

Necesita Explicar el Equilibrio Termodinámico? Simúlelo!

Mauricio García Castañeda. (*)
Departamento de Física
Universidad Nacional de Colombia.

Introducción:

La descripción dinámica de sistemas físicos compuestos por una gran cantidad de partículas sería prácticamente imposible de no existir la Mecánica Estadística y en especial, el papel que juegan los promedios de las variables dinámicas en cada caso.

Cuando el sistema físico bajo consideración logra una situación de equilibrio, la denominada función de distribución de Boltzmann representa clásicamente en promedio, una imagen bien precisa del comportamiento de las partículas dentro del sistema. Más aún, una vez en equilibrio, salvo fluctuaciones de rara ocurrencia [1], la distribución de las partículas respecto a las variables dinámicas (energía, velocidad etc.) no cambia.

Sin embargo, cómo evoluciona un sistema físico para adquirir tal estado de equilibrio termodinámico? La respuesta dependerá del tipo de interacciones presentes en cada caso concreto. De todas maneras, es posible simular la evolución, con base en modelos que tengan en cuenta las características fundamentales de las interacciones de las partículas dentro del sistema.

El ánimo de la presente comunicación es mostrar cómo empleando una rutina numérica simple, (que puede ser implementada en una calculadora programable), se simula la evolución de un sistema físico hacia un estado de equilibrio termodinámico, cuando el estado inicial del sistema se prepara arbitrariamente, permitiéndose que se den intercambios elásticos de energía entre pares de partículas en el sistema de una manera totalmente al azar.

Método Utilizado.

Tomando un número grande de partículas, (como para que el análisis Newtoniano no sea práctico), 100 en nuestro caso, se le asigna a cada una de ellas una cantidad de energía mecánica arbitraria quedando de esta manera especificado el estado energético inicial del sistema. Por comodidad en la preparación del estado inicial se puede asignar a todas las partículas la misma cantidad de energía. Otra posibilidad es asignarle a una sola partícula la energía total del sistema, o cualquier variante entre los casos extremos mencionados.

La evolución del sistema hacia el equilibrio termodinámico se conseguirá por el intercambio energético acaecido durante las colisiones que se dan entre las partículas que conforman el sistema.

El primer elemento importante del modelo para la simulación, es suponer que las interacciones o choques solamente se dan por parejas. Es decir que en cada uno de los choques solamente intervienen dos partículas.

A continuación es necesario introducir el criterio de la IGUALDAD DE PROBABILIDADES A PRIORI. Esto lleva implícito el carácter estocástico de las

interacciones, y por tal razón es necesario escoger totalmente al azar el par de partículas que van a colisionar.

Posteriormente es preciso incorporar la característica elástica de las colisiones entre las dos partículas previamente tomadas al azar. Además, debe ser tenida en cuenta la característica aleatoria DE LA FRACCION DE ENERGIA INTERCAMBIADA EN CADA CHOQUE. Lo anterior significa sencillamente que las dos partículas al interactuar se encuentran en cualquier situación intermedia entre los siguientes límites: a) que no haya ningún intercambio energético o b) que una partícula le ceda a la otra la totalidad de la energía que poseía antes del choque.

Lo anterior se concreta de la siguiente manera: si i y j son las partículas que van a interactuar, se debe tener que:

$$\epsilon_i + \epsilon_j = s \quad (1)$$

con s la energía total de las dos partículas cuyas energías iniciales se representan por ϵ_i y ϵ_j .

Si F es un número entre 0 y 1 tomado al azar, podemos tomar por ejemplo, que $\epsilon_i = F \cdot s$ donde ϵ_i representa la energía "final" de la partícula i después de la interacción.

Pero también debe ser satisfecha la siguiente condición:

$$\epsilon_i + \epsilon_j = s \quad (2)$$

ya que la energía se conserva, y por consiguiente:

$$\epsilon_j = s - \epsilon_i = s - Fs = s(1 - F) \quad (3)$$

Este procedimiento se repite un número arbitrario de veces, dado que la cantidad de colisiones será una medida indirecta de la evolución del sistema, y mientras más choques se presenten, el sistema físico se encontrará "más termalizado".

Cada cierto número de interacciones se efectúa un histograma de la distribución de energía de las partículas con el fin de compararlo con la expresión de Boltzmann:

$$n(\epsilon) \propto \exp(-\epsilon/\langle \epsilon \rangle) = A \exp(-\epsilon/\langle \epsilon \rangle) \quad (4)$$

La constante de proporcionalidad se encuentra fácilmente por medio de la normalización:

$$\int n(\epsilon) d\epsilon = N \quad (5)$$

donde $\langle \epsilon \rangle$ y N en (4) y en (5) representan respectivamente la energía promedio y el número de partículas.

En últimas, la distribución de Boltzmann que caracteriza el estado de equilibrio a volumen constante para comparar con los histogramas de la simulación numérica es la siguiente:

$$n(\varepsilon) = (N/\langle\varepsilon\rangle) \exp(-\varepsilon/\langle\varepsilon\rangle) \quad (6)$$

Resultados y Discusión.

En la figura 1 (a-f) se presentan los resultados de la simulación de la evolución hacia el equilibrio de un sistema conformado por 100 partículas ($N=100$) en donde a cada una de ellas se le asignó una energía inicial de 4 ($\langle\varepsilon\rangle = 4$) en unidades arbitrarias de energía.

Un histograma que representara tal estado inicial consistiría simplemente de una columna de altura 100 centrada en un valor de energía igual a 4.

Luego de 50 interacciones ($k=50$) se ha alcanzado alguna distribución entre las partículas, pero aún casi la mitad de ellas poseen energías en el rango energético de 4 a 5 unidades.

El conjunto de figuras 1b-1f muestra los histogramas cuando el número de interacciones son 100, 200 etc., hasta 1600, así como la distribución de Boltzmann correspondiente.

Como se puede apreciar, cuando $k=400$ el número de partículas por rango de energía ya está bastante bien ajustado por la distribución de Boltzmann y no se modifica apreciablemente a pesar del incremento considerable de k .

De acuerdo con la discusión del numeral anterior, la manera de preparar el estado inicial para una determinada distribución permite una gran cantidad de variantes.

Los resultados previamente descritos se obtuvieron para las condiciones $N=100$ y $\langle\varepsilon\rangle = 4$.

El mismo promedio se puede obtener cuando a 50 partículas se les asigna una energía de 8 unidades, y a las restantes 50 una energía de cero unidades. El histograma de tal estado inicial serían dos columnas de altura 50 centradas en los rangos energéticos de cero y 8 unidades de energía. La evolución hacia el equilibrio termodinámico está representada gráficamente en el conjunto de figuras 2a-2d. Cuando el número de interacciones es 50 (fig.2-a), aún se tiene preferencialmente la distribución inicial. Al aumentar el número de colisiones los histogramas se acomodan mejor a la distribución de Boltzmann y a partir de $k=400$ el ajuste es muy bueno, y lo más importante, INDISTINGUIBLES de aquellos de la figura 1 ya discutidos.

Con base en la ecuación (6) se puede concluir que el ancho de la curva de distribución disminuye si la energía promedio por partícula se hace menor. En las figuras 3a-3f se contempla tal posibilidad, donde el estado inicial para 100 partículas se ha preparado de tal suerte que todas ellas poseen una energía de 2 unidades ($\langle\varepsilon\rangle=2$). Se aprecia que el comportamiento de la evolución del sistema se ajusta bastante bien a partir de $k=400$ a la distribución de Boltzmann.

Es interesante en este caso comparar una situación extrema en la preparación del estado inicial. Las figuras 3g-3h muestran el comportamiento del sistema cuando a

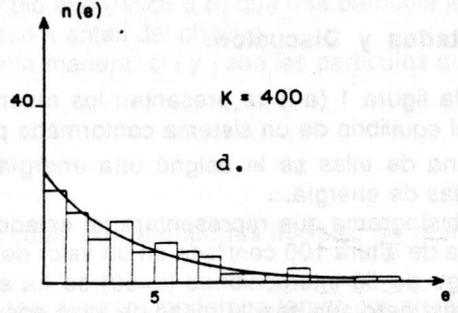
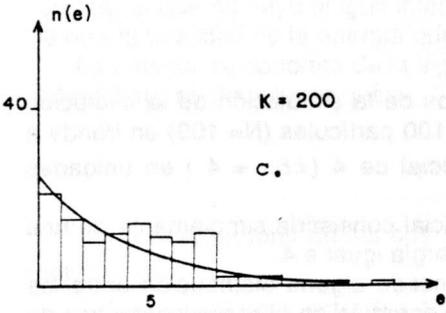
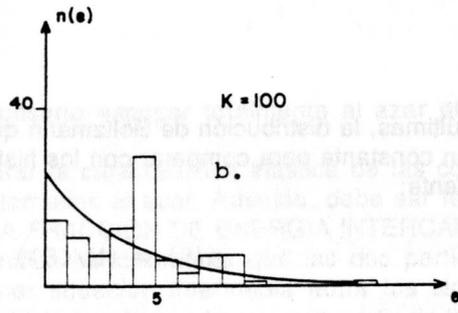
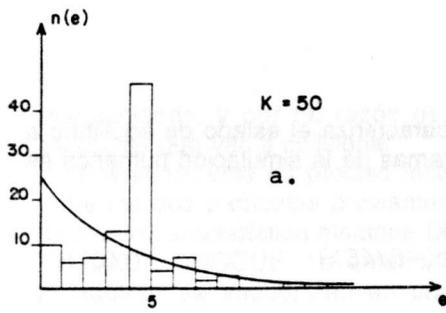


FIGURA 1.

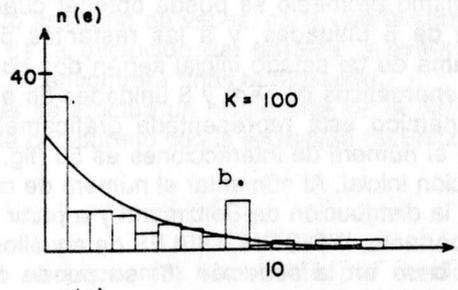
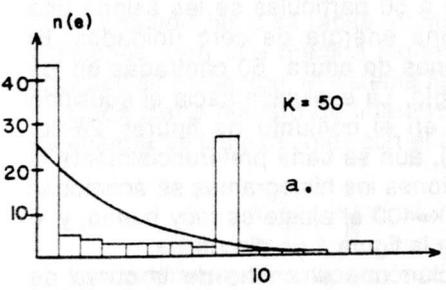
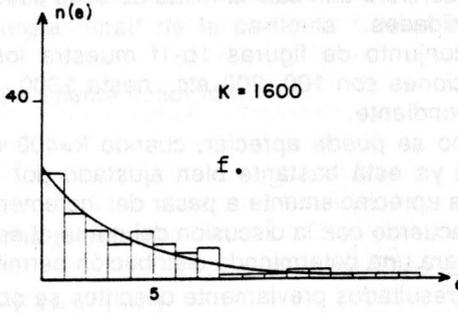
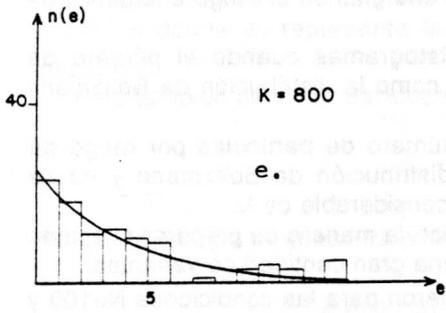
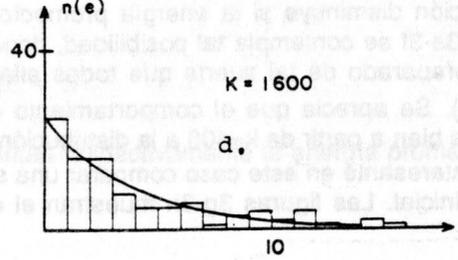
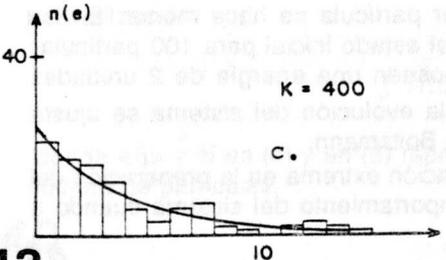


FIGURA 2



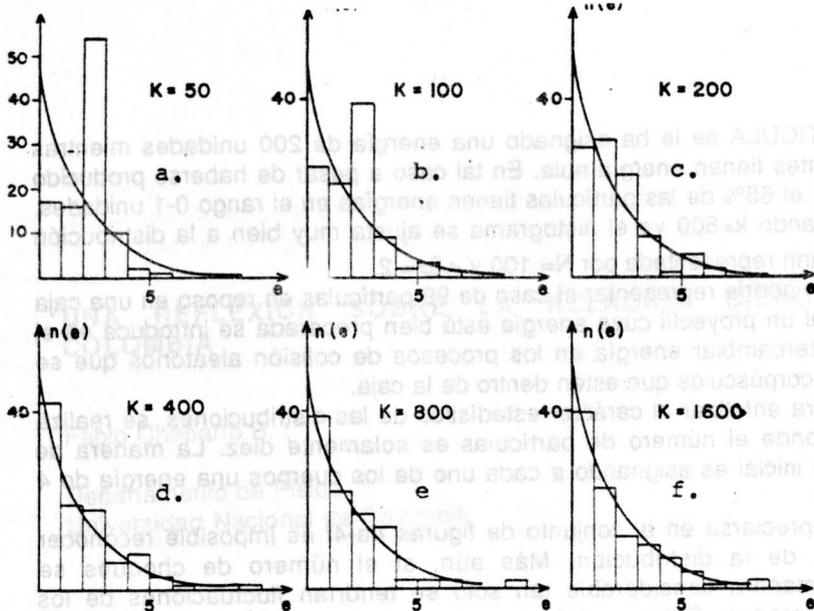


FIGURA 3

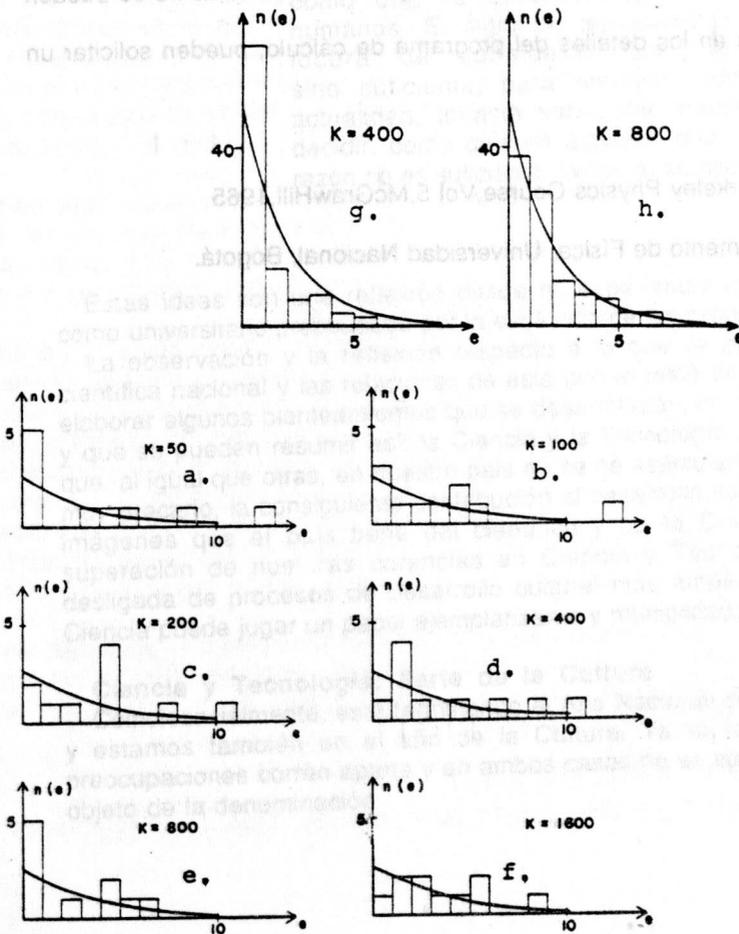


FIGURA 4

UNA SOLA PARTICULA se le ha asignado una energía de 200 unidades mientras que las 99 restantes tienen energía nula. En tal caso a pesar de haberse producido 400 interacciones, el 65% de las partículas tienen energías en el rango 0-1 unidades. Sin embargo, cuando $k=800$ ya el histograma se ajusta muy bien a la distribución teórica de Boltzmann representada por $N=100$ y $\langle \epsilon \rangle = 2$.

Esta simulación podría representar el caso de 99 partículas en reposo en una caja elástica, en la cual un proyectil cuya energía está bien preparada se introduce en el recipiente para intercambiar energía en los procesos de colisión aleatorios que se presenten con los corpúsculos que estén dentro de la caja.

Finalmente, para enfatizar el carácter estadístico de las distribuciones, se realiza una simulación donde el número de partículas es solamente diez. La manera de preparar el estado inicial es asignando a cada uno de los cuerpos una energía de 4 unidades.

Como puede apreciarse en el conjunto de figuras 4a-4f es imposible reconocer una TENDENCIA de la distribución. Más aún, si el número de choques se incrementara de manera considerable tan solo se tendrían fluctuaciones de los histogramas presentados. Esto se debe a que el número de partículas es tan pequeño, que las características estadísticas del conjunto de partículas no se pueden presentar.

Aquellos interesados en los detalles del programa de cálculo, pueden solicitar un listado al autor.

Referencias:

[1] Statistical Physics. Berkeley Physics Course, Vol 5, McGrawHill, 1965

(*) Profesor del Departamento de Física, Universidad Nacional, Bogotá.