

Random Walk: Simulación de energías en un sistema de partículas

Introducción

En esta práctica he utilizado el lenguaje Python para realizar una simulación de un sistema de partículas. Este sistema cambia con el tiempo siguiendo reglas simples y aleatorias. Parte de unas condiciones iniciales arbitrarias, puestas de antemano, y las partículas se mueven y colisionan entre sí. El objetivo es observar cómo varían diferentes magnitudes a lo largo del tiempo.

Mi meta es representar un gas ideal a partir de conceptos básicos, donde la temperatura se modela como la velocidad de partículas, etc., analizar cómo cambian con el tiempo e intentar deducir una ley física a partir de los resultados obtenidos.

Planificación del experimento

Las condiciones iniciales que he elegido para la simulación son las siguientes: El sistema es termodinámicamente cerrado, y cada partícula se genera de manera aleatoria, con diferentes momentos, energías, tamaños, masas y tipos.

Al colisionar las partículas, se transmite energía al azar, pero la energía interna del sistema se mantiene constante en todo momento, siendo esta la suma de las energías de cada partícula.

Para organizar los datos, he clasificado las partículas según sus características iniciales. Primero, en función de su tamaño y masa, que he asumido proporcional al radio. A cada categoría le asigné un color: azul para las partículas pequeñas, verde para las medianas y rojo para las grandes.

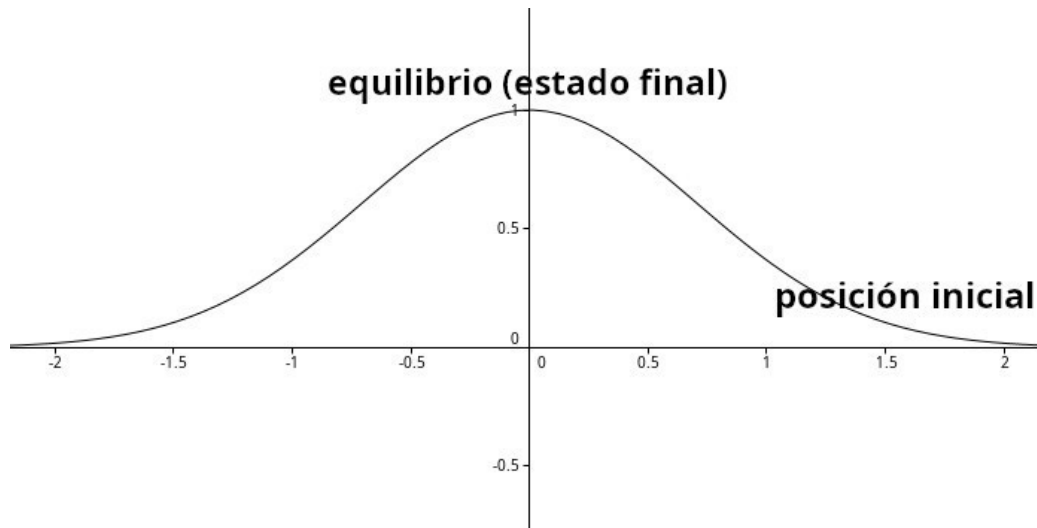
Además, he categorizado las partículas según la cantidad de energía inicial, que calculé a partir de la velocidad inicial asignada y la masa de cada partícula. Para separar estas categorías, he utilizado la librería Pandas, que permite organizar los datos en tablas similares a las de Excel, programa que ya conozco.

Para el procesamiento de los datos y el modelado de las interacciones entre las partículas, he utilizado la programación orientada a objetos en Python, el cual me ayudó mucho, ya que me permitía ir recopilando datos a la par que se ejecutaba mi programa. Finalmente, graficaría el comportamiento del sistema y analizaría los datos por separado.

Hipótesis

Mi hipótesis es que, a medida que las partículas colisionan y pasa el tiempo, la energía se distribuirá de manera más equitativa entre ellas. Dado que lo que importa es la cantidad de “agentes” involucrados, creo que, con el tiempo, cada partícula alcanzará una energía similar, tendiendo a un equilibrio. No estoy seguro de cuál será el valor exacto de este equilibrio, ya que podría depender de la distribución de masas, pero supongo que, a medida que aumentan los choques, el sistema se volverá más equilibrado y uniforme.

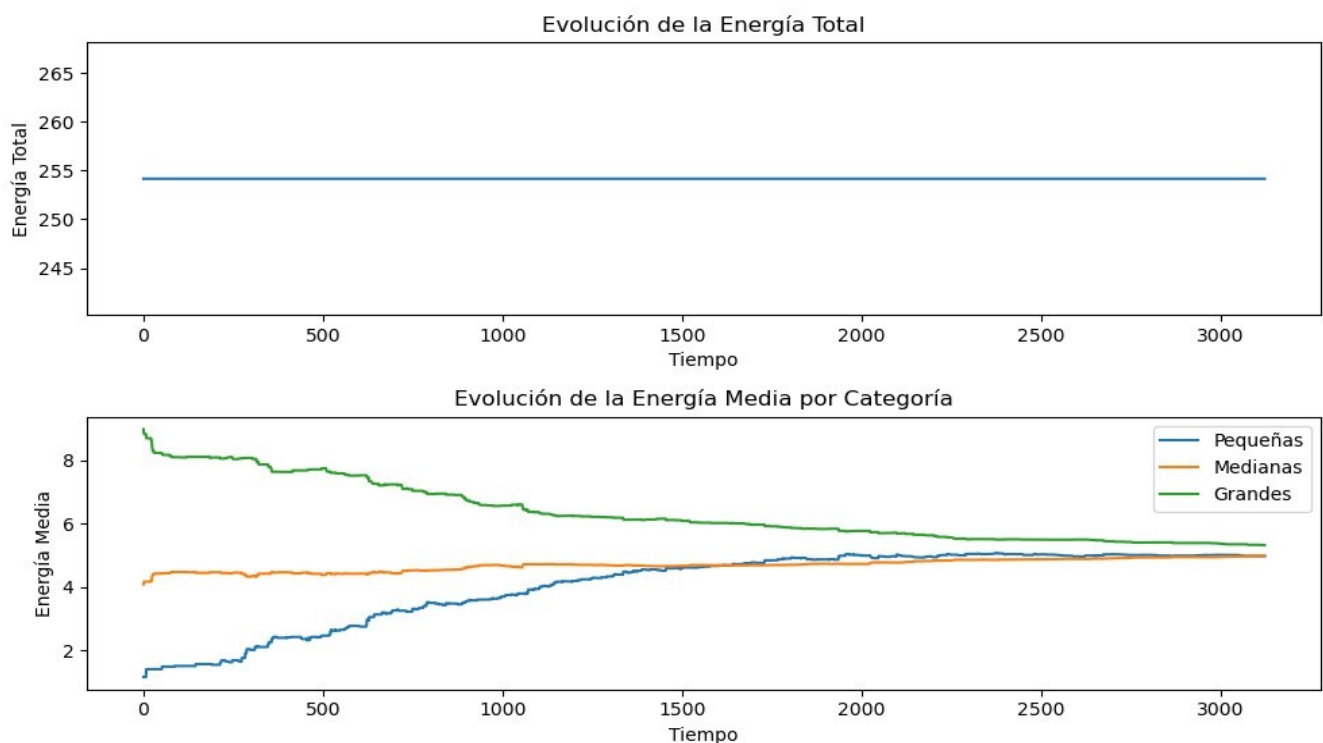
En cuanto a la evolución del sistema, creo que el estado inicial está alejado de una distribución gaussiana, ya que este tipo de distribución es poco probable al principio. A medida que el tiempo avanza, la distribución tenderá a acercarse a la forma de una campana, con el pico desplazándose hacia la izquierda hasta alcanzar el máximo. La gráfica debería mostrar algo similar a esto:



Para comprobarlo, analizaré los datos a lo largo del tiempo, y veré si se ajusta a una función similar a esta, donde $y = \exp(-x^2)$.

Análisis de datos y conclusiones:

Mientras hacía el experimento y programaba la simulación, me di cuenta de que en realidad era mucho más complicado y habían muchas variables que no podía controlar. Comencé probando colisiones elásticas, pero estas mantenían la velocidad constante. Al final opté por colisiones inelásticas, y apliqué una regla aleatoria, donde a mayor energía más probable es perderla por las colisiones, y a menor, más fácil es ganarla, tendiendo a un equilibrio. Los resultados son los que se muestran a continuación:



La energía total, lo que es la suma, se mantiene invariante, al ser un sistema cerrado.

Mientras que vemos que al principio, al asignar velocidades por igual a cada partícula, iban a tener mayor energía las que más masa tuvieran, y menos las que menos, debido a que E es proporcional a m .

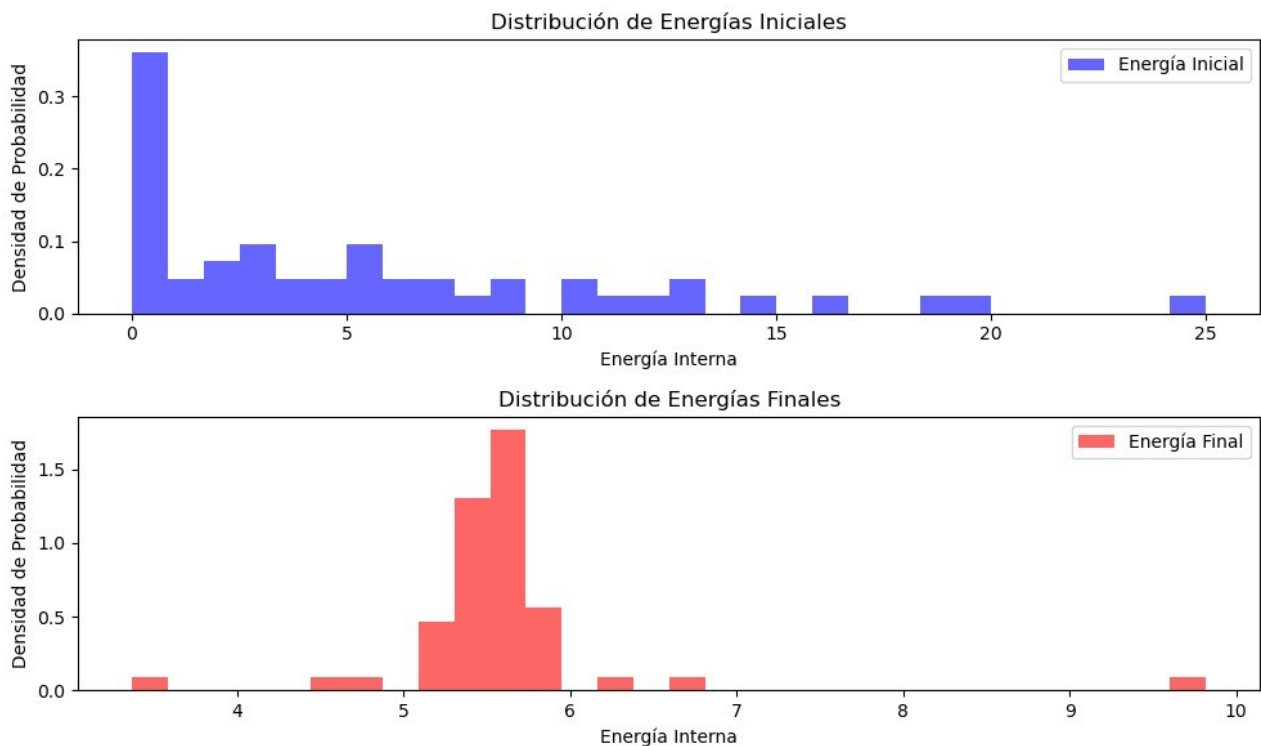
En la gráfica se ve como por una parte las de categoría medianas se mantienen igual, lo que era de esperar, no tienen las de ganar pero tampoco las de perder, y que las pequeñas ganaban mucho y las grandes perdían mucho. Como la suma es constante y obviando las medianas, vemos que forma una ecuación exponencial formada por:

La curva verde de $P_0 * \exp(-x)$

La curva azul $P - P_0 * \exp(-x)$

Por como he hecho el experimento, es lógico pensar que sea una exponencial, ya que al principio el estado está muy desequilibrado, y poco a poco, cuando más se acerca, menos partículas tienen este estado que favorece un intercambio de energía, entrando muchas a la categoría que las de las bolas medianas. Haciendo una ecuación diferencial se puede ver muy fácilmente.

Por lo que respecta a mi hipótesis de la gaussiana, añadí un código que cogía la distribución de energías al inicio, las cuales deberían ser generadas de manera aleatoria y equilibrada en todo el eje de frecuencias / energía. Mientras que la final debería formar una campana.



Lo cual era lo que me esperaba que ocurriera con el paso del tiempo. Sin embargo, hay un pico muy raro al inicio de la primera gráfica (azul) que interpreto que es debido a que cuando la velocidad se va haciendo más pequeña, la energía cinética tiende a cero más rápido ya que el término v está al cuadrado.

Pero en general lo que esperaba, sobre todo el ver cómo lo que estaba en la izquierda está ahora más a la derecha y viceversa, concentrándose en un máximo que justamente coincide con la energía media final. Un valor entre el 5 y el 6 en las dos gráficas, justamente lo que predice la teoría estadística.

Dudas y posibles errores

He asumido que el choque dependía más de la energía que de la masa u otras magnitudes, pero tengo dudas de que si utilizo otros criterios, el resultado vaya a ser diferente.

Por otra parte, hay varios “bugs” en mi programa, sin embargo, está lo suficientemente bien programado para que no afecte a los resultados, pero al visualizarla no sé si se actualizan bien las velocidades o las energías. También hay algunas partículas puntuales que van mucho más rápido que las otras, cosa que me cuesta bastante de revisar y entender dónde está el fallo.