TRABAJO PRÁCTICO:

SIMULACIONES RELACIONADAS CON EL TEMA ENTROPIA

ACTIVIDAD 1: Urna de Boltzman

Introducción

La simulación representa resultados del procedimiento de extracción de un número de bolitas de una urna que contiene igual número de bolitas rojas y azules. Lo único que distingue a una bolita de otra es el color. Se puede establecer el número de bolitas a extraer y el número de extracciones a realizar. En pantalla aparece una urna conteniendo las bolitas de colores con algunos botones que permiten operar opciones de configuración interna. Un botón permite modificar la velocidad de extracción desde un modo lento hasta un modo más rápido; otro botón permite fijar el número de bolitas a extraer (de 2 a 15); otro botón permite elegir el número de extracciones (de 1 a 991) y finalmente un botón permite visualizar los histogramas de frecuencia y la probabilidad en función del número de bolitas azules extraídas. En el applet se observan las bolitas azules.

Objetivos.

- Distinguir entre frecuencia y probabilidad
- Adquirir concepto de configuración, macroestados y microestados.

Actividades

1.1.- Frecuencia y Probabilidad

a) Como primer paso, explorar la simulación y analizar los casos que se indican en la tabla siguiente. Para cada caso, capturar las imágenes de las gráficas de frecuencia y probabilidad e insertarlos en la hoja:

Nº de bolitas a extraer	**Nº de extracciones**
3	**4**
3	**50**
15	**4**
15	**50**
15	**990**

b) Responder las siguientes cuestiones:

i) ¿En qué casos las gráficas de probabilidad y frecuencia se aproximan más entre sí?

ii) ¿Cómo cambia la curva de probabilidad con el aumento del número de bolitas extraídas?

iii) El applet solo admite extraer un máximo de 15 bolitas y 1000 extracciones. ¿Qué sucedería para 15 bolitas en las gráficas de probabilidad y frecuencia, si se pudiera hacer un número de extracciones muy grande, como por ejemplo 10000 extracciones?

1.2.- Macroestados y Microestados. Multiplicidad

a) Extracción de cuatro bolitas

Presentamos más abajo una tabla, en la que se muestran los modos posibles que pueden ocurrir en la extracción de 4 bolitas. Cada cuadradito coloreado indica una bolita (azul o roja). Caracterizamos cada configuración por el número de bolitas azules. Las posibles configuraciones serán: A: 0 bolitas azules; B: 1 bolita azul; C: 2 bolitas azules; D: 3 bolitas azules; E: 4 bolitas azules. Cada configuración constituye un macroestado. A cada macroestado corresponde un valor de multiplicidad que viene dado por el número de microestados asociados con él.

Observamos que:

- la configuración A puede obtenerse de 1 solo modo (1 microestado)
- la configuración B puede obtenerse de 4 modos (4 microestados)
- la configuración C puede obtenerse de 6 modos (6 microestados)
- la configuración D puede obtenerse de 4 modos (4 microestados)
- la configuración E puede obtenerse de 1 solo modo (1 microestado)

Completar la tabla y responder cuál es el macroestado más probable; cuál es la cantidad de microestados que le corresponde y cuál es la cantidad total de microestados total del sistema.

I	II	III	IV	(Macroestados)	Multiplicidad (Nº de microestados) Ω	Probabilidad
				A	**1**	**1/16**
				B	**4**	
				C	**6**	
				D	**4**	
				E	**1**	

b) Caso general (N bolitas)

En el caso anterior, la multiplicidad (**Ω**) puede determinarse fácilmente contando los microestados correspondientes a cada macroestado. Pero si el número de bolitas a extraer es mayor, la situación se complica, por lo que importante contar con una expresión general que permita realizar el cálculo.

Consideremos extracciones de N bolitas. Los diferentes macroestados corresponderán a 1 bolita azul; 2 bolitas azules; …….; (N-1) bolitas azules; N bolitas azules.

Nos interesa el número de modos distintos en que podemos extraer **N** bolitas con una configuración determinada, es decir, n_b bolitas azules y n_r bolitas rojas. No nos importa el orden en que las bolitas son extraídas.

El número de diferentes modos en que es posible ordenar **N** objetos distintos es **N!** **(*permutaciones* de *N*)**. Pero el número de modos de la configuración mencionada será menor que **N!,** ya que no nos interesan las permutaciones de las bolitas azules entre sí, ni de las rojas entre sí (las bolitas azules son indistinguibles entre sí; ídem las rojas).

Entonces, el número de modos en que podemos obtener n_b bolitas azules y n_r rojas en **N** extracciones viene dado por:

$$\Omega = N! / (n_b!\, n_r!)$$

O, teniendo en cuenta que $n_r = N - n_b$,

$$\Omega = N! / n_b!\, (N - n_b)!$$

Otro modo de explicar la expresión es la siguiente:

Hay un sólo modo de ordenar **N** esferas idénticas, ya que, siendo idénticas, cualquier sucesión es equivalente a cualquier otra; mientras que hay muchos modos diferentes de ordenar **N** esferas distintas: **N** esferas, todas diferentes, pueden ser ordenadas en **N!** *(factorial de N)* modos distintos (la primera en **N** modos, la segunda en **(N-1)** modos, etc....), pero si n_b son idénticas entre sí y n_r son también idénticas entre sí (aunque diferentes de las precedentes), $n_b!$ y $n_r!$ modos no son más distintos, y el número **N!** deberá ser dividido por $n_b!$ y por $n_r!$.

Si la urna hubiese contenido tres colores (azul, rojo y verde), el número de modos en que habríamos podido obtener n_b bolitas azules, n_r bolitas rojas y n_v verdes, viene dado por:

$$\Omega = N! / (n_b!\, n_r!\, n_v!)$$

Podemos ahora generalizar la expresión. El número de modos distintos de una partición de N partículas en n grupos distintos ($n_1!n_2!$ $n_2!....n_n$) formados sobre la base de n propiedades distintas (color, valor de la energía, dimensiones,........), es:

$$\Omega = N!/(n_1!n_2!\, n_2!....n_n!)$$

c) **Aplicación del caso general.** Análisis para el caso en que se extraen 15 bolitas.

Con ayuda de una planilla Excel, completar la tabla siguiente para el caso de extracción de 15 bolitas y representar gráficamente la multiplicidad y la probabilidad en función del número de bolitas azules.

n_b (cantidad de bolitas azules	Multiplicidad (Ω) $\Omega = N!/n_b!(N-n_b)!$	Probabilidad
0		
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		

Comparar la gráfica de probabilidad obtenida con la que presenta el applet para el caso de extracción de 15 bolitas.

Responder:

- ¿Cuál es el macroestado con mayor número de microestados y por ende el más probable?
- ¿Cuál es el número total de microestados?

d) Análisis comparativo.

Utilizando una planilla Excel, analizar los casos correspondientes a N=20 y N=100, completando los datos de la siguiente tabla. Representar gráficamente la multiplicidad y la probabilidad para cada caso.

N= 20			N=100		
n_b.	**Ω**	**Probabilidad**	**n_b**	**Ω**	**Probabilidad**
0			**0**		
1			**5**		
2			**10**		
3			**15**		
4			**20**		
5			**25**		
6			**30**		
7			**35**		
8			**40**		
9			**45**		
10			**50**		
11			**55**		
12			**60**		
13			**65**		
14			**70**		
15			**75**		
16			**80**		
17			**85**		
18			**90**		
19			**95**		
20			**100**		

Responder:

- ¿Qué diferencias se observan en las gráficas de los dos casos anteriores? Explicar.
- ¿Qué forma adoptarían dichas gráficas si N fuera enormemente grande?

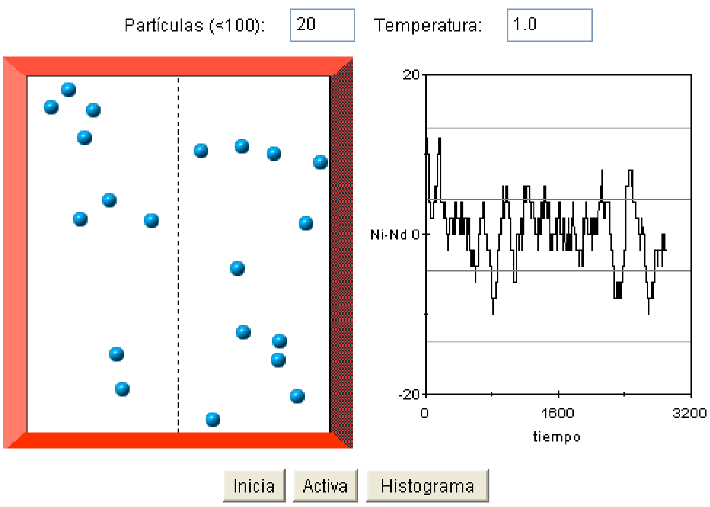
TRABAJO PRÁCTICO:

SIMULACIONES RELACIONADAS CON EL TEMA ENTROPIA

ACTIVIDAD 2: Irreversibilidad y Fluctuaciones en el equilibrio

Introducción

El applet simula moléculas de un gas ubicadas en una caja. El modelo es bidimensional y las moléculas son representadas por discos rígidos. Se consideran para el análisis solo las posiciones de las moléculas y de un modo muy simplificado: se analiza solamente como se reparten las moléculas en cada momento entre la mitad izquierda y la derecha de la caja. Concretamente, la variable que se contabiliza es la diferencia entre el número de moléculas ubicadas en la mitad izquierda y el número de moléculas ubicadas en la mitad derecha ($N_i - N_d$).



El applet permite variar el número de moléculas y la temperatura. Inicialmente todas las moléculas están ubicadas en la mitad izquierda.

El modelo es similar al caso ya analizado de la Urna de Boltzmann. El número de bolitas azules en ese caso, corresponde aquí al número de moléculas en el lado izquierdo. Cada extracción en la Urna corresponde aquí a un suceso con una distribución particular de moléculas a la izquierda y a la derecha.

Es importante tener en cuenta que el modelo utilizado en el applet es sumamente simplificado y no contempla adecuadamente toda la complejidad correspondiente a la representación de un gas. Por un lado, las variables que deberíamos considerar incluyen la velocidad de las moléculas, además de su posición. Por otro lado, la posición ha sido solo considerada en una dimensión y con sólo 2 valores discretos (izquierda y derecha).

A diferencia de la Urna, este applet nos muestra la secuencia temporal. A la derecha del recipiente una gráfica muestra permanentemente ($N_i - N_d$) en función del tiempo. Nótese que el applet no representa el número de moléculas a la izquierda (N_i) sino la diferencia $N_i - N_d$. De modo equivalente, en los gráficos de la Urna de Boltzmann podría haberse trabajado con la diferencia entre el número de bolitas azules y el número de bolitas rojas.

Abajo del recipiente se encuentran 3 botones. Pulsando **Inicia**, comienza la evolución en la que las moléculas se mueven aleatoriamente. El botón **Pausa** detiene el proceso. Para continuar hay que pulsar **Activa**. El botón **histograma** abre una ventana que muestra la gráfica de frecuencia de ($N_i - N_d$). Pulsando ese botón en distintos momentos pueden obtenerse gráficos sucesivos que permiten observar cambios en la frecuencia.

Objetivos:

- Analizar la noción de equilibrio y el concepto de irreversibilidad desde una perspectiva microscópica.

- Observar que en el equilibrio el valor medio de las magnitudes macroscópicas se mantiene constante, aunque dichas magnitudes muestran fluctuaciones en torno a ese valor medio.
- Observar las fluctuaciones en el equilibrio y comprender que las mismas decrecen con N (número de partículas del sistema)

Actividades.

2.1 Equilibrio y fluctuaciones en el equilibrio

a) Fijar el número de partículas en 2; luego en 4; luego en 10; luego en 20, luego en 60 y finalmente en 90. En todos los casos fijar la temperatura en un valor 8. Una vez que inicie la simulación, dejar correr el tiempo y para cada caso, apretando pausa, capturar: la imagen del recipiente; la gráfica que aparece a la derecha y el histograma correspondiente, insertándolos en la hoja. Analizar las gráficas y explicar las diferencias.

b) Responder las siguientes cuestiones

i) En los casos analizados, ¿diría que el sistema ha alcanzado el equilibrio? ¿Cómo caracterizaría usted equilibrio?

ii) ¿Se mantiene constante el número de partículas en el lado izquierdo cuando el sistema está en equilibrio? Si no es así, ¿en qué consiste el equilibrio?

iii) Considere la gráfica de $N_i – N_d$ en función del tiempo de cada uno de los casos anteriores. Describa de modo cualitativo el comportamiento de ($N_i – N_d$) en función del tiempo en el equilibrio. ¿qué indican las variaciones o fluctuaciones que se observan en la gráfica? ¿Cuál es el valor medio de $N_i – N_d$? ¿Ese valor medio varía o permanece constante en el tiempo?

iv) ¿Podría asociar Ni y Nd con alguna variable macroscópica, en el caso de que se tratara de las moléculas de un gas? ¿Cómo describiría el comportamiento de esa variable en el equilibrio?

v) ¿Considera que las variaciones o fluctuaciones son perceptibles o podrían detectarse a través de algún instrumento? ¿Cambia su respuesta en función del número de moléculas N utilizadas en el modelo? Explique.

2.2. Irreversibilidad y la dirección del tiempo.

La experiencia nos dice que un gas se expande hasta ocupar todo el recinto, y que nunca se observa que el gas se vuelva a concentrar en una parte del recipiente. Se argumenta así que la evolución temporal nos conduce de un estado inicial, con el gas concentrado en una región, a un estado final, con el gas ocupando todo el recinto. Pero la situación inversa no se observa. Por ello, la secuencia de estados tiene una dirección temporal determinada y se dice que el proceso es irreversible.

Considerando los casos analizados en la simulación, diría Ud. que los procesos observados son irreversibles? Depende su respuesta del valor de N considerado? Explicar.

TRABAJO PRÁCTICO:

SIMULACIONES RELACIONADAS CON EL TEMA ENTROPIA

ACTIVIDAD 3: Tirada de monedas

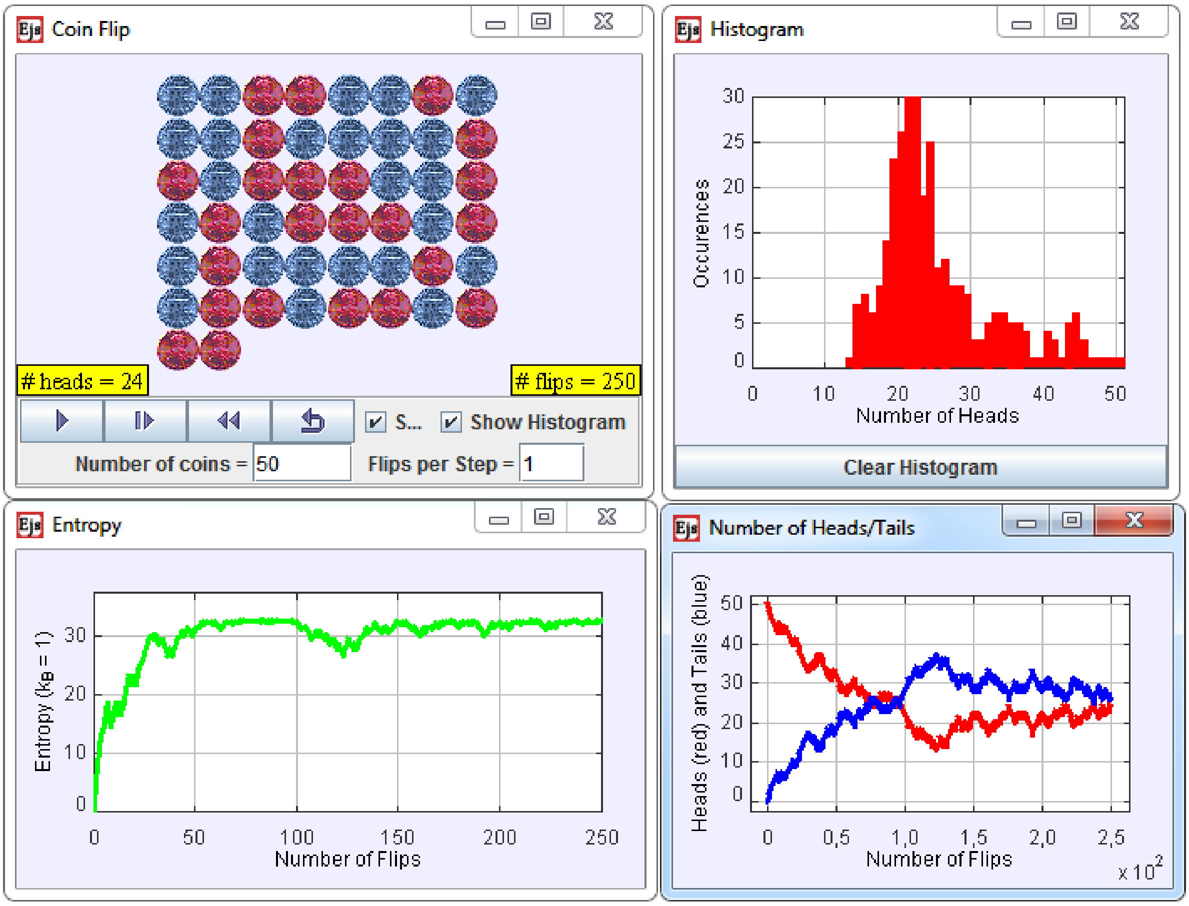
Introducción

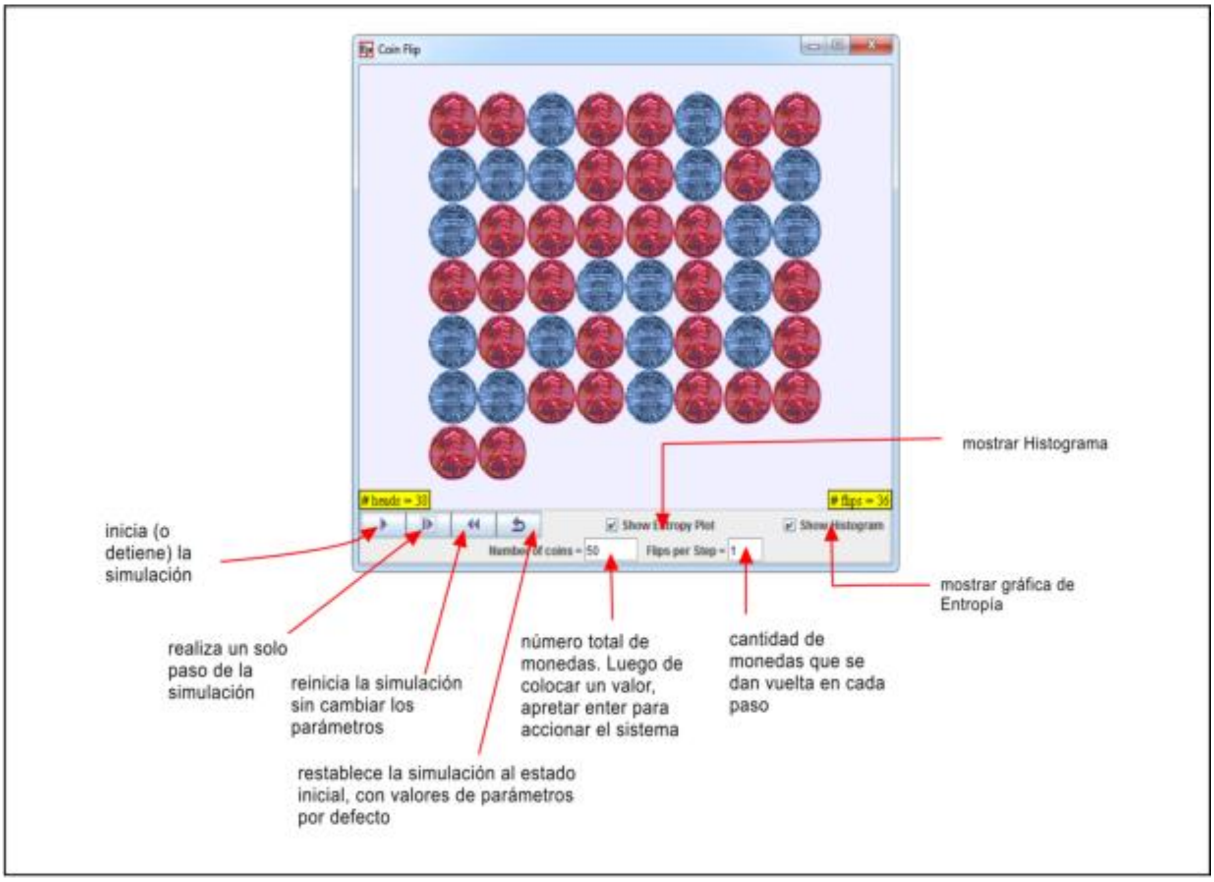
La simulación modela un sistema simple de N monedas dispuestas en filas ordenadas. Inicialmente todas las monedas están con la cara hacia arriba. En cada paso de la simulación una moneda es elegida al azar y dada vuelta. Una ventana de animación muestra el conjunto de monedas (con las caras en color rojo, y cruces en color azul). Se muestra gráficamente el número de caras (en rojo) y cruces (azul) en función del tiempo (en realidad, en función del número de pasos realizados).

Dos botones en la consola principal permiten además abrir dos ventanas en las que se representa el histograma de frecuencias (del número de veces que el sistema ha tenido un determinado número de caras hacia arriba) y la "entropía" del sistema, calculada como $S = \ln\Omega$ (se adopta k=1).

El usuario puede cambiar el número total de monedas (de 2 a 2000) colocando el número deseado en la ventana correspondiente (hay que presionar ENTER para que el sistema acepte el nuevo valor, y luego el botón de inicio para comenzar). También puede establecerse el número de monedas que el sistema da vuelta (flips) en cada paso (step), colocando el número deseado en Flips per Step (un valor grande hace que la simulación funcione más rápido).

Las figuras siguientes muestran las ventanas disponibles y explican los controles en la consola principal.





Objetivos:

- Profundizar las características del equilibrio en un sistema análogo al caso de las partículas en una caja.
- Verificar la diferencia en el comportamiento del sistema para valores grandes y pequeños de N. Observar las fluctuaciones en el equilibrio y comprender que las mismas decrecen con N (número de partículas del sistema)
- Analizar cómo varía la entropía del sistema en función del tiempo y observar el comportamiento de S(t) para valores grandes y pequeños de N.
- Establecer relaciones en el comportamiento de las diferentes gráficas que describen el sistema.

Actividades.

3.1- Explorando la Simulación.

a) Observe el comportamiento del sistema para cantidades pequeñas y grandes de monedas. Pruebe con 2, 4, 20, 100, 1000, 2000 monedas. En cada caso observe los cambios que se producen en las tres ventanas disponibles. Puede seguir las simulaciones paso a paso o dejarlas correr de manera continua. También puede elegir dar vuelta una moneda por paso o más monedas en cada paso.

b). Capture las imágenes para los casos de 20 y para 1000 monedas. En ambos casos corra las simulaciones a razón de 1 flip por step y tome las imágenes cuando se hayan transcurrido 200 flips. Analice las gráficas obtenidas y explique cualitativamente las diferencias que observa entre los dos casos considerados. ¿A qué atribuye Ud. las diferencias observadas?

3.2. Equilibrio y fluctuaciones en el equilibrio.

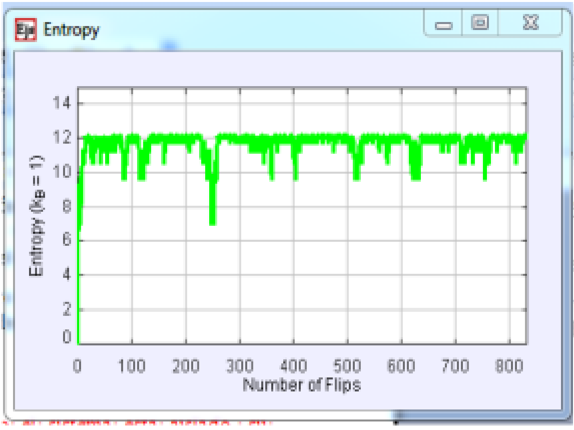
a) Considere el caso de 1000 monedas. Deje correr la simulación hasta que considere que el sistema ha alcanzado el equilibrio y detenga la simulación. Capture las imágenes. ¿qué criterio utilizó para determinar cuando el sistema ha alcanzado el equilibrio?

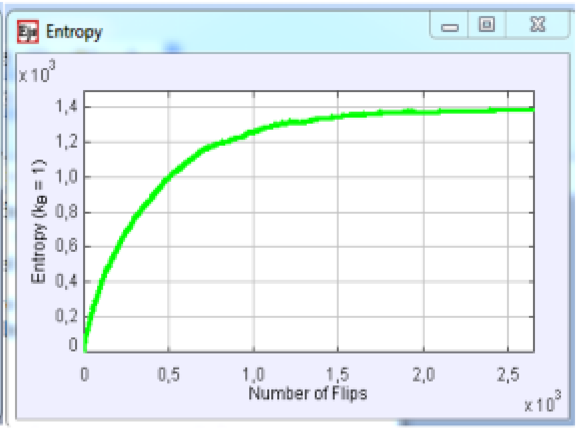
b) Considere el caso de 10 monedas. Deje correr la simulación hasta que considere que el sistema ha alcanzado el equilibrio y detenga la simulación. Capture las imágenes. ¿qué criterio utilizó para determinar cuando el sistema ha alcanzado el equilibrio?

c) ¿Qué valor toma, en el equilibrio, la variable "número de caras" para los casos considerados en (a) y en (b)? ¿Puede dicho valor considerarse constante, o presenta fluctuaciones? Explique.

3.3. Entropía

a) Las gráficas de abajo representan la entropía del sistema para 20 monedas y 2000monedas respectivamente. Como puede verse, son muy diferentes. Intente expicar por qué se dan esas diferencias.





b) Cuando consideramos sistemas reales, sabemos que, cuando el sistema está aislado, su entropía crece hasta alcanzar un valor estable máximo. En el caso de la tirada de monedas, ¿es válida esta afirmación en los sistemas de pocas monedas? A partir de qué número de monedas podemos considerar que se produce esa tendencia?

3.4. Relación entre la tirada de monedas y las partículas en una caja

Compare la simulación "Tirada de monedas" con la realizada en la actividad 2 que corresponde a las partículas en una caja. ¿En que sentido se las puede considerar semejantes? Explique

TRABAJO PRÁCTICO:

SIMULACIONES RELACIONADAS CON EL TEMA ENTROPIA

ACTIVIDAD 4: Multiplicidad

Introducción

El applet muestra de cuantos modos podemos distribuir una energía dada E_T entre un número determinado N de partículas. La energía total viene dada por la suma de las energías de cada partícula. A cada partícula puede atribuírsele una unidad discreta de energía, de valor 1ε, 2 ε, 3 ε …, compatible con la energía total. La energía total, que se mantiene fija, queda entonces expresada en función de las energías individuales por la siguiente expresión:

$$\mathbf{E_T = n_1 .\, 1\varepsilon + n_2 .\, 2\varepsilon + n_3 .\, 3\varepsilon + \ldots + n_n .\, n\varepsilon}$$

donde n_1, n_2, …n_n representan respectivamente el número de partículas que poseen las energías 1ε, 2ε, ….,nε. (con $n_1 + n_2 + \ldots + n_n = N$).

A diferencia del applet anterior, esta simulación no presenta una secuencia temporal. Sólo muestra, para diferente número de partículas N y de valores de energía total E_T, todas las configuraciones posibles, y los diferentes modos (diferentes microestados) en que las partículas pueden disponerse en cada configuración. En este caso, los microestados están caracterizados en términos de la energía, sin ninguna referencia a coordenadas espaciales.

Objetivos

- Observar las diferentes configuraciones (macroestados) de las partículas respecto de la ocupación de los niveles de energía y los microestados asociados a cada una de ellas.
- Reconocer el macroestado de mayor probabilidad ($\Omega_{\mathbf{max}}$) y asociarlo con la situación de equilibrio.
- Interpretar las fluctuaciones en el equilibrio a partir de las probabilidades de los diferentes macroestados.

Actividades:

4.1. Análisis de algunos casos

a) Trabajando con 4 partículas y una energía total igual a 8, analice todas las configuraciones posibles; el número de microestados correspondientes a cada configuración y complete la siguiente tabla: En cada caso capturar las imágenes que correspondan; insertarlas en la hoja y discutir la distribución

	Macroestado	**Número de microestados (Ω)**	**Probabilidad**
I	1ε,1ε, 1ε, 5ε	4	
II			
III			
IV			
V			
Número Total de microestados			

b) El applet sólo muestra hasta un máximo de cinco partículas y energía igual a 11. Capturar las imágenes para esa distribución y analizar los resultados obtenidos. Calcular **Ω**.

4.2. Análisis de 6 partículas con Energía Total 12

Para valores mayores, los números se hacen muy grandes, pero aparece una situación interesante. La tabla muestra las 11 distribuciones posibles en el caso en que **N=6 y E_T= 12**

	Macroestado	**Número de microestados (Ω)**	**Probabilidad**
I	7ε, 1ε, 1ε, 1ε, 1ε, 1ε	6	
II	6ε, 2ε, 1ε, 1ε, 1ε, 1ε	30	
III	5ε, 3ε, 1ε, 1ε, 1ε, 1ε	30	
IV	5ε, 2ε, 2ε, 1ε, 1ε, 1ε	60	
V	4ε, 4ε, 1ε, 1ε, 1ε, 1ε,	15	
VI	4ε, 3ε, 2ε, 1ε, 1ε, 1ε,	120	
VII	4ε, 2ε, 2ε, 2ε, 1ε, 1ε,	60	
VIII	3ε, 3ε, 3ε, 1ε, 1ε, 1ε	20	
IX	3ε, 3ε, 2ε, 2ε, 1ε, 1ε	90	
X	3ε, 2ε, 2ε, 2ε, 1ε, 1ε,	30	
XI	2ε, 2ε, 2ε, 2ε, 2ε, 2ε.	1	
Número Total de Microestados		462	

Se observa que hay una configuración que tiene un número de microestados notablemente más grande que las otras, y, por lo tanto, una probabilidad mucho más alta. Llamaremos a ésta configuración: configuración más probable, y es a la que puede asociarse un mayor número de microestados. En el caso indicado en la tabla, la configuración VI tiene una probabilidad del orden del 26 % [(120/462)*100].

Supongamos entonces, que el sistema se hubiera preparado de modo tal que se encontrara inicialmente en el macroestado II, y que luego las partículas (por razones internas, como por ejemplo, interaccciones entre ellas), pudieran cambiar de nivel, manteniendo el sistema aislado, es decir, sin modificar su energía total. El sistema podría estar entonces en cualquiera de sus 462 microestados, pasando sucesivamente por cualquiera de ellos. Sin embargo, como el macroestado VI es el más probable, el sistema se encontrará la mayor parte del tiempo en alguno de los 120 microestados correspondientes a él. Ese macroestado (donde **$\Omega = \Omega_{max}$)** suele denominarse macroestado de equilibrio.

Considerando lo analizado, responder las siguientes cuestiones:

i) En el caso anterior, y suponiendo que el sistema está en equilibrio, ¿puede el sistema estar en algún momento en el macroestado (3ε, 3ε, 2ε, 2ε, 1ε, 1ε)? ¿y en el (7ε, 1ε, 1ε, 1ε, 1ε, 1ε)? ¿.Cuantas más chances tiene el sistema de estar en el primero respecto del segundo?.

ii) Si el sistema se encuentra en equilibrio, puede pasar de un microestado a otro? Si es así, ¿esto produce efectos macroscópicos o cambios macroscópicos en el sistema? ¿Cómo incide en la respuesta el número de partículas N que constituyen el sistema? Piense en el análisis de las fluctuaciones realizado en la actividad de las moléculas en una caja.

iii) En el caso considerado, el macroestado de equilibrio incluye el 27% del total de microestados del sistema. Si consideramos otro sistema con mayor número de partículas, que piensa que ocurrirá con ese porcentaje? ¿aumenta, disminuye o se mantiene en torno a ese valor?. Justifique su respuesta.

NOTA: Los applets utilizados en el Trabajo Práctico pueden también consultarse en sus páginas de origen:

http://www.griaf.unipa.it/ProTerm/entropia/applets/urna/applet_estrazioni.htm

http://valbuena.fis.ucm.es/expint/html/sistemas/irrever/fluc.html

http://www.compadre.org/psrc/items/detail.cfm?ID=10090&Attached=1

http://www.griaf.unipa.it/ProTerm/entropia/modi_equilibrio.htm