

FISICA COMPUTACIONAL

PROYECTO 3



**VNiVERSIDAD
D SALAMANCA**

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

Emilio Nieto Morales

2024-2025

Índice

1. Introducción	2
2. Subproyecto 1	2
2.1. Calcular Z_r	2
2.2. Representar la tasa de aceptación de movimiento frente al paso MC.	2
2.3. Trayectoria de la partícula	3
3. Subproyecto 2	4
3.1. Histogramas de las distribuciones	5
3.2. Representación de casos I y II frente al resultado teórico.	6
3.3. Representación caso III frente al caso teórico	6
4. Subproyecto 3	7
4.1. Casos IV, V, VI, VII frente al teórico	7
5. Subproyecto 4	8
5.1. Simulación VI para gas ideal y esferas duras.	8
5.2. ¿Por qué las longitudes tienen esos valores?	10
5.3. Distribuciones radiales en casos VIII, IX, X	10

1. Introducción

En este programa nuestro objetivo final será la simulación del movimiento de un conjunto de partículas, siguiendo el modelo de esferas duras (no existe fuerzas atractivas entre las partículas, la única condición es que no se pueden solapar). Estas partículas se encontrarán dentro de un cilindro infinitamente largo, de radio 3 en unidades del diametro de las partículas ($D_{part} = 1$). El proyecto se dividirá en subproyectos, donde en cada siguiente subproyecto iremos añadiendo condiciones que nos acerquen más al objetivo final del proyecto.

2. Subproyecto 1

En este subproyecto simularemos el movimiento de una partícula dentro del cilindro. Para ello usaremos una simulación montecarlo y trabajaremos en un colectividad canónica. En esta colectividad, la probabilidad de encontrar la partícula en una posición \vec{r} viene dada por:

$$\rho(\vec{r})d\vec{r} = \frac{1}{Z_r} e^{-\beta V(\vec{r})} d\vec{r} \quad (1)$$

donde la Z_r es la constante de normalización:

$$Z_r = \int e^{-\beta V(\vec{r})} d\vec{r} \quad (2)$$

En nuestro sistema el potencial es tal:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \text{si } r < R_c - R \\ \infty, & \text{si } r > R_c - R \end{cases} \quad (3)$$

2.1. Calcular Z_r

Con este potencial Z_r toma la expresión siguiente:

$$Z_r = \int e^{-\beta V(\vec{r})} d\vec{r} = 4\pi \int_0^{R_{cil}-R} r dr = \frac{4\pi}{3} (R_{cil} - R)^3 = 65,45 \quad (4)$$

donde hemos utilizado que $R_{cil} = 3$ y $R = 0,5$.

2.2. Representar la tasa de aceptación de movimiento frente al paso MC.

Usaremos unos pasos $MC = \{0,1,0,3,0,5,0,7,0,9\}$, datos del cilindro de $L_{cil} = R_{cil} = 3$, y un número de intentos montecarlo $NMC = 10^4$. La tasa de aceptación viene dada por $acc = \frac{\text{movimientos aceptados}}{N_{part} * NMC}$. Los resultados obtenidos son razonables, ya que un paso de montecarlo mayor hace que la partícula se mueva más lejos de la posición anterior, haciendo más posible que la partícula se salga del cilindro y bajando la tasa de aceptación. La gráfica es la siguiente:

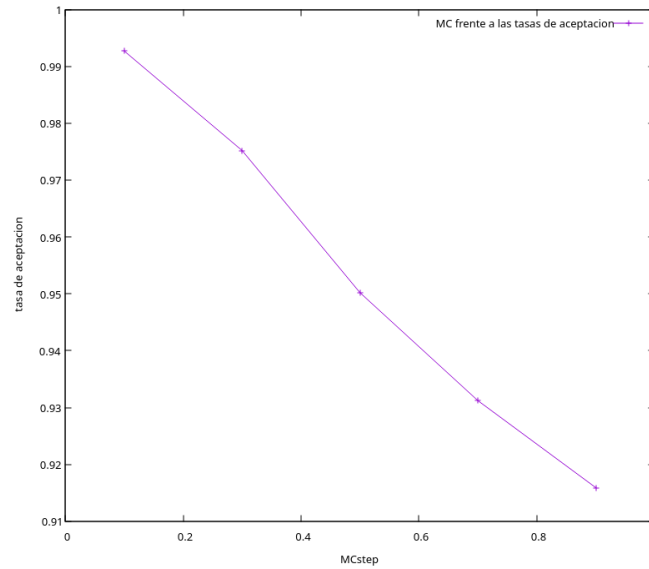


Figura 1: Representación de la tasa de aceptación frente a los pasos de la simulación montecarlo.

2.3. Trayectoria de la partícula

Para obtener la trayectoria de una partícula, vamos haciendo intentos de montecarlo, donde la partícula se moverá a una posición aleatoria. Si esta nueva posición esta dentro del volumen del cilindro permitido, aceptamos el movimiento, si no lo rechazamos (la tasa de aceptación representa el número de intentos que se aceptan frente al número de intentos totales). Si se acepta el movimiento, escribimos la posición final en un fichero, para posteriormente representarlo con GNU PLOT con el comando "splot" que sirve para representar en 3D.

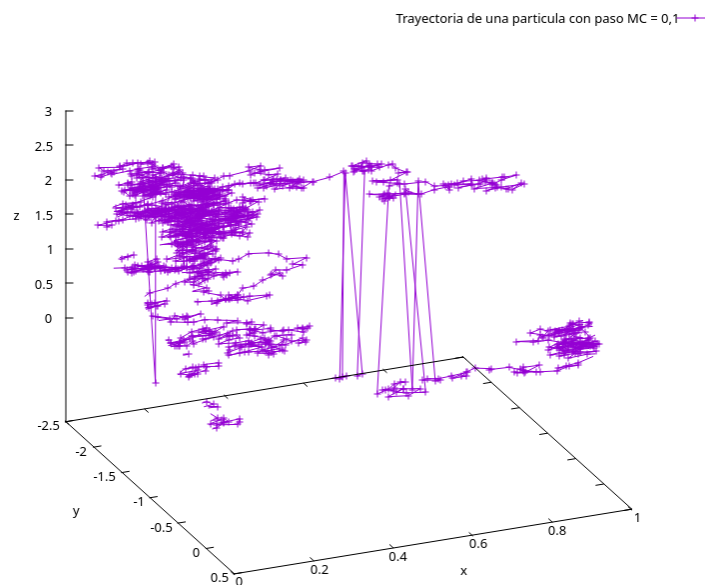


Figura 2: Para esta simulación de trayectoria hemos usado un paso de montecarlo de 0.1

3. Subproyecto 2

En esta parte del proyecto empezaremos a tomar medidas de la distribución $\rho(r)$ y $\rho(z)$. Además, entre medida y medida realizaremos un cierto número de intentos de MC (montecarlo) para que las medidas de las posiciones de la partícula estén lo menos correlacionadas posibles. Otro punto a destacar es que como queremos que el sistema esté en equilibrio, hacemos un cierto número de intentos de MC antes de iniciar el proceso de medida. Estos intentos los agruparemos en una subrutina del programa principal llamada *Pre calentamiento*. En este subproyecto vamos a eliminar la obtención de las trayectorias, ya que tardaría bastante y no las necesitamos para nada.

Además, tendremos que definir unas nuevas variables, que leeremos del fichero "*datos_in2.txt*", que son $N_{med} = 10^5$, N_{binr} y N_{binz} donde estas dos últimas son el número de subdivisiones que haremos del volumen del cilindro para obtener las distribuciones.

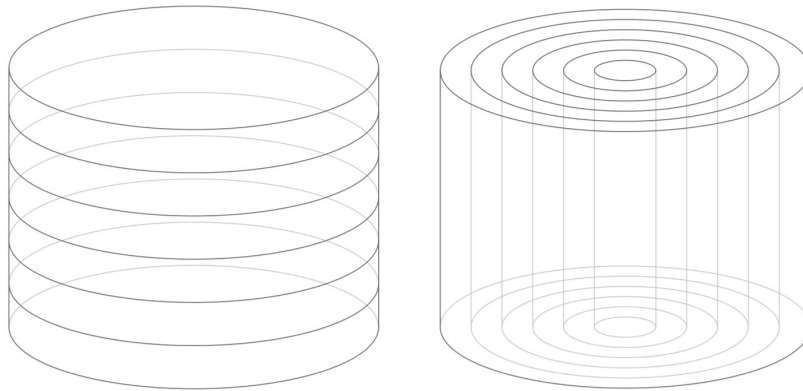


Figura 3: Forma de tomar los bins para $\rho(r)$ (derecha) y $\rho(z)$ (izquierda).

3.1. Histogramas de las distribuciones

Para generar los histogramas, medimos en que bin (ya sea de r o z , ya que se hace de la misma manera). La medida se realiza después de un cierto número de intentos MC, después se vuelven a hacer los intentos, se mide, más intentos... Una vez obtenidas las distribuciones de la posición de la partícula, las tenemos que normalizar al número de partículas. Como solo tenemos el potencial externo (0 o ∞), en las dos distribuciones cabe esperar un valor constante que sea igual a $\rho = N_{part}/V_{cil}$, donde V_{cil} representa el volumen accesible de los centros de las partículas. En este caso solo tenemos una partícula, por lo que $\rho \approx 0,017$.

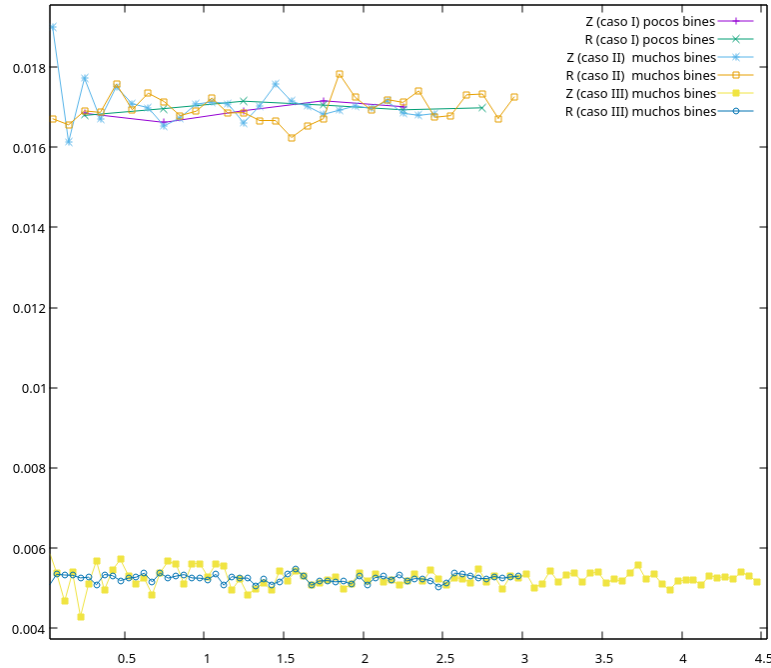


Figura 4: Gráfica de las tres simulaciones (casos I, II, III) para $\rho(z)$ y $\rho(r)$.

En el caso de la simulación III, como el radio del cilindro lo aumentamos a 5. El valor esperado de la distribución, sigue teniendo que ser constante, como vemos, pero como el volumen aumenta este valor de ρ disminuye.

3.2. Representación de casos I y II frente al resultado teórico.

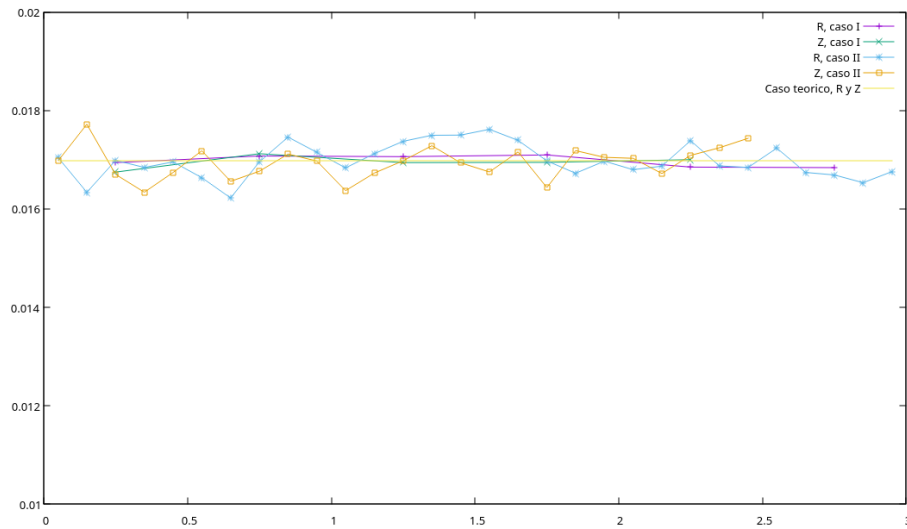


Figura 5: Resultado teórico (constante, como ya comentamos) y $\rho(r)$, $\rho(z)$ de ambos casos.

Como podemos observar, las distribuciones son aproximadamente constantes, con ruido obviamente, pero constantes al valor teórico esperado. Si nos fijamos, vemos como el caso I tiene menos puntos que el caso II. Esto es así porque el número de bins que hay en el caso II es 5 veces mayor que en el caso I, lo que provoca que haya más ruido en este.

3.3. Representación caso III frente al caso teórico

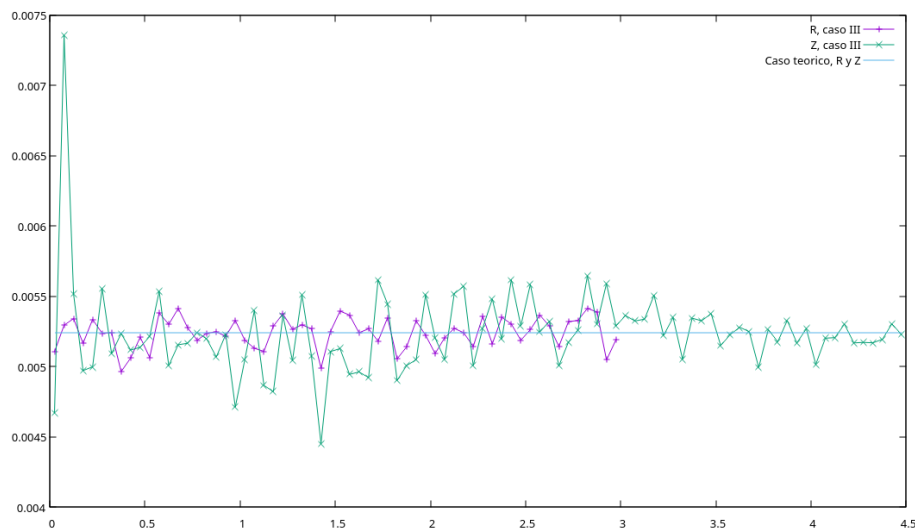


Figura 6: $\rho(z)$ en morado y $\rho(r)$ en verde. El caso teórico es constante, como cabía esperar.

En esta gráfica observamos como la distribución radial tiene un mayor alcance (hasta 4.5) ya que se ha seleccionado un radio del cilindro de 5. Además se puede observar como la tendencia de ruido en esta

distribución es decreciente con respecto a la distribución en Z que el ruido se mantiene mas o menos igual. Esto es así porque el volumen de los bins de Z es constante, mientras que los bins radiales, como lo que varía es la r , el volumen de los bins más alejados del centro es mayor que los centrales. Esto hace que las partículas se hayan con una mayor probabilidad en los más alejados (con más volumen), haciendo que se mida la partícula un mayor numero de veces en estos que en los centrales y por lo tanto la distribución se asemeje más a la teórica.

Otro punto a destacar es que entorno al 0, en la distribución radial hay un pico muy pronunciado. Esto se debe a que la posición inicial de la partícula es $(0,0,z)$ por lo que si no hemos realizado un precalentamiento lo suficientemente largo, es muy posible que a la hora de medir, la partícula esté rondando esta posición y por eso hay tantas medidas cercanas a 0.

4. Subproyecto 3

En esta parte del proyecto, lo que hacemos es añadir más partículas, que no interaccionan entre ellas y pueden solaparse. lo único que no permitimos es que se salgan del cilindro ni se solapen con este. En este subproyecto, al trabajar con muchas partículas, cada intento de montecarlo será N_{part} intentos de montecarlo, ya que los intentos de movimientos se hacen sobre partículas aleatorias. De esta forma conseguimos que en promedio cada partícula se haya tenido un intento de movimiento.

4.1. Casos IV, V, VI, VII frente al teórico

Los casos vienen dados por

	IV	V	VI	VII
<code>Npart</code>	5	20	35	50
<code>Rcil</code>	4	4	4	4
<code>Lcil</code>	5	5	5	5
<code>NMC</code>	10^6	10^6	10^6	10^6
<code>Nmed</code>	10^5	10^5	10^5	10^5
<code>MCstep</code>	*	*	*	*
<code>Nbinr</code>	28	28	28	28
<code>Nbinz</code>	40	40	40	40

Figura 7: Casos subproyecto 3.

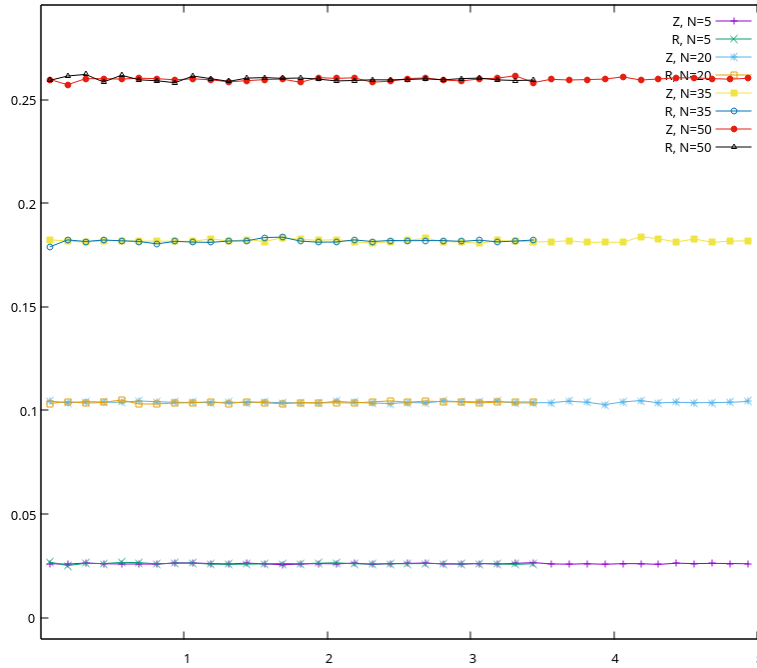


Figura 8: Distribuciones radial y en altura de los distintos casos.

Como se observa en la gráfica, las distribuciones radiales y en altura de los casos IV, V, VI y VII son prácticamente constantes, lo cual concuerda con el resultado teórico, ya que las partículas ni se repelen ni se atraen. Además el resultado teórico de cada caso viene dado $\rho = N_{part}/V_{cil}$. Como vemos, para cada caso tenemos un número de partículas distinto, mientras que el volumen del cilindro es constante en todos, de tal forma que el resultado teórico varía según el caso, siendo el menor valor el caso IV y el mayor el VII por tener más partículas.

5. Subproyecto 4

En esta última parte, implementamos que las partículas dentro del cilindro tengan un potencial de repulsión (seguimos con la condición de que no se atraen). Este potencial será el del modelo de esferas duras (HS), según el cual las partículas son esferas de radio R que no pueden solaparse entre sí. Este modelo define un potencial que depende solo de las distancias entre partículas de la siguiente manera.

$$V(r_{ij}) = \begin{cases} \infty & \text{si } r_{ij} < \sigma \\ 0 & \text{si resto casos} \end{cases} \quad (5)$$

Este potencial nos dice que cualquier intento de movimiento que lleve a las partículas a solaparse o saque a las partículas del volumen del cilindro permitido, sea rechazado.

5.1. Simulación VI para gas ideal y esferas duras.

En esta pregunta se nos pide obtener un gráfica del caso VI para el modelo de gas ideal (no hay interacción entre las partículas) y el de esferas duras.

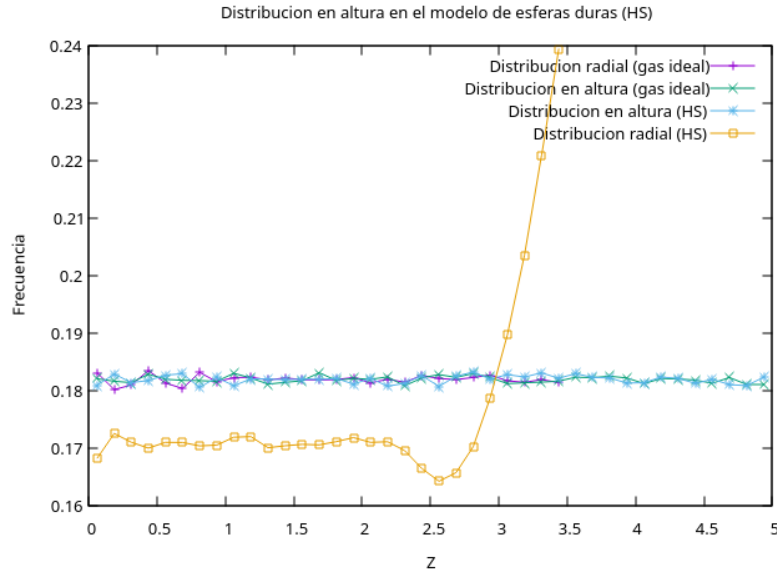


Figura 9: Gráfica del caso VI para ambos modelos.

Como se puede observar en la gráfica, para el modelo de gas ideal, las distribuciones radiales y en altura son prácticamente constante (con ruido) e iguales al valor teórico. Esto es de esperar, ya que como comentamos en el subproyecto 2, al no haber potencial las partículas se distribuirán uniformemente, dando en cada bin un número de partículas prácticamente uniforme.

Lo mismo pasa con la distribución en altura del modelo de esferas duras, ya que esta distribución tiene los tamaños de los bins todos iguales, lo que hace que las partículas al no poder solaparse, se distribuyan uniformemente.

Esto no pasa con la distribución radial, ya que el volumen de los bins no son iguales, aumentan al alejarse los bins del centro. Esto hace que como las partículas son esferas duras que no pueden solaparse, en el centro como hay menos volumen, cabrán menos partículas a la vez, mientras que en los bins con R más grande, hay más volumen hay más espacio para que las partículas se puedan mover. Por eso en la gráfica con el modelo de esferas duras, la distribución radial aumenta con el radio.

5.2. ¿Por qué las longitudes tienen esos valores?

Los casos para las simulaciones de este subproyecto vienen dadas por

	VIII	IX	X
<code>Npart</code>	40	40	40
<code>Rcil</code>	1.8	2.0	2.2
<code>Lcil</code>	10.0453	7.5451	5.8742
<code>NMC</code>	10^6	10^6	10^6
<code>Nmed</code>	10^5	10^5	10^5
<code>MCstep</code>	0.2	0.2	0.2
<code>Nbinr</code>	26	30	34
<code>Nbinz</code>	30	30	30

Figura 10: Casos para la simulación del modelo de esferas duras.

A la vista de los casos, cabe preguntarse el porqué las longitudes del cilindro tienen esos valores. Esto es así, para que los volúmenes accesibles de los cilindros de cada caso sean los mismos y por lo tanto todas las distribuciones estén normalizadas al mismo volumen.

5.3. Distribuciones radiales en casos VIII, IX, X

A continuación se expone la gráfica de las distribuciones radiales de los casos presentados.

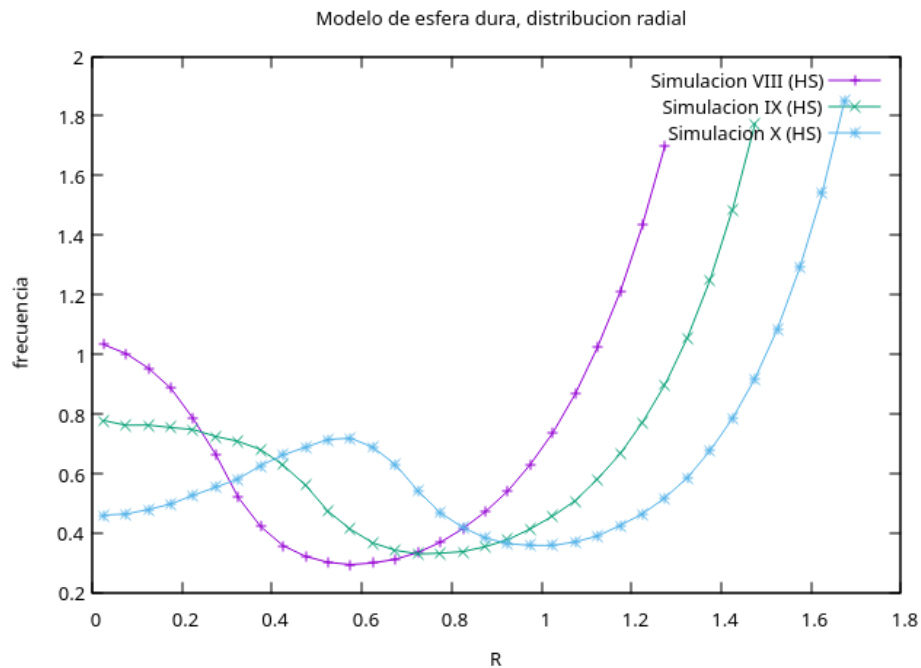


Figura 11: Distribuciones radiales de los casos en el modelo de esferas duras.