



UNIVERSIDAD DE SONORA
Departamento de Física

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

Objetivo: Mostrar los avances en la implementación de su código de simulación de Monte Carlo (NVT) para un sistema de discos duros (HD), realizando las actividades que se incluyen a continuación.

Modelo de potencial

El modelo de potencial entre pares que en el presente resumen utilizamos es el llamado *discos duros*, abreviado como HD. Una imagen meramente ilustrativa se presenta a continuación:

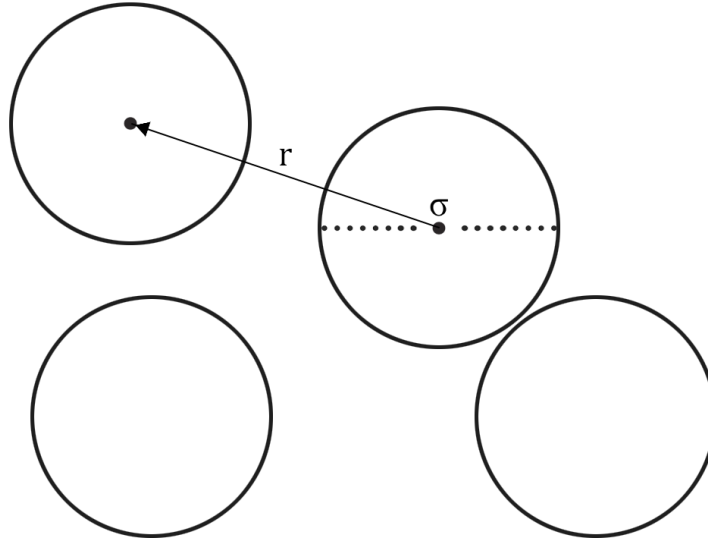


Figura 1: Ilustración

Matemáticamente, el potencial para HD, está dado por

$$\Phi(r) = \begin{cases} \infty & ; \quad r < \sigma \\ 0 & ; \quad r \geq \sigma \end{cases}$$

Donde r es la distancia entre el centro de los discos y σ el diámetro de cada disco. Reduciendo con el diámetro σ , el potencial de interacción puede escribirse en la forma

$$\Phi^*(r^*) = \begin{cases} \infty & ; \quad r^* < 1 \\ 0 & ; \quad r^* \geq 1 \end{cases}$$

donde $r^* = \frac{r}{\sigma}$. La expresión anterior es el potencial reducido y el que utilizaremos en este resumen.

Actividad I

Instrucción: Muestre el comportamiento de un sistema con concentración reducida pequeña ($n^* < 0,2$) a partir de una configuración inicial regular cuadrada. Seleccione usted los parámetros de simulación que considere pertinentes y documente mostrando gráficamente lo siguiente:

- I) Curva de termalización de la energía potencial por partícula vs configuración.
- II) Configuración inicial.
- III) Configuración final.
- IV) “Trayectoria” de una trazadora seleccionada arbitrariamente.

SOLUCIÓN: Lo primero que hice fue probar con distintos valores de las variables (o parámetros) para observar el comportamiento del sistema y descubrir como afectaba el cambio de cada una de las variables. Una vez probado lo suficiente elegí los parámetros que presento a continuación.

Corrida 1: Los datos que utilicé para la simulación fueron

Parámetros de la simulación elegidos	
Número de partículas (N)	100
Configuraciones totales (NSTEP)	50000
Configuración de equilibrio (NENER)	5000
Frecuencia de muestreo (ISAVE)	1
Corrección de paso (IRATIO)	500
Tamaño del ensemble (NN2)	45000
Densidad reducida (DENS)	0.1000
Desplazamiento máximo inicial (DRMAX)	0.3000
Criterio de aceptación (ACEPRATIO)	0.9500
Longitud de la celda (BOXL)	31.6228

Decidí comenzar con densidad reducida $n^* = 0,1$. Como es un sistema diluido permití que inicialmente las partículas se movieran aproximadamente una tercera parte de su diámetro (0.3). Además, consecuencia de que el sistema sea diluido y del valor del desplazamiento máximo inicial, el criterio de aceptación lo tomé como un valor alto: 0.95. Con estos criterios el valor máximo del desplazamiento máximo fue de 0.63, es decir, poco más del doble que el valor inicial (0.3).

Se produjeron un conjunto de archivos con la información calculada en el programa y que nos interesa estudiar.

A continuación muestro tanto la configuración inicial regular como la configuración final para los parámetros elegidos.

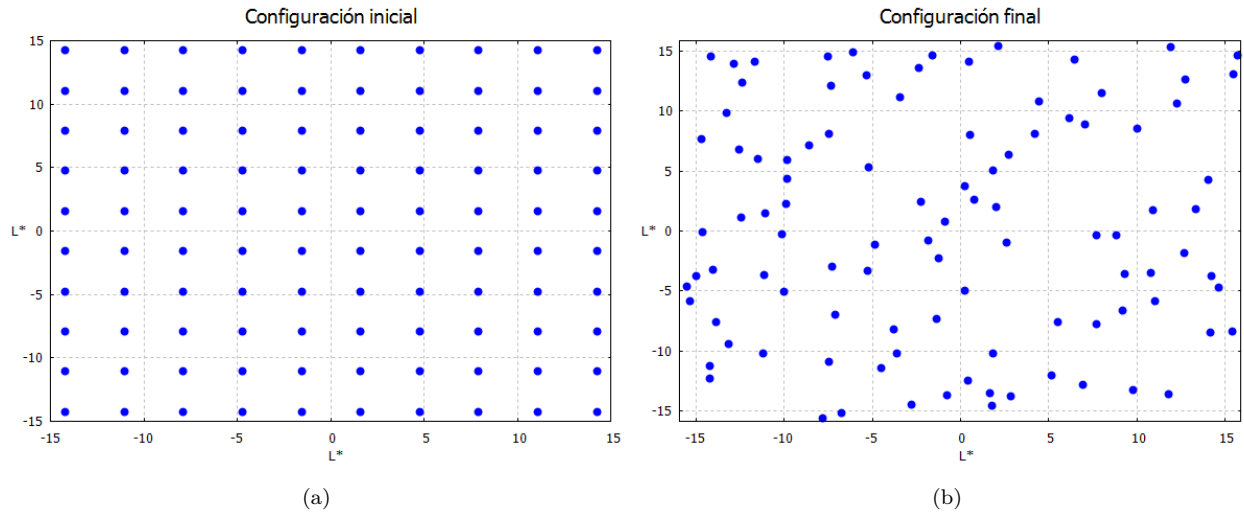


Figura 2: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial regular. En la **figura (b)** se muestra la configuración final.

La configuración inicial y final corresponden a una configuración de equilibrio (tomando como criterio el valor de la energía por partícula). La configuración de equilibrio que tomé fue la número 5000, la gráfica de termalización, figura (3a), sustenta mis palabras anteriores.

Anexo también la curva de termalización, precisamente para mostrar que el sistema llegó al equilibrio (energético), y los puntos sobre la curva de la función de distribución radial $g(r)$.

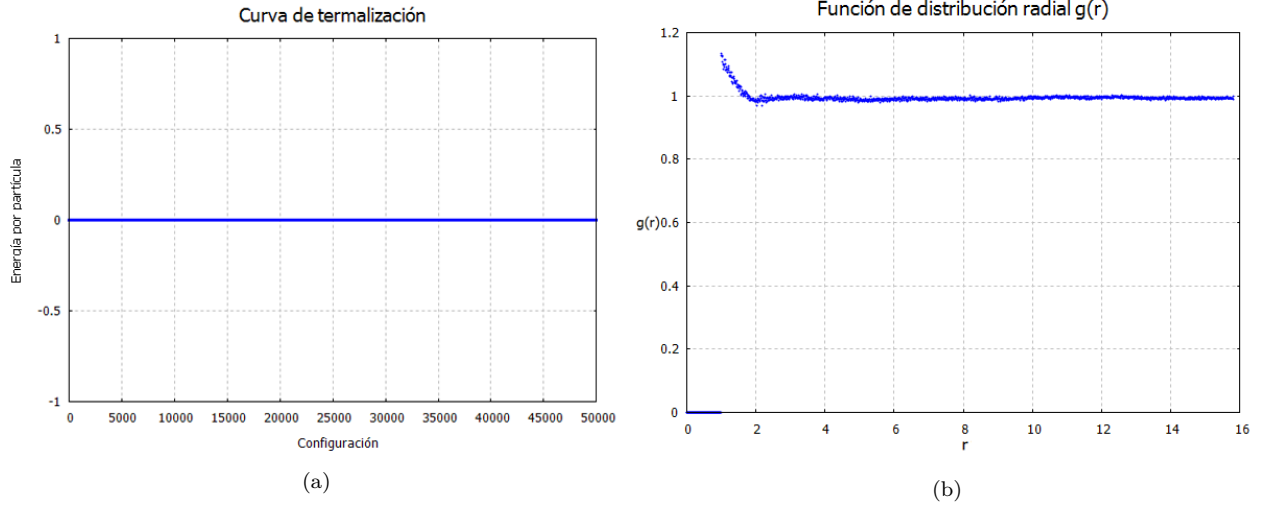


Figura 3: En la **figura (a)** se muestra el comportamiento de la energía por partícula (eje vertical) en cada configuración (eje horizontal). En la **figura (b)** se presentan algunos puntos sobre la función de distribución radial $g(r)$. En ésta se observa cómo hay demasiados pocos vecinos, consecuencia de que el sistema sea diluido. El comportamiento de la $g(r)$ es el esperado, en bulto la $g(r)$ fluctúa alrededor de 1. (en este caso ligeramente por debajo)

El código permite observar cada punto por el que pasa una de las 100 partículas desde su posición inicial (en la configuración inicial) hasta su posición final (en la configuración final), ésta se selecciona de manera aleatoria. El gráfico siguiente corresponde a la partícula 42.

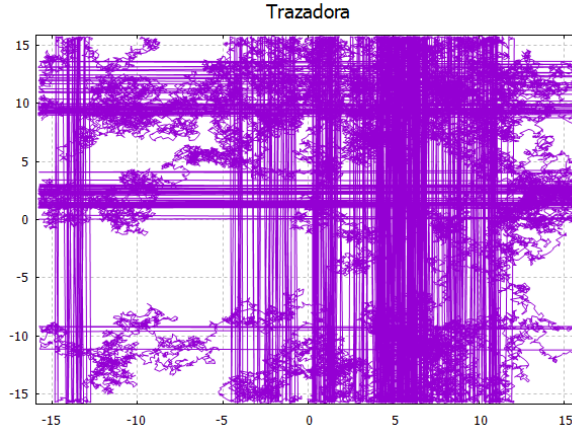


Figura 4: Partícula trazadora: 42. Tanto en el eje vertical como en el horizontal es L^* .

Corrida 2: Decidí ir a un caso más extremo, en el sentido de que la densidad reducida la tomé como un valor menor al presentado en el caso anterior: $n^* = 0,05$. Los parámetros de la simulación se presentan en la tabla siguiente.

Parámetros de la simulación elegidos	
Número de partículas (N)	100
Configuraciones totales (NSTEP)	50000
Configuración de equilibrio (NENER)	5000
Frecuencia de muestreo (ISAVE)	1
Corrección de paso (IRATIO)	500
Tamaño del ensemble (NN2)	45000
Densidad reducida (DENS)	0.0500
Desplazamiento máximo inicial (DRMAX)	0.4000
Criterio de aceptación (ACEPRATIO)	0.9500
Longitud de la celda (BOXL)	44.7214

Se produjeron un conjunto de archivos con la información calculada en el programa y que nos interesa estudiar. A continuación muestro las gráficas de cada uno de estos archivos.

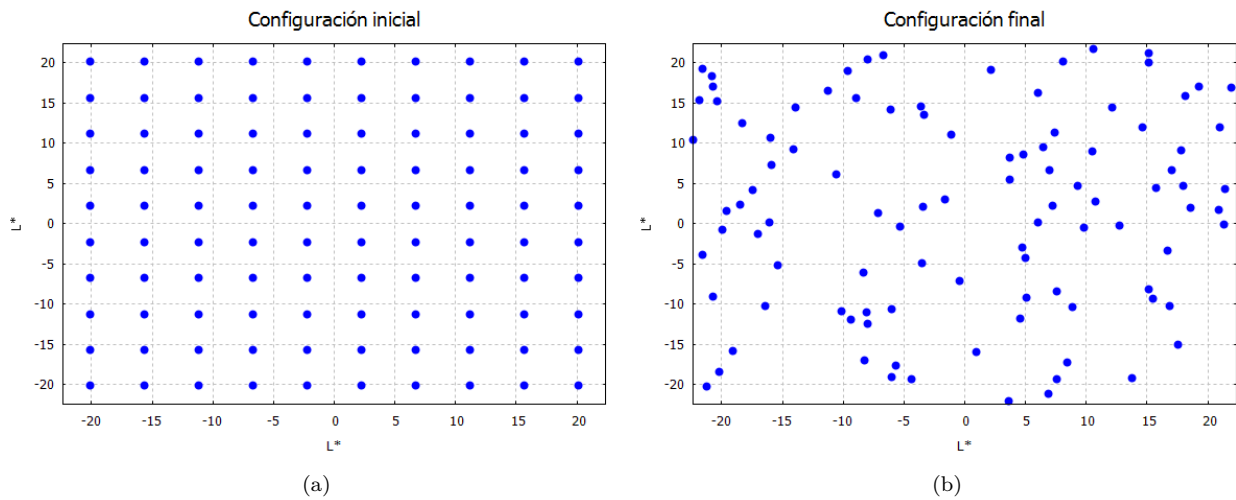


Figura 5: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial regular. En la **figura (b)** se presenta la configuración final.

En el caso de la partícula trazadora, el programa seleccionó aleatoriamente la partícula 66. La posición de esta partícula en cada una de las 50000 configuraciones se muestra en el siguiente gráfico.

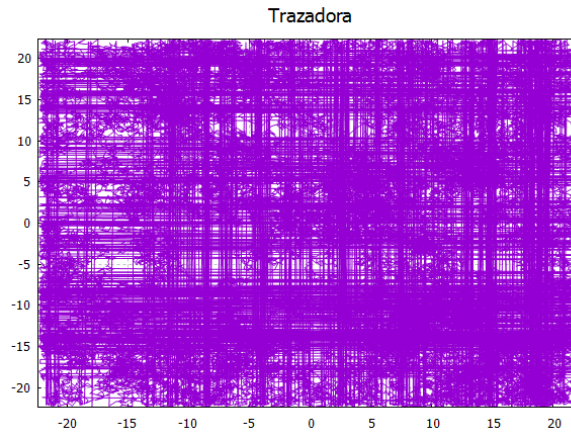


Figura 6: Partícula trazadora: 66. Se observa que en este caso la partícula se recorrió una área mayor de la celda que en el caso anterior.

Además, anexo la curva de termalización, precisamente para mostrar que el sistema llegó al equilibrio (energético), y los puntos sobre la curva de la función de distribución radial $g(r)$.

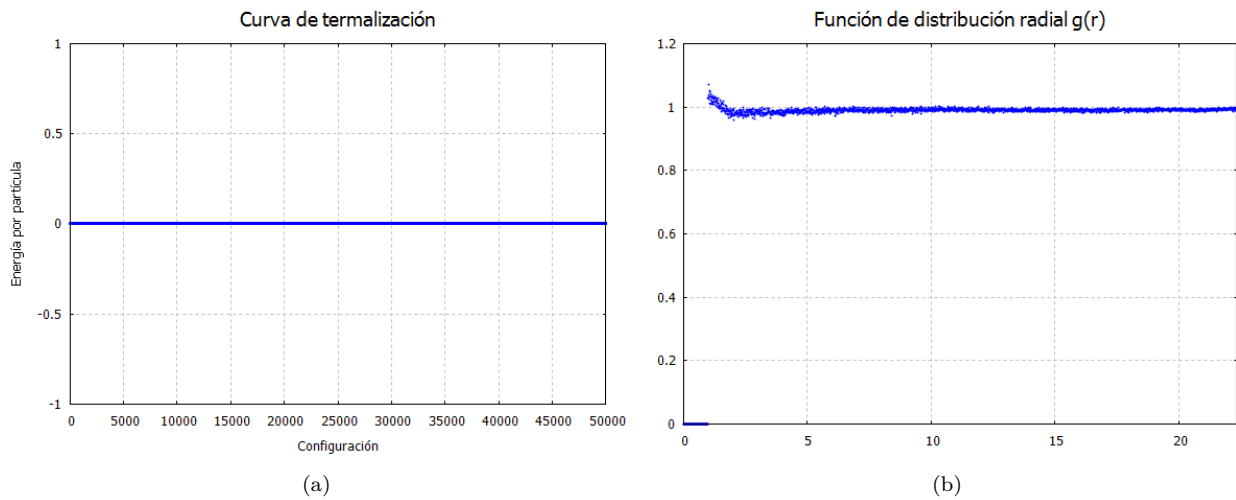


Figura 7: En la **figura (a)** se muestra el comportamiento de la energía por partícula en cada configuración. En la **figura (b)** se presentan algunos puntos sobre la función de distribución radial $g(r)$.

Actividad II

Instrucción: Muestre el comportamiento de un sistema con concentración reducida alta ($n^* > 0,85$) a partir de una configuración inicial aleatoria con traslapes. Seleccione usted los parámetros de simulación que considere pertinentes y documente mostrando gráficamente lo siguiente:

- I) Curva de termalización de la energía potencial por partícula vs configuración.
- II) Configuración inicial.
- III) Configuración final.
- IV) “Trayectoria” de una trazadora seleccionada arbitrariamente.

SOLUCIÓN: Como la configuración inicial debe de ser tal que las partículas pueden estar traslapadas, fue necesario eliminar la condición de **no traslape** en el código. Específicamente, en la subrutina para generar la configuración inicial aleatoria se eliminaron las siguientes líneas:

```
DO 9 J=1, I-1
  Xij=X(I)-X(J)
  Yij=Y(I)-Y(J)
  RO=Xij**2 + Yij**2
  IF (RO<=SIGMA) THEN
    WRITE(*,*) 'Traslape:', I, J
    GO TO 2
  END IF
9 CONTINUE
```

Eliminadas las líneas anteriores, el programa se ejecuta de la manera usual. Me tomé el tiempo suficiente para “jugar” con los valores de las variables para observar el comportamiento y parámetros del sistema. Con la experiencia anterior, los parámetros de simulación que elegí los muestro en la siguiente tabla.

Parámetros de la simulación elegidos	
Número de partículas (N)	100
Configuraciones totales (NSTEP)	200000
Configuración de equilibrio (NENER)	100000
Frecuencia de muestreo (ISAVE)	5
Corrección de paso (IRATIO)	200
Tamaño del ensemble (NN2)	20000
Densidad reducida (DENS)	0.9000
Desplazamiento máximo inicial (DRMAX)	0.1500
Criterio de aceptación (ACEPRATIO)	0.2500
Longitud de la celda (BOXL)	10.5409

Una vez generada la configuración inicial aleatoria con traslapes permitidos, el programa calculó la energía de la configuración inicial y el resultado fue

$$\text{Energía de la configuración inicial} = 14,8 \times 10^{11}.$$

Lo que nos permite concluir que hubo traslapes en la configuración inicial. A continuación muestro tanto la configuración inicial como la final.

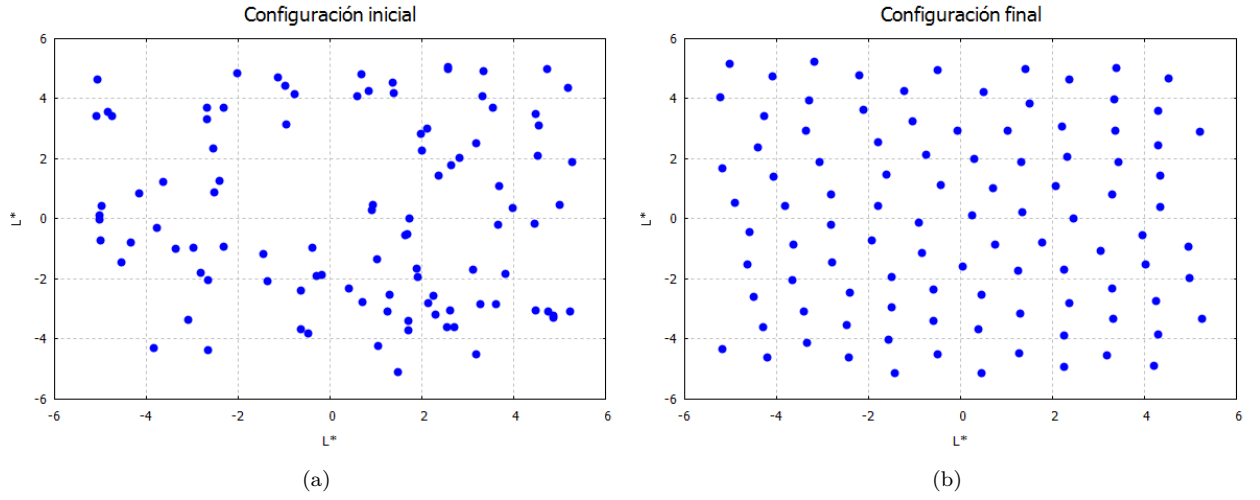


Figura 8: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria con traslapes permitidos. En la **figura (b)** se presenta la configuración final. Se observa, además, que el sistema se organiza con cierta regularidad en la configuración final (¡Qué suave!).

En el caso de la partícula trazadora, el programa seleccionó aleatoriamente la partícula 58. La posición de esta partícula en cada una de las 200000 configuraciones se muestra en el siguiente gráfico.

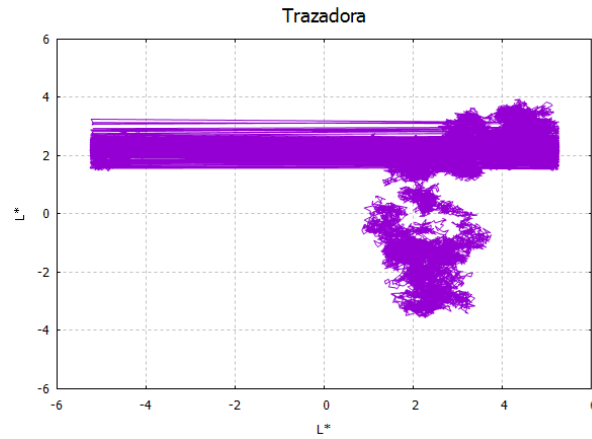


Figura 9: Partícula trazadora: 58

Observamos que la partícula se movió por una fracción relativamente pequeña de la celda.

Finalmente, anexo la curva de termalización, precisamente para mostrar que el sistema llegó al equilibrio (energético), y los puntos sobre la curva de la función de distribución radial $g(r)$.

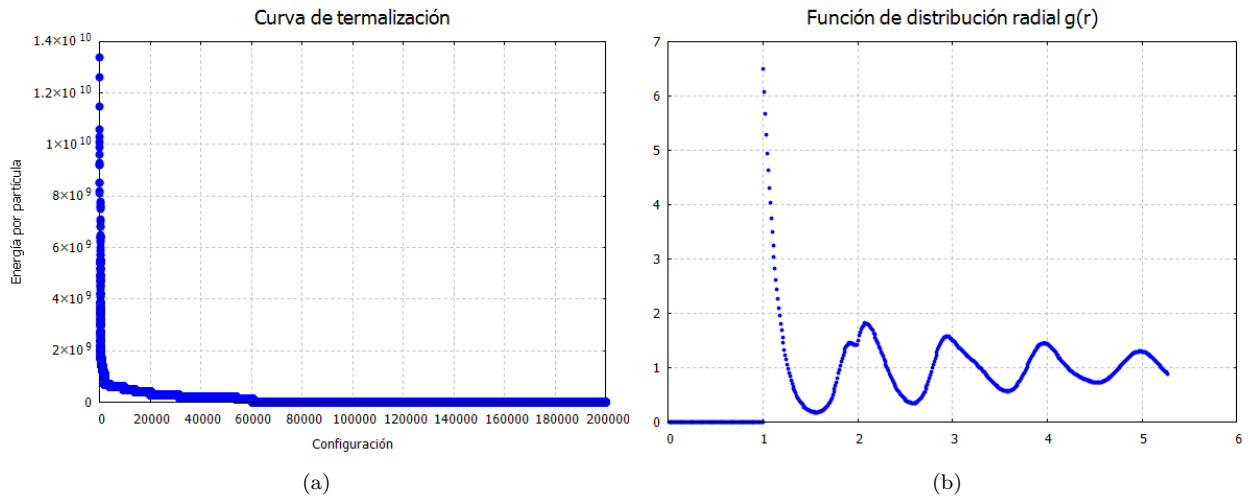


Figura 10: En la **figura (a)** se muestra el comportamiento de la energía por partícula en cada configuración. En la **figura (b)** se presentan algunos puntos sobre la función de distribución radial $g(r)$.

La configuración de equilibrio que elegí fue la 100000, consistente con la figura (10a). En la figura (10b) se observa que, como la concentración es relativamente alta, las partículas están más cerca y, en consecuencia, el número de vecinos aumenta. Lo anterior es evidente con las crestas pronunciadas de la figura antes mencionada.

Actividad III

Instrucción: Implementar las subrutinas para el cálculo de la función de distribución radial $g(r)$ (en cualquiera de las dos versiones vistas en clase). Entre todos los compañeros de la clase, pónganse de acuerdo solamente en dos concentraciones (alta y baja) del sistema de discos duros y calculen de forma independiente esta propiedad estructural. Mostrar en una sola gráfica la superposición de sus resultados, incluyendo los suyos con símbolos y los de sus compañeros con líneas. Cada uno tome un valor de DELTAR diferente (0.01, 0.05, 0.1, 0.15).

SOLUCIÓN: Las concentraciones reducidas elegidas fueron

$$\begin{aligned}n_{alta}^* &= 0,95 \\ n_{baja}^* &= 0,15.\end{aligned}$$

Cada quién utilizó valores de DELTAR distintos, precisamente los propuestos en la instrucción: 0.01, 0.05, 0.1 y 0.15. A continuación muestro las $g(r)$'s obtenidas.

Para $n^*=0.15$:

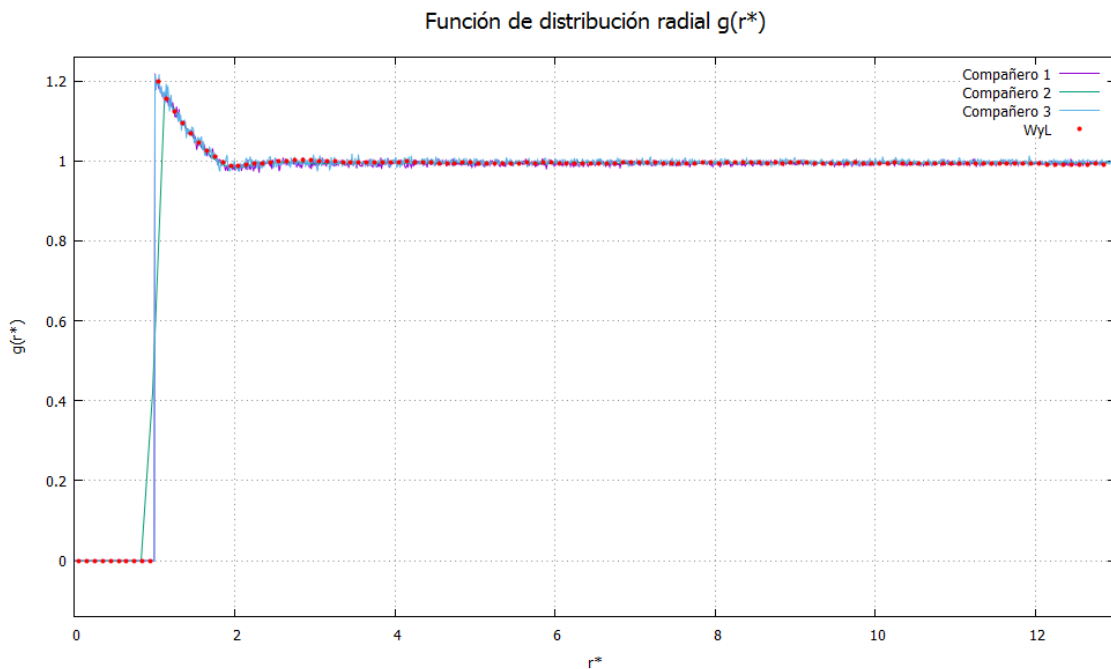


Figura 11: Para $n^* = 0,15$

o bien, haciendo un *zoom* para apreciar mejor lo que ocurre:

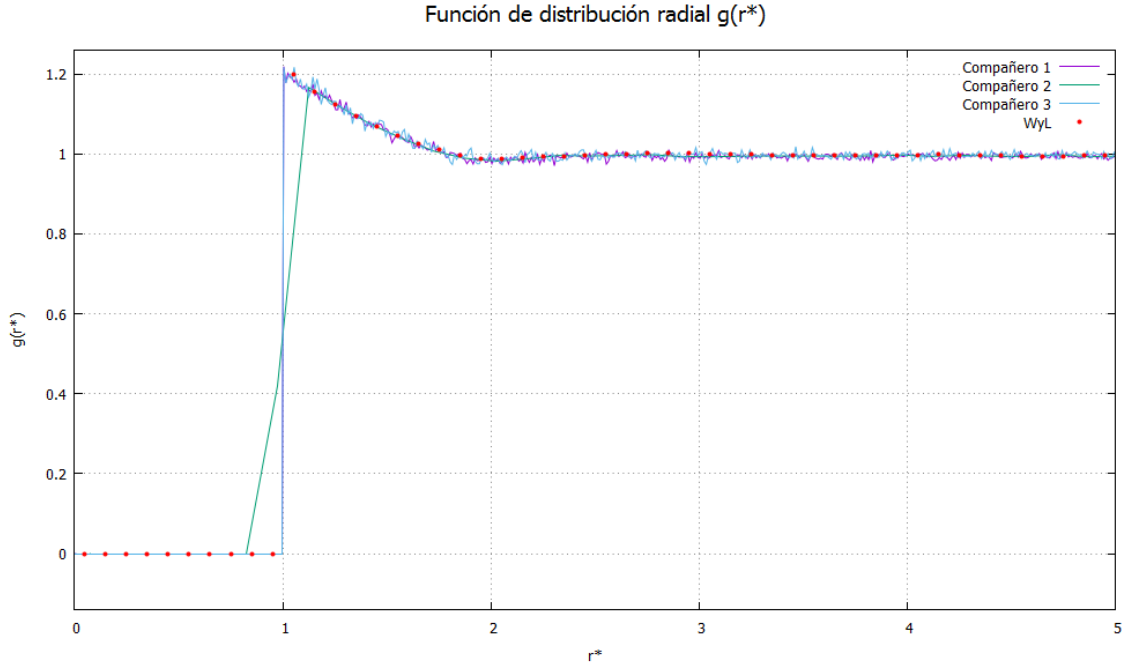


Figura 12: Para $n^* = 0,15$ con zoom.

Claramente el comportamiento general de las curvas es el similar. El parámetro que hace la diferencia más importante es, precisamente, el valor de DELTAR tomado. La organización de estos valores fue la siguiente:

$$\begin{aligned} \text{Compañero 1, DELTAR} &= 0,01, \\ \text{Compañero 2, DELTAR} &= 0,15, \\ \text{Compañero 3, DELTAR} &= 0,05, \\ \text{WyL, DELTAR} &= 0,10. \end{aligned}$$

Cuando DELTAR aumenta el espacio horizontal entre los puntos de la $g(r)$ es mayor, y menor cuando DELTAR disminuye. Por este motivo el comportamiento general, particularmente alrededor de $r^* = 1$.

Para $n^*=0.95$

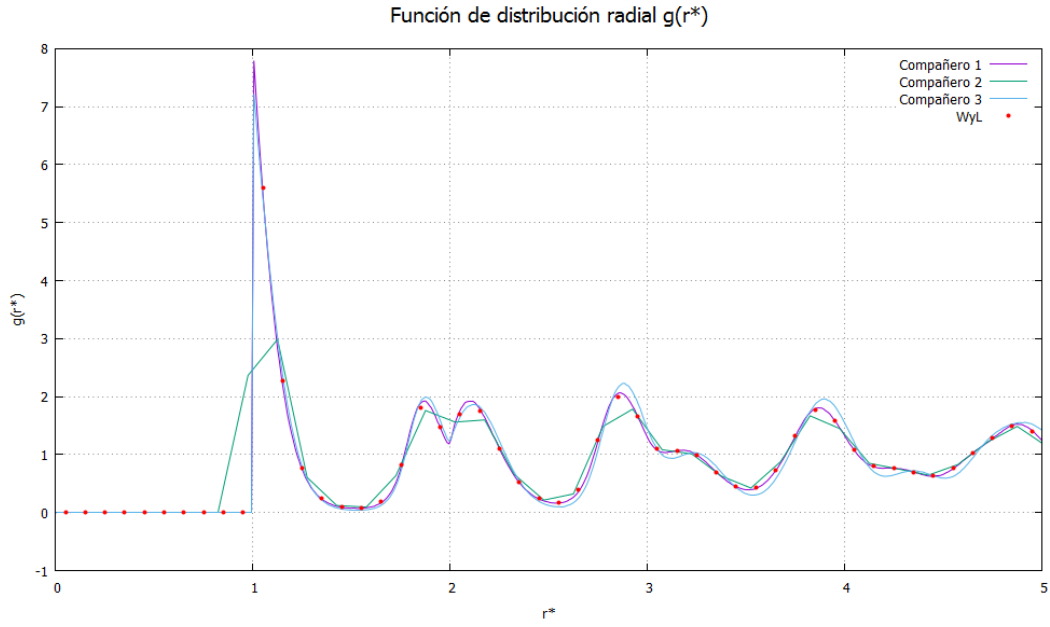


Figura 13: Para $n^* = 0,15$

o bien, haciendo un *zoom* para apreciar mejor lo que ocurre:

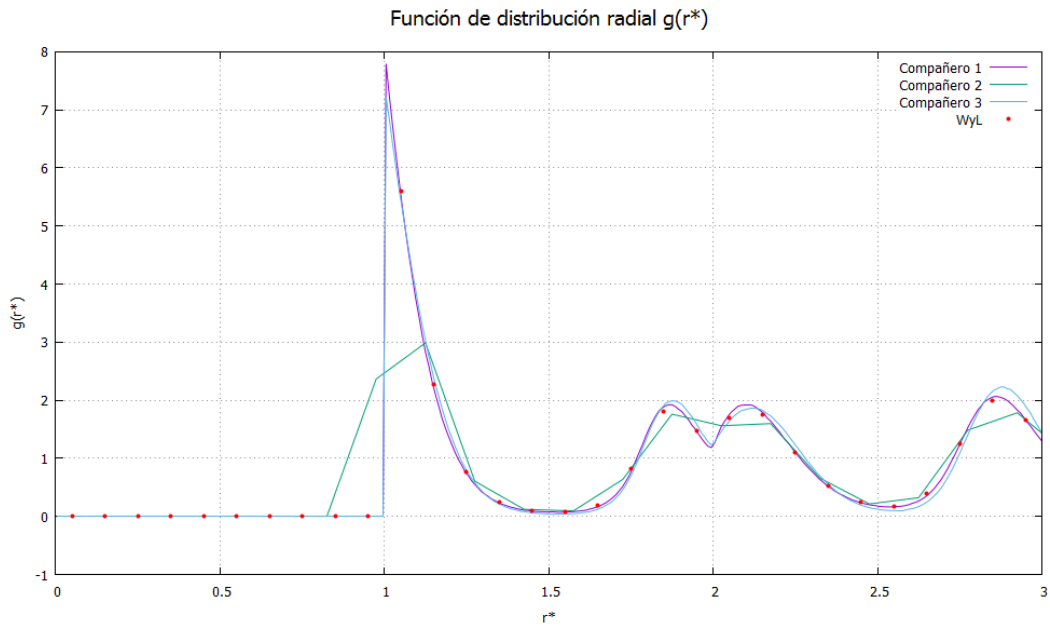


Figura 14: Para $n^* = 0,15$ con zoom.

En esta última figura se hace más evidente las diferencias al tomar un valor de DELTAR distinto, para esta concentración reducida mantuvimos el convenio de los valores de DELTAR que cada quien tenía.

Actividad IV

Instrucción: Implementar de forma sistemática su código de simulación de *MC* para calcular la función de distribución radial $g(r)$ para algunas concentraciones en el intervalo $n^* \in (0,05, 1,0)$. Muestre sus resultados en una (o dos, de ser necesario) gráficas comparativas.

SOLUCIÓN: Debido a la cantidad de $g(r)$ que decidí exponer en este resumen de calibración, fue necesario, para una buena presentación, realizar tres gráficas. Las funciones de distribución radial fueron producidas por la versión 1 del código de la $g(r)$. Las gráficas son las siguientes.

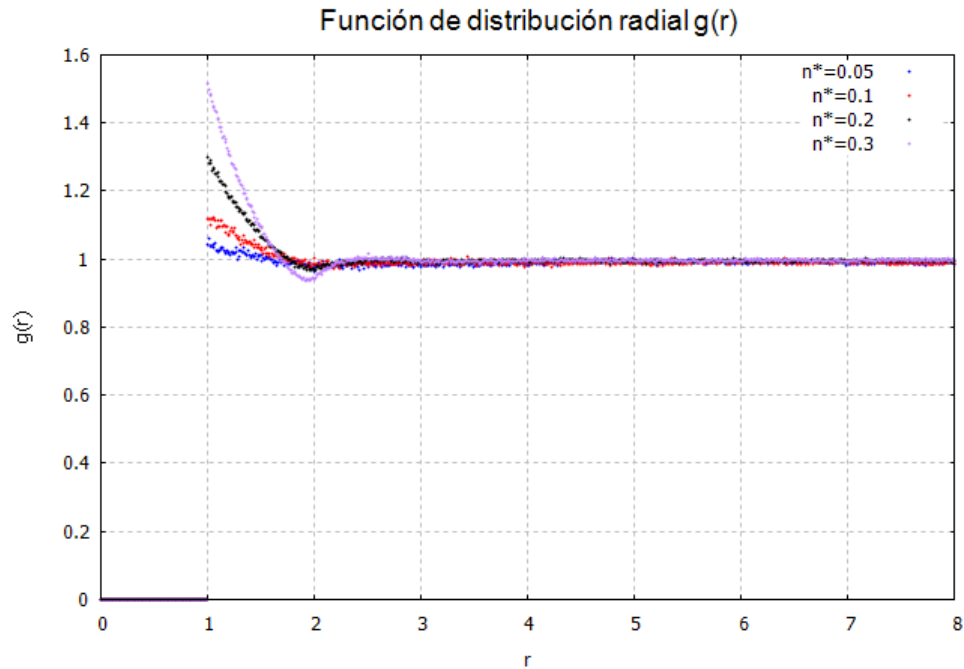


Figura 15: $n^* = 0,05$ línea azul, $n^* = 0,1$ línea roja, $n^* = 0,2$ línea negra y $n^* = 0,3$ línea purpura.

Se observa que para las cuatro densidades la función de distribución radial $g(r)$ toma el valor de cero en el intervalo $[0, 1)$. Además, se hace evidente que conforme la concentración aumenta, el número de "vecinos" en la región correspondiente también lo hace. Por ser un sistema de núcleo duro (en particular, discos duros), cuando r crece la $g(r)$ fluctúa alrededor de 1.

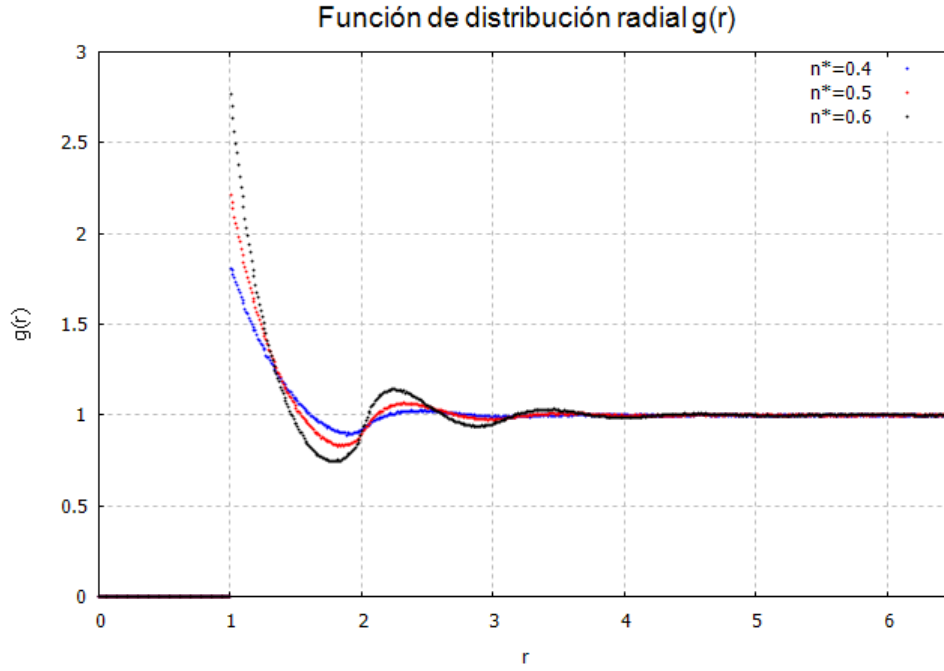


Figura 16: $n^* = 0,4$ línea azul, $n^* = 0,5$ línea roja y $n^* = 0,6$ línea negra.

De nuevo, al igual que en el caso anterior se observa un comportamiento idéntico de la $g(r)$ en el intervalo $[0, 1)$, toma el valor cero. También, análogo a la situación anterior, cuando aumentamos la densidad se observa que las crestas y valles son más pronunciados, resultado de que las partículas están más cercanas unas de otras cuando la densidad es mayor.

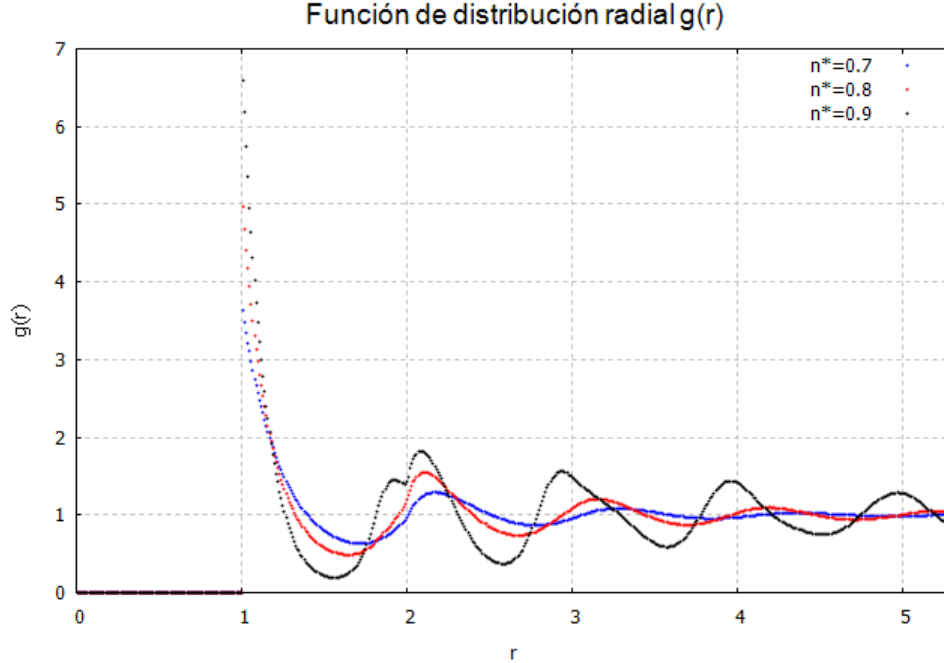


Figura 17: $n^* = 0,7$ línea negra, $n^* = 0,8$ línea roja y $n^* = 0,9$ línea azul.

La descripción general sobre lo que se observa en esta gráfica es totalmente similar a la descrita anteriormente. Lo único interesante es que, cuando la concentración es relativamente grande como en el caso $n^* = 0,9$ identificamos que la primera cresta comienza a dividirse en dos, una más pequeña que la otra.

Actividad V

Instrucción: A partir de las $g(r)$ obtenidas en la actividad anterior obtenga la ecuación de la presión para el sistema de discos duros a partir de la expresión exacta para discos duros obtenida en clase para la presión reducida p^* en función de n^* . Muestre sus resultados en una gráfica colocando los valores de sus cálculos con símbolos unidos por líneas.

SOLUCIÓN: Para resolver este ejercicio fue necesario agregar algunas líneas de código cuyo objetivo sea el de extraer el valor de $g(1+)$, al que se le conoce como "g" de contacto, del archivo que contiene a la $g(r)$. Además, se agrega la variable de presión reducida, PSS. Las líneas de código que se agregaron son

```
! APERTURA DE ARCHIVOS
  OPEN (50, FILE = "06g(r).dat", STATUS = "unknown")

! IDENTIFICAR g(1+) (g(r) DE CONTACTO) Y CALCULAR LA PRESION
  DO I= 1, MAXBIN
    READ(50,*) gX(i), gY(i)
    IF(gY(i)/=0.0) THEN
      PSS = 1.0 + (1.0/2.0)*PI*DENS*gY(i)
      WRITE(17,*) DENS, gY(i), PSS
    EXIT
  END IF
END DO
```

donde $gY(i)$ toma el valor de $g(1+)$ debido al *IF* del código. La presión reducida, P^* , la calculo mediante

$$P^* = 1 + \frac{1}{2}\pi n^* g(1+).$$

En el caso del gas ideal, la expresión anterior se simplifica a $P_{gi}^* = 1$. A continuación muestro una tabla que muestra la densidad reducida n^* y su correspondiente $g(1+)$ y presión reducida P^* de las simulaciones que hice.

n^*	$g(1+)$	P^*
0.05	1.04412985	1.082005769
0.10	1.11881793	1.175743509
0.15	1.20787168	1.284598060
0.20	1.29951119	1.408253481
0.25	1.39239538	1.546792387
0.30	1.51446271	1.713673739
0.35	1.63584113	1.899350633
0.40	1.80545640	2.134401713
0.45	1.99696839	2.411573775
0.50	2.21257639	2.737753433
0.55	2.45391631	3.120031499
0.60	2.76678729	3.607635587
0.65	3.16040492	4.226829086
0.70	3.62826371	4.989484316
0.75	4.22261667	5.974653066
0.80	4.96887636	7.244074188
0.85	5.70217466	8.613411759
0.90	6.59757853	10.32710691
0.95	7.94903231	12.86199522

Graficando P^* vs n^* , y $P^* = 1$ (gas ideal) obtenemos

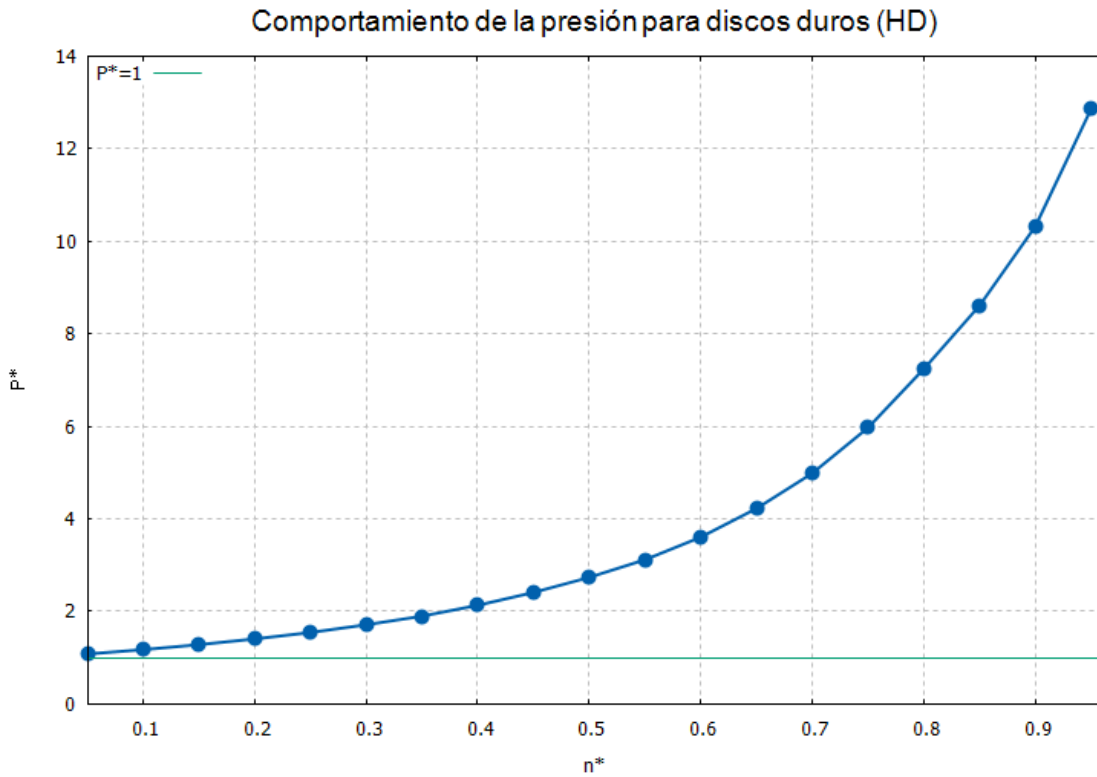


Figura 18: Comportamiento de la presión reducida cuando cambia la concentración reducida. La línea verde es la de gas ideal.

Observamos que para n^* y P^* pequeñas, la ecuación de presión del gas ideal parece ser asíntota a la "curva" de presión con modelo de potencial de discos duros (¡Qué suave!).

Podemos también calcular la presión reducida P^* mediante la expresión

$$P^* = n^* + \frac{1}{2}(n^*)^2 g(1+),$$

donde

$$\frac{P^*}{n^*} = \frac{P}{\rho k_B T}.$$

Para el gas ideal, la primera expresión se simplifica a

$$P_{gi}^* = n^*.$$

Usando las mismas concentraciones de la primera tabla y cambiando la expresión de PSS en el segmento de código correspondiente, calculamos la presión P^* .

Gráficamente resulta,

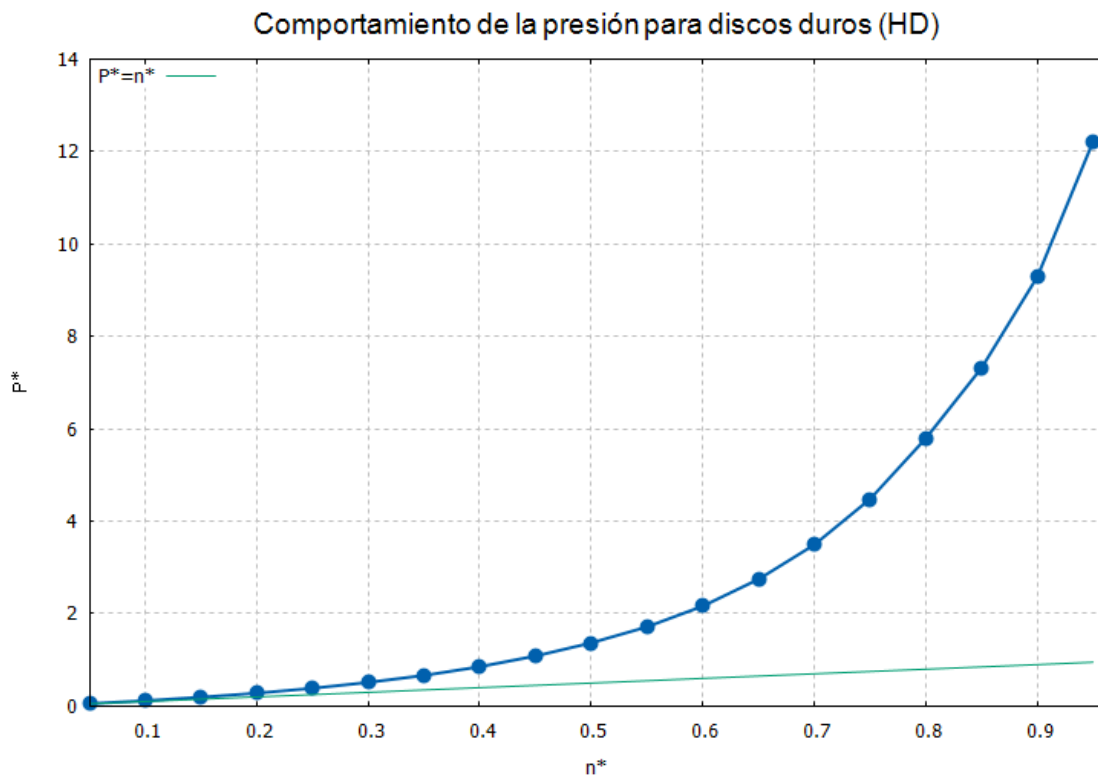


Figura 19: Comportamiento de la presión reducida cuando cambia la concentración reducida. La línea verde es la de gas ideal.

De nuevo, nuestro sistema de discos duros pareciera comportarse asintóticamente como gas ideal para bajas densidades y presiones. (¡Qué suave!)

Comentarios y observaciones finales

Esta actividad resultó muy útil pues discutimos detalles que cada quien tenía con el código. En estas discusiones notamos que la función de distribución radial no fluctuaba, estrictamente hablando, alrededor de la unidad (es el resultado que esperamos por el tipo de sistema que estamos trabajando). Esto nos condujo a aumentar el número de partículas y observar que ocurría. Comenté esto porque la actividad se trata, precisamente, de hacer una calibración. De manera independiente ejecuté mi programa con $N = 250$, $n^* = 0,6$ y con $NN2 = 10000$, el resultado de la función de distribución radial $g(r)$ fue:

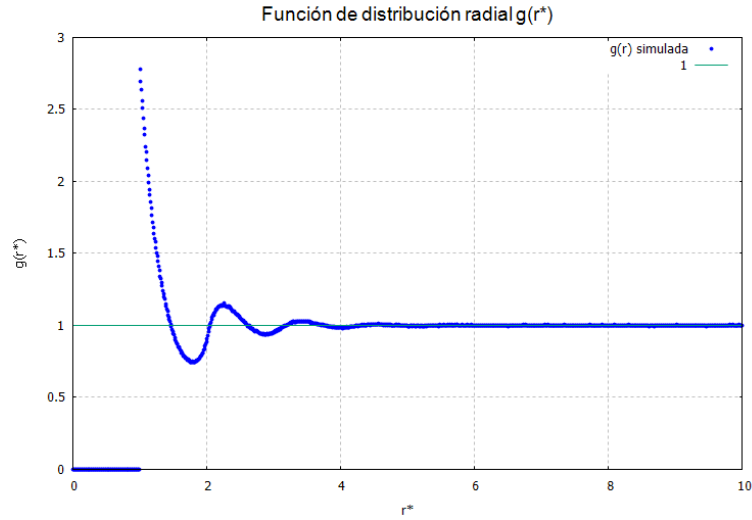


Figura 20: $g(r^*)$

o bien, en el intervalo $[7,0,8,4]$:

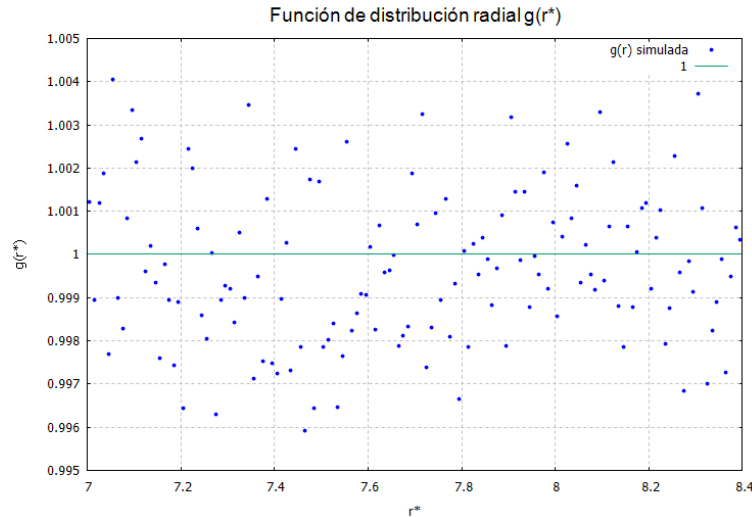


Figura 21: $g(r^*)$

Calculé el promedio de $g(r)$ desde $r^* = 5,70$ hasta $r^* = 10$ y resultó

$$\overline{g(r^*)}_{[5,10]} = 0,999656234,$$

es decir, en este caso estamos a 0.000343766 del valor que esperamos, 1. Lo anterior nos llevó a considerar calcular el número de partículas final y verificar que, efectivamente, el número de partículas se conserve en la situación ideal. Próximamente agregaré este cálculo al código.