Estudio de las propiedades dinámicas del sistema simulado: propiedades de la distribución de la velocidad o coeficiente de difusión.
Se estudian las diferentes propiedades dinámicas en el archivo `dynamic.py`

Distribuciones de velocidades

Obtenemos un histograma de la media del módulo de las velocidades a lo largo de la simulación ya estudiada de 25 discos duros de radio unidad inicializados de forma aleatoria que colisionan 250 veces. Este histograma lo cotejamos con la distribución teórica del módulo de la velocidad en el caso de un sistema isotrópico como en el que nos escontramos, la distribución de Maxwell-Boltzmann:

$$f(v) = \frac{mv}{k_B T} \exp\left(\frac{mv^2}{2\pi k_B T}\right) \tag{1}$$

donde en nuestra simulación hemos tomado la masa $m = 1$ y la constante de Boltzmann $k_B = 1$.

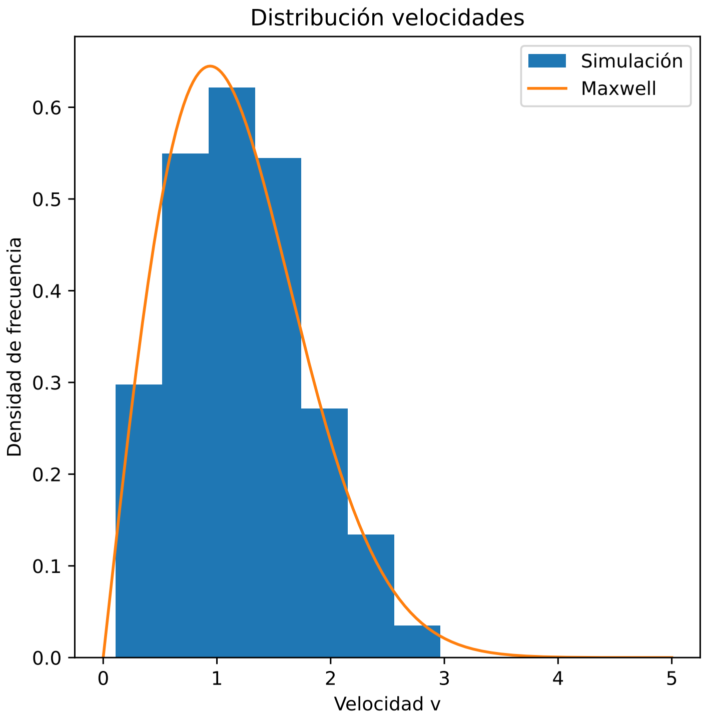

Figura 1: Distribución del módulo de la velocidad media de las partículas frente junto a la distribucón de Maxwell-Boltzmann.

Se aprecia la gran concordancia entre el resultado simulado y el teórico.

Coeficiente de difusión

Tras cargar los datos relativos a las posiciones de las partículas, generamos un vector de Δt donde calcularemos el desplazamiento cuadrático medio (MSD), con el fin de mediante mínimos cuadrados obtener el coeficiente de difusión D

$$MSD = 2nDt \tag{2}$$

donde n es el número de dimensiones de la simulación -en nuestro caso 2- y el MSD se logra de

$$MSD = \frac{1}{N}\langle\sum_{i=1}^{N}\left|x^{(i)}(t) - x^{(i)}(0)\right|^2\rangle \tag{3}$$

que calcularemos realizando un promedio a partir de ventanas temporales

$$\langle MSD(k)\rangle = \frac{1}{N_t}\sum_{j=1}^{N_t} MSD_j(k) \tag{4}$$

donde N_t es el número de ventanas temporales utilizadas, y k el diferencial temporal para el que se calcula.

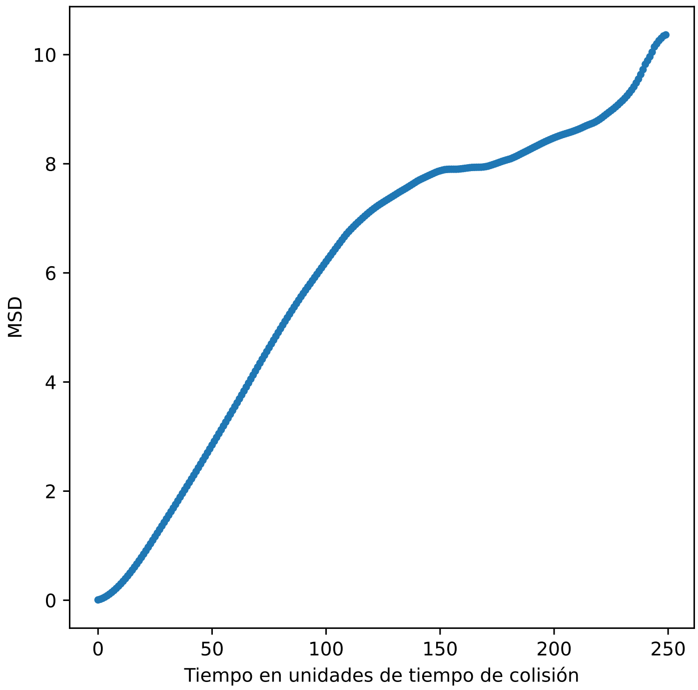

Figura 2: Desplazamiento cuadrático medio frente al diferencial temporal considerado en unidades de tiempo de colisión.

Aplicamos regresión mediante mínimos cuadrados descartando la zona balística, que sería el primer paso temporal, que para estar más seguros aumentamos hasta los 10 primeros pasos; así como la zona en la que comienza a estabilizarse acabando el proceso de difusión.

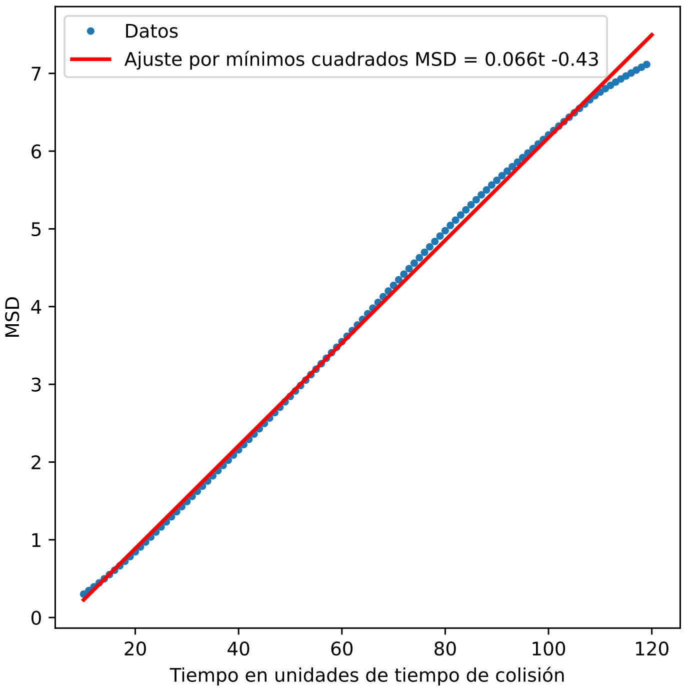

Figura 3: Ajuste por mínimos cuadrados al desplazamiento cuadrático medio para conseguir el coeficiente de difusión D.

Logramos una pendiente de valor 0.066 y una ordenada en el origen con valor -0.43, con lo que el coeficiente de difusión de nuestro sistema será

$$D = \frac{\text{pendiente}}{4},$$

es decir $D = 0{,}017$. El ajuste tiene por coeficiente de determinación $R^2 = 0{,}998$, y los intervalos al 95 % de la pendiente y la ordenada en el origen son:

$$\text{Pendiente: } 0{,}0661 \pm 0{,}0{,}0005 \tag{5}$$

$$\text{Ordenada: } -0{,}43 \pm 0{,}0{,}04 \tag{6}$$