

Simulación 1. Partículas en una caja

Sergio López, Guillermo Quiñónez, Camilo Mayen G, Andrés Ixcoy

Mecánica estadística

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

August 6, 2020

Partículas en una caja

El objetivo del programa es crear un video en donde se muestren las partículas chocar elásticamente dentro de una caja. Cuando las partículas lleguen al equilibrio, es decir, la mitad de las partículas se encuentren a la mitad de la caja, entonces se extiende la caja el doble por un lado, y se espera a ver cuándo las partículas vuelven a alcanzar el equilibrio.

El programa empieza definiendo dos funciones. La primera tiene como parámetro una lista y regresa la lista dada vuelta. La segunda función tienen como objetivo devolver una lista con las posiciones de la partícula ya sea en el eje x o en el eje y . Tiene como parámetros la velocidad de la partícula ya sea en x o en y , el límite izquierdo o inferior y el límite derecho o superior. Dado que la velocidad es constante, ya sea para x o para y , entonces se emplea la fórmula de movimiento con velocidad constante $x = vt + x_0$. t varía de 0.05 entre cada iteración. x_0 es el límite en la izquierda o inferior de la caja si la velocidad es positiva, o el límite en la derecha o superior de la caja si la velocidad es negativa. Es importante mencionar que los límites se refieren a la caja ya extendida, no solo a la primera parte del programa. Luego de esto se procede a declarar las listas a utilizar y a llenarlas.

La razón por la que se decidió hacer así fue porque de esta manera nos evitamos estar analizando vectorialmente cada partícula al momento de llegar a una pared. Al tener de una vez todas las posiciones en las que una partícula va a estar tanto en el eje x como en el eje y , al momento de llegar a una pared, supongamos que la pared del lado derecho, entonces se le da la vuelta a la lista que tiene las posiciones en el eje x , y se vuelve a recorrer la lista de inicio a final. Claro está, aprovechando el hecho de que al ser choques elásticos el ángulo de incidencia es igual al ángulo de reflexión, por lo que se toma la misma pendiente pero con signo contrario. Esto es lo que se lleva a cabo en las líneas 104-114 para la primera parte del programa y entre las líneas 141-151 para cuando la caja se extiende.

¿Cómo saber cuándo dar vuelta a la lista de posiciones para cada partícula ya sea en el eje x o en el eje y ? Para eso se tienen una lista que contiene un número para cada partícula. Si

el número es par, la partícula va a la derecha o para arriba, y si el número es impar entonces la partícula va hacia la izquierda o hacia abajo. Este número aumenta en uno cada vez que el contador de posición de cada partícula para cada eje llega a la penúltima posición. Al llegar a la penúltima posición, el contador se resetea para empezar de cero nuevamente, y aumenta el número anteriormente explicado en uno.

Lo que se observa en el video son tres gráficas, dispuestas en manera de "subplots". La primera gráfica, la que está hasta arriba, muestra la simulación de las pelotas. Aquí se grafican las listas con el nombre `xtemp` en el eje x, y `ytemp` en el eje y. Estas listas tienen la posición en x & y para cada partícula. En la segunda gráfica, la de en medio, se observan las fluctuaciones de la cantidad de partículas que hay de un lado de la caja en el eje y, y en el eje x las iteraciones que realiza. En el eje x va la lista "t", que aumenta en uno cada vez que pasa por un ciclo completo. En el eje y va la lista "Num", en la que se agrega el valor "mitad" cada vez que realiza un ciclo. En la última gráfica, la de abajo, se realiza un histograma que nos proporciona una manera visual más fácil para determinar el equilibrio. En la segunda gráfica se puede ver las fluctuaciones alrededor de la mitad del total de partículas, pero, ¿cómo saber si llegó al equilibrio? Para eso se tiene un contador llamado "cont_primer". Este contador aumenta en uno cada vez que "mitad", el contador que indica cuántas partículas hay a la mitad de la caja, se encuentra entre 45 y 55. Si "cont_primer" llega a ser igual a 80 ininterrumpidamente, entonces se dice que llegó al equilibrio y pasa a la parte de la caja completa. Eso es lo que mira en el histograma. El eje y de la segunda gráfica. Cuando se abre la compuerta para que las partículas pasen a toda la caja, ahora la cantidad de "mitad" se agrega a "Num2". Esto es para que en el histograma para el caso de la caja completa no se encuentren valores que tuvieron que ver con el caso pasado. Esta segunda parte se dice que llega al equilibrio si "cont_segundo" llega a ser igual a 60. Véanse las figuras 1 y 2 para más detalle.

Cada vez que se realizan estas 3 sub-gráficas, se procede a tomar una captura de pantalla de la gráfica con el módulo "celluloid". Este se puede instalar usando "pip install celluloid" en la shell. Se define en la línea 93 el objeto tipo "Camera" que es el responsable de tomar la captura de pantalla y guardar cada captura de pantalla que toma. Al salir del ciclo while, la línea 198 indica que el formato a crear será un mp4, por el "ffmpeg". Aquí se emplea la biblioteca FuncAnimation, la cual se puede instalar haciendo "pip install ffmpeg" o "pip install imagemagick", dependiendo si lo que se quiere sacar es un mp4 o un giff. Adicional a esto, hay que descargar el software necesario para realizar el mp4 o el giff. En este caso se usó ffmpeg, el cual se descargó de <https://www.ffmpeg.org>. La siguiente línea contiene las características del video, como los gráficos por segundo ("frames per second"), el autor y los bits por segundo a procesar ("bitrate"). La línea 200 crea el mp4 de las capturas de pantalla que tomó. La última línea guarda el archivo.

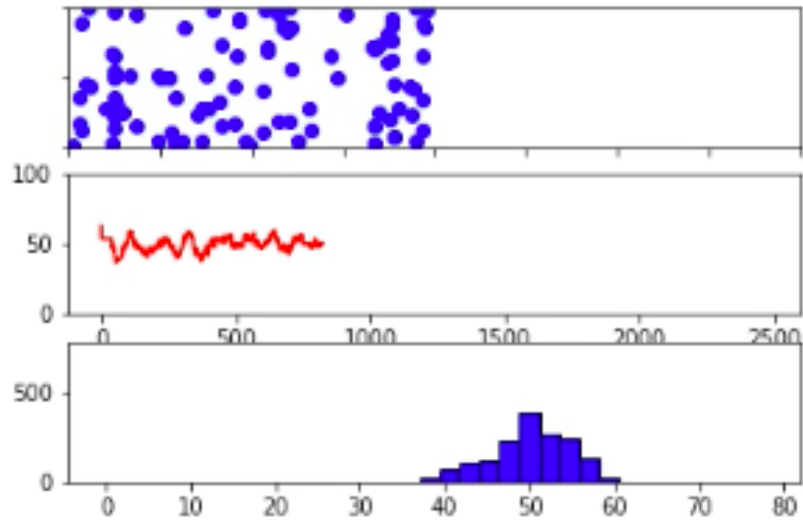


Figure 1: Muestra del gráfico generado cuando las partículas se encuentran a la mitad de la caja. La segunda gráfica empieza a estar cerca de 50 en las últimas iteraciones. Nótese que el histograma muestra el promedio en 50.

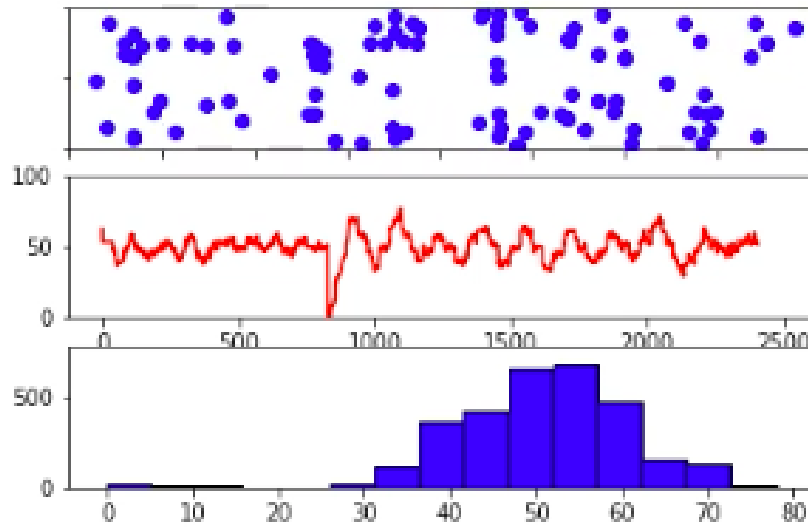


Figure 2: Muestra del gráfico generado cuando las partículas están en toda la caja. Se vuelve a apreciar en la segunda gráfica la cercanía respecto a la mitad de partículas y en la tercera la normalidad respecto a 50.