

Difusión, entropía y la flecha del tiempo. El problema de la crema en el café

Paula Jessica González, José David Hernández,
Sergio Andrés Lopez, Daniela Valentina Quiroga

pjgonzalezp@unal.edu.co, johernandezo@unal.edu.co,
anlopezdi@unal.edu.co, dquirogao@unal.edu.co

Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia

9 de octubre de 2020

1. Resumen

En términos generales la entropía se define como la cantidad de desorden en un sistema [1]. En este documento se presenta un estudio sobre la entropía de un sistema compuesto por una taza de café un una gota de crema que, a medida que transcurre el tiempo, se difunde en la superficie. Para efectos de simplificación del problema se tomó una superficie cuadrada.

2. Introducción

Los problemas de difusión son estudiados ampliamente en el campo de la física, entre ellos se encuentra el estudio sobre el esparcimiento de una gota de crema sobre la superficie del café.

Considerando este caso, al colocar una gota de crema en la superficie de café, esta se va a esparcir hasta llenar todo el recipiente y al final observaremos que el café tendría un color más claro que el original

Microscópicamente, se podría considerar que esta gota de crema está formada de pequeñas partículas individuales. Las trayectorias de estas son muy complicadas, ya que, al estar tan cerca unas de otras, las colisiones entre sí mismas causaran cambios abruptos en las velocidades de cada una de las partículas.

Aunque es posible realizar la descripción de estas trayectorias, para realizar un estudio sobre la forma en la que este sistema alcanza el equilibrio, esto no es necesario. En este caso se considera adecuado el uso de un modelo donde las trayectorias de las partículas sean aleatorias pero las propiedades promedio del sistema permanezcan iguales.

En el siguiente informe se realiza un análisis del problema de la crema en el café utilizando una simulación computacional que nos permita calcular la entropía del sistema y su relación con el tiempo transcurrido después de colocar la crema, el tamaño del contenedor y el tamaño de la gota de crema.

Además, añadiendo algunas modificaciones en el código que le permitan al contenedor tener un pequeño agujero, se calcula el número de moléculas en el contenedor y su relación con el tiempo transcurrido después de colocar la crema en el café.

Por último, se realizó un análisis de optimización del código, mostrando la relación entre el tiempo de cómputo de la simulación y el tamaño del sistema, además de la mención de otras optimizaciones realizadas.

3. Simulación de la difusión de una gota de crema en el café

3.1. Cálculo de la entropía

Para el cálculo de la entropía se tuvo en cuenta la siguiente ecuación:

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

Siendo P_i la probabilidad de encontrar el sistema en el estado i . Estos estados fueron determinados a partir de una grilla definida como la división del contenedor en 8 filas y 8 columnas, donde la probabilidad de un determinado estado corresponde al número de moléculas que se encuentran en cierta cuadrícula dividido entre el número total de moléculas.[2]

Utilizando un contenedor con un lado de 200 unidades, al calcular la variación de la entropía entre la disposición inicial de la crema y luego de 10^6 pasos se obtuvo la siguiente gráfica que describe el crecimiento de la entropía:

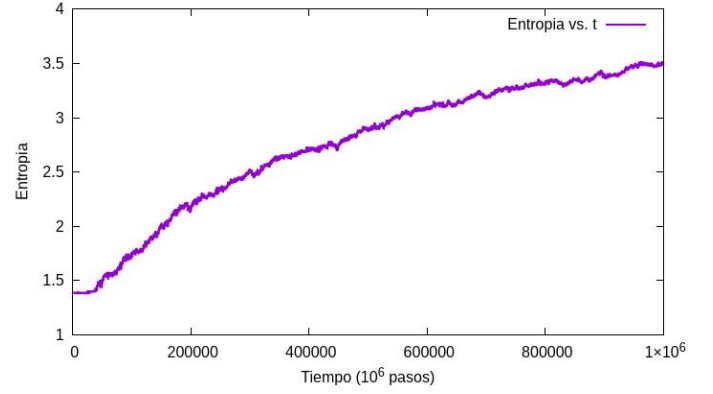


Figura 1: Entropía en función del tiempo. LC=200

Como se puede observar la entropía no llega a estabilizarse debido al tamaño del contenedor. Reduciendo su tamaño a un lado de 100 unidades se obtuvo la siguiente gráfica:

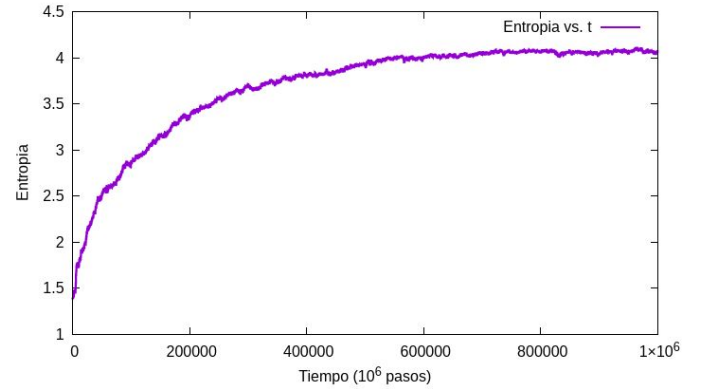


Figura 2: Entropía en función del tiempo. LC=100

Debido al tamaño reducido, las moléculas lograron una distribución más o menos uniforme en todo el contenedor de manera que aproximadamente luego de 600000 pasos la entropía dejó de crecer y se estabilizó.

A continuación se muestra la distribución de las moléculas de crema en un contenedor de lado de 100 unidades, luego de 10^6 pasos:

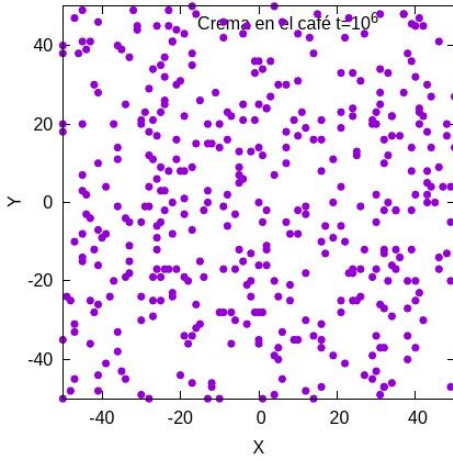


Figura 3: Gota de crema en el café luego de 10^6 pasos. $LC=100$

3.2. S en función del tiempo

En la gráfica obtenida se observó que la entropía de las moléculas de crema alcanza el equilibrio de manera más rápida en contenedores más pequeños ya que se distribuyen de manera uniforme más rápidamente. Para estudiar este comportamiento se realizó las respectivas gráficas de entropía en función del tiempo para contenedores de diferentes lados, como se muestra en la siguiente figura.

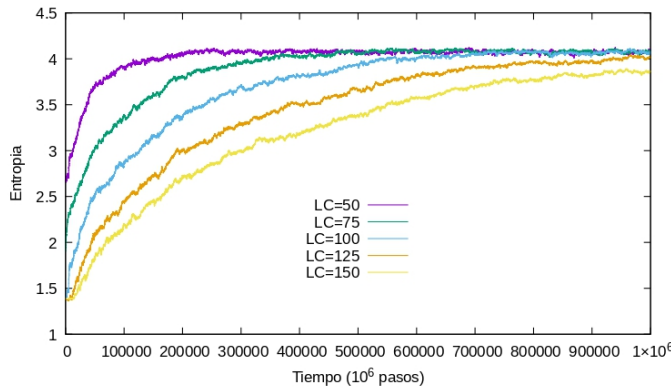


Figura 4: Entropía en función del tiempo variando el tamaño del contenedor

Partiendo de los valores observados en la gráfica anterior en los cuales la entropía se estabiliza se realizó un ajuste en donde se puede observar

que el tiempo necesario para alcanzar el equilibrio varía aproximadamente con el cuadrado del lado del contenedor.

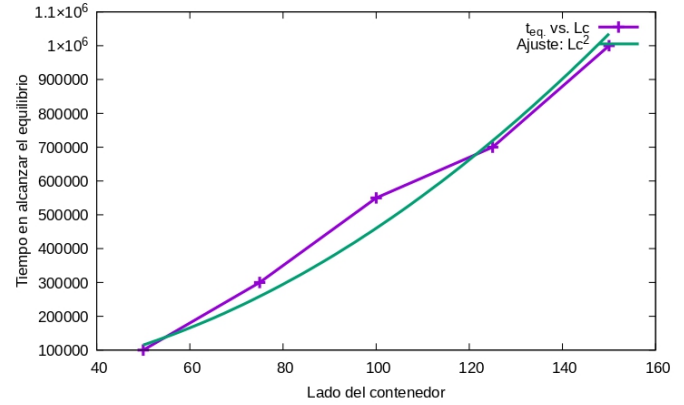


Figura 5: Tiempo en que el sistema alcanza el equilibrio en función del tamaño del contenedor

3.3. Simulación de la difusión aleatoria

Las siguientes gráficas muestran la difusión de la gota de crema en el café con el paso del tiempo, utilizando pasos aleatorios.

En el tiempo cero todas las moléculas de la crema adicionada al café se encuentran dispuestas en una región pequeña del contenedor, como se observa en la figura, se encuentran ordenadas justo en el centro.

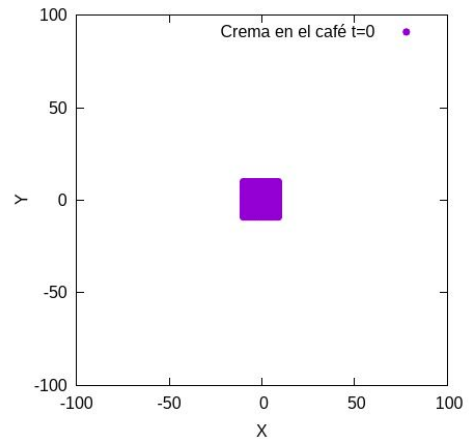


Figura 6: Gota de crema en el café en el tiempo cero

Luego de 10^4 pasos las moléculas se han elegido de manera aleatoria una a la vez en cada paso, posteriormente también de manera aleatoria se ha elegido una dirección de movimiento (arriba, abajo, izquierda o derecha) para luego desplazarse en esta una unidad.

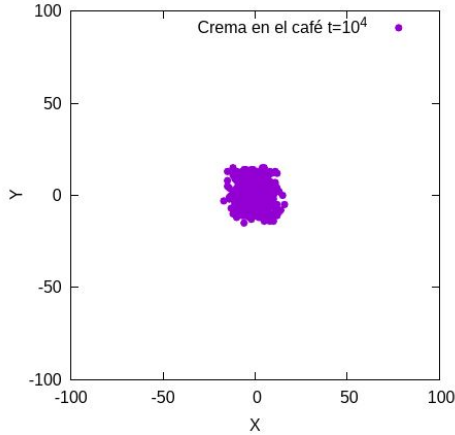


Figura 7: Gota de crema en el café luego de 10^4 pasos

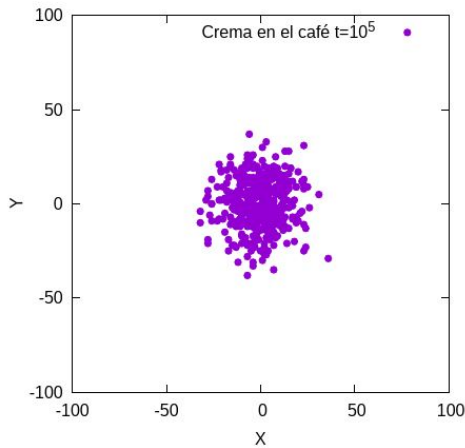


Figura 8: Gota de crema en el café luego de 10^5 pasos

Como se observa en la siguiente figura algunas de las moléculas ya se han aproximado o han alcanzado los bordes del contenedor, por lo cual ha sido necesario introducir una corrección, en la cual al alcanzar alguno de los bordes las moléculas no puedan seguir avanzando en esa dirección y por lo tanto la partícula no cambia su posición

actual en esta iteración, de manera que la crema siempre se encontrará dentro del contenedor.

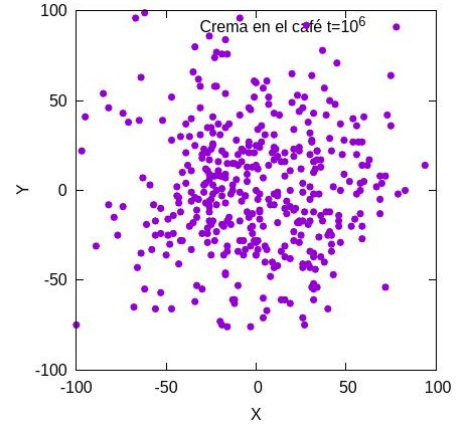


Figura 9: Gota de crema en el café luego de 10^6 pasos

Cabe resaltar que las figuras 6 - 9 se obtuvieron con un contenedor de lado 200 unidades, esto con el motivo de replicar las figuras 7.18 y 7.19 de las páginas 181 y 182 del libro *Computational Physics*[1].

3.4. El tamaño de la gota de crema aumenta con $t^{1/2}$

Al estudiar el comportamiento del tamaño de la gota de crema en el transcurso del tiempo, se demostró (como se observa en la figura) que este incrementa en $t^{1/2}$ siempre que la gota sea más pequeña que el tamaño del contenedor. Esto ocurre cuando se tiene un contenedor con lado de 200 unidades pues las moléculas no alcanzan a llenar completamente el área delimitada, por lo cual la gráfica de 10^6 pasos ajusta muy bien.

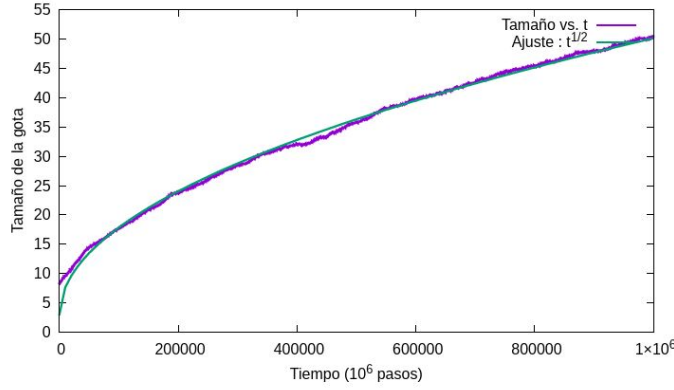


Figura 10: Tamaño de la gota en función del tiempo. $LC=200$

Al reducir el contenedor a un lado de 100 unidades, las moléculas de crema alcanzan a cubrir prácticamente todo el contenedor, con lo cual acercándose hacia 600000 pasos de tiempo la gráfica se estabiliza, el tamaño deja de aumentar y el ajuste deja de ser correcto a partir de este punto.

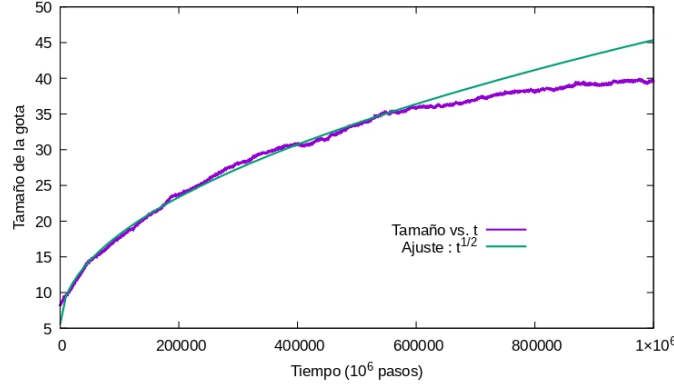


Figura 11: Tamaño de la gota en función del tiempo. $LC=100$

3.5. Simulación de un contenedor con un pequeño orificio

Al pensar en un contenedor con un orificio fue necesario establecer las condiciones que permitieran la salida de moléculas por una parte específica del contenedor. En este caso, tomamos el agujero en la pared derecha del contenedor y se fijó una

abertura de $2(LC/10)$, es decir, para un contenedor de $LC=20$, la apertura fue de 20 unidades. Se definió que a partir de que alguna molécula alcanzara dicha apertura su posición solo podría aumentar en la dirección x (hacia la derecha), de manera que las moléculas que han salido no pueden volver a entrar al contenedor. Así fue posible hacer el conteo de las moléculas de crema que se encontraron al interior del contenedor en función del tiempo.

A partir de este procedimiento, fue posible encontrar que el número de moléculas en el contenedor en función del tiempo se comporta como la función $\exp(-\frac{t}{\tau})$ donde τ es la constante de tiempo efectivo de escape.

El ajuste realizado se encuentra en la siguiente figura.

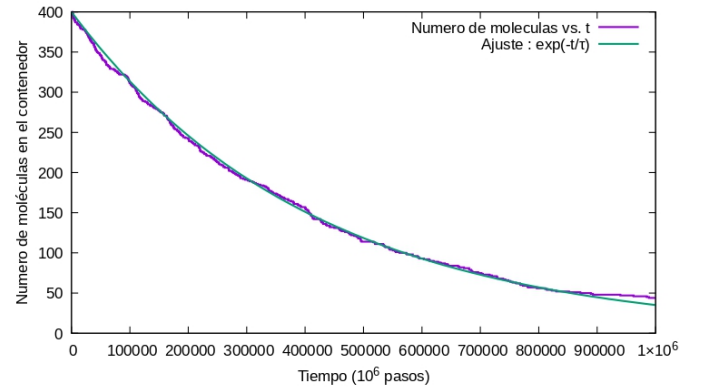


Figura 12: Ajuste del número de moléculas que aún permanecen en el contenedor en función del tiempo, $LC=20$

4. Análisis de optimización

Con el motivo de analizar el efecto de la optimización sobre el programa se realizan 2 compilaciones para cada uno de los puntos descritos anteriormente, una con la bandera `-O3` y otra sin ella, donde en cada caso se varía el número de iteraciones. Los resultados obtenidos se muestran en la siguiente gráfica.

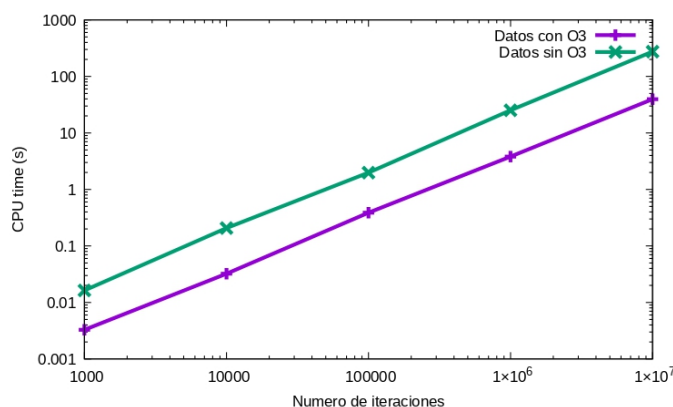


Figura 13: Tiempo de ejecución con y sin optimización

Cabe resaltar que los tiempos de ejecución del sistema mostrados en esta grafica se encontraron calculando el tiempo en llevar a cabo la acción de las funciones *Initial* y *Step* para cada punto y posteriormente sumando los resultados de los 4 puntos.

Observando las curvas de tiempo de computo en función del tamaño del sistema es evidente que la optimización de nivel -O3 tiene un efecto considerable sobre tiempo de ejecución, de tal forma que al activar la bandera este tiempo se reduce a aproximadamente una décima parte de su valor al compilar sin optimización. Este comportamiento se mantiene constante para un grande rango de iteraciones, donde la diferencia más notable se da al pasar de 100 segundos a 10 para el caso de 10^7 iteraciones.

Otras optimizaciones de bajo impacto se realizaron al modificar el código, especialmente el correspondiente al punto 1, de tal manera que no se realicen cálculos innecesarios. Algunos ejemplos de dichas optimizaciones se muestran en los siguientes fragmentos del código.

```
//Modificación de conteo en cuadrícula en caso de que haya cambiado

if(giold != gnew || gjold != gjnew){
    ests[giold][gjold]--;
    ests[gnew][gjnew]++;
}
```

Figura 14: Optimización en el conteo de moléculas en cada cuadrícula

```
if(Pr > 0.0){
    S_0 -= Pr*log(Pr);
}
```

Figura 15: Optimización en la suma de términos para el cálculo de la entropía

En ambos casos se añade condicionales para decidir si se lleva a cabo una acción o no. Para la figura 14 se tiene un condicional que evalúa si una partícula que ha realizado un paso aleatorio se encuentra en una cuadrícula diferente a la que se encontraba antes de realizar dicho paso, para así decidir si cambia el conteo del número de moléculas en cada cuadrícula.

En la figura 15 se tiene un condicional que determina si la probabilidad de un estado es mayor a cero, es decir, si una determinada cuadrícula tiene moléculas en su interior, para añadir este término al calculo de la entropía.

5. Conclusiones

Con ayuda de una simulación computacional, se verifico la validez de la aproximación de caminos aleatorios para realizar el estudio del comportamiento promedio de las moléculas de crema en el problema de la crema en el café. Observando que el comportamiento de la entropía y tamaño de la gota de crema dependen totalmente del tamaño del contenedor.

Además, se pudo observar que la relación entre el tamaño de la gota de crema y el paso del tiempo tiene un comportamiento acorde al observado en

procesos de difusión.

Implementando algunos cambios en el código, también fue posible la realización de una simulación para un sistema con un pequeño orificio en el contenedor de café. A partir de esta simulación, se encontró una relación entre el número de moléculas dentro del contenedor y el tiempo.

Por medio de la modularización del código fue posible simplificar en gran manera el manejo de variables que en cada punto o gráfica debieron cambiar.

Adicionalmente, el uso de herramientas y técnicas de optimización mejoraron notablemente el tiempo de ejecución del código.

6. Referencias

1. Nicolas J. Giordano. Computational physics, 2006, p. 201.
2. Matthew Schwartz. Lecture 6: Entropy, 2019, p. 2. Disponible en <https://scholar.harvard.edu/files/schwartz/files/6-entropy.pdf>