

Reporte de resultados durante el semestre

Francisco Vazquez-Tavares

June 11, 2025

Resumen de actividades

Durante el semestre se trabajó principalmente en realizar correcciones al protocolo de simulaciones y realizar simulaciones de prueba con el protocolo correguido. Las principales correcciones que se realizaron fueron:

1. Correguir la implementación del potencial de 3 cuerpos en LAMMPS
2. Cambiar el comando `write_data` por el comando `restart`.
3. Adaptar el promedio temporal de los comandos `fix` para los observables de energía y estrés.
4. Corrección en el cálculo de densidad de empaquetamiento de las simulaciones.

Por otro lado las simulaciones de pruebas fueron realizandose para ir monitoreando que las comabios realizados no alteraran significativamente el comportamiento cualitativo esperado de las relaciones entre deformación y estrés.

Una vez que se implementaron todas las correcciones, se empezaron a realizar simulaciones de exploración de parametros con el objetivo de ir analizando el sistema. Los parámetros que se variaron fueron el ritmo de deformación y el `damp`.

Resultados principales

En esta sección se presentan los resultados obtenidos con el protocolo de simulación correguido. Las simulaciones se realizaron en sistemas de 8000 partículas con 3% de partículas con 4 patches. Los resultados principales que se presetan son la relación preliminar entre el ritmo de deformación con el estrés en estado estacionario durante una deformación de cizallamiento (figura 1) y la evolución del estrés virial durante una deformación de cizallamiento (figura 2), junto con las correcciones realizadas en el protocolo de simulación con un valor de `damp` igual a 0.1.

Resultados generales

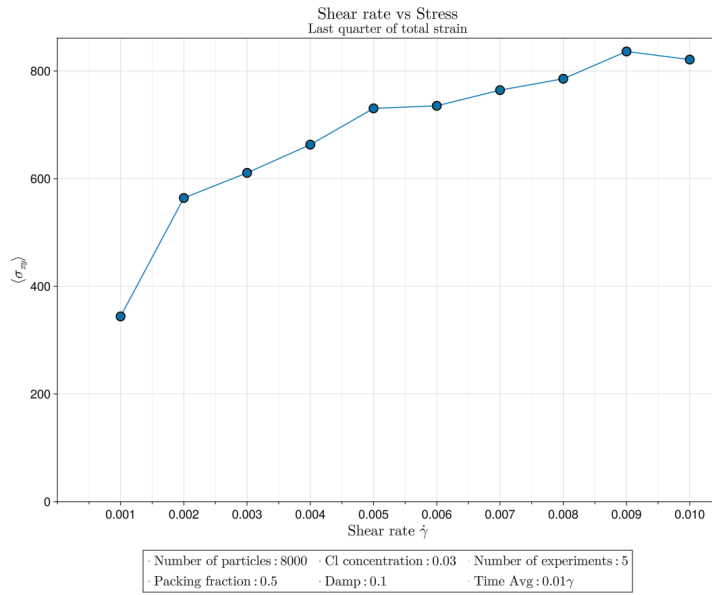


Figure 1: Promedio temporal del estrés en estado estacionario para distintos ritmos de deformación.

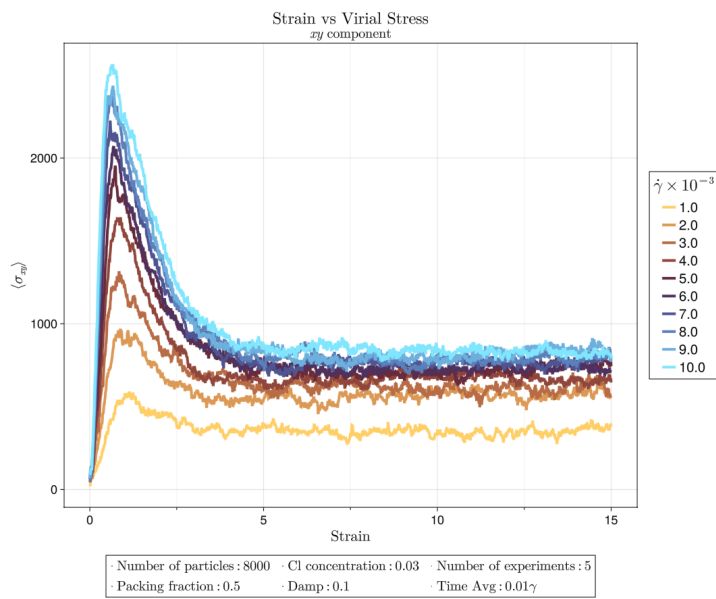


Figure 2: Promedio temporal del estrés virial durante una deformación de tipo cizallamiento para distintos ritmos de deformación.