

Características determinísticas de la distribución de Boltzmann

Deterministic characteristics of the Boltzmann distribution

J. A. HERNÁNDEZ BARAHONA¹

Recibido: 15 de enero de 2019 / Aceptado: 12 de diciembre de 2019

¹Escuela de Física, Universidad Nacional Autónoma de Honduras. email: jocsan.hernandez@yahoo.com

La distribución de Boltzmann viene a ser el primer paso de lo que conocemos como Mecánica Estadística, describe la energía esperada para un sistema que es capaz de intercambiar energía con un reservorio térmico, dejando de ver las propiedades termodinámicas de un sistema como una cosa certera y viéndolas más bien como un observable probabilístico; sin embargo dentro de este aparente movimiento azaroso de intercambio de energía entre un reservorio y un sistema, llamado ensamble canónico, existen ciertas características determinísticas, que se exploran con la ayuda de un programa desarrollado en el lenguaje Python en el presente trabajo.

The Boltzmann distributions is what we would call the first step in what is today Statistical Mechanics, it describes the mean energy of a system that is capable of interacting via the exchange of energy with a thermal reservoir, this leads us to see the thermodynamical properties of a system as a set of mean values reign by this distribution, rather than set values, however in this apparent random exchange of energy between a system and a heat reservoir, called a canonical ensemble, there are certain deterministic characteristics that we will explore with the aid of a computer program developed in Python language in this article.

PALABRAS CLAVES

Python, distribución de Boltzmann, Mecánica Estadística, probabilidad, ensamble canónico

KEYWORDS

Python, Boltzmann distribution, Statistical Mechanics, probability, canonical ensemble

PACS

05.20.-y

* Esta obra está bajo una licencia Creative Commons Reconocimiento - NoComercial 4.0 Internacional 

* This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License. 

I | INTRODUCCIÓN

La introducción por excelencia al problema que vamos a estudiar se trata de una analogía Blundell y Blundell (2006) imagine que tiene una caja grande que contiene 100 monedas idénticas. Uno puede cerrar la caja y batirla a más no poder, al abrir la caja notará que algunas monedas tienen la cara o la cruz arriba. Hay muchas configuraciones posibles que se pueden lograr haciendo este procedimiento (2^{100} para ser precisos, que viene a ser 10^{30}) y asumiremos que cada una de estas configuraciones se da con exactamente la misma probabilidad. Así, cada configuración tiene una probabilidad idéntica de existir de 10^{-30} , cada una de estas configuraciones particulares se llama microestado. Para identificar cada microestado deberíamos ser capaces de distinguir cada una de las monedas y si boca arriba muestran cara o cruz; sin embargo la manera menos extenuante de obtener el resultado de este «experimento» sería simplemente contar el número de monedas que están en cara y que están en cruz. A esto le llamamos macroestado del sistema, a diferencia de los microestados no son igualmente probables; por ejemplo de los casi 10^{30} microestados posibles, el siguiente número de configuraciones es posible:

$$\blacksquare \text{ 50 caras y 50 cruces} = \frac{100!}{50!50!} \approx 4 \times 10^{27}. \quad \blacksquare \text{ 100 caras y 0 cruces} = \frac{100!}{100!0!} = 1.$$

II | DOS SISTEMAS A LOS QUE SE LES PERMITE INTERCAMBIAR ENERGÍA

Consideremos dos sistemas grandes en contacto térmico y aislados del ambiente (véase la figura 1), los sistemas tienen energía E_1 y E_2 , la energía total es la suma de estas dos anteriores y está fija. Así la energía de uno de los dos sistemas basta para determinar el macroestado del sistema conjunto, con un número de microestados relacionados, así todo el sistema está en un microestado $\Omega_1(E_1)\Omega_2(E_2)$.

El sistema parecerá elegir el macroestado que maximiza el número de microestados; hay tres grandes suposiciones importantes para asumir esto:

- Cada microestado es igualmente probable.
- La dinámica del sistema es tal que los microestados del sistema están en cambio continuo.
- Con el tiempo suficiente el sistema estará en cada uno de los microestados posibles la misma cantidad de tiempo (hipótesis ergódica) de Oliveira y Werlang (2007).

Estas simples suposiciones nos llevan a concluir que lo más probable es que el sistema se encuentre en el macroestado con mayor microestados asociados a él, si el sistema es muy grande al decir «muy probable», me refiero a absolutamente y sobrecogedoramente probable; lo que parecería ser una simple suposición probabilística se convierte en una certeza prácticamente absoluta y esto es lo que el código de computadora demuestra, de hecho.

Hemos asumido que nuestros estados probabilísticos son grandes, entonces pueden ser descritos por el cálculo. Es necesario maximizar el número de microestados, podría ser con respecto a E_1 o E_2 , lo cual no es relevante ya que la energía del sistema total es constante. Por ello, se hará con respecto a E_1 :

$$\frac{d}{dE_1}(\Omega_1(E_1)\Omega_2(E_2)) = 0. \quad (1)$$

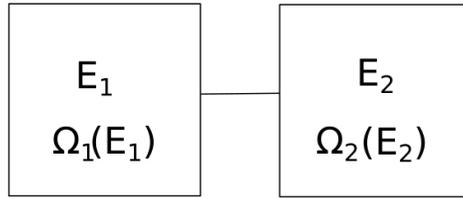


Figura 1: Dos sistemas a los que se les permite intercambiar energía

Y recordando que el que la energía esté fija implica que:

$$\frac{dE_2}{dE_1} = -1. \quad (2)$$

Las ecuaciones (1) y (2) nos llevan a la conclusión:

$$\frac{dLn(\Omega_1)}{dE_1} = \frac{dLn(\Omega_2)}{dE_2}. \quad (3)$$

Esta ecuación define la distribución más probable de la energía entre los dos sistemas ya que maximiza el número de microestados, esto normalmente se conoce como equilibrio térmico o más comúnmente «estar a la misma temperatura», evidencia experimental demuestra que esto debería ser igual a:

$$\frac{1}{k_B T} = \frac{dLn(\Omega)}{dE}. \quad (4)$$

III | EL ENSAMBLE CANÓNICO

El problema que nos concierne (el que se va a tratar con el programa) está íntimamente relacionado al ensamble canónico, a saber: tenemos un reservorio muy grande de energía térmica (un baño térmico) de energía E , que es capaz de darle energía a un sistema con capacidad térmica muy pequeña de energía ϵ , el reservorio tiene la capacidad de entregar esa pequeña cantidad de energía al sistema sin sufrir ningún cambio aparente, sin embargo la cantidad de microestados asociados a este proceso para la leve pérdida del reservorio será por tanto enorme ($\Omega(E - \epsilon)$), mientras que el sistema sólo tendrá un microestado asociado.

Así la probabilidad de que el sistema cuente con energía ϵ será:

$$P(\epsilon) \propto \Omega(E - \epsilon) \times 1. \quad (5)$$

Ahora tomando el logaritmo natural de la probabilidad y expandiendo en series de Taylor, obtenemos:

$$Ln\Omega(E - \epsilon) = Ln\Omega(E) - \frac{\epsilon}{k_B T} + \dots \quad (6)$$

Luego rechazamos los términos de orden superior al cuadrado al ser muy pequeños:

$$P(\epsilon) \propto e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}}. \quad (7)$$

La ecuación 7 es conocida como el factor de BoltzmanLandau y Lifshitz (1980).

IV | PROBLEMA A TRATAR Y CÓDIGO

Ahora, para ver de que hablamos cuando decimos que esta simple distribución de probabilidad resulta ser la certeza prácticamente absoluta cuando se trata de sistemas grandes, nos referiremos al siguiente experimento computacional, imagine que tenemos un sistema que tiene 400 posiciones, cada una de las posiciones en el estado inicial del sistema tiene un cuanto de energía, la energía total del sistema está fija (400 cuantos de energía), dejamos que las posiciones interactúen las unas con las otras, así un cuanto se puede mover aleatoriamente de una posición a la otra, no hay máximo de cuantos para una sola posición, bien podría tener 400 una sola posición; pero obviamente el mínimo es establecido de tal forma que ninguna posición tenga asignados cuantos negativos, supondremos que el movimiento de los cuantos es completamente aleatorio y este es un punto importante Knuth (1968). A primera vista y sin darle muchas vueltas al asunto, si movemos estos cuantos de manera aleatoria, no esperamos encontrar ninguna especie de patrón en su comportamiento final, aquí es donde entra la importancia de la hipótesis ergódica, en el programa se estableció que los cuantos se muevan muchas veces (varios cientos de miles, para ser exactos) y el resultado es por demás satisfactorio (a saber: está lejos de un comportamiento errante y aleatorio).

El código se muestra a continuación, donde se han retraído las clases del objeto ensamble:

```
# Programa que mueva cuantos de lugar al azar
#Importando modulos
import math
import random
import numeric
#Creando objeto ensamble
class Ensamble:

#El objeto ensamble recibe el tamaño y que tanto vale cada
#cuanto en un ensamble microcanonico
    def __init__(self, tamanyo, cuanto):

#Se inicia el ensamble de modo que cada microestado
#tenga la misma cantidad de cuantos
    def iniciar(self):

#empezamos a mover cuantos de lugar, por completo al azar
#de una posición a otro, cambiando así los microestados
#aquí elegimos las posiciones a las que se moverán
    def azar(self):

#Esto mueve los cuantos de uno en uno
    def mover(self):

#Esto mueve los cuantos un numero n de veces
    def maximizar(self, n):

#Definimos el valor maximo de energia presente
```

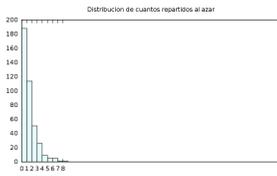


Figura 2: Histograma de la distribución de los cuantos de energía después de 340,000 iteraciones



Figura 3: Histograma de la distribución de los cuantos de energía después de 340,000 iteraciones

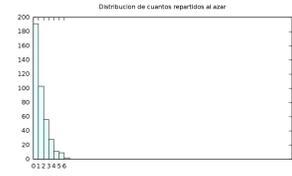


Figura 4: Histograma de la distribución de los cuantos de energía después de 340,000 iteraciones

```
def maximo(self):

#contamos la cantidad de cuantos que hay
def conteo(self,n):

#sacamos los datos
def histo(self):
ensamble= Ensamble(20,1)
ensamble.iniciar()
ensamble.maximizar(340000)
print(ensamble.histo())
```

V | RESULTADOS

Se realizaron tres pruebas con el código en cuestión, aquí es importante mantener en mente que el movimiento de cada cuanto es por completo al azar, aquí sólo se establecieron dos cosas cruciales que llevan a los resultados, la primera es que la energía total del sistema esté fija, la segunda es que los cuantos se puedan mover una gran cantidad de veces; los resultados se pueden ver en los tres histogramas de las figuras 2, 3, 4, donde se ve la energía asociada a la cantidad de espacios que contienen dicha energía.

Los resultados son por demás abrumadores, se puede notar claramente el comportamiento de una función exponencial con argumento negativo (mayor energía, menos espacios asociados a esa cantidad de cuantos), siendo que es muy poco probable encontrar un espacio que contenga más de 8 cuantos de energía asociados.

Uno de los mejores resultados está asociado al histograma de la figura 4, aquí se puede observar muy claramente una tendencia exponencial asociada a 2^{-n} .

Claro está los resultados se pueden observar mejor con una regresión linealizada, antes de ver los resultados de esta linealización tenga en mente que si bien 340.000 iteraciones suena a mucho, no lo es realmente, el resultado teórico se consigue al dejar pasar una cantidad prácticamente infinita de tiempo, a falta de dicha capacidad computacional, los mejores resultados obtenidos se observan en las figuras 5, 6, 7, cada uno asociado a los histogramas anteriores en orden.

De nuevo, el mejor resultado está asociado a la regresión de la figura 7, en realidad no hay una razón

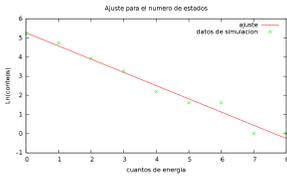


Figura 5: Linealización de la distribución de los cuantos después de 340,000 iteraciones

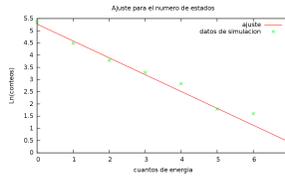


Figura 6: Linealización de la distribución de los cuantos después de 340,000 iteraciones

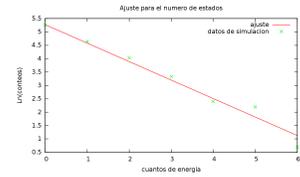


Figura 7: Linealización de la distribución de los cuantos después de 340,000 iteraciones

particular para esto, ya que la simulación se realizó en igualdad de condiciones; pero se puede ver la gran precisión a que esto nos lleva (recuerde, los cuantos fueron movidos al azar, en principio no debería existir ninguna distribución asociada a los mismos).

VI | CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Se logró obtener el resultado esperado de que el movimiento aleatorio de muchos cuantos estuviese descrito por una distribución probabilística como la de Boltzmann, siendo el mejor de los resultados el relacionado a la tercer iteración (figuras 7 y 4), concluyendo que no hay razón en específico para que esta haya sido la que de mejor resultados. Vemos también la importancia de la hipótesis ergódica, ya que es una parte fundamental de las tres suposiciones presentadas el hecho de que los cuantos se muevan muchas veces a varios lugares, como trabajo futuro se busca realizar una labor similar en física computacional para un caso semiclásico, incluyendo ya nociones de mecánica cuántica para verificar como es que principios similares a estos (por demás clásicos y más que todos probabilísticos) nos llevan necesariamente a que la función de partición es la que contiene toda la información termodinámica de un sistema.

I | REFERENCIAS

- Blundell, S., y Blundell, K. (2006). *Concepts in thermal physics*. Oxford: Oxford University Press.
- de Oliveira, C. R., y Werlang, T. (2007, 9). Ergodic hypothesis in classical statistical mechanics. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 29(2), 189–201. (San Carlos)
- Knuth, D. (1968). *The art of computer programming*. Boston: Addison-Wesley.
- Landau, L. D., y Lifshitz, E. M. (1980). *Statistical physics. course of theoretical physics*. Oxford: Pergamon Press.