

# El gas ideal: Modelación en computadora

(*The ideal gas: Modelling in a computer*)

L. Mármol Amador y J. Fuentes Betancourt<sup>1</sup>

Taller de Enseñanza de la Física Universitaria, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, Habana, Cuba  
Recibido em 25/2/2005; Aceito em 23/6/2005

Se obtiene, con ayuda del modelo del gas ideal implementado en una computadora PIII, la descripción de su expansión libre considerando que inicialmente se encuentra localizado en la mitad izquierda de un recipiente de volumen  $V$ , por medio de un tabique aislante. Se desarrolla una función, que permite generar el número deseado de partículas con valores aleatorios de la velocidad inicial y de la posición. Se estudia la expansión libre del gas ideal con ayuda de este modelo. Se obtiene que, para el tiempo de relajación, el número de partículas en el lado izquierdo se hace igual a  $N/2$  y que el valor de éste, depende de la masa de la partícula y de la temperatura. Se comprueba que el tiempo de relajación depende de la naturaleza del gas y que la distribución de velocidades de Maxwell es la que da una descripción adecuada del comportamiento de este sistema. Se calcula la entropía del sistema con un número relativamente grande de partículas con ayuda de una función construida al efecto. Se muestra que ésta crece cuando el sistema tiende al equilibrio y se encuentra que las mayores fluctuaciones son poco probables aún para tiempos grandes de observación.

**Palabras-clave:** modelación, enseñanza asistida por modelos, gas ideal, distribución de velocidades de Maxwell, entropía, fluctuaciones.

The description of the free expansion of the ideal gas is obtained with the aid of the model of the ideal gas implemented in a PIII computer. The gas was initially located in the left half of a box of volume  $V$ , by means of an insulating partition wall. It was developed a function that allows to generate the number of particles desired with random values of the initial speed and of the position. It is obtained, that by the time of relaxation the number of particles in the left part of the box is equal to  $N/2$  and that the value of this interval depends on the nature of the gas and the temperature. It is proved that the Maxwell distribution of speeds gives an adequate description of the behavior of this system. The entropy of the system with a number of particles relatively big, is calculated with the aid of a function developed for that purpose. It was also shown that the entropy of the system grew when the system reached the equilibrium and that the bigger fluctuations are not very probable even for a long time of observation.

**Keywords:** modelling, model-based teaching, ideal gas, Maxwell distribution of speeds, entropy, fluctuations.

## 1. Introducción

La enseñanza asistida por modelos está basada en el desarrollo de recursos informáticos, actividades y estrategias de enseñanza que pretenden facilitar la comprensión por parte del alumno de determinados fenómenos y darle a conocer como se elaboran y validan los modelos. Emplearemos la definición de modelo dada en [1] como: "la representación simplificada de un sistema, que concentra su atención sobre aspectos específicos del mismo, logrando poner al descubierto otras propiedades del sistema en estudio". Los modelos son importantes en la investigación científica para la formulación de hipótesis y la descripción de los fenómenos. En la pasada década aumentó el reconocimiento de la modelación en la ciencia de la educación [2], también ha

sido muy utilizada en los métodos interactivos que se focalizan en la implementación de modelos en la computadora [3]. La aplicación de la computación ha permitido alcanzar con la modelación una fase de desarrollo en la que es posible reproducir adecuadamente los procesos reales y realizar experimentos virtuales en los que se comprueba la validez de los presupuestos de partida y se logra también explorar nuevos aspectos de los fenómenos en estudio.

El objetivo del presente trabajo es modelar un sistema de  $N$  partículas no interactuantes o sea un gas ideal, que está contenido en una mitad de un recipiente de volumen  $V$  dividido por un tabique y estudiar posteriormente el comportamiento del sistema una vez que se retira el mismo.

<sup>1</sup>E-mail: jfuentesb@gmail.com.

## 2. Planteamiento del problema físico

El gas ideal como conjunto de partículas que se mueven libremente en un volumen dado ha jugado un papel importante en el desarrollo de la Física [4, 5, 6, 7], ha permitido explicar un conjunto de propiedades de los gases de densidad tan pequeña que, no se tienen en cuenta los choques entre las partículas. Entre estas propiedades tenemos la tendencia a ocupar los recipientes que los contienen y de penetrar unos en otros, o sea, difundir. Las partículas del gas ideal se consideran como puntos sin extensión, que están caracterizadas por su masa y velocidad. Se considera además que sólo son posible los choques perfectamente elásticos de las partículas con las paredes, lo que origina la presión que el gas ejerce sobre las mismas.

En base a este modelo y a partir de los trabajos de Bernoulli y posteriormente de Maxwell, Boltzmann entre otros, se desarrolló y perfeccionó la Teoría Cinética de los Gases, que oportunamente sirvió de base a la física estadística.

En varios libros de texto de Física [4, 5, 6] se trata el problema de un gas ideal que ocupa, limitado por un tabique, la mitad de un recipiente y se describe, con posterioridad, el proceso de expansión libre del mismo después de quitar el tabique, cuando las moléculas del gas pasan a ocupar todo el volumen. Se presenta en estos libros de texto una curva exponencial de disminución de la concentración hasta que alcanza el valor de  $N/2$ , con oscilaciones posteriormente, alrededor de este valor. No se presenta al alumno ninguna demostración a no ser razonamientos lógicos sobre el comportamiento de este sistema.

### 2.1. Descripción del programa

En el programa elaborado en el C++ Builder se crean  $N$  objetos partícula a los cuales se les asigna una posición  $(X, Y)$  aleatoria con igual probabilidad por componente, de forma tal que no existen zonas del plano privilegiadas en cuanto a densidad de partículas. Seguidamente se definen las condiciones de fronteras considerando choques perfectamente elásticos con las paredes. Una vez posicionadas todas las partículas se les asigna una velocidad  $(V_x, V_y)$ , que cumple con una distribución gaussiana respecto a cero por componente, en la cual la desviación estándar está determinada por la masa de la partícula y la temperatura a la que se supone el sistema. Se excluye el caso en que una o las dos componentes de velocidad sean cero ( $V_x \neq 0$  &  $V_y \neq 0$ ), evitando así que existan partículas sin movimiento o con toda su velocidad en una sola componente. A continuación se inicia el ciclo donde se calcula la nueva posición de cada partícula en función de su velocidad bajo las condiciones de fronteras ya establecidas anteriormente. Esto se repite hasta quitar el tabique separador y se redefinen las condiciones de

frontera para cada una de las partículas. El sistema se considera perfectamente aislado y con un número constante de partículas. Estas condiciones son importantes ya que son suficientes para que el sistema mantenga una energía constante y cada una de las partículas conserve su energía cinética, lo que hace al sistema dependiente del estado inicial.

## 3. Modelación de la expansión libre

### 3.1. El tiempo de relajación

En el proceso de expansión libre, el gas se encuentra totalmente aislado y todas las partículas que lo componen se encuentran en el lado izquierdo de un recipiente dividido en dos partes de igual volumen, como puede observarse en la Fig. 1. El tabique que separa dichas partes es tal que no permite el intercambio tanto de partículas como de energía.

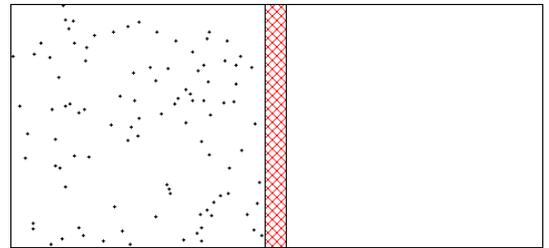


Figura 1 - Sistema en el instante inicial

Cuando se retira el tabique las partículas comienzan a moverse en la parte derecha del recipiente, ver Fig. 2.

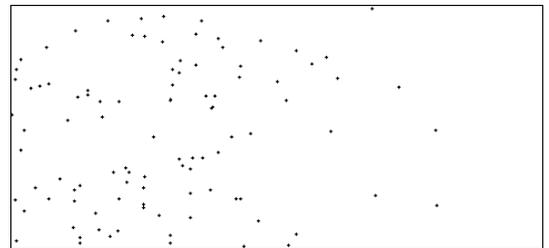


Figura 2 - Sistema después de quitado el separador.

Una vez que ha transcurrido el tiempo de relajación, que es el tiempo que necesita el sistema para equilibrar el número de partículas en ambas mitades del recipiente, podemos ver en la Fig. 3, que efectivamente el número de partículas en el lado izquierdo es  $N/2$ .

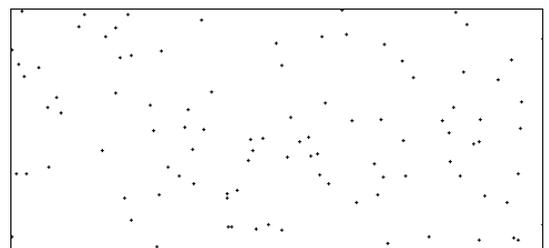


Figura 3 - Sistema luego de haber pasado el tiempo de relajación.

El modelo teórico de la expansión libre del gas ideal predice, que el sistema debe reducir su número de partículas en la mitad izquierda en función del tiempo, de forma exponencial decreciente, hasta alcanzar una distribución homogénea en ambas mitades. En la Fig. 4 vemos que el resultado del experimento realizado confirma el carácter exponencial.

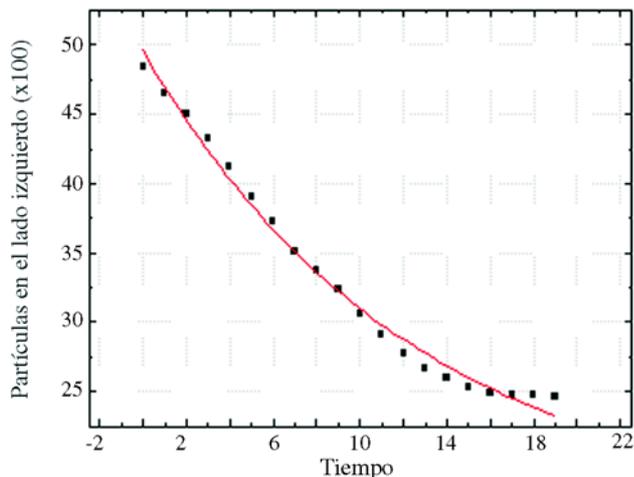


Figura 4 - Dependencia del número de partículas en la mitad izquierda del tiempo.

### 3.2. Comparación del tiempo de relajación para diferentes gases

Acorde con el experimento se debe observar una dependencia del tiempo de relajación de la naturaleza del gas. Para comprobar esto se llevaron a cabo dos experimentos virtuales con los gases: xenón e hidrógeno. Una cantidad igual de partículas con los parámetros correspondiente a ambos gases se crearon en la mitad izquierda del recipiente y el tabique aislante fue quitado en el instante inicial de tiempo. Se contó después la cantidad de partículas en la mitad izquierda para diferentes instantes de tiempo. En la Fig. 5 podemos ver como varía esta magnitud para ambos gases.

Nótese la gran diferencia entre las curvas para el Xe y el H en cuanto a decrecimiento de la cantidad de partículas en la parte izquierda del recipiente y los valores del tiempo de relajación. Esto se debe a la gran diferencia de masa entre los mismos. Al conservarse la energía promedio del sistema, que solo es de origen cinético, queda una relación radical inversa de la velocidad en función de la masa, lo cual provoca que las partículas menos masivas tengan una velocidad mayor y por tanto el tiempo de relajación sea menor.

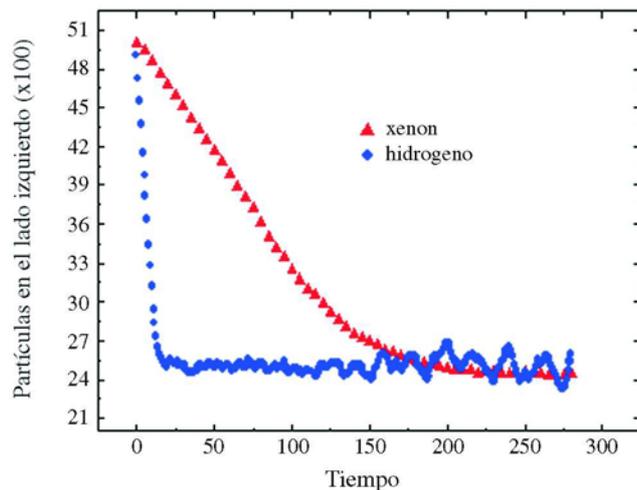


Figura 5 - Dependencia del número de partículas en la mitad izquierda del tiempo de expansión.

### 3.3. Comparación del tiempo de relajación a diferentes temperaturas

Para un mismo gas se realiza la expansión a diferentes temperaturas y se observa en la Fig. 6 que la dependencia del tiempo de relajación de la temperatura. En la misma podemos apreciar que el sistema alcanza el equilibrio más rápido a temperaturas mayores, o sea disminuye el tiempo de relajación con el aumento de la temperatura.

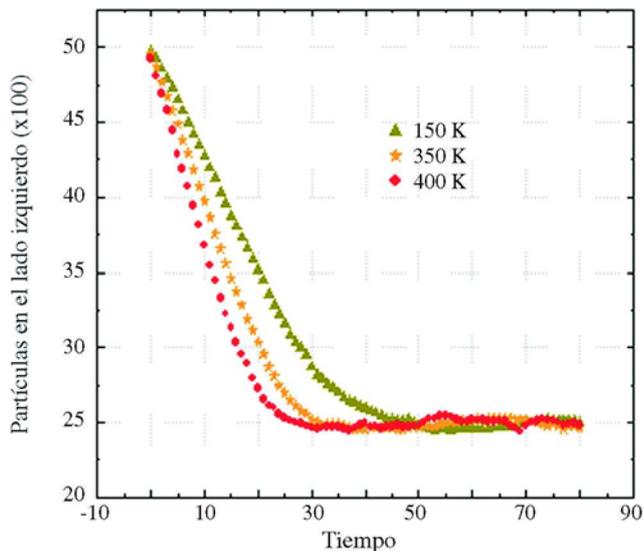


Figura 6 - Dependencia del número de partículas en la mitad izquierda de la temperatura;

En un proceso de expansión real, el conjunto de partículas es del orden de  $10^{19}$  las cuales tienen la misma probabilidad de tener velocidades negativas como positivas por componente, y responden a una distribución gaussiana centrada en cero. Esto implica que  $v = 0$

para un gran número de partículas. Realizamos el experimento donde se toman  $N$  partículas de masa  $m$  a una temperatura  $T$  y se cuenta el número de partículas con un determinado valor de la velocidad en el lado izquierdo en función del tiempo. La desviación estándar de dicha distribución gaussiana es precisamente  $\sqrt{kT/m}$  donde  $k$  es la constante de Boltzmann,  $T$  es la temperatura del sistema y  $m$  es la masa de una partícula. Los histogramas en la Fig. 7, muestran como depende la distribución de velocidades a diferentes temperaturas para un gas determinado.

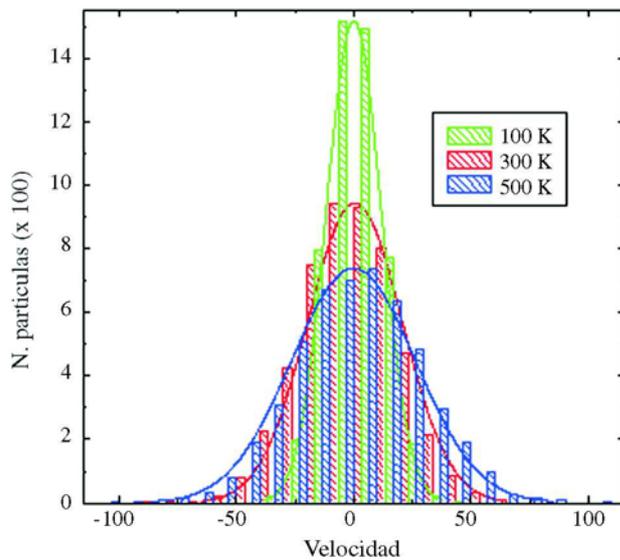


Figura 7 - Histogramas de la dependencia de la distribución de velocidades de la temperatura.

Como se puede ver en general a mayor temperatura la desviación estándar es mayor y disminuye el valor del máximo, de forma tal que el valor del área bajo la curva sea  $N$  en cada caso.

### 3.4. Distribución de celeridades

A partir de considerar que se cumple  $v = 0$  se obtiene una distribución de celeridades, que es similar a la obtenida por Maxwell con características asimétricas. Al realizar en la computadora el experimento para un total de  $10^6$  partículas, se obtuvo una distribución de celeridades que se muestra en la Fig. 8.

Como puede verse en la Fig. 8 la distribución de celeridades responde a una distribución de Maxwell tal y como predice la teoría cinética de los gases.

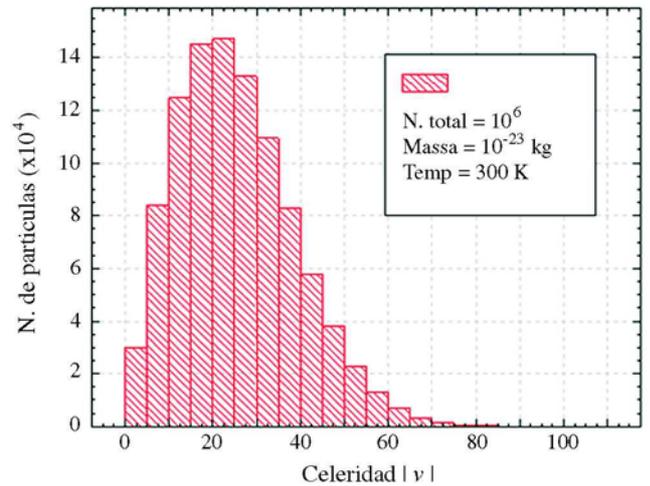


Figura 8 - Distribución de celeridades.

### 3.5. Dependencia del sistema de la distribución de velocidades

Como ya ha sido mencionado anteriormente, el sistema es extremadamente dependiente de las condiciones iniciales, lo cual se debe a sus características de aislamiento y conservación del momento para toda partícula. Dichas condiciones iniciales responden a la distribución de velocidades ya que no se intercambia energía con el ambiente y el número de partículas es constante. Se hicieron experimentos con diferentes conjuntos de posibles velocidades y distribuciones de las mismas (x-probable y gaussiana). Los resultados se muestran en la Fig. 9.

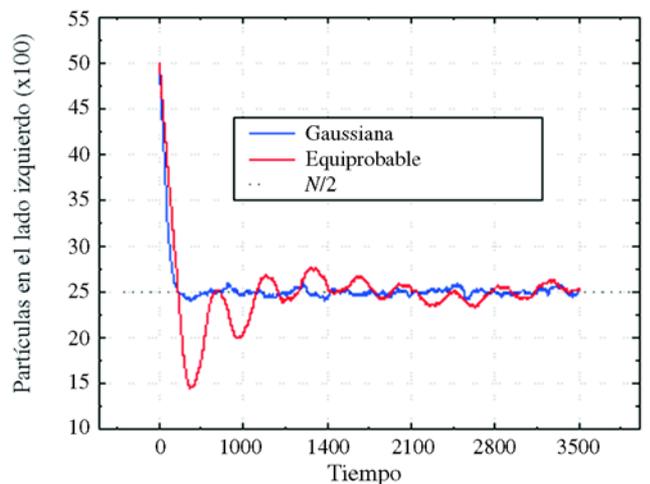


Figura 9 - Número de partículas en la mitad izquierda para diferentes funciones de distribución de velocidades en dependencia del tiempo.

Es notable la diferencia de comportamiento entre las dos distribuciones. Como se ve la distribución normal no responde a la realidad experimental, mientras que la distribución gaussiana si describe el experimento.

Luego de realizar la expansión libre con una distribución x-probable para cantidades diferentes de partículas se concluye que mantiene la misma forma funcional que la mostrada anteriormente, pero en todos los casos las dos primeras depresiones son significativas y mantienen la misma tendencia al equilibrio para valores de tiempos mayores.

#### 4. Cálculo de la entropía

Si caracterizamos el estado del sistema, sometido a una expansión libre, con la función de estado entropía, tendremos que, como es conocido la entropía del sistema debe aumentar en el proceso de expansión libre. El estudio de este sistema nos lleva a definir el microestado [5, 8] como la distribución de las  $N$  partículas en las dos mitades del recipiente. Teniendo en cuenta que el sistema responde a la física clásica podemos numerar cada partícula y conocer en cada momento donde se encuentra la misma. Así tendremos que en el momento inicial:  $N_1 = N$  y  $N_2 = 0$  donde  $N_1$  es el número de partículas en el lado izquierdo del recipiente y  $N_2$  en el lado derecho. En momentos posteriores tendremos que:  $N_1 = n_1$  y  $N_2 = n_2 = N - n_1$  El macroestado del sistema se encuentra a partir de los microestados posi-

bles para la distribución de partículas con los valores de  $n_1$  y  $n_2$ . Se define, como es conocido el número de los microestados posibles, como [5]:

$$W = \frac{N!}{n_1!n_2!}, \tag{1}$$

o sea, que el macroestado del sistema se determina cuando se conoce el número de partículas en una parte del recipiente en ese momento [5]. La entropía del sistema es igual a:

$$S = k \ln W. \tag{2}$$

El cálculo del valor de la entropía tropieza con la dificultad [5] de que los factoriales que aparecen se hacen extremadamente grandes para algunos centenares de partículas. Es por esto que en los libros de texto [5, 6] se describe el cálculo para sistemas con un número reducido de partículas. Para solucionar el problema procedimos a calcular la entropía basándonos en la propiedad de los logaritmos de que transforman el producto en una suma. Se definió una función en el C++ Builder que hace el cálculo del factorial extrayendo el logaritmo a cada factor y sumando los logaritmos calculados. El uso de esta función nos permitió aplicar el cálculo en sistemas con un número relativamente grande de partículas. La Ec. (1) puede ser reescrita como:

$$W = \frac{N(N-1)(N-2)(N-3)...max(N, N-n_1)!}{min(N, N-n_1)!max(N, N-n_1)!} = \frac{\prod_{j=max(N, N-n_1)+1}^N (j)}{min(N, N-n_1)!}. \tag{3}$$

Luego de aplicar logaritmo tendremos:

$$S = \kappa \ln \left( \frac{\prod_{j=max(N, N-m)+1}^N j}{min(N, N-m)!} \right). \tag{4}$$

O bien:

$$S = \kappa \left( \sum_{j=max(N, N-m)+1}^N \ln(j) - \sum_{k=2}^{min(N, N-m)} \ln(k) \right). \tag{5}$$

La fórmula (5) nos permite calcular la entropía para sistemas con un número relativamente grande de partículas. Con este resultado podemos graficar la concentración de partículas en el lado izquierdo y al mismo tiempo graficar el valor calculado de la entropía del sistema.

En la Fig. 10 se observa como el número de partículas disminuye rápidamente hasta alcanzar el valor de  $N/2$  en el tiempo de relajación del sistema o sea que el número de partículas es igual a ambos lados el recipiente y después este valor fluctúa de forma aleatoria mientras que la entropía del sistema aumenta hasta al-

canzar el valor máximo en este mismo tiempo de relajación.

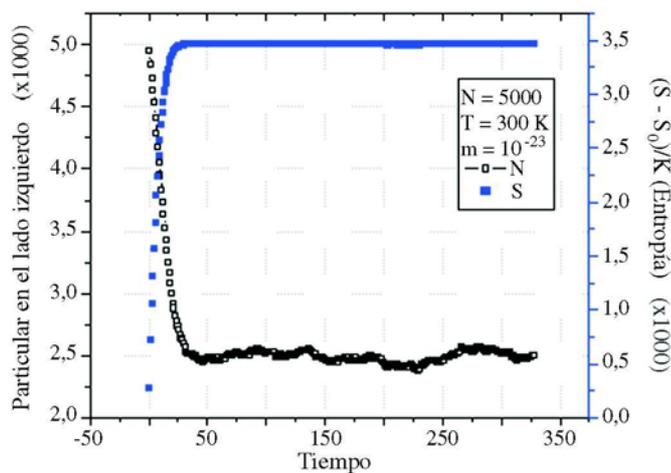


Figura 10 - Número de partículas en la mitad izquierda para diferentes funciones de distribución de velocidades en dependencia del tiempo.

## 5. Fluctuaciones

Como se ve en los gráficos ya mostrados el sistema en el equilibrio fluctúa alrededor de  $N/2$  en cada mitad del recipiente, estas fluctuaciones aparecen de forma aleatoria en el tiempo. El orden de dichas fluctuaciones [5, 8] cumple con una distribución gaussiana con centro en  $N/2$  independientemente de la temperatura, masa o número de partículas. Para comprobar lo anterior se realizó en un sistema con un total de 1000 partículas la expansión libre del mismo al retirar el tabique y se midió la frecuencia de las fluctuaciones en intervalos de 5 partículas. En la Fig. 11 se observa el histograma para fluctuaciones con valor entre +40 y -40.

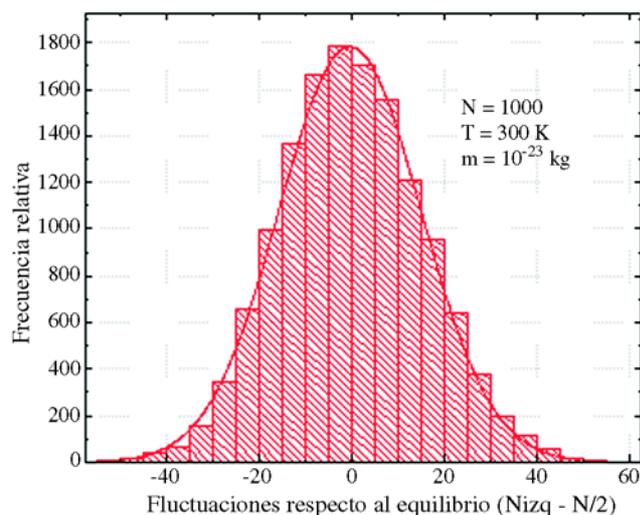


Figura 11 - Histograma de las fluctuaciones del número de partículas.

Este comportamiento del sistema hace que las fluctuaciones grandes, como puede observarse en la Fig. 11 sean mucho menos probables que las fluctuaciones pequeñas, de tal modo, que no se observan incluso para tiempos extremadamente grandes.

## 6. Conclusiones

La modelación realizada permite al estudiante:

- visualizar el desarrollo del proceso de expansión del gas ideal.
- comprobar el carácter exponencial de la disminución del número de partículas del gas en la mitad izquierda en los primeros momentos de la expansión libre.

- comprobar la dependencia del tiempo de relajación de la masa de las partículas y de la temperatura a que se encuentra el sistema.
- comprobar que la distribución de velocidades de Maxwell es la que da la descripción correcta de la expansión libre del gas ideal.
- obtener un desarrollo de la expresión de la entropía que permite calcular su valor para sistemas con un número relativamente grande de partículas.
- comprobar que para el tiempo de relajación del sistema el número de partículas se hace igual a  $N/2$  y la entropía alcanza su máximo valor.
- estudiar las fluctuaciones del número de partículas y comprobar que obedece una distribución gaussiana con centro en  $N/2$  independientemente de la temperatura. Este modelo es de utilidad para que el alumno pueda entender mejor las predicciones de la teoría cinético molecular basadas en el modelo del gas ideal.

El programa elaborado es sencillo y lo recomendamos para ilustrar en las actividades docentes, el fenómeno de expansión libre de un gas ideal que ocupa inicialmente la mitad del volumen del recipiente. La presentación elaborada en base al programa fue incluida en los actividades prácticas de la asignatura física molecular para la Licenciatura en Física.

## Referencias

- [1] A.M. Ingham and J.K. Gilbert, *Int. J. Phys. Ed.* **13**, 193 (1991).
- [2] J. Gobert and B.C. Buckley, *Int. J. Phys. Ed.* **22**, 891 (2000).
- [3] B.A. Thacker, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 1833 (2003).
- [4] F. Reif, *Fundamentos de Física Estadística y Térmica* (Ediciones del Castillo, Madrid, 1974).
- [5] D. Halliday, R. Resnick and J. Walker, *Fundamentals of Physics* (John Wiley & Sons, New York, 1997), 5th edition.
- [6] S. Frish y A. Timoreva, *Curso de Física General* (Editorial Mir, Moscú, 1967), Tomo 1.
- [7] Raúl Portuondo Duany y M. Pérez Quintana, *Mecánica* (Editorial Pueblo y Educación, La Habana, 1974).
- [8] F. Reif., *Statistical Physics, Berkeley Physics Course* (Edición Revolucionaria, La Habana, 1969), v. 5.