

Proyecto Final

Juan B. Benavides y Juan P. Vanegas

18 de diciembre de 2019

1. Sistema Físico

La entropía es uno de los conceptos físicos más difíciles de comprender. Para llegar a él se puede ver desde el punto de vista termodinámico, o desde un punto de vista más cercano a la teoría de la información. A partir de este segundo camino podemos definir la entropía como la cantidad de información que nos hace falta, en promedio, para saber la posición y velocidad de todas las moléculas (J.D. Muñoz).

En este informe se estudiara la entropía de un sistema difusivo y se estudiara como se relaciona con el estado de equilibrio del sistema. Se comienza con una taza de café a la que se le echa una gota de crema en el centro. Por simplicidad se asumira que se tiene una taza bidimensional con una distribución inicial de crema como la mostrada en la figura 1. Las figuras 1, 1 y 1 muestran como evoluciona la difusión de la crema usando un algoritmo de Random Walk. Se asume que en las posiciones $x = \pm 100$, y $y = \pm 100$ hay paredes y por lo tanto la crema esta confinada a permanecer en dicho espacio.

Estas imagenes muestran como se reproduce un proceso difusivo usando esta simula-

ción, sin embargo, nos interesa ir más allá y estudiar en este sistema la segunda ley de la termodinámica y como esta se relaciona a la forma en que el sistema se acerca al equilibrio. Recordemos que la mecánica estadística establece que la entropía de un sistema cerrado siempre aumenta o permanece constante y que permanece constante solo cuando el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico.

Para medir la entropía se divide el espacio en celdas y se calcula la probabilidad P de que haya una molécula en una celda dada contando el numero de moleculas en la celda y dividiendo entre el número total de moléculas. Luego, la entropía se calcula según la definición usual de la mecánica estadística como:

$$S = - \sum_i P_i \log P_i \quad (1)$$

En este caso, se suma sobre todas las moléculas y se mide la probabilidad de que cada molécula se encuentre en una celda dada. Si la probabilidad de que la molécula este en una celda es cero, esa celda no se tienen en cuenta para evitar el error en el logaritmo.

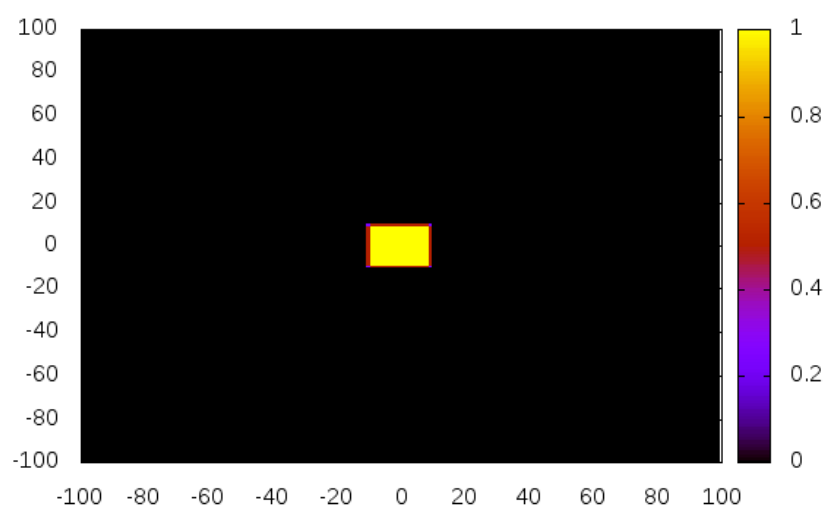


Figura 1: Configuración inicial usando algoritmo procedimental con 400 partículas de crema.

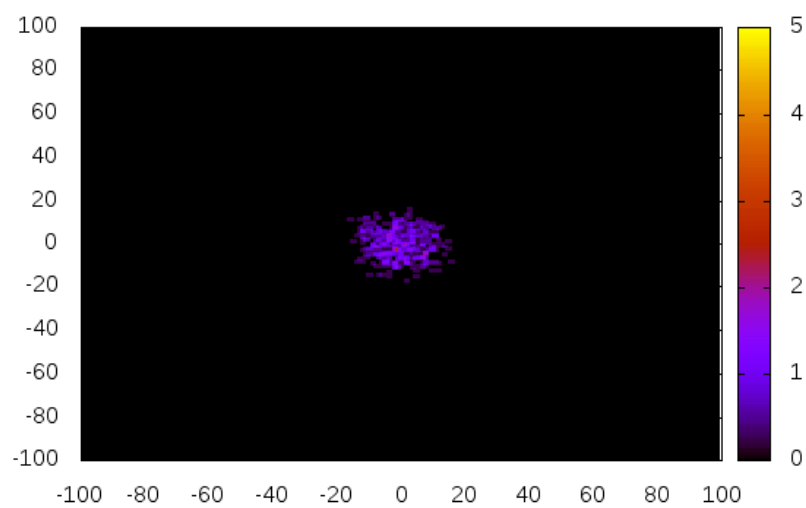


Figura 2: Difusión después de 10^4 pasos de tiempo usando algoritmo procedimental con 400 partículas de crema

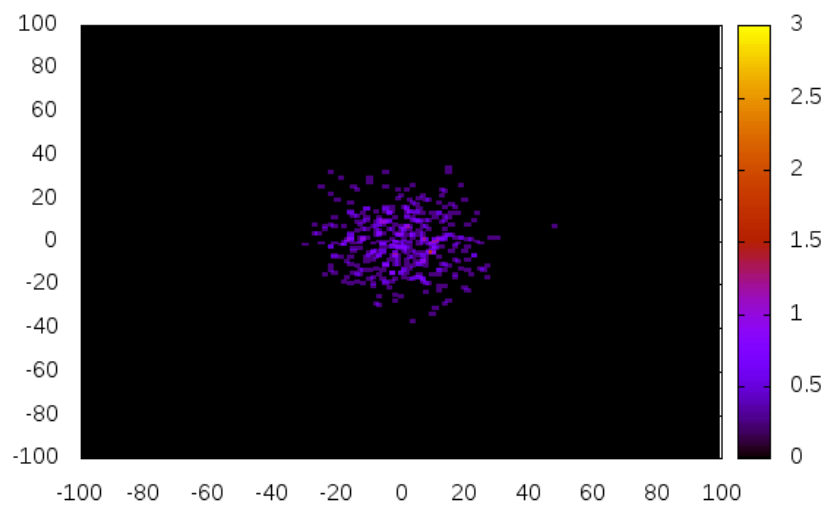


Figura 3: Difusión después de 10^5 pasos de tiempo usando algoritmo procedimental con 400 partículas de crema

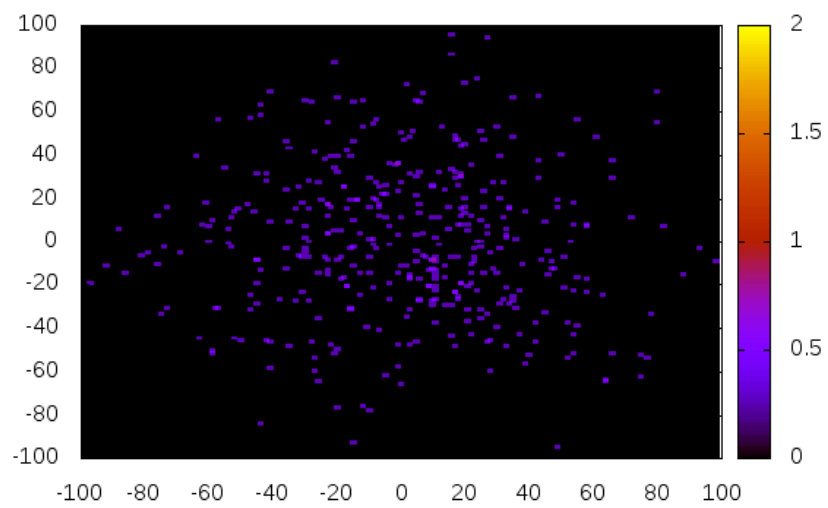


Figura 4: Difusión después de 10^6 pasos de tiempo usando algoritmo procedimental con 400 partículas de crema

2. Algoritmos y Validación

Para modelar este fenómeno utilizamos dos paradigmas de programación diferentes: Procedimental y Orientado a Objetos, cada uno utilizando un algoritmo de propagación diferente. El algoritmo utilizado para el paradigma procedimental, descrito en la figura 5, que consta en un arreglo de moléculas, donde cada elemento tiene la posición en x y y de una molécula. Para evolucionar el sistema se elige al azar una molécula, y se modifica su posición, de manera que se mueva una unidad en alguna dirección aleatoria. Este procedimiento de elegir una molécula y moverla se toma como un paso de tiempo.

Por otro lado, para el paradigma orientado a objetos se implementó el algoritmo descrito en la figura 6, que consiste en una matriz bidimensional de enteros no negativos, o Lattice, donde se representan las moléculas como el número de cada celda. Para mover las moléculas se recorre el Lattice celda por celda, y en caso de que se encuentre al menos una molécula en una celda se mueve a alguna casilla inmediatamente adyacente a la celda. Utilizando este algoritmo se toma un paso de tiempo está dado por un recorrido completo al Lattice, a diferencia del criterio empleado en el paradigma procedimental.

Dos factores a considerar en este algoritmo es que, primero, en dado caso que una molécula al desplazarse se ubique en la celda donde el algoritmo continúa buscando, esta

se moverá dos veces. Este caso, aunque poco probable, conlleva a una ligera pérdida de información frente al algoritmo procedimental.

En segundo lugar, dado que un paso de tiempo del paradigma orientado a objetos implica mover aproximadamente todas las moléculas, cada paso de tiempo de este algoritmo es N veces más rápido que el algoritmo procedural, con N el número inicial de moléculas. Por lo tanto, cualquier cálculo que se realice en función del tiempo se verá directamente afectado, resultando en que el algoritmo orientado a objetos solo calcula una variable cada 400 cálculos del algoritmo procedural. Este factor sí debe tenerse en cuenta, y solo puede ser despreciado en caso de que el tiempo computacional total que se deba utilizar para hallar resultados concluyentes sea mucho mayor a 400.

Para validar cada uno de estos métodos se calculó la entropía usando la ecuación 1 en función del tiempo de cómputo, donde esperamos que inicialmente halla un crecimiento muy rápido de la entropía del sistema, que para este caso corresponde a la gota de crema difundiéndose por la taza. Luego esperamos que la entropía se estabilice y tenga un comportamiento asintótico alrededor de algún valor, que corresponde al momento en el que la crema se haya distribuido de manera más o menos uniforme alrededor de la taza y por lo tanto, el sistema llega al equilibrio.

Vemos que en ambos paradigmas, y por lo tanto, algoritmos, el comportamiento de la entropía en función del tiempo es el esperado,

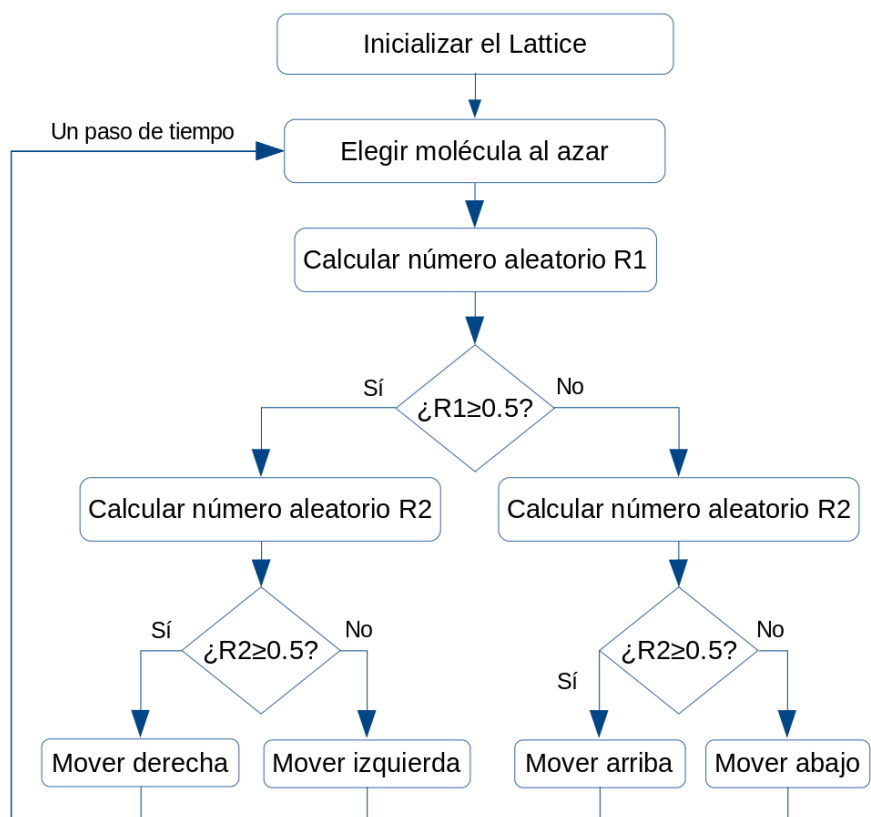


Figura 5: Algoritmo 1.

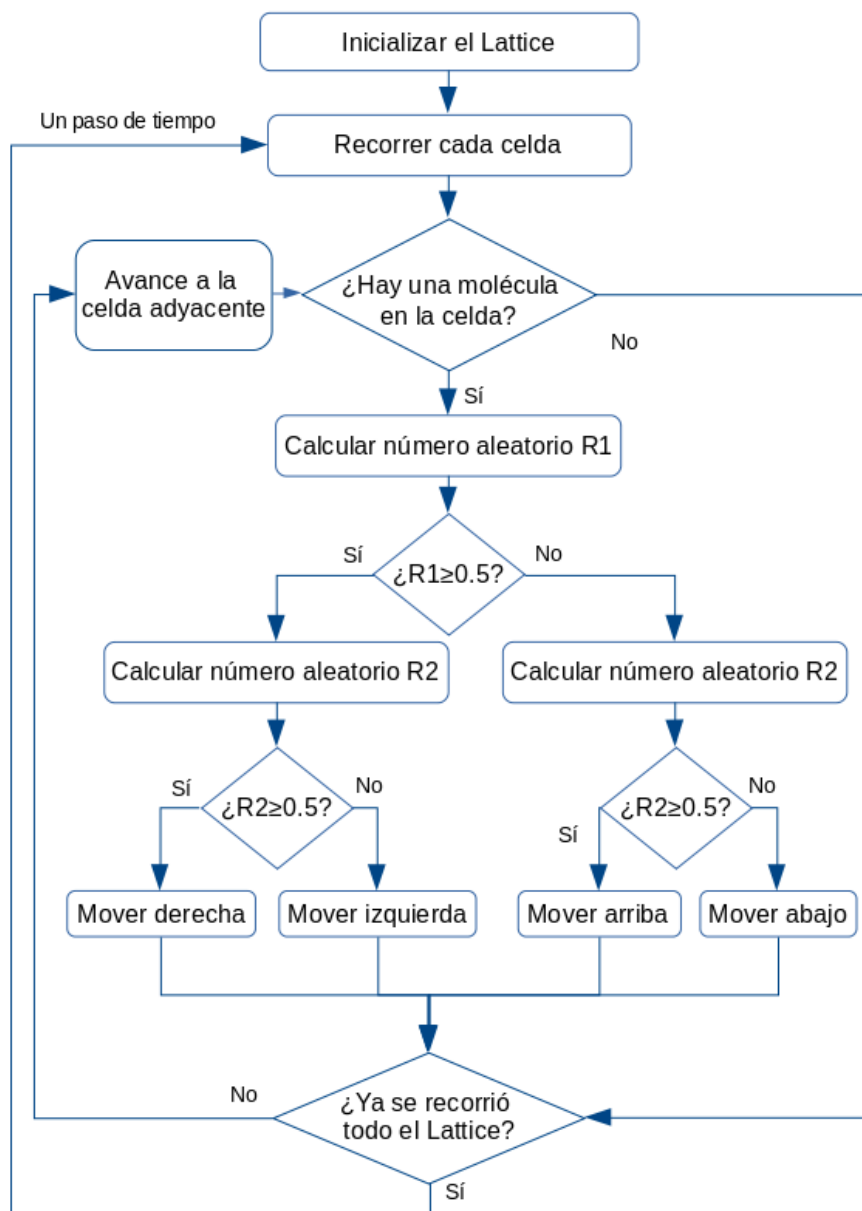


Figura 6: Algoritmo 2.

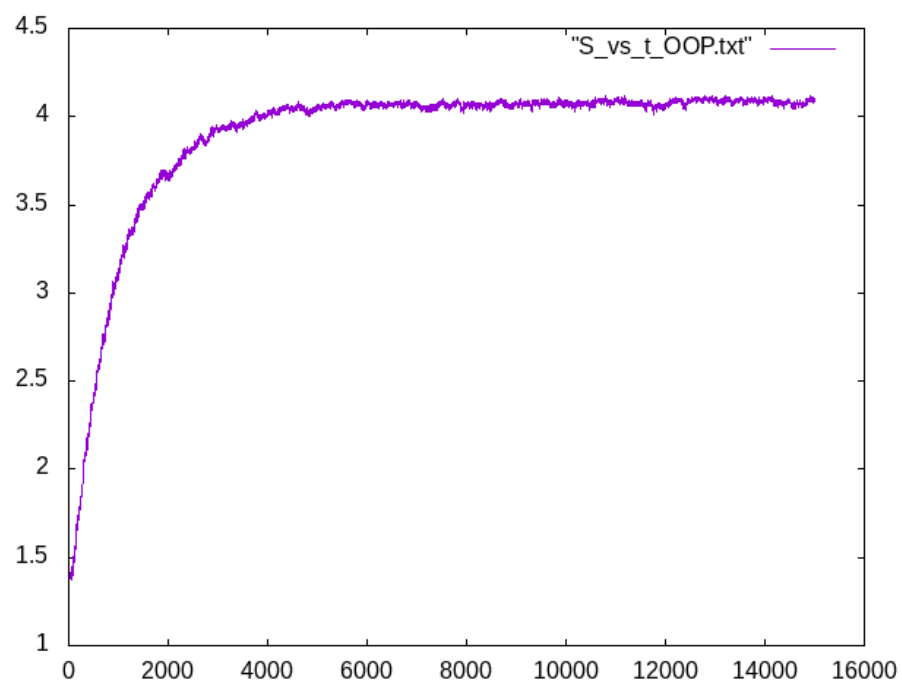


Figura 7: Entropía en función del tiempo para paradigma orientado a objetos.

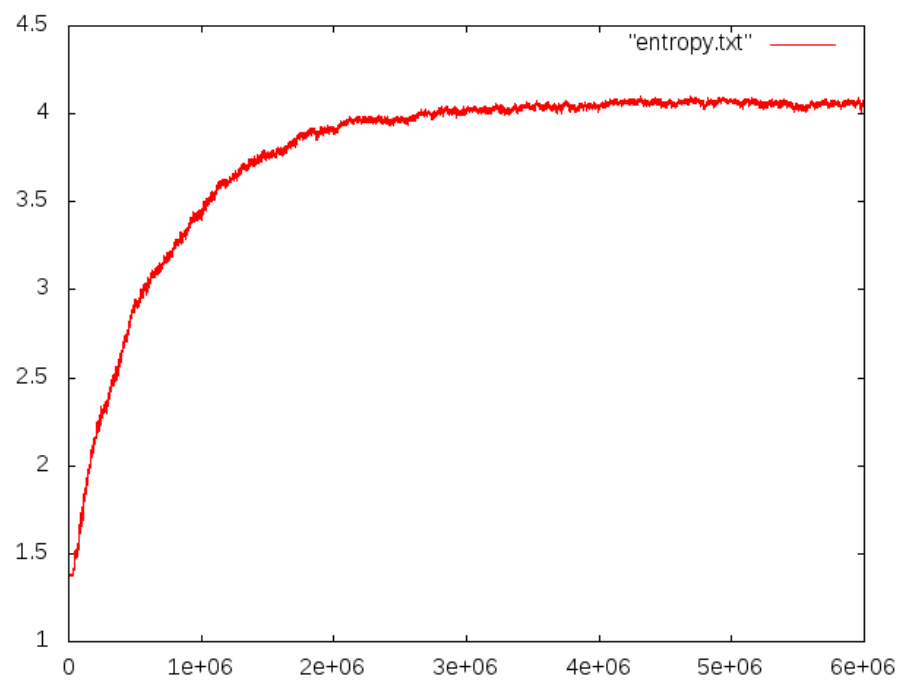


Figura 8: Entropía en función del tiempo para paradigma procedimental.

por lo que ambos métodos quedan validados para modelar este sistema. Vemos también que el tiempo de computo total empleado para el paradigma orientado a objetos es mucho mayor a 400, con lo que también podemos despreciar la información perdida por utilizar este método. A partir de este punto se transformará el tiempo del paradigma orientado a objetos multiplicando el tiempo de cómputo por un factor de 400, lo que permite comparar directamente los resultados obtenidos en ambos paradigmas.

3. Resultados y Análisis

A continuación, ya teniendo los dos paradigmas validados para simular este sistema, se procede a estudiar distintos aspectos físicos.

En primer lugar, se estudia como depende el tiempo para el que se alcanza el equilibrio del tamaño de la taza. En la figura 9 se ve como a medida que aumenta el tamaño del sistema, aumenta también el tiempo que le toma en llegar al equilibrio. Vemos que, dado que el eje x está en escala logarítmica, la diferencia entre el punto en el que para cada tamaño de Lattice se alcanza el equilibrio se encuentran igualmente espaciados, por lo que se podría proponer una ley de potencias entre el tamaño del Lattice y el tiempo de equilibrio.

Realizando un análisis más detallado de los datos el exponente se encuentra alrededor de dos, como se puede hallar a partir de la figura 10, por lo que podemos concluir que el tiempo

requerido para llegar al equilibrio crece con el cuadrado del tamaño del Lattice.

Por otro lado, el principio ergódico establece que en el equilibrio todos los estados son ocupados con igual probabilidad, lo que se da cuando la crema está distribuida uniformemente en todo el espacio. Esto concuerda con nuestro concepto intuitivo del equilibrio en este sistema. Para medir esto se estudia como varía el tamaño de la gota de crema en el tiempo. Esta medida se hace tomando la raíz del promedio de la distancia al origen al cuadrado, es decir:

$$\sqrt{\frac{\sum_i r_i^2}{N}}$$

La figura 11 muestra como va aumentando el tamaño de la gota de crema.

Por otro lado, este resultado se puede usar para probar que la crema tiene un comportamiento difusivo en que el tamaño de la gota crece proporcional a $t^{1/2}$ hasta que se alcanza el equilibrio, momento en que dicho comportamiento cambia. Para ver esto se realiza una normalización del tamaño dividiéndolo por una constante de forma que se pueda graficar junto con la entropía para ver más claramente el resultado. luego se realiza un ajuste de los datos a una función de la forma $f(x) = at^{1/2} + b$. En la figura 12 se puede ver como el tamaño del sistema coincide perfectamente con el ajuste realizado hasta un poco antes de $t = 2 \times 10^6$, tiempo en el que se puede ver que la entropía llega a su máximo y por tanto, se obtiene el equilibrio. En el ajuste obtenido se tiene $a = 0,002269$ y $b = 0,177329$.

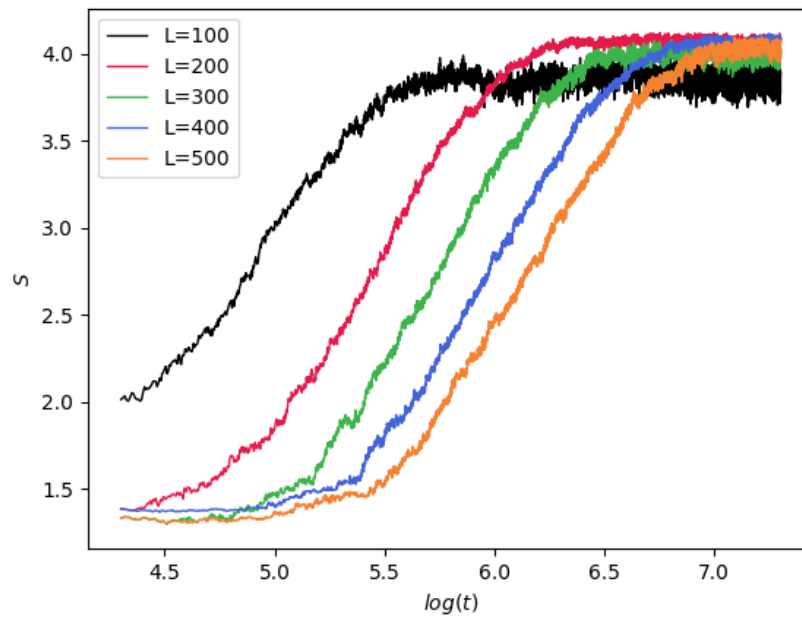


Figura 9: Comparación de la Entropía en función del tiempo para diferentes tamaños de Lattice. Para mejorar la visualización, se gráfica el tiempo en escala logarítmica.

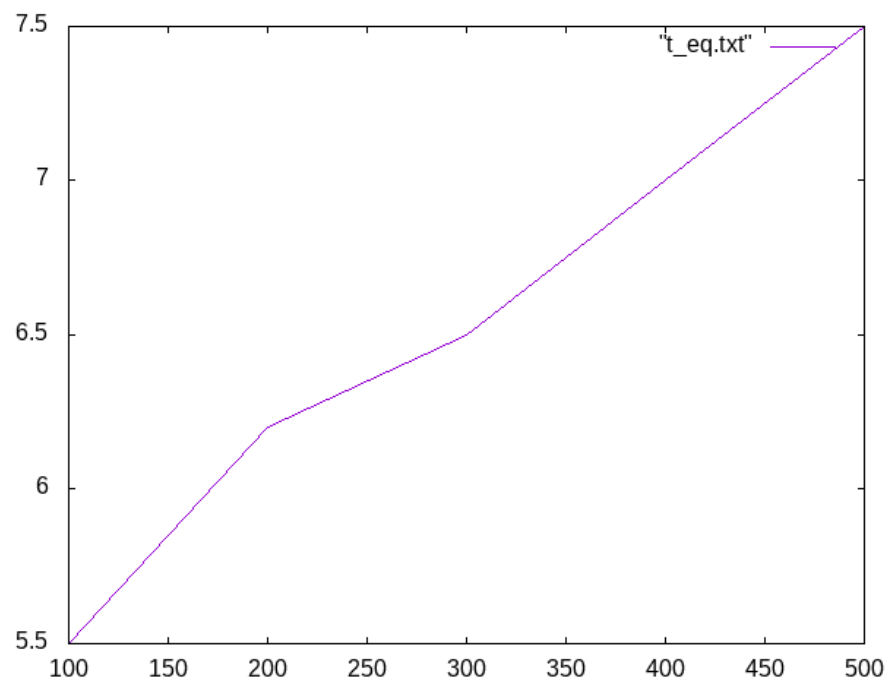


Figura 10: Tiempos de equilibrio en función del tamaño de un lado del Lattice. Para mejorar la visualización se gráfica el tiempo en escala logarítmica.

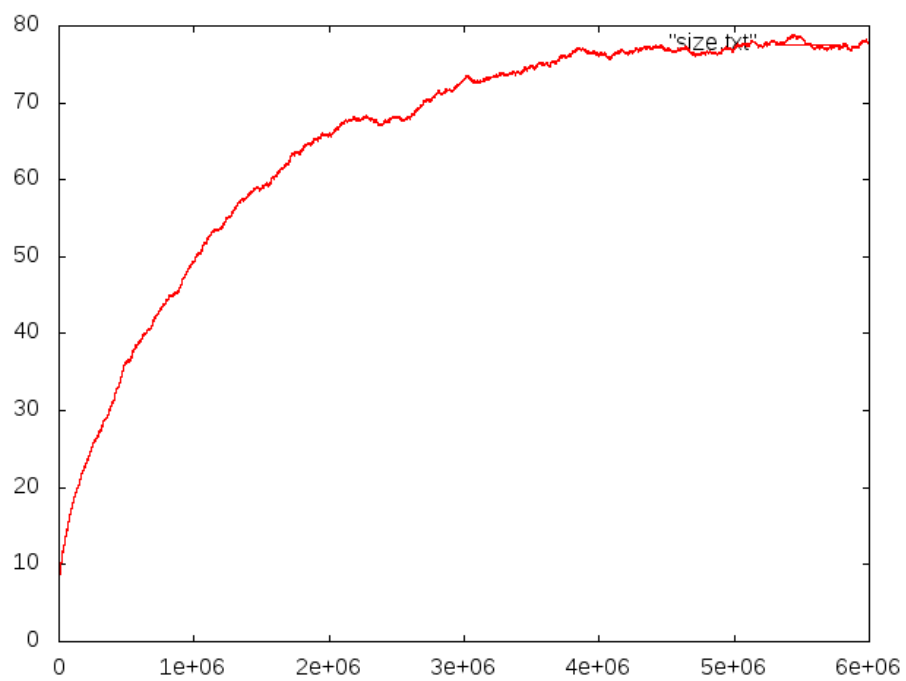


Figura 11: En la imagen se puede ver el tamaño de la gota en función del tiempo.

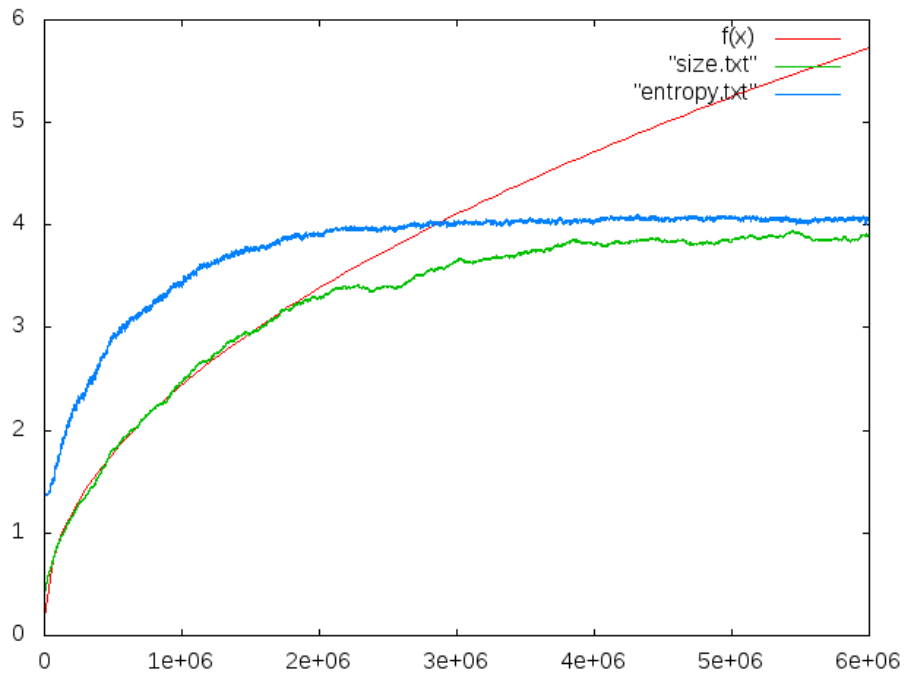


Figura 12: En la imagen se puede ver el tamaño de la gota (se normaliza dividiendolo entre 20 para que se pueda comparar con la entropía), la función $0,002269\sqrt{t} + 0,177329$ y la entropía del sistema.

Finalmente, consideremos lo que sucedería si la taza tiene un hueco en un lado y por lo tanto cuando las partículas llegan a dicho hueco, desaparecen. En este caso se debe observar como el número de partículas que hay en la taza disminuye como $\exp(-\frac{t}{\tau})$. Esto se puede ver en la figura 13 donde se gráfica el número de partículas contra el tiempo junto con un ajuste de los datos en el que se obtiene un parametro $\tau = 55433,6s$.

- Para un estudio más detallado del fenómeno se podría, entre otras cosas, estudiar en un arreglo tridimensional, limitar el numero de moléculas en una celda a únicamente una imponiendo reglas para el caso de que dos moléculas se choquen, o utilizar diferentes herramientas computacionales de simulación, como por ejemplo Lattice-Boltzmann.

4. Conclusiones

- Los dos algoritmos utilizados para modelar el sistema de la crema en el café son igualmente válidos, y, debido a la escala de tiempo que se requiere para tomar datos relevantes, se puede despreciar la información perdida al utilizar el algoritmo del paradigma orientado a objetos
- Cada uno de los algoritmos resulta más eficiente para realizar determinado tipo de cálculo sobre el sistema, por lo que no se debe descartar ninguno de los dos al momento de modelar el sistema.
- Se evidencia que el modelo tiene el comportamiento difusivo esperado, cumpliendo con aspectos como que el tiempo de equilibrio crece con el cuadrado del tamaño del Lattice, el tamaño de la gota de crema crece con la raíz cuadrada del tiempo, y en caso de incluir un agujero por donde las moléculas puedan salir, el número de moléculas disminuye exponencialmente con el tiempo.

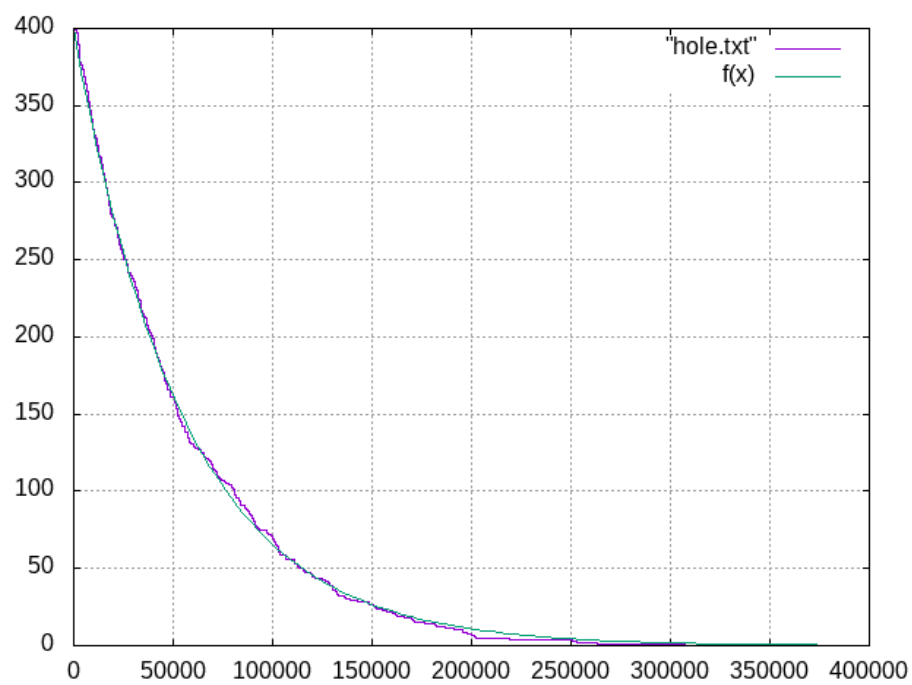


Figura 13: Propagación de las moléculas con un agujero en la pared.