Análisis Físico: Simulación de N Partículas en una Caja 2D

Esteban Tobar 20221107008

Resumen

Este documento presenta el análisis físico y numérico de la simulación de un sistema de N partículas esféricas confinadas en una caja bidimensional. Se implementó un programa en C++ utilizando programación orientada a objetos para modelar colisiones elásticas entre partículas y con las paredes. Se estudió la distribución de velocidades, conservación de energía y cálculo de presión mediante dos métodos diferentes.

1. Introducción y Objetivos

En este trabajo simulamos el comportamiento de N partículas idénticas confinadas en una caja rectangular de dimensiones $W \times H$, donde cada partícula tiene radio $r \ll \min(W, H)$.

Los objetivos principales son:

- Implementar un simulador eficiente usando POO en C++
- Analizar la distribución de velocidades y compararla con Maxwell-Boltzmann
- Verificar la conservación de energía total del sistema
- Calcular presión mediante métodos cinéticos y de colisiones

2. Verificación de Aforo

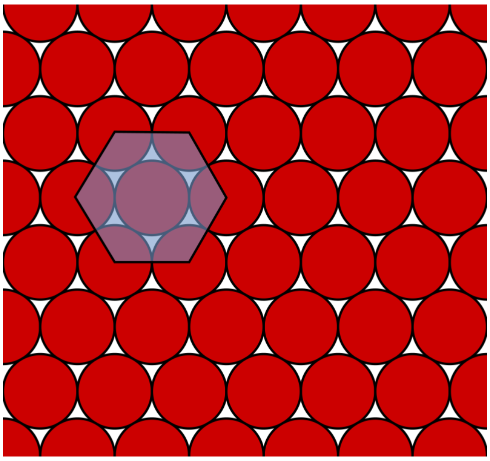
Antes de iniciar la simulación, el programa verifica que las partículas puedan caber en la caja sin solapamientos. El cálculo considera el empaquetamiento hexagonal óptimo, que permite acomodar más partículas que el empaquetamiento rectangular.

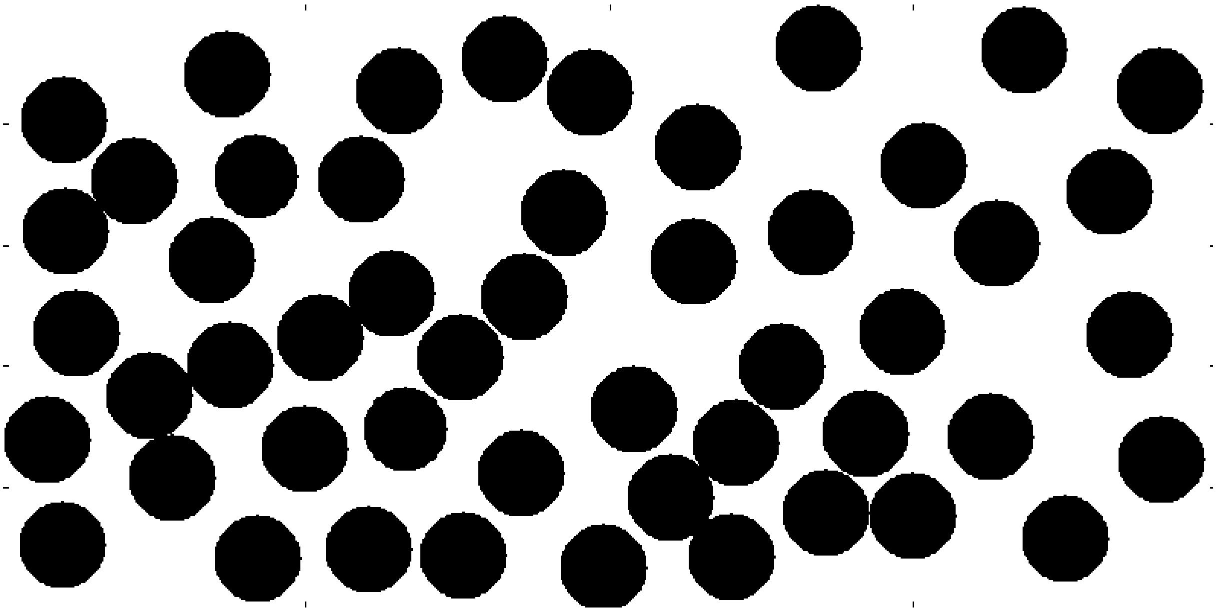
2.1. Empaquetamiento Hexagonal

En el empaquetamiento hexagonal, las filas se desplazan alternadamente para maximizar el número de partículas. La distancia entre centros en la dirección horizontal es $2R$, y en la dirección vertical es $\sqrt{3}R$.

El número máximo de partículas se calcula considerando que:

- Las filas pares tienen n_{cols} partículas
- Las filas impares tienen $n_{\text{cols}} - 1$ partículas (debido al desplazamiento)





$$n_{\text{cols}} = \left\lfloor \frac{W}{2R} \right\rfloor$$
$$n_{\text{filas}} = \left\lfloor \frac{H}{\sqrt{3}R} \right\rfloor$$
$$N_{\max} = \begin{cases} n_{\text{cols}} \times \frac{n_{\text{filas}}+1}{2} + (n_{\text{cols}} - 1) \times \frac{n_{\text{filas}}-1}{2} & \text{si } n_{\text{filas}} \text{ es impar} \\ n_{\text{cols}} \times \frac{n_{\text{filas}}}{2} + (n_{\text{cols}} - 1) \times \frac{n_{\text{filas}}}{2} & \text{si } n_{\text{filas}} \text{ es par} \end{cases}$$

En la práctica, tu código implementa una versión iterativa de este cálculo que es más precisa.

3. Modelo Físico y Matemático

3.1. Dinámica de las Partículas

Cada partícula i tiene masa m, posición $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ y velocidad $\mathbf{v}_i = (v_{x_i}, v_{y_i})$. La evolución temporal entre colisiones sigue:

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{0} \tag{1}$$

3.2. Colisiones entre Partículas

Para dos partículas i y j en colisión, definimos el vector unitario normal:

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \tag{2}$$

Las velocidades después de la colisión elástica se calculan como:

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i - [(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \hat{\mathbf{n}}]\hat{\mathbf{n}} \tag{3}$$

$$\mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j - [(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \hat{\mathbf{n}}]\hat{\mathbf{n}} \tag{4}$$

3.3. Colisiones con las Paredes

Para colisiones con paredes en $x = 0$ y $x = W$:

$$v'_x = -v_x \tag{5}$$

$$v'_y = v_y \tag{6}$$

Para colisiones con paredes en $y = 0$ y $y = H$:

$$v'_x = v_x \tag{7}$$

$$v'_y = -v_y \tag{8}$$

4. Métodos Numéricos

4.1. Integración Temporal - Método de Euler

El método de Euler forward se implementa como:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t \tag{9}$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) \quad \text{(entre colisiones)} \tag{10}$$

4.2. Equivalencia de Métodos de Integración sin Fuerzas

En esta simulación, entre colisiones no hay fuerzas actuando sobre las partículas ($\mathbf{a} = 0$). En este caso especial, varios métodos de integración numérica se reducen al mismo algoritmo.

4.2.1. Ecuaciones del Movimiento

Entre colisiones, cada partícula sigue movimiento rectilíneo uniforme:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \tag{11}$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{0} \tag{12}$$

4.2.2. Reducción al Método de Euler

Velocity-Verlet:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 \tag{13}$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}[a(t) + a(t + \Delta t)]\Delta t \tag{14}$$

Con $a(t) = 0$ y $a(t + \Delta t) = 0$, se reduce a:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t \tag{15}$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) \tag{16}$$

Leapfrog:

$$v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + a(t)\Delta t \tag{17}$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t \tag{18}$$

Con $a(t) = 0$, la velocidad se mantiene constante y el método se reduce a Euler.

Runge-Kutta de 4º Orden (RK4): Para la ecuación $\frac{dx}{dt} = f(t, x) = v$ (con v constante):

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t, x) = v \\
k_2 &= f(t + \tfrac{\Delta t}{2}, x + \tfrac{\Delta t}{2}k_1) = v \\
k_3 &= f(t + \tfrac{\Delta t}{2}, x + \tfrac{\Delta t}{2}k_2) = v \\
k_4 &= f(t + \Delta t, x + \Delta t k_3) = v
\end{aligned}$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \tag{19}$$

$$= x(t) + \frac{\Delta t}{6}(v + 2v + 2v + v) \tag{20}$$

$$= x(t) + v\Delta t \tag{21}$$

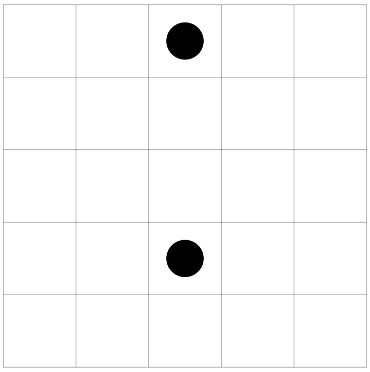
4.3. Detección de Colisiones

Se implementan dos métodos:

Normal:

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 \leq (2R)^2 \tag{22}$$

Malla:



Malla espacial 5×5

Figura 1: Malla espacial para detección de colisiones. Cada partícula solo verifica colisiones con partículas en celdas vecinas.

5. Cálculo de Presión

5.1. Método Cinético

En 2D, la presión se define como fuerza por unidad de longitud. Partimos de la definición fundamental:

$$P = \frac{F}{L} \tag{23}$$

Para una partícula con velocidad v_x que choca elásticamente con la pared vertical, el cambio de momento es:

$$\Delta p_x = 2m|v_x| \tag{24}$$

La fuerza ejercida por una partícula es:

$$F_x = \frac{\Delta p_x}{\Delta t} = \frac{2m|v_x|}{\Delta t} \tag{25}$$

El tiempo entre colisiones para una partícula con la misma pared es $\Delta t = \frac{2W}{|v_x|}$, por lo que la fuerza media por partícula es:

$$F_x = \frac{2m|v_x|}{\frac{2W}{|v_x|}} = \frac{mv_x^2}{W} \tag{26}$$

Para N partículas, la fuerza total en la dirección x es:

$$F_x = \frac{Nm\langle v_x^2 \rangle}{W} \tag{27}$$

La presión en la dirección x es entonces:

$$P_x = \frac{F_x}{H} = \frac{Nm\langle v_x^2 \rangle}{WH} \tag{28}$$

De manera similar, la presión en la dirección y es:

$$P_y = \frac{Nm\langle v_y^2 \rangle}{WH} \tag{29}$$

Dado que el sistema es isotrópico, $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \frac{\langle v^2 \rangle}{2}$, y la presión total es:

$$P = \frac{P_x + P_y}{2} = \frac{Nm\langle v^2 \rangle}{2A} \tag{30}$$

donde $A = W \times H$.

5.2. Método de Colisiones (Medido)

Calculamos la presión directamente a partir de las colisiones con las paredes. Para la pared vertical:

$$F_x = \frac{\sum \Delta p_x}{\Delta t} = \frac{\sum 2m|v_x|}{\Delta t} \tag{31}$$

$$P_x = \frac{F_x}{H} = \frac{\sum 2m|v_x|}{H\Delta t} \tag{32}$$

Para la pared horizontal:

$$F_y = \frac{\sum \Delta p_y}{\Delta t} = \frac{\sum 2m|v_y|}{\Delta t} \tag{33}$$

$$P_y = \frac{F_y}{W} = \frac{\sum 2m|v_y|}{W\Delta t} \tag{34}$$

La presión total se promedia:

$$P_{\text{col}} = \frac{P_x + P_y}{2} \tag{35}$$

5.3. Distribución de Velocidades

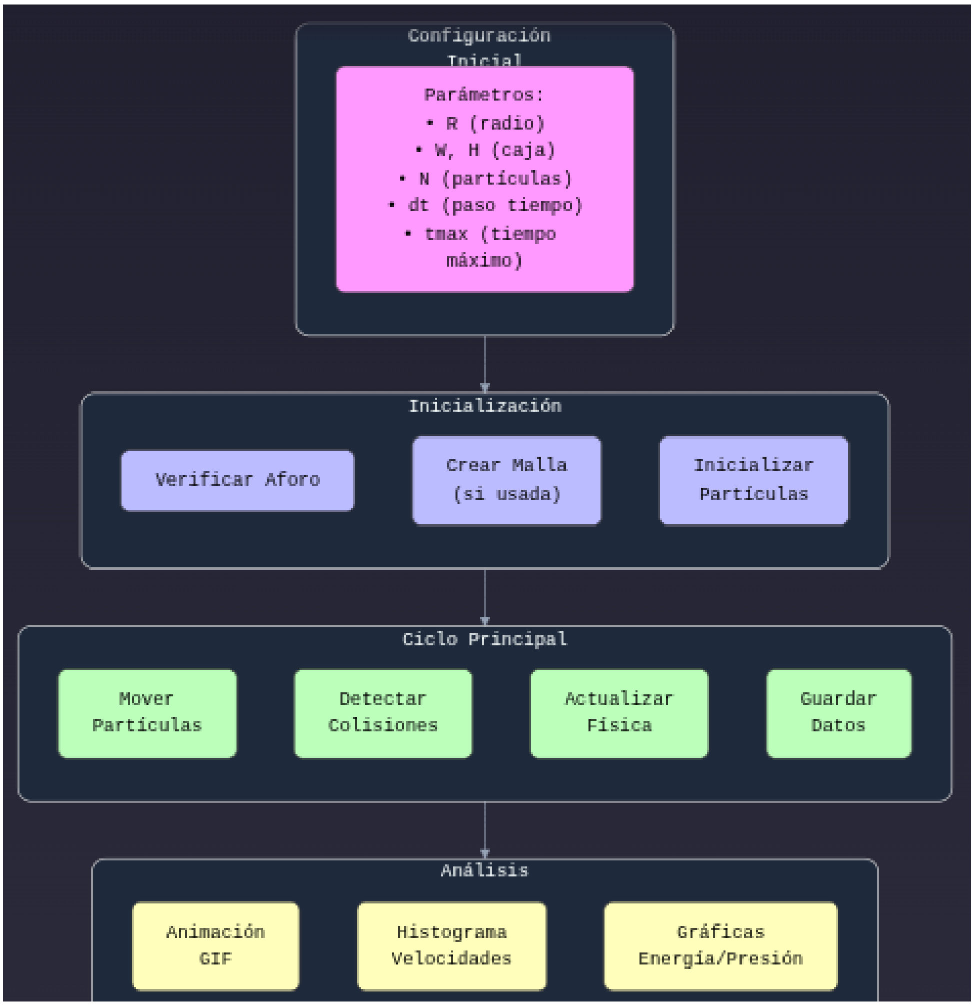
En el equilibrio térmico, la distribución de magnitudes de velocidad es conocida como la distribución Maxwell-Boltzamann (2D):

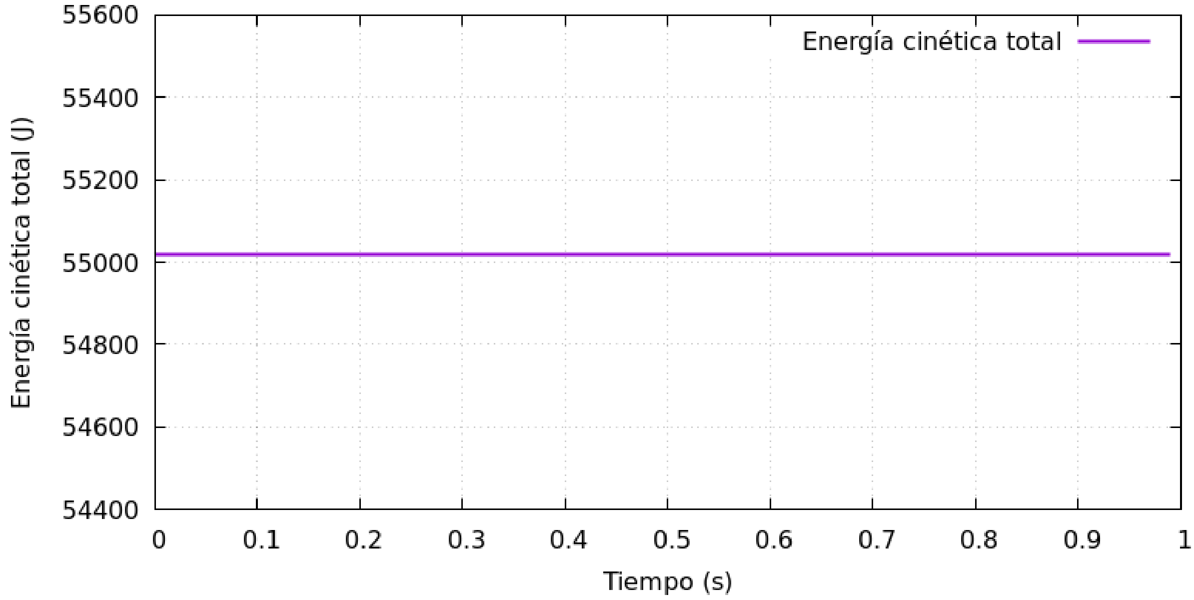
$$P(v) = \frac{mv}{k_B T} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) \tag{36}$$

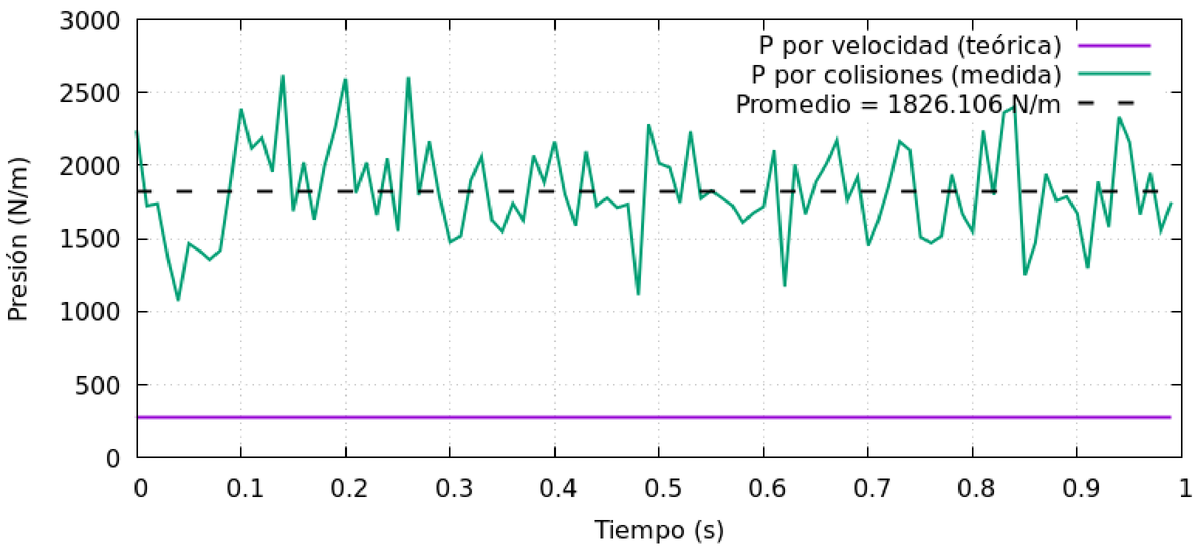
6. Implementación y Flujo del Programa

El programa sigue este flujo secuencial:

1. **Verificación de aforo** - Garantiza que las partículas quepan en la caja
2. **Inicialización** - Posiciones y velocidades aleatorias sin solapamiento
3. **Bucle principal** - Para cada paso de tiempo:
   - Mover partículas (Euler)
   - Rebotar en paredes y calcular presión por colisiones
   - Detectar y resolver colisiones entre partículas
   - Calcular presión cinética y energía
   - Guardar datos
4. **Post-procesamiento** - Generar animaciones y gráficas


Configuración Inicial
Parámetros:
• R (radio)
• W, H (caja)
• N (partículas)
• dt (paso tiempo)
• tmax (tiempo máximo)
Inicialización
Verificar Aforo
Crear Malla (si usada)
Inicializar Partículas
Ciclo Principal
Mover Partículas
Detectar Colisiones
Actualizar Física
Guardar Datos
Análisis
Animación GIF
Histograma Velocidades
Gráficas Energía/Presión



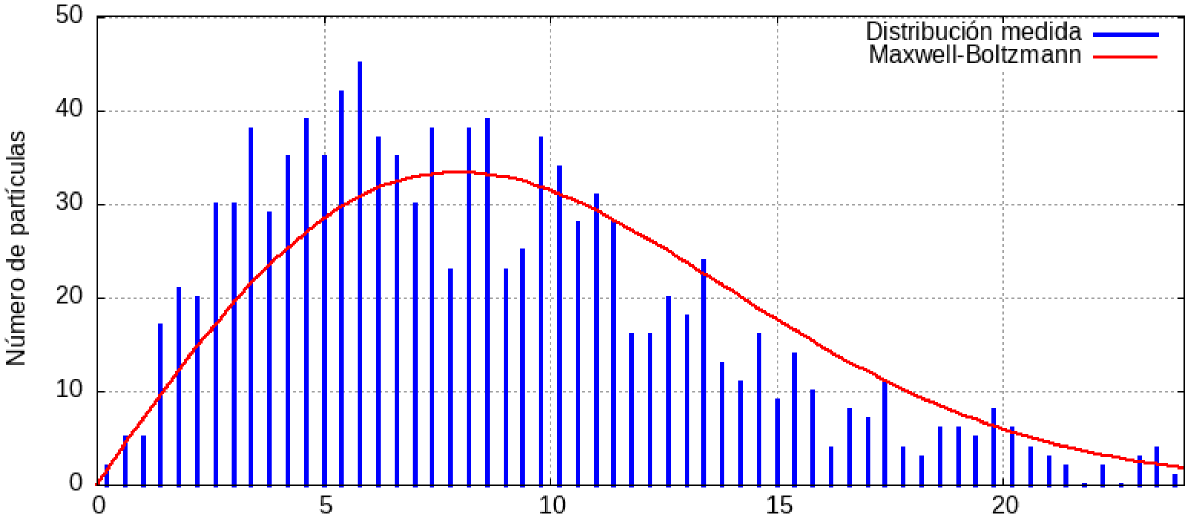


7. Resultados y Validación

7.1. Conservación de Energía

La energía total debe conservarse en colisiones elásticas:

$$E_{\text{total}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m v_i^2 = \text{constante} \tag{37}$$


Distribución medida
Maxwell-Boltzmann
Número de partículas
50
40
30
20
10
0
0
5
10
15
20