

Reporte de resultados de simulaciones

Francisco Vazquez-Tavares

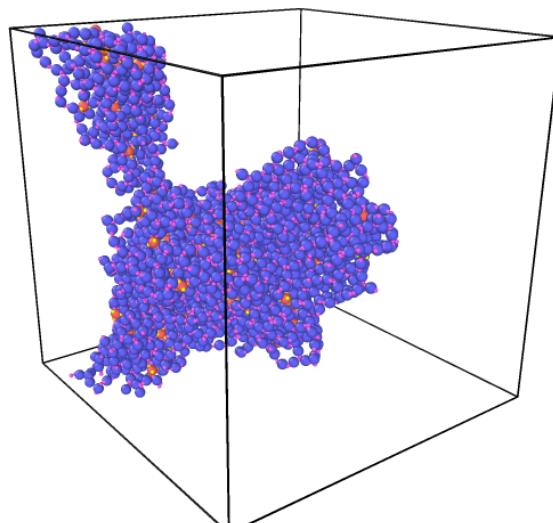
January 26, 2026

Documento en el que se muestran 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.



- etotal = pe + ke
- ecouple = cumulative energy change due to thermo/baro
- econserve = pe + ke + ecouple
- ebond = bond energy
- eangle = angle energy
- emol = ebond + eangle + edihed + eimp

Figure 1: Configuración final del sistema. The econserve keyword is the sum of the potential and kinetic energy of the system as well as the energy that has been transferred by thermostating or barostating to their coupling reservoirs – that is, econserve = pe + ke + ecouple. Ideally, for a simulation in the NVT, NPH, or NPT ensembles, the econserve quantity should remain constant over time even though etotal may change.

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 numéricos¹.

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 $w = 0.75$,

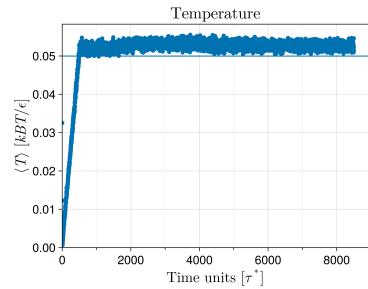
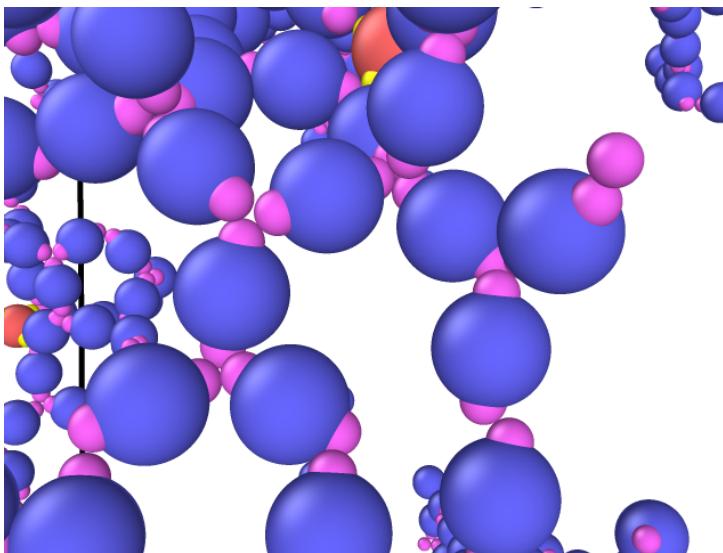


Figure 2: Temperature during assembly.

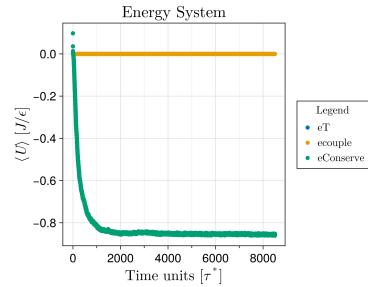


Figure 3: Econserve and ecouple.

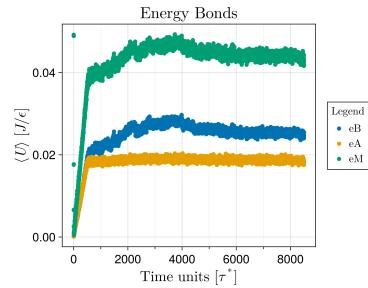


Figure 4: Bonds de la partícula patchy

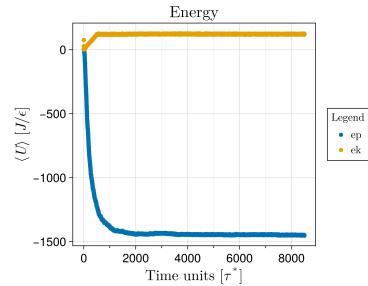
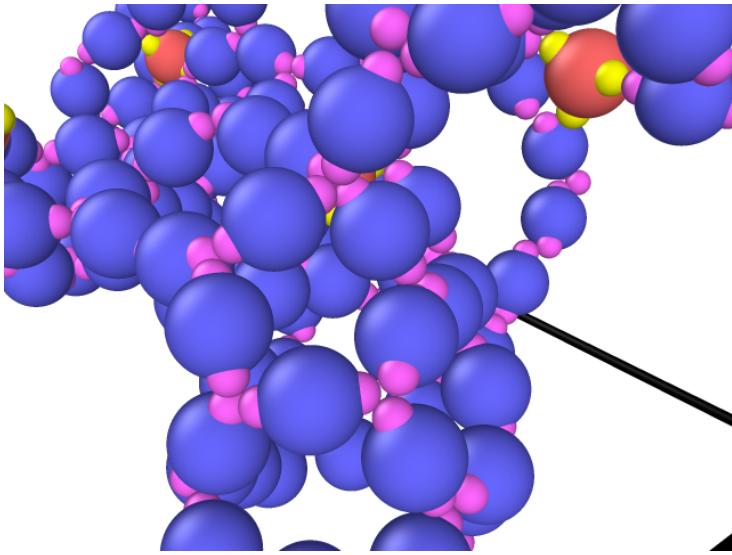


Figure 5: ep y ek

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-20-121005

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



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.

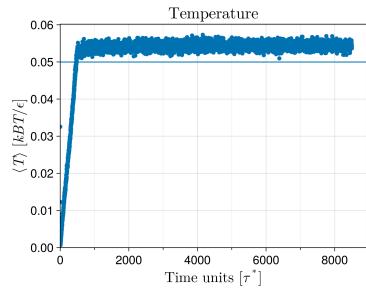


Figure 6: Temperature during assembly.

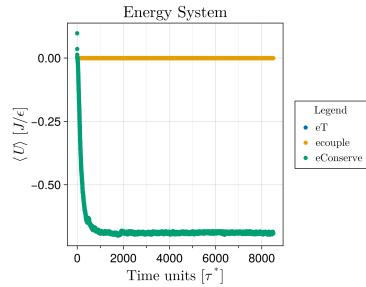


Figure 7: Econserve and ecouple.

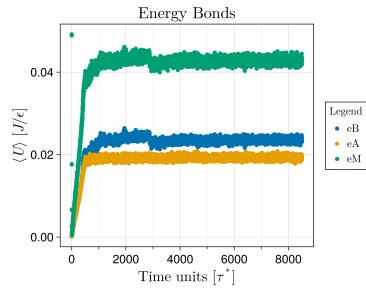


Figure 8: Bonds de la partícula patchy

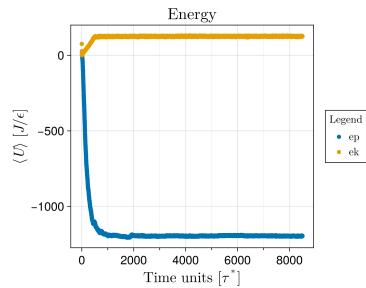


Figure 9: ep y ek

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-20-135923

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

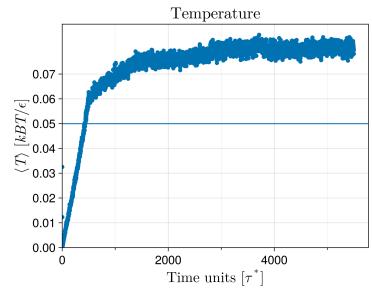
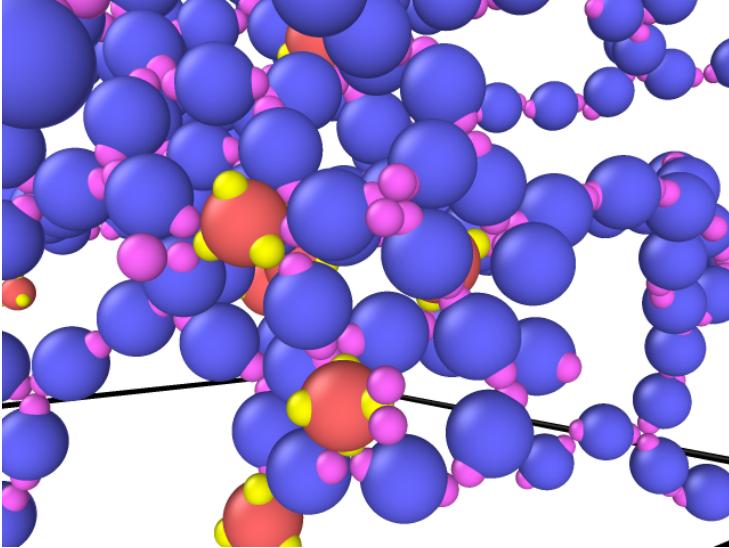


Figure 10: Temperature during assembly.

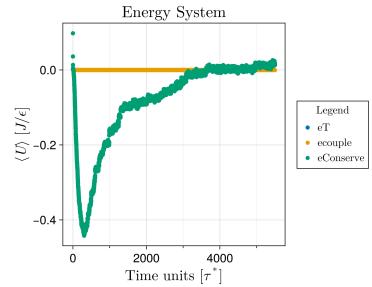


Figure 11: Econserve and ecouple.

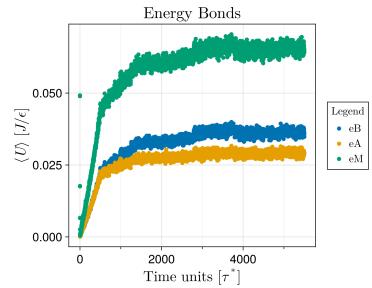


Figure 12: Bonds de la partícula patchy

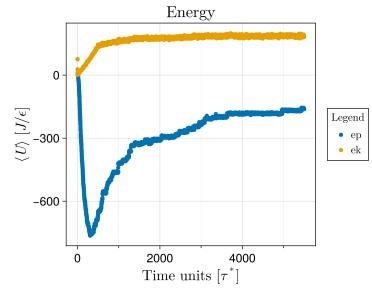
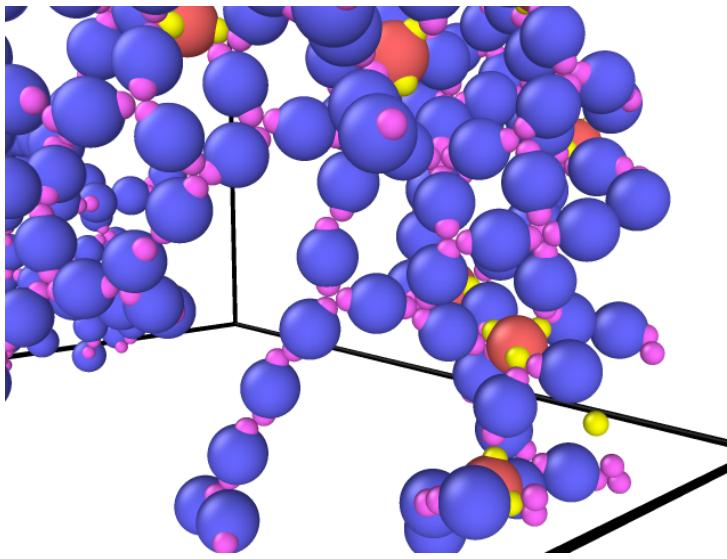


Figure 13: ep y ek

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-20-143651

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



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.

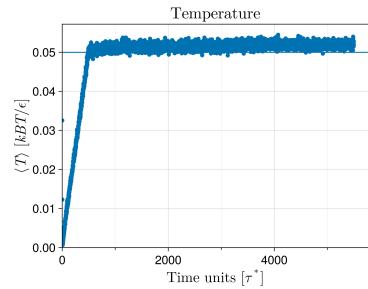
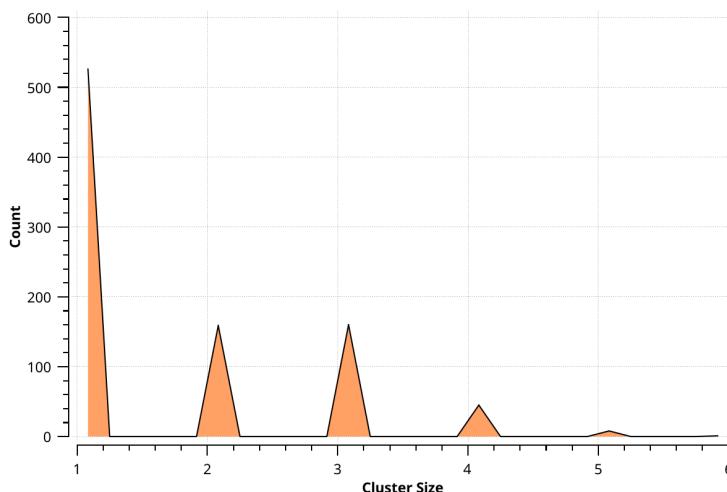


Figure 14: Temperature during assembly.

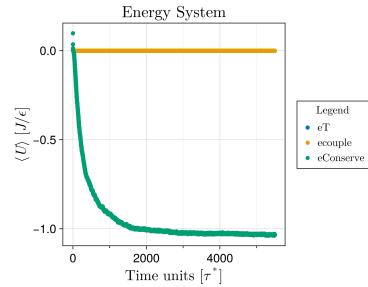


Figure 15: Econserve and ecouple.

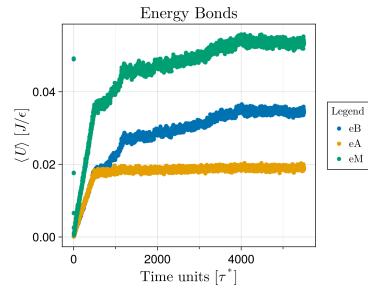


Figure 16: Bonds de la partícula patchy

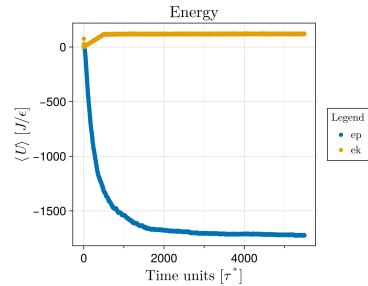
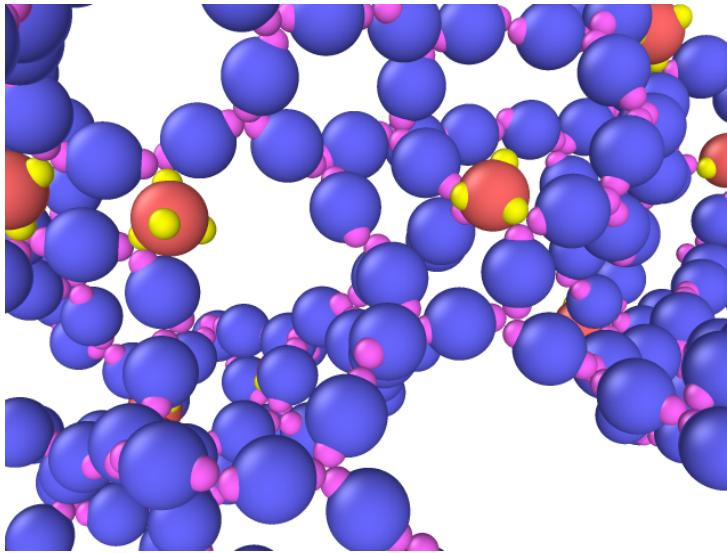


Figure 17: ep y ek

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.



No se ‘‘arreglo’’ la interacción de más de dos patches, pero parece ser que la temperatura si se stabilizó en el valor esperado, 0.05.

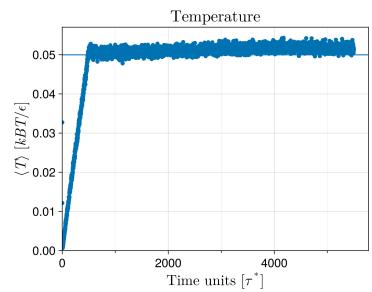
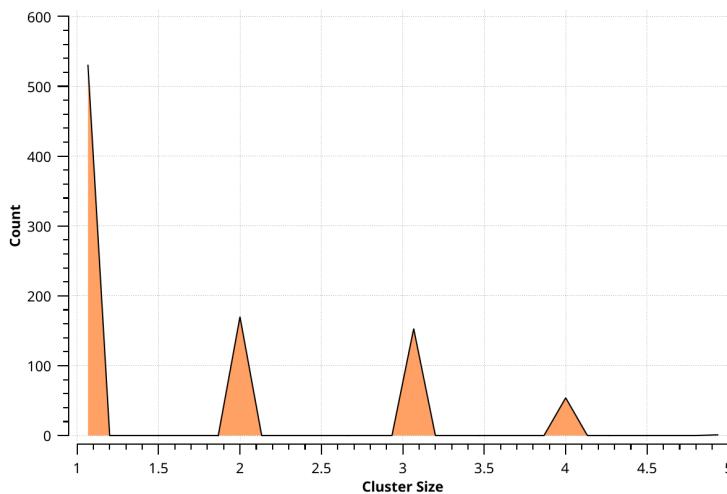


Figure 18: Temperature during assembly.

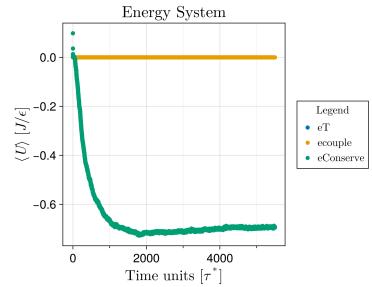


Figure 19: Econserve and ecouple.

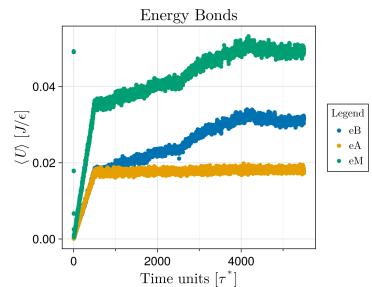


Figure 20: Bonds de la partícula patchy

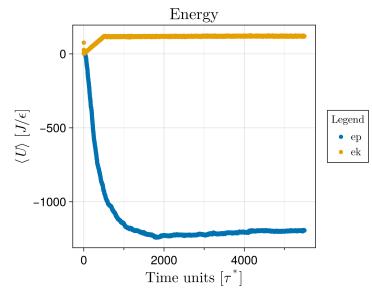


Figure 21: ep y ek

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-21-133721

Se supone recomienda que econserve se debe mantener constante a lo largo de las simulaciones, pero claramente empezó a tener un comportamiento exponencial y pienso que eso no es deseado. En las simulaciones pasadas ese comportamiento no se podía apreciar porque en el comando fix langevin no estaba activada la opción tally, que permitió guardar la suma acumulada de la energía que se introduce al sistema através del baño térmico. Además, el problema de las interacciones entre tres patches no se ‘’arregló’’

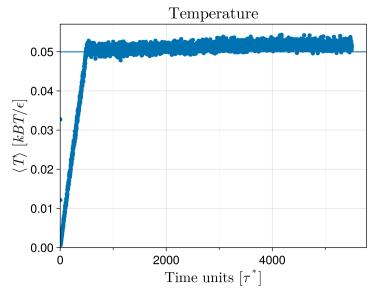
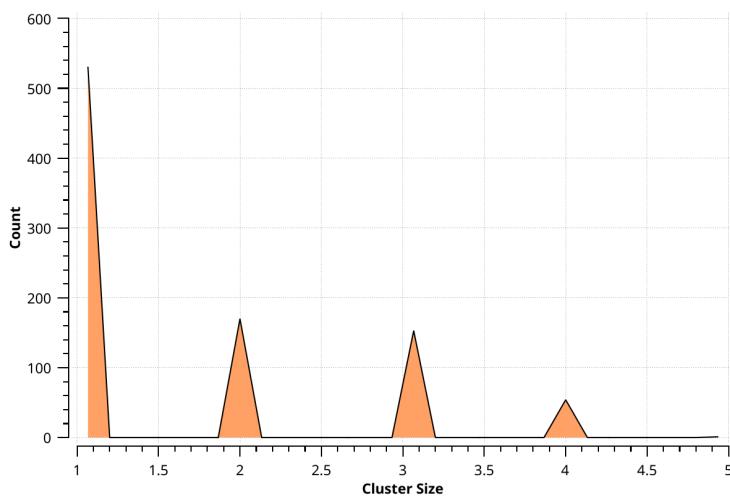
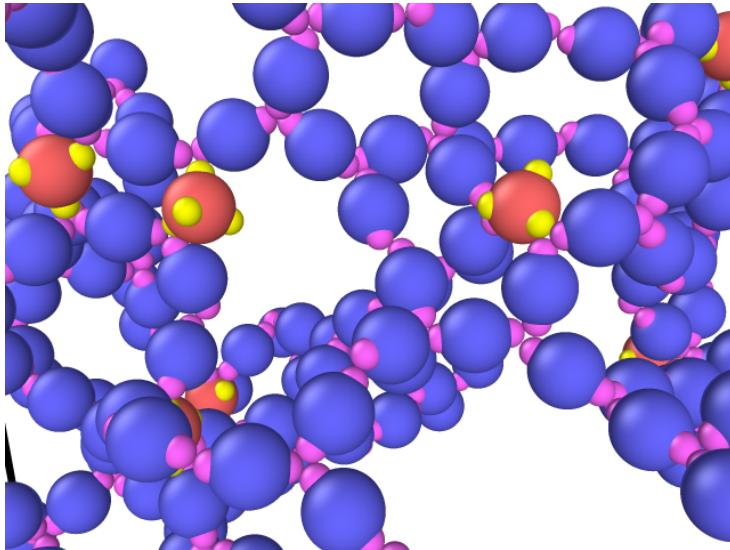


Figure 22: Temperature during assembly.

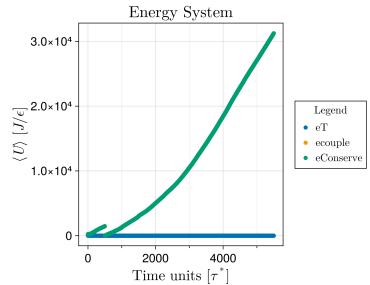


Figure 23: Econserve and ecouple.

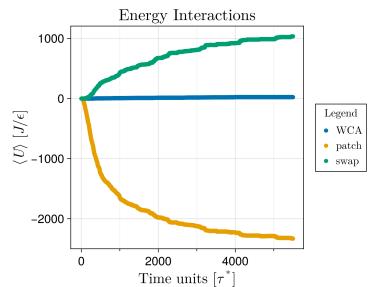


Figure 24: Energía de potenciales de interacción

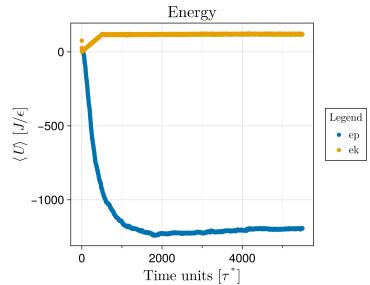


Figure 25: ep y ek

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-21-161335

Puse la keyword zero a yes, para forzar que la suma de la fuerza estocásita fuera cero, a ver que pasa con las energías. Se tardó 35 mins.

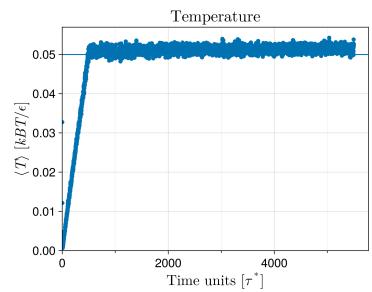
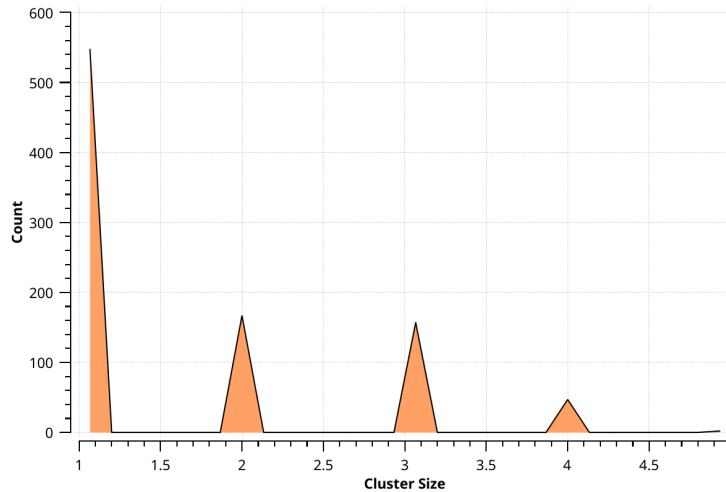


Figure 26: Temperature during assembly.

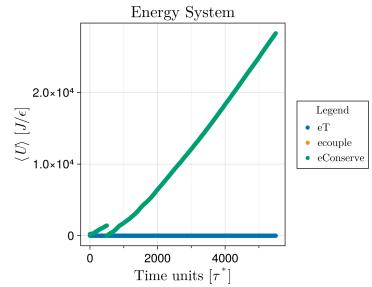


Figure 27: Econserve and ecouple.

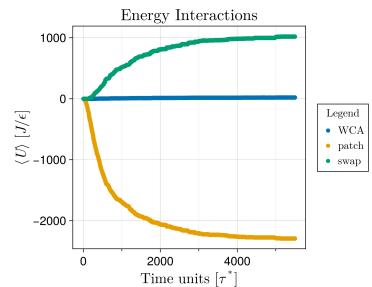


Figure 28: Energía de potenciales de interacción

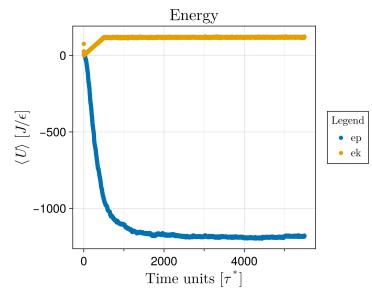
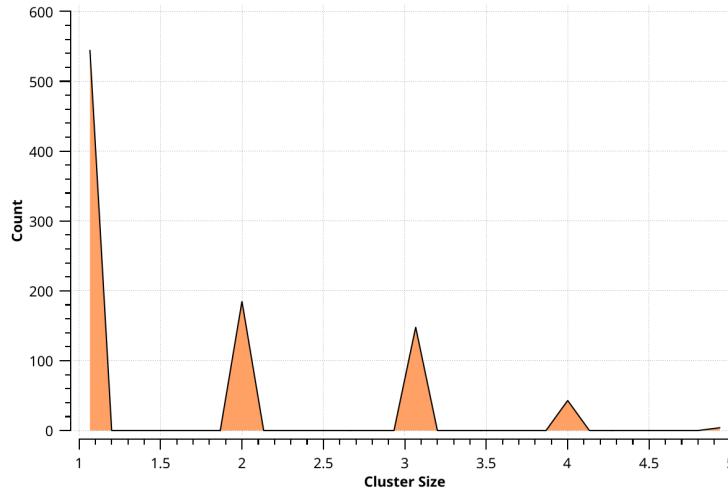


Figure 29: ep y ek

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-22-154929

Cambie el damp, para ver que onda.



Parece que no cambió mucho.

Parámetros importantes de la simulación

$$\text{damp} = 0.5; \quad w = 1$$

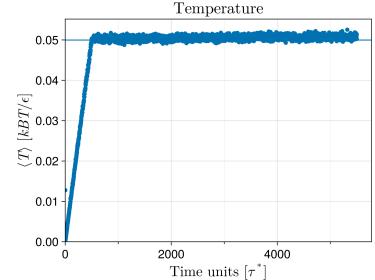


Figure 30: Temperature during assembly.

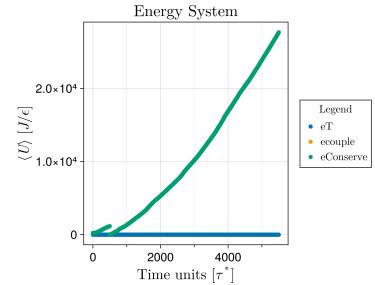


Figure 31: Econserve and ecouple.

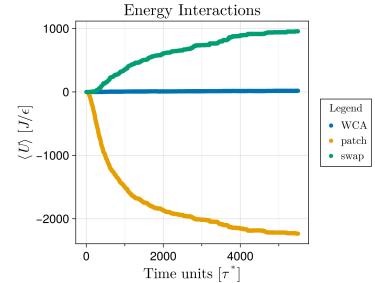


Figure 32: Energía de potenciales de interacción

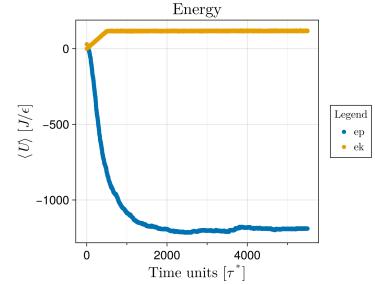


Figure 33: ep y ek

Acerca del potencial de tres cuerpos

Mi intuición es que hay algo mal en la forma en como estoy evaluando el potencial de tres cuerpos. Porque la energía que se registra debido al potential de swap es comparable con la energía que se registra debido al potencial de interacción. Posiblemente estoy evaluando mal los dominios.

Revisando con calma la última versión que usé para crear las tablas del potencial de tres cuerpos me encontré que estaba mal evaluada. En la documentación de lammps se espera que $f_{i1} = -f_{j1}$, $f_{i2} = -f_{k1}$, $f_{j2} = -f_{k2}$ y esas propiedades no se cumplieron para todas las evaluaciones.

Esto se puede apreciar facilmente en la declaración de la función que evalua las fuerzas debido al potencial de tres cuarpos:

```
th = deg2rad(th);
r_jk = sqrt(r_ij^2+r_ik^2-2*r_ij*r_ik*cos(th));

f_i=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_ik);
f_j=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_jk);
f_k=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ik,r_jk);

f_i1=f_i;
f_i2=f_i*cos(th);

f_j1=f_j;
f_j2=f_j*(1-cos(th));

f_k1=f_k*cos(th);
f_k2=f_k*(1-cos(th));
```

Cambié el código al siguiente:

```
th = deg2rad(th);
r_jk = sqrt(r_ij^2+r_ik^2-2*r_ij*r_ik*cos(th));

f_i=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_ik);
f_j=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_jk);
f_k=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ik,r_jk);

f_i1=f_i;
f_i2=f_i*cos(th);

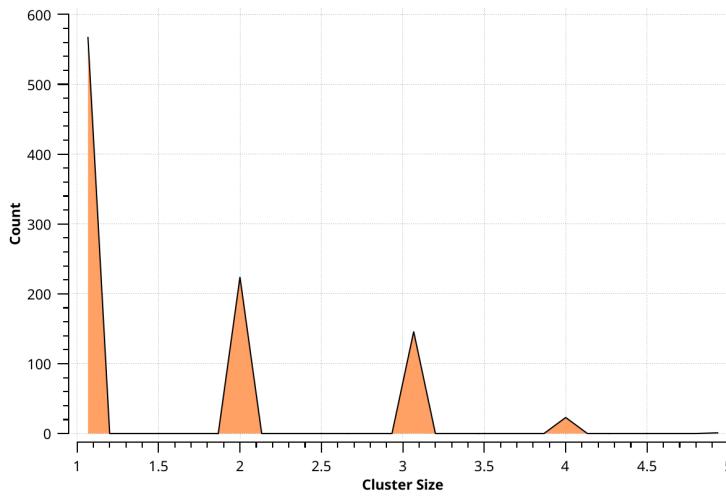
f_j1=-f_i2;
f_j2=f_j*(1-cos(th));

f_k1=-f_i2;
f_k2=-f_j2;
```

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-22-163251

Cambié la evaluación de las tablas de la forma anterior. Disminuí de 5×10^6 a 3×10^6 en el proceso isotérmico para que tardará menos las simulaciones de prueba. Fue hasta 3×10^6 porque observando la energía potencial de interacción, se relajaba a un valor más o menos constante al rededor de esas iteraciones.

Tardó 16 mins



Tiene vibras que mejoró, voy a poner 8×10^6

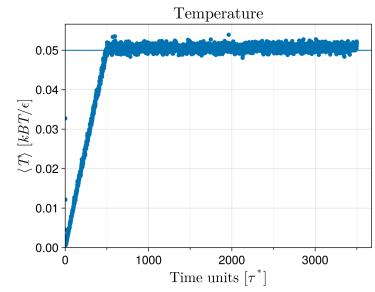


Figure 34: Temperature during assembly.

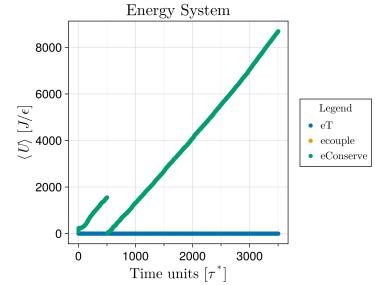


Figure 35: Econserve and ecouple.

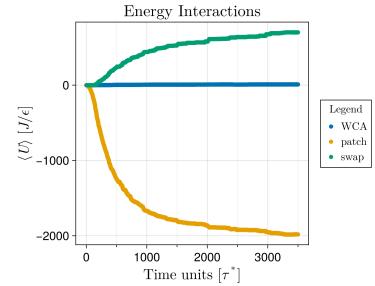


Figure 36: Energía de potenciales de interacción

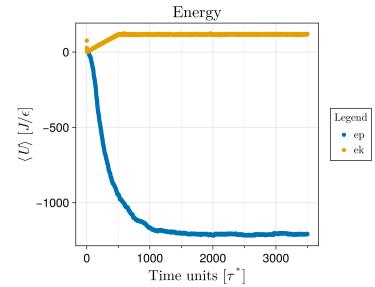
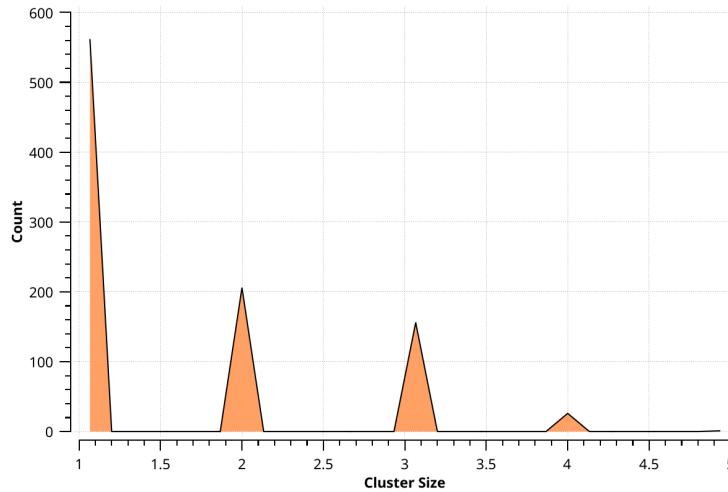


Figure 37: ep y ek

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-22-165623



No entiendo porque aún hay una cantidad considerable de enlaces entre tres patches.

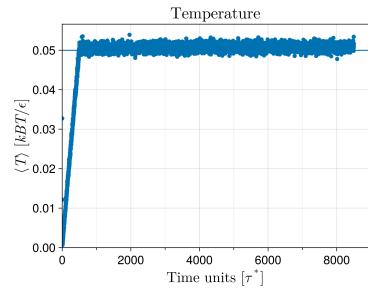


Figure 38: Temperature during assembly.

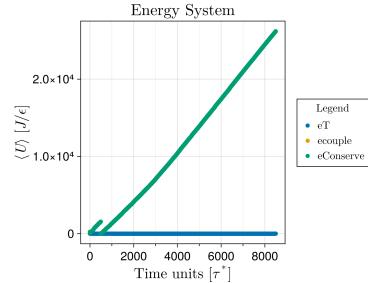


Figure 39: Econserve and ecouple.

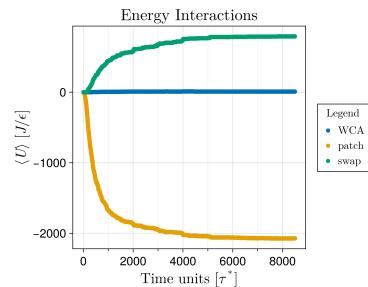


Figure 40: Energía de potenciales de interacción

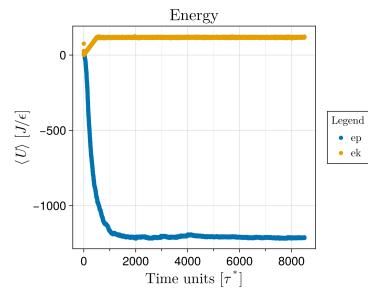


Figure 41: ep y ek

Acerca del potencial de tres cuerpos

Cambié el código al siguiente:

```

th = deg2rad(th);
r_jk = sqrt(r_ij^2+r_ik^2-2*r_ij*r_ik*cos(th));

f_i=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_ik);
f_j=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_jk);
f_k=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ik,r_jk);

f_i1=f_i;
f_i2=f_i*cos(th);

f_j1=-f_i1;
f_j2=f_j*cos(th);

f_k1=-f_i2;
f_k2=-f_j2;

```

Aún no estoy muy seguro del porque no está funcionando. Hice el cambio del factor escala de $1 - \cos \theta \rightarrow \cos \theta$, porque el primer factor de escala es cuando estaba de terco usar un *tercer vector propio* para el espacio dos dimensional.

Acerca de la simetría

El potencial de tres cuerpos está definido de la siguiente forma

$$U_{\text{swap}}(r_{ij}, r_{ik}) = \alpha U_3(r_{ij}) U_3(r_{ik}).$$

Considerando la relación entre potencial y fuerza en interacciones conservativas, se tienen las siguientes expresiones² para la fuerza de cada partículas:

$$\begin{aligned}\vec{F}_i &= -\alpha \left[U_3(r_{ik}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ij}) + U_3(r_{ij}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ik}) \right] \hat{e}_r \\ \vec{F}_j &= -\alpha \left[U_3(r_{jk}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ij}) + U_3(r_{ij}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{jk}) \right] \hat{e}_r \\ \vec{F}_k &= -\alpha \left[U_3(r_{jk}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ik}) + U_3(r_{ik}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{jk}) \right] \hat{e}_r\end{aligned}$$

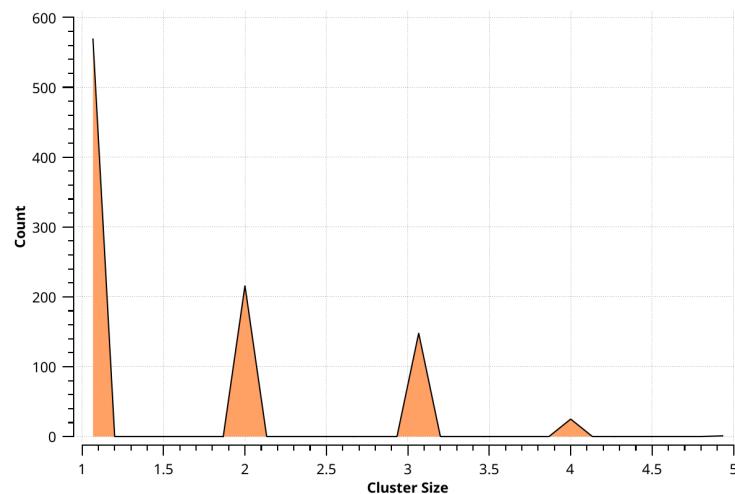
Por argumento intuitivo/diagrama las fuerzas no son recíprocas $f_{ij} \neq -f_{ji}$. Porque se depende de la distancia r_{jk} y f_{ik} .

Analizando el caso en que $\vec{F}_i = -\vec{F}_j$,

$$\begin{aligned}\vec{F}_i &= \vec{F}_j \\ -\alpha \left[U_3(r_{ik}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ij}) + U_3(r_{ij}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ik}) \right] \hat{e}_r &= \alpha \left[U_3(r_{jk}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ij}) + U_3(r_{ij}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{jk}) \right] \hat{e}_r \\ -U_3(r_{ik}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ij}) - U_3(r_{ij}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ik}) &= U_3(r_{jk}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ij}) + U_3(r_{ij}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{jk})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{F}_i &= -\nabla U_{\text{swap}}(r_{ij}, r_{ik}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial r} \alpha U_3(r_{ij}) U_3(r_{ik}) \hat{e}_r \\ &= -\alpha \left[U_3(r_{ik}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ij}) + U_3(r_{ij}) \frac{\partial}{\partial r} U_3(r_{ik}) \right] \hat{e}_r\end{aligned}$$

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-23-150058



No se arregló.

20 mins.

Directory: 0.050.30.05500-2026-01-23-152756

Realicé el siguiente cambio en la declaración del potencial

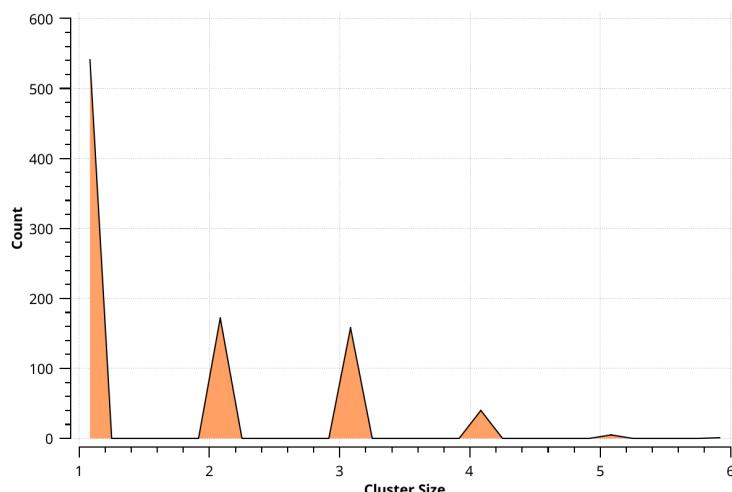
```
th = deg2rad(th);
r_jk = sqrt(r_ij^2+r_ik^2-2*r_ij*r_ik*cos(th));

f_i=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_ik);
f_j=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_jk);
f_k=forceSwap(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ik,r_jk);

f_i1=f_i;
f_i2=f_i*cos(th);

f_j1=f_j;
f_j2=f_j*cos(th);

f_k1=f_k;
f_k2=f_k*cos(th);
```



Directory: 0.050.30.05500-2026-01-23-171941

Hice algo que pensaba que estaba mal, pero después de rebotar planteamientos con DeepSeek me rendí y quise probar a ver que onda:

$$f_{i1} = -w\epsilon_{ij}\frac{\partial U_3(r_{ij})}{\partial r_{ij}}U_3(r_{jk})$$

$$f_{i2} = -w\epsilon_{ij}U_3(r_{ij})\frac{\partial U_3(r_{jk})}{\partial r_{ik}}$$

```
function force3(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_ik,th)
    th = deg2rad(th);
    r_jk = sqrt(r_ij^2+r_ik^2-2*r_ij*r_ik*cos(th));

    f_i1=-w*eps_jk*DiffU3(eps_ij,eps_ij,sig_p,r_ik)*U3(eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ik);
    f_i2=-w*eps_jk*U3(eps_ij,eps_ij,sig_p,r_ik)*DiffU3(eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ik);

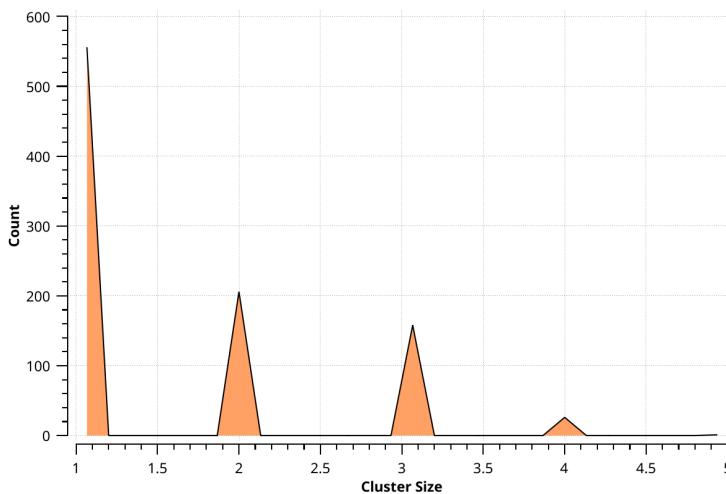
    f_j1=-f_i1;
    f_j2=-w*eps_jk*U3(eps_ij,eps_ij,sig_p,r_ik)*DiffU3(eps_ik,eps_jk,sig_p,r_jk);

    f_k1=-f_i2;
    f_k2=-f_j2;

    eng=SwapU(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_ik) + SwapU(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ij,r_jk) + SwapU(w,eps_ij,eps_ik,eps_jk,sig_p,r_ik,r_jk);
    eng=round(eng/3,digits=2^7)

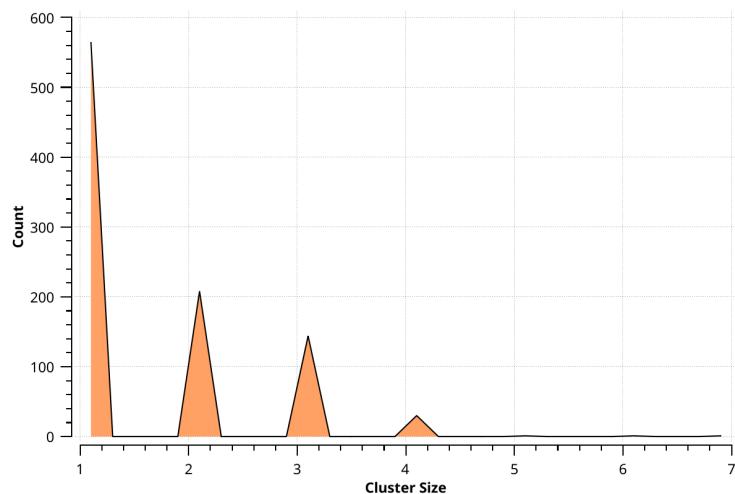
    return (f_i1,f_i2,f_j1,f_j2,f_k1,f_k2,eng)
end
```

Va a estar mal, porque me equivoqué en la evaluación de f_{i1} .



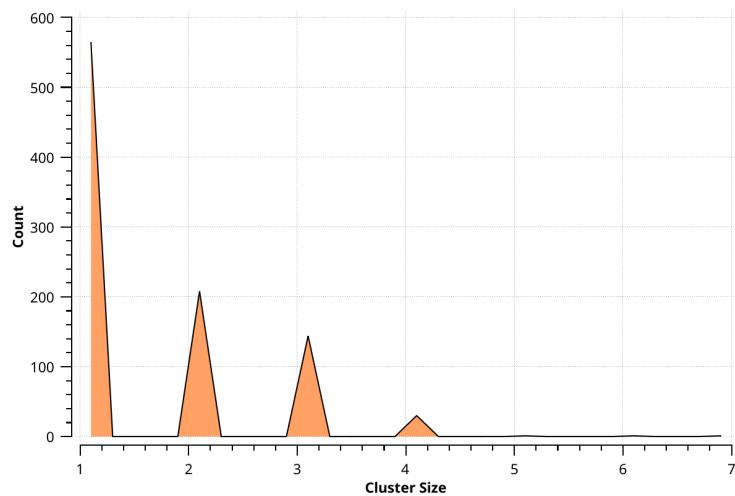
Directory: 0.050.30.05500-2026-01-23-174419

No entiendo.



Directory: 0.050.30.05500-2026-01-26-101526

Cambié de signo, a ver que pasa.



Acerca de la tabulación del potencial de tres cuerpos

Voy a asumir lo siguiente:

$$\begin{aligned}
 f_{i1} &= -\frac{\partial}{\partial r_{ij}} U_{\text{swap}}(r_{ij}, r_{ik}) = -\alpha \left[\frac{\partial U_3(r_{ij})}{\partial r_{ij}} U_3(r_{ik}) \right] \\
 f_{i2} &= -\frac{\partial}{\partial r_{ik}} U_{\text{swap}}(r_{ij}, r_{ik}) = -\alpha \left[U_3(r_{ij}) \frac{\partial U_3(r_{ik})}{\partial r_{ik}} \right] \\
 f_{j1} &= -\frac{\partial}{\partial r_{ij}} U_{\text{swap}}(r_{ij}, r_{jk}) = -\alpha \left[\frac{\partial U_3(r_{ij})}{\partial r_{ij}} U_3(r_{jk}) \right] \\
 f_{j2} &= -\frac{\partial}{\partial r_{jk}} U_{\text{swap}}(r_{ij}, r_{jk}) = -\alpha \left[U_3(r_{ij}) \frac{\partial U_3(r_{jk})}{\partial r_{jk}} \right] \\
 f_{k1} &= -\frac{\partial}{\partial r_{ik}} U_{\text{swap}}(r_{ik}, r_{jk}) = -\alpha \left[\frac{\partial U_3(r_{ik})}{\partial r_{ik}} U_3(r_{jk}) \right] \\
 f_{k2} &= -\frac{\partial}{\partial r_{jk}} U_{\text{swap}}(r_{ik}, r_{jk}) = -\alpha \left[U_3(r_{ik}) \frac{\partial U_3(r_{jk})}{\partial r_{jk}} \right]
 \end{aligned}$$

Mientras realizaba esta tabla, me di cuenta que estuve evaluando mal los potenciales y derivadas³. Estas relaciones no siguen la relación $f_{i1} = -f_{j1}$, al menos que $r_{ik} = r_{jk}$.

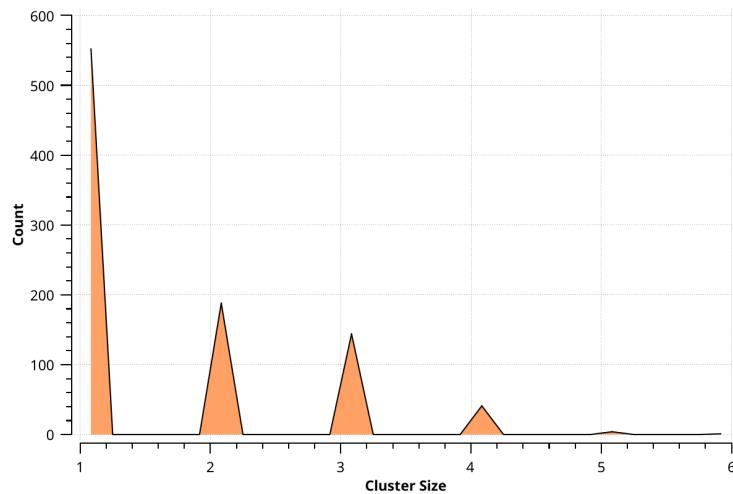
La idea es que el sufijo i, j, k , infican partícula. Los sufijos 1 y 2, lo intrepreté como la contribución de la fuerza debido a la distancia r_{lm} y la distancia r_{ln} . Si el potencial también depende del ángulo, intuyo que hay que obtener las proyecciones a las distancias r_{lm}, r_{ln} .

Aún no estoy seguro si hay que agregar el factor escala r_{lm} , ya que lammps hace la multiplicación con \vec{r}_{lm} .

³ A pesar de no tener la misma expresión algebraica, la evaluación estaba incorrecta.

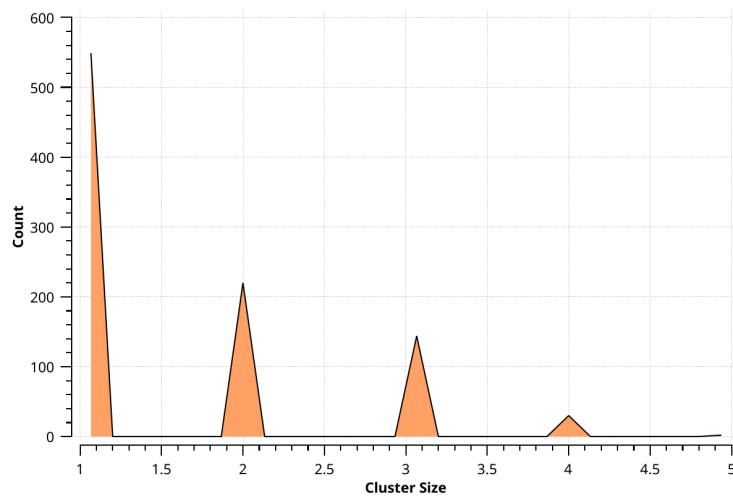
Directory: 0.050.30.05500-2026-01-26-113021

El cambio anterior no ayudo.



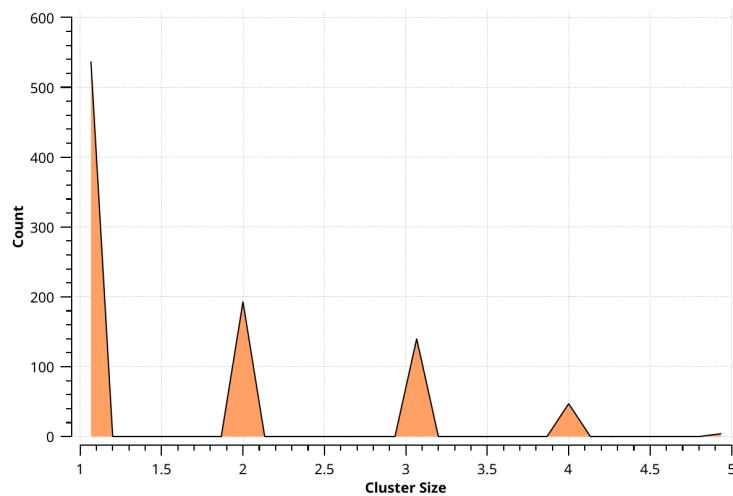
Directory: 0.050.30.05500-2026-01-26-120745

Forcé el parámetro de reciprocidad



Directory: 0.050.30.05500-2026-01-26-134421

Regrese a las definiciones de , pero sin el signo negativo.



No entiendo que está pasando.