



SIMULACIÓN DE UN GAS EN UNA CAJA CUADRADA

L. Melissa Niño Vera
CC: 1094271637

Universidad de Pamplona
Facultad de ciencias básicas
Programa de física

CONTENIDO

- 1 Objetivo de la simulación
- 2 Condiciones de frontera y estructura del código
- 3 Magnitudes físicas del sistema
- 4 Trayectorias de las partículas
- 5 Energías del sistema
- 6 Evolución de la temperatura
- 7 Distribución de velocidades
- 8 Conclusiones

Objetivo de la simulación

- Simular un sistema de 10 partículas cargadas en una caja bidimensional.
- Aplicar fuerzas de tipo Coulomb con condiciones de frontera periódicas.
- Observar trayectorias, energía total, evolución térmica y distribución de velocidades.
- Utilizar herramientas de programación en Python para el desarrollo y visualización.

Condiciones de frontera y estructura del código

- **Lenguaje y librerías:** Se programó en Python usando `numpy` y `matplotlib`.
- **Condiciones de frontera periódicas:** Cuando una partícula sale de un borde, reaparece por el lado opuesto.

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

Esto permite simular un sistema sin paredes, como si estuviera repetido infinitamente.

- **Cálculo de fuerzas:** Se aplica la ley de Coulomb con la condición de imagen mínima:

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

Esto asegura que las partículas interactúen con la copia más cercana de sus vecinas.

- **Actualización dinámica:** Se usa el método de Euler para integrar las posiciones y velocidades:

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \vec{a}\Delta t \quad \vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}\Delta t$$

Magnitudes físicas del sistema

- **Energía cinética:** mide el movimiento de las partículas en función de su masa y velocidad.

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

- **Energía potencial:** representa la interacción eléctrica entre pares de partículas.

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

- **Temperatura:** está relacionada con la energía cinética promedio por grado de libertad.

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

Trayectorias de las partículas

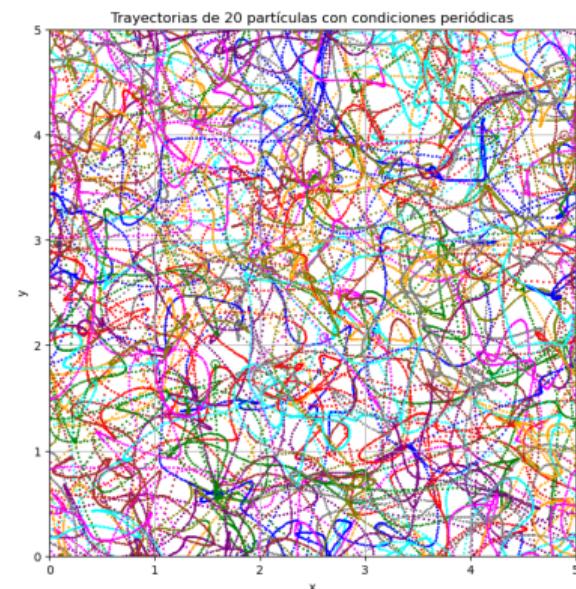
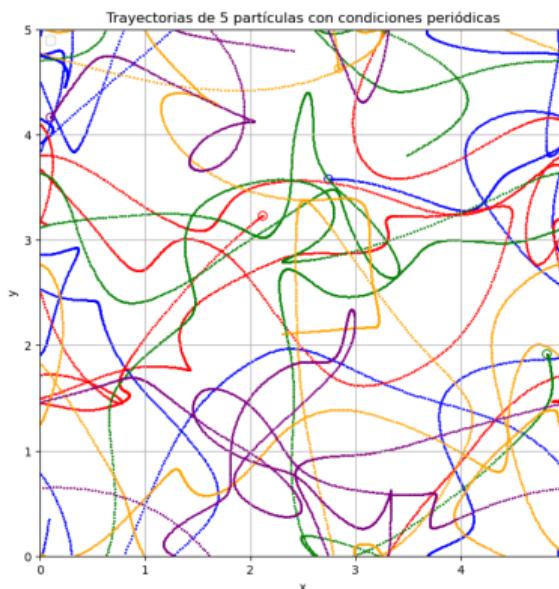
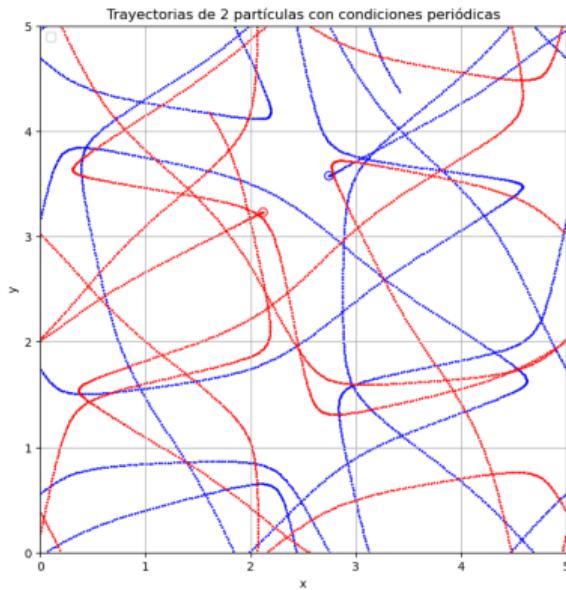


Trayectorias en una caja con frontera periódica

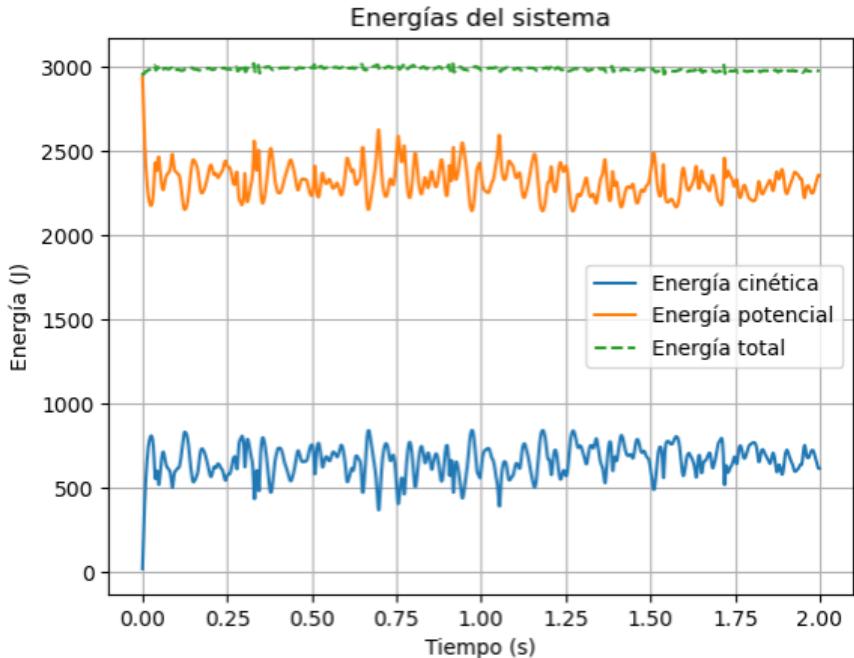
- Cada línea representa el recorrido de una partícula.
- El movimiento es curvo y complejo, debido a las fuerzas electrostáticas.
- Las trayectorias no son rectas ni libres, sino afectadas por la presencia de otras partículas.
- Al cruzar un borde, la partícula reaparece por el lado opuesto (frontera periódica).

Interpretación física: Este comportamiento es típico de un plasma idealizado, con interacción colectiva y dinámica caótica.

Comparación de trayectorias según número de partículas



Energías del sistema

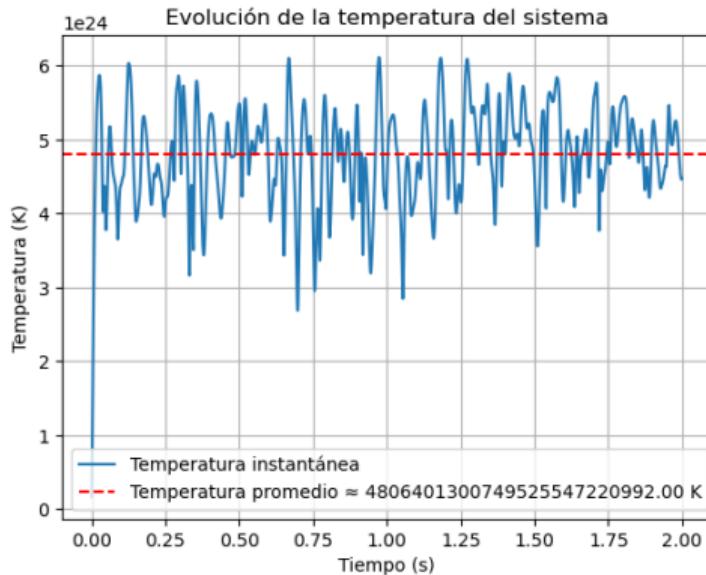


Energía cinética (azul), potencial (naranja) y total (verde).

- La energía total se mantiene casi constante durante la simulación.
- Se observa un intercambio dinámico entre energía cinética y potencial.
- Las oscilaciones reflejan el carácter caótico del sistema.

Interpretación física: El sistema conserva la energía total, como debe hacerlo un sistema cerrado, mientras las partículas intercambian energía al interactuar.

Evolución de la temperatura



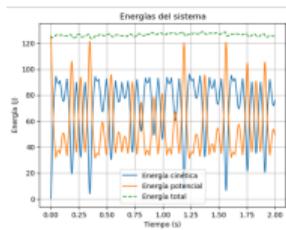
Temperatura instantánea con línea promedio en rojo.

- La temperatura fluctúa alrededor de un valor promedio.
- Las oscilaciones se deben al número reducido de partículas (estadística pequeña).
- El valor elevado de temperatura se debe a parámetros artificiales (masa, carga, constante de Boltzmann).

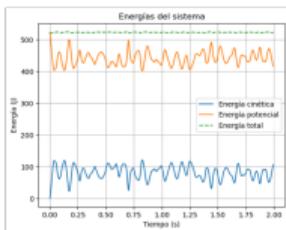
Interpretación física: Aunque los valores no son realistas, la evolución refleja correctamente la estabilización energética del sistema.

Comparación de energías y temperaturas

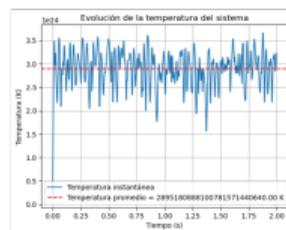
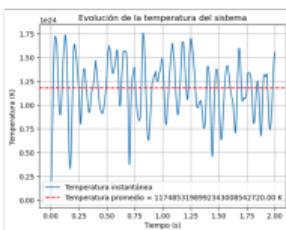
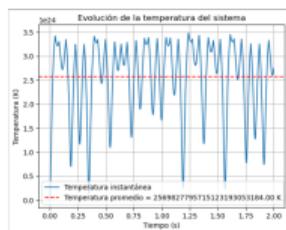
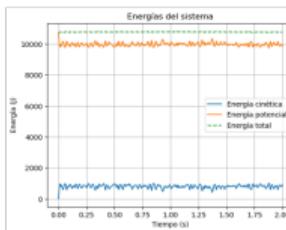
2 PARTÍCULAS



5 PARTÍCULAS



20 PARTÍCULAS

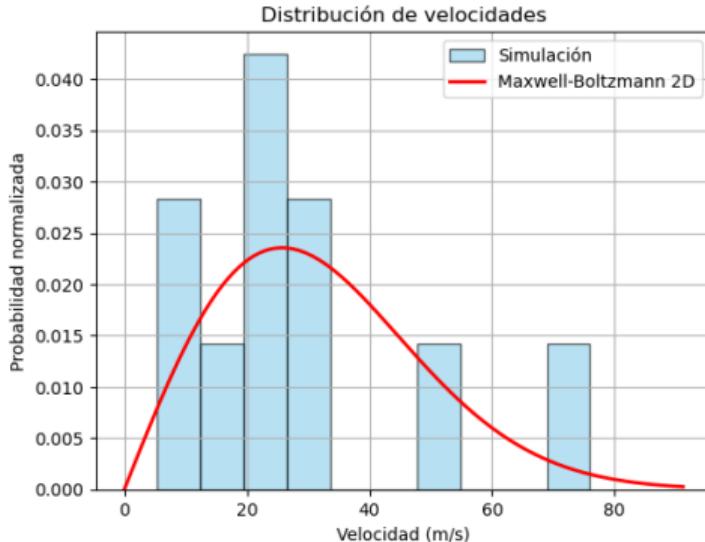


Comparación entre los gráficos de energía (fila superior) y temperatura (fila inferior) para sistemas con 2, 5 y 20 partículas.

Observación general:

- A medida que aumenta el número de partículas, las fluctuaciones en la energía y la temperatura se reducen.
- La energía total del sistema crece proporcionalmente al número de partículas.
- Aunque el comportamiento es más estable con más partículas, la temperatura sigue siendo extremadamente alta debido al valor pequeño de la constante de Boltzmann ($k_B \approx 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$).

Distribución de velocidades



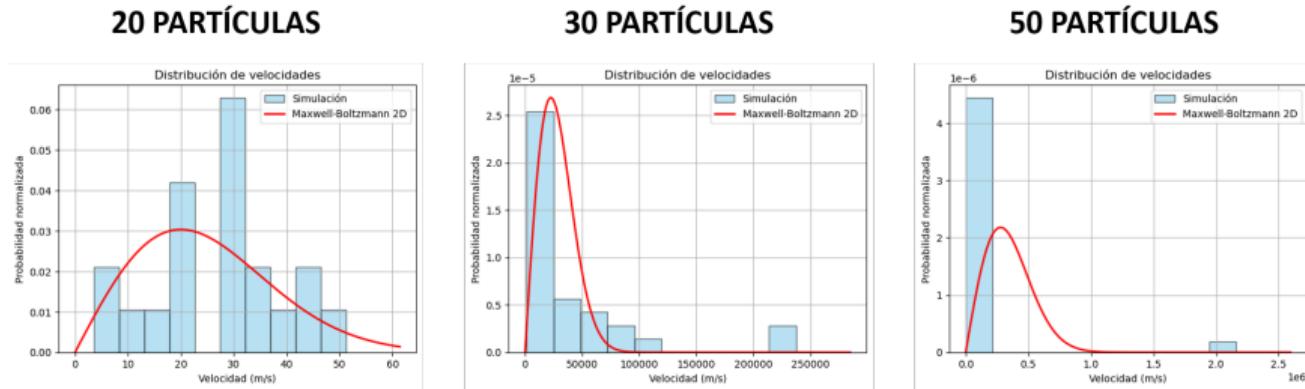
Histograma de velocidades con la curva de Maxwell-Boltzmann 2D superpuesta.

- Se compara la distribución simulada con la teoría para un gas en equilibrio.
- Las partículas tienden a organizarse según una distribución estadística esperada.
- La curva teórica usada es:

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

Interpretación física: A pesar del número reducido de partículas, el sistema tiende a un comportamiento colectivo que reproduce bien la distribución estadística clásica.

Distribución de velocidades: 20, 30 y 50 partículas



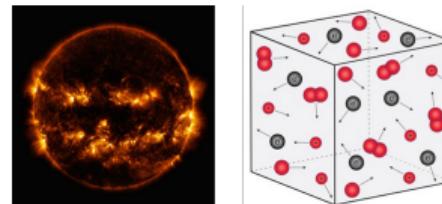
Comparación entre el histograma de velocidades simuladas y la curva teórica de Maxwell-Boltzmann en 2D para 20, 30 y 50 partículas.

Observaciones:

- **Con 20 partículas:** La distribución sigue la forma teórica, aunque presenta cierto desfase y fluctuaciones por la baja estadística.
- **Con 30 partículas:** La curva simulada se ajusta de forma mucho más precisa a la distribución de Maxwell-Boltzmann, reflejando mayor estabilidad estadística.
- **Con 50 partículas:** La forma general se conserva, pero aparecen picos marcados. Estos corresponden a agrupamientos locales, pero están bien alineados con la curva teórica.
- A mayor número de partículas, mejora la representación estadística del sistema, lo que es consistente con la teoría cinética y la ley de los grandes números.

Conclusiones

- La simulación permitió observar la dinámica colectiva de partículas cargadas en 2D, con conservación de la energía total y aproximación a distribuciones estadísticas esperadas.
- Fue necesario usar valores normalizados para masas, cargas y constantes físicas. Esto se debe a que, con valores reales, las trayectorias son demasiado rápidas y pequeñas para resolverse y visualizarse adecuadamente en una simulación computacional simple.
- Aunque los valores de energía y temperatura son elevados, la simulación reproduce correctamente comportamientos físicos como el intercambio energético, la temperatura y la distribución de velocidades.
- Este tipo de modelo puede usarse como aproximación al estudio de plasmas, sistemas de partículas confinadas, o gases altamente energizados, donde las interacciones son dominadas por fuerzas de largo alcance como la electrostática.





GRACIAS