

# FÍSICA COMPUTACIONAL.

## Bloque 1: Comentario de programas

Juan José Vidal Justamante

Curso 21/22

### **1. Introducción**

En este documento voy a hacer un comentario acerca de las prácticas del bloque 1. En cada una de ellas resumiré los objetivos, publicaré los resultados obtenidos y comentaré el código por partes.

## 2. Práctica 1: Construcción de redes cristalinas

El objetivo de la primera práctica es construir un cristal de tipo f.c.c. y otro de tipo b. El código funcionará a partir de una celda base, la cual iremos repitiendo en todas las direcciones del espacio.

Un ejemplo de cristal tipo f.c.c. de dimensiones 5x5x5. es:



Figura 1: Estructura del cristal tipo f.c.c. y celda unidad

Y uno de tipo b (con un átomo por celda unidad):

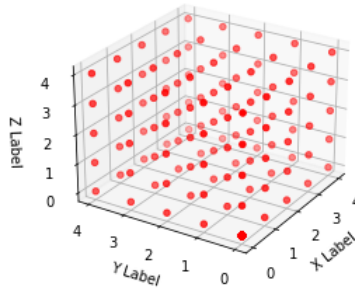


Figura 2: Estructura del cristal tipo b

### 2.1. Código 1

**GeneraCristal:** Aquí creo una celda base con la forma de cada una de las moléculas del cristal, luego la voy repitiendo en dimensiones Nx,Ny,Nz. Con esto he obtenido un array con las coordenadas de cada uno de los átomos del cristal.

## 3. Práctica 2: Algoritmo de Verlet

En esta práctica utilizamos el algoritmo de Verlet para resolver la ecuación diferencial del movimiento orbital terrestre:

$$\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -GM \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (1)$$

Comenzamos con dos condiciones iniciales: la posición y la velocidad en el instante 0. Utilizaremos un método iterativo para calcular los valores de  $x, y, v_x, v_y$  a partir de los valores anteriores en intervalos de distancia  $h$ , que será diferencial. Avanzaremos en distancias de  $\frac{h}{2}$  y usaremos las fórmulas planteadas en clase:

$$\begin{aligned}
x(t+h) &= x(t) + hv(t+h/2) \\
k &= hr(x(t+h), t+h) \\
v(t+h) &= v(t + \frac{h}{2}) + \frac{h}{2}k \\
v(t + \frac{3}{2}h) &= v(t + \frac{h}{2}) + k
\end{aligned} \tag{2}$$

Los gráficos de los valores obtenidos son los siguientes:

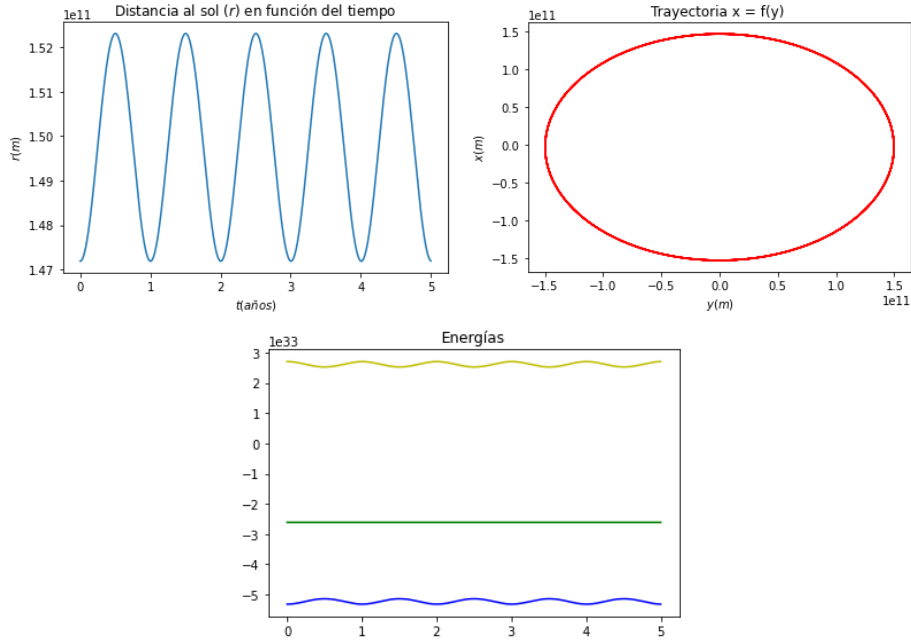


Figura 3: Resultados

Que representan:

**1. El radio en función del tiempo  $r = f(t)$ .**

Tiene sentido que la distancia entre el Sol y la Tierra represente un movimiento sinusoidal. Uno podría pensar que debería ser constante al ser algo similar a un movimiento circular, pero esto se daría si la órbita fuese un círculo perfecto. En el caso real las órbitas son elípticas, y por ello aparece un movimiento periódico que define una distancia mínima cuando la Tierra pasa por el perihelio y máxima en el afelio.

**2. La trayectoria  $x = f(y)$ .**

La trayectoria representa una elipse. Además, se aprecia si hacemos zoom a las órbitas cómo varía la distancia.

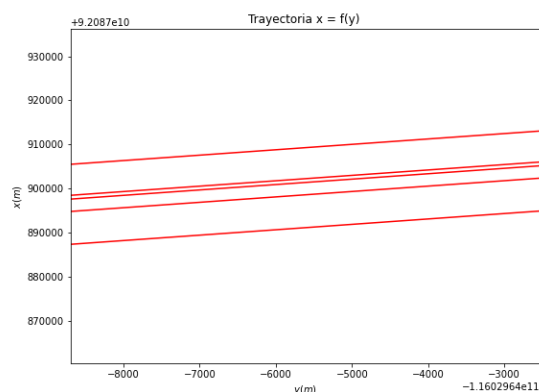


Figura 4: Variación en la órbita

Es importante resaltar las escalas a las que están los ejes, a una distancia infinitesimal comparando con el movimiento completo orbital.

### 3. La energía potencial, cinética y total en función del tiempo.

Los resultados obtenidos conservan la energía total, que es lo que se esperaría para este caso. Además, vemos como ambas energías varían de forma periódica.

#### 3.1. Código 2

**Líneas 33-43:** Listas.

**Líneas 45-82:** Algoritmo de Verlet con condiciones iniciales.

**Líneas 87-108:** Gráficas.

## 4. Práctica 3: Integración por Monte Carlo

En esta sesión veremos cómo plantear un sistema que mediante números aleatorios resuelva una integral.

En nuestro caso, trabajaremos con:

$$f(x) = \sin^2 \frac{1}{x(2-x)} \quad (3)$$

Esta función es tan difícil de comprender que probablemente la encuentres en un examen de análisis. Además, no posee primitiva analítica.

El método Monte Carlo va a consistir en lo siguiente:

#### 1. Escogemos un rectángulo que contenga la función.

La anchura del rectángulo será el intervalo de integración y la altura debe ser como mínimo el máximo de la función en el intervalo de integración. Es conveniente mencionar que el método convergerá más rápido a la solución si la altura del rectángulo dista poco del máximo de la función.

#### 2. Escogemos puntos aleatorios dentro del rectángulo.

Una forma práctica y fácil de ver lo que hacemos aquí es pensar que se trata de una persona disparando a una diana con una pistola. Si consideramos que este sujeto no tiene puntería, cada bala sería un punto y nuestra diana sería el rectángulo.

#### 3. Clasificamos los puntos.

Comparamos cada uno de estos puntos escogidos aleatoriamente con el valor de la función en el valor del eje x correspondiente. Si el punto queda por debajo de la función, lo ponemos como verde y lo guardamos. Si no, como rojo y nos olvidamos.

#### 4. Calculamos el valor de la integral.

Si conocemos el número de puntos que caen bajo la función y el número total de puntos lanzados, podemos calcular el porcentaje de puntos verdes. Si el número de puntos es lo suficientemente grande, al multiplicar este valor por el área del rectángulo, tendremos el área bajo la función, es decir, el valor de la integral.

Ahora vamos a representar los datos y a obtener el valor de la integral. Si tomamos  $[0, 2]$  como intervalo de integración, tenemos:

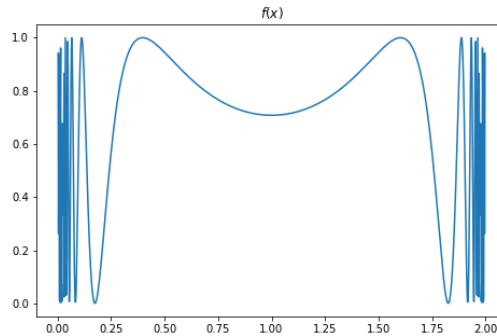


Figura 5: La función

Esta es la función que queremos integrar (Ecuación 3). Vamos a implementar el método:

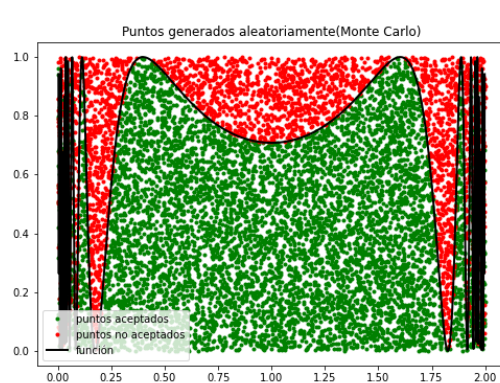


Figura 6: Lanzamos y clasificamos puntos aleatorios

En este caso hemos utilizado 10000 puntos y un rectángulo de altura 1. El resultado de la integral es  $I = 1,4482 \pm 0,0089$ .

El método es muy útil con un número elevado de puntos (o pasos del Monte Carlo) pero uno podría preguntarse cómo converge este método al ir cambiando el número de pasos. Si calculamos el valor de la integral en función del número de pasos, obtenemos la siguiente figura:

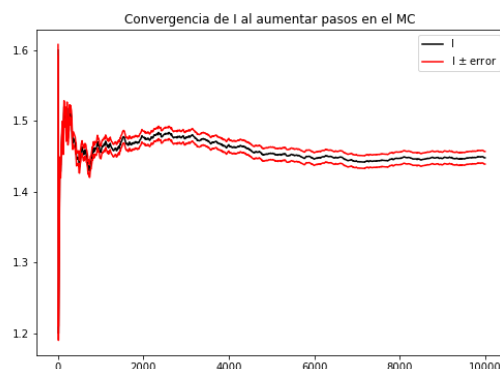


Figura 7: Convergencia del Monte Carlo

De esta gráfica deducimos que el método es útil cuando los pasos del Monte Carlo son muchos, lo que cabía esperar.

#### EXTRA: Utilizamos otra función.

Vamos a utilizar el programa para una gaussiana. Esta función no tiene primitiva analítica y conocemos el valor de su integral.

$$f(x) = e^{-x^2} \quad (4)$$

Los resultados obtenidos son:

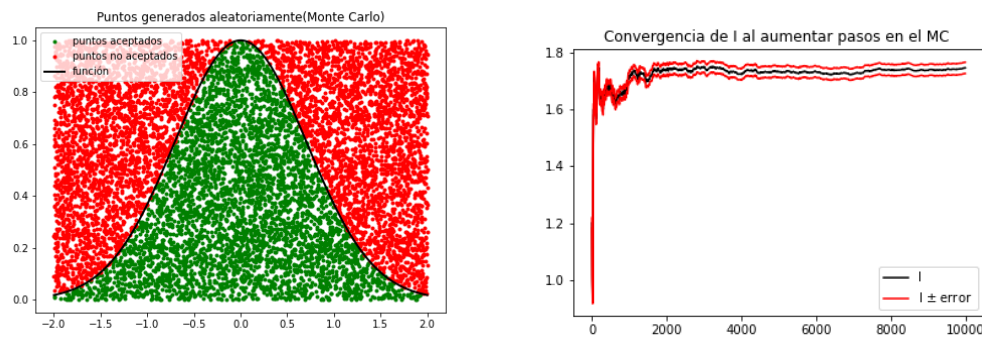


Figura 8: Análisis en gaussiana

Y el valor de la integral para 10000 pasos del Monte carlo es  $I = 1,7692 + -0,0199$ , lo cual se acerca a  $\sqrt{\pi} = 1,77245\dots$ , que es el resultado de la integral en todo el espacio, pero esta función tiende rápidamente a 0 cuando se aleja del centro de la gaussiana.

#### 4.1. Código 3

**Líneas 50-58:** Busco los puntos debajo de la función.

**Líneas 61-64:** Calculo el valor de la integral.

**Líneas 77-89:** Graficamos con los puntos aceptados e ignorados.

**Líneas 105-123:** Grafico el valor de la integral en función de los pasos del Monte Carlo, utilizando un bucle while.

## 5. Práctica 4: Cálculo de energía total con un potencial de pares

En esta práctica consideraremos el potencial de Lennard-Jones para calcular la energía por átomo de una red cristalina f.c.c. y la total del cristal completo. El potencial viene dado por:

$$V(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^n - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^m \right) \quad (5)$$

con  $n = 12$  y  $m = 6$ , y parámetros  $\sigma = 2,3151\text{\AA}$  y  $\epsilon = 0,167eV$  correspondientes al cobre, con un parámetro de red de  $a = 3,603\text{\AA}$ . Consideraremos un radio de corte de  $3\sigma$ . Esto quiere decir que dos átomos separados más de esta distancia tendrán un potencial  $V = 0$ .

También diferenciaremos entre condiciones de contorno libres o periódicas. Esto significa que consideraremos primero el caso en el que el cristal es finito, es decir, las superficies de nuestro plot son el final del cristal (superficies libres). El otro caso será el que representa un trozo de un cristal mayor. Esto significa que para calcular el potencial de pares de los átomos en las superficies consideraremos que tienen más átomos a su lado. Este es el caso de un trozo de cristal de un cristal mayor (condiciones de contorno).

Comenzamos por un cristal de dimensiones  $5 \times 5 \times 5$ .

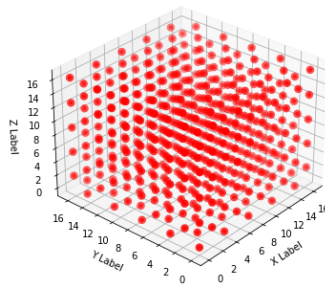


Figura 9: Estructura del cristal

Donde cada una de las celdas viene dada por la estructura f.c.c:

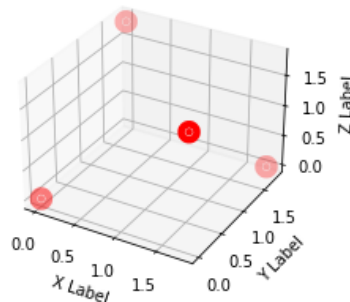


Figura 10: Celda del cristal

Si tomamos este cristal y calculamos la energía potencial de cada una de las moléculas que lo forma:



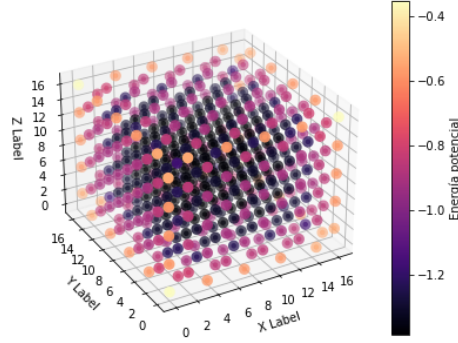


Figura 11: Superficies libres

En el caso de las superficies libres (Figura 9) se ve claramente cómo la energía potencial disminuye (en valor absoluto) en las superficies. Esto se debe a que sólo tendrán contacto con átomos en 5 de las 6 posibles celdas contiguas.

La energía por átomo queda  $E = -1,07eV$  y la total  $E_{total} = -535,74eV$  Si aplicamos las condi-

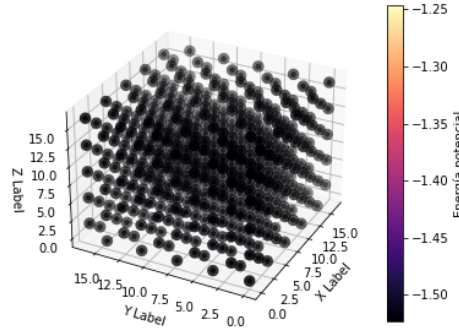


Figura 12: Con condiciones de contorno

ciones de contorno, consideramos que todas las celdas contiguas poseen átomos y potencial. Por lo tanto, todas las celdas tendrán la misma energía potencial, como se aprecia en la Figura 10.

La energía por átomo queda  $E = -1,385eV$  y la total  $E_{total} = -692,49eV$

**EXTRA: cambio parámetros de la red** Veamos qué ocurre si disminuimos el tamaño de la red:

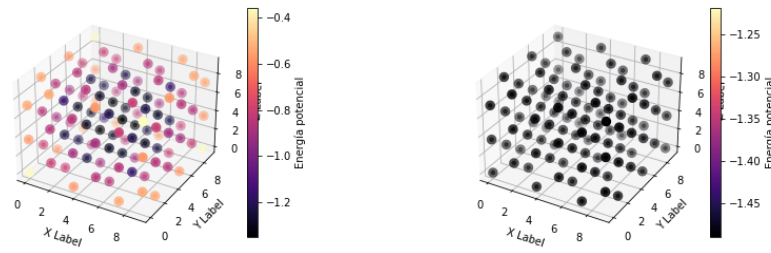


Figura 13: Superficies libres (izquierda) y con condiciones de contorno (derecha)

Las energías son:

Con superficies libres:  $E = -0,8878eV$  y  $E_{total} = -95,885eV$

La energía queda menor (en valor absoluto). Esto se debe a que, al tener menor superficie en el caso 3x3x3, hay una menor cantidad de átomos en éstas y la energía total queda menor.

Con condiciones de contorno:  $E = -1,354eV$  y  $E_{total} = -146,217eV$

La energía total en este caso queda menor debido a que el tamaño de la red es menor, y la energía por átomo queda muy similar a la obtenida en el caso 5x5x5. Esto tiene sentido porque no hay diferencia en la energía de ninguna de las moléculas (ya sea en la superficie u otro lugar).

## 5.1. Código 4

**Líneas 19-33:** Establezco la función potencial y los inputs.

**GeneraCristal:** Ya comentado en la práctica 1.

**Líneas 98-105:** Separo los componentes x,y,z de las coordenadas de cada átomo.

**Líneas 112-181:** Aplico las condiciones de contorno. Para las superficies libres, calculo las distancias entre componentes de partículas (dx,dy,dz) para obtener r (distancia total). Luego compruebo que es menor que el radio de corte ( $3\sigma$ ) y si lo es, utilizo la función V para calcular el potencial. Coloco cada potencial en la matriz E para graficarlos luego.

Si las condiciones son periódicas comparo la distancia con el ancho y aplico el algoritmo suponiendo que en la celda contigua hay átomos (esto es útil para los bordes).

**Resto del código:** Gráficas.

## 6. Práctica 5: Cálculo de la fuerza con un potencial de pares.

En esta práctica continuaremos con el programa de la anterior. El objetivo es calcular la fuerza ejercida por cada átomo y representar los valores.

Para el caso de superficies libres:

Obtenemos un resultado similar al apartado anterior.

Si tenemos condiciones libres, las fuerzas del interior del cubo serán menores que las exteriores debido a que varias de ellas se cancelarán. Por esa razón el interior del cubo se ve más oscuro que las superficies externas.

Al aplicar condiciones de contorno todas las fuerzas se igualan, como en el apartado anterior con el potencial.

Podemos representar también el vector fuerza de cada una de las partículas en un caso más sencillo (para que se aprecien mejor):

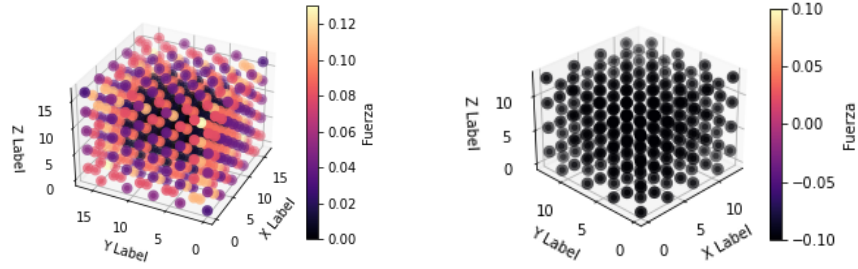


Figura 14: Módulo de la fuerza en superficies libres (izquierda) y con condiciones de contorno (derecha)

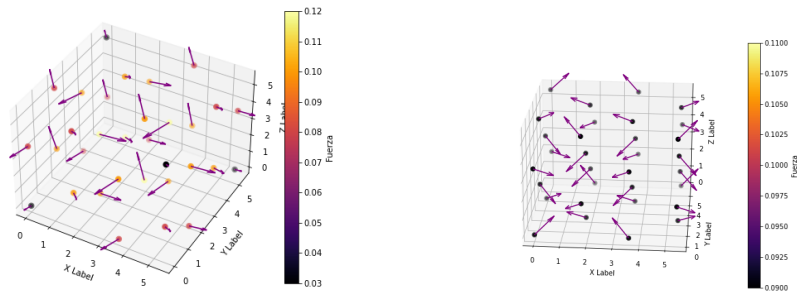


Figura 15: Vector fuerza en superficies libres (izquierda) y con condiciones de contorno (derecha)

## 6.1. Código 5

Los únicos cambios que hemos hecho en este código respecto al de la práctica 4 han sido en **líneas 29-32**. He creado una lista `F`, donde se guardan todos los vectores fuerza de cada partícula, y otra función `F-lista`, donde se guardan los módulos. A la hora de gradicar utilizo `ax.quiver` para los vectores. Hay que llevar cuidado con la magnitud porque como las fuerzas son pequeñas a veces no se ven.

## 7. Práctica 6: Metrópolis Monte Carlo

En la última práctica veremos cómo implementar el método Monte Carlo para encontrar el valor de la energía en equilibrio de un sistema de  $N$  partículas no interactuantes. Tenemos un conjunto de partículas con 3 números cuánticos asociados a cada una de ellas:  $n_x$ ,  $n_y$  y  $n_z$ . La energía de una partícula  $i$  será:

$$E_i = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (6)$$

Y por lo tanto la energía del sistema será la suma de la energía de cada partícula. Alteraremos uno de los números cuánticos de un átomo aleatoriamente sumándole o restándole 1. También decidiremos si aceptamos este cambio o no comparando un número aleatorio entre 0 y 1 con  $P_r = e^{\frac{\Delta E}{kT}}$ . Los resultados obtenidos son:

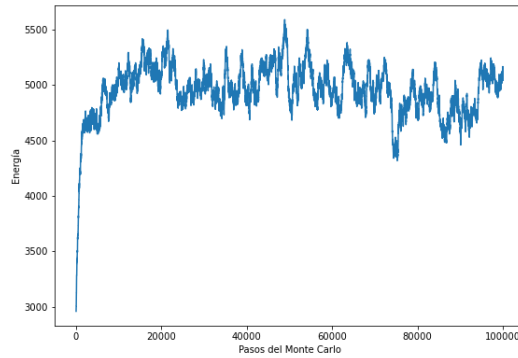


Figura 16: Convergencia del método Monte Carlo

### 7.1. Código 6

El algoritmo que implementaremos hará lo siguiente:

1. Escogerá aleatoriamente una partícula y uno de sus números cuánticos. (**líneas 24-26**)
2. Cambiará este número, sumándole +1 o -1. Calculará el  $\Delta E$  y comparará un número aleatorio entre 0 y 1 con  $e^{\frac{\Delta E}{kT}}$ . Si es mayor aceptamos el cambio y si no, negamos y volvemos a escoger otro número. Es importante tener en cuenta qué  $\Delta E$  escoger. (**líneas 28-33**) Además, considerará que el número después de hacer el cambio no puede ser 0. (**líneas 28-40**)