

# Condiciones iniciales

Hay que satisfacer las siguientes condiciones  
(en unidades reducidas)

(a)  $\mathbf{v}_{cm} = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle v_x \rangle = \langle v_y \rangle = \langle v_z \rangle = 0$

(b) Para una distribución de Maxwell en el equilibrio

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = T \quad (K = 1 \text{ y } m = 1) \quad (1)$$

# Termalización

(a) Función H de Boltzmann

$$H = \int d^3p f(\mathbf{p}, t) \ln f(\mathbf{p}, t) \quad (2)$$

(b) Parámetro de orden de Verlet para un arreglo cúbico con separación  $a$ .

$$\lambda_x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos \left( \frac{2\pi}{a} (x_i - a/2) \right) \quad (3)$$

y lo mismo para  $\lambda_y$  y  $\lambda_z$ .

## (a) Función H de Boltzmann

$$H = \int d^3p f(\mathbf{p}, t) \ln f(\mathbf{p}, t) \approx \frac{1}{3} (H_x + H_y + H_z) \quad (4)$$

$$H_x = \sum_{\Delta v_x} f(v_x) \ln f(v_x) \cdot \Delta v_x \quad (5)$$

y lo mismo para  $H_y$  y  $H_z$ .  $f(v_x)$  es el histograma instante a instante de las velocidades, con bins  $v_x \pm \Delta v_x/2$  (por ejemplo,  $\Delta v_x = 0.05$ ).

El teorema H de Boltzmann asegura que  $dH/dt \leq 0$  y  $dH/dt = 0$  en el equilibrio (distribución de Boltzmann).

## (a) Función $H$ de Boltzmann

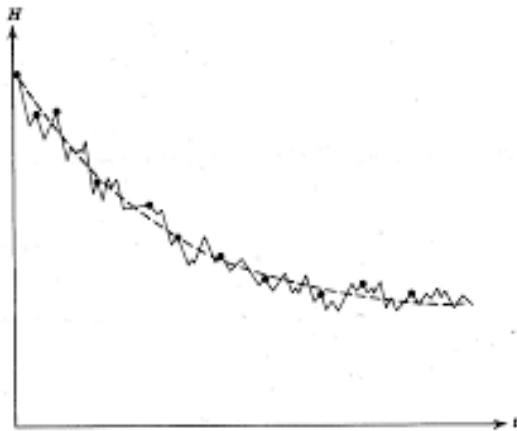


Figure: Función  $H$  de Boltzmann.

## (b) Parámetro de orden de Verlet

El sistema tiene condición inicial de arreglo cúbico. Calculamos

$$\lambda = \frac{1}{3} [\lambda_x + \lambda_y + \lambda_z] \quad (6)$$

- (1) Si la red cúbica está ordenada, entonces  $\lambda = 1$ .
- (2) Cuando el sistema está completamente desordenado  $\lambda \rightarrow 0$  (aunque con fluctuaciones  $1/\sqrt{N}$ ).
- (3) Entre  $\lambda = 1$  y  $\lambda \approx 0$  aparecen fluctuaciones que muestran agrupamientos parciales o vestigios de la red original.

## Re-escalo de velocidades

Supongamos que inicio con una temperatura (reducida)

$$T_0 = \frac{1}{3} [\langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle] \quad (7)$$

y deseo alcanzar una temperatura

$$T_d = \frac{1}{3} [\langle v_x'^2 \rangle + \langle v_y'^2 \rangle + \langle v_z'^2 \rangle] \quad (8)$$

$$\Rightarrow T_d = \frac{1}{3} \frac{T_d}{T_0} [\langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle] \quad (9)$$

Tengo que “re-escalar” las velocidades como  $v_i' = \sqrt{\frac{T_d}{T_0}} v_i$ .

# Magnitudes termodinámicas (promedios temporales)

(a) La temperatura (reducida) del sistema

$$T = \frac{2}{3} \langle E_k \rangle \quad (10)$$

donde  $\langle E_k \rangle$  es la energía cinética (reducida) por átomo y  $\langle \cdot \rangle$  representa el promedio temporal.

(b) La presión (reducida) del sistema, según el virial

$$P = \frac{2}{3} \rho \langle E_k \rangle + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \mathbf{f}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} \right\rangle \quad (11)$$

donde todas las magnitudes son reducidas. El primer término representa la presión del gas ideal ( $\rho = N/V$ ).  $\langle \cdot \rangle$  representa el promedio temporal.

# Muestreo para promediar

## (a) Muestreo sistemático estratificado.

Tomamos muestras “independientes” cada  $m$  pasos  $x_1, x_2, \dots, x_n$ . Entonces,  $\sigma_{\langle x \rangle}^2 = \sigma_x^2/n$ .

## (b) Muestreo aleatorio estratificado.

Similar al anterior, pero las muestras se toman cada un número aleatorio de pasos (asegurando descorrelación).

## (c) Muestreo de “grano grueso”.

- (1) Promediamos  $x_1, x_2, \dots, x_m$  valores consecutivos para hallar  $\langle x \rangle$ . Esto se repite a intervalos espaciados (descorrelacionados)  $\langle x \rangle_1, \langle x \rangle_2, \dots, \langle x \rangle_n$ . Entonces,  $\sigma_{\langle \langle x \rangle \rangle}^2 = \sigma_{\langle x \rangle}^2/n = \sigma_x^2/nm$ .