

# Simulaciones de modelos de teoría cinética como recursos didácticos

A. Salcido, R. Rechtman, A. Calles

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias,  
Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apdo. postal 70-646, 04510 México D.F., México*

(Recibido el 17 de mayo de 1989; aceptado el 30 de agosto de 1989)

**Resumen.** En cursos introductorios de Teoría Cinética y Mecánica estadística se presentan al estudiante algunos conceptos como los de la tendencia irreversible al equilibrio y la hipótesis de caos molecular que, por lo general, no son asimilados fácilmente. Para ilustrar estos conceptos, en la literatura existen algunos modelos relativamente sencillos como el de las urnas (de 1906) y el de viento-arbol (de 1911) de los Ehrenfest y el modelo de anillo de Kac de 1956. En este trabajo, después de discutir de manera breve estos modelos y otro para el proceso de autodifusión en un gas, se presentan programas para su simulación en una computadora personal (compatible con IBM). La observación de las simulaciones en la pantalla de la computadora y la comparación de los resultados de estas con las soluciones de las ecuaciones de la teoría cinética son dos elementos que pueden contribuir para facilitar al estudiante la comprensión de los conceptos básicos de esta teoría.

PACS: 01.50.Ht; 05.20.Dd

## 1. Introducción

En la teoría cinética, uno de los objetivos principales es la obtención de las propiedades macroscópicas de un fluido a partir de la descripción del comportamiento del enorme número de partículas que lo componen. Se parte de la consideración mecánica de un sistema de muchas partículas (del orden de  $10^{23}$ ) para terminar con una descripción macroscópica o termodinámica del mismo. Entre los elementos más sobresalientes de esta teoría se encuentra el hecho de que consigue pasar de una descripción reversible en el tiempo, como lo es la mecánica clásica, a otra esencialmente irreversible, como la termodinámica [1].

La presentación y discusión de este problema en los cursos introductorios de teoría cinética no es, en general, una tarea sencilla, debido esto a la complejidad matemática de las ecuaciones de la teoría y a la sutileza de algunos de sus conceptos básicos. En estos cursos, por consiguiente, casi siempre es necesario recurrir a modelos sencillos y matemáticamente tratables que generalmente no representan a sistemas que puedan encontrarse en la naturaleza, pero que sí poseen algunos rasgos que en algo semejan a tales sistemas.

En este trabajo se describen algunos de estos modelos y se presenta un paquete de simulaciones en computadora que puede utilizarse como suplemento para la discusión de los mismos. Se espera que la comparación de los resultados teóricos con los de las simulaciones permitan al estudiante obtener una percepción más clara y más profunda de los conceptos claves de la teoría cinética.

Los modelos que se consideran son el de las urnas de los Ehrenfest [2,3], el modelo del anillo de Kac [4,5], el modelo viento-árbol, también de los Ehrenfest [6,7], y un modelo simple de autodifusión en un gas ideado por los autores. Los programas de simulación para estos modelos se han integrado en un paquete que ha sido escrito en Turbo Pascal y para ser usado en una computadora personal compatible con IBM. La utilización del paquete no requiere de experiencia previa en computación por parte del estudiante, pero sí de un conocimiento mínimo de los fundamentos de la teoría cinética. Este paquete de simulaciones no fue concebido como material para el auto-aprendizaje sino como un elemento didáctico auxiliar que le permita al maestro efectuar algunas demostraciones interesantes frente a sus estudiantes.

De los modelos integrados en este paquete, el de las urnas es de carácter totalmente probabilístico y presenta una tendencia irreversible hacia el equilibrio al evolucionar de estados poco probables a otros más probables. El modelo del anillo de Kac, por su parte, intenta una representación de un gas unidimensional donde las partículas sufren "colisiones" con obstáculos fijos colocados al azar; estas colisiones cambian el color de las partículas. En este modelo, dado que su evolución temporal es reversible y periódica, resulta interesante comparar los resultados de la simulación con la solución de la correspondiente ecuación de transporte, la cual predice una tendencia irreversible al equilibrio. El modelo viento-árbol de los Ehrenfest simula un gas bidimensional de partículas que no interactúan entre sí, pero que chocan con obstáculos fijos siguiendo las leyes de la mecánica. La evolución temporal de este modelo también es reversible, pero debido a la existencia de colisiones se espera que refleje de manera adecuada, aunque tal vez burda, el comportamiento de un gas real. Finalmente, el modelo de difusión en un gas bidimensional permite observar, al menos de manera cualitativa, que la tendencia irreversible al equilibrio es una consecuencia de las colisiones dispersivas entre partículas.

Una vez que el paquete ha sido cargado en la computadora, el profesor o el estudiante puede elegir cualquiera de los modelos mencionados, encontrando en cada caso una descripción breve del modelo elegido y de la solución teórica correspondiente. Luego podrá observar en pantalla la simulación computacional y la presentación gráfica de los resultados. El programa permite modificar algunos de los parámetros relevantes del modelo, como la duración de la simulación o el número de partículas que intervienen en ella.

En las secciones siguientes de este trabajo se presentan brevemente los modelos mencionados, su solución dentro de la teoría cinética, la descripción de las simulaciones y los resultados de éstas. Finalmente, se hacen algunos comentarios acerca de la importancia de las simulaciones por computadora en la enseñanza de la física.



## 2. Modelo de las urnas de los Ehrenfest

En 1906, Paul y Tatiana Ehrenfest presentaron un modelo probabilístico que se conoce en la literatura como el modelo de las urnas o modelo perro-pulga y que muestra una tendencia irreversible al equilibrio. El propósito original de los Ehrenfest era el de explicar algunas ideas de Boltzmann respecto a la llamada curva  $H$ , sin embargo, su modelo también es útil como un primer acercamiento al estudio de la tendencia irreversible al equilibrio. En las palabras de los Ehrenfest, el modelo se define como sigue:

Supóngase que tenemos  $N$  pelotas (100 por ejemplo). Estas están numeradas del 1 al  $N$  de manera que sean distinguibles individualmente. En algún momento se encuentran distribuidas entre dos urnas de manera que la urna  $A$  contiene  $P_0$  pelotas (90 por ejemplo), y la urna  $B$  tiene  $Q_0 = N - P_0$  pelotas (por lo tanto 10). Pero no se sabe cuáles pelotas individuales se encuentran en  $A$  y cuáles en  $B$ . Tenemos también, en una bolsa, boletas de lotería numeradas del 1 al  $N$ . Cada 10 segundos se saca una boleta, su número es anunciado, es regresada a la bolsa y las boletas son mezcladas nuevamente. Luego otra boleta es escogida, anunciada, etc. Cada vez que un número es anunciado, la pelota que lleva ese número salta de la urna en la que se encuentre a la otra urna y permanece allí hasta que su número sea anunciado nuevamente [8].

Dado que la probabilidad de sacar cualquier número de la bolsa es la misma (1/100 por ejemplo), es más probable que la pelota llamada se encuentre en la urna más llena. Por ello, si la urna  $A$  se encuentra mucho más llena que la urna  $B$ , es más probable que la primera se vaya vaciando y la segunda llenando hasta que cada una de ellas tenga alrededor de la mitad de las pelotas. Entonces el equilibrio está dado por la igualación aproximada de los números de pelotas en cada urna (50 en el caso considerado). Es interesante recalcar que el número de pelotas que se encuentran en cada urna, como función del tiempo, es en este modelo una variable macroscópica, mientras que una descripción microscópica se refiere a saber en cuál de las urnas se encuentra cada pelota particular.

La ecuación que describe la evolución temporal del número de pelotas,  $P$ , que se encuentran en una de las urnas (la urna  $A$ , por ejemplo) puede obtenerse fácilmente. Considerando que  $P$  es una variable continua, lo mismo que el tiempo, y que  $q$  denota la probabilidad de sacar un boleto cualquiera de la urna ( $q = 1/100$  en el caso considerado), se debe satisfacer que

$$\frac{dP}{dt} = (N - P)q - Pq. \quad (1)$$

Esta expresión es una ecuación de balance donde el primer término del miembro derecho representa la probabilidad de que la pelota llamada en la lotería al tiempo  $t$  se encuentre en la urna  $B$ , y al saltar aumenta el valor de  $P$ ; el segundo término, por su parte, representa la probabilidad de que la pelota llamada en la lotería se encuentre en la urna  $A$ , y por lo tanto al saltar a la urna  $B$  disminuye el valor de

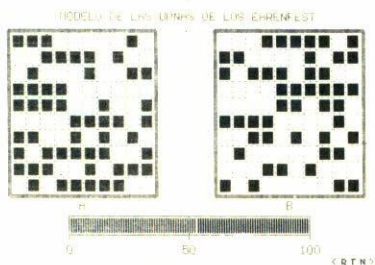


FIGURA 1. Las urnas del modelo.

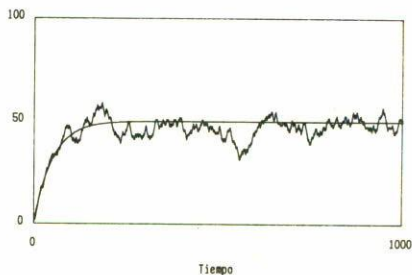


FIGURA 2. El número de pelotas  $P$  en la urna  $A$  como función del tiempo con  $P_0 = 1$ . La curva continua es la gráfica de la Ec. (2), la curva quebrada es el resultado de una simulación.

$P$ . La solución de esta ecuación es

$$P = \frac{N}{2q} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{2P_0}{N} \right) \cdot \exp(-2qt) \right] \quad (2)$$

donde  $P_0$  es el número de pelotas en la urna  $A$  al tiempo  $t = 0$ .

Para este caso, el paquete computacional presenta primero una introducción breve al problema, similar a lo dicho aquí, y enseguida la simulación del modelo. Por comodidad las pelotas se han dibujado en la pantalla como cuadros, tal como

se muestra en la Fig. 1, y estos cambian de color al pasar de una urna a la otra. Se muestra también el número de pelotas en cada una de las urnas para cada tiempo. Finalmente se presenta la gráfica del número de pelotas  $P$  en la urna  $A$  como función del tiempo y la gráfica de la función dada por la ecuación (2). Esto se muestra en la figura 2.

### 3. Modelo del anillo de Kac

En 1956, M. Kac propuso un modelo sencillo para explicar la importancia del papel que juega la hipótesis de caos molecular en la tendencia irreversible al equilibrio. Este modelo, el cual hoy se conoce como el modelo del anillo de Kac, ha sido generalizado y discutido por Dresden en 1962 y Wannier en 1966 [9,10].

Siguiendo la definición de Kac y de Thompson [5], el modelo consiste de un anillo con  $N$  puntos marcados que pueden ser ocupados por  $R$  pelotas rojas y  $V$  pelotas verdes, de manera tal que el número total de pelotas sea  $N$ . Entre cada dos puntos marcados puede o no haber una cruz. El sistema evoluciona en un tiempo discreto de manera que cada pelota se mueve en la dirección de las manecillas del reloj al siguiente punto marcado. En el caso de encontrarse con una cruz en su paso de un punto marcado a otro, cambia su color; en el caso contrario lo mantiene.

En términos de este modelo, Kac se formuló la pregunta siguiente: Dada una distribución de pelotas rojas y verdes al tiempo  $t = 0$ , junto con una distribución al azar de un número dado de cruces, ¿cuál será la distribución de las pelotas después de un número grande de movimientos?

Si las cruces se encuentran distribuidas al azar, y hay un número suficiente de ellas, podría esperarse, dentro del marco de la teoría cinética, que para tiempos largos el número de pelotas de los dos colores se iguale, aun cuando el modelo obedece a una dinámica reversible y periódica. Este punto será discutido más adelante; primero serán obtenidas y resueltas las ecuaciones de transporte.

Conocidos los números de pelotas de cada uno de los dos colores al tiempo  $t$ ,  $V$  y  $R$ , y el número de pelotas de cada color que se encuentran frente a una cruz y que por lo tanto cambiarán de color,  $v$  y  $r$ , es claro que

$$V(t+1) = V(t) - v(t) + r(t) \tag{3}$$

$$R(t+1) = R(t) - r(t) + v(t). \tag{4}$$

Para avanzar en la solución de las ecuaciones de transporte (3) y (4) es necesario hacer una hipótesis acerca de las cantidades  $v$  y  $r$ . Kac propuso que

$$v(t) = (M/N)V(t)$$

y

$$r(t) = (M/N)R(t), \tag{5}$$



donde  $M$  es el número total de cruces en el anillo. Las ecuaciones (5) establecen que el número de las pelotas que cambiarán de color es proporcional al número de cruces y a la fracción de pelotas de ese color. Como argumentó Kac, estas ecuaciones representan a la hipótesis de caos molecular para el modelo, pues establecen que no hay correlación alguna entre el color de las pelotas y las posibles colisiones.

Al restar la ecuación (3) de la (4) y sustituir la condición (5) se obtiene que

$$V(t+1) - R(t+1) = [V(T) - R(t)] \left[ 1 - \frac{2M}{N} \right]. \quad (6)$$

La solución de esta ecuación por diferencias es entonces

$$V(t) - R(t) = [V(0) - R(0)] \left[ 1 - \frac{2M}{N} \right]^t. \quad (7)$$

Aquí puede observarse que para tiempos grandes, dado que  $M < N$ , el sistema alcanza un estado de equilibrio expresado por la igualación de los números de pelotas rojas y verdes.

La dinámica de este modelo, sin embargo, es reversible y periódica. Después de  $N$  pasos temporales, cada pelota se encontrará en su posición inicial con su color inicial si el número de cruces  $M$  es par, y con el color opuesto si el número de cruces es impar. El periodo es  $N$  en el primer caso, y  $2N$  en el segundo. Si el modelo evoluciona un cierto tiempo  $t$ , al cabo del cual se invierte el sentido de movimiento y el del tiempo, cuando se alcance un nuevo tiempo 0 cada pelota se encontrará en su posición original y con su color original. Esto último se debe a que si una pelota pasa por un cierto número de cruces durante la evolución directa, atravesará exactamente el mismo número de ellas en la evolución inversa.

Para entender estas diferencias debe observarse que la hipótesis de caos molecular, expresada por las ecuaciones (5), no es satisfecha por el modelo de Kac en el caso de un anillo finito; pues una vez que una pelota se ha encontrado con una cruz modificando su color, la probabilidad de que al siguiente paso se encuentre de nuevo con una cruz es menor que la anterior, y esto no es lo que expresan las ecuaciones (5). Sin embargo, si la ubicación de las cruces se modifica aleatoriamente después de cada paso (pero sin cambiar su número), se encuentra que el modelo de Kac modificado sí satisface la hipótesis de caos molecular dada por las ecuaciones (5) y que la evolución del sistema ocurre tal como lo predice la teoría cinética.

En el programa de simulación se presentan el modelo de Kac y la modificación mencionada en el párrafo anterior, permitiendo en cualquier caso la comparación de sus resultados con los de la teoría, tal como se ilustra en la Fig. 3.

#### 4. Modelo viento-árbol de los Ehrenfest

El modelo de viento-árbol fue propuesto por los Ehrenfest en 1911. Este representa a un gas bidimensional en el que sus partículas no interactúan entre ellas, pero que

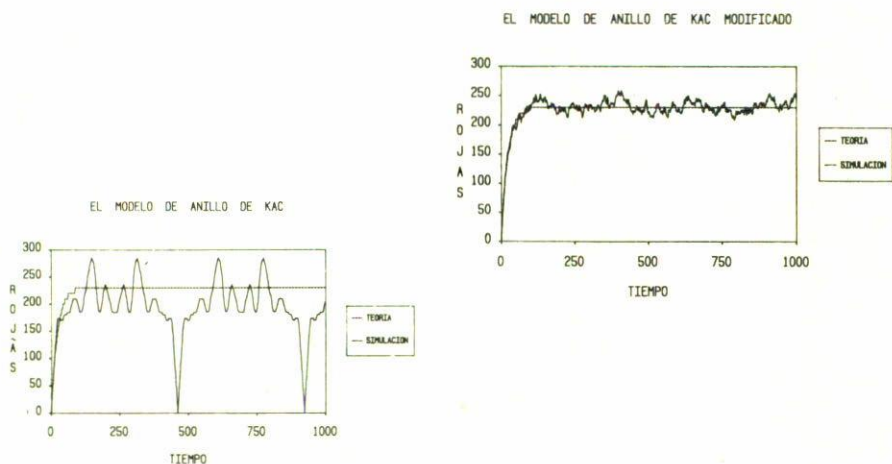


FIGURA 3. Resultados de la simulacion y la teoría para el modelo de Kac y el modelo de Kac modificado.

sí pueden hacerlo con obstáculos fijos. El modelo recibe el nombre de viento-árbol porque de alguna manera recuerda al viento chocando contra los árboles.

Consideremos un número grande pero finito ( $N$ ) de puntos materiales moviéndose en el plano infinito. Llamaremos a estos puntos las 'moléculas  $P$ '. Supondremos que se pueden penetrar completamente unas a otras. Se mueven en ausencia de fuerzas, excepto por colisiones que llevan a cabo con las 'moléculas  $Q$ '. Las 'moléculas  $Q$ ' están definidas como cuadrados con lados de longitud  $a$ ; hay un número infinito de ellas, distribuidas irregularmente sobre el plano infinito y están fijas. Cada porción del plano contiene más o menos el mismo número de ellas (es decir, la distribución es uniforme sobre el plano), y la distancia promedio  $A$  de cuadrados vecinos es grande comparada con  $a$ . Las diagonales de cada molécula  $Q$  son exactamente paralelas a los ejes  $X$  y  $Y$  respectivamente (Fig. 4).

Suponemos que al tiempo  $t_0$  todas las moléculas  $P$  tienen la misma rapidez  $c$  y que se mueven en las cuatro direcciones siguientes

$$(1) \rightarrow (2) \uparrow (3) \leftarrow (4) \downarrow .$$

Dado que las moléculas  $Q$  están fijas y que sus direcciones están orientadas exactamente, esta suposición será válida en cualquier tiempo. Por otra parte, los números

$$f_1, f_2, f_3, f_4$$

que son los números de moléculas moviéndose en las cuatro direcciones en cual-

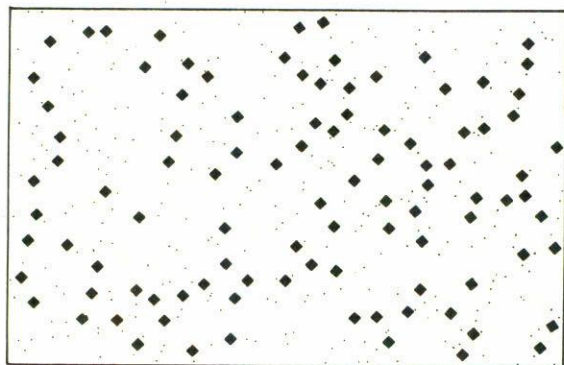


FIGURA 4. El modelo viento-árbol de los Ehrenfest.

quier instante, serán cambiados por las colisiones de las moléculas  $P$  con las moléculas  $Q$ . En otras palabras, cambiará la distribución de velocidades [11].

El modelo de los Ehrenfest es suficientemente sencillo para tratarse exactamente en la teoría, así como también para simularse en una computadora personal. La ecuación de transporte en este caso es el siguiente sistema lineal de cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden y acopladas

$$\frac{df_1}{dt} = k(f_2 + f_4 - 2f_1),$$

$$\frac{df_2}{dt} = k(f_1 + f_3 - 2f_2),$$

$$\frac{df_3}{dt} = k(f_2 + f_4 - 2f_3),$$

$$\frac{df_4}{dt} = k(f_1 + f_3 - 2f_4),$$

donde

$$k = \frac{ac\rho}{2^{1/2}},$$

siendo  $\rho$  la densidad de moléculas  $Q$ . La deducción de estas ecuaciones está basada en la hipótesis de caos molecular, la cual en este caso expresa que el número de partículas dispersadas de una dirección de movimiento a otra (de la 1 a la 2, por ejemplo) es igual al número de partículas dispersadas de la primera dirección a la dirección contraria de la segunda (de la 1 a la 4, en el mismo ejemplo).



Con las condiciones iniciales dadas por

$$\begin{aligned} f_1(0) &= N, \\ f_2(0) &= f_3(0) = f_4(0), \end{aligned}$$

y la condición de normalización

$$f_1 + f_2 + f_3 + f_4 = N,$$

la solución de las ecuaciones de transporte del modelo está dada por [7,12]

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{N}{4} [1 + \exp(-2kt)]^2, \\ f_2 = f_4 &= \frac{N}{4} [1 + \exp(2kt)][1 - \exp(-2kt)], \\ f_3 &= \frac{N}{4} [1 + \exp(-2kt)]^2. \end{aligned} \tag{8}$$

Durante la simulación se cuentan en cada tiempo las moléculas  $P$  que se encuentran moviéndose en cada una de las cuatro direcciones posibles, y el programa permite guardar en disco estos datos. Al terminar la simulación se muestran en la pantalla las gráficas de las funciones  $f_1, \dots, f_4$  y las correspondientes para la función  $H$  teórica y simulada. La función  $H$  en este modelo está definida de la manera siguiente

$$H = \sum_{k=1}^4 f_k \ln(f_k). \tag{9}$$

Un ejemplo de las gráficas que proporciona el programa se muestra en la Fig. 5.

La dinámica del modelo es reversible en el tiempo, pues al invertir éste y la velocidad de cada partícula, cada una de ellas recorrerá la misma trayectoria que había recorrido antes pero en sentido contrario. Si el modelo se encierra en un volumen finito, por ejemplo, una caja con lados paralelos a los ejes  $X$  y  $Y$ , y las moléculas  $P$  se reflejan especularmente al chocar con éstas, el sistema es también periódico. En el caso de la simulación que se presenta se han implementado condiciones periódicas a la frontera por lo que semeja un sistema infinito. Otra vez, como en el modelo del anillo de Kac, se presenta la contradicción entre el comportamiento microscópico que es reversible en el tiempo y la descripción de Boltzmann que es esencialmente irreversible en éste. Como antes, la solución a la paradoja se da en términos de comparar la teoría con el comportamiento promedio de la simulación; es decir, con un conjunto representativo de simulaciones. En particular, el teorema

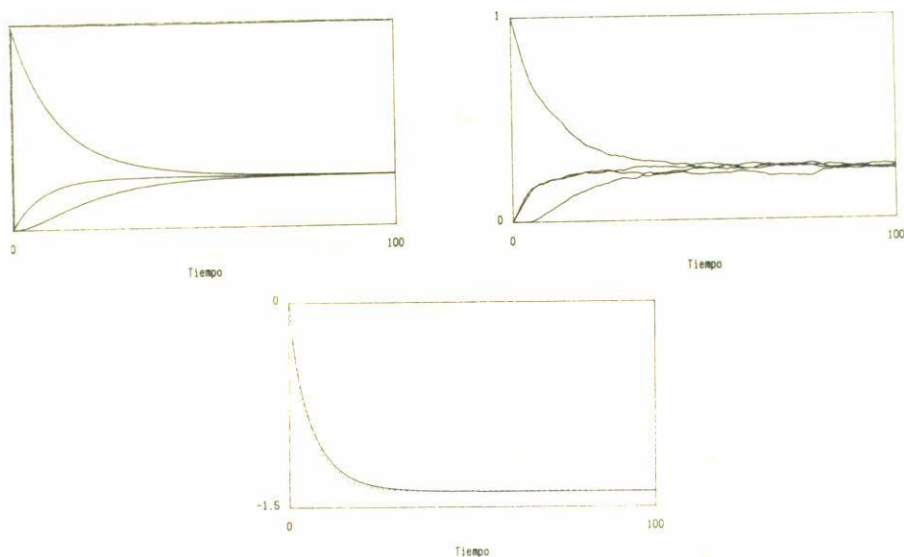


FIGURA 5. a) Solución de las Ecs.(8). La curva superior representa a  $f_1$ , la de enmedio a  $f_2$  (que es igual a  $f_4$ ) y la inferior a  $f_3$ . b) Resultado de la simulación. c) La curva continua representa a la función  $H$  dada por la Ec. (9), la curva punteada representa la simulación. Se usaron 2500 moléculas  $P$  y 600 moléculas  $Q$  de lado  $2/\sqrt{2}$ .

$H$  de Boltzmann establece que

$$\frac{dH}{dt} \leq 0,$$

lo cual, como puede verse en la Fig. 5, no ocurre siempre en las simulaciones individuales. Sin embargo, si se repite la simulación un número grande de veces (por ejemplo 10) y se compara el promedio con la teoría se tiene un mejor acuerdo, tal como se muestra en la Fig. 6.

## 5. Un modelo simple para la difusión de un gas

En esta sección se presenta la simulación de un modelo relativamente más complicado que los discutidos anteriormente. Se trata también de un gas en dos dimensiones, pero ahora con una dinámica más cercana a la de un gas real. En el modelo se considera un sistema de partículas contenidas en una caja y distribuidas inicialmente al azar, aunque con la restricción de satisfacer una función de densidad predefinida. El problema que se plantea es el de conocer la manera en que evolucionará el sistema y si se alcanzará o no un estado de equilibrio.

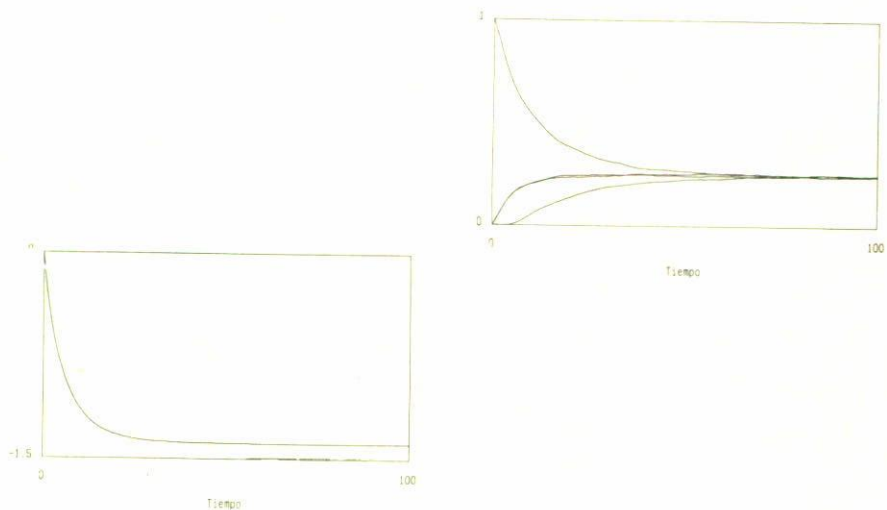


FIGURA 6. Gráfica del comportamiento promedio de las funciones  $f_1, \dots, f_4$  y  $H$  con los mismos parámetros de la figura anterior.

Si el modelo refleja de alguna manera el comportamiento de un gas real debe evolucionar hacia un estado de equilibrio en el cual la densidad sea constante. Es este proceso el que se conoce como difusión (o más correctamente, autodifusión).

Las partículas se pueden mover en ocho direcciones, cuatro de ellas paralelas a los ejes  $X$  y  $Y$  y otras cuatro rotadas  $45^\circ$  respecto a las primeras. La rapidez con la que se mueven las partículas en las primeras cuatro direcciones es 1, y  $\sqrt{2}$  en las otras cuatro. Las colisiones de las partículas con las paredes ocurren elásticamente y de manera especular, y las interacciones entre partículas pueden o no estar presentes. De esta manera, observando la evolución del modelo en la pantalla de la computadora en cada una de estas dos posibilidades, el estudiante y el profesor pueden percatarse de la importancia del papel que juega el mecanismo de interacción entre las partículas del gas en el proceso de difusión.

Al empezar la simulación se escoge una función de densidad predefinida de entre cinco posibilidades. Esta densidad es sólo función de  $x$ . Inicialmente el programa divide a la caja en 50 rebanadas verticales y coloca en cada una de ellas una cantidad de partículas proporcional a la densidad inicial pero al azar en cuanto a posición y velocidad.

En el caso en que no existen interacciones entre partículas, lo cual corresponde a un modelo de un gas ideal, se observa que el comportamiento del sistema es completamente reversible y periódico, y que la evolución de la densidad de partículas coincide con la de una perturbación que se propaga en un medio no disipativo. Por el contrario, cuando se permiten colisiones entre las partículas de manera que sus velocidades antes y después de la colisión no estén correlacionadas (hipótesis de caos molecular), en la simulación puede observarse claramente un proceso de autodifusión



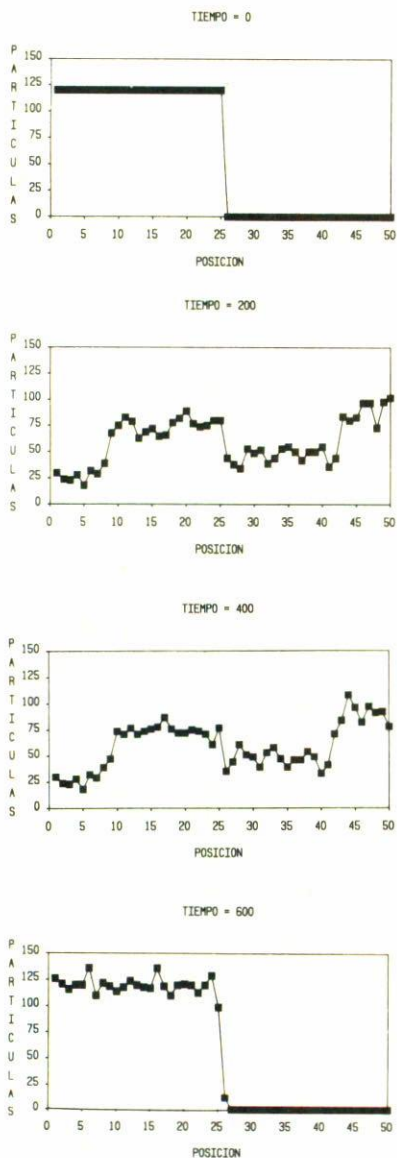


FIGURA 7. Secuencia de la evolución de la densidad en el modelo de difusión en ausencia de interacción entre las partículas del gas.

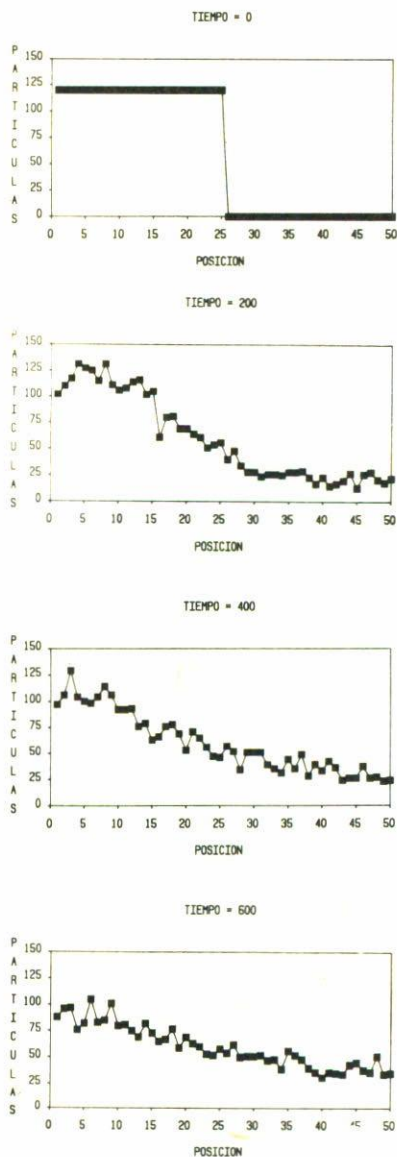


FIGURA 8. Secuencia de la evolución de la densidad en el modelo de difusión en presencia de colisiones dispersivas entre las partículas del gas.

en el que el sistema evoluciona hacia un estado de equilibrio en el sentido antes mencionado. En las Fig. 7 y 8 se muestran secuencias de gráficas que describen la evolución de la densidad de partículas en el sistema para el caso de una expansión libre. La comparación de estos resultados permiten apreciar claramente el efecto de las colisiones entre partículas en el comportamiento macroscópico del sistema.

La dinámica de colisiones que se ha implementado en este modelo es muy sencilla: en cada colisión se conserva el número de partículas pero no la energía ni la cantidad de movimiento. Cuando una partícula al avanzar encuentra a otra, su velocidad se modifica aleatoriamente entre las ocho posibilidades. Este mecanismo de interacción en el modelo, aunque poco realista, permite observar en la simulación que la presencia de las colisiones dispersivas hace posible la relajación del sistema hacia las condiciones de equilibrio.

Por otra parte, cabe mencionar que con el programa de simulación de este modelo de gas uno puede, también, comenzar a estudiar propiedades de transporte tales como tiempos de relajación, coeficientes de difusión y otras [13].

## 6. Conclusiones

En las secciones anteriores se han presentado algunos de los modelos empleados en la literatura para explicar conceptos de la teoría cinética de gases, como es el caso de la hipótesis de caos molecular. Esta presentación está acompañada de un conjunto de programas que simulan la dinámica de cada uno de los modelos discutidos en una computadora personal. La presentación se ha hecho de acuerdo con la complejidad del modelo.

El modelo de las urnas de los Ehrenfest es sencillo, pero muestra cómo un elemento aleatorio puede lograr el equilibrio. El modelo del anillo de Kac corresponde al caso de un gas unidimensional donde las interacciones entre las partículas que lo constituyen sólo tienen un efecto sobre el color de las mismas; mientras que el modelo de viento-árbol de los Ehrenfest corresponde a un gas en dos dimensiones con una dinámica un poco más compleja en la que ocurren interacciones entre dos tipos de partículas, el viento y los árboles. Las simulaciones que se han desarrollado para estos modelos constituyen un material didáctico que facilitan al profesor y al estudiante la tarea de hacer suyos algunos conceptos de la teoría cinética al permitirles observar directamente, en la pantalla de la computadora, el comportamiento de los sistemas considerados. Finalmente, cabe mencionar que dada la naturaleza bidimensional de estos modelos y la imposibilidad de observar directamente lo que ocurre a nivel microscópico, la simulación computacional de los mismos adquiere gran importancia al jugar el papel de los experimentos de laboratorio.

Con el paquete computacional aquí descrito se pretende proporcionar al profesor una herramienta que pueda utilizar para enriquecer sus exposiciones y motivar las discusiones con algunas demostraciones interesantes en el salón de clases. Una demostración es, en este sentido, como un experimento donde lo importante no es la caracterización cuantitativa del fenómeno sino la comprensión cualitativa del mismo. No obstante, también es interesante mencionar que durante el proceso del desarrollo

de los programas para cada uno de los modelos, se ha encontrado que con algunas modificaciones relativamente sencillas dichos programas pueden transformarse en algo más que un mero recurso didáctico. Por ejemplo, en el caso del modelo viento-árbol se podrían calcular coeficientes de transporte como el coeficiente de difusión. El mismo tipo de cálculos se pueden hacer en el último modelo presentado.

Este paquete de programas se encuentra a disposición de las personas interesadas que lo soliciten a los autores. Para ello deberán enviar un diskette de 5.25" o 3.5".

### Agradecimientos

Uno de los autores (AS) agradece a la señorita Guillermina Barrera la solidaridad y el apoyo que le brindó durante la realización de este trabajo.

### Referencias

1. L. Boltzmann, *Vorlesungen Uber Gastheorie*, 2 vols. Leipzig, Barth (1896-1898). Traducido al inglés por S.G.Brush con una introducción por él mismo: *Lectures on Gas Theory*. University of California Press, Cambridge University Press (1964).
2. P. y T. Ehrenfest, "Über eine Aufgabe aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung, die mit der kinetischen Deutung der Entropie- vermehrung zusammenhangt", *Math. Naturw. Blatter* **3** (1906). P. y T. Ehrenfest, "Über zwei bekannte Einwände gegen das Boltzmannsche H-Theorem", *Phys. Z.* **8** (1907) 311.
3. M. Klein, *Paul Ehrenfest*. North Holland, Holanda (1969), pp. 115-119.
4. M. Kac, "Some remarks on the use of probability in classical statistical mechanics", *Bull. Acad. Roy. Belg.*, **42** (1952) 356.
5. C.J. Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*. Princeton University Press (1972), pp. 23-27.
6. P. y T. Ehrenfest, "Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik", en: *Encyklopedie der mathematischen Wissenschaften*, vol. 4, Parte 32, Leipzig, B.G. Teubner (1911). Traducido al inglés por M.J. Moravcsik con un nuevo prefacio por T. Ehrenfest: *The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics*. Cornell University Press (1959).
7. A. Baracca, *Manuale Critico dei Meccanica Statistica*. CULC, Italia (1980).
8. *Ibid* Ref. 3, p. 115.
9. M. Dresden, "A study of models in non-equilibrium statistical mechanics", en: *Studies in Statistical Mechanics*, Vol.1, J. DeBoer, G.E.Uhlenbeck editores. North Holland, Holanda (1962).
10. G.H.Wannier, *Statistical Physics* Wiley, N. York (1966).
11. *Ibid* Ref. 6, p. 11 de la traducción al inglés.
12. A. Calles, R. Rechtman, A. Salcido, "El Modelo de los Ehrenfest y la Hipótesis de Caos Molecular", Preimpreso Depto. de Física, Facultad de Ciencias, UNAM, Serie Verde 1/87.
13. Versiones modificadas del modelo de difusión en un gas que aquí se presenta están siendo utilizadas por C. Sheinbaum y A. Salcido para el estudio de fenómenos de transporte en una estufa doméstica de leña (trabajo en preparación, Facultad de Ciencias, UNAM, 1989.), y más recientemente por S. Orlaineta, A. González, A. Narváez y A. Salcido para estudiar el proceso de difusión en una mezcla binaria de gases (trabajo en preparación, Facultad de Ciencias, UNAM, 1989).



**Abstract.** In elementary courses of Kinetic Theory and Statistical Mechanics, some concepts like the irreversible tendency to equilibrium and the hypothesis of molecular chaos are not easily assimilated by the students. In order to give them some feeling about these concepts, some relatively simple models, like the urn (1906) and the wind-tree (1911) models of P. and T. Ehrenfest and the Kac's ring model (1956), have been developed in the specialized literature. Using simulations implemented in a personal computer (IBM compatible), these models, and another one for a self-diffusion process, are briefly described and discussed in this work. The time evolution of the models can be seen on the computer's screen monitor and the comparison of the simulation results with the solutions of the kinetic equations may contribute to the comprehension of the basic concepts of these theories.