

Simulación de Dinámica Molecular de Esferas en 2D

Santiago Suárez

Eric Arciniegas

Octubre 2025

1 Objetivos

El objetivo de este trabajo es simular la dinámica de un conjunto de partículas (esferas) dentro de una caja 2D, analizar:

- Trayectorias de las partículas.
- Distribución de velocidades y comparación cualitativa con la distribución de Maxwell–Boltzmann.
- Presión ejercida sobre las paredes y su relación con la densidad.
- Conservación de la energía total y contraste entre gas diluido y denso.

2 Método Numérico

Se implementó un simulador basado en Programación Orientada a Objetos (C++), con las siguientes características:

- Integración de movimiento mediante el método de Verlet explícito.
- Manejo de colisiones elásticas entre esferas.
- Rebote elástico de partículas con las paredes de la caja.
- Cálculo de presión a partir de la fuerza ejercida sobre las paredes.
- Generación de animaciones de trayectorias y de histogramas de velocidades usando Gnuplot.

3 Validación Básica

- Se verificó que la energía total se conserva a lo largo de la simulación.
- La presión promedio aumenta y se estabiliza con el número de partículas, concordando con la teoría de gases ideales en 2D.
- El histograma de velocidades muestra una distribución similar a la Maxwell–Boltzmann, especialmente al aumentar el número de partículas.

4 Experimentos

4.1 Trayectorias de Partículas

Se simularon sistemas con diferente número de partículas y densidades. **Figura 1:** Trayectorias de las partículas en una caja 2D.

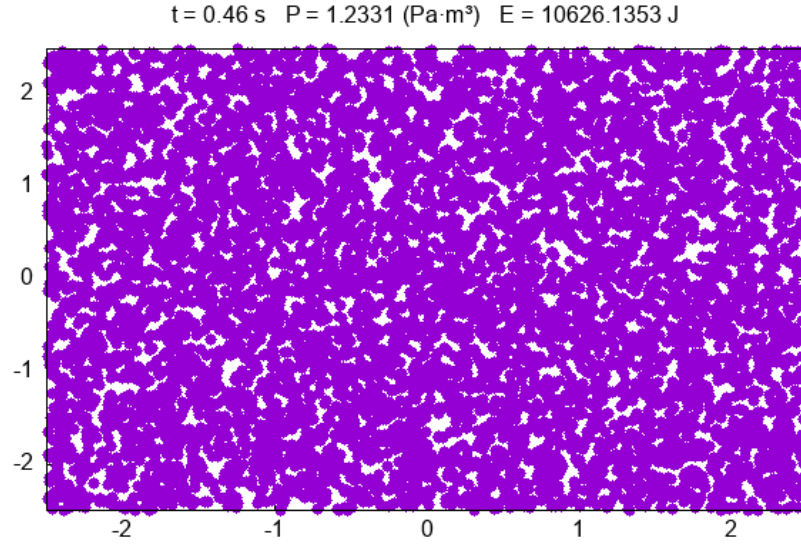


Figure 1: Trayectorias de las partículas en la caja, $n=7000$.

4.2 Distribución de Velocidades

Se construyeron histogramas de magnitud de velocidades $|\mathbf{v}|$ para distintos números de partículas. **Figura 2:** Histograma de $|\mathbf{v}|$ comparado cualitativamente con Maxwell-Boltzmann.

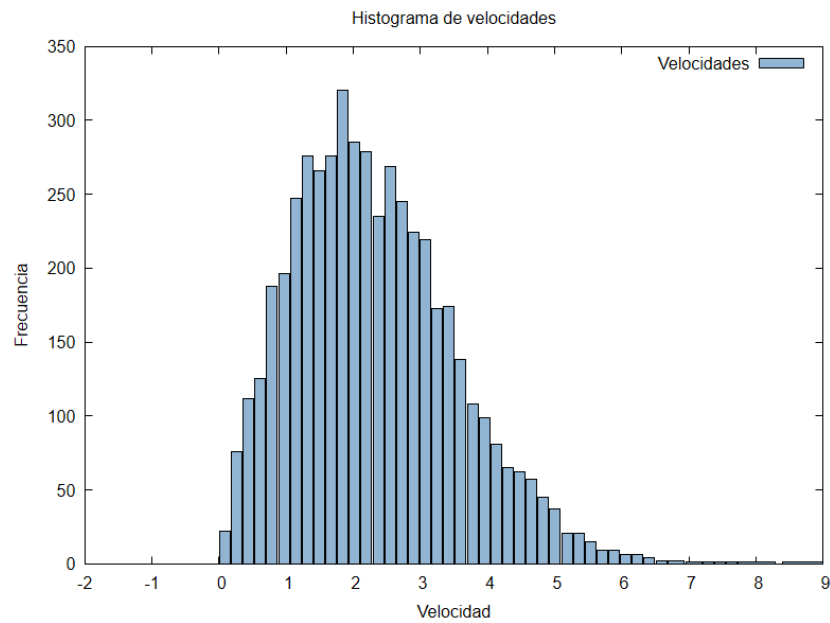


Figure 2: Distribución de velocidades para $n=7000$

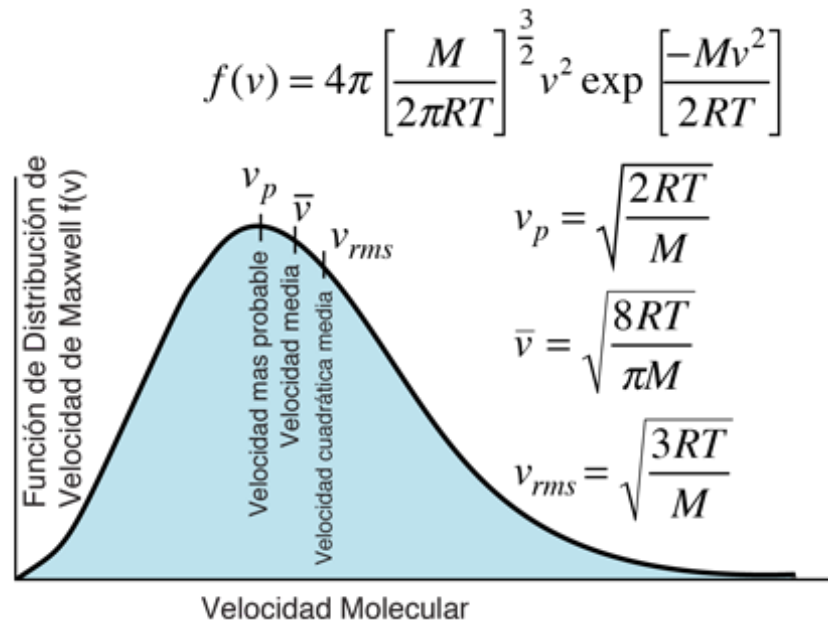


Figure 3: Distribución de Maxwell-boltzman

4.3 Presión y Choques

Se registró la presión promedio en la caja y su evolución temporal. **Figura 3:** Presión vs. tiempo para gas diluido y gas denso.

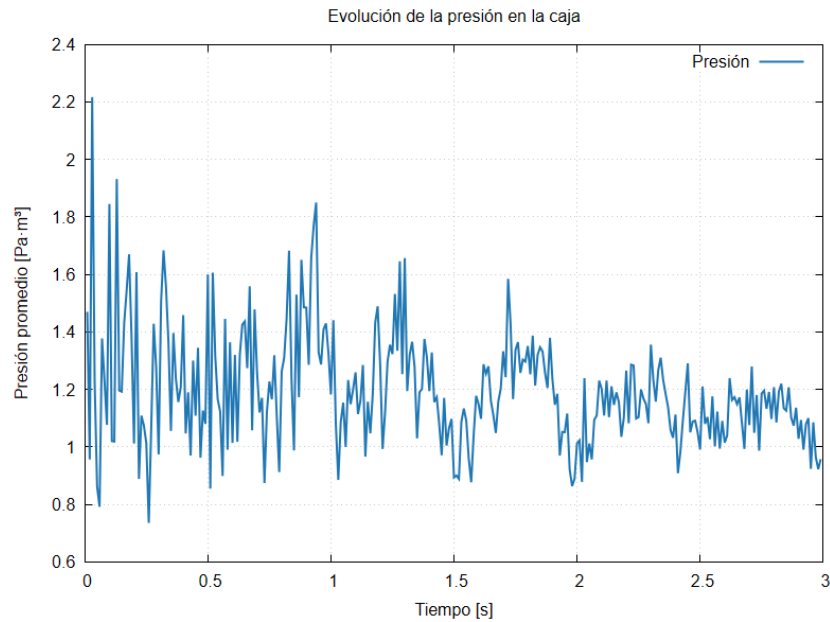


Figure 4: presión para $n=1000$.

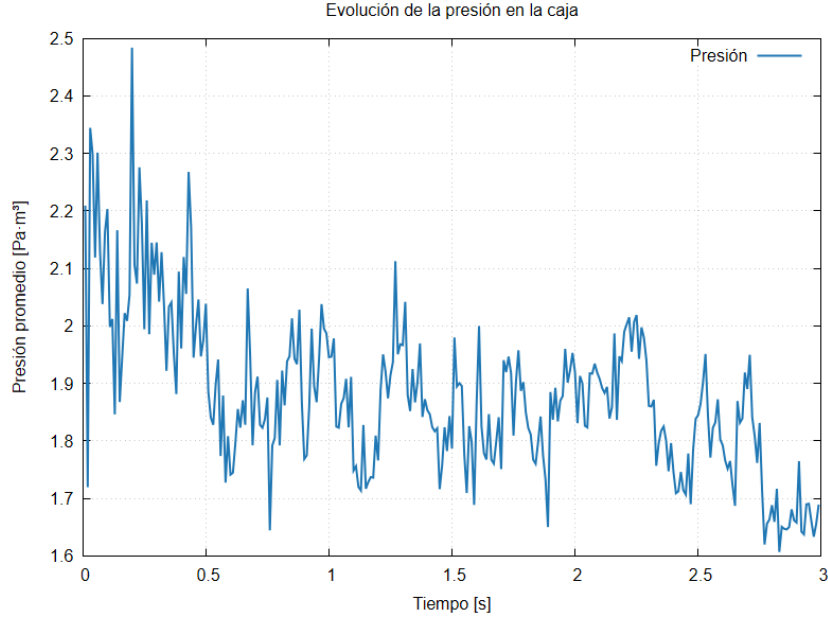


Figure 5: presión para $n=7000$.

5 Discusión

- Los histogramas muestran que el sistema tiende a una distribución de velocidades similar a Maxwell–Boltzmann, confirmando el comportamiento estadístico esperado.
- La presión se mantiene más estable a medida que aumenta el número de partículas, reflejando un mejor promedio estadístico.
- La energía total se conserva correctamente, validando la implementación de colisiones y rebotes.
- Al comparar gas diluido vs. denso, se observa que en gases densos los choques son más frecuentes y la presión es mayor, coherente con la teoría cinética.

6 Conclusiones

- El simulador reproduce correctamente la dinámica de partículas en 2D con colisiones y rebotes.
- La conservación de energía y la distribución de velocidades confirman la validez cualitativa de los resultados.
- La presión promedio se estabiliza y aumenta con la densidad, reflejando la relación esperada entre número de partículas, temperatura y presión.
- Este estudio permite observar diferencias claras entre gases diluidos y densos, así como la aproximación a distribuciones estadísticas como Maxwell–Boltzmann.