EPISTEMOLOGÍA E HISTORIA DE LA CIENCIA

SELECCIÓN DE TRABAJOS DE LAS XV JORNADAS

VOLUMEN 11 (2005)

TOMO II

Horacio Faas
Aarón Saal
Marisa Velasco
Editores

ÁREA **L**OGICO-**E**PISTEMOLÓGICA DE LA **E**SCUELA DE **F**ILOSOFÍA
CENTRO DE **I**NVESTIGACIONES DE LA **F**ACULTAD DE **F**ILOSOFÍA Y **H**UMANIDADES
UNIVERSIDAD **N**ACIONAL DE **C**ÓRDOBA

Irreversibilidad, ergodicidad y la noción de equilibrio

Olimpia Lombardi / Martín Labarca†*

1. Introducción

A fin de justificar la introducción de probabilidades en un contexto clásico determinista, Boltzmann introdujo en 1871 la *hipótesis ergódica*, según la cual un sistema aislado recorre, a través de su evolución, todos los estados compatibles con su energía. En la actualidad, la Teoría Ergódica se ha convertido en una poderosa herramienta matemática para el estudio de los sistemas dinámicos desde una perspectiva formal. Sus resultados han permitido volver a analizar, con herramientas teórico-formales más precisas, el papel que cumple la ergodicidad en los fundamentos de la Mecánica Estadística. En particular, el debate se refiere al papel de la ergodicidad en la evolución irreversible hacia el equilibrio. En el presente trabajo se discutirán dos posiciones antagónicas respecto de esta cuestión, derivadas de los enfoques teóricos de Boltzmann y de Gibbs, poniendo de manifiesto los malentendidos conceptuales implícitos en el debate.

2. Ergodicidad y mezcla

La Teoría Ergódica es una teoría matemática que estudia las propiedades estadísticas de los sistemas dinámicos considerados desde un punto de vista totalmente abstracto (cfr. Lebowitz y Penrose, 1973). Dicha teoría permite clasificar los sistemas dinámicos según su grado creciente de inestabilidad en ergódicos, mezcladores, K y Bernoulli. Cada una de estas clases incluye a la siguiente; por lo tanto, si un sistema es mezclador, es ergódico pero no a la inversa.

Si bien la hipótesis ergódica fue introducida por Boltzmann, por consideraciones dimensionales hoy se sabe que en su formulación original no puede ser verdadera: dado que cualquier trayectoria en el espacio de las fases es unidimensional, no puede "cubrir" la hipersuperficie de energía constante cuya dimensión es superior a uno. No obstante, la idea original puede conservarse mediante un nuevo concepto de ergodicidad, que requiere que el punto representativo pase por toda subregión de volumen finito incluida en la hipersuperficie de energía constante. De este modo se cumple que el punto representativo no permanezca atrapado en ninguna subregión de la hipersuperficie de energía constante, pero evitando la exigente condición de que pase por todos sus puntos a lo largo del tiempo.

La propiedad de *mezcla* es la siguiente propiedad ergódica, más fuerte que la ergodicidad. Formalmente, la mezcla implica que cualquier región finita incluida en la hipersuperficie de energía constante evoluciona manteniendo su volumen constante, pero deformándose progresivamente; por lo tanto, para $t \rightarrow \infty$, la región inicial puede haberse ramificado hasta el punto de "cubrir" aparentemente toda la hipersuperficie de energía constante.

* Universidad Nacional de Quilmes. CONICET

† Universidad Nacional de Quilmes.

Epistemología e Historia de la Ciencia, Volumen 11 (2005)

Como veremos, los conceptos de ergodicidad y mezcla resultan centrales en la discusión acerca del grado de inestabilidad que debe poseer un sistema dinámico para manifestar un comportamiento irreversible.

3. El enfoque de Gibbs

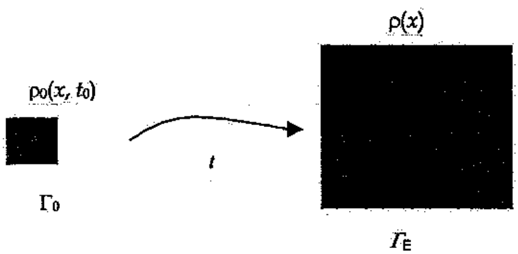
En el enfoque de Gibbs, el estado instantáneo de un sistema mecánico-estadístico queda representado por una densidad $\rho(x, t)$ que brinda la probabilidad por unidad de volumen de que el punto representativo del sistema se encuentre en las diferentes regiones del espacio de las fases.

Desde esta perspectiva, el equilibrio se define como la situación en la cual la densidad $\rho(x, t)$ es independiente del tiempo ($\partial\rho \,/\, \partial t = 0$). Para representar dicha situación, Gibbs recurre a la distribución *microcanónica*, que se define como una distribución $\rho(x)$ constante en la hipersuperficie de energía constante Γ_E y nula fuera de ella. A su vez, la entropía de Gibbs S_G se calcula como:

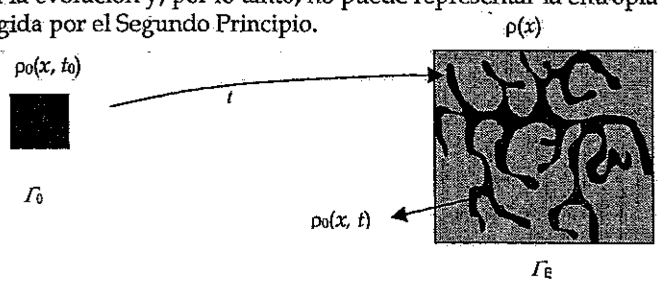
$$S_G = -k \int_\Gamma \rho(x)\, log\, \rho(x)\, d\Gamma$$

donde Γ representa el espacio de las fases.

¿Cómo dar cuenta, desde esta perspectiva, de la macroevolución de un sistema hacia el equilibrio? En la descripción de Gibbs, el estado inicial, representado por la distribución $\rho_0(x, t_0)$ cuyo soporte se encuentra confinado a una región Γ_0, debería evolucionar luego de un cierto tiempo t hacia la distribución microcanónica $\rho(x)$ constante en Γ_E.



Sin embargo, tal situación es imposible. Puesto que el sistema evoluciona según las leyes de la mecánica cumpliendo el Teorema de Liouville de constancia de la medida en el espacio de las fases, la región Γ_0 podrá deformarse y extenderse sobre Γ_E pero no podrá cubrirla de un modo efectivo. En consecuencia, dada la validez del Teorema de Liouville, la entropía S_G se mantiene constante durante toda la evolución y, por lo tanto, no puede representar la entropía termodinámica S regida por el Segundo Principio.



En el enfoque de Gibbs, lo que en realidad sucede es que la región inicial se ha distribuido y ramificado hasta el punto de cubrir de un modo *aparentemente* uniforme la región Γ_E correspondiente al equilibrio. A fin de dar cuenta de la creciente deformación de Γ_0 inicial, puede definirse una *entropía de grano grueso* (*coarse grain*) S_{cg}: divídase el espacio de las fases en celdas y asígnese una probabilidad P_i a cada una de ellas –probabilidad de que el punto representativo del microestado del sistema se encuentre en la celda *i*–; S_{cg} se define como:

$$S_{cg} = -k \, \Sigma P_i \, log \, P_i$$

y puede esperarse que *aumente* a través de la evolución, a medida que la región inicial vaya ingresando en mayor cantidad de celdas. En efecto, para que se produzca el aumento de S_{cg}, es necesario que el sistema posea la propiedad de mezcla, esto es, que la región inicial se deforme a través de la evolución. Pero, a su vez, ello exige que el sistema sea *ergódico* puesto que, como fue señalado en la sección anterior, la mezcla es un grado de inestabilidad superior a la ergodicidad.

4. El enfoque de Boltzmann

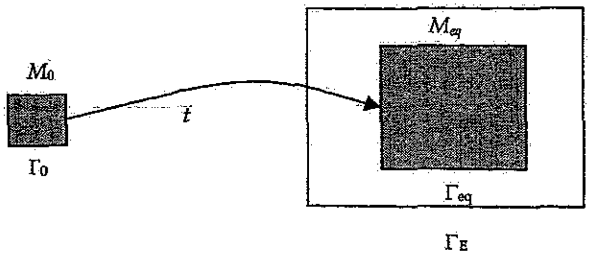
El enfoque de Boltzmann se basa en el hecho de que cada macroestado termodinámico M_i del sistema es compatible –esto es, puede realizarse a través de– una enorme variedad de microestados mecánicos y, por tanto, queda representado por una región Γ_i del espacio de las fases. El núcleo de la propuesta de Boltzmann consiste en asociar la probabilidad de ocurrencia de cada macroestado M_i con el número de microestados diferentes compatibles con él, es decir, con el número de puntos pertenecientes a su región Γ_i correspondiente. Pero dado que el conjunto de puntos de cada región Γ_i es no numerable, el modo de "contar" microestados consiste en utilizar la medida de Lebesgue μ que, intuitivamente, mide el volumen de cada región de las fases.

Desde esta perspectiva, el macroestado más probable será el representado por la región de medida máxima, es decir, aquél al cual corresponda un mayor número de microestados, y hacia él tenderá, con alta probabilidad, la evolución del sistema. Por lo tanto, el macroestado de equilibrio M_{eq} se define como el macroestado más probable, esto es, el representado por la región Γ_{eq} de medida máxima. De aquí surge la idea de Boltzmann de identificar la entropía de cada macroestado con una medida del número de sus microestados compatibles, en el lenguaje del espacio de las fases, la entropía de Boltzmann se define entonces:

$$S_B(M_i) = k \, log \, \mu(\Gamma_i)$$

donde k es la constante de Boltzmann. Dado que la región correspondiente al macroestado de equilibrio es la que posee medida máxima, en cualquier evolución que parte de un macroestado inicial M_0 y se dirige al equilibrio M_{eq}, la entropía, con alta probabilidad, tiende a aumentar en concordancia con el Segundo Principio de la Termodinámica.

¿Qué se requiere, entonces, para que la microevolución mecánica reversible del sistema sea compatible con su macroevolución irreversible? Se requiere que todos los microestados compatibles con el macroestado inicial M_0 den lugar a microevoluciones que conduzcan al sistema, luego de un tiempo t, a microestados compatibles con el macroestado de equilibrio M_{eq}:



Como puede comprobarse, esta explicación boltzmanniana de la irreversibilidad no requiere que el sistema sea ergódico. En palabras de Bricmont, "se fija un conjunto de variables macroscópicas y se divide el espacio de las fases de acuerdo con los valores que adoptan dichas variables [...] Cada elemento de la partición consiste en un conjunto de estados microscópicos que producen el mismo valor de las variables macroscópicas elegidas. Tales elementos de la partición tienen volúmenes muy diferentes [...] Por lejos, el mayor volumen corresponde a los valores de equilibrio de las variables macroscópicas. Por lo tanto, se necesita una noción mucho más débil que la ergodicidad. Todo lo que se requiere es que las configuraciones microscópicas evolucionen en el espacio de las fases hacia aquellas regiones donde las variables macroscópicas relevantes toman sus valores de equilibrio" (Bricmont, 1995, p.179).

5. El problema de la ergodicidad

Las secciones anteriores ponen claramente de manifiesto el profundo desacuerdo entre los enfoques de Boltzmann y de Gibbs respecto del papel que cumple la ergodicidad en el comportamiento de los sistemas mecánico-estadísticos. La explicación gibbsiana de la irreversibilidad depende esencialmente del carácter mezclador del sistema: si el sistema no es ergódico –y, por tanto, no es mezclador– el esquema teórico de Gibbs predice que *no se producirá el aumento de la entropía* de grano grueso asociada con la entropía macroscópica y, por tanto, tampoco el aumento de entropía postulado por el Segundo Principio. Esto explica la razón por la cual quienes adoptan en una u otra variante la línea teórica de Gibbs, siempre subrayan la necesidad de que la microestructura del sistema posea un alto grado de inestabilidad para que la irreversibilidad se manifieste. Uno de los primeros autores en señalar el papel esencial que cumple la inestabilidad dinámica para la irreversibilidad fue el físico ruso Krylov, al afirmar que "el proceso de mezcla es indispensable para que exista la relajación de los sistemas físicos, esto es, para hacer posible la existencia de una ley probabilística de la distribución de los estados que sea independiente del estado inicial" (Krylov, 1979, p.19).

La idea de mezcla, si bien carente por completo de definición formal, fue ya introducida por Gibbs en el Capítulo XII de su *Elementary Principles in Statistical Mechanics* con su famosa analogía de la gota de tinta en un vaso de agua (Gibbs, 1902, pp.144-145). En su ya clásico texto, Tolman retoma explícitamente la misma idea: "esta disminución [de $k \, \Sigma \, P_i \log P_i$] resulta de la incapacidad de los puntos representativos del ensemble, originalmente presentes en alguna particular región pequeña pero finita $\delta q_1 \ldots \delta p_f$ con densidad uniforme ρ, de moverse juntos como un todo compacto sin cambiar la 'forma' de la extensión que ocupan. [...] las diferentes densidades de grano fino ρ, dentro de una celda del espacio de las fases correspondiente a un rango E a E+δE, finalmente se mezclan como para darnos una densidad de grano grueso P aproximadamente uniforme dentro de ese rango" (Tolman, 1938, pp.177-178). Es interesante notar cómo Gibbs y Tolman, si bien carecen de los elementos formales para relacionar ergodicidad y mezcla, consideran la propiedad de mezcla como un elemento indispensable para la evolución irreversible del sistema hacia el equilibrio.

Frente a la explicación gibbsiana de la irreversibilidad, otros autores prefieren adoptar la línea boltzmanniana, según la cual un sistema evoluciona desde sus macroestados menos probables hacia sus macroestados más probables. Por ejemplo, Lebowitz (1993) desacredita la entropía de Gibbs en la medida en que permanece constante durante la evolución del sistema; según el autor, sólo la entropía de Boltzmann captura la distinción entre las escalas microscópica y macroscópica. Desde una perspectiva similar, Bricmont (1995) sostiene que la ergodicidad no es condición ni necesaria ni suficiente para la irreversibilidad. No es condición suficiente puesto que hay sistemas ergódicos de pocos grados de libertad para los cuales no tiene sentido hablar de comportamiento irreversible. Pero la afirmación más fuerte es que la ergodicidad tampoco es condición necesaria, ya que existen evoluciones que, sin ser ergódicas, manifiestan un carácter inequívocamente irreversible. Lebowitz se refiere a los procesos irreversibles en un sentido análogo: "las características esenciales de la evolución no dependen de propiedades dinámicas específicas, como la positividad de los exponentes de Lyapounov, la ergodicidad o la mezcla" (Lebowitz, 1993, p.32). En una línea similar de crítica al enfoque de Gibbs, Earman y Rédei señalan que muchos de los sistemas típicos estudiados en Mecánica Estadística no son siquiera ergódicos (Earman y Rédei, 1996, p.70).

Un argumento particularmente fuerte en contra de la explicación gibbsiana de la irreversibilidad es el que esgrime Bricmont (1995) al presentar el modelo Kac como ejemplo claro y sencillo donde se manifiesta un comportamiento irreversible que no requiere la condición de ergodicidad que impone el enfoque de Gibbs.

6. El modelo Kac

Para construir el modelo Kac (Kac, 1959). se señalan sobre un círculo n puntos equidistantes de modo de definir n segmentos iguales: m segmentos se marcan de algún modo y forman el conjunto S, el conjunto complementario de los n-m segmentos no marcados será S'. En cada uno de los puntos se ubica una bola que podrá ser blanca (w) o negra (b). Durante cada Δt elemental, cada bola se mueve en sentido antihorario hasta el punto contiguo, cumpliendo las siguientes condiciones:

- Si la bola cruza un segmento perteneciente a S, cambia de color
- Si la bola cruza un segmento perteneciente a S', no cambia de color

Bricmont subraya la analogía con el caso mecánico. El microestado de cada una de las bolas queda definido por su posición y por su color: el color cumple el papel de la velocidad –discreta– puesto que cambia cuando la bola colisiona con un "*scatterer*" fijo, esto es, un segmento perteneciente a S. La característica que simplifica el modelo es que la velocidad-color no afecta el movimiento. La microdinámica del sistema viene dada por el movimiento antihorario más los cambios de color. La microevolución:

- Es *determinista* y *reversible* puesto que, si luego de k intervalos se invierte la orientación del movimiento, el sistema vuelve a su microestado inicial luego de k pasos.
- Es *periódica* puesto que, luego de $2n$ pasos, cada segmento ha sido atravesado dos veces por cada bola y, por tanto, cada bola ha vuelto a su posición y su color original.

Dada esta descripción microscópica del sistema, se definen ahora como macrovariables el número de bolas blancas $N_w(t)$ y el número de bolas negras $N_b(t)$ en cada instante. El problema es determinar, dada una distribución inicial arbitraria de colores, qué sucede con $N_w(t)$ y con $N_b(t)$ luego de un gran número de movimientos. Kac calcula, para cada configuración S/S' de segmentos, la curva $(N_w(t)-N_b(t))/n$ como función del tiempo; el resultado es que, cuando n es suficientemente elevado, para cada t, la enorme mayoría de tales curvas se aproxima a $(1-2m/n)^t$. Si además se cumple que $2m<n$, entonces para tiempos suficientemente grandes $(1-2m/n)^t$ tiende a cero y, por tanto, $N_w(t)-N_b(t)$ tiende a cero, esto es, el sistema tiende a la equipartición entre bolas blancas y bolas negras. Esta evolución irreversible de las macrovariables se obtiene a pesar de que el sistema es periódico de período $2n$: si n es suficientemente elevado, el macroestado de equilibrio –equipartición– se obtiene para tiempos inferiores en varios órdenes de magnitud al tiempo de recurrencia $2n$ (Kac sugiere pensar en n del orden de 10^{23} y t del orden de 10^6).

Pero la cuestión central aquí es que el modelo Kac, si bien manifiesta la evolución irreversible de las macrovariables $N_w(t)$ y $N_b(t)$, no es ergódico. En efecto, respecto de la macrovariables $N_w(t)$ y $N_b(t)$ no es relevante la posición de cada una de las bolas sino sólo su color; por lo tanto, la ergodicidad y la mezcla relevantes deben definirse sobre el subespacio-color Γ_C que contiene sólo las 2^n combinaciones posibles de los 2 colores en las n bolas. Pero, dado que el sistema es periódico de período $2n$, ninguna trayectoria puede pasar por más de $2n$ microestados-color: cada trayectoria sólo pasa por una pequeña región del subespacio-color Γ_C. Sobre la base de este ejemplo, Bricmont concluye que "esto ilustra claramente el hecho de que la ergodicidad no es necesaria para la irreversibilidad" (Bricmont, 1995, p. 200).

7. Las nociones de equilibrio y de irreversibilidad

El problema de la ergodicidad queda así claramente planteado: mientras para quienes adoptan la línea de Gibbs es indispensable que el sistema sea mezclador –y, por tanto, ergódico– para manifestar un comportamiento irreversible, los defensores del enfoque de Boltzmann sostienen que la ergodicidad no es condición necesaria para la irreversibilidad e incluso esgrimen ejemplos de sistemas dinámicos no-ergódicos que describen evoluciones irreversibles hacia el equilibrio

Esta situación es particularmente paradójica en la medida en que los enfoques de Boltzmann y de Gibbs son los dos marcos teóricos tradicionalmente aceptados en Mecánica Estadística. No obstante, el problema comienza a disiparse cuando se analizan los conceptos de equilibrio e irreversibilidad en ambos enfoques.

Gibbs identifica el equilibrio con el *equilibrio estadístico*, representado por una distribución constante en toda la hipersuperficie de energía constante Γ_E. Desde la perspectiva de Boltzmann, por el contrario, el equilibrio se asimila al *equilibrio macroscópico*, representado por la región Γ_{eq} correspondiente al macroestado con mayor número de microestados compatibles. Pero, sin duda, Γ_{eq} no es Γ_E, sino que $\Gamma_{eq} \subset \Gamma_E$. En otras palabras, el equilibrio en sentido de Boltzmann queda representado por una región del espacio de las fases incluida en la región que representa el equilibrio gibbsiano.

Esta diferencia entre los dos conceptos de equilibrio conduce directamente a dos nociones diferentes de irreversibilidad. En el enfoque de Gibbs, la evolución de un sistema es irreversible si tiende al *equilibrio estadístico*. En este caso, el equilibrio es un estado atractor, es decir, un estado al que se tiende para *tiempo tendiendo a infinito* y del cual el sistema ya no puede escapar. En el enfoque boltzmanniano, por el contrario, una evolución es irreversible si alcanza el *equilibrio macroscópico*, y esto puede suceder en un *tiempo finito*. Además, el equilibrio no es aquí un estado atractor puesto que el sistema puede abandonar el estado de equilibrio en un tiempo suficientemente largo, del orden del tiempo de recurrencia.

Cuando se advierte la diferencia entre los conceptos de equilibrio e irreversibilidad que manejan ambos enfoques, el problema de la irreversibilidad tal como fue inicialmente planteado se disuelve: las situaciones del tipo del modelo Kac esgrimidas por los defensores del enfoque boltzmanniano dejan de ser un desafío para el enfoque de Gibbs. En efecto, la evolución de las macrovariables del sistema Kac es irreversible en el sentido de Boltzmann, pero es reversible en el sentido de Gibbs puesto que el estado de equipartición entre bolas blancas y bolas negras, que se alcanza en un tiempo finito, no es un estado atractor y, por lo tanto, el sistema volverá a su estado inicial después de un número suficiente de movimientos. Ya no se trata, entonces, de desacreditar la explicación gibbsiana de la irreversibilidad, sino de constatar que el enfoque de Gibbs da cuenta de un tipo de irreversibilidad diferente de la irreversibilidad explicada por la perspectiva de Boltzmann. Por lo tanto, no existe contradicción alguna en sostener que la ergodicidad es condición necesaria para la irreversibilidad gibbsiana pero no para la irreversibilidad boltzmanniana

Si bien de este modo se disuelve la aparente contradicción planteada por el problema de la ergodicidad, la conclusión anterior conduce a un nuevo problema: ¿cuál de los dos conceptos de equilibrio y, por tanto, de irreversibilidad es el físicamente relevante? Podría argumentarse que, dado el altísimo número de grados de libertad de los sistemas estudiados en Mecánica Estadística, el tiempo de recurrencia es tan grande que resulta inobservable en la práctica y, en consecuencia, el enfoque boltzmanniano es el que da cuenta de la irreversibilidad efectivamente observable. Sin embargo, esta posición deja sin explicar el éxito predictivo del enfoque de Gibbs el cual, dada su generalidad, se ha constituido como la herramienta teórica *standard* en Mecánica Estadística. La solución de este problema se basa, nuevamente, en la condición de un altísimo número de grados de libertad, condición bajo la cual el enfoque de Boltzmann brinda resultados satisfactorios. En efecto, puede demostrarse que las nociones gibbsiana y boltzmanniana de equilibrio y, por tanto, también de irreversibilidad tienden a aproximarse indefinidamente con el aumento de grados de libertad del sistema. Pero el tratamiento pormenorizado de esta cuestión excede el alcance del presente trabajo.

Bibliografía

Bricmont, J. (1995), "Science of Chaos or Chaos in Science?", *Physicalia Magazine* , Vol. 17, pp.159-208.

Earman, J. y Rédei, M. (1996), "Why Ergodic Theory Does Not Explain the Success of Equilibrium Statistical Mechanics", *British Journal for the Philosophy of Science*, Vol.47, pp.63-78.

Gibbs, J. W. (1902), *Elementary Principles in Statistical Mechanics*, Yale University Press, New Haven.

Kac, M. (1959), *Probability and Related Topics in the Physical Sciences*, Interscience Publishers, New York.

Krylov, N. S. (1979), *Works on the Foundations of Statistical Physics*, Princeton University Press, Princeton.

Lebowitz, J. L. (1993), "Boltzmann's Entropy and Time's Arrow", *Physics Today*, Vol.46, pp.32-38.

Lebowitz, J. L. y Penrose, O. (1973), "Modern Ergodic Theory", *Physics Today*, Vol.26, pp.23-29.

Tolman, R. C. (1938), *The Principles of Statistical Mechanics*, Clarendon Press, Oxford.