

Reporte de resultados de simulaciones

Francisco Vazquez-Tavares

January 20, 2026

Documento en el que se muestrán los análisis de las simulaciones realizadas en este directorio

Pruebas iniciales

Directory: o.050.30.052500-2026-01-16-102953

La simulación tardó, aproximadamente, 5 hrs. Fueron 2500 partículas y 8.5×10^6 iteraciones. Se asginó damp = 1 para ver que onda. Fracción de empaquetamiento y concentración de crosslinkers son irrelevantes por el momento.

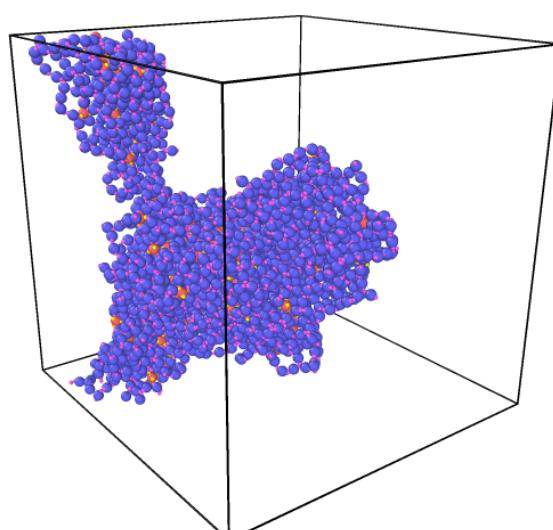


Figure 1: Configuración final del assembly

El error proviene del archivo swapMech.3b. Estaba declarado de la siguiente forma:

```
PA PA PA 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PB PA PA 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PA PB PA 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PB PB PA 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PA PA PB 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PB PA PB 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PA PB PB 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PB PB PB 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
```

La diferencia con el archivo swapMechTab2_w0.75.table es la evaluación de los potenciales. En el archivo 1 tiene más elementos evaluados que en el segundo archivo. Esto por la forma que tiene LAMMPS para evaluar potenciales *numéricos*¹.

¹... There are two different cases. If element 2 and element 3 are of the same type (e.g. SiCC),... If element 2 and element 3 are not of the same type (e.g. SiCSI),... Therefore, the total number of table entries is "M = N * N * (N+1)" for the symmetric (element 2 and element 3 are of the same type) and "M = 2 * N * N * N" for the general case (element 2 and element 3 are not of the same type).

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-20-111704

Main fix:

```
PA PA PA 0.6 swapMechTab2_w0.75.table SEC1 linear 100
PB PA PA 0.6 swapMechTab2_w0.75.table SEC1 linear 100
PA PB PA 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PB PB PA 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PA PA PB 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PB PA PB 0.6 swapMechTab1_w0.75.table SEC1 linear 100
PA PB PB 0.6 swapMechTab2_w0.75.table SEC1 linear 100
PB PB PB 0.6 swapMechTab2_w0.75.table SEC1 linear 100
```

Ahora, el problema principal es la aglomeración de interacción de más de dos patches, se tiene que $w = 0.75$,

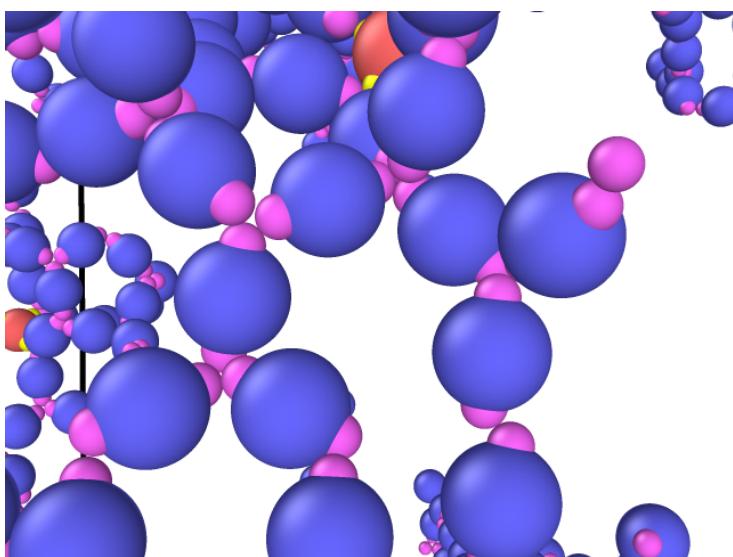


Figure 2: Configuración final del assembly

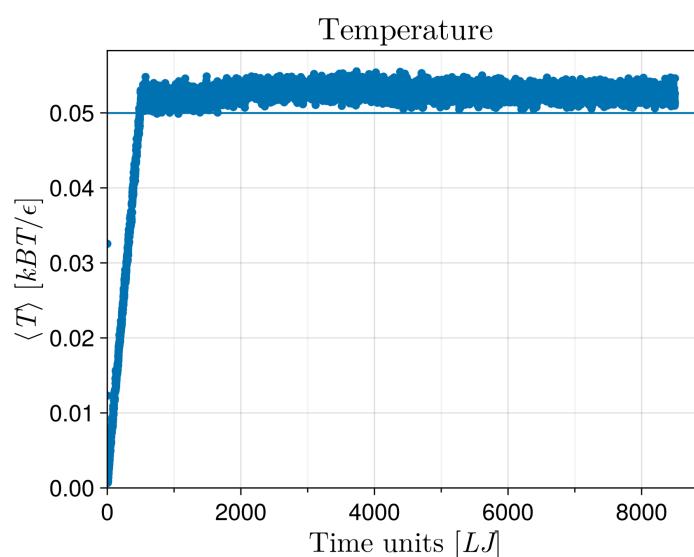


Figure 3: Temperatura durante el assembly

Directory: o.050.30.05500-2026-01-20-121005

En esta simulación se cambió el parámetro w a $w = 1$,

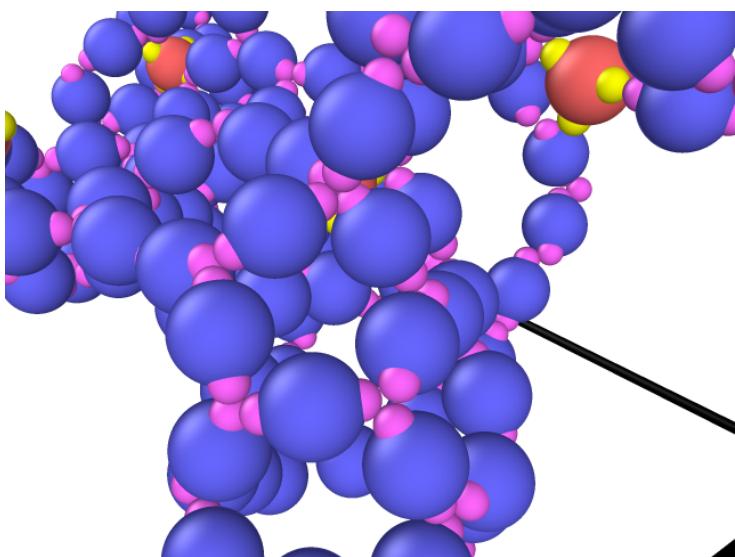


Figure 4: Configuración final del assembly

Parece que incrementar el parámetro w , incrementa la cantidad de interacciones entre patches. Posiblemente sea error de signo en la evaluación de la fuerza o potencial, porque debería de pasar lo contrario, por la definición del potencial.

Directory: o.050.30.05500-2026-01-20-135923

$w = 2$ Para reducir el tiempo de espera, la cantidad de iteraciones se disminuyeron a 5.5×10^6 . Se tardó 36 minutos.

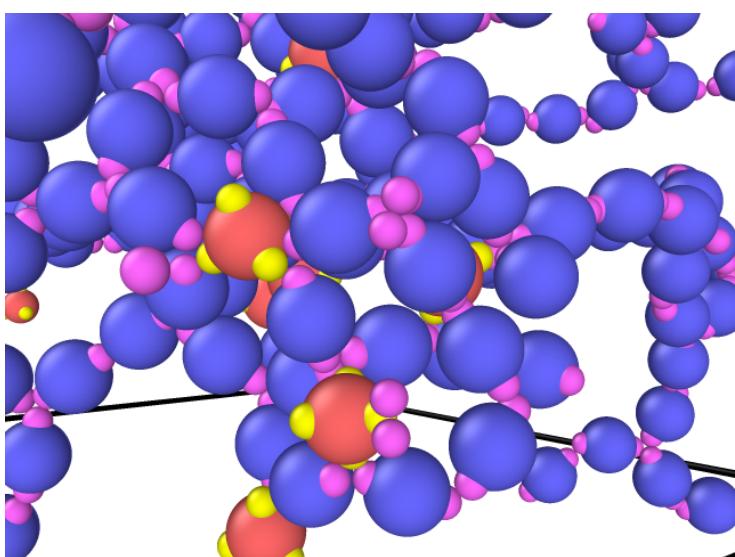


Figure 5: Configuración final del assembly

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-20-143651

Ahora se explora con $w = 0.5$ 35 minutos.

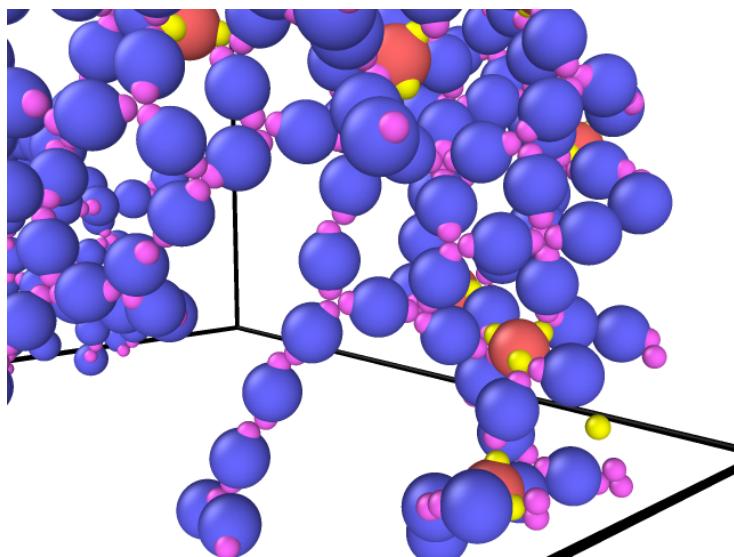


Figure 6: Configuración final del assembly

Mi intuición ahora es que puede que tenga mal las diferencias finitas. En las simulaciones que use para la Tesis de maestría se tenía el $damp = 0.1$ y ahora es de $damp = 1$. Intuyo que también por eso no se está logrando estabilizar mucho esto. También, viendo rápidamente la temperatura, está se relaja arriba de 0.05, lo cuál no es esperado.

Volveré a intentar, pero cambiaré la masa de las partículas patchy a 1, a ver que onda.

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-20-151755

Ahora se explora con $w = 1$ Masa de partículas patchy de 0.1 a 1. 32 minutos.

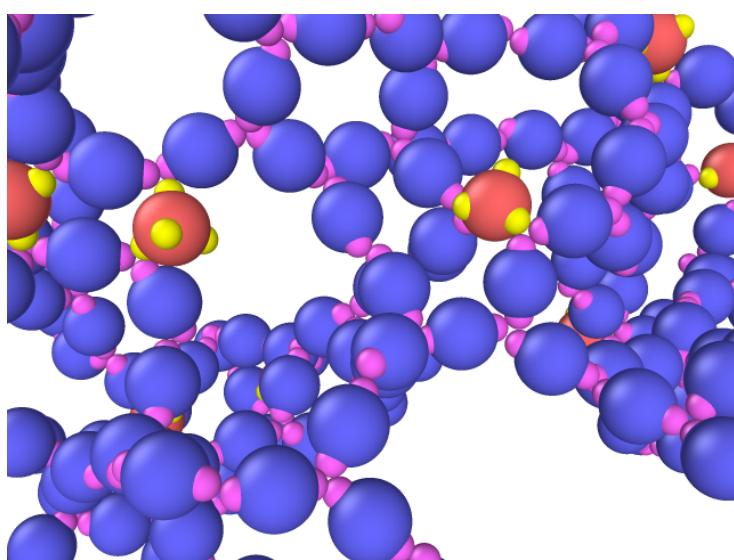


Figure 7: Configuración final del assembly

No se "arreglo" la interacción de más de dos patches, pero

parece ser que la temperatura si se estabilizó en el valor esperado, 0.05.