

Reporte de resultados de simulaciones

Francisco Vazquez-Tavares

January 20, 2026

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

Pruebas iniciales

Directory: 0.050.30.052500-2026-01-16-102953

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

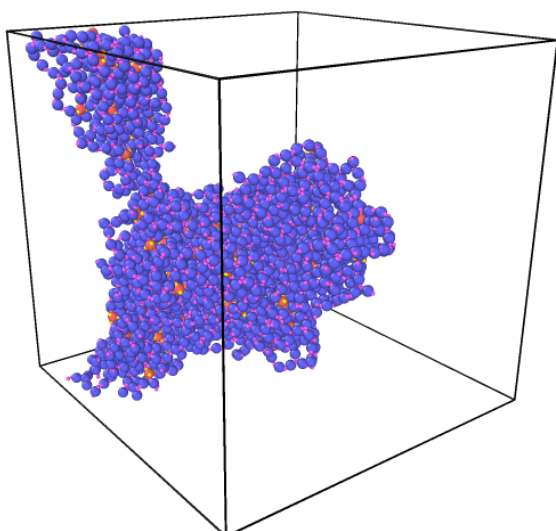


Figure 1: Configuración final del assembly

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

```
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
```

The triple patches propertie reappears