

# Tarea 3: Líquidos y sólidos bidimensionales

Sofia Thiel Pizarro  
B36953

26 de febrero de 2021

## A1

- La figura geométrica que se obtiene es la de un círculo

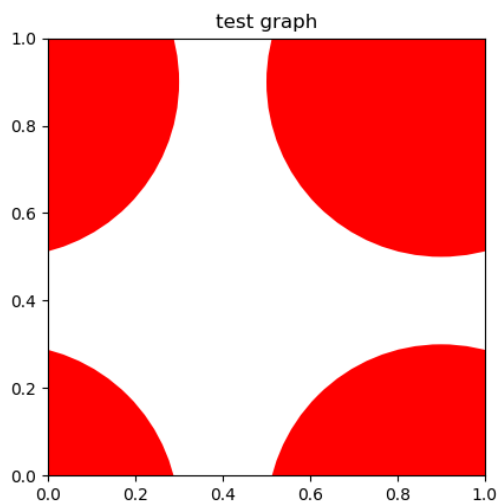


Figura 1: Imagen generada al compilar el código de esta sección de la tarea

- El color que presentan es rojo debido a la línea del código que dice:

```
cir = pylab.Circle((x + ix, y + iy), radius=sigma, fc='r')
```

donde la parte de  $fc = 'r'$  la  $r$  representa el color rojo o red en inglés.

- Las condiciones de contorno están dadas por la siguiente parte del código:

```
for [x, y] in L:
    for ix in range (-1, 2):
        for iy in range (-1, 2):
            cir = pylab.Circle((x + ix, y + iy), radius=sigma, fc='r')
```

- Lo que me permite verlo en la pantalla es la sección del código: `pylab.show()`, esta línea crea la imagen y la muestra al final de ejecutar el código.
- Sí se crea un archivo. la línea del código `pylab.savefig(fname)` guarda la imagen creada. El nombre del archivo se puede modificar en la línea de código de `show_conf(L, sigma, 'test graph', 'one_disk.png')` en donde el archivo para esta parte se llama `one_disk.png`.

## A2

- Para explicar la condición primero se explica el comando `os.path.isfile(filename)`, el cual busca en la carpeta un archivo con el nombre, en este caso, `filename` y si lo encuentra, este devuelve un `True` y en caso de no ser así devuelve un `False`. Por lo tanto el condicional `if os.path.isfile(filename)` se ejecuta si el `os.path.isfile(filename)` devuelve un `True` sino pasa a la parte de `else`.
- La diferencia entre `f = open(filename, 'r')` y `f = open(filename, 'w')` es que el primero tiene `'r'` y el segundo `'w'`. La `'r'` significa que abre el archivo en modo lectura (read) el cual solo se puede visualizar y la `'w'` abre el archivo en modo de escritura (write) en el cual aparte de visualizarlo se puede modificar.
- `f.write(str(a[0]) + ' ' + str(a[1]) + '\n')`  
escribe en el nuevo documento como strings la configuración de los discos.
- El potencial de este programa es revisar si existe una configuración deseada y si no la hay crea una configuración aleatoria.

## B1

```
import random, math

def dist(x, y):
    d_x = abs(x[0]-y[0])%1.0
    d_x = min(d_x, 1.0-d_x)
    d_y = abs(x[1]-y[1])%1.0
    d_y = min(d_y, 1.0-d_y)
    return math.sqrt(d_x**2 + d_y**2)
L = [[0.25, 0.25], [0.75, 0.25], [0.25, 0.75], [0.75, 0.75]]
sigma = 0.15
sigma_sq = sigma**2
delta = 0.1
n_steps = 1000
for steps in range (n_steps):
    a = random.choice(L)#random choice para un disco
    b = [(a[0]+ random.uniform(-delta, delta))%1.0, (a[1]+ random.uniform(-delta, delta))%1.0]
    min_dist = min(dist(b, c) for c in L if c != a)

if min_dist > 2*sigma:
    a[:] = b
print (L) #genera la configuración de 4 discos
```

## B2

```
import random, math, pylab

def dist(x, y):
    d_x = abs(x[0]-y[0])%1.0
    d_x = min(d_x, 1.0-d_x)
    d_y = abs(x[1]-y[1])%1.0
    d_y = min(d_y, 1.0-d_y)
    return math.sqrt(d_x**2 + d_y**2)
def show_conf (L, sigma, title, fname):
```

```

pylab.axes()
for [x, y] in L:
    for ix in range (-1,2):
        for iy in range (-1, 2):
            cir = pylab.Circle((x+ix, y+iy), radius=sigma, fc='r')
            pylab.gca().add_patch(cir)
pylab.axis('scaled')
pylab.title(title)
pylab.axis([0.0, 1.0, 0.0, 1.0])
pylab.savefig(fname)
pylab.show()
pylab.close()

L = [[0.25, 0.25], [0.75, 0.25], [0.25, 0.75], [0.75, 0.75]]
N = 4
densidad = 0.60
sigma = math.sqrt(densidad/(N*math.pi))
sigma_sq = sigma**2
delta = 0.1
n_steps = 1000
for steps in range (n_steps):
    a = random.choice(L)
    b = [(a[0]+ random.uniform(-delta, delta))%1.0, (a[1]+ random.uniform(-delta, delta))%1.0]
    min_dist = min(dist(b, c) for c in L if c != a)
    if min_dist > 2*sigma:
        a[:] = b

show_conf(L, sigma, 'ImagenB2', 'Tarea3B2.png')

```

La gráfica que se genera es la siguiente:

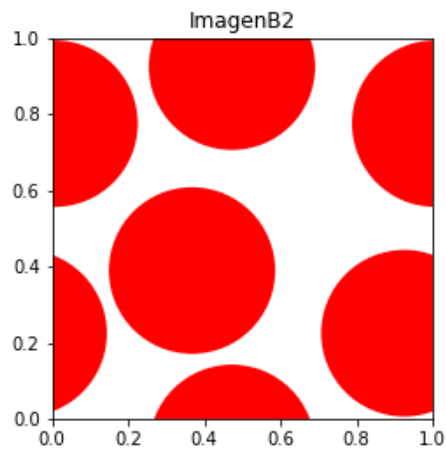


Figura 2: Imagen generada para discos en una caja

Se puede notar que algunos discos se salen de los bordes y se ven incompletos, lo cual nos asegura las condiciones de frontera que se pusieron.

## B3

- Al correr el código para varios valores de la densidad se puede notar que a partir de la densidad de 0.75 las configuraciones empiezan a traslaparse. Quiere decir que se obtienen configuraciones no deseadas o ilegales.
- Corriendo el programa para  $N = 256$  y  $\rho = 0,72$ :

```
import random , math , pylab , os

densidad = 0.72
k = 16
N = k**2
two_del_xy=1.0/k
del_xy= two_del_xy/2
sigma = math.sqrt(densidad/(N*math.pi))
sigma_sq=sigma**2
delta = 0.1
n_steps = 1000
filename = 'disk_configuration_N%i_densidad%.2f.txt'%(N, densidad)

def show_conf(L, sigma, title, fname):
    pylab.axes()
    for [x, y] in L:
        for ix in range (-1,2):
            for iy in range (-1,2):
                cir = pylab.Circle((x+ix, y+iy), radius=sigma, fc='r')
                pylab.gca().add_patch(cir)

    pylab.axis('scaled')
    pylab.title(title)
    pylab.axis([0.0, 1.0, 0.0, 1.0])
    pylab.savefig(fname)
    pylab.show()
    pylab.close()

def dist(x,y):
    d_x=abs(x[0]-y[0])%1.0
    d_x = min(d_x, 1.0-d_x)
    d_y = abs(x[1]-y[1])%1.0
    d_y = min(d_y, 1.0-d_y)
    return math.sqrt(d_x**2 + d_y**2)

if os.path.isfile(filename):
    f = open(filename, 'r')
    L = []
    for line in f:
        a, b = line.split()
        L.append([float(a), float(b)])
    f.close()
    print('starting_from_file', filename)
else:
    L = [[del_xy+i*two_del_xy, del_xy+j*two_del_xy]for i in range (k) for j in range(k)]
    print ('starting_from_a_new_random_configuration')

show_conf(L, sigma, 'graficaB3', 'Tarea3B3.png')
```

```

for steps in range (n_steps):
    a = random.choice(L)
    b = [(a[0]+ random.uniform(-delta, delta))%1.0, (a[1]+ random.uniform(-delta, delta))%1.0]
    min_dist = min(dist(b, c) for c in L if c != a)
    if min_dist > 2*sigma:
        a[:] = b
f = open(filename, 'w')
for a in L:
    f.write(str(a[0])+','+str(a[1])+'\n')
f.close()

show_conf(L, sigma, 'Grafico_B3', 'Tarea3B3_2')

```

- La gráfica generada es la siguiente:

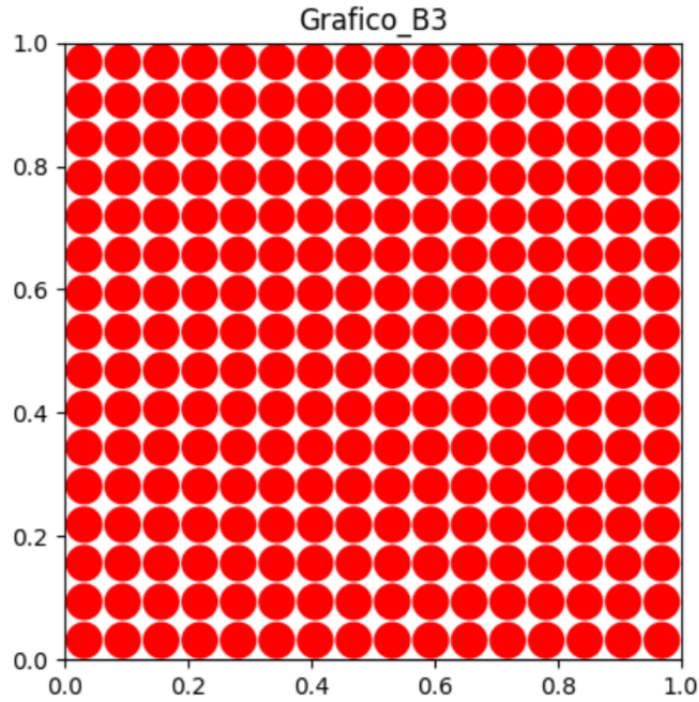


Figura 3: Imagen generada para discos en una caja con  $N = 256$  y  $\eta = 0,72$

Se puede notar que se genera 16x16 círculos y los círculos están muy cercanos porque la densidad utilizada se acerca a la densidad crítica mencionada en el primer punto.

## B4

Las figuras obtenidas para esta sección son:

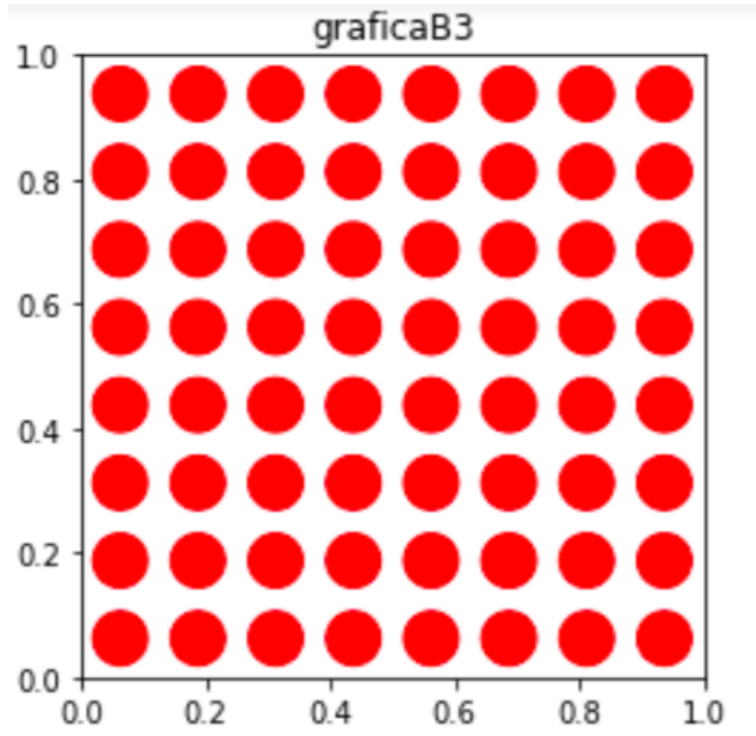


Figura 4: Imagen generada para discos en una caja con  $N = 64$  y  $\eta = 0,42$

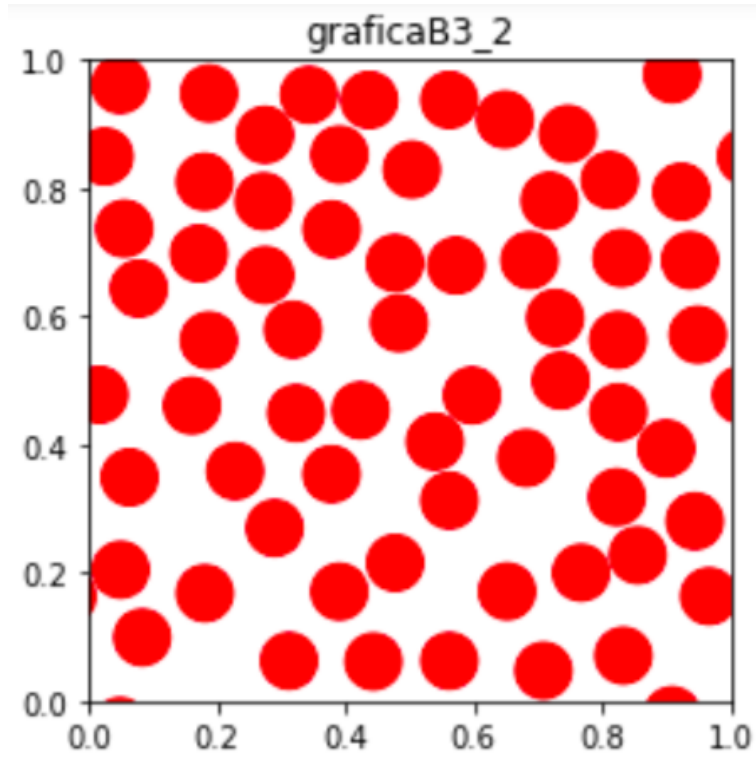


Figura 5: Imagen final generada para discos en una caja con  $N = 64$  y  $\eta = 0,42$

De las gráficas o imágenes obtenidas se puede concluir que en la figura 4 se muestra la configuración inicial y luego esta se pasa por las cadenas de Markov con  $n\_steps = 10000$ . Quiere decir que se está tomando cada disco y se está moviendo una cantidad  $x$  hacia una dirección arbitraria. La gráfica 5 muestra el estado final, como se puede observar los discos tienen mayor libertad de movimiento porque al utilizar una densidad mucho más baja que la densidad crítica encontrada pueden tener mayores estados posibles. Esta última configuración se ve muy distinta y se pueden notar grandes cambios comparada con la figura anterior después de utilizar las cadenas de Markov, por lo tanto este movimiento se puede aproximar al de un líquido, en donde las partículas gozan de mayor libertad para moverse.

## B5

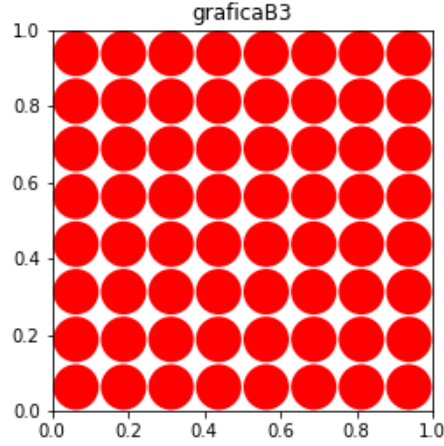


Figura 6: Imagen generada para discos en una caja con  $N = 64$  y  $\eta = 0,72$

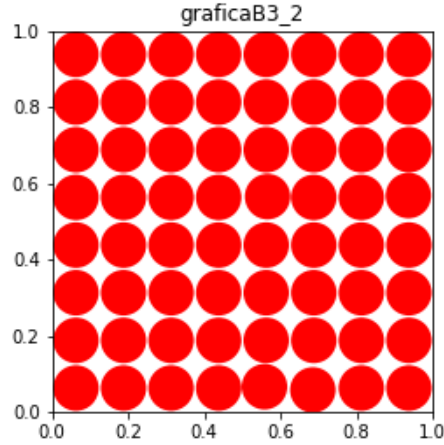


Figura 7: Imagen final generada para discos en una caja con  $N = 64$  y  $\eta = 0,72$

En esta sección se realiza lo mismo que en la sección anterior solo que ahora se utiliza una densidad mayor que la anterior, con un valor de 0,72, la cual es cercana a la densidad crítica mencionada

anteriormente en la tarea. Para este valor de densidad se observa en la figura 6 que los discos están más cerca unos de otros. Al correr el programa obtenemos la imagen 7, en donde vemos resultados esperados, ya que al tener una densidad mayor y cercana al valor crítico se tienen menos estados posibles. Los discos se mueven distancias muy pequeñas por lo que podemos concluir que, para este caso, los discos se comportan similar al acomodo atómico de un sólido, a diferencia de la sección anterior que se comportaban como un líquido.

## C1

- Para el caso (a) el disco tiene 6 vecinos y sus centros forman un hexágono por lo que están separados unos de otros por  $60^\circ$  o en radianes por  $\frac{\pi}{3}$ . Las posiciones de los discos estarían dados respectivamente en radianes por  $(0, \frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}, \pi, \frac{4\pi}{3}, \frac{5\pi}{3})$  en sentido antihorario. Utilizando la ecuación dada

$$\psi_6(a) = \frac{1}{\text{número de vecinos}} \sum_j e^{6i_{imag}\phi_{ij}} \quad (1)$$

Resolviendo para los ángulos encionados obtenemos:

$$\psi_6(a) = \frac{1}{6}(e^{0i} + e^{2\pi i} + e^{4\pi i} + e^{6\pi i} + e^{8\pi i} + e^{10\pi i})$$

$$\psi_6(a) = \frac{1}{6}(1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1) = \frac{6}{6} = 1$$

Por lo tanto el valor de  $\psi_6(a)$  es:  $\psi_6(a) = 1$ , es un valor real

- Para el caso (b) el disco tiene 6 vecinos. Los discos en este caso están a  $30^\circ$  o en radianes por  $\frac{\pi}{6}$ , las posiciones de los discos están dados respectivamente en radianes por  $(\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{2}, \frac{5\pi}{6}, \frac{7\pi}{6}, \frac{3\pi}{2}, \frac{11\pi}{6})$  en sentido antihorario. Utilizando la ecuación 1 obtenemos:

$$\psi_6(b) = \frac{1}{6}(e^{\pi i} + e^{3\pi i} + e^{5\pi i} + e^{7\pi i} + e^{9\pi i} + e^{11\pi i})$$

$$\psi_6(b) = \frac{1}{6}(-1 + -1 + -1 + -1 + -1 + -1) = \frac{-6}{6} = -1$$

Por lo tanto el valor de  $\psi_6(b)$  es:  $\psi_6(b) = -1$ , es un valor real

- Para el caso de (c) el disco tiene 6 vecinos. El primer disco se encuentra a  $15^\circ$  o  $\frac{\pi}{12}$  del eje x y los demás centros se encuentran a  $60^\circ$  o en radianes por  $\frac{\pi}{3}$ , por lo tanto a este dato se le deben sumar los  $15^\circ$ . Las posiciones de los discos están dados respectivamente en radianes por  $(\frac{\pi}{12}, \frac{5\pi}{12}, \frac{3\pi}{4}, \frac{13\pi}{12}, \frac{17\pi}{12}, \frac{7\pi}{4})$  en sentido antihorario. Utilizando la ecuación 1 obtenemos:

$$\psi_6(c) = \frac{1}{6}(e^{\frac{\pi}{2}i} + e^{\frac{5\pi}{2}i} + e^{\frac{9\pi}{2}i} + e^{\frac{13\pi}{2}i} + e^{\frac{17\pi}{2}i} + e^{\frac{21\pi}{2}i})$$

$$\psi_6(c) = \frac{1}{6}(i + i + i + i + i + i) = \frac{6i}{6} = i$$

Por lo tanto el valor de  $\psi_6(c)$  es:  $\psi_6(c) = i$ , es un valor imaginario.

- $\psi_6(a) + \psi_6(b) = 1 + -1 = 0$



## C2

- Como las configuraciones A y B se extienden hasta el infinito entonces los parámetros locales van a ser los mismos, quiere decir que  $\psi_6(i)$  va a ser igual para cada disco de dicha configuración, ya que no hay bordes que generen asimetrías. Por lo tanto, la configuración A es equivalente a la configuración a de la sección anterior, al igual que B es equivalente a b. Concluimos que  $\psi_6(A) = \psi_6(a) = 1$  y  $\psi_6(B) = \psi_6(b) = -1$
- Para un valor de densidad igual a  $\eta = 0,42$  que es un valor de densidad bajo, como se mencionó anteriormente en la tarea, los discos están más separados y se puede aproximar a un líquido. Por lo tanto podemos concluir que el parámetro de orden va a tender a cero, porque los parámetros de órdenes locales van a ser valores muy pequeños y van a estar divididos por valores de N muy grandes.