

## Desarrollo Experimental II

### Tarea 2

#### Configuraciones Iniciales

**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.

#### Actividad 1. Arranque aleatorio con $\pi$

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  $\pi$ .* Tomando como base los elementos planteados en clase y las notas que se incluyen en el anexo, estime el valor de  $\pi$ . Experimente lo necesario para diferente número  $N$  de dardos seleccionados por Usted.

- Incluya en su código el cálculo de la desviación  $\Delta\pi$  y el error relativo  $\varepsilon$  calculado tomando como base el valor conocido de  $\pi$  con 4 decimales.
- Muestre gráficamente el comportamiento de  $\pi$  vs  $N$ .
- Muestre gráficamente el comportamiento de  $\varepsilon$  vs  $N$ .

#### Actividad 2. Configuración inicial aleatoria tridimensional

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.

#### Actividad 3. Configuración inicial aleatoria bidimensional

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

#### **Actividad 4. Configuración inicial regular cúbica (tres dimensiones)**

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.

#### **Actividad 5. Empaquetamiento de esferas duras.**

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*)