

SIMULACIÓN DE UN GAS EN UNA CAJA CUADRADA

Asignación final

L. Melissa Niño Vera*
CC. 1094271637
liseth.nino@unipamplona.edu.co

(Dated: June 27, 2025)

Este proyecto corresponde al trabajo final del curso de Física Computacional. El objetivo principal fue simular un sistema de partículas cargadas que interactúan mediante fuerzas de tipo Coulomb en dos dimensiones, bajo condiciones de frontera periódicas. A través de esta simulación, se pretendió observar las trayectorias de las partículas, el comportamiento de la energía total del sistema, su evolución térmica y la distribución de velocidades, utilizando herramientas de programación en Python.

Abstrac : This project corresponds to the final work of the Computational Physics course. The main objective was to simulate a system of charged particles interacting by Coulomb-type forces in two dimensions, under periodic boundary conditions. Through this simulation, the aim was to observe the trajectories of the particles, the behavior of the total energy of the system, its thermal evolution and the velocity distribution, using Python programming tools.

Structure: El documento se estructura en cinco secciones principales. Comienza con una introducción al contexto y fundamentos de la física computacional, seguida por una descripción detallada del código utilizado en la simulación. Posteriormente, se presentan y analizan los resultados obtenidos mediante gráficas, y se finaliza con una reflexión en las conclusiones sobre el alcance, limitaciones e interpretación física del modelo.

INTRODUCCIÓN

La simulación computacional es una herramienta clave en el análisis y comprensión de sistemas físicos complejos. A través del uso de modelos numéricos, es posible representar fenómenos dinámicos que, por su naturaleza multivariada o no lineal, no pueden resolverse de forma analítica.

Este proyecto se desarrolla en el marco del curso de Física Computacional I, con el propósito de modelar y analizar un sistema de partículas cargadas en dos dimensiones. Estas partículas interactúan mediante fuerzas electrostáticas y evolucionan en el tiempo bajo condiciones de frontera periódicas. El objetivo principal fue observar la evolución del sistema y evaluar propiedades como la conservación de la energía, la distribución de velocidades y el comportamiento térmico, todo ello con el fin de aproximarse a las condiciones ideales de un gas o plasma en equilibrio.

Mediante programación en Python y el uso de técnicas de simulación directa, se integraron numéricamente las ecuaciones de movimiento del sistema y se evaluaron las magnitudes físicas relevantes a lo largo del tiempo.

I. FUNDAMENTOS DE LA FÍSICA COMPUTACIONAL

La física computacional es una disciplina que combina los principios de la física teórica con herramientas de programación y métodos numéricos, con el fin de resolver problemas que no pueden abordarse fácilmente mediante técnicas analíticas. Es especialmente útil en sistemas con muchos grados de libertad, interacciones no lineales o condiciones complejas, donde las soluciones exactas son impracticables o inexistentes.

El uso de simulaciones en física permite modelar fenómenos naturales, explorar el comportamiento de sistemas en distintas condiciones y realizar experimentos virtuales. No solo permiten predecir resultados, sino también estudiar el equilibrio térmico, la conservación de la energía, la dinámica de sistemas interactuantes y la evolución de propiedades estadísticas, como la temperatura o la distribución de velocidades en un gas.

En este contexto, la presente simulación se enmarca en el estudio de un sistema de partículas cargadas, modeladas como un gas interactuante mediante fuerzas electrostáticas, con el objetivo de observar su evolución dinámica bajo condiciones idealizadas.

* Física computacional I
Departamento de física, Universidad de pamplona

II. ESTRUCTURA Y APLICACIÓN DEL CÓDIGO

La simulación fue implementada en Python utilizando bibliotecas como **numpy** para el manejo de vectores y operaciones numéricas, y **matplotlib** para la visualización gráfica de los resultados. El sistema modelado corresponde a un gas de 10 partículas cargadas confinadas en una caja bidimensional de lado $L = 5$, bajo condiciones de frontera periódicas. Las partículas interactúan mediante la ley de Coulomb, y su movimiento se calcula a través del método de integración de Euler.

A. Inicialización del sistema

Cada partícula se representa como un objeto de la clase **Particle**, con atributos: masa m , carga q , posición \vec{r} , velocidad \vec{v} , y aceleración \vec{a} . Además, se guarda la trayectoria completa para graficar el movimiento posterior.

Se generan posiciones y velocidades iniciales aleatorias en el dominio $[0, L)$, con velocidades uniformemente distribuidas entre -1 y 1 .

B. Fuerza de interacción

Las partículas interactúan mediante la fuerza electrostática de Coulomb en dos dimensiones, utilizando la forma vectorial de la ley:

$$\vec{F}_{ij} = K \cdot \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} \cdot \vec{r}_{ij}$$

donde $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ es el vector de desplazamiento entre partículas, $K = 9 \times 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$ es la constante de Coulomb y el factor $|\vec{r}_{ij}|^{-3} \cdot \vec{r}_{ij}$ asegura que la fuerza tenga la dirección adecuada y caiga con el cuadrado de la distancia.

Para respetar las condiciones de borde periódicas, se aplica la condición de imagen mínima:

$$\vec{r}_{ij} \leftarrow \vec{r}_{ij} - L \cdot \text{round}\left(\frac{\vec{r}_{ij}}{L}\right)$$

Esto garantiza que la distancia se calcule entre las copias más cercanas de las partículas dentro de la caja.

C. Dinámica del sistema

La evolución temporal se implementa usando el método de Euler. Las ecuaciones del movimiento son:

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m}, \quad \vec{v}(t+\Delta t) = \vec{v}(t) + \vec{a} \cdot \Delta t, \quad \vec{r}(t+\Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t) \cdot \Delta t$$

Posteriormente, la posición se ajusta con condiciones periódicas:

$$\vec{r} \leftarrow \vec{r} \bmod L$$

D. Energías y temperatura

Durante la simulación se calculan tres magnitudes físicas clave:

- **Energía cinética total:** Esto proviene directamente de la definición clásica de energía cinética para una partícula de masa m moviéndose con velocidad v . En un sistema de muchas partículas, se suman los aportes de todas. Es una medida de cuánto movimiento tiene el sistema.

$$E_c = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2$$

$v_i = |\vec{v}_i|$ es la magnitud de la velocidad de la partícula i .

- **Energía potencial total** La energía potencial electrostática, es la energía potencial entre dos cargas es inversamente proporcional a la distancia entre ellas. Se suman todos los pares (i, j) , sin repetir, por eso $i < j$, porque cada interacción ocurre una sola vez.

$$E_p = \sum_{i < j} \frac{K q_i q_j}{|\vec{r}_{ij}|}$$

- **Temperatura** Temperatura a partir de la energía cinética.

$$T = \frac{2E_c}{N_{\text{dof}} \cdot k_B}$$

Esta fórmula proviene de la teoría cinética de los gases y del teorema del equipartición de la energía. Según este principio, cada grado de libertad contribuye con una energía promedio de:

$$\frac{1}{2} k_B T$$

En un sistema de N partículas en 2D, hay $N_{\text{dof}} = 2N$ grados de libertad (posición en x y y). Reorganizando la fórmula para despejar T , se obtiene:

$$T = \frac{2E_c}{2N \cdot k_B} = \frac{E_c}{N k_B}$$

Pero como en el código se usa la forma general con N_{dof} , queda:

$$T = \frac{2E_c}{N_{\text{dof}} \cdot k_B}$$

Es decir, la temperatura se interpreta como una medida de la energía cinética promedio por grado de libertad, no como la energía total.

E. Distribución de velocidades

Al finalizar la simulación, se analiza la distribución de velocidades mediante un histograma de las magnitudes $v_i = |\vec{v}_i|$. Sobre este histograma se superpone la curva teórica de la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann en 2D, dada por:

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

la ecuación anterior se usa porque en un gas ideal en equilibrio térmico, las velocidades de las partículas no son todas iguales, sino que se distribuyen estadísticamente. Esta fórmula describe la probabilidad de encontrar una partícula con una velocidad de magnitud v en un sistema donde las velocidades en x y y están distribuidas de forma gaussiana. En 2D, el número de estados accesibles con una velocidad v es proporcional a v (por la geometría del espacio de velocidades), lo que genera el factor multiplicativo v al principio de la expresión.

La usamos para comparar la simulación con el comportamiento ideal de un gas en equilibrio térmico, que debería aproximarse a esa curva si la simulación está bien hecha. Esta comparación permite evaluar el comportamiento estadístico del sistema y su aproximación al equilibrio térmico.

F. Simulación y cálculo por pasos

Durante la simulación, se repiten múltiples ciclos **for** anidados con el objetivo de calcular la fuerza entre cada par de partículas. Esto requiere un doble ciclo:

```
for i in range(N): for j in range(i+1, N):
```

Esto asegura que se evalúen todas las interacciones sin repetir pares ni calcular fuerzas consigo mismas.

Se acumulan las fuerzas netas sobre cada partícula mediante el principio de acción y reacción:

$$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji}$$

Luego, en un ciclo aparte, se actualizan las posiciones y velocidades de cada partícula con base en las fuerzas calculadas.

Estos pasos se repiten durante muchos intervalos de tiempo cortos (Δt), lo que permite simular la evolución temporal del sistema.

III. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE LA SIMULACIÓN

En esta sección se presentan los resultados obtenidos al ejecutar la simulación del sistema de 10 partículas cargadas en un espacio bidimensional con condiciones de frontera periódicas. A través de las gráficas generadas, se busca analizar el comportamiento dinámico y estadístico del sistema en función del tiempo, incluyendo trayectorias individuales, energías, temperatura y distribución de velocidades.

Cada gráfica aporta información clave sobre la evolución y el equilibrio del sistema, permitiendo una interpretación tanto física como computacional del modelo.

A. Trayectorias de las partículas

La siguiente imagen muestra las trayectorias de las 10 partículas simuladas a lo largo del tiempo, dentro de una caja de lado $L = 5$ con condiciones periódicas de frontera. Cada línea de color representa el recorrido de una partícula distinta.

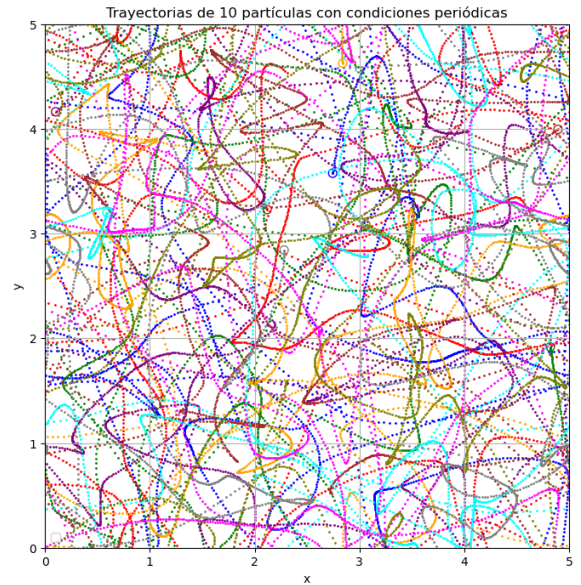


FIG. 1. Trayectorias de 10 partículas, con posiciones entre $[0, L)$ y velocidades entre -1 y 1 , aleatorias

No se observan trayectorias rectilíneas ni uniformes, lo cual confirma que las partículas están en constante interacción. El movimiento curvilíneo indica que las partículas están sometidas a fuerzas variables debido a las interacciones electrostáticas con las demás. La complejidad de las trayectorias refleja la dinámica caótica del sistema, es decir, pequeñas diferencias en posición inicial conducen a trayectorias notablemente distintas, típico en sistemas de muchos cuerpos.

Las condiciones de frontera periódica se evidencian en la continuidad de las trayectorias, cuando una partícula sale por un borde, reaparece automáticamente por el lado opuesto.

Interpretación física:

Este comportamiento es consistente con el de un gas cargado o plasma idealizado, donde las partículas están sometidas a fuerzas de repulsión continua por tener la misma carga. La complejidad de las trayectorias refleja una fuerte interacción colectiva, y el espacio está suficientemente poblado para mantener un estado dinámico estable, sin agrupamientos ni colisiones directas.

B. Energía cinética, potencial y total

La siguiente gráfica muestra la evolución de tres magnitudes energéticas a lo largo del tiempo de simulación. Energía cinética (azul) asociada al movimiento de las partículas. Energía potencial (naranja) asociada a las interacciones electrostáticas entre partículas. Energía total (verde punteada) suma de la cinética y la potencial.

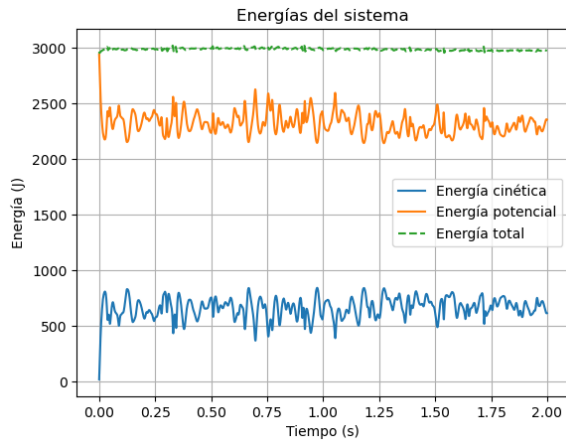


FIG. 2. Energía cinética (azul), Energía potencia Coulombiana (Naranja). Energía total del sistema (Verde).

La energía total del sistema se mantiene aproximadamente constante a lo largo del tiempo, lo cual es esperable dado que el sistema es cerrado y no hay

fuentes ni pérdidas de energía externas. Esto confirma que la simulación conserva bien la energía.

Se observa una compensación inversa entre energía cinética y potencial, es decir, cuando una sube, la otra baja. Esto refleja el intercambio típico de energía en sistemas interactuantes, por ejemplo, una partícula acelerada por una fuerza repulsiva gana energía cinética mientras se aleja, disminuyendo la potencial.

Las oscilaciones en ambas curvas indican fluctuaciones dinámicas típicas de un sistema de partículas interactuantes. Aun así, se observa cierta estabilización estadística a medida que avanza el tiempo.

Los valores de energía en julios son altos, lo cual se debe a la normalización artificial de parámetros en la simulación (masas, cargas, constantes, etc.). Aunque no corresponden a un gas real, son coherentes dentro del marco numérico que se ha usado para hacer visible la dinámica del sistema.

Interpretación física

El sistema alcanza un estado cuasi-estacionario, donde las energías fluyen entre sus formas cinética y potencial pero sin cambiar el total. Esto es típico de sistemas termalizados, aunque no equilibrados termodinámicamente en sentido estricto, y valida que la simulación reproduce correctamente la física básica del sistema.

C. Evolución de la temperatura del sistema

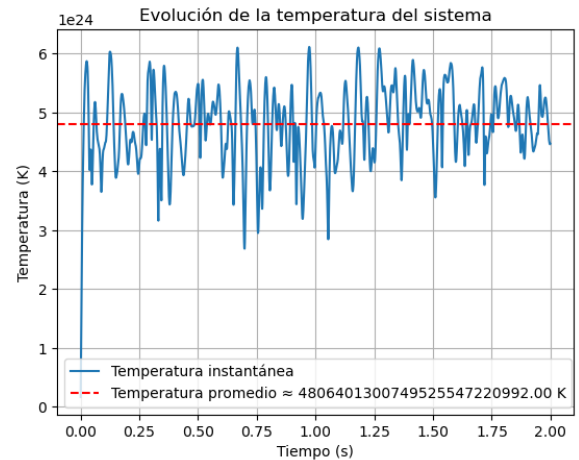


FIG. 3. Evolución de la temperatura del sistema

Esta gráfica representa la temperatura instantánea del sistema a lo largo del tiempo, calculada mediante la relación entre la energía cinética y los grados de libertad del sistema:

$$T(t) = \frac{2E_c(t)}{N_{\text{dof}} \cdot k_B}$$

donde $N_{\text{dof}} = 2N$ es el número total de grados de libertad (dos por partícula en 2D) y k_B es la constante de Boltzmann.

La temperatura muestra fluctuaciones significativas a lo largo del tiempo, pero oscila en torno a un valor promedio claramente definido. Estas oscilaciones reflejan los intercambios de energía entre partículas y son típicas en simulaciones de sistemas pequeños, donde los efectos estadísticos no se promedian tan fácilmente como en gases macroscópicos.

El valor promedio de temperatura es extremadamente alto ($\sim 10^{24}$ K), lo cual no corresponde a un sistema físico realista. El valor elevado de temperatura se debe a:

1. **Cargas y masas no reales:** En el código se usan valores artificiales (masas grandes, cargas pequeñas, pero constantes arbitrarias) que afectan directamente la energía cinética y, por lo tanto, la temperatura.
2. **Constante de Coulomb en unidades SI:** $K = 9 \times 10^9 \text{ N}\cdot\text{m}^2/\text{C}^2$, lo que amplifica las fuerzas y las aceleraciones.
3. **Velocidades y energías no escaladas:** as partículas se mueven muy rápido y acumulan gran energía, resultando en temperaturas desproporcionadas.

Interpretación física:

Aunque no corresponde a un gas convencional, este comportamiento podría interpretarse como una simulación de un sistema altamente energizado, como un plasma extremadamente caliente, por ejemplo, los que se producen en colisiones de partículas, o en astrofísica.

En el contexto del proyecto, se puede entender que la temperatura no tiene una correspondencia directa con una magnitud física, sino que funciona como indicador relativo del estado energético del sistema.

D. Distribución de velocidades:

Esta gráfica muestra un histograma de las velocidades obtenidas a partir de la simulación, junto con la curva teórica correspondiente a la distribución de Maxwell-Boltzmann en dos dimensiones, dada por la expresión:

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

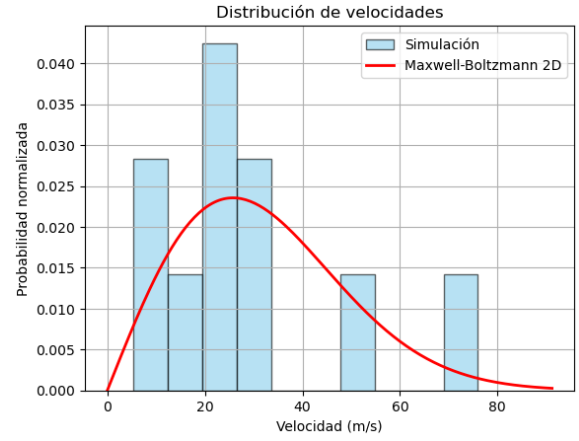


FIG. 4. Distribución de velocidades y comparación con Maxwell-Boltzmann

donde $f(v)$ es la probabilidad de encontrar una partícula con velocidad v , m es la masa de las partículas, T es la temperatura promedio del sistema, $k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J/mol} \cdot \text{K}$ es la constante de Boltzmann.

La curva roja representa la distribución teórica esperada para un sistema en equilibrio térmico, mientras que las barras azules muestran el resultado de la simulación. A pesar del número reducido de partículas (10), el histograma muestra una tendencia general coherente con la forma de la distribución de Maxwell-Boltzmann.

Se observan fluctuaciones e irregularidades propias de sistemas con pocos datos y estadística limitada. No obstante, el pico del histograma y la cola decreciente reflejan correctamente la forma esperada.

El uso de temperaturas elevadas en la simulación (por los parámetros artificiales) influye en la posición del máximo y la dispersión de velocidades, pero la forma funcional se mantiene.

Interpretación física:

Este resultado muestra que el sistema, a pesar de no estar en equilibrio termodinámico estricto, se comporta como si estuviera cercano al equilibrio, al menos en el sentido estadístico. Las partículas se distribuyen en velocidades de forma similar a lo que se esperaría en un gas clásico en 2D, con más partículas en velocidades intermedias y menos en velocidades muy bajas o muy altas.

Esto sugiere que con condiciones numéricas artificiales, el modelo logra reproducir comportamientos colectivos coherentes con la física estadística clásica.

IV. CONCLUSIONES:

A través de la presente simulación se logró modelar con éxito un sistema de partículas cargadas interactuantes en dos dimensiones, evidenciando comportamientos dinámicos coherentes con lo esperado en un gas idealizado con interacción de tipo Coulomb.

Debido a las limitaciones prácticas de visualización y estabilidad numérica, fue necesario utilizar valores normalizados o artificiales para las masas, cargas, constantes y velocidades de las partículas. El uso de valores reales, como la masa del electrón o las cargas elementales, haría que las trayectorias fueran extremadamente rápidas y difíciles de resolver computacionalmente en tiempos de simulación razonables. Por tanto, los parámetros fueron ajustados para garantizar una evolución visible del sistema, aunque a costa de obtener valores de energía y temperatura que no corresponden directamente con condiciones físicas realistas.

No obstante, este tipo de simulaciones sigue siendo

muy útil para explorar el comportamiento cualitativo de sistemas físicos complejos. En particular, aunque los resultados no representen un gas convencional, pueden interpretarse como una aproximación visual y dinámica de un plasma altamente energizado, como los que se encuentran en procesos astrofísicos, en reactores de fusión, o en experimentos de colisión de partículas, donde las energías y temperaturas alcanzan escalas extremas.

La conservación de la energía total, el intercambio entre energía cinética y potencial, la estabilización estadística de la temperatura y la aproximación a la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann validan que la simulación capta las características esenciales de la dinámica colectiva de partículas interactuantes.

Finalmente, este ejercicio permitió afianzar competencias clave en física computacional: la formulación de modelos, la implementación numérica de leyes físicas, el análisis de resultados y la interpretación crítica de los mismos bajo un enfoque tanto teórico como práctico.