

Física Estadística Computacional: Segunda entrega.

Máster Universitario de Simulación en Ciencias e Ingeniería - 2023
Daniel Fco. Merino Delgado

1 Programa añadido: `vel_dist.py`

Para esta segunda entrega se ha programado un script destinado al análisis de algunas propiedades de la función de distribución de velocidades. En primer lugar, se ha obtenido un «histograma medio» de velocidades al final la simulación. También se han modificado los parámetros de la simulación a 25 esferas en un cuadrado de 50×50 .

En este histograma se han definido 25 barras entre 0 y 7 —este valor máximo se ha elegido observando los resultados de la simulación. Su cálculo se ha llevado a cabo a partir del cálculo del mismo histograma por *snapshot*, y un promedio al final.

En un bucle, se recorren las snapshots leyendo las velocidades de las 25 esferas, calculando su módulo y almacenándolos en una matriz de 25 columnas llamada *vels*. Tiene tantas filas como *snapshots* tiene la simulación. Además, a la vez que se van guardando las velocidades se va “generando” —en realidad, sólo se almacena el conteo por intervalo— un histograma correspondiente a la *snapshot*. Al finalizar el bucle, se calcula la media de los conteos por intervalo y se representa junto a la función

$$f(v) = \frac{mv}{k_B T} \exp\left(-\frac{mv^2}{2\pi k_B T}\right)$$

para comprobar cuánto se ajustan los resultados a la distribución teórica.

Por último, se calculan los cuatro primeros momentos de los datos almacenados en la matriz *vels_vect*.

