo-mecánico es aquel que verifica

$$\Gamma'(t) \in (\mathcal{L}_M \times \mathcal{L}_T + \mathcal{W}_M \times \mathcal{W}_T + \mathcal{W}_{TM}) \cap (\mathcal{D}_M \times \mathcal{D}_T \cap \mathcal{D}_{TM}).$$

Por lo analizado en la parte termodinámica tenemos que $\mathcal{L}_T = (TN)^{\perp}$ y que $\mathcal{D}_T \subset TN$, esto nos simplifica lo anterior a la siguiente expressión

$$\Gamma'(t) \in ((\mathcal{L}_M \times (TN)^{\perp}) + (\mathcal{W}_M \times \{0\}) + \tilde{\mathcal{W}}_{TM}) \cap \mathcal{D}_M \times \mathcal{D}_T \cap \mathcal{D}_{TM}$$

donde $\tilde{\mathcal{W}}_{TM} = (\mathcal{W}_{TM} \times \{0\})$, luego

$$\Gamma'(t) \in \left((\mathcal{L}_M \times TN) + (\mathcal{W}_M + \mathcal{W}_{TM}) \times \{0\} \right) \cap \mathcal{D}_M \times \mathcal{D}_T \cap \mathcal{D}_{TM},$$

y factorizando términos nos queda

$$\Gamma'(t) \in (\mathcal{L}_M + \mathcal{W}_M + \mathcal{W}_{TM} \cap \mathcal{D}_M \times TN \cap \mathcal{D}_T) \cap \mathcal{D}_{TM}.$$

Por lo que es conveniente dar la siguiente definición manteniendo la misma tesitura que en 4.9.1.

Definición 6.1.1. Dada una variedad simpléctica (P, ω) y una de contacto (M, θ) , un sistema termo-mecánico en la variedad simpléctica $(P \times SM, \omega_M \oplus \omega_T)$ es una terna $(\mathcal{L}, \mathcal{W}, \mathcal{P})$ tal que

- $\mathcal{L} = \mathcal{L}_M \times (TN)^{\perp}$, siendo \mathcal{L}_M una subvariedad Lagrangiana de $(TP, d_T\omega)$ y \mathcal{N} una subvariedad de Legendre de (M, θ) ;
- $\mathcal{P} = (\mathcal{P}_M \times \mathcal{D}) \cap \mathcal{P}_{TM}$, con $\mathcal{P}_M \subset TP$, $\mathcal{D} \subset T(\mathcal{S}M)$ y $\mathcal{P}_{TM} \in T(P \times \mathcal{S}M)$ subvariedades.
- $\mathcal{W} = (\mathcal{W}_M \times 0) + \mathcal{W}_{TM}$, con $\mathcal{W}_M \times TP$ y $\mathcal{W}_{TM} \in T(P \times SM)$ distribuciones.

A las ternas $(\mathcal{L}_M, \mathcal{W}_M, \mathcal{P}_M)$ y $((T\mathcal{N})^{\perp}, 0, \mathcal{D})$ las llamaremos sistema mecánico y sistema termodinámico subyacentes, respectivamente.

Observación. Es fácil notar que la subvariedad \mathcal{L} de la definición anterior es una subvariedad Lagrangeana de $(T(P \times SM), d_T \omega_M \oplus d_T \omega_T)$. Diremos que \mathcal{L} es la **subvariedad** Lagrangeana termo-mecánica del sistema termo-mecánico.

Análogamente a lo ya visto, llamaremos vínculos externos termo-mecánicos a \mathcal{P} y fuerzas de vínculo termo-mecánicos a \mathcal{W} .

Definición 6.1.2. Llamaremos vínculos de acople (termo-mecánicos) y fuerzas de acople (termo-mecánicos) respectivamente a \mathcal{P}_{TM} y \mathcal{W}_{TM} de la definición anterior.

Observación. Hemos introducido esta última definición para identificar estos objetos que no son datos de los sistemas subyacentes. Luego, para acoplar un sistemas mecánico $(\mathcal{L}_M, \mathcal{W}_M, \mathcal{P}_M)$ con uno termodinámicos $((T\mathcal{N})^{\perp}, 0, \mathcal{D})$ basta con definir cuáles son los vínculos de acople y las fuerzas de acople. **Definición 6.1.3.** Llamaremos **trayectoria-proceso** del sistema termo-mecánico a una curva $\Gamma = (\Gamma_M; \Gamma_T) : I \to P \times SM$ tal que

$$\Gamma'(t) \in (\mathcal{L} + \mathcal{W}) \cap \mathcal{P}, \ \forall t \in I.$$

El siguiente ejemplo de alguna manera engloba lo visto a lo largo de la tesis.

Ejemplo 6.1.1. Consideremos el sistema mecánico del ejemplo 4.9.1 sobre un espacio co-tangente, i.e. con $P = T^*Q$ y $\omega = \omega_Q$. Visto como un sistema con vínculos externos, puede describirse a través de la terna $(ImX_H, 0, TT^*Q)$. Por otro lado, consideremos un sistema termodinámico como el dado en el Ejemplo 5.9.1, pero con procesos distinguidos definidos por \mathcal{D} , y describámoslo a través de la terna $((T\mathcal{N})^{\perp}, 0, \mathcal{D})$. Construyamos ahora un sistema termo-mecánico que tenga a los anteriores como los sistemas mecánico y termodinámico subyacentes, respectivamente. Para eso, debemos construir \mathcal{W}_{TM} y \mathcal{P}_{TM} .

Consideremos las funciones $\mathfrak{F}, \mathfrak{V} : T^*Q \to T^*Q$, que llamaremos fricción y volumen, respectivamente, donde la segunda es de la forma $V = d\Upsilon \circ \pi_Q$, con $\Upsilon : Q \to \mathbb{R}$. A partir de ellas, definamos las 1-formas

$$\mathfrak{F}^{\flat}, \ \mathfrak{V}^{\flat}: T^*Q \to T^*T^*Q$$

y los campos

$$\mathfrak{F}^{\sharp}, \ \mathfrak{V}^{\sharp}: T^*Q \to TT^*Q$$

como

$$\langle \mathfrak{F}^{\flat}(\sigma), v_{\sigma} \rangle = \langle \mathfrak{F}(\sigma), (\pi_Q)_*(v_{\sigma}) \rangle \ y \ \mathfrak{F}^{\sharp} = \omega_Q^{\sharp} \circ \mathfrak{F}^{\flat},$$

ídem para \mathfrak{V}^{\flat} y \mathfrak{V}^{\sharp} . Ahora, consideremos la distribución de las fuerzas de acople $\mathcal{W}_{TM} \subset T(T^*Q \times SM) = TT^*Q \times T(SM)$, que sobre el punto

$$(\sigma, U, S, V, -T, P, \lambda) \in T^*Q \times SM$$

está dado por el subespacio generado por el vector $(\mathfrak{F}^{\sharp}(\sigma) + P\mathfrak{V}^{\sharp}(\sigma), \vec{0}_{SM}).$

Por simplicidad, a tal espacio lo escribiremos $\langle \mathfrak{F}^{\sharp} + P\mathfrak{V}^{\sharp} \rangle$. Consideremos también la subvariedad de vínculos de acople $\mathcal{P}_{TM} \subset T(T^*Q \times \mathcal{S}M)$ dada por los vectores $v_{\sigma} \in T_{\sigma}T^*Q$ y

 $(\dot{U}, \dot{S}, \dot{V}, -\dot{T}, \dot{P}, \dot{\lambda}) \in T_{(U,S,V,-T,P,\lambda)} \mathcal{S}M$

tales que

$$\langle dH(\sigma) - \mathfrak{F}^{\flat}(\sigma) - P\mathfrak{V}^{\flat}(\sigma), v_{\sigma} \rangle = 0,$$

es decir,

$$v_{\sigma} \in \langle dH(\sigma) - \mathfrak{F}^{\flat}(\sigma) - P\mathfrak{V}^{\flat}(\sigma) \rangle^{0},$$

у

$$\langle dH(\sigma), v_{\sigma} \rangle + \dot{U} = 0.$$

En un abuso de notación, podemos escribir

$$\mathcal{P}_{TM} = \langle dH - \mathfrak{F}^{\flat} - P\mathfrak{V}^{\flat} \rangle^0 \cap \langle dH + dU \rangle^0.$$

Con todo esto podemos definir el sistema termo-mecánico $(\mathcal{L}, \mathcal{W}, \mathcal{P})$ con

$$\mathcal{L} = \operatorname{Im} X_H \times (T\mathcal{N})^{\perp}, \ \mathcal{W} = \mathcal{W}_{TM} = \mathfrak{F}^{\sharp} + P\mathfrak{V}^{\sharp} \times \{0\}$$

у

$$\mathcal{P} = (TT^*Q \times \mathcal{D}) \cap \mathcal{P}_{TM}.$$

Notar que, haciendo nuevamente abuso de notación,

$$\mathcal{L} + \mathcal{W} = (\text{Im } X_H + \langle \mathfrak{F}^{\sharp} + P \mathfrak{V}^{\sharp} \rangle) \times (TN)^{\perp}$$

Una trayectoria-proceso de $(\mathcal{L}, \mathcal{W}, \mathcal{P})$ es una curva

$$(\Gamma_M(t);\Gamma_T(t)) = (\sigma(t);U(t),S(t),V(t),T(t),P(t),\lambda(t))$$

tal que, para cierta función $\alpha(t),$

$$\sigma(t) - X_H(\sigma(t)) - \alpha(t)(\mathfrak{F}^{\sharp}(\sigma(t)) + P(t)\mathfrak{V}^{\sharp}(\sigma(t)) = 0,$$

$$U - \Phi((S(t), V(t)) = 0, \ P(t) = \frac{\partial \Phi}{\partial V}(S(t), V(t)), \ T(t) = \frac{\partial \Phi}{\partial S}(S(t), V(t)), \ \lambda(t) = 1,$$

$$(U'(t), S'(t), V'(t), T'(t), P'(t)) \in D_{(U(t), S(t), V(t), T(t), P(t))},$$

$$\langle dH(\sigma(t)) - \mathfrak{F}^{\flat}(\sigma(t)) - P(t)\mathfrak{V}^{\flat}(\sigma(t)), \sigma'(t) \rangle = 0$$

у

$$\langle dH(\sigma(t)), \sigma'(t) \rangle + U'(t) = 0.$$

De la primera y la cuarta ecuación se deduce que $\alpha(t) = 1$, y por ende

$$\sigma(t) - X_H(\sigma(t)) - F(\sigma(t)) - P(t)V(\sigma(t)) = 0.$$
6.1.1. Revisión de los ejemplos

A continuación veremos cómo los ejemplos mostrados en el capítulo 3 quedan expresados en este último esquema.

Ejemplo 6.1.2. Carrito deslizando con fricción (CcF)

Recordemos que $H(p,q) = \frac{p^2}{2m}$ y las ecuaciones de estado son $U = \nu T$ y $S = \nu ln \left(\frac{T}{T_0}\right) + S_0$, por la parte mecánica tenemos:

$$\mathcal{L}_{M,CcF} = \left\{ (q, p, \dot{q}, \dot{p}) \in TT^*Q_M \text{ tales que } \dot{q} = -\frac{\partial H}{\partial p} \text{ y } \dot{p} = \frac{\partial H}{\partial q} \right\} = \left\{ \left(q, p, \frac{p}{m}, 0 \right) \right\}$$

 $\mathcal{W}_M = \{0\}; \quad \mathcal{P}_{M,CcF} = T^* Q_M \text{ (no hay restrictions)}.$

Por la parte termodinámica tenemos:

$$T\mathcal{N}_{CcF} = \left\{ (U, S, T, \lambda, \dot{U}, \dot{S}, \dot{T}, \dot{\lambda}) = \left(\nu T, \nu ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + S_0, T, 1, \nu \dot{T}, \frac{\nu \dot{T}}{T}, \dot{T}, 0 \right) \right\}$$
$$\mathcal{D}_{CcF} = T\mathcal{N}_{CcF} \quad \text{(no hav restricciones).}$$

Denotaremos \mathcal{L}_{CcF} a la subvariedad Lagrangiana generada por el producto de estas dos subvariedades en $(T(T^*Q \times SM), d_T(\omega \oplus \omega_T))$, es decir,

$$\mathcal{L}_{CcF} = \mathcal{L}_M \times (T\mathcal{N})^{\perp}.$$

Observación. Recordemos que $T\mathcal{N}$, por corolario de la sección 5.8, es isotrópica y la subvariedad Lagrangiana $(T\mathcal{N})^{\perp} \subset T\mathcal{S}M$ es simplemente, en coordenadas canónicas, $T\mathcal{N}$ sin la restricción que provino de la simplectificación ($\lambda = 1$).

En este caso el sistema está aislado energéticamente, por lo tanto consideramos el siguiente vínculo de acople termo-mecánico:

$$\mathcal{P}_{TM} = \{ \underbrace{((\dot{q}_m, \dot{p}_m))}_{v_m}; \underbrace{(\dot{U}_n, \dot{S}_n, -\dot{T}_n), \dot{\lambda}_n)}_{v_n} \in T(P_m \times \mathcal{N}_n) \ \langle dH, v_m \rangle + \dot{U} = 0 \}$$

Resta decir que las fuerzas de acople $\mathcal{W}_{TM} \times \{0\}$ verifican, en coordenadas canónicas locales (\dot{q}, \dot{p}) , que

$$\mathcal{W}_{TM,CcF} = \{(0, -\mu \operatorname{Signo}(\dot{q}))\}.$$

Ejemplo 6.1.3. Émbolo vertical isoentrópico adiabático (EVA)

En este ejemplo se tiene el Hamiltoniano $H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + mgq$ por la parte mecánica, y las ecuaciones de estado del gas ideal $U = \alpha NRT$, PV = NRT y $S = S_0 + NR \ln\left(\frac{T^{\alpha}V}{T_0^{\alpha}V_0}\right)$

por la parte termodinámica, que definen la subvariedad Lagrangeana que denotaremos \mathcal{L}_{EV} . Además tenemos la restricción de un proceso isoentrópico adiabático, esto es, $PV^{\gamma} = k$, donde $\frac{\alpha+1}{\alpha} = \gamma$.

En la descripción mecánica tenemos que

$$\mathcal{L}_M = \{(q, p, \frac{p}{m}, -mg)\} \quad \mathcal{W}_M = \{0\}, \quad \mathcal{P}_{M,EV} = T^*Q \text{ (no hay restrictions)}.$$

Por la parte termodinámica tenemos que

$$T\mathcal{N} = \{ (U, S, V, T, P, \lambda; \dot{U}, \dot{S}, \dot{V}, \dot{T}, \dot{P}, \dot{\lambda}) \} = \{ (\alpha PV, S_0 + NRln\left(\frac{P^{\alpha}V^{\alpha+1}}{(NR)^{\alpha}T_0V_0}\right), V, \frac{PV}{NR}, P, 1; \alpha(\dot{P}V + P\dot{V}), \frac{NR}{PV}(\alpha\dot{P}V + (\alpha+1)P\dot{V}), \dot{V}, \frac{\dot{P}V + P\dot{V}}{NR}, \dot{P}, 0) \}$$
$$\mathcal{D}_{GIA} = T\mathcal{N}_{\mathcal{GIA}} \cap \{ PV^{\gamma} = k \}.$$

Luego la subvariedad Lagrangiana termo-mecánica verifica que

$$\mathcal{L}_{EV} = \mathcal{L}_M \times (T\mathcal{N})^{\perp}.$$

En este caso el sistema está aislado energéticamente, por lo tanto consideramos el siguiente vínculo de acople termo-mecánico:

$$\mathcal{P}_{TM} = \{ (v_m; v_n) \in T(P_m \times \mathcal{N}_n) : \langle dH, v_m \rangle + \dot{U} = 0 \}$$

Las fuerzas de acople termo-mecánicas $\mathcal{W}_{TM} \times \{0\}$ verfican, en coordenadas locales canónicas, que

$$\mathcal{W}_{TM,EVA} = \overline{\{(0, PA)\}}.$$

Ejemplo 6.1.4. Émbolo vertical isotérmico

En este ejemplo se tiene la misma subvariedad Lagrangiana termo-mecánica que en el ejemplo anterior, \mathcal{L}_{EV} , y la restricción en la parte termodinámica ahora es un proceso isotérmico, esto es, $T = T_0$.

Por la parte mecánica resta decir que nuevamente $\mathcal{W}_M = \{0\}$ y $\mathcal{P}_M = T^*Q$ (no hay restricciones).

En cambio en la parte termodinámica tenemos que

$$\mathcal{D} = T\mathcal{N} \cap \{T = T_0\}.$$

En este caso el sistema no está aislado energéticamente, por lo tanto consideramos el

siguiente vínculo de acople termo-mecánico:

$$\mathcal{P}_{TM} = (v_m; v_n) \in T(P_m \times \mathcal{N}_n) : \quad \dot{H} + \dot{U} = \dot{Q}_E \},$$

donde Q_E es un calor externo que bien puede pensarse relacionado con la energía interna de un tercer sistema, que contribuye a una clausura energética.

La fuerzas de acople $\mathcal{W}_{TM} \times \{0\}$ son como en el ejemplo anterior, i.e.,

$$\mathcal{W}_{TM} = \overline{\{(0, PA)\}}.$$

Ejemplo 6.1.5. Émbolo vertical con disipación térmica por conducción

La subvariedad Lagrangiana termo-mecánica de este ejemplo nuevamente es \mathcal{L}_{EV} . Además tenemos la restricción de un proceso con disipación térmica por conducción, esto es, $\dot{T} = \kappa (T - T_0)$.

En la descripción mecánica tenemos, como en los casos anteriores, que

$$\mathcal{W}_M = \{0\}, \quad \text{y} \quad \mathcal{D}_M = T^*Q \text{(no hay restrictions)}.$$

Por la parte termodinámica tenemos:

$$\mathcal{D}_T = T\mathcal{N} \cap \{ \dot{T} = \kappa(T - T_0) \}.$$

En este caso el sistema no está aislado energéticamente, por lo tanto consideramos el siguiente vínculo de acople termo-mecánico:

$$\mathcal{P}_{TM} = \dot{H} + \dot{U} = \dot{Q}_E,$$

donde Q_E es un calor externo que verifica que $\dot{Q}_E = T\dot{S}$.

La fuerzas de acople son $\mathcal{W}_{TM} \times \{0\}$, y en coordinadas canónicas

$$\mathcal{W}_{TM} = \overline{\{(0, PA)\}}.$$

6.1.2. Sistemas desacoplados y campos Hamiltonianos

En el caso extremo donde no existe interacción entre la parte termodinámica con la mecánica, es posible dar una descripción sólo utilizando un Hamiltoniano global en la variedad simpléctica producto $(P \times SM, \omega \oplus \omega_T)$. Notemos que a diferencia de lo expuesto en el capítulo 4, aquí estamos considerando un espacio más grande que el EFTR, y a diferencia de este, la estructura simpléctica aquí presente, sí está vinculada con la evolución de los observables involucrados cuando el sistema se encuentra desacoplado. En la parte mecánica consideremos el Hamiltoniano H_M mientras que en la parte termodinámica consideremos la simplectificación de una función f asociada al campo de contacto, como se mostró en 5.6 y 5.7, y denotémoslo H_T^f . Podemos entonces considerar el Hamiltoniano termo-mecánico siguiente,

$$H_{TM} = H_M + H_T^f$$

asociado al campo Hamiltoniano $X_{H_{TM}}$

$$i_{X_{H_{TM}}}(\omega \oplus \omega_T) = dH_{TM}$$

que determina la evolución del sistema.

En coordenadas locales $(p_M, q_M) \in P, (p_T, q_T) \in SM$ obtenemos la siguiente expresión del campo Hamiltoniano:

$$\dot{p_M} = -\frac{\partial H_{TM}}{\partial q_M} = -\frac{\partial H_M}{\partial q_M} \qquad \dot{q_M} = \frac{\partial H_{TM}}{\partial p_M} = \frac{\partial H_M}{\partial p_M}$$
$$p_T' = -\frac{\partial H_{TM}}{\partial q_T} = -\frac{\partial H_T^f}{\partial q_T} \qquad \dot{q_T} = \frac{\partial H_{TM}}{\partial p_T} = \frac{\partial H_T^f}{\partial p_T}$$

y como las variables involucradas son independientes no es posible relacionar el tiempo t con un proceso termodinámico efectivo.

Observemos el caso del carrito con fricción desacoplado (o carrito sin fricción).

Ejemplo 6.1.6. (*Carrito con fricción desacoplado*) En este ejemplo plantearemos el Hamiltoniano $H_{TM} = H_M + H_T^f$ donde

$$H_M = \frac{p_M^2}{2m} \quad \text{y} \quad H_T^f = \lambda f(-T, S, U) = \lambda \frac{\mu}{\nu} (S - \nu \ln(T)),$$

donde $q_{T_1} = S, q_{T_0} = U, p_{T_1} = \lambda(-T), p_{T_0} = \lambda$, según lo visto en 4.6.1 y 5.7.1. Luego obtenemos que la evolución temporal de los observables, cuando f = 0, es la siguiente,

$$\dot{p_M} = -\frac{\partial H_M}{\partial q_M} = 0 \qquad \dot{q_M} = \frac{\partial H_M}{\partial p_M} = \frac{p_M}{m}$$
$$p_{T_1'} = -\frac{\partial H_T^f}{\partial q_{T_1}} = \frac{\mu}{T} \qquad q_{T_1'} = \frac{\partial H_T^f}{\partial p_{T_1}} = -\frac{\lambda \mu}{\nu}$$
$$p_{T_0'} = -\frac{\partial H_T^f}{\partial q_{T_0}} = 0 \qquad q_{T_0'} = \frac{\partial H_T^f}{\partial p_{T_0}} = \mu$$

Esto puede interpretarse de la siguiente manera: Por la parte mecánica la evolución temporal es un movimiento rectilíneo uniforme, lo cual nos indica que no hay fricción en el sistema. Mientras que por la parte termodinámica tenemos cierta trayectoria en el espacio de fase termodinámica que no puede realizarse porque involucra una variación en la energía interna y como la energía se conserva, la única posibilidad es una evolución trivial donde los valores en las variables termodinámicas se mantienen constantes.

Observación. Los sistemas termo-mecánicos que admiten procesos no triviales en la parte termodinámica, y cuya evolución está dada sólo por un campo Hamiltoniano, como se acaba de mostrar, son aquellos que admiten procesos termodinámicos cuando H_M es constante. Por ejemplo, si interviniera una fuente de calor en el carrito sin fricción, es obvio que este podría calentarse aún estando en reposo.

6.2. Producto de sistemas termo-mecánicos simples

En esta sección buscamos utilizar todo lo construido anteriormente para la construcción de sistemas termo-mecánicos compuestos, es decir, en términos de variedades simplécticas, lo que haremos es un producto de variedades.

Consideremos dos sistemas termo-mecánicos como se presentaron en la sección anterior, esto es,

$$(\mathcal{L}_1, \mathcal{W}_1, \mathcal{P}_1) \text{ y } (\mathcal{L}_2, \mathcal{W}_2, \mathcal{P}_2).$$
(6.1)

Si consideramos las trayectorias $(\Gamma_1(t), \Gamma_2(t))$ en el producto, es decir,

$$(\Gamma_1'(t), \Gamma_2'(t)) \in (\mathcal{L}_1 \times \mathcal{L}_2 + \mathcal{W}_1 \times \mathcal{W}_2) \cap (\mathcal{P}_1 \times \mathcal{P}_2)$$
(6.2)

estamos diciendo que ambos sistemas no interactúan. Una forma de que ambos sistemas temo-mecánicos interactúen es mediante vínculos, y una forma de expresar esa interacción es proceder como se hizo anteriormente en 6.1.1 con \mathcal{W}_{TM} y \mathcal{P}_{TM} , salvo que en esta oportunidad queda expresado de una forma general.

Definición 6.2.1. Dados dos sistemas termo-mecánicos $\mathcal{L}_1, \mathcal{W}_1, \mathcal{P}_1 \subset (TP_1, d_T\omega_1)$ y $\mathcal{L}_1, \mathcal{W}_1, \mathcal{P}_1 \subset (TP_2, d_T\omega_2)$ llamaremos **producto de sistemas termo-mecánicos** en una variedad simpléctica $(P_1 \times P_2, \omega_1 \oplus \omega_2)$ a la terna $(\mathcal{L}, \mathcal{W}, \mathcal{P})$ tal que

- $\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \times \mathcal{L}_2$, siendo \mathcal{L}_i una subvariedad Lagrangiana de $(TP_i, d_T\omega_i)$;
- $\mathcal{W} = (\mathcal{W}_1 \times \mathcal{W}_2) + \mathcal{W}_{12}$, con $\mathcal{W}_1 \times \mathcal{W}_2$ y $\mathcal{W}_{12} \in T(P_1 \times P_2)$ distribuciones;
- $\mathcal{P} = (\mathcal{P}_1 \times \mathcal{P}_2) \cap \mathcal{P}_{12}$, con $\mathcal{P}_1 \subset TP_1$, $\mathcal{P}_2 \subset TP_2$ y $\mathcal{P}_{12} \in T(P_1 \times P_2)$ subvariedades.

Luego las trayectorias-procesos son análogos a las ya definidas en 6.1.3.

Definición 6.2.2. Llamaremos **trayectoria-proceso** del sistema termo-mecánico producto a una curva $\Gamma = (\Gamma_1; \Gamma_2) : I \to P_1 \times P_2$ tal que

$$\Gamma'(t) \in (\mathcal{L} + \mathcal{W}) \cap \mathcal{P}, \ \forall t \in I.$$



Figura 6.1: Carrtio acoplado a un émbolo

Quizás el sistema termo-mecánico más sencillo que podemos exhibir sea el considerar un carrito con fricción con un émbolo vertical adiabático como se muestra en la figura (6.1).

Ejemplo 6.2.1. (Émbolo vertical adiabático acoplado a un carrito con fricción) El sistema no es otra cosa que un carrito conectado a un émbolo mediante un cable ideal lo suficientemente rígido como para transmitir las variaciones longitudinales en las posiciones, de un extremo a otro. Consideraremos que el sistema se encuentra totalmente aislado, no intercambia energía ni materia con ningún otro sistema, y el cable que une a ambos subsistemas lo consideramos despreciable y sólo interactúa en el sentido que se expresó anteriormente, es decir, sólo proporciona un vínculo mecánico. La energía total del sistema se conserva, es decir,

$$\dot{\mathcal{E}} = \dot{H}_1 + \dot{U}_1 + \dot{H}_2 + \dot{U}_2 = 0,$$

donde $H_1 + U_1$ y $H_2 + U_2$ son la energía del émbolo y del carrito respectivamente. Termodinamicamente, cada subsistema obedece a las mismas ecuaciones de estado que se expusieron en (3.1.1) y en (3.1.2).

En términos de vínculos cinemáticos, lo anterior lo expresaríamos de la siguiente manera

$$\mathcal{P}_{12} = \{ \dot{q_1} = \dot{q_2}, \ \dot{\mathcal{E}} = 0 \}, \tag{6.3}$$

donde q_1 identifica la posición del émbolo y q_2 es la posición del carrito.

La ecuación de Newton del sistema en cuestión es una sola debido a que es posible

identificar las posiciones $q_1 y q_2$ del sistema, y da por resultado:

$$(m_1 + m_2)\ddot{q}_1 = -mg + PA - \mu \operatorname{Signo}(\dot{q}_1)$$
 donde $P = kV^{-\gamma}$ y $V = Aq_1$. (6.4)

La evolución temporal del conjunto de observables de este sistema, se obtiene de resolver (6.4) y $\dot{\mathcal{E}} = 0$, además de considerar todas las ecuaciones de estado que definen los subsistemas.

Observación. La siguiente terna $(\mathcal{E}, \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}}, \tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}})$ describe al sistema como SNHG reducido por las ecuaciones de estado:

$$\mathcal{E}(q_1, p_1, p_2, V_1, T_2) = \frac{p_1^2}{2m_1} + mgq_1 + \frac{p_2^2}{2m_2} + \alpha k V_1^{1-\gamma} + \nu T_2,$$
$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{K}} = \{ \dot{q}_1 = \dot{q}_2, \ \dot{\mathcal{E}} = 0 \},$$
$$\tilde{\mathcal{C}}_{\mathcal{V}} = \{ \delta q_1 = \delta q_2, \ \nu \delta T_2 = \mu \text{ Signo}(\dot{q}_2), \ \delta p_1 \text{ y } \delta p_2 \text{ arbitrarios} \}.$$

En el esquema que se propuso en la sección anterior toda esta información queda codificada de la siguiente manera, utilizando $6.1.2 ext{ y } 6.1.3$:

$$\mathcal{L}_1 = \mathcal{L}_{EV}$$
 $\mathcal{L}_2 = \mathcal{L}_{CcF}$
 $\mathcal{W}_1 = \mathcal{W}_{TM,EVA},$ $\mathcal{W}_2 = \mathcal{W}_{TM,CcF},$ $\mathcal{W}_{12} = \{0\},$
 $\mathcal{P}_1 = \mathcal{P}_{M,EV} \times \mathcal{D}_{GIA},$ $\mathcal{P}_2 = \mathcal{P}_{M,CcF}, \times \mathcal{D}_{CcF},$
 $\mathcal{P}_{12} = \{\dot{q}_1 = \dot{q}_2, \ \dot{\mathcal{E}} = 0\}.$

Puede apreciarse en esta configuración y acoplamiento de dos subsistemas termomecánicos, la conversión del trabajo hecho por un émbolo adiabático en calor generado por fricción.

Observación. Puede apreciarse que cierta similitud de la ecuación (6.4) con la ecuación (3.28) del ejemplo termo-mecánico 3.3.5 presentado anteriormente. Esta manera constructiva de generar sistemas termo-mecánicos puede re-interpretar fenómenos, reproduciendo las ecuaciones de movimiento con distintas configuraciones.

6.3. Comentarios finales

Las perspectivas de trabajo a futuro, relacionado con lo expuesto hasta aquí, son diversas. Por un lado, el formalismo simpléctico y lo que ya se conoce sobre reducción de sistemas con simetrías, invita al estudio de sistemas termo-mecánicos que puedan reducirse. Tener una descripción simpléctica de estos sistemas, apunta también en la dirección de utilizar todo el arsenal de resultados conocidos de la geometría para abordar cuestiones de interés termodinámico, como pueden ser los cambios de fase e irreversibilidad.

Por otro lado, en el estudio de fluídos y medios continuos, es conocida la intervención de variables termodinámicas (por ejemplo distribuciones de temperaturas) en las EDP's que gobiernan la dinámica del sistema. Lo aquí planteado, bajo ciertas condiciones de regularidad, podría valer como una aproximación a la descripción de algunos fenómenos.

Apéndice A Transformada de Legendre

Introduciremos en este apéndice la transformada de Legendre en términos elementales. La transformada de Legendre es una herramienta matemática muy útil, transforma funciones de un espacio vectorial en funciones en el espacio dual. Está relacionada con la dualidad proyectiva y coordenadas tangenciales en geometría algebraica y a la construcción de duales de espacios de Banach en análisis. También son frecuentes en física, por ejemplo, en la definición de cantidades termodinámicas.

Definición A.O.1. (En dimensión 1) Sea $y = f(x) : U \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función convexa tal que $f \in C^2(U)$ y f''(x) > 0. La **transformada de Legendre** $T_{\mathcal{L}}$ de f(x) es una nueva función $g(p) : W \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ (que notaremos $T_{\mathcal{L}}(f(x)) = g(p)$), y se construye de la siguiente manera:

Se define una nueva función

$$F(p,x) = px - f(x),$$

dicha función tiene a lo sumo un máximo con respecto a x en el punto x(p), pues f''(x) > 0. Esto nos define una función

$$g(p) = F(p, x(p)),$$

y llamaremos a esta última, la transformada de Legendre de f.

Ejemplo A.0.1. Sea $f(x) = \frac{x^{\alpha}}{\alpha} \operatorname{con} \alpha > 1 \text{ y } x \in (0, +\infty)$. Luego $f'(x) = x^{\alpha-1} \text{ y } f''(x) = (\alpha - 1)x^{\alpha-2},$

está claro que f''(x) > 0, por lo tanto podemos calcular su transformada de Legendre en todo su dominio. Para ello consideremos primero

$$F(p,x) = px - f(x) = px - \frac{x^{\alpha}}{\alpha} \Rightarrow F_x(p,x) = p - x^{\alpha-1}$$

y los extremos son $x(p) = p^{\frac{1}{\alpha-1}}$. Por lo tanto, de esto último, podemos concluir que

$$T_{\mathcal{L}}(f(x)) = p^{\frac{1}{\alpha-1}+1} - \frac{p^{\frac{\alpha}{\alpha-1}}}{\alpha} = \frac{(\alpha-1)p^{\frac{\alpha}{\alpha-1}}}{\alpha} = g(p).$$

Proposición A.O.1. Sea $f: U \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R} \in C^2$ una función convexa tal que f''(x) > 0, entonces su transformada $T_{\mathcal{L}}(f) = g$ es una función convexa.

Demostración. Sea $g(p) = T_{\mathcal{L}}(f(x))$ la transformada de Legendre de f(x). Luego de la definición tenemos que

$$g'(p) = x(p) + px'(p) - f'(x(p))x'(p) \Rightarrow g'(p) = x(p)$$

pues x(p) es la función que satisface $x(p) = (f')^{-1}(p)$. Luego por el teorema de la función inversa y de lo anterior tenemos que

$$g''(p) = x'(p) = \frac{1}{f''(x)}$$

Finalmente por la hipotesis f'' > 0 obtenemos que g'' > 0.

De esta proposición junto con la construcción de la transformada estamos en condiciones de poder aplicar nuevamente la transformada de Legendre a g(p). Un resultado que se desprende de esta iteración es el siguiente.

Teorema A.O.2. La transformada de Legendre $T_{\mathcal{L}}$ es involutiva, es decir, $(T_{\mathcal{L}} \circ T_{\mathcal{L}})(f) = f$.

Demostración. Ya vimos en la proposición anterior que g(p) es convexa donde g'' > 0 y además vale que g'(p) = x(p).

Calculemos entonces la transformada de Legendre de g(p), donde g(p) es la transformada de Legendre de f(x), es decir, tomemos las siguientes expresiones

$$g(p) = F(p, x(p)) = px(p) - f(x(p))$$
$$G(\bar{x}, p) = \bar{x}p - g(p)$$

donde vale que $x(p) = (f')^{-1}(p)$. Luego si derivamos con respecto a \bar{x} obtenemos que los puntos críticos son $\bar{x} = x(p)$, es decir en términos de $\bar{x} = x$ se deduce que p = f'(x), y por lo tanto, si reemplazamos en la expresión de más arriba llegamos a que

$$\bar{f}(x) = G(x, p(x)) = xp(x) - (p(x)x(p(x)) - f(x(p(x)))) = f(x)x(p(x)) = f(x)x(p(x)$$

pues x(p(x)) = x, y por lo tanto la tansformada de Legendre es involutiva.

Visto lo anterior es natural ahora definir la transformada de Legendre en \mathbb{R}^n de la siguiente manera.

Definición A.0.2. (En dimensión n) Sea $f : U \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ una función convexa, es decir, su Hessiano H(f) es definido positivo. Entonces su transformada de Legendre $T_{\mathcal{L}}(f(\vec{x})) = g(\vec{p})$ es una función $g: W \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ definida de manera análoga, es decir, $g(\vec{p}) = F(\vec{p}, \vec{x}(\vec{p})) = \max_{\vec{x}} F(\vec{p}, \vec{x}), \text{ donde } F(\vec{p}, \vec{x}) = \langle \vec{p}, \vec{x} \rangle - f(\vec{x}) \text{ y } \vec{p} = \frac{\partial f}{\partial \vec{x}}.$

Observación. Todos los resultados escritos anteriormente para dimensión 1 siguen valiendo en \mathbb{R}^n .

De esta construcción, en un espacio V de dimension n, se pueden construir transformaciones de Legendre parciales. Por ejemplo, podemos estar interesados en trabajar en un subespacio $S \subset V$ de dimension k, y en este caso aplicar la transformada de Legendre en este subespacio y como S es un subespacio propio, llamaremos a este tipo de transformación transformada de Legendre parcial. Este tipo de transformaciones es muy común en termodinámica y forma parte de las herramientas claves para responder interrogantes de esa disciplina.

Otro ejemplo interesante donde se ve involucrada la transformada es el caso de un sistema Lagrangiano, donde un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden se convierte en un sistema de 2n ecuaciones de orden 1 notablemente simétrico.

Ejemplo A.0.2. (Derivación con respecto a la fibra de TQ) Consideremos el ejemplo donde Q es una variedad de configuración n-dimensional, TQ su fibrado tangente identificado localmente por $(q_{\nu}, \dot{q}_{\kappa})$ y $L: TQ \to \mathbb{R}$ un Lagrangiano (hiperregular) dado.

El Lagrangiano L define un mapeo llamado derivada con respecto a la fibra, notado $\mathbf{F}L: TQ \to T^*Q$ y definido de la siguiente manera

$$\mathbf{F}L(v) \cdot w \equiv \frac{d}{dt}L(v+tw) \rfloor_{t=0} \quad \text{donde } v, w \in T_xQ,$$

es decir, $\mathbf{F}L(v) \cdot w$ es la derivada de L a lo largo de la fibra en la dirección de w.

En la literatura $\mathbf{F}L: TQ \to T^*Q$ algunas veces es llamada transformada de Legendre, mientras que clásicamente el nombre está reservado para el mapeo que lleva

$$L(q_{\nu}, \dot{q}_{\kappa})$$
 a $H(q_{\nu}, p_{\kappa}) = \dot{q}_j p_j - L(q_n u, \dot{q}_{\kappa})$

donde $p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}$.

Hasta aquí para poder realizar la transformada de Legendre las hipótesis de diferenciabilidad y monotonía de las derivadas fueron claves. En lo que concierne a esta tesis, dado el contexto y las hipótesis asumidas convenientemente, lo ya expuesto es considerado suficiente para comprender su desarrollo.

Nota. Para mayores referencias se sugiere la lectura de [22], que trata sobre la transformada de Legendre en el contexto de fibrados principales afines.

Apéndice B

Ecuación de Euler

Miremos por un momento la propiedad de homogeneidad de la energía interna U, según lo visto en la sección 2.5 sabemos que es homogénea de grado 1, i.e. $U(\lambda S, \lambda X_1, ..., \lambda X_k) = \lambda U(S, X_1, ..., X_k)$. Con respecto a esta propiedad existe el siguiente teorema de Euler que caracteriza a las funciones homogéneas.

Definición B.0.3. Sea $f : \mathbb{R}^n_+ \to \mathbb{R}$, diremos que f es homogénea de grado k si para $\forall \vec{x} \in \mathbb{R}^n_+$ y $\forall \lambda > 0$,

$$f(\lambda \vec{x}) = \lambda^k f(\vec{x}).$$

Teorema B.O.3. (Euler) Sea $f : \mathbb{R}^n_+ \to \mathbb{R}$ una función continua y diferenciable (en $\mathbb{R}^n_+ - \{0\}$), entonces f es homogénea de grado k si y sólo si $\forall \vec{x} \in \mathbb{R}^n_+ - \{0\}$ vale que

$$kf(\vec{x}) = \sum_{i} \partial_i f(\vec{x}) x_i,$$

donde $\vec{x} = (x_1, ..., x_n).$

Demostración. \Rightarrow) Supongamos que f es una función homogénea de grado k. Para un $\vec{x} \in \mathbb{R}^n_+ - \{0\}$ fijo podemos definir una función $g : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ de la siguiente manera

$$g(\lambda) = f(\lambda \vec{x}) - \lambda^k f(\vec{x})$$

y como f es homogénea de grado k y continua vale lo siguiente

$$g(\lambda) = 0 \quad (\forall \lambda \ge 0) \text{ y } g'(\lambda) = 0 \quad (\forall \lambda > 0).$$

Luego derivando la última expresión tenemos que

$$g'(\lambda) = \sum_{i} \partial_{i} f(\lambda \vec{x}) x_{i} - k \lambda^{k-1} f(\vec{x}),$$

y para $\lambda = 1$ obtenemos lo que buscábamos.

 \Leftarrow) Supongamos que $kf(x) = \sum_i \partial_i f(\vec{x}) x_i$ en $\forall \vec{x} \in \mathbb{R}^n_+ - \{0\}$. Para cualquier $\vec{x} \neq 0$ fijo de nuevo se puede definir $g : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ de la siguiente manera

$$g(\lambda) = f(\lambda \vec{x}) - \lambda^k f(\vec{x}),$$

notemos que g(1) = 0. Luego para $\lambda > 0$ vale

$$g'(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \partial_i f(\lambda \vec{x}) x_i - k \lambda^{k-1} f(\vec{x}) = \lambda^{-1} (\sum_{i=1}^{n} \partial_i f(\lambda \vec{x}) \lambda x_i) - k \lambda^{k-1} f(\vec{x})$$
$$= \lambda^{-1} k f(\lambda \vec{x}) - k \lambda^{k-1} f(\vec{x})$$

luego

$$\lambda g'(\lambda) = k(f(\lambda \vec{x}) - \lambda^k f(\vec{x})) = kg(\lambda)$$

Como λ es arbitrario, g satisface la siguiente ecuación diferencial

$$g'(\lambda) - \frac{k}{\lambda}g(\lambda) = 0$$
 donde $g(1) = 0$

y la solución de dicha ecuación es

$$g(\lambda) = e^{-A(\lambda)} \int_{1}^{\lambda} 0.e^{A(t)} dt = 0$$

pues $A(\lambda) = -k \ln(\lambda)$. Entonces f es homogénea en $\mathbb{R}^n_+ - \{0\}$ y la continuidad termina de garantizar que f es homogénea en \mathbb{R}^n_+ .

Si aplicamos el teorema B.0.3 a U se obtiene que

$$U = TS + \sum_{j=1}^{r} P_j X_j.$$
 (B.1)

Nota. Para que este último resultado sea válido estamos suponiendo que U satisface las condiciones del teorema. Hasta ahora sólo sabíamos que U era diferenciable y monótona sólo con respecto a S.

Corolario. Sea $f : \mathbb{R}^n_+ \to \mathbb{R}$ una función continua y diferenciable (en $\mathbb{R}^n_+ - \{0\}$). Si f es homogénea de grado k, entonces $\partial_i f(\vec{x})$ es homogénea de orden k - 1.

Corolario. Sea $f : \mathbb{R}^n_+ \to \mathbb{R}$ una función continua y diferenciable (en $\mathbb{R}^n_+ - \{0\}$). Si f es homogénea de grado k, entonces vale que

$$\frac{\partial_i f(\lambda \vec{x})}{\partial_j f(\lambda \vec{x})} = \frac{\partial_i f(\vec{x})}{\partial_j f(\vec{x})} \quad \forall \lambda > 0 \ con \ \vec{x} \in \mathbb{R}^n_+ - \{0\}.$$

Corolario. Sea $f : \mathbb{R}^n_+ \to \mathbb{R}$ una función $C^2(\mathbb{R}^n_+ - \{0\})$. Si f es homogénea de grado 1, entonces el Hessiano $D_{ij}f(\vec{x})$ es singular para todo $x \in \mathbb{R}^n_+ - \{0\}$.

(Referencia: Apostol Calculus 2
d.ed. vol $1\ [4])$



Apéndice C

Capacidad calórica molar y otras derivadas

Las derivadas primeras de la ecuación fundamental tienen el significado físico más importante. Las derivadas segundas describen las propiedades del material y estas derivadas segundas usualmente son las cantidades de mayor interés físico directo. Por ello exhibiremos algunas pocas derivadas segundas e ilustraremos su utilidad.

Definición C.0.4. El coeficiente de expansión térmica se define como

$$\alpha \equiv \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P.$$

El coeficiente de expansión térmica es el incremento del volumen comparado con el incremento de la temperatura de un sistema mantenido a presión contante y un número constante de moles.

Definición C.0.5. La compresibilidad isotérmica se define como

$$\kappa_T \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T.$$

La compresibilidad isotérmica es el cociente entre el decrecimiento del volumen con el incremento de la presión a temperatura constante.

Definición C.0.6. La capacidad calórica molar a presión constante se define como

$$c_P \equiv \frac{1}{N} \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_P.$$

La capacidad calórica molar a presión constante es el flujo de calor cuasi-estático que se requiere para producir un incremento en la temperatura del sistema manteniendo la presión constante. *Observación.* La capacidad calórica volumétrica puede interpretarse como una medida de inercia térmica. Es una propiedad extensiva, ya que su magnitud depende, no sólo de la substancia, sino también de la cantidad de materia del cuerpo o sistema; por ello, es característica de un cuerpo o sistema particular. Por ejemplo, la capacidad calorífica del agua de una piscina olímpica será mayor que la de un vaso de agua.

La capacidad calorífica no debe ser confundida con el *calor específico*, el cual es la propiedad intensiva que se refiere a la capacidad de un cuerpo para almacenar calor, y es el cociente entre la capacidad calorífica y la masa del objeto. El calor específico es una propiedad característica de las sustancias y depende de las mismas variables que la capacidad calorífica.

Observación. Para sistemas con un número constante de moles todas las derivadas segundas se pueden expresar en términos de estas tres derivadas, y estas tres son comúnmente tabuladas como funciones de la temperatura y la presión para una gran variedad de materiales.

Para más resultados e información referirse a Callen [8, p.85].

Apéndice D

Potenciales termodinámicos alternativos

La aplicación del formalismo precedente a la termodinámica es evidente. La relación fundamental en la representación energética es $U = U(S, V, N_1, ..., N_r)$, sus derivadas corresponden a los parámetros intensivos $T, -P, \mu_1, ..., \mu_r$. Las funciones transformadas mediante la transformada de Legendre se llaman potenciales termodinámicos y ahora definiremos algunos de los más comunes.

Definición D.0.7. (Potencial de Helmholtz $F \equiv U(T, V, ...)$) El potencial de Helmholtz o la energía libre de Helmholtz es la transformada parcial de U que reemplaza la entropía por la temperatura como variable independiente.

Definición D.0.8. (Entalpía $H \equiv U(S, P, ...)$) La entalpía es la transformada de Legendre parcial de U donde se reemplaza el volumen por la presión como variable independiente.

Otra transformada de Legendre común es la siguiente,

Definición D.0.9. (Potencial de Gibbs $G \equiv U(T, P, ...)$) Este potencial es la transformada de Legendre de U que reemplaza simultáneamente la entropía por la temperatura y el volumen por la presión como variables independientes.

En lo que sigue veremos que asociado a cada uno de estos potenciales se puede enunciar un principio del extremo, donde es posible ver el significado intuitivo de cada uno de ellos.

D.0.1. Los principios del mínimo para los potenciales

Hemos visto que la transformada de Legendre permite expresar la ecuación fundamental en términos de un conjunto de variables independientes, adecuado para cada problema particular. Sin embargo, esa ventaja se perdería si no se pudiera expresar un principio del extremo para cada una de esas representaciones. Afortunadamente, dicha reformulación es posible y a continuación enunciaremos tales principios.

Principio. (Mínimo del potencial de Helmhotz) El valor de equilibrio de cualquier parámetro interno sin vínculos, en un sistema que está en contacto diatérmico con un reservorio de calor, minimiza el potencial de Helmholtz en la variedad de estados para los cuales vale que $T = T^r$, donde T_r es la temperatura del reservorio.

Principio. (Mínimo de la entalpía) El valor del equilibrio de cualquier parámetro interno sin vínculos, de un sistema en contacto con un reservorio de presión, minimiza la entalpía en la variedad de estados donde la presión se mantiene constante (e igual a la presión del reservorio).

Principio. (Mínimo del potencial de Gibbs) El valor de equilibrio de cualquier parámetro interno sin vínculos, de un sistema con un reservorio térmico y un reservorio de presión, minimiza el potencial de Gibbs a temperatura y presión constantes (igual a la de dichos reservorios).

Los argumentos de por qué son éstos los principios respectivos, se pueden ver en Callen [8, p. 153]. Como resultado general se obtiene lo siguiente:

Principio. (Mínimo de la transformada de Legendre de la energía U.) El valor del equilibrio de cualquier parámetro interno sin vínculos en un sistema con un conjunto de reservorios (con parámetros intensivos P_1^r , P_2^r ,...) minimiza el potencial termodinámico $U(P_1, P_2, ...)$ con P_1 , P_2 ,... constantes (iguales a P_1^r , P_2^r ,...).

Bibliografía

- Ralph Abraham and Jerrold Marsden, Foundations of mechanics, The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1978.
- [2] Ralph Abraham, Jerrold Marsden, and Tudor Ratiu, Manifolds, tensor analysis and aplications, Addison-Wesley publishing company, London-Amsterdam-Don Mills, Ontario-Sydney-Tokyo, 1983.
- [3] C.J. Adkins, *Equilibrium thermodynamics*, third edition ed., McGraw-Hill, London, ISBN 0-521-25445-0., 198300.
- [4] Tom M. Apostol, Calculus, 2nd ed. ed., John Wileys and Sons, New York–Santa Barbara–London–Sydney–Toronto, 1967.
- [5] Vladimir I. Arnold, Mathematical methods of classical mechanics, Springer Verlag, New York–Heidelberg–Berlin, 1989.
- [6] M. Bailyn, A survey of thermodynamics, American Institute of Physics Press, New York, ISBN 0-88318-797-3., 1994.
- [7] A.M. Bloch, Nonholonomic mechanics and control, Interdisciplinary Applied Mathematics 24 (2003).
- [8] Herbert B. Callen, Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, 2nd ed. ed., John Wileys and Sons, New York–Chichester–Brisbane–Toronto–Singapore, 1985.
- [9] Hernán Cendra and Sergio Grillo, *Generalized nonholonomic mechanics, servomechanisms and related brackets*, Journal of Mathematical Physics **47** (2006).
- [10] Hernán Cendra, Alberto Ibort, Manuel de León, and David Martín de Diego, A generalization of chetaev's principle for a class of higher order nonholonomic constraints, Journal of Mathematical Physics 45 (2004), no. 7.
- [11] Hernán Cendra, Jerrold E. Marsden, and Tudor S. Ratiu, *Geometric mechanics*, *lagrangian reduction and non-holonomic systems*.

- [12] F.H. Crawford, *Heat, thermodynamics, and statistical physics*, Rupert Hart-Davis, London, Harcourt, Brace and World, Inc., 1963.
- [13] Enrico Fermi, *Thermodynamics*, Dover publications, 1956.
- [14] Herbert Goldstein, Charles Poole, and Paul Safko, *Classical mechanics*, 3rd ed. ed., John Wileys and Sons, New York–Chichester–Brisbane–Toronto–Singapore, 2000.
- [15] David J. Griffiths, Introduction to electrodynamics, 3rd ed. ed., Prentice Hall, 1998.
- [16] Sergio Grillo, Sistemas no holónomos generalizados, Ph.D. thesis, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina, 2007.
- [17] Robert Hermann, Geometry, physics and systems, Deker, 1973.
- [18] Jorge V. José and Eugene J. Saletan, Classical dynamics: A contemporary approach, Cambridge University Press, 1998.
- [19] S. Kobayashi and K. Nomizu, Foundations of differential geometry, John Wiley and Son, Inc, New York., 1963.
- [20] Elliott Lieb and Jakob Yngvason, The physics and mathematics of the second law of thermodynamics, Phys. Rept. 310 (1999), 1–96.
- [21] P. Liebermann and Ch.-M. Marle, Symplectic geometry and analytical mechanics, D. Reidel, 1987.
- [22] Enrico Massa, Enrico Pagani, and Stefano Vignolo, Legendre transformation and analytical mechanics: a geometric approach, Journal of Mathematical Physics 45 (1991), no. 7.
- [23] P.M. Morse, *Thermal physics*, 2nd ed. ed., W.A. Benjamin, Inc, New York., 1969.
- [24] Ryszard Mrugala, On contact and metric structures on thermodynamic spaces, Departmental Bulletin Paper.
- [25] Ryszard Mrugala, On a special family of thermodynamic processes and their invariants, Reports on mathematical physics 46 (2000), 461–468.
- [26] Ryszard Mrugala, James D. Nulton, J. Christian Schön, and Peter Salamon, Contact structure in thermodynamic theory, Reports on mathematical physics 29 (1991), 109– 121.
- [27] A. Münster, *Classical thermodynamics, translated by e.s. halberstadt*, Wiley?Interscience, London., 1970.

- [28] J.R. Partington, An advanced treatise on physical chemistry, volume 1, fundamental principles. the properties of gases, Longmans, Green and Co., London., 1949.
- [29] Max Planck, Treatise on thermodynamics, Dover publications, 1917.
- [30] Andy Ruina and Rudra Pratap, *Introduction to statics and dynamics*, Oxford University Press, 2002.
- [31] J. Śniatycki and W. M. Tulczyjew, Generating forms of Lagrangian submanifolds, Indianan University Mathematics Journal 22.
- [32] W. M. Tulczyjew, The Legendre transformation, Annles de l'Institut Henri Poincaré-Section A (1977), 101.
- [33] Włodzimierz Tulczyjew and Pawel Urbański, A slow and careful Legendre transformation for singular Lagrangians, Acta physica polonica- Series B; 30, 10; 2909-2978.
- [34] Edmund Taylor Whittaker, A treatise on the analytical dynamics of particles and rigid bodies, 4th ed. ed., Dover Publications, New York, 1944.
- [35] M. Zemansky, Heat and thermodynamics. an intermediate textbook, fifth edition ed., McGraw Hill Book Company, New York., 1967.