

Interacción de partículas en 2D*

Luis Hernando Beltran Garcia[†]
Universidad de Pamplona
Física computacional I
(Dated: June 24, 2025)

Using this Python code, we analyzed the behavior of particles interacting through the Coulomb force and how information such as temperature and energy can be obtained from this force. Thanks to this interaction, we were able to obtain graphs that were essential for analyzing this phenomenon.

I. MARCO TEÓRICO

Primordialmente, para poder entender cómo se comporta el fenómeno y las gráficas, debemos entender teóricamente cómo se comporta el fenómeno, por lo tanto, iniciaremos con una explicación breve de lo que es la ley de Coulomb.

A. Ley de Coulomb

La ley de Coulomb describe la interacción electrostática entre dos cargas puntuales en reposo. Esta ley establece que la magnitud de la fuerza electrostática \vec{F} entre dos partículas cargadas q_i y q_j , separadas por una distancia r_{ij} , es proporcional al producto de las cargas e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que las separa, es decir:

$$\vec{F}_{ij} = k_e \frac{q_i q_j}{r_{ij}^2} \hat{r}_{ij} \quad (1)$$

Dónde:

- $k_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ es la constante de Coulomb.
- $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ es el vector que apunta de la partícula i a la partícula j
- \hat{r}_{ij} es el vector unitario en la dirección de \vec{r}_{ij} .
- ϵ_0 es la permitividad del vacío.

En el caso de sistemas con múltiples partículas cargadas, como el que se modela en esta práctica, la fuerza total sobre cada partícula se obtiene como la suma vectorial de todas las fuerzas de Coulomb ejercidas por las demás partículas del sistema:

$$\vec{F}_i = \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} \quad (2)$$

B. Energía total

Para esta parte, debemos definir también la energía cinética(E_k) y la energía potencial(E_p), recordemos que la energía cinética de un sistema es la energía asociada al movimiento de sus partículas, definida como la suma de las energías cinéticas individuales de cada partícula, por otro lado, la energía potencial representa la energía almacenada en el sistema debido a las interacciones de las partículas. Su valor depende de la configuración espacial de las partículas y de la fuerza que actúan entre ellas. Por último, la energía total(E_T) del sistema es la suma de la energía cinética y potencial. En un sistema aislado y conservativo, la energía total se mantiene constante.

C. Relación de la energía cinética con la temperatura

La temperatura (T) de un sistema termodinámico es una medida macroscópica de la energía cinética promedio de sus partículas constituyentes. Para un sistema clásico, la temperatura es directamente proporcional a la energía cinética promedio. Más específicamente, según el teorema de equipartición, para un sistema con N_f grados de libertad, la energía cinética promedio por grado de libertad es $\frac{1}{2}k_B T$, donde k_B es la constante de Boltzmann. Justificar el uso de esta relación es crucial para conectar las propiedades microscópicas de la simulación con las propiedades termodinámicas macroscópicas.

D. Algoritmo de integración

Los algoritmos de integración son métodos numéricos utilizados para resolver las ecuaciones de movimiento de las partículas (usualmente las leyes de Newton). El algoritmo de Euler explícito es uno de los métodos más sencillos y directos, aunque con limitaciones en precisión y estabilidad para pasos de tiempo grandes.

II. METODOLOGÍA

Vamos a dividir en cómo se describe la simulación

* Interacción de partículas

[†] Facultad de física, Universidad de Pamplona.

A. Número de partículas, distribución de posiciones y velocidades

Se simulan un total de $N = 100$ partículas. Las posiciones iniciales de estas partículas se distribuyen de manera uniforme y aleatoria dentro de una caja cuadrada de tamaño $L \times L$ (dónde $L = 10000$). De manera similar, las velocidades iniciales de cada partícula se asignan de forma aleatoria, con componentes x e y distribuidas uniformemente entre -500 y 500 unidades de velocidad.

B. Cálculo de fuerzas usando la condición de imagen mínima

La fuerza entre cada par de partículas se calcula utilizando una interacción de tipo Coulomb o gravitatoria, donde la magnitud es inversamente proporcional al cuadrado de la distancia ($\frac{1}{r^2}$). Para manejar los efectos de contorno y simular un sistema más grande, se aplica la condición de imagen mínima. Esto significa que, al calcular la distancia entre dos partículas, se considera la separación más corta posible, teniendo en cuenta las imágenes periódicas de la caja de simulación. Si una partícula sale de la caja principal, su imagen "más cercana" puede estar en el lado opuesto del contorno.

C. Método de integración temporal

La evolución temporal del sistema se realiza mediante el algoritmo de integración de Euler explícito. En cada paso de tiempo Δt (definido como 1×10^{-3}), se utiliza la aceleración actual de cada partícula para actualizar su velocidad, y luego la nueva velocidad para actualizar su posición. Después de cada actualización de posición, se aplican las condiciones de contorno periódicas para asegurar que las partículas permanezcan dentro del volumen de la simulación.

D. Parámetros físicos y escalares usados

Los principales parámetros y escalares utilizados son:

- K : Una constante de acoplamiento para el cálculo de fuerza, fijada en 9×10^9
- $DELTA_T$: El paso de tiempo para la integración, establecido en 1×10^{-3}
- L : La longitud del lado de la caja de simulación, con un valor de 10000 .
- N : El número total de partículas, que es 100 .
- $mass$: La masa de cada partícula, por defecto 1 .
- $charge$: La carga de cada partícula, por defecto 1 .

E. Forma en que se registraron trayectorias, energías y temperaturas

- **Trayectorias**: La posición de cada partícula se registra en cada paso de tiempo y se almacena en una lista llamada *trajectory* dentro de cada objeto *Particle*. Esto permite visualizar el camino que sigue cada partícula a lo largo de la simulación.
- **Energías**: En cada paso de tiempo, se calculan y registran las energías cinética y potencial totales del sistema.
- **Temperaturas**: La temperatura del sistema se calcula de forma adimensional en cada paso de tiempo, utilizando la relación directa con la energía cinética total del sistema. Específicamente, se obtiene como el doble de la energía cinética total dividido por el número de partículas

III. RESULTADOS

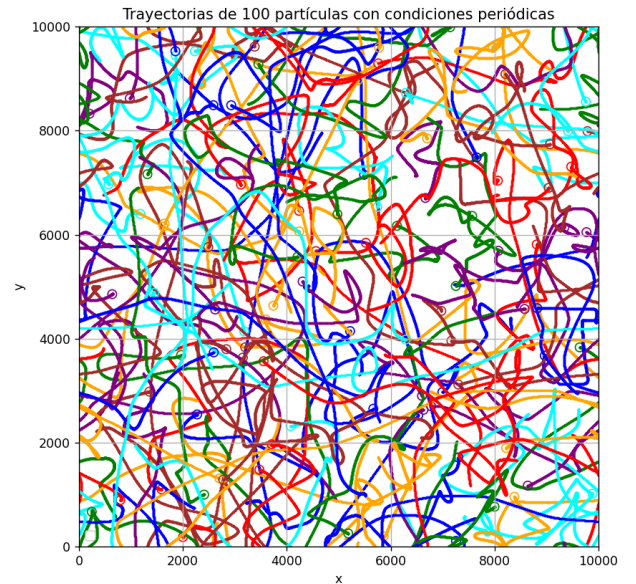


FIG. 1. Trayectorias de 100 partículas con condiciones periódicas.

Tenemos un digrama de dispersión de trayectorias, dónde cada línea de color representa el camino seguido por una partícula individual a lo largo del tiempo.

¿Son caóticas? A primera vista, las trayectorias parecen caóticas o al menos muy desordenadas. Hay un cruce constante de líneas, sin un patrón claro o predecible en las trayectorias individuales o en el conjunto. Las líneas se superponen y entrelazan de manera compleja. En un sistema verdaderamente caótico, pequeñas diferencias en las condiciones iniciales conducirían a trayectorias dramáticamente diferentes con el tiempo. Aunque esta

imagen no nos permite ver la evolución temporal o las condiciones iniciales, la densidad y la falta de un patrón visible sugieren un comportamiento altamente irregular. **¿Hay estructuras?** A pesar del aparente caos, se pueden observar algunas "estructuras" de un tipo muy particular:

- Sin estructuras ordenadas a gran escala: No hay evidencia de estructuras grandes y coherentes como agrupaciones estables, vórtices a gran escala que persistan, o movimientos colectivos claramente definidos en una dirección.
- Patrones locales de "espiral/bucle": Muchas de las trayectorias individuales muestran pequeños bucles o espirales. Esto podría indicar que las partículas a menudo cambian de dirección bruscamente o se mueven en círculos cerrados antes de continuar en otra dirección. Estas no son estructuras globales, sino más bien patrones de movimiento individual.
- A pesar del movimiento individual complejo, la distribución general de las trayectorias parece bastante uniforme en toda la "caja". No hay grandes regiones vacías ni grandes concentraciones de trayectorias en un solo lugar. Esto sugiere que las partículas exploran todo el espacio disponible.

¿Cómo se mueven en la caja?

- Movimiento errático y aparentemente aleatorio: Las partículas se mueven en patrones irregulares y no lineales. Constantemente cambian de dirección, haciendo giros bruscos y, como se mencionó, formando bucles y espirales.
- Interacciones (implícitas): Aunque no se muestran las fuerzas, el movimiento complejo y los cruces sugieren que las partículas están interactuando entre sí o con algún campo de fuerzas subyacente. Si no hubiera interacciones, las trayectorias serían más simples (líneas rectas o trayectorias balísticas a menos que haya un campo de fuerza externo).

En resumen, el gráfico muestra un sistema dinámico complejo con trayectorias individuales muy irregulares y entrelazadas, lo que sugiere un comportamiento caótico. Aunque no hay estructuras organizadas a gran escala, las partículas exploran eficientemente todo el espacio de la caja de manera difusa, y se pueden observar patrones locales de bucles en sus movimientos.

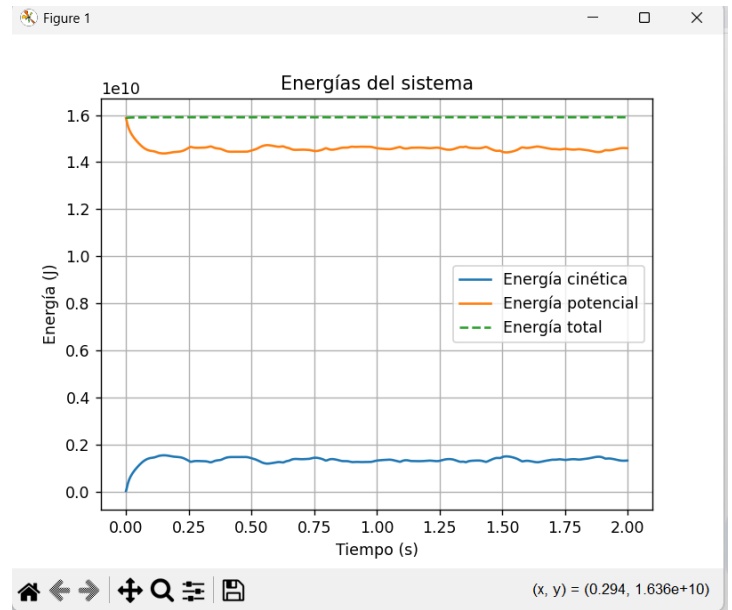


FIG. 2. Energías del sistema.

El gráfico muestra la evolución de las energías cinética, potencial y total de un sistema a lo largo del tiempo

¿Se conserva la energía total? Analizando la línea verde discontinua que representa la energía total, se puede afirmar que sí, la energía total se conserva en este sistema. La línea verde se mantiene prácticamente horizontal a lo largo de todo el tiempo simulado (desde 0 hasta 2.0 segundos). Las pequeñas fluctuaciones que se puedan observar en la línea verde son mínimas en comparación con la escala total de la energía y probablemente se deben a errores numéricos inherentes a la simulación, no a una pérdida o ganancia real de energía en el sistema físico.

¿Cómo oscilan las energías? Las energías cinética y potencial sí muestran oscilaciones, y lo hacen de una manera particular, empezamos con la energía potencial(naranja):

- Comienza en un valor muy alto, cercano a la energía total (1.6×10^{10}), lo que implica que la energía cinética inicial es muy baja o nula.
- Las oscilaciones son de amplitud relativamente pequeña en comparación con su valor promedio y con la energía total. Son oscilaciones irregulares, no sinusoidales perfectas, lo que es común en sistemas con múltiples partículas o interacciones complejas.

Mientras que la energía cinética(azul):

- Comienza en un valor muy bajo (cercano a cero), lo que es consistente con la energía potencial inicial alta.
- Las oscilaciones de la energía cinética son opuestas en fase a las oscilaciones de la energía potencial.

Esto significa que cuando la energía potencial disminuye, la energía cinética aumenta, y viceversa. Esta relación es fundamental para la conservación de la energía total en sistemas donde la energía se transforma entre estas dos formas.

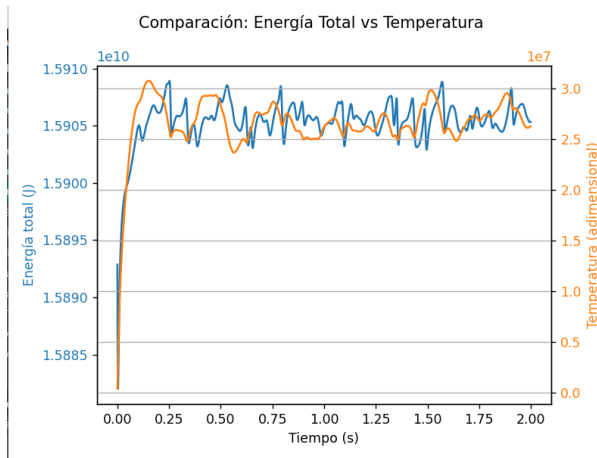


FIG. 3. Comparación de la energía total vs la temperatura.

El gráfico compara la energía total (eje izquierdo, azul) y la temperatura (eje derecho, naranja) en función del tiempo.

¿Cómo varía?

- **Energía total (azul):** Las fluctuaciones son relativamente pequeñas una vez que se estabiliza, lo que indica que, en general, la energía total del sistema se mantiene casi constante después del calentamiento inicial. Es importante notar que estas oscilaciones, aunque pequeñas, son más evidentes que en el gráfico anterior de energía total, lo que podría indicar una escala diferente o una sensibilidad mayor en esta representación.
- **Temperatura (naranja):** Al igual que la energía total, la temperatura comienza en un valor bajo y experimenta un rápido aumento inicial en el mismo período (aproximadamente los primeros 0.25 segundos). Las oscilaciones de la temperatura son notables y parecen seguir un patrón similar a las de la energía total una vez que se alcanza la estabilidad.

¿Correlaciona con la energía cinética?

- Aquí, tanto la energía total (que, en un sistema donde la energía potencial es relativamente constante o tiene una componente dominante constante, refleja en gran medida los cambios en la energía cinética) como la temperatura muestran un comportamiento muy similar: un aumento inicial seguido de fluctuaciones alrededor de un valor medio.
- Al comparar visualmente las oscilaciones de la línea azul (Energía Total) y la línea naranja (Temperatura) en este gráfico, se observa que se mueven

en fase, es decir, cuando una sube, la otra también sube, y cuando una baja, la otra baja.

- Dado que la energía total en este gráfico también muestra oscilaciones similares a la temperatura, y sabiendo que la temperatura es directamente proporcional a la energía cinética promedio, podemos inferir que las fluctuaciones observadas en la "Energía Total" en este gráfico están fuertemente impulsadas por las fluctuaciones de la energía cinética. Si la energía potencial tuviera fluctuaciones significativas y desfasadas con la cinética, la energía total se mantendría más constante.

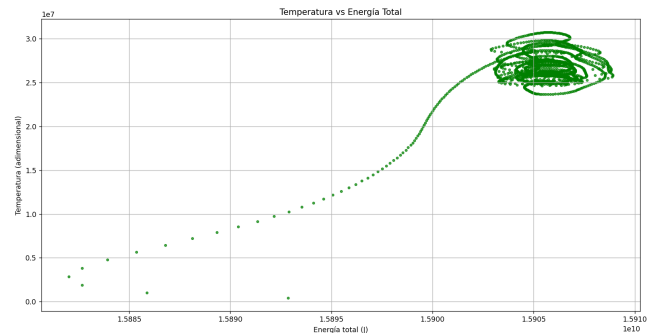


FIG. 4. Trayectoria del estado del sistema de temperatura vs energía total a lo largo del tiempo.

El gráfico muestra la temperatura (eje Y, adimensional) en función de la energía total (eje X, en Joules). Esto es una representación de la trayectoria del estado del sistema en el "espacio de fase" de Temperatura vs. Energía Total a lo largo del tiempo. Primordialmente, para la fase inicial tenemos:

- Al comienzo (valores más bajos de Energía Total y Temperatura), el sistema parte de un estado donde ambos valores son bajos.
- A medida que la Energía Total aumenta (lo que vimos en gráficos anteriores como un calentamiento inicial), la Temperatura también aumenta rápidamente.
- Esta parte de la curva forma una especie de "cola" ascendente, casi lineal, o al menos monótonicamente creciente, donde la temperatura es directamente proporcional a la energía total. Esto sugiere que durante esta fase inicial, la energía inyectada en el sistema (o reorganizada) se traduce directamente en un aumento de la temperatura (energía cinética promedio).

Para la fase de equilibrio/fluctuación (el "nudo" o "espiral" en la parte superior derecha) tenemos:

- Una vez que la Energía Total alcanza aproximadamente 1.5904×10^{10} J, el comportamiento cambia drásticamente.

- La trayectoria del sistema entra en una región donde la Energía Total ya no aumenta significativamente, sino que fluctúa en un rango muy estrecho (entre aproximadamente $1.5904 \times 10^{10} J$ a $1.5907 \times 10^{10} J$)
- Dentro de este rango estrecho de Energía Total, la Temperatura sigue fluctuando considerablemente, formando una especie de "nudo", "espiral" o "órbita" densa. Esto indica que el sistema ha alcanzado un estado de equilibrio dinámico.
- En este estado de equilibrio, la energía total promedio es casi constante, pero tanto la energía total como la temperatura presentan oscilaciones (como ya habíamos visto en el gráfico anterior de "Comparación: Energía Total vs Temperatura"). Este "nudo" visualiza esas fluctuaciones conjuntas. La forma de "espiral" o la superposición de puntos sugiere que el sistema se mueve continuamente dentro de un pequeño volumen en este espacio de fase una vez que alcanza el equilibrio. 10J).

El gráfico ilustra claramente dos fases en la evolución del sistema:

- Una fase transitoria inicial donde el sistema "se calienta" y su energía total y temperatura aumentan en conjunto hasta alcanzar un nivel estable.
- Una fase de equilibrio donde la energía total se mantiene esencialmente constante (con pequeñas fluctuaciones), y la temperatura también fluctúa alrededor de un valor promedio. La formación del "nudo" en la parte superior derecha muestra que en este estado de equilibrio, la temperatura y la energía total oscilan en un rango limitado y acoplado, reflejando el constante intercambio y fluctuación de energía dentro del sistema.

IV. CONCLUSIONES

Considerando todas las gráficas obtenidas, podemos obtener diferentes conclusiones generales sobre el sistema simulado:

- Las trayectorias de las 100 partículas(1) muestran un movimiento extremadamente desordenado y entrecruzado. Aunque no se observa un patrón global claro o estructuras macroscópicas persistentes, las partículas exploran eficientemente todo el espacio disponible.
- La energía total del sistema(2) se conserva notablemente bien después de una fase inicial. La línea verde de Energía Total es casi perfectamente horizontal, indicando un sistema energéticamente cerrado (o con disipación/aporte energético despreciable una vez alcanzado el equilibrio).
- Sin embargo, las energías cinética y potencial (2) sí oscilan significativamente y en contrafase. Esto demuestra que la energía se transforma constantemente entre sus formas cinética y potencial dentro del sistema, manteniendo la suma total constante.
- La Temperatura del sistema (Imagen 3) exhibe un comportamiento que replica muy de cerca las fluctuaciones de la Energía Cinética (observada en 2 y confirmada por la correlación en 3). El rápido aumento inicial de la temperatura y su posterior estabilización, con fluctuaciones en fase con la "Energía Total" (que en esta gráfica representa en gran medida la cinética), refuerza el principio de que la temperatura es una medida de la energía cinética promedio de las partículas.
- Una vez en equilibrio, el sistema entra en una región de "fluctuación" dinámica donde la Energía Total se mantiene en un rango estrecho, mientras que la Temperatura oscila dentro de un rango más amplio. Esta fase de "nudo" o "espiral" en el gráfico de fase indica que el sistema ha llegado a un estado estacionario donde las propiedades termodinámicas fluctúan alrededor de un valor promedio, esto obtenido de 4

-
- [1] P. A. Tipler and G. Mosca, *Física para la Ciencia y la Tecnología, Volumen 2: Electricidad y Magnetismo*, 5th ed. (Freeman/Océano, México, 2005) sección 22-2: La ley de Coulomb.
- [2] H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko, *Classical Mechanics*, 3rd ed. (Pearson Education, 2014) capítulos 1–3 sobre formulaciones energéticas y leyes de Newton.
- [3] L. Verlet, Computer experiments on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules, *Physical Review* **159**, 98 (1967).
- [4] W. Greiner, *Classical Mechanics: Systems of Particles and Hamiltonian Dynamics* (Springer, 2004) capítulo 2: Energía cinética y potencial, conservación de la energía.
- [5] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 4th ed. (Cambridge University Press, New York, 2017) capítulo 2: Coulomb's Law.
- [6] L. B. García, Simulación de partículas con interacción tipo coulomb, <https://github.com/DeftWallout/Fuerzas> (2025), repositorio en GitHub. Accedido el 20 de junio de 2025.