Mec. Estadística 2022 Clase 2

En la ultima clase dijimos que los siguientes tres hechos son determinantes en el destino del zapatero.

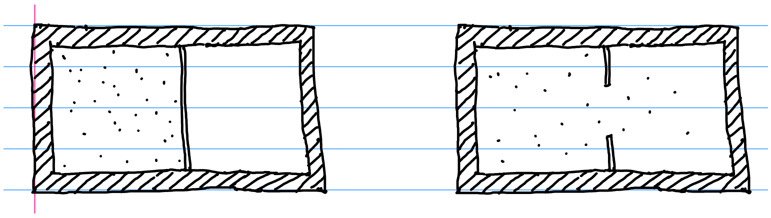
1. Los oasis ocupan una muy pequeña parte del área del Sahara

2. El zapatero pasa igual tiempo en cada metro cuadrado de la parte del Sahara que recorre.

3. El tiempo que pasa en cada metro cuadrado es corto (aproximadamente 1 s) pero no muy, muy corto. Por lo tanto el tiempo para el retorno a la oasis es mucho mayor que el tiempo de sus observaciones – de su vida.
- si pasara un nanosegundo en cada metro cuadrado volvería a su oasis unas horas luego de partir.

Y también dijimos que condiciones análogas aplican a sistemas físicos (mecánicos). Y fundamentan la mec. estadística.
Estrictamente dicho solo los análogos a 1. y 2. se necesitan para fundamentar el formalismo de mec. estadística. El análogo de condición 3 es necesario para que este reproduzca la termodinámica, y en particular la Segunda Ley.

Consideramos un proceso de equilibración en un sistema físico muy sencillo: Un gas esta inicialmente contenido en compartimento 1 de una recipiente que esta dividido en dos compartimentos por una compuerta.
Luego se abre la compuerta. Se observa que el gas se distribuye sobre los dos compartimentos, hasta llegar a una densidad uniforme, y que después de esto no hay mas cambio a nivel macroscópico.



Sostengo que este comportamiento se explica por 3 hechos:

1. La parte del espacio de fase accesible del gas en que todas las moléculas están en el compartimento 1 ocupa una muy pequeña fracción del volumen del espacio de fase accesible total (en que cada molécula pueden estar en ambos compartimientos).

2. La evolución del gas es tal que su microestado pasa igual tiempo en iguales volúmenes en el espacio de fases accesible. Y por lo tanto pasa una muy pequeña fracción de su tiempo en el macro estado consistiendo de microestados con todas las moléculas en compartimento 1.

3. La velocidad de movimiento de las moléculas del gas es menor que la velocidad de la luz, y la velocidad media mucho menor que esto.

Entonces el gas no puede pasar de un estado mas o menos uniformemente distribuido a un estado en que esta toda en compartimento 1 y de vuelta a una distribución mas o menos uniforme en un tiempo arbitrariamente corta. No es un proceso exento de las leyes de física, aunque resulte de un microestado inicial excepcional del gas. Por lo tanto la fluctuación en que toda el gas se concentra en compartimiento 1 lleva cierto tiempo mínimo. Si el sistema pasa una muy pequeña fracción del tiempo concentrado en el compartimiento 1, pero cada pasaje por este estado lleva cierto tiempo mínimo, entonces debe haber mucho tiempo entre tales fluctuaciones.

(He dado el argumento de manera no del todo precisa aquí. Luego lo voy a dar una versión precisa que nos permite calcular una cota inferior sobre la duración de una fluctuación, y por lo tanto una cota inferior sobre el tiempo medio entre fluctuaciones.)
Porque el tiempo entre las vueltas del gas al compartimento 1 (el tiempo de retorno de Poincare) es extraordinariamente largo en el promedio podemos estar bastante seguros de que no vamos a llegar a verlo, y se puede concluir que la mecánica predice el comportamiento de equilibración observado.

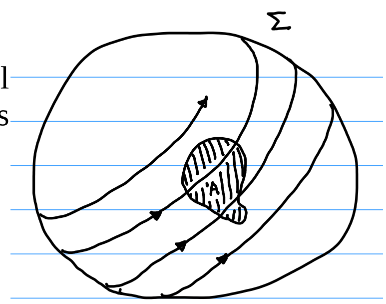
Ahora vamos a formular mas precisamente estos hipótesis para un sistema mecánico general y argumentar su plausibilidad.

Empezamos con hipótesis 2.

El microestado de un sistema mecánico evoluciona en el tiempo y por lo tanto describe una trayectoria en su espacio de fases accesible. Si fijamos un subconjunto A del espacio de fases accesible Σ podemos preguntar cuál fracción del tiempo el microestado pasa en A.

Sostengo que "el microestado pasa iguales tiempos en iguales volúmenes de Σ ". Mas precisamente:

"Para casi todo microestado inicial la fracción del tiempo que el microestado pasa dentro de un subconjunto medible A del espacio de fases accesible Σ es igual a la fracción del volumen de Σ ocupado por A."



De hecho esto es un teorema matemático, llamado el teorema ergodico. Fue comprobado por Birkhoff en 1931. Lo que suele ser una hipótesis es cuales son las cantidades conservadas del sistema, y entonces cual es el espacio de fase accesible. Siempre se conserva la energía en un sistema aislado, y generalmente se supone que es la única cantidad conservada. A veces hay otras cantidades conservadas que son obvias, como el momento angular si no hay recipiente para romper su conservación. Pero puede haber cantidades conservadas menos obvias. Para algunas pocas sistemas se ha demostrado matemáticamente cual es el conjunto completo de cantidades conservadas. Volveremos sobre esto.

La idea de este teorema es muy importante, pero para entenderlo hay que aclarar el significado de varias palabras. ¿Que es “casi todo”? ¿“subconjunto medible”? ¿Como se define “volumen” en el espacio de fase accesible? ¿La “fracción del tiempo”?

Empezamos con el volumen en el espacio de fase accesible, y de subconjuntos de este.

Para fijar conceptos miramos primero un ejemplo sencillo y importante de un espacio de fases accesible:

El espacio de fases accesible de un gas monatómico ideal en un recipiente sin fuerzas externas.

Supongamos que hay N partículas y que el recipiente ocupa una región $W \subset R^3$ del espacio tridimensional.

Las posiciones $\mathbf{q}_s$ de cada uno de los N partículas están confinadas a W.

Porque el gas es ideal y no sujeto a fuerzas externas (como gravedad) su energía es

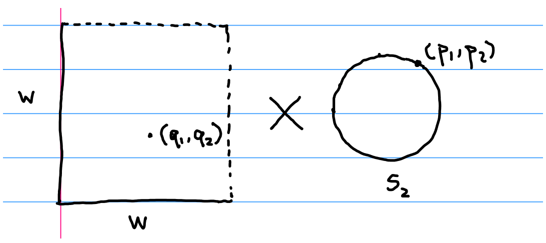
$$E = \frac{1}{2m} \sum_s p^2{}_s$$

(En general hay un termino de energía potencial debido a las atracciones, repulsiones y otras interacciones de las moléculas En un gas ideal esta energía potencial es despreciable frente a la energía cinética. Esto no quiere decir que no hay interacción alguna. Si no hubiera la energía de cada molécula seria conservada por separado, y habría muchísimas cantidades conservadas. Estamos suponiendo que la interacción es débil, pero que rompe la conservación de todo salvo la energía total.)

Esto define una esfera S_{3N-1} de 3N-1 dimensiones, y radio $\sqrt{2mE}$ en el espacio de los momenta.

Supongamos, como *hipótesis* que no hay otra cantidad conservada para el sistema que la energía. El espacio de fases accesible es entonces

$$\Sigma = W^N \times S_{3N-1}$$



Caso de 2 partículas en espacio unidimensional

Todos los microestados $(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_N;\ \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_N)$ en este conjunto son accesibles, y solo ellos lo son.

Seguimos con el desarrollo de la definición del volumen de un subconjunto de Σ .

El proximo paso es definir el **volumen en el espacio de total**, sin restricción a estados accesibles. (Llamare al espacio de fases total Γ).

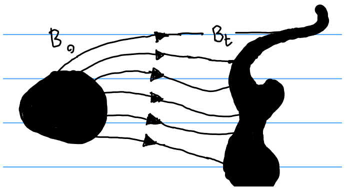
Hay una noción de volumen natural: La medida de Liouville

$$d\mu = d^{3N}q\, d^{3N}p = dq_{11}dq_{21}dq_{31}dq_{12}dq_{22}dq_{32},\ldots dp_{11}dp_{21}dp_{31}dp_{12}dp_{22}dp_{32}\ldots$$

Esta noción de volumen no es solo natural porque es fácil de escribir en términos de coordenadas canónicas, es natural porque es **preservado por la evolución**: Si fijamos un conjunto B_0 y evolucionamos todos los microestados en B_0 adelante por un cierto tiempo *t* obtenemos un nuevo conjunto B_t, y

$$volumen\, B_t = volumen\, B_0$$

Esto se llama el teorema de Liouville, pero parece haber originado con Gibbs. Dice que los microestados mueven como un fluido incompressible en el espacio de fases Γ . Es muy importante, entonces lo demostraremos.

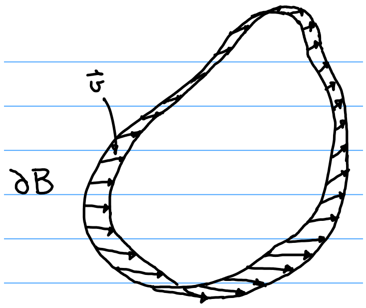


Teorema de Liouville: $d/dt\, vol(B_t) = 0$.

Dem: $d/dt\, vol(B_t) = d/dt \int_{B_t} d\mu$

$= \int_{\partial B_t} \vec{v} \cdot d\vec{a}$ - $\vec{v} = (\dot{\boldsymbol{Q}}, \dot{\boldsymbol{P}})$ = velocidad en espacio de fases.

$= \int_{B_t} \nabla \cdot \vec{v}\, d\mu$.



Así es suficiente demostrar que $\nabla \cdot \vec{v} = 0$.

Pero en espacio de fases las ecuaciones de Hamilton dicen que

$$\dot{q}_{si} = \partial H / \partial p_{si}$$
$$\dot{p}_{si} = -\partial H / \partial q_{si}$$

Entonces $\nabla \cdot \vec{v} = \sum_{si} \left[\frac{\partial \dot{q}_{si}}{\partial q_{si}} + \frac{\partial \dot{p}_{si}}{\partial p_{si}}\right] = \sum_{si} \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_{si}\partial p_{si}} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_{si}\partial q_{si}}\right] = 0$. Q.E.D.

(Se puede hacer otra demostración que es menos geométricamente intuitivo pero mas elemental: Se define coordenadas u^k en el espacio de fase que mueven con la evolución, es decir, los u^k son constantes en un microestado que evoluciona. Entonces B_t corresponde a una región fija de las coordenadas u^k y el volumen de B_t es el integral sobre esta región del determinante Jacobiano de la transformación de las coordenadas u^k a las coordenadas (**Q**, **P**) sobre este dominio fijo. La derivada en el tiempo de este determinante es fácilmente evaluado y resulta ser $\nabla\cdot\vec{v}$ por el mismo determinante Jacobiano. El hecho que esta divergencia es cero nos da de nuevo que el volumen se conserva.)

Bueno. Entonces adoptamos $d\mu = d^{3N}q\,d^{3N}p$ como elemento de volumen en el espacio de fases. (Se llama "la medida de Liouville".)

Ahora queremos definir una noción de **volumen en el espacio de fases *accesible***.

Para simplificar la presentación supongamos que la energía es la única integral de movimiento. Entonces el espacio de fases accesible Σ es la superficie H(**Q**, **P**) = E, con H el Hamiltoniano. Es decir, que es la superficie donde la energía tiene el valor E. (Esto es lo que hicimos en el ejemplo del gas ideal recién.)

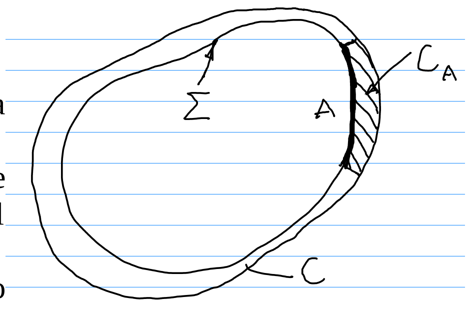
En esta discusión voy a llamar el volumen en Σ el *área*, aunque Σ tiene 6N – 1 >> 2 dimensiones, para distinguirlo del volumen Liouville en el espacio de fases total Γ.

La idea tras la definición del area en Σ es la siguiente: Reemplazamos la superficie Σ por una capa C en el espacio de fases definido por $E < H < E + \Delta E$. Tomamos como área el volumen Liouville de esta capa, dividido por ΔE:

$$Area(\Sigma) = Vol(C)/\Delta E = \frac{1}{\Delta E}\int_{E<H<E+\Delta E} d^{3N}q\,d^{3N}p \quad .$$

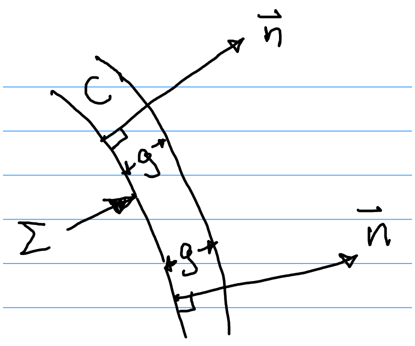
Podemos extender esto a un área de un subconjunto $A \subset \Sigma$. Simplemente tomamos la parte de la capa C que esta sobre A, que llamamos C_A y definimos

$$Area(A) = Vol(C_A)/\Delta E$$



Ahora bien, esta definición es ambigua, porque la definición de C_A lo es. Si la capa es muy, muy fina (ΔE muy pequeño) parece como no lo sería. De hecho es a menudo la manera mas util de pensar del area en Σ.
Pero para asegurarnos que tengamos una definición no ambigua escribimos la de manera mas nítida. Vamos a tratar el espacio de fases Γ como un espacio Cartesiano con las coordenadas canónicas q_{si}, p_{si} siendo coordenadas Cartesianas. En la geometría Cartesiana ∇H es normal a Σ y el grosor *g* de la capa C_A es definido por

$$\Delta E = g\vec{n}\cdot\nabla H$$



donde $\vec{n}=\nabla H/\|\nabla H\|$ es el normal unitario a Σ .
Entonces $\Delta E=g\nabla H\cdot\nabla H/\|\nabla H\|=g\|\nabla H\|$, que implica $g=\Delta E/\|\nabla H\|$ y

$$Area(A)=\frac{1}{\Delta E}\int_A g\,da=\int_A \frac{1}{\|\nabla H\|}da$$

donde da es el elemento de área Cartesiano en Σ . Esto si es una clara definición de area en Σ , al menos mientras esta dada una elección de coordenadas canónicas. Se puede mostrar que es invariante bajo transformaciones canónicas. Porque la evolucion en el tiempo es también una transformación canónica esto muestra de paso muestra que es invariante bajo evolución.
Vemos que en el caso del gas ideal monatómico esta expresión es algo trivial, ya que $\|\nabla H\|$ es constante ahí. El área en Σ es proporcional al área Cartesiano.

Ahora que tenemos la definición de “área” en el espacio de fases accesible volveremos a llamarlo “volumen”. Es la definición de volumen a que se refiere el teorema de Birkhoff, y es la noción de volumen que mas usaremos.