

Simulación en Python: Distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann para un gas ideal

M. Sabogal¹, H. Torres¹, M. Bandera¹, J. Gallardo¹, J. Cardona²

¹ Estudiante del programa de Física, Universidad del Atlántico, Barranquilla-Colombia

² Doctor en ciencias físicas, Docente del programa de Física, Universidad del Atlántico, Barranquilla-Colombia

Resumen

Con el propósito de entender cómo evoluciona un sistema de partículas representativas de un gas ideal, dentro de una caja unidimensional con paredes adiabáticas, se utilizaron herramientas computacionales de python para comprobar que pasado un tiempo, el sistema tiende al equilibrio termodinámico y sus velocidades se ven regidas por la distribución de maxwell-Boltzman.

Palabras clave: adiabático, equilibrio termodinámico, distribución de maxwell-Boltzman

Abstract

With the purpose of understanding how a system of representative particles of an ideal gas evolves, within a one-dimensional box with adiabatic walls, computational tools of python were used to verify that after a while, the system tends to thermodynamic equilibrium and its speeds are ruled by the Maxwell-Boltzman distribution.

Keywords: adiabatic, thermodynamic equilibrium, Maxwell-Boltzman distribution

INTRODUCCIÓN

La distribución de Maxwell-Boltzmann, formulada originalmente por los físicos J.C. Maxwell y L. Boltzmann en el año 1860, es una distribución de probabilidad de las velocidades de las partículas de un gas ideal en un sistema aislado. La importancia de la distribución Gaussiana radica en que permite modelar numerosos fenómenos naturales. Mientras que los mecanismos que subyacen a gran parte de este tipo de fenómenos son desconocidos, por la enorme cantidad de variables incontrolables que en ellos intervienen, el uso del modelo normal puede justificarse asumiendo que cada observación se obtiene como la suma de unas pocas causas independientes.

Sistema de estudio: gas ideal en un entorno aislado

Se propone el problema de un gas ideal contenido en una caja de paredes adiabáticas; estas se moverán de un modo independiente y aleatorio, donde todas las direcciones de las velocidades son equiprobables, donde las colisiones entre partículas son perfectamen-

te elásticas; y se desea comprobar como el sistema llega al equilibrio térmico.

Colisiones entre partículas

El término colisión representa un evento durante el que dos partículas se acercan una a la otra e interactúan mediante fuerzas. Una colisión puede involucrar contacto físico entre dos objetos macroscópicos sin embargo a una escala microscópica estas partículas no interactúan así.

Una colisión elástica entre dos objetos es aquella en la que la energía cinética total (así como la cantidad de movimiento total) del sistema es la misma antes y después de la colisión.

$$K_i = K_f$$

$$\frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} m_1 v_{1f}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{2f}^2 \quad (1)$$

$$P_i = P_f$$

$$m_1 v_1 + m_2 v_2 = m_1 v_{1f} + m_2 v_{2f} \quad (2)$$

desarrollando el sistema de ecuaciones generado por 1 y 2 se obtiene la expresion para las velocidades finales para cada masa:

$$v_{1f} = \frac{v_1(m_1 - m_2) + 2v_2m_2}{m_1 + m_2} \quad (3)$$

$$v_{2f} = \frac{v_2(m_2 - m_1) + 2v_1m_1}{m_1 + m_2} \quad (4)$$

Las colisiones verdaderamente elásticas no transforman su energía cinética a otro tipo de energía, y se presentan entre partículas atómicas y subatómicas.

Principios básicos de la termodinámica

A escala microscópica, donde la materia se trata como un conjunto de moléculas. Aplicar las leyes de movimiento de Newton de manera estadística a un conjunto de partículas proporciona una descripción razonable de los procesos termodinámicos.

Dos cuerpos a diferentes temperaturas que interactúan entre sí y no con el ambiente, transferirán energía entre ellos. En el momento que no haya más intercambio de energía se dice que el sistema alcanzó el equilibrio térmico; entonces podemos expresar lo siguiente:

Si los objetos A y B están por separado en equilibrio térmico con un tercer objeto C, en tal caso A y B están en equilibrio térmico entre sí (ley cero).

La primera ley de la termodinámica establece que, la energía interna de cualquier sistema termodinámico depende exclusivamente de su estado. El cambio de energía interna durante cualquier proceso depende únicamente de los estados inicial y final, no de la trayectoria seguida.

La segunda ley de la termodinámica nos dice que ningún proceso cíclico puede convertir calor totalmente en trabajo, un sistema aislado tiende al desorden y la entropía es una manera de cuantificar este desorden, que es en pocas palabras la energía que no puede ser reutilizada. La temperatura de un gas ideal va a depender directamente de la energía cinética, por lo tanto estará en función de la velocidad promedio al

cuadrado de las partículas como se muestra en la siguiente ecuación:

$$T = \frac{1}{3K_B} (\overline{mv^2}) \quad (5)$$

El movimiento de las moléculas que conforman un gas es extremadamente caótico, cualquier partícula individual choca con otra a una rapidez enorme, es muy complicado modelar un sistema caótico de manera analítica sin embargo, en 1860, James Clerk Maxwell (1831–1879) obtuvo una expresión que describe la distribución de magnitudes de velocidad moleculares en una forma muy definida, llamada *función de distribución de rapidez de Maxwell–Boltzmann*:

$$N_v = 4\pi N \left(\frac{m_0}{2\pi K_B T} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{m_0 v^2}{2K_B T}} \quad (6)$$

Solución computacional: Simulación

- Modelamiento del sistema y condiciones de contorno

Con el fin de comprobar la distribución de Maxwell-Boltzmann para un gas ideal, se considero una caja unidimensional de longitud [L] con paredes adiabáticas, elásticas y lisas, en la cual se ubicaron N partículas de un gas monoatómico con posiciones iniciales repartidas uniformemente a través de ésta, a cada partícula se le asigno una velocidad aleatoria en un rango entre [-Vmax,Vmax] siendo Vmax la rapidez máxima con la que se puede desplazar cualquiera de las partículas del gas. Al estar confinadas en una caja unidimensional y al ser un sistema aislado, éste carece de fuerzas externas, por ende el movimiento de las partículas será uniformemente rectilíneo, no se tuvo en consideración rotaciones ni vibraciones, solo traslaciones; las colisiones se consideraron perfectamente elásticas, es decir, siempre se conserva el momento durante cada colisión y también se conservara la energía cinética, teóricamente este sistema sigue la ley cero de la termodinámica iniciando en desequilibrio y llegando a un estado de equilibrio termodinámico después de cierto tiempo, y a la segunda ley pues el desorden del sistema aumenta con el paso del tiempo esto implica que la energía libre del sistema para realizar un trabajo disminuye.

```
#CONDICIONES INICIALES
inbox=[i,f]
pos=np.linspace(inbox[0]+radio,inbox[1]-radio,N)
v0=np.array([vmax*np.random.uniform(-1,1) for i in range(N)])
m=np.array([m0 for i in range(N)])
for i in range(n):
    m[np.random.randint(N-1)]= m0*(1 + np.random.uniform(-0.5,1))
```

Figura 1: Condiciones iniciales, código en Python

Por simplicidad del modelo, se consideraron dos puntos fijos en una recta los cuales representan los extremos de la caja, confiando el movimiento de las partículas solo dentro de este intervalo, se le doto a cada partícula del mismo radio $[r]$ y masa $[m_o]$, que facilitara la interacción entre ellas. El sistema evoluciona en el tiempo a razón de un $[dt]$ específico, esta razón esta tomada estratégica mente para describir el movimiento de las partículas de manera casi infinitesimal y evitar que éstas puedan recorrer una distancia mayor a su radio en ese dt , condicionando a que éstas solo puedan interaccionar con sus vecinas. De manera que el $[dt]$ dependerá de la velocidad máxima asignada al sistema y del radio de las partículas.

-Interacción entre partícula-partícula

Posteriormente a cada dt , se evalúa si en este intervalo de tiempo las partículas interactuaron con sus vecinas o con la pared; para poder lograr tener la mayor control posible de estas colisiones, se seccionaron las evaluaciones en tres partes: la primera corresponde a la posible interacción de la primera partícula con la segunda o con la pared, la segunda parte son las evaluaciones genéricas de colisiones entre partículas, desde la segunda hasta la partícula $N-1$, y por ultimo la interacción de la partícula N con la $N-1$ o con la pared de la caja.

La manera de evaluar si ha ocurrido una colisión entre partículas, es que si la diferencia entre las posiciones finales de las dos partículas es menor a dos veces su radio, esto implica que han colisionado. (foto del código o diagrama). Debido a que los radios de las partículas en las colisiones han de interceptarse, se condicionó que se le adicionara la mitad de la distancia que han de estar superpuestas a la partícula con mayor posición y que se le sustrajera la misma cantidad a la partícula anterior, de manera que estas se encontraran separadas por una distancia de 2 veces su radio, es decir, que estas se encuentren las posiciones reales en el momento exacto después de la colisión.

```
if np.absolute(x[1]-x[0]) < 2*radio:
    v[0]=( v[0]*(m[0]-m[1]) + 2*v[1]*m[1] )/(m[1]+m[0])
    v[1]=( v[1]*(m[1]-m[0]) + 2*v[0]*m[0] )/(m[1]+m[0])

    if v[1]>0 and v[0]<0:
        c=np.absolute(x[1]-x[0])
        x[0]= x[0] - np.absolute(2*radio-c)/2
        x[1]= x[1] + np.absolute(2*radio-c)/2

    if v[1]>0 and v[0]>0:
        c=np.absolute(x[1]-x[0])
        x[0]= x[0]
        x[1]= x[1] + np.absolute(2*radio-c)

    if v[1]<0 and v[0]<0:
        c=np.absolute(x[1]-x[0])
        x[0]= x[0] - np.absolute(2*radio-c)
        x[1]= x[1]
```

Figura 2: Interacción entre la partícula 1 y 2. De igual manera para las partículas i y $i + 1$

Al ser las colisiones perfectamente elásticas y con masas iguales, el cambio de momento será igual para cada una de las partículas, imposibilitando que se llegue a la distribución de velocidades buscada en nuestro sistema ideal; debido a que no hay un mediador que permitiera el cambio de la magnitud de las velocidades de las partículas, solo una intercambio de estas; por tal motivo se añadió de manera aleatoria una cantidad n despreciable de partículas con masas aleatorias diferentes, entre 0,5 veces y dos veces la masa uniforme de las partículas del gas, que permitiera un cambio en la magnitud de la velocidad de las partículas descrita por (3) y (4), cuando éstas colisionen con otras partículas. Al ser ésta cantidad n despreciable con respecto al numero total de partículas (N), el sistema se puede considerar aun como un gas ideal.

-Interacción entre partícula-pared

Una partícula colisiona con la pared superior si su posición es mayor al de ésta, y colisiona con el pared inferior si su posición es menor a este extremo, en cada caso se cambia la posición de la partícula involucrada por dos veces el extremo menos la posición anterior de la partícula, de manera que se simule que la partícula reboto de manera elástica en la pared, en estas colisiones solo se cambiara el sentido de la velocidad de la partícula, debido a que se considera que ésta no genera ningún cambio en le momentum de la pared, puesto que la partícula es insignificante ante ésta.

```

if x[0] <= inbox[0]:
    x[0] = 2*inbox[0] - x[0]
    v[0] = -v[0]

if x[N-1] >= inbox[1]:
    x[N-1] = 2*inbox[1] - x[N-1]
    v[N-1] = -v[N-1]

```

Figura 3: Interacciones de la primera y ultima partícula con la pared.

-Interpretación física y resultados

Al interior de una caja adiabatica unidimensional, solo los pares de partículas logran interactuar entre si. Esto implica, que es muy poco probable los choques entre tres o más partículas simultáneamente a un cierto dt . Es posible conocer la energía cinética inicial del sistema, ya que la masa y la velocidad inicial de cada una de las partículas es un parámetro conocido. sabiendo esto, utilizando (1) y encontrando la velocidad media, obtenemos la energía cinética inicial del sistema.

Al dejar evolucionar el sistema durante un largo tiempo, se puede observar una disminución de la energía cinética de las partículas, puesto que las partículas del gas contenidas en la caja, inician con altas velocidades, y al chocar múltiples veces durante un largo tiempo, esto ocasiona una disminución en la magnitud de las velocidades de las partículas. Al graficar estas magnitudes de velocidades finales en un histograma, se puede evidenciar la termalización del sistema, **concordado con lo expresado por la ley cero de la termodinámica**, siendo su distribución de velocidades una distribución normal, que cumple con lo enunciado por Maxwell en su expresión de la distribución de velocidades (6).

En un principio a la termodinámica no le interesa el tiempo para observar un proceso, solo dice que pasara de un estado a otro, sin embargo en la simulación es necesario tener un tiempo mínimo para que el sistema termalice, si el intervalo de tiempo es muy corto, las partículas que conforman el gas aun estarán aun muy excitadas, es decir, que no se ha alcanzado un estado de equilibrio, por el contrario si se toma un tiempo muy largo el sistema se termalizara, pero implicara un mayor tiempo de calculo por parte de la computadora y ademas los procesadores de estas tienen un numero definido de operaciones que puede realizar de manera óptima.

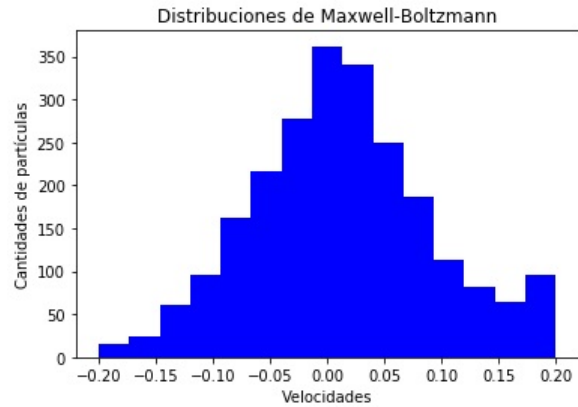


Figura 4: Distribución de velocidades de las partículas, del sistema simulado: con $N = 1000$, tres partículas con masas diferentes, $V_{max} = 0,2$, radio de las partículas $r = 0,15$, longitud de la caja $L = 700$ unidades, en 600 iteraciones repetidas 150 veces.

Para establecer el mejor gráfico del histograma que representa la distribución de velocidades del sistema estudiado, se realizó un promedio de los cálculos, mediante esta operación se logra un aumento en la precisión y exactitud de la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann, como se aprecia en la figura 4.

CONCLUSIÓN

Mediante las herramientas computacionales de Python, se pudo analizar el comportamiento de un gas ideal de N partículas confinadas en una caja unidimensional con paredes adiabaticas, comprobando que el sistema tiende al equilibrio termodinámico (ley cero de la termodinámica), y su distribución de velocidades concuerda con lo enunciado por Maxwell (distribución de Maxwell-Boltzmann), esto se logró comparando la distribución de velocidades iniciales, totalmente estocásticas, con la distribución final de velocidades obtenidas a través de simulaciones.

Referencias

- [1] Rojas, J. E., Martínez, R., y Morales, M. A. (2014). Mecánica 3d: python y el algoritmo de Verlet. Revista mexicana de física E, 60(1), 51-65.
- [2] Alonso, M., y Finn, E. J. (2000). Física, vol. I. Fondo educativo interamericano.

[3] Serway, R. A., Jewett, J. W., Hernández, A. E. G., y López, E. F. (2005). Física para ciencias e ingeniería (Vol. 6). Thomson.