



UNIVERSIDAD DE SONORA
Departamento de Física

DESARROLLO EXPERIMENTAL II
PORTAFOLIO I - TAREA II
Por WyL Alberto Félix Guillen

Objetivo: Continuar en la elaboración de códigos en lenguaje Fortran para construir configuraciones iniciales haciendo énfasis en que las longitudes de las celdas sean dependientes de la concentración y el número de partículas, así como también a la generación de posiciones aleatorias. En el desarrollo de la tarea 2 se utiliza, cuando es necesario, el diámetro $\sigma = 1,0$ de las partículas como unidad para reducir.

Actividad I: Generador de números aleatorios y π

Instrucción: Utilizar alguno de los generadores de números aleatorios con distribución uniforme con valores comprendidos en el intervalo $[0, 1]$ utilizados previamente en sus cursos de programación.

Estimando π : Tomando como base los elementos planteados en las notas que se incluyen en el anexo, estime el valor de π . Experimente lo necesario para diferentes números N de dardos seleccionados por Usted.

- i) Incluya en su código el cálculo del error relativo ϵ , tomando como base el valor conocido de π con 4 decimales.
 - ii) Muestre gráficamente el comportamiento de π vs N
 - iii) Muestre gráficamente el comportamiento de ϵ vs N .
-

Un método para aproximar π

Introducción

Los métodos numéricos que implican el muestreo de números al azar se llaman los métodos de Monte Carlo. En el siguiente se describirá tal método usado para aproximar al número π .

¿Cómo calcular?

Tenemos que considerar un círculo unitario ($radio = 1$) dentro de un cuadrado con los lados iguales a 2 (véase la figura 1). Ahora, si escogemos un punto al azar (x, y) donde x, y

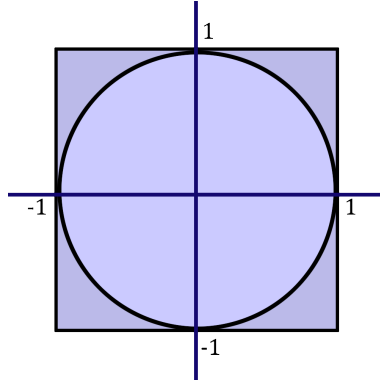


Figura 1: Cuadrado de radio 1

$\in [-1, 1]$, la probabilidad de que este punto al azar se encuentre dentro del círculo unitario se da como la proporción entre el área del círculo unitario y el cuadrado:

$$P(x^2 + y^2 < 1) = \frac{A_{circle}}{A_{square}} = \frac{\pi}{4}.$$

Si escogemos puntos al azar N veces y M de esas veces el punto cae dentro del círculo unitario, la probabilidad de que un punto al azar caiga dentro de dicho círculo estará dado por:

$$P^0(x^2 + y^2 < 1) = \frac{M}{N},$$

donde el superíndice indica que esta es una distribución discreta (porque M y N son números enteros). Pero si N es un número muy grande (teóricamente infinito), las dos probabilidades deberán ser iguales y podemos escribir:

$$\pi = \frac{4M}{N}.$$

Programación

Como usted puede ver, en la fórmula final para el número pi, la precisión (número de dígitos) depende de cuántas veces escoge usted un punto. A mayores N y M se consiguen mayores dígitos. Usted puede elaborar un programa en el lenguaje de su preferencia para intentar calcular el número pi.

SOLUCIÓN: Este programa es simple en el sentido de que su funcionamiento es tal como se describió anteriormente y, además, el código es corto.

Breve descripción del programa: Se le solicita al usuario que introduzca un número entero N , el cual se refiere al número total de veces que se ha de "lanzar un dardo", esto es, generar números aleatorios. Con estos números aleatorios se calculan dos coordenadas, x y y , tal que éstas se encuentren dentro (o sobre) el cuadrado (figura 1), esto es $x, y \in [-1, 1]$.

Calculadas las coordenadas se procede a determinar la distancia (en el código d) del origen $(0, 0)$ al punto (x, y) ; si d es menor o igual que 1 entonces el punto (x, y) está dentro (o sobre) del círculo, fuera de él en el caso contrario. Con una variable M contamos las veces que el punto está dentro del círculo y con otra, llamada NDC en el código, contamos las que no. Después aproximamos π usando la relación antes expuesta

$$\pi \approx \frac{4M}{N}.$$

También calculamos el error relativo (e en el código) y posteriormente el error relativo porcentual usando

$$\epsilon = \frac{|\pi_{approx} - \pi_{real}|}{\pi_{real}}.$$

Finalmente se genera un archivo con toda la información calculada siguiendo el formato: *número de lanzamiento, aproximación de pi, error relativo porcentual, número de veces que el punto estuvo dentro del círculo y número de veces que el punto estuvo fuera del círculo.*

Se presenta a continuación la manera en la que cambia nuestra aproximación de π y el error relativo porcentual (e) cuando aumenta N .

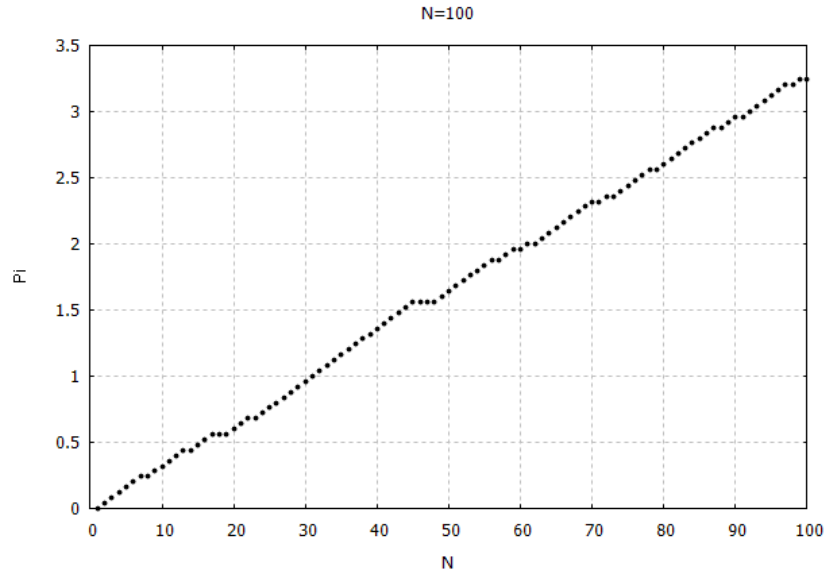


Figura 2: Aproximación de π VS N con $N = 100$

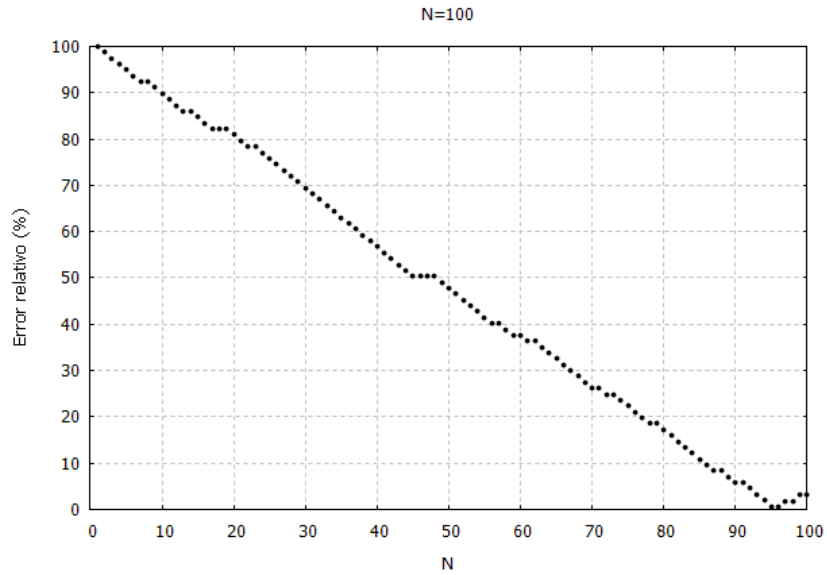


Figura 3: Error relativo porcentual e VS N con $N = 100$

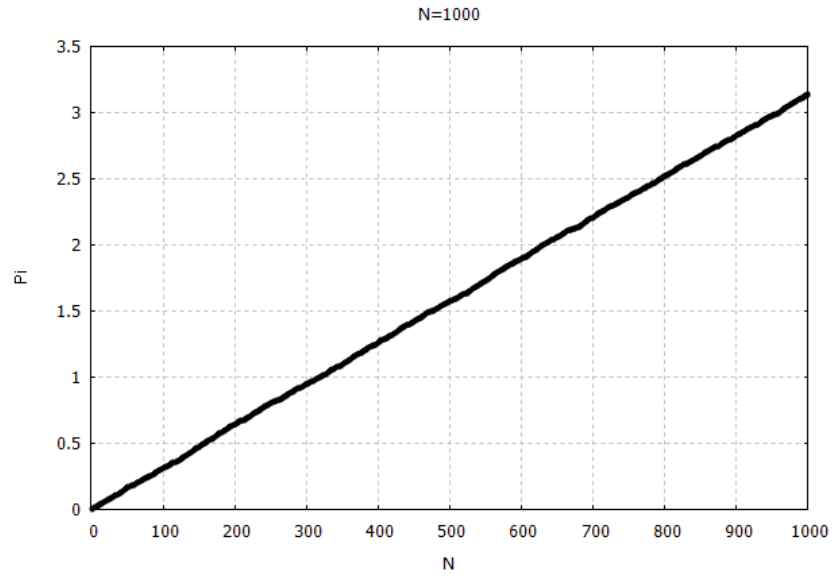


Figura 4: Aproximación de π VS N con $N = 1000$

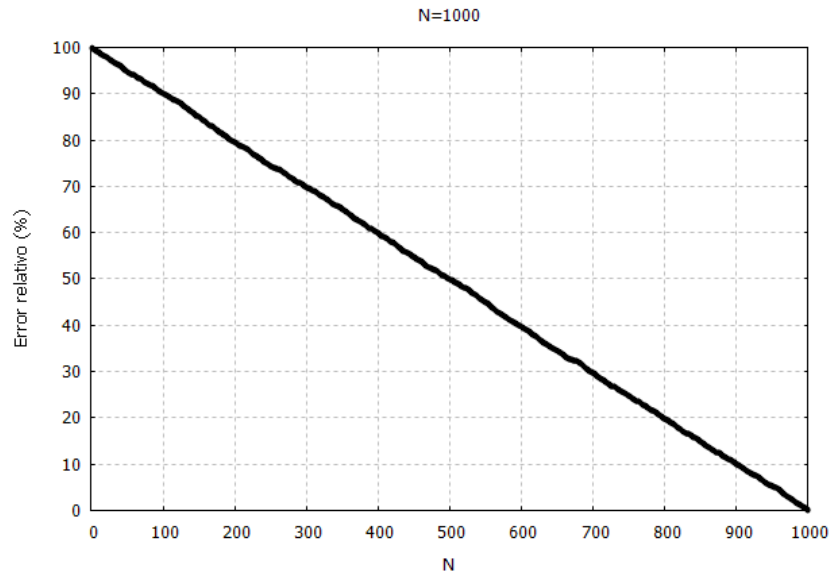


Figura 5: Error relativo porcentual e VS N con $N = 1000$

En las cuatro imágenes anteriores se hace evidente que tanto nuestra aproximación de π como el error relativo e porcentual cambian "linealmente" cuando cambia (aumenta) N .

Actividad II: Configuración inicial aleatoria tridimensional

Instrucción: Adaptar el código presentado en clase para construir una configuración inicial aleatoria tridimensional sin traslapes. Ejecutar el programa para obtener configuraciones iniciales para los casos siguientes:

- Concentración reducida fija en $n^* = 0,4$ y $N = 125, 512$ y 1000 partículas
- Número de partículas fijo en $N=512$ y $n^* = 0.2, 0.6$ y 0.8 .

En cada caso:

- Incluir en su código la instrucción que lleve a mostrar la longitud de la celda
- Mostrar gráficamente la distribución de partículas obtenida donde se aprecie con claridad la longitud de la celda correspondiente.

SOLUCIÓN: Se trata de construir una configuración inicial aleatoria tres-dimensional tal que las partículas no se traslapen entre sí.

Breve descripción del programa: Inicialmente el programa solicita al usuario el número total de partículas N y la densidad reducida n^* . Nuestra unidad para reducir es el diámetro σ de las partículas tal que $\sigma = 1,0$. Una vez proporcionada esta información, se calcula la longitud L^* ($BOXL$ en el código) de cada lado del cubo.

En una subrutina, con N y $BOXL$ datos de entrada, y un generador de números aleatorios se procede a calcular las coordenadas X , Y y Z de cada partícula. En esta subrutina se incluye una condición para asegurar que las partículas no se traslapan, tal condición es

$$\sigma^2 \leq (X(I) - X(J))^2 + (Y(I) - Y(J))^2 + (Z(I) - Z(J))^2,$$

que es la separación al cuadrado entre la i -ésima partícula y la j -ésima. Una vez calculadas todas las coordenadas de todas las partículas de manera aleatoria (usando la subrutina generadora de números aleatorios) se genera un archivo donde se incluye la etiqueta ($i = 1, 2, \dots, N$) y coordenadas X , Y y Z de cada partícula. A continuación se muestran algunos ejemplos con la información especificada en la instrucción.

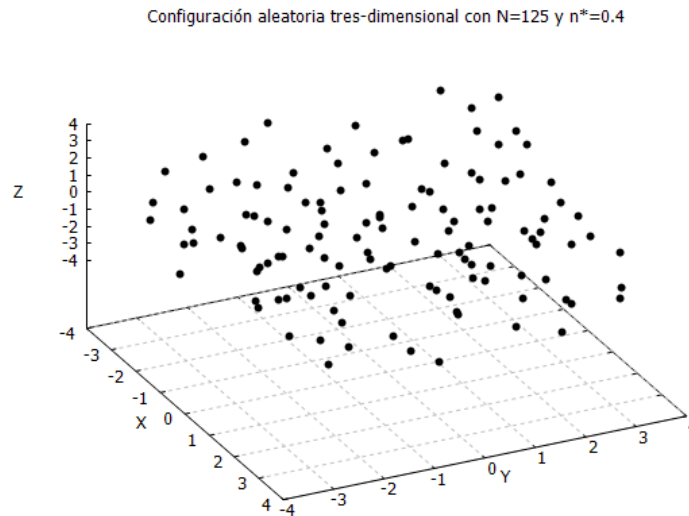


Figura 6: Configuración inicial aleatoria tres-dimensional sin traslape con $N = 125$ y $n^* = 0,4$

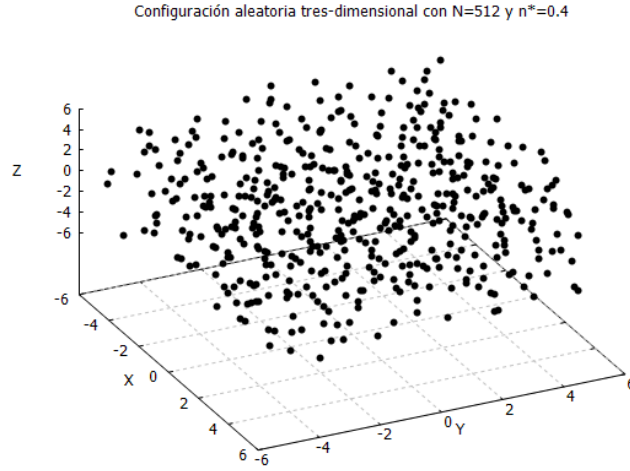


Figura 7: Configuración inicial aleatoria tres-dimensional sin traslape con $N = 512$ y $n^* = 0,4$

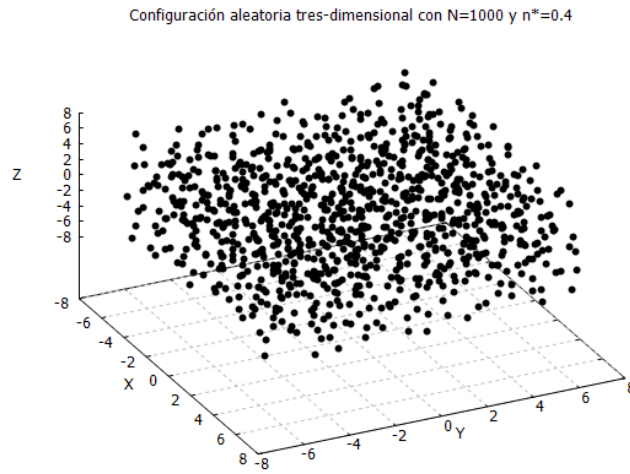


Figura 8: Configuración inicial aleatoria tres-dimensional sin traslape con $N = 1000$ y $n^* = 0,4$

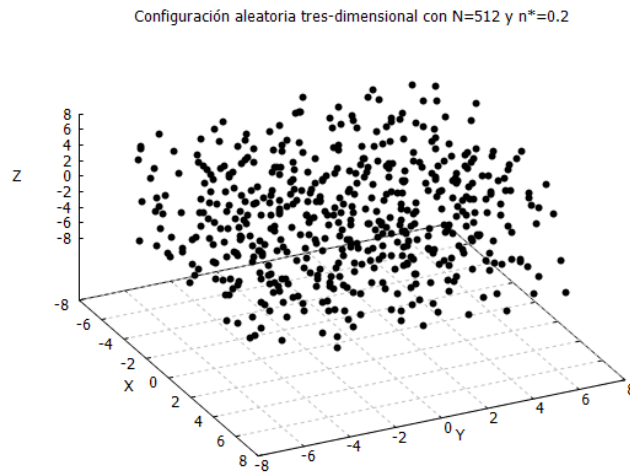


Figura 9: Configuración inicial aleatoria tres-dimensional sin traslape con $N = 512$ y $n^* = 0,2$

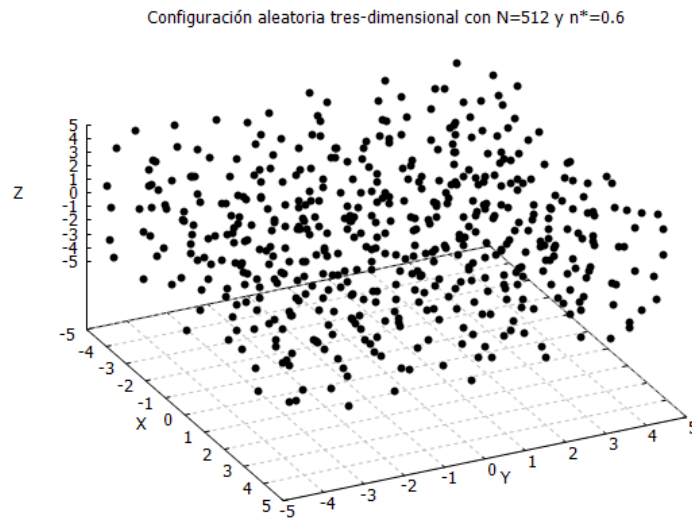


Figura 10: Configuración inicial aleatoria tres-dimensional sin traslape con $N = 512$ y $n^* = 0,6$

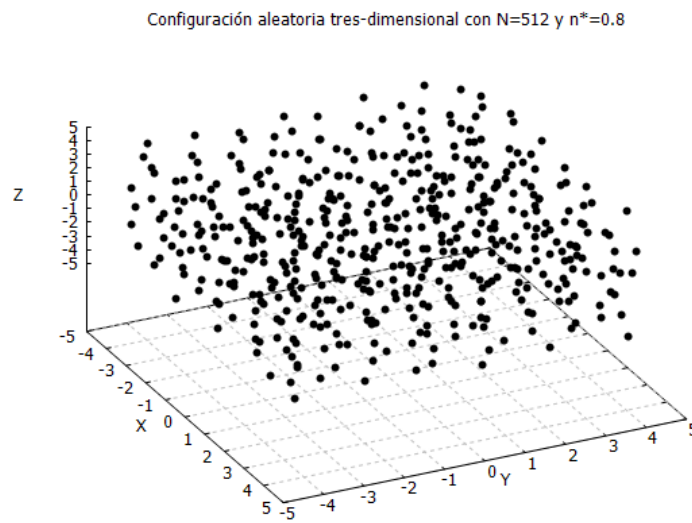


Figura 11: Configuración inicial aleatoria tres-dimensional sin traslape con $N = 512$ y $n^* = 0,8$

Actividad III: Configuración inicial aleatoria bidimensional

Instrucción: Modificar la Actividad 2 para construir configuraciones iniciales aleatorias. Puede utilizar los mismos valores de los parámetros.

SOLUCIÓN: El objetivo de este programa es construir configuraciones iniciales dos-dimensionales aleatorias sin que haya traslape entre partículas. Los datos o valores de entrada son el número de partículas N y la densidad reducida n^* . Una vez introducida la información correspondiente, se calcula la longitud de la celda L^* . En este punto, el programa muestra en pantalla un breve registro de la información que ha de utilizar para proceder a generar la configuración inicial.

Se llama a una subrutina, llamada **CONFIGINI**, donde en ésta se calculan cada una de las coordenadas de todas las partículas de manera aleatoria, para hacer esto se utiliza una subrutina que genera números aleatorios. El programa verifica mediante un **IF** que las partículas no se traslapen. Finalizado el ciclo correspondiente, se escriben en un archivo las coordenadas de todas las partículas.

Concluido lo anterior, el programa principal indica que el cálculo ha finalizado y se describe brevemente la información generada.

Algunos ejemplos son los siguientes:

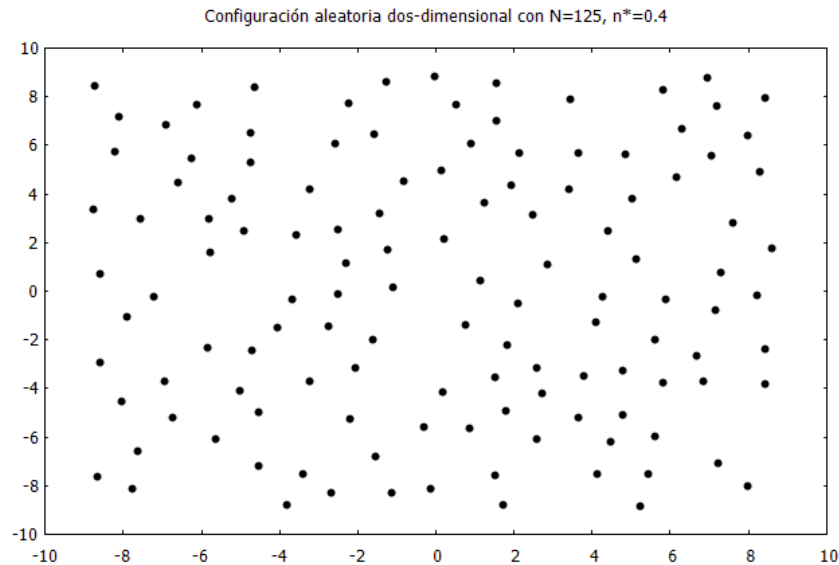


Figura 12: Configuración inicial aleatoria dos-dimensional sin traslape con $N = 125$ y $n^* = 0,4$

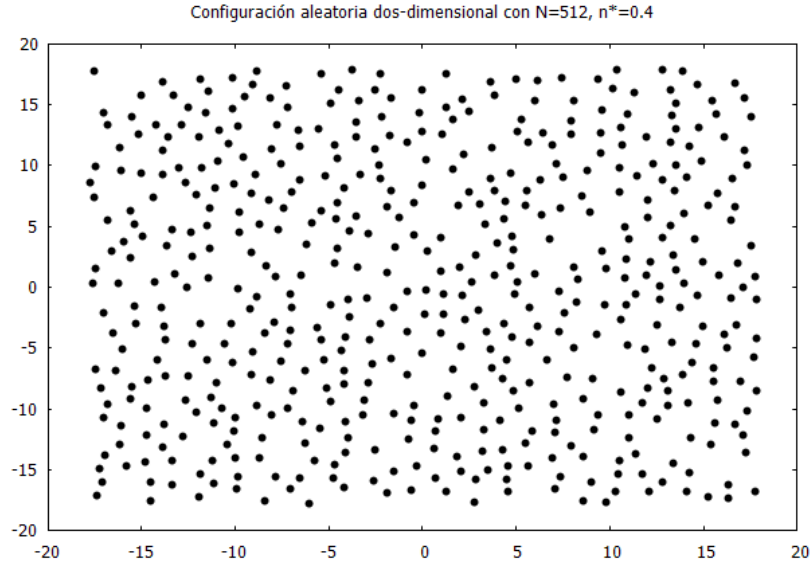


Figura 13: Configuración inicial aleatoria dos-dimensional sin traslape con $N = 512$ y $n^* = 0,4$

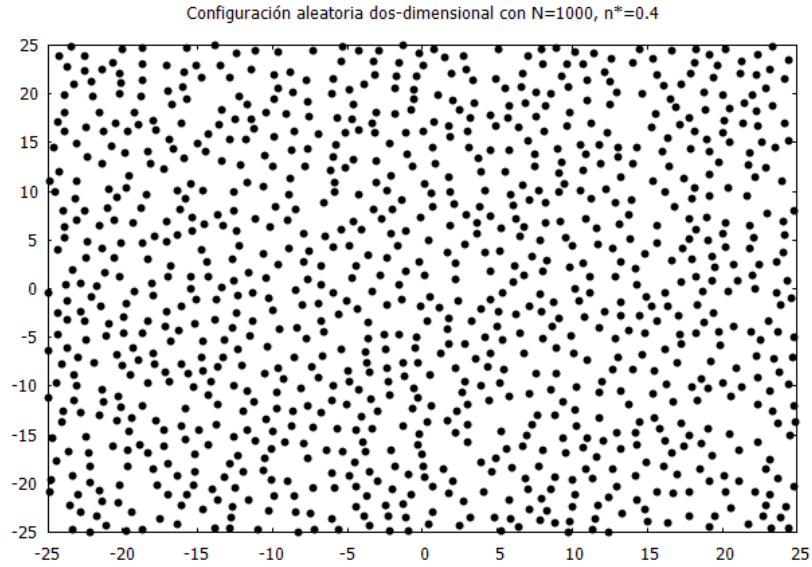


Figura 14: Configuración inicial aleatoria dos-dimensional sin traslape con $N = 1000$ y $n^* = 0,4$

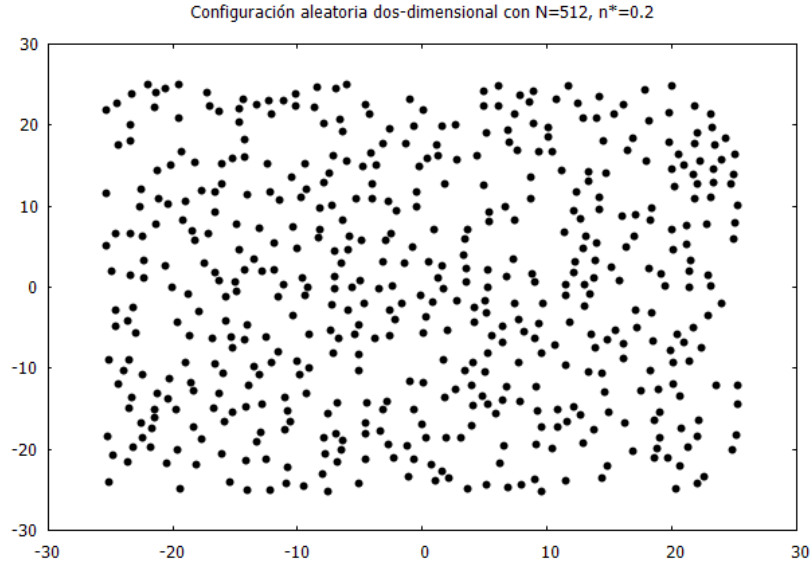


Figura 15: Configuración inicial aleatoria dos-dimensional sin traslape con $N = 512$ y $n^* = 0,2$

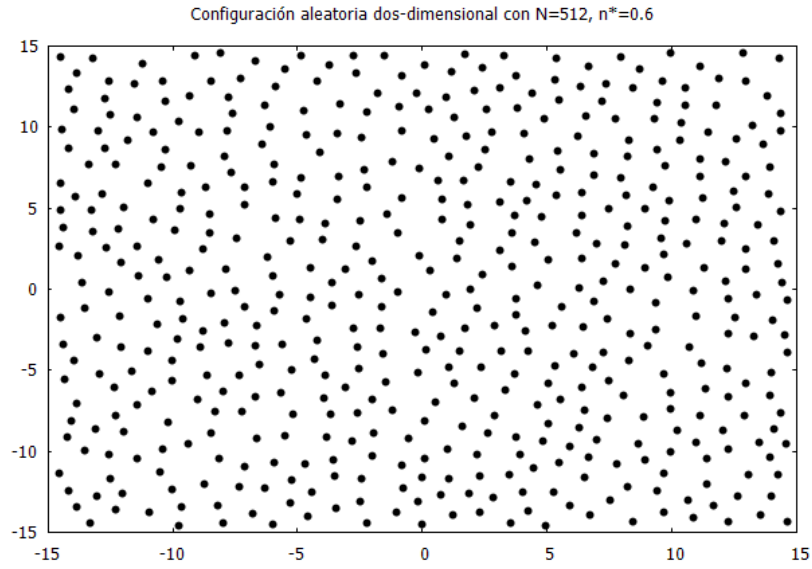


Figura 16: Configuración inicial aleatoria dos-dimensional sin traslape con $N = 512$ y $n^* = 0,6$

En cada una de las imágenes es evidente que nuestro código funciona adecuadamente (las partículas no se salen de la celda y la configuración es aleatoria).

Actividad IV: Configuración inicial regular cúbica (tres dimensiones)

Instrucción: Extender la Actividad anterior para el caso en tres dimensiones, pero ahora determinar la longitud de la celda dependiendo de la concentración del sistema. Para ello, haga uso de los parámetros de la Actividad 2.

SOLUCIÓN: Decidí crear dos versiones de este programa. En la primera es necesario indicar el número de partículas por lado del cubo; en la segunda el número total de partículas. Ésta es la única diferencia. Por este motivo decidí utilizar la primera versión para generar algunos ejemplos.

El programa requiere como información de entrada el número de partículas por lado del cubo, como ya se indicó, y la densidad reducida. Con los valores de estas variables procede a realizar el cálculo de la longitud del lado de la caja y asignar dimensiones a cada una de las coordenadas (X, Y, Z). Inmediatamente muestra en pantalla un breve registro sobre la información introducida y calculada.

Tal como se realizó en la actividad 3 de la tarea 1, se determina si N , el número de partículas por lado, es par o impar. Según sea el caso; lo siguiente, es decir, el cálculo de coordenadas de todas las partículas, es idéntico a la actividad 3 antes mencionada. Solo se agrega el cálculo correspondiente para la coordenada Z.

Finalmente, el programa guarda en un archivo todos los cálculos de las posiciones de cada partícula y escribe en pantalla una breve información sobre la ejecución del programa.

Las características de esta configuración es que es regular y en tres dimensiones. Algunos ejemplos son:

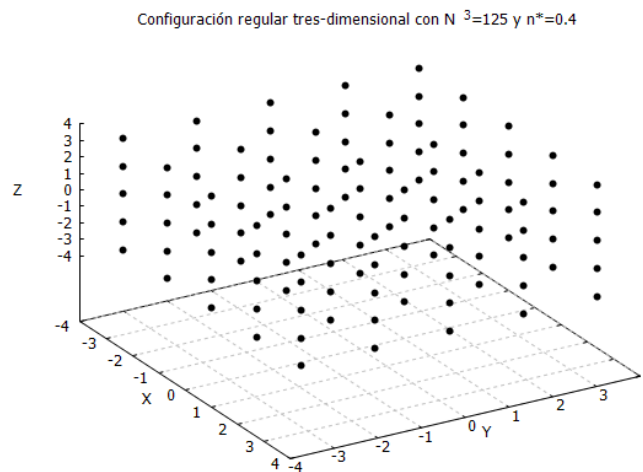


Figura 17: Configuración regular cúbica con $N = 125$ y $n^* = 0,4$

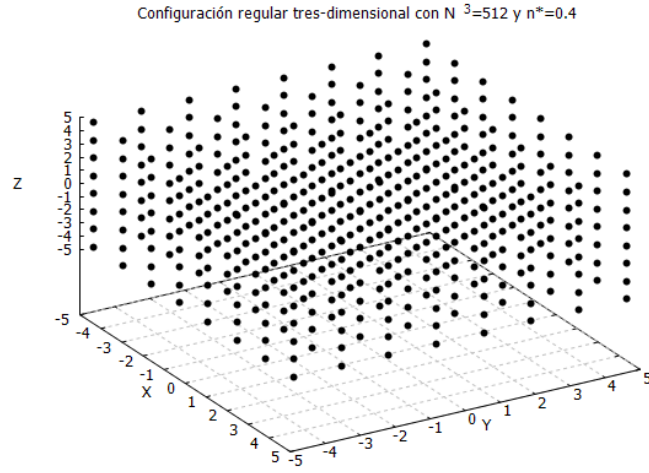


Figura 18: Configuración regular cúbica con $N = 512$ y $n^* = 0,4$

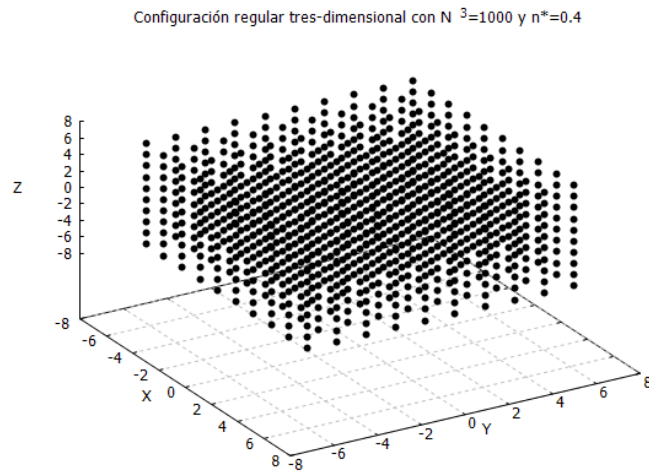


Figura 19: Configuración regular cúbica con $N = 1000$ y $n^* = 0,4$

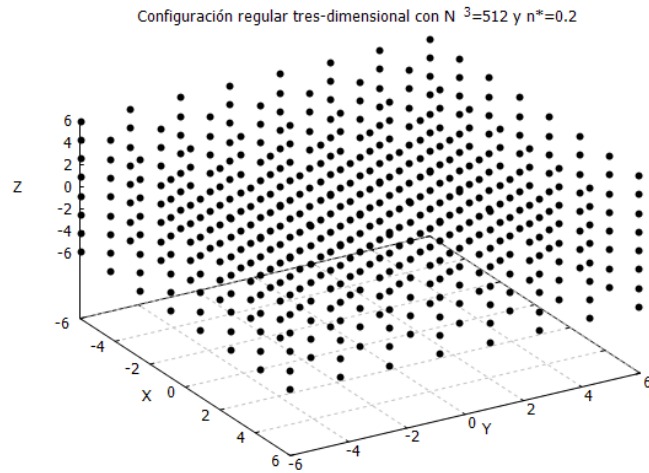


Figura 20: Configuración regular cúbica con $N = 512$ y $n^* = 0,2$

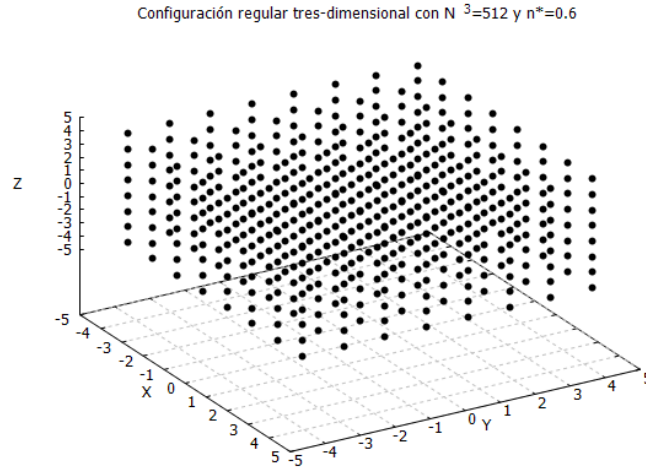


Figura 21: Configuración regular cúbica con $N = 512$ y $n^* = 0,6$

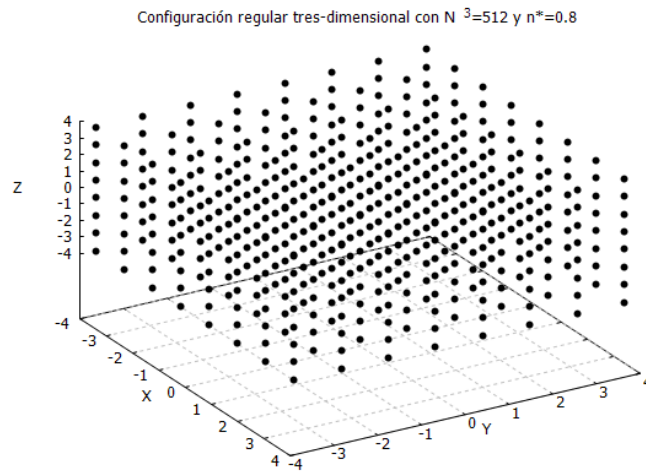


Figura 22: Configuración regular cúbica con $N = 512$ y $n^* = 0,8$

En cada uno de los ejemplos anteriores se verifica (en primera instancia con observación), que nuestra programa funciona según nuestros requerimientos.

Actividad V: Empaquetamiento de esferas duras.

Instrucción: Para un sistema de esferas duras del mismo diámetro, investigar sobre los valores de:

- i) Máxima fracción en volumen (**close packing**);
- ii) Fracción en volumen de empaquetamiento aleatorio (**random close packing**)

SOLUCIÓN:

- i) **Matemáticamente** este es un problema geométrico. Fue estudiado por Carl Friedrich Gauss y existe una conjetura respecto al tema; se le conoce como la conjetura de Kepler. **Físicamente**, existen algunas estructuras cristalinas de metales, aleaciones y compuestos inorgánicos que se pueden describir geoméricamente en términos de un "empaquetamiento" cerrado de esferas idénticas unidas mediante alguna fuerza. Se observa que las estructuras asumidas son consecuencia del empaque más eficiente de las unidades involucradas. Dado que estas unidades pueden representar átomos, iones o moléculas de forma aproximadamente esférica, puede ser interesante estudiar la forma más eficiente de empaquetar esferas duras de igual tamaño en tres direcciones.

Si una gran cantidad de esferas de igual tamaño se colocan en un recipiente y se agitan, se dispondrán de manera que ocupen volumen. La distribución de tales esferas se muestra en la figura (23).

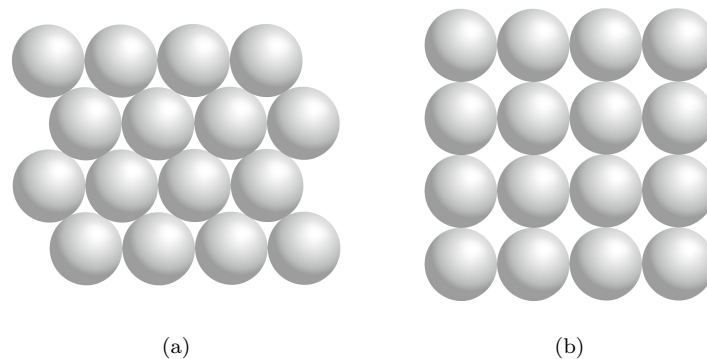


Figura 23: Distribución de esferas iguales

La distribución que se muestra en (a) es más "económica" que la que se muestra en (b). El empaque está más cerca cuando las esferas se organizan, de modo que sus centros están en las esquinas de un triángulo equilátero, como se muestra en la figura (24a). Cada esfera en la disposición más cercana está en contacto con otras seis esferas, como se muestra en la figura (24b).

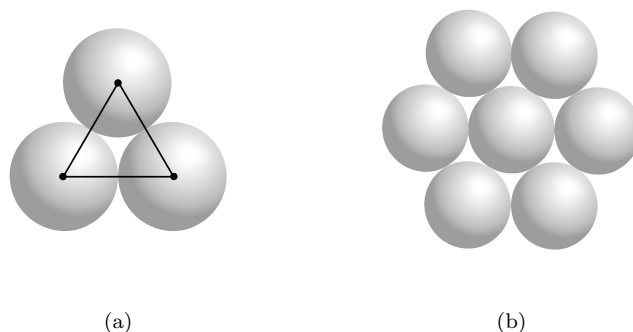
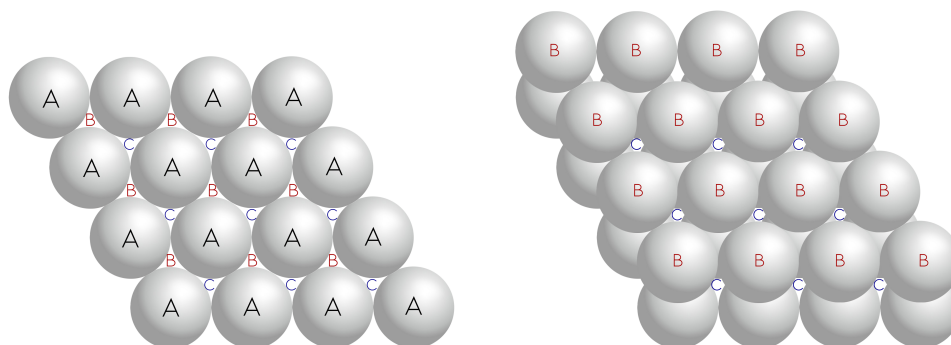


Figura 24

Los centros de cada una de estas seis esferas están dispuestos hexagonalmente. Ahora, si comenzamos a construir capas sucesivas en la parte superior de la primera capa, esferas marcadas con **A**, figura (25a), pronto nos daremos cuenta de que las esferas de la segunda capa pueden colocarse en los huecos que están marcados con **B** o en el otro conjunto de huecos que están marcados con **C**, figura (25b).



(a) Los sitios creados por la capa 1 y disponibles para aceptar átomos la segunda capa, ya sea en los huecos **B** o **C**.

(b) La cobertura de todos los huecos **B** por los átomos en la segunda capa hace que los sitios **C** no estén disponibles para ser ocupados por átomos empaquetados.

Figura 25

Para construir la tercera capa, tenemos la opción de organizar las esferas de dos maneras diferentes:

-La tercera capa de esferas puede colocarse en los huecos de las segundas capas, de modo que cada esfera de la tercera capa se encuentre estrictamente sobre una esfera de la primera capa. En tal distribución, la primera y la tercera capas son exactamente idénticas. Esta distribución de empaquetamiento cerrado de esferas se denomina distribución **ABA** de empaquetamiento de esferas.

-Alternativamente, las terceras capas pueden colocarse en el segundo conjunto de huecos que se marcaron con **C** en la primera capa. Estos huecos se dejaron sin cubrir mientras se disponía la segunda capa de esferas. Esta distribución de empaquetamiento se denota como tipo de empaquetamiento **ABC**.

Cuando la disposición de **ABABABA...** del empaquetamiento continúa indefinidamente, el sistema posee simetría **hexagonal**. Esto implicaría que la estructura posee un eje de simetría de seis pliegues que es perpendicular a los planos de las esferas cerradas. Tal distribución de empaquetamiento tridimensional de esferas se muestra en la figura (26a)¹. Debido a su simetría hexagonal, esta distribución se denomina empaquetamiento cerrado hexagonal de esferas a menudo abreviado como **HCP**.

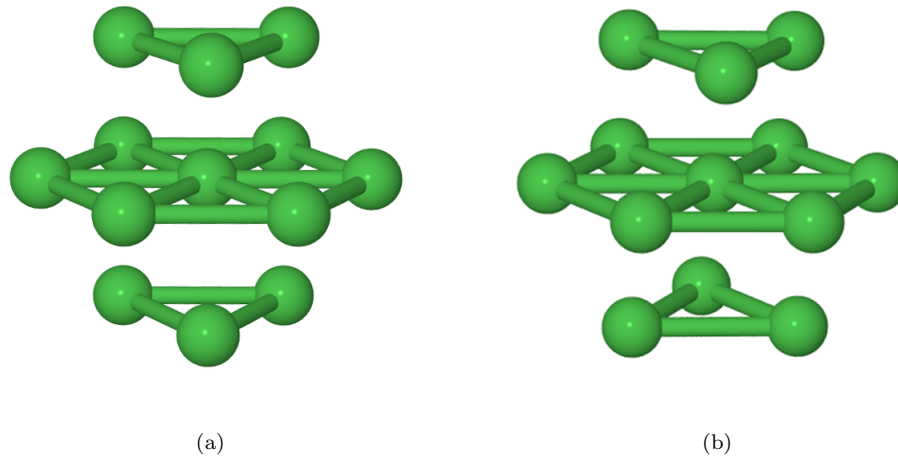


Figura 26

Cuando se continúa con la disposición de empaquetamiento **ABCABC...** (i.e., cada cuarta capa está situada directamente encima de la primera capa), el sistema posee simetría cúbica. El arreglo se muestra en la figura (26b). La estructura ahora tiene tres ejes de simetría de 4 pliegues. La distribución se denomina empaquetamiento cúbico de esferas y se abrevia a menudo como **CCP**. También se desprende de este diagrama que en esta distribución tenemos una esfera en el centro de cada cara del cubo unitario. Esta distribución de esferas también se conoce como cara cúbica centrada (FCC).

En estos dos tipos de arreglos cerrados, el volumen máximo de espacio ocupado por las esferas es aproximadamente 74 %. Más precisamente, Gauss demostró que el volumen es

$$\frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,740480489...$$

- II) En el caso i) hemos hablado acerca de arreglos o empaquetamientos regulares. Ahora extenderemos la descripción a aquellos que son aleatorios; en este caso se dice que el empaquetamiento "no tiene una definición geométrica precisa". Así, el empaquetamiento cerrado aleatorio (**RCP**), similar al caso anterior, es un parámetro, denotado por η_{CRP} que nos permite caracterizar la fracción de volumen máximo de objetos sólidos obtenidos cuando se empaquetan aleatoriamente.

En el caso anterior las unidades son tratadas como esferas idénticas, en este caso las esferas son un caso particular. Pueden ser, por ejemplo, elipsoides, esferas polidispersas, etc.

¹Esta figura no fue creada por mi, ver referencia 1.

Para el **empaquetamiento aleatorio de esferas duras polidispersas**, algunos valores estimados de η_{CRP} usando Montecarlo son^[3]

η_{CRP}
$0,64 \pm 0,02$
$0,62 - 0,64$
$0,6366 \pm 0,0005$
$0,6366 \pm 0,0004$
$0,637 \pm 0,002$

Para discos duros²

η_{CRP}
$0,82 \pm 0,02$
$0,81 \pm 0,02$
$0,821 \pm 0,002$
$0,82$
$0,830 \pm 0,015$

Para esferas duras monodispersas el valor de η_{CRP} es justamente el valor presentado en i).

Comentarios y observaciones finales

Parte del contenido aquí expuesto fue reutilizado de la tarea anterior, en consecuencia, las descripciones tanto de la tarea 1 como de la tarea 2 se complementan.

En el presente trabajo, el programa de la actividad I (estimación de π) lo probé con distintos valores de N ("número de lanzamientos") y a mayor N no necesariamente la aproximación era mejor, muy pocas veces. Supongo que este comportamiento se debe al generador de números aleatorios.

En cuanto a la actividad IV, realicé dos versiones del programa correspondiente, las gráficas que presenté son producto de una de ellas. Sin embargo, el resultado de ambas es el mismo.

Finalmente, en la actividad V mostré dos tablas para la estimación del parámetro de empaquetamiento aleatorio mediante algún método particular, cada una para un sistema particular: esferas duras y discos duros, ambos polidispersos. En la referencia correspondiente se detalla el método que utiliza el autor para estimar η_{CRP}

Referencias

1. "Structure Of Solid: The Close Packing Of Spheres". Minerva.Mlib.Cnr.It, 2019, <https://minerva.mlib.cnr.it/mod/book/view.php?id=269&chapterid=84>. Accessed 9 Feb 2019.
2. P. Krishna, D. Pandey . Close-Packed Structures. Wales by University College, Cardiff: University College Cardiff Press, 1981.
3. James G. Berryman, Phys. Rev. A 27, 1053.
4. Notas del curso Desarrollo Experimental II para la estimación de π . Todas las imágenes expuestas en el presente resumen son de mi autoría, excepto la figura (26).