Práctica 2.2

Objetivo: Analizar y comprender el funcionamiento de una simulación Montecarlo y los parámetros que influyen en ella.

El problema

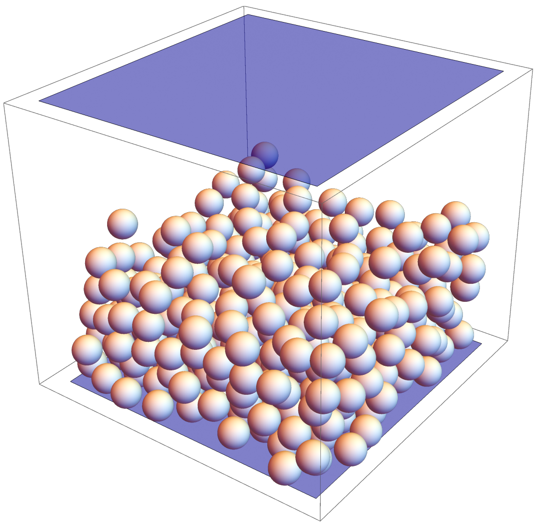
Queremos medir la función de distribución (también llamado perfil de densidad) de un fluido de esferas duras en presencia de un campo gravitatorio externo. El gas de esferas duras está formado por partículas esféricas de diámetro σ que no pueden interpenetrarse entre sí. El potencial de interacción entre ellas viene dado por

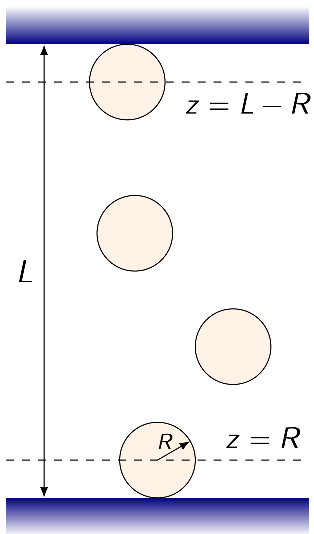
$$V_{\text{HS}}(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < \sigma \\ 0 & \text{resto.} \end{cases} \tag{1}$$

El gas está sometido a un campo externo de la forma

$$V_{\text{EXT}}(z) = \begin{cases} \infty & \text{si } z < R \text{ o } z > L - R \\ mgz & \text{resto,} \end{cases} \tag{2}$$

donde L representa la distancia entre el suelo y el techo, R es el radio de las partículas, m su masa, g es la aceleración de la gravedad y z la coordenada vertical.





En caso de que el fluido no esté en presencia de ningún campo externo la probabilidad de encontrar una partícula en una posición cualquiera del espacio es constante e igual a la densidad media $\rho_{\text{B}} = N/V$, donde el subíndice B significa *bulk*, N es el número total de partículas y V es el volumen del recinto. En caso de que haya un potencial externo esa probabilidad dependerá de la posición $\mathbf{r}$ y hablaremos de perfil de densidad $\rho(\mathbf{r})$. El perfil hereda las simetrías que tenga el potencial externo. En este caso, como el potencial externo sólo depende de z, el perfil también depende sólo de la altura: $\rho(\mathbf{r}) \to \rho(z)$.

Para medir $\rho(z)$ lo que haremos es fijarnos en la coordenada z de cada partícula y hacer un histograma que representará cuántas partículas hemos encontrado que estén a una altura entre z_i y $z_i + \Delta$ (Δ representa el tamaño de cada bin). Esta medida se repite varias veces y el resultado final es el promedio de esas medidas. A la hora de escribir las medidas hay que normalizarlas adecuadamente. Nótese que el perfil de densidad no está normalizado a 1, sino a N (cuando se integra sobre todo el volumen).

Cosas varias

- σ será nuestra unidad de longitud, de modo que $\sigma = 1$ y $R = 1/2$.
- Como los potenciales para este fluido son cero o infinito [v. ec. (1)y (2)] la temperatura solo influye en el término mgz del hamiltoniano. Por eso en el programa aparece el parámetro `bmg` que representa $mg/k_\mathrm{B}T$.
- El recinto de simulación es un prisma de base cuadrada de lado `box` y altura `boxz` (esto es L).
- Si bien en la dirección Z tenemos suelo y techo, en las direcciones X e Y hay que utilizar condiciones de contorno periódicas.
- La definición del perfil de densidad implica que su normalización viene dada por

  $$\int \rho(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r} = N.$$

  Se recomienda al amable lector que compruebe esta normalización con el perfil para el gas ideal dado por (3).

Concretando

La tarea a realizar consiste en rellenar las subrutinas de movimiento, medida y normalización y escritura de resultados del programa `slit.for` para llevar a cabo los siguientes puntos:

1. **Influencia del paso de Montecarlo** Realiza cinco simulaciones con los siguientes datos:

   ```
   200    ! ngotas
   10     ! box
   10     ! boxz
   red    ! colocacion inicial (red o rnd)
   10000  ! intentos
   2.0    ! paso
   50     ! nbinz
   100    ! Nmed
   5      ! Nescr
   1.0    ! mg/kt
   ```

   tomando los siguientes valores para el paso de Montecarlo: 0.1, 0.5, 1.0, 1.5 y 2.0.

   - Representa la tasa de aceptación final en función del paso de Montecarlo. Explica el porqué de ese comportamiento.

- Ahora repite la simulación con paso 0.5 pero para $N = 700$. ¿Cuál es ahora la tasa de aceptación?
- Compara con la de $N = 200$. ¿Por qué son tan diferentes?
- Una tasa de aceptación tan baja es un problema, porque indica que mi simulación es ineficiente, ya que está desperdiciando muchos intentos que luego no se aceptan. ¿Cómo se arreglaría?

2. **Comparación con el gas ideal** Realiza una simulación con estos datos

```
10       ! ngotas
10       ! box
10       ! boxz
rnd      ! colocacion inicial (red o rnd)
100000   ! intentos
0.4      ! paso
50       ! nbinz
1000     ! Nmed
5        ! Nescr
1.0      ! mg/kt
```

Representa el perfil obtenido junto al perfil que tendría un gas ideal (la fórmula barométrica):

$$\rho_{\mathrm{GI}}(z) = \frac{N}{A}\frac{mg}{k_{\mathrm{B}}T}\left[1 - \exp\left(-\frac{mgL}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]^{-1} \exp\left(-\frac{mgz}{k_{\mathrm{B}}T}\right) \tag{3}$$

(A es el área de la base del recinto) Antes de nada, ¿qué pasa en el bin que corresponde a $z = 0{,}5\,\sigma$? ¿Cómo podría evitarse? ¿Por qué ambos perfiles se parecen tanto? ¿Por qué parecen desplazadas?

3. **Efecto del campo externo** Realiza tres simulaciones con estos datos:

```
400     ! ngotas
10      ! box
10      ! boxz
red     ! colocacion inicial (red o rnd)
10000   ! intentos
0.2     ! paso
40      ! nbinz
100     ! Nmed
5       ! Nescr
0.0     ! mg/kt
```

variando la intensidad del campo externo: $mg/k_{\mathrm{B}}T = 0, 1$ y 5. Describe los resultados y explica las diferencias.