

Universidad de Alicante

FACULTAD DE CIENCIAS

BLOQUE II
FÍSICA COMPUTACIONAL

4^o Grado en Física

Manuel Mora Cartagena

Índice

Capítulos	Página
1. Ejercicio 1	3
1.1. Red cúbica simple	3
1.2. Red cúbica centrada en las caras	4
1.3. Red cúbica centrada en el cuerpo	4
1.4. Red de diamante	5
1.5. Red de sal de roca	5
2. Ejercicio 2	6
2.1. Algoritmo de Verlet	6
2.2. Método de Runge-Kutta orden 2	9
3. Ejercicio 3	11
4. Ejercicio 4	16
5. Ejercicio 5	21
5.1. $f(x)$	21
5.2. $g(x)$	25
5.3. Círculo e hipersfera	27
6. Ejercicio 6	29
6.1. Energía del sistema para diferentes valores de la temperatura	30
6.2. Energía del sistema para diferentes tamaños del sistema	31
6.3. Energía del sistema para diferentes números de partículas	32
6.4. Energía del sistema para diferentes números de pasos Monte Carlo	33

Resumen

Este documento consiste en el informe de ejercicios del bloque II de la asignatura Física computacional.

1. Ejercicio 1

Este ejercicio consiste en la generación de distintas redes cristalinas.

Para ello, en el script *ejercicio1.py* será necesario introducir el número de celdas en cada una de las coordenadas (x, y, z) y el tipo de red cristalina, de manera que las redes pueden ser no cúbicas y por lo tanto tener distinto número de celdas para cada dirección del espacio.

La salida del programa dará el número total de átomos generados, es decir, el número total de posiciones y una representación gráfica en tres dimensiones de la red. Además, se generará un archivo llamado *ejercicio1* con extensión *.txt* en el que la primera línea será el número de átomos que contiene la red y las siguientes líneas corresponderán a las posiciones x, y y z de cada uno de los átomos de la red.

A continuación se mostrarán las celdas unidad de cada una de las redes y un ejemplo de cada una de las redes donde N_x , N_y y N_z son el número de celdas unidad en la dirección x, y y z correspondientemente.

1.1. Red cúbica simple

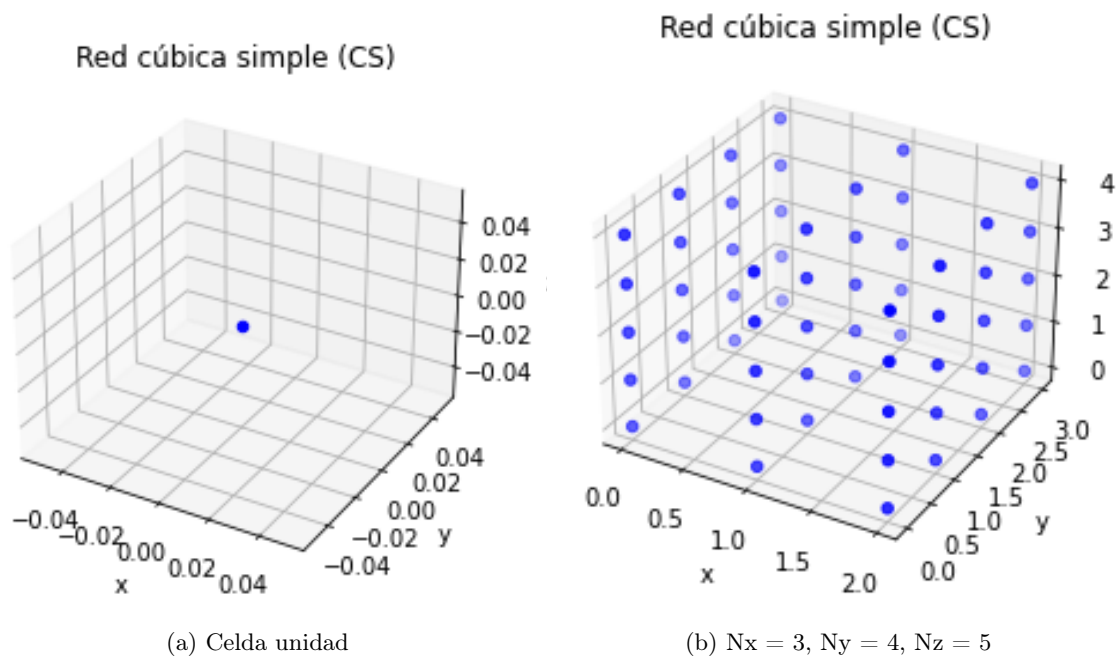
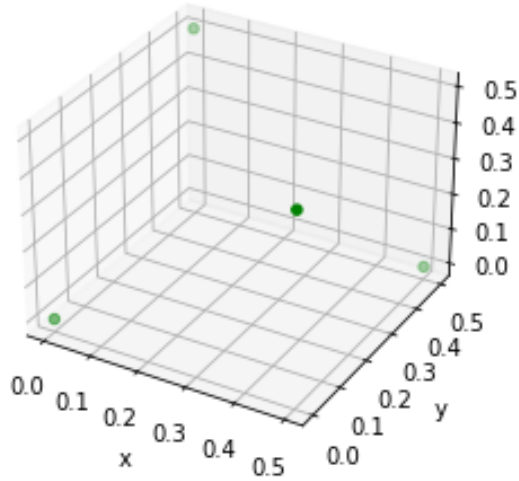


Figura 1: Red cúbica simple

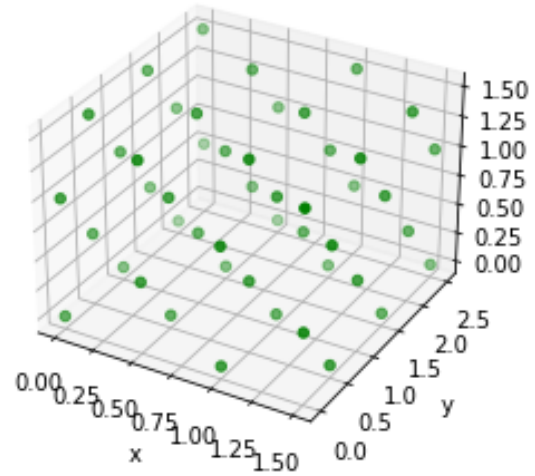
1.2. Red cúbica centrada en las caras

Red cúbica centrada en las caras (FCC)



(a) Celda unidad

Red cúbica centrada en las caras (FCC)

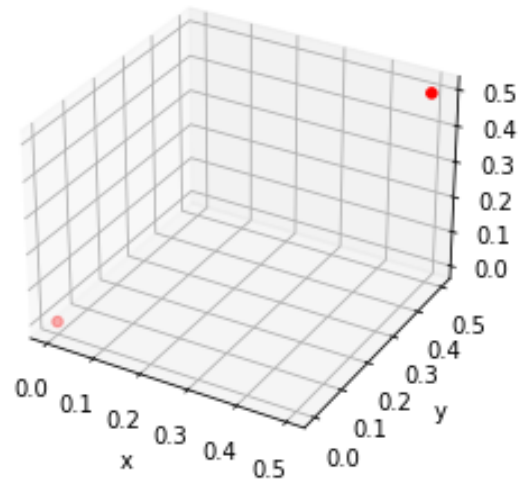


(b) $N_x = 2$, $N_y = 3$, $N_z = 2$

Figura 2: Red cúbica centrada en las caras

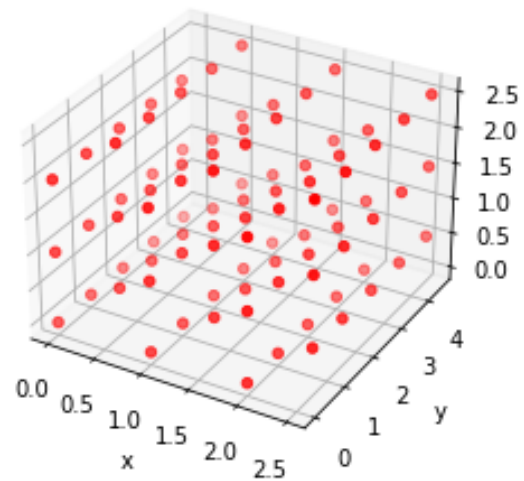
1.3. Red cúbica centrada en el cuerpo

Red cúbica centrada en el cuerpo (BCC)



(a) Celda unidad

Red cúbica centrada en el cuerpo (BCC)



(b) $N_x = 3$, $N_y = 5$, $N_z = 3$

Figura 3: Red cúbica centrada en el cuerpo

1.4. Red de diamante

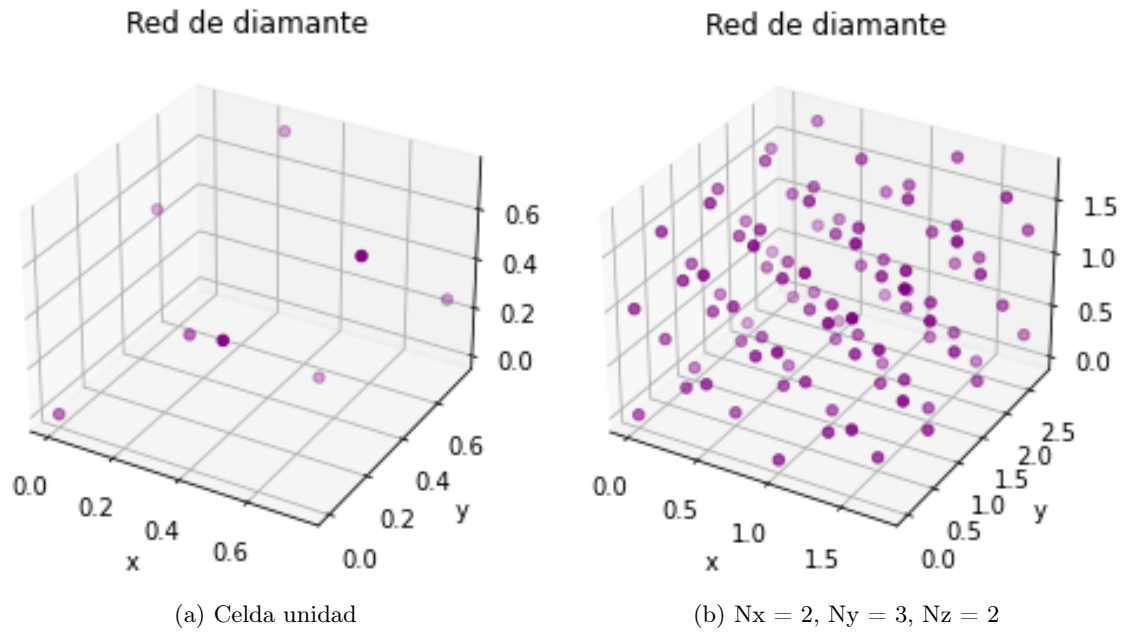


Figura 4: Red de diamante

1.5. Red de sal de roca

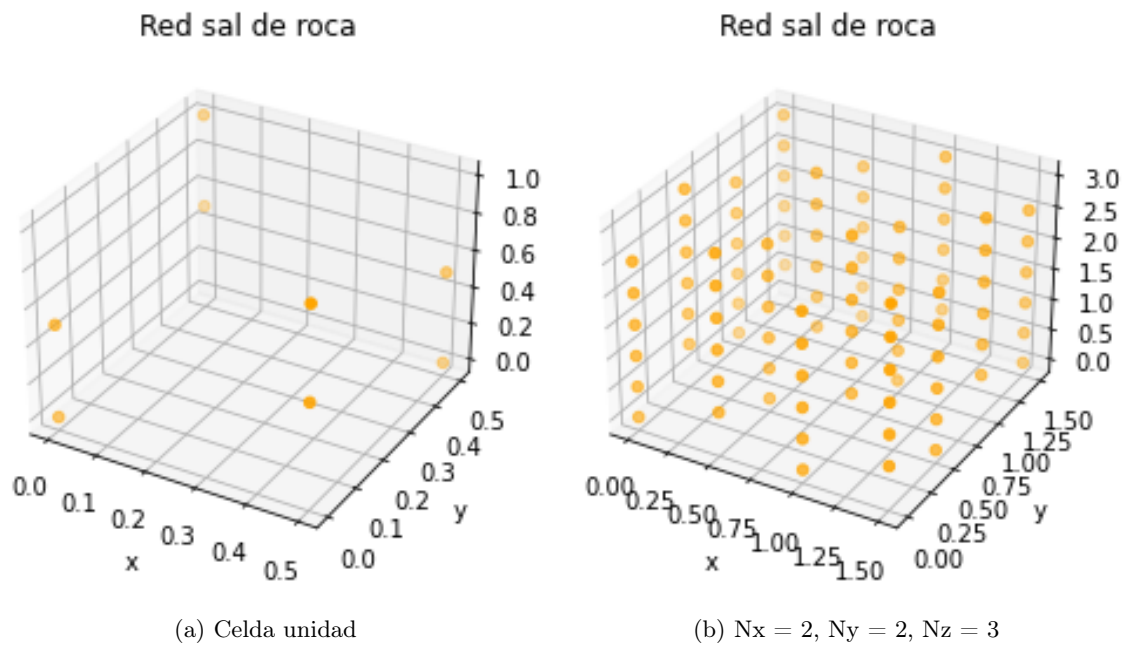


Figura 5: Red sal de roca

2. Ejercicio 2

Este ejercicio consiste en resolver la siguiente ecuación de movimiento:

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

Para ello se utilizan dos métodos distintos, el algoritmo de Verlet y el método de Runge-Kutta de orden 2.

2.1. Algoritmo de Verlet

Con el algoritmo de Verlet solo se calcula la posición en instantes enteros y la velocidad en instantes semi-enteros. Sin embargo, también se quiere calcular la energía cinética, potencial y total del sistema. Por lo tanto, para calcular la energía total es necesario calcular la velocidad en posiciones enteras también, ya que la energía cinética depende de la velocidad y la energía potencial depende de la posición y entonces para calcular la energía total como suma de ambas es necesario calcularlas en el mismo instante. A continuación se muestran diferentes gráficas de la resolución del problema con el algoritmo de Verlet:

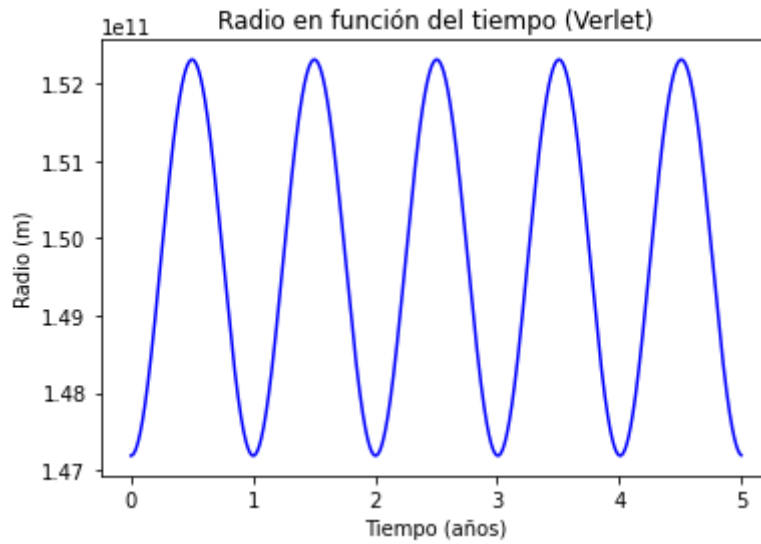


Figura 6: Radio en función del tiempo para el algoritmo de Verlet

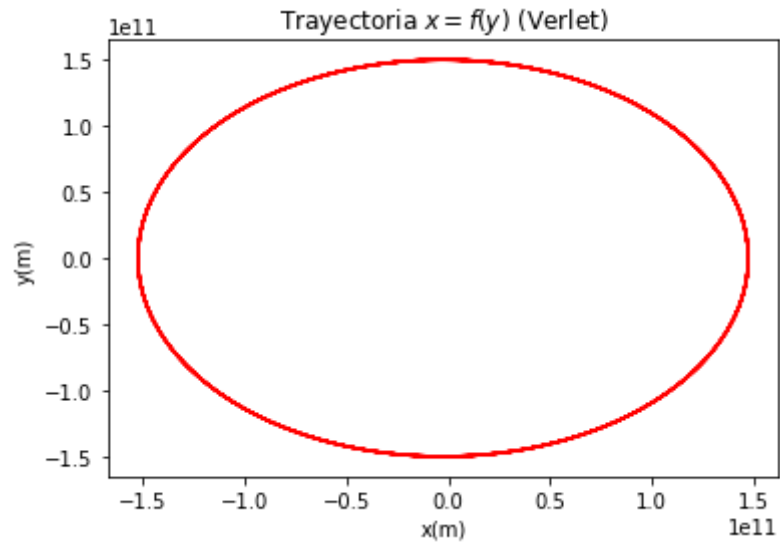


Figura 7: Trayectoria $x = f(y)$ para el algoritmo de Verlet

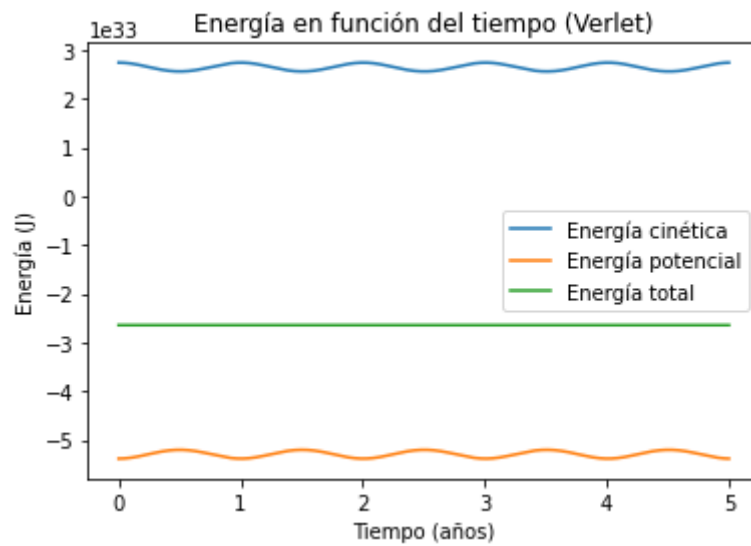


Figura 8: Energía en función del tiempo para el algoritmo de Verlet

Como puede verse en la figura 8 las energías cinética y potencial varían durante cada órbita mientras que la energía total del sistema se mantiene constante.

Sin embargo si se grafica unicamente la energía total del sistema puede verse que la energía total también varía levemente. Cabe destacar que al usar el algoritmo de Verlet la energía total se conserva en cada órbita, volviendo a la energía inicial tras el transcurso de una órbita.

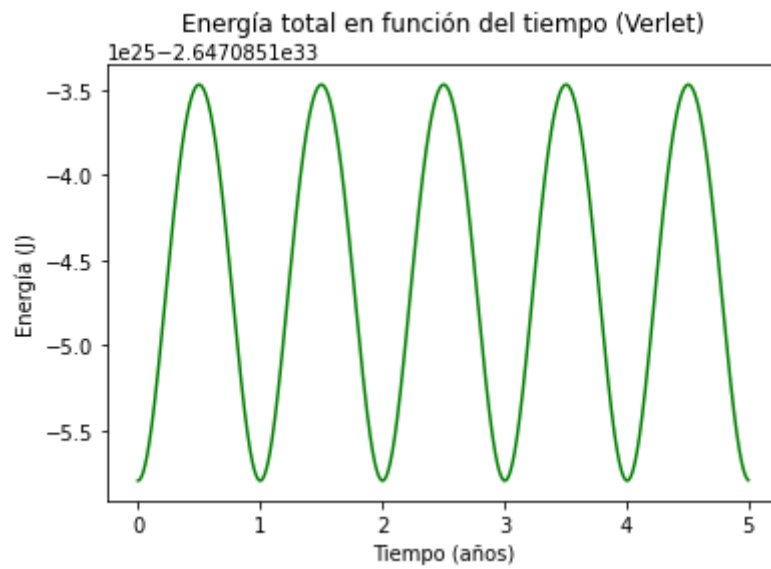


Figura 9: Energía total en función del tiempo para el algoritmo de Verlet

2.2. Método de Runge-Kutta orden 2

Otro método con el que se puede resolver la ecuación 1 es el método de Runge-Kutta de orden 2. Este algoritmo tiene un error $O(h^3)$, siendo un factor h más preciso que el métodos como el de Euler. Una diferencia respecto al método de Verlet es que con este método se calculan tanto las posiciones como las velocidades en todos los puntos enteros. Los resultados en este caso son los siguientes:

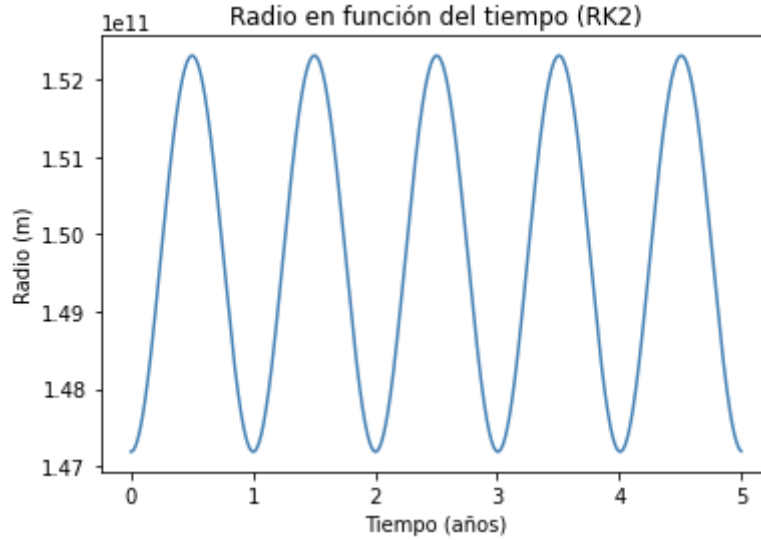


Figura 10: Radio en función del tiempo para el método Runge-Kutta orden 2

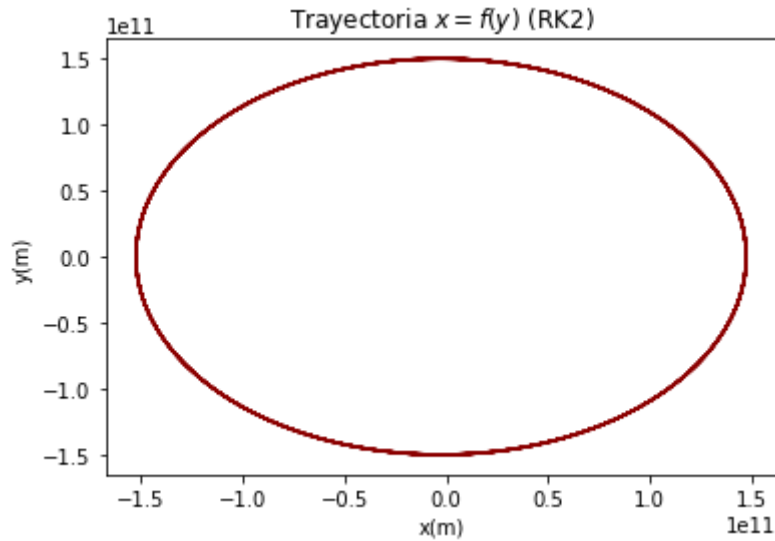


Figura 11: Trayectoria $x = f(y)$ para el método Runge-Kutta orden 2

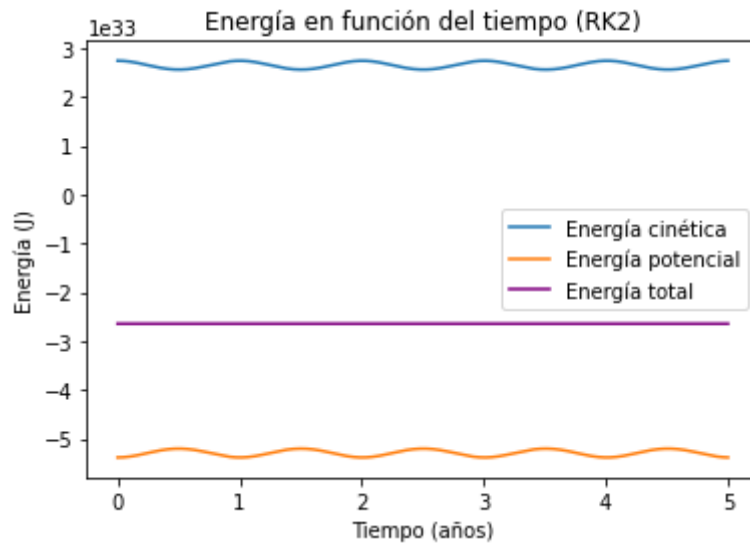


Figura 12: Energía en función del tiempo para el método Runge-Kutta orden 2

A primera vista puede parecer que en la figura 12 la energía total se conserva. Sin embargo si se compara con la energía total calculada con el algoritmo de Verlet se puede ver que no es así:

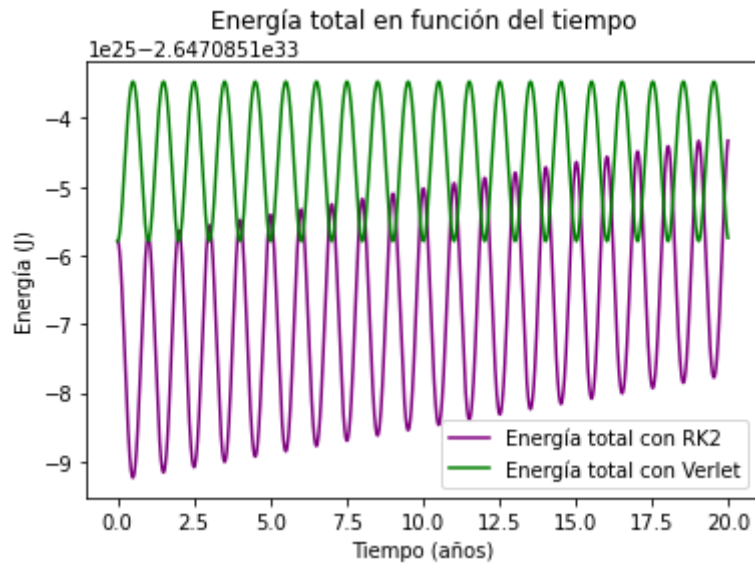


Figura 13: Energía total en función del tiempo para el ambos métodos

Tal y como puede verse en la figura 13 la energía total con el método de Runge-Kutta de orden 2 no se conserva. Cabe destacar que se ha calculado la energía total para 20 años para que se aprecie mejor este fenómeno.

3. Ejercicio 3

Este ejercicio consiste en generar una red cúbica centrada en las caras (FCC) y calcular la energía total del sistema considerando un potencial de interacción de pares, el potencial de Leonard-Jones que viene dado por la siguiente ecuación:

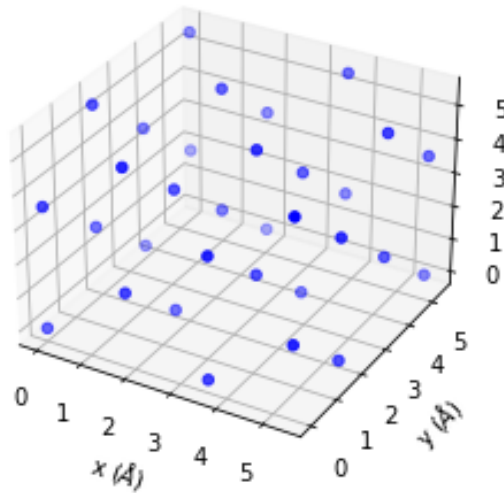
$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

siendo $n = 12$, $m = 6$, $\sigma = 2,3151\text{\AA}$ y $\epsilon = 0,167\text{eV}$ con un parámetro de red $a = 3,603\text{\AA}$.

Se calculará la energía del sistema tanto con condiciones de contorno libres como periódicas tomando siempre un radio de corte de 3σ .

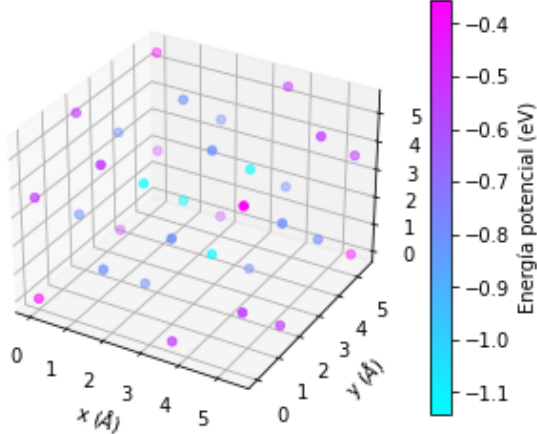
A continuación se muestran diferentes figuras de redes FCC en 3D y la misma red pero se representa mediante un código de colores la energía potencial de cada átomo para ambas condiciones de contorno:

Red cúbica centrada en las caras (FCC)



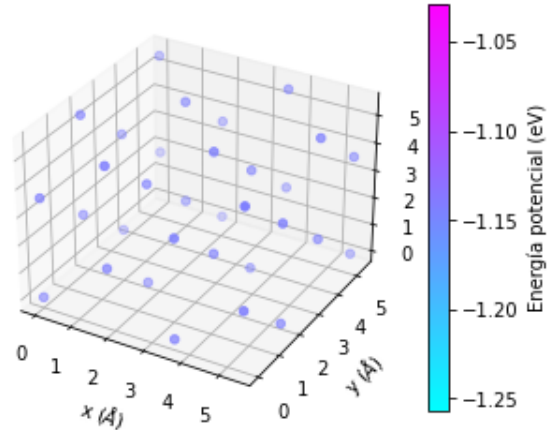
(a) Red 2x2x2

Energía potencial de cada átomo



(b) Energía potencial de cada átomo con condiciones de contorno libres

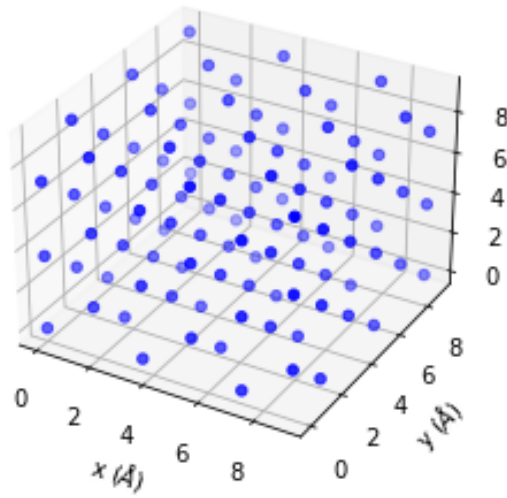
Energía potencial de cada átomo



(c) Energía potencial de cada átomo con condiciones de contorno periódicas

Figura 14: Red 2x2x2 en 3D y la energía potencial de cada átomo

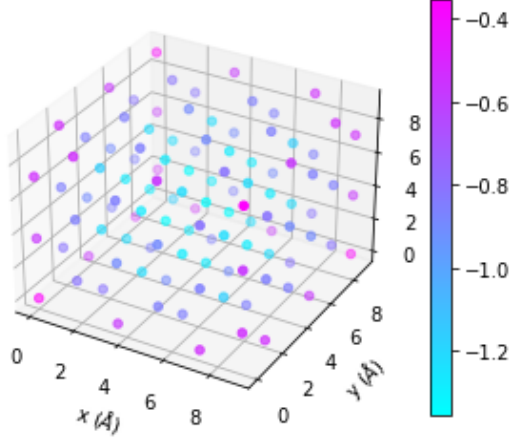
Red cúbica centrada en las caras (FCC)



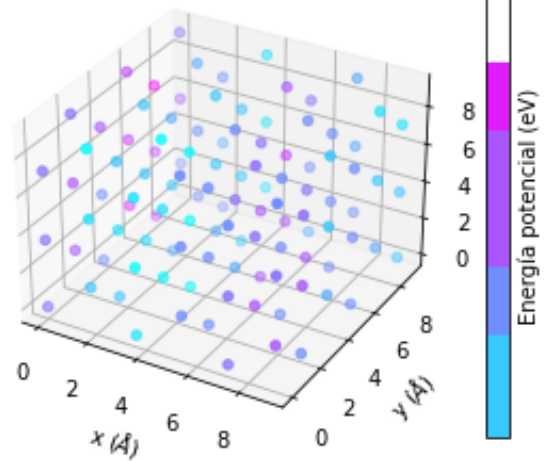
(a) Red 3x3x3

Energía potencial de cada átomo

Energía potencial de cada átomo



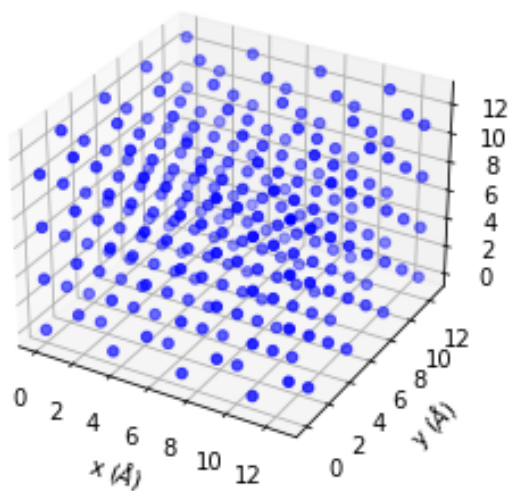
(b) Energía potencial de cada átomo con condiciones de contorno libres



(c) Energía potencial de cada átomo con condiciones de contorno periódicas

Figura 15: Red 3x3x3 en 3D y la energía potencial de cada átomo

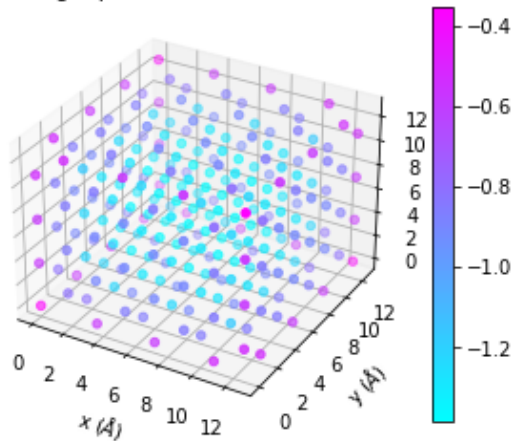
Red cúbica centrada en las caras (FCC)



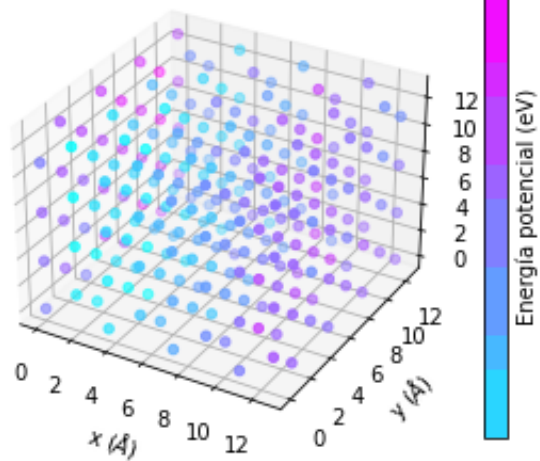
(a) Red 4x4x4

Energía potencial de cada átomo

Energía potencial de cada átomo



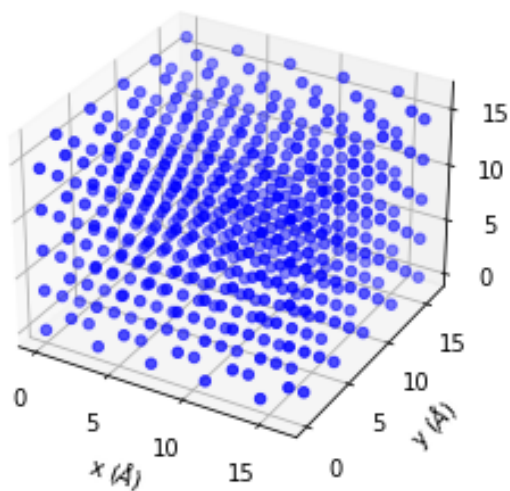
(b) Energía potencial de cada átomo con condiciones de contorno libres



(c) Energía potencial de cada átomo con condiciones de contorno periódicas

Figura 16: Red 4x4x4 en 3D y la energía potencial de cada átomo

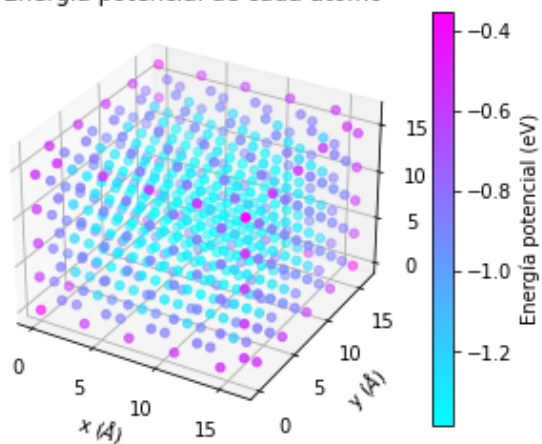
Red cúbica centrada en las caras (FCC)



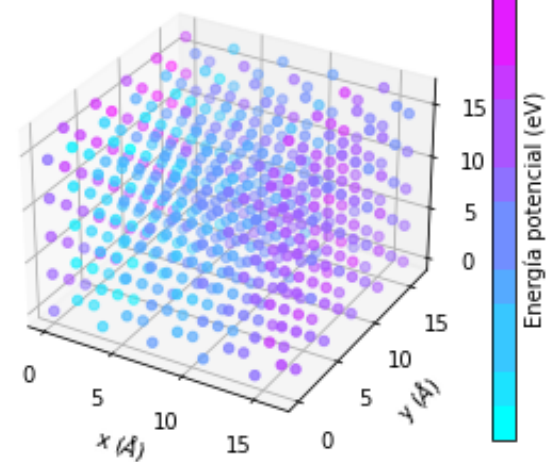
(a) Red 5x5x5

Energía potencial de cada átomo

Energía potencial de cada átomo



(b) Energía potencial de cada átomo con condiciones de contorno libres



(c) Energía potencial de cada átomo con condiciones de contorno periódicas

Figura 17: Red 5x5x5 en 3D y la energía potencial de cada átomo

El script también calcula la energía del sistema y la energía por átomo como se dijo anteriormente. Los resultados para cada una de las redes anteriores son los siguientes:

Tamaño de la red	Energía del sistema cc libres (eV)	Energía del sistema cc periódicas (eV)	Energía por átomo cc libres (eV)	Energía por átomo cc periódicas (eV)
2x2x2	-21.922	-36.578	-0.685	-1.143
3x3x3	-95.885	-146.217	-0.888	-1.354
4x4x4	-256.0782	-354.553	-1.0003	-1.385
5x5x5	-535.7409	-692.486	-1.071	-1.385

Cuadro 1: Energía del sistema y por átomo para los distintos tamaños de la red

De la tabla 1 se puede observar que la energía del sistema y la energía por átomo aumenta para el mismo tamaño de red si se asumen condiciones de contorno periódicas y no libres. Esto se debe a que los átomos de los extremos de la red interactúan con más átomos que si se consideran condiciones de contorno libres, y por lo tanto estas contribuciones aumentan el valor de la energía del sistema y por tanto de la energía por átomo.

También se puede ver que a medida que aumenta el tamaño de la red, aumenta la energía del sistema (el valor absoluto) para ambas condiciones de contorno. Cabe destacar que la energía por átomo prácticamente es constante una vez se pasa el tamaño de red 4x4x4 para ambas condiciones de contorno.

Además, si se modifica el radio de corte, de 3σ como era originalmente se puede observar que la energía del sistema y por tanto la energía por átomo disminuye. Por ejemplo para una red 3x3x3 se obtiene lo siguiente:

Radio de corte	Energía del sistema cc libres (eV)	Energía del sistema cc periódicas (eV)	Energía por átomo cc libres (eV)	Energía por átomo cc periódicas (eV)
$2,5\sigma$	-94.875	-144.048	-0.878	-1.334
3σ	-95.885	-146.217	-0.888	-1.354
$3,5\sigma$	-96.311	-146.301	-0.892	-1.355

Cuadro 2: Energía del sistema y por átomo para una red 3x3x3 para distintos radios de corte

Tal y como puede verse en la tabla 2 a medida que aumenta el radio de corte aumenta la energía del sistema y por tanto la energía por átomo.

4. Ejercicio 4

Este ejercicio es una continuación del ejercicio 3. En este caso, además de calcular la energía del sistema se calcula la fuerza sobre cada átomo, donde \vec{F} viene dado por la siguiente expresión:

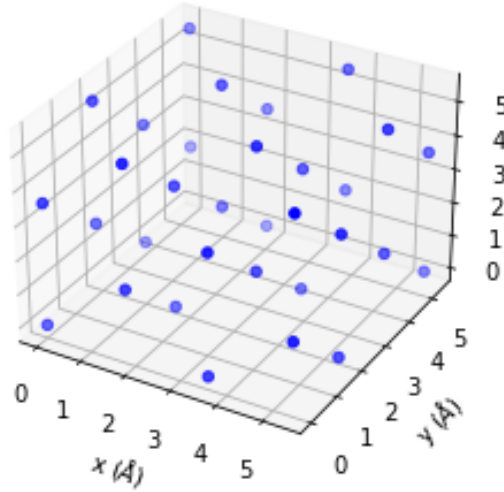
$$\vec{F} = -\vec{\nabla}V(r) = -4\epsilon(\sigma^m \frac{m}{r^{m+2}} - \sigma^n \frac{n}{r^{n+2}})\vec{r} \quad (3)$$

Cabe destacar que los parámetros siguen siendo $n = 12$, $m = 6$, $\sigma = 2,3151\text{\AA}$ y $\epsilon = 0,167\text{eV}$ con un parámetro de red $a = 3,603\text{\AA}$.

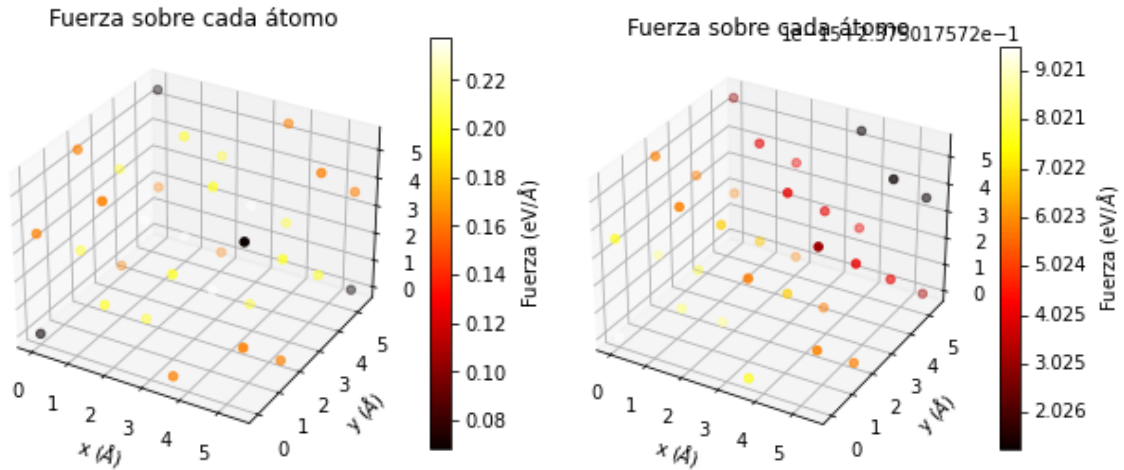
Se calculará la fuerza sobre cada átomo del sistema tanto con condiciones de contorno libres como periódicas tomando siempre un radio de corte de 3σ .

A continuación se muestran diferentes figuras de redes FCC en 3D y la misma red pero se representa mediante un código de colores la fuerza ejercida sobre de cada átomo para ambas condiciones de contorno:

Red cúbica centrada en las caras (FCC)



(a) Red 2x2x2

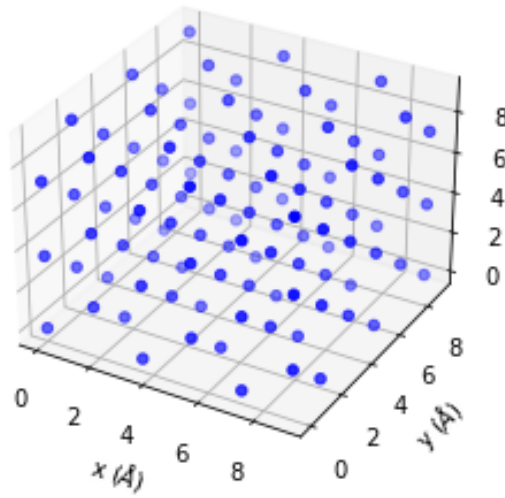


(b) Módulo de la fuerza sobre cada átomo con condiciones de contorno libres

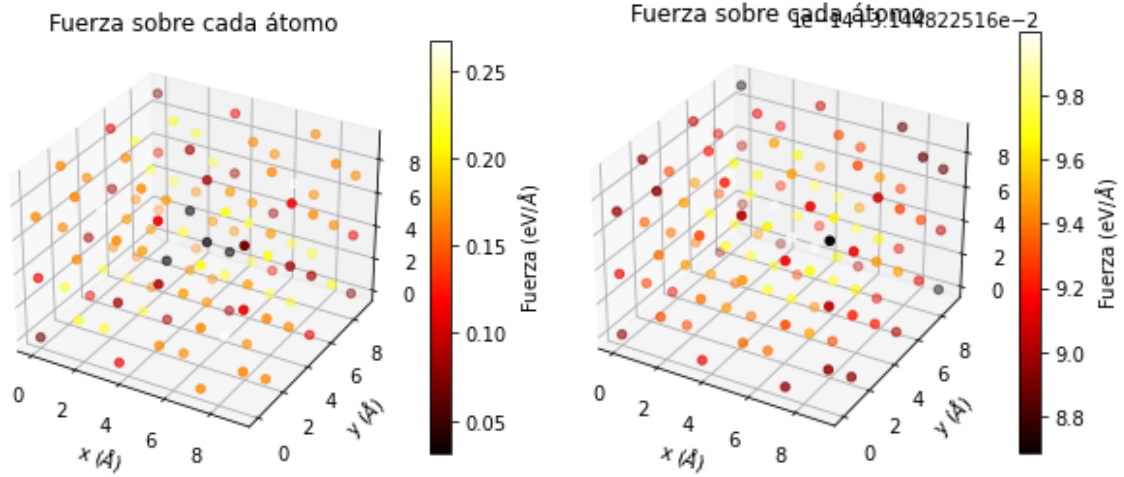
(c) Módulo de la fuerza sobre cada átomo con condiciones de contorno periódicas

Figura 18: Red 2x2x2 en 3D y módulo de la fuerza sobre cada átomo

Red cúbica centrada en las caras (FCC)



(a) Red 3x3x3

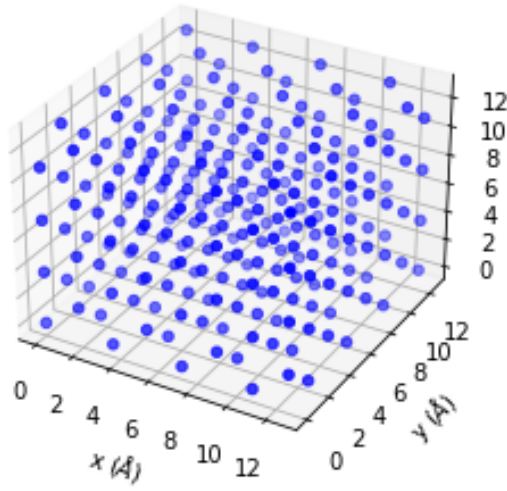


(b) Módulo de la fuerza sobre cada átomo con condiciones de contorno libres

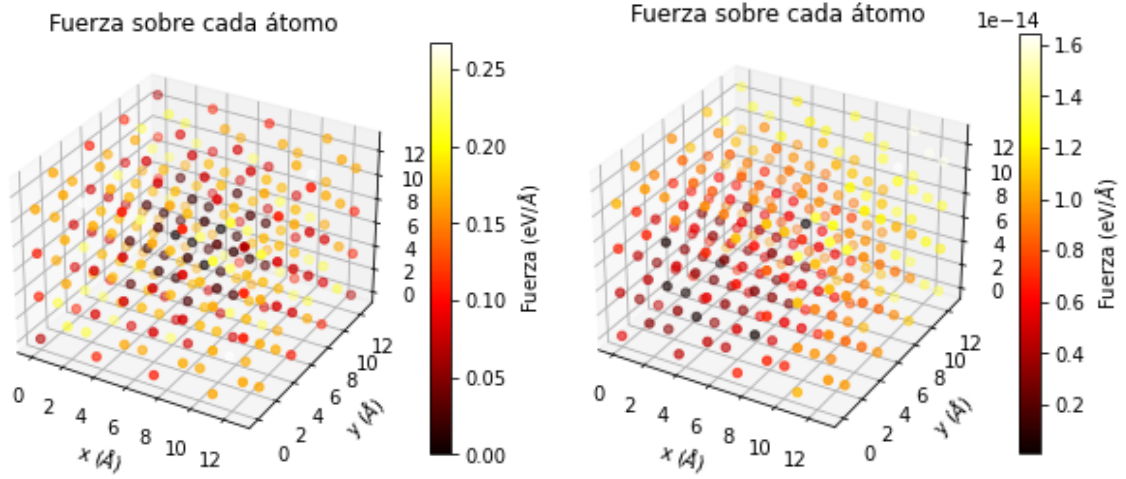
(c) Módulo de la fuerza sobre cada átomo con condiciones de contorno periódicas

Figura 19: Red 3x3x3 en 3D y módulo de la fuerza sobre cada átomo

Red cúbica centrada en las caras (FCC)



(a) Red 4x4x4

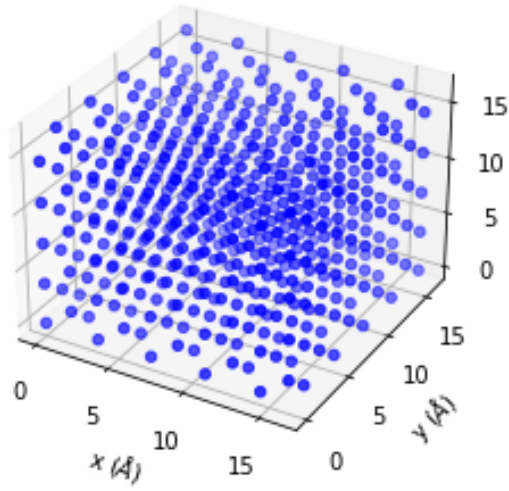


(b) Módulo de la fuerza sobre cada átomo con condiciones de contorno libres

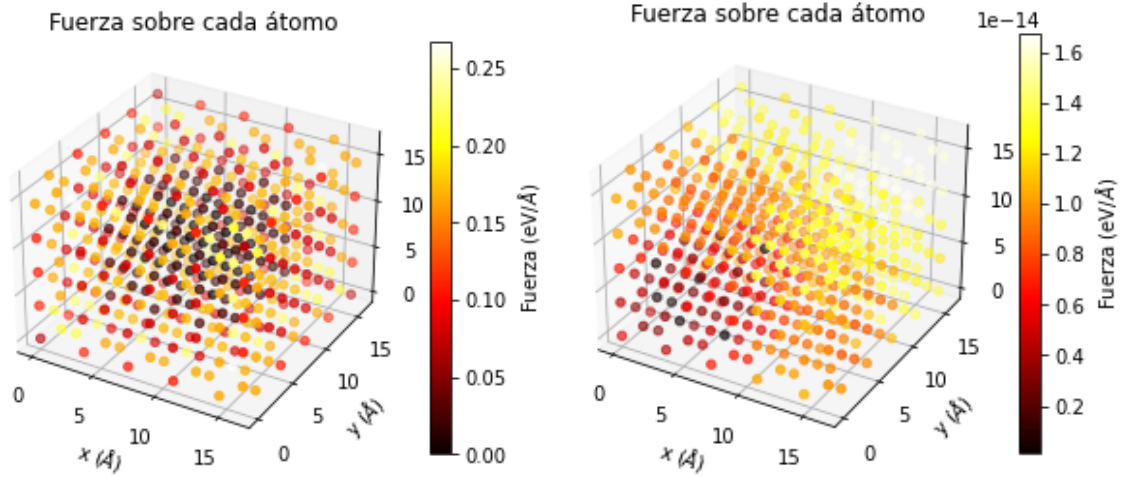
(c) Módulo de la fuerza sobre cada átomo con condiciones de contorno periódicas

Figura 20: Red 4x4x4 en 3D y módulo de la fuerza sobre cada átomo

Red cúbica centrada en las caras (FCC)



(a) Red 5x5x5



(b) Módulo de la fuerza sobre cada átomo con condiciones de contorno libres

(c) Módulo de la fuerza sobre cada átomo con condiciones de contorno periódicas

Figura 21: Red 5x5x5 en 3D y módulo de la fuerza sobre cada átomo

También se puede representar la fuerza sobre cada átomo dibujando el vector F correspondiente a cada átomo. Por ejemplo para la celda unidad de una red fcc se tiene lo siguiente:

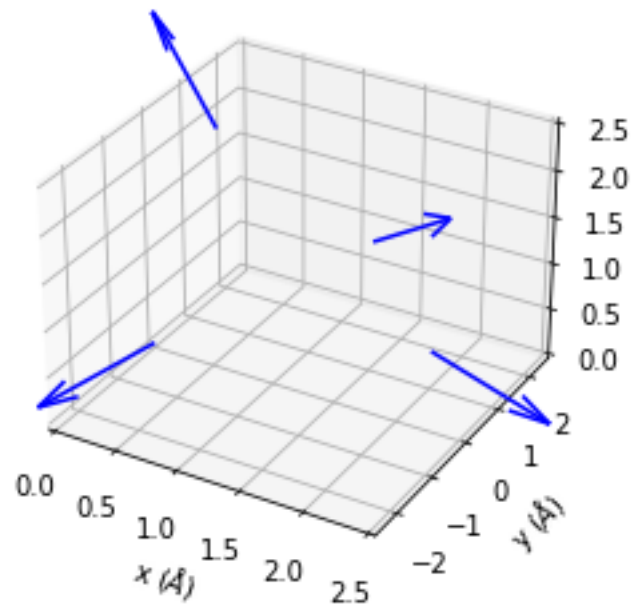


Figura 22: Vectores fuerza sobre cada átomo para la celda unidad de una red fcc

5. Ejercicio 5

5.1. $f(x)$

El objetivo de este ejercicio es desarrollar un programa Monte Carlo para integrar funciones. La función objetivo a integrar es la siguiente:

$$f(x) = \sin^2 \frac{1}{x(2-x)} \quad (4)$$

que tiene la siguiente forma:

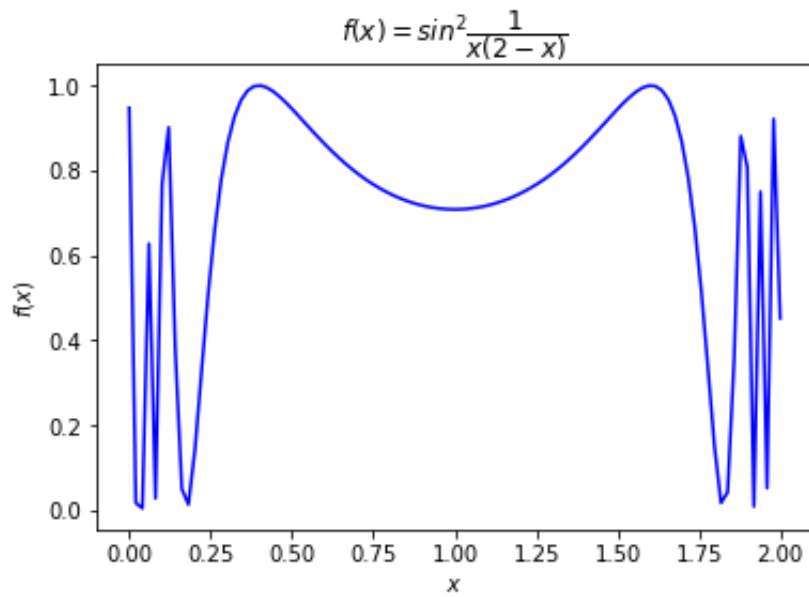


Figura 23: $f(x)$

Una vez escrito el programa Monte Carlo se puede representar la misma función junto con los puntos que están por debajo de la función, es decir, el conjunto de puntos aceptados, obteniéndose lo siguiente:

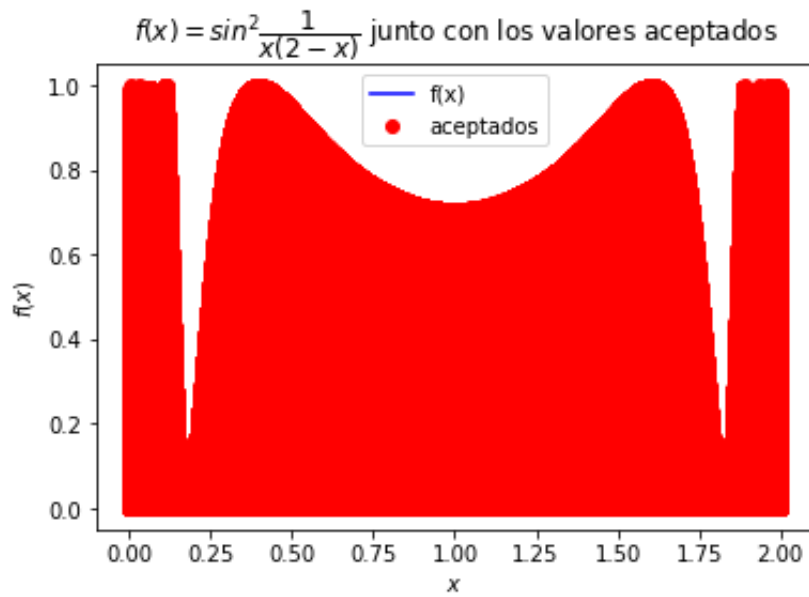


Figura 24: $f(x)$ junto con los puntos aceptados

Considerando como número máximo del rectángulo $y_0 = 2$ y el número de pasos Monte Carlo $N = 10000000$ se obtiene que el valor de la integral es $I = 1,4510$ u.a y su error es $\sigma = 0,0006$ u.a. También se puede representar el valor de la integral y del error en función del número de pasos, fijando como valor máximo de la función $y_0 = 2$, obteniéndose lo siguiente:

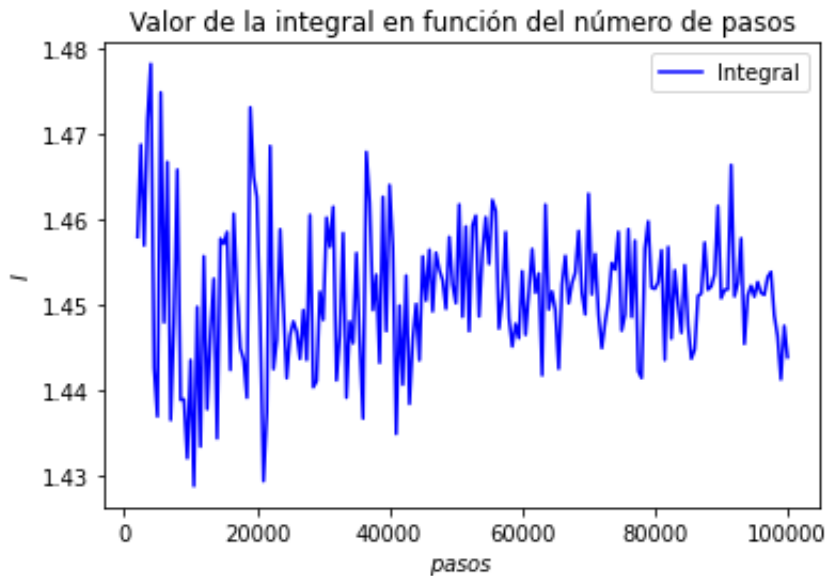


Figura 25: Integral de $f(x)$ en función del número de pasos

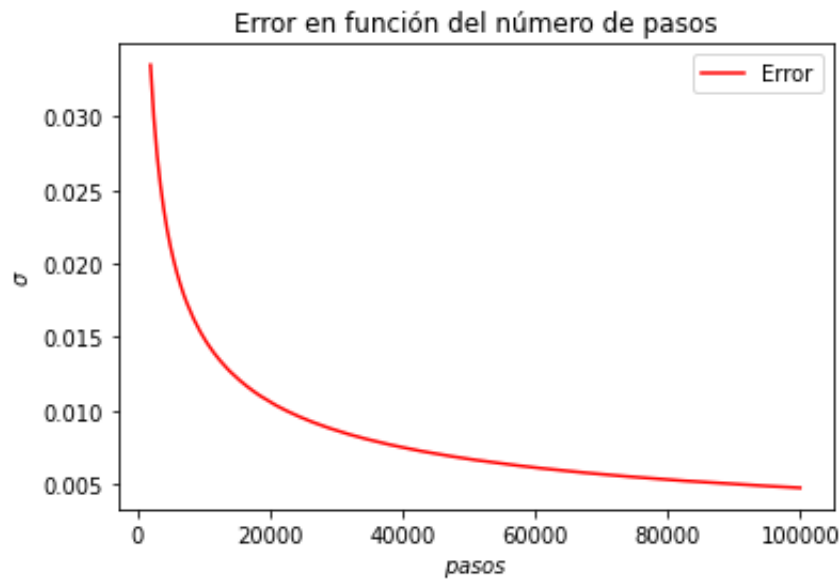


Figura 26: Error de $f(x)$ en función del número de pasos

Como se puede ver en la figura 25 el valor de la integral varía mucho por la naturaleza aleatoria del método Monte Carlo, se puede minimizar este efecto si se elije siempre la misma semilla para todos los pasos, obteniéndose lo siguiente:

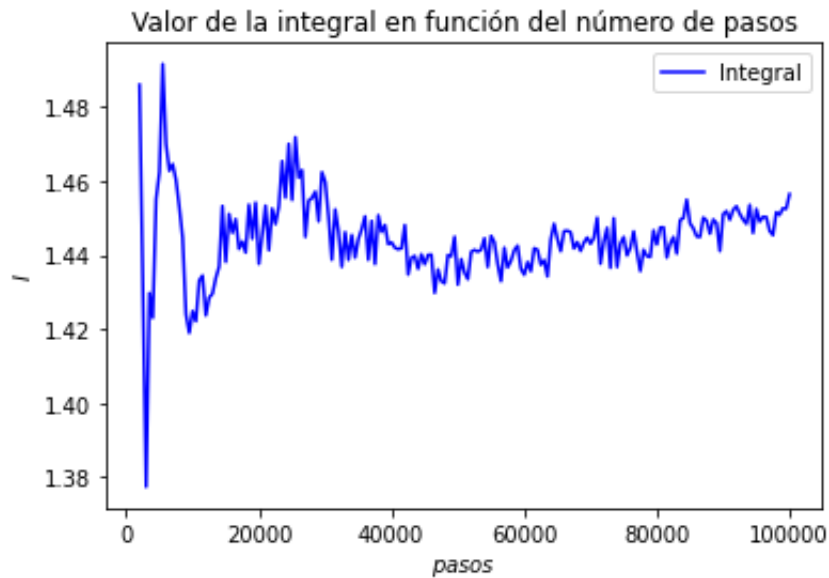


Figura 27: Integral de $f(x)$ en función del número de pasos para la misma semilla

Como se puede ver en la figura 27 este efecto se ha minimizado y el valor de la integral es mucho más estable, acercándose al valor real $I = 1,4514$ u.a.

También se puede estudiar como varía el valor de la integral y del error en función del valor máximo del rectángulo y fijando el valor del número de pasos en $N = 1000000$, obteniendo lo siguiente:



Figura 28: Integral de $f(x)$ en función del valor máximo del rectángulo

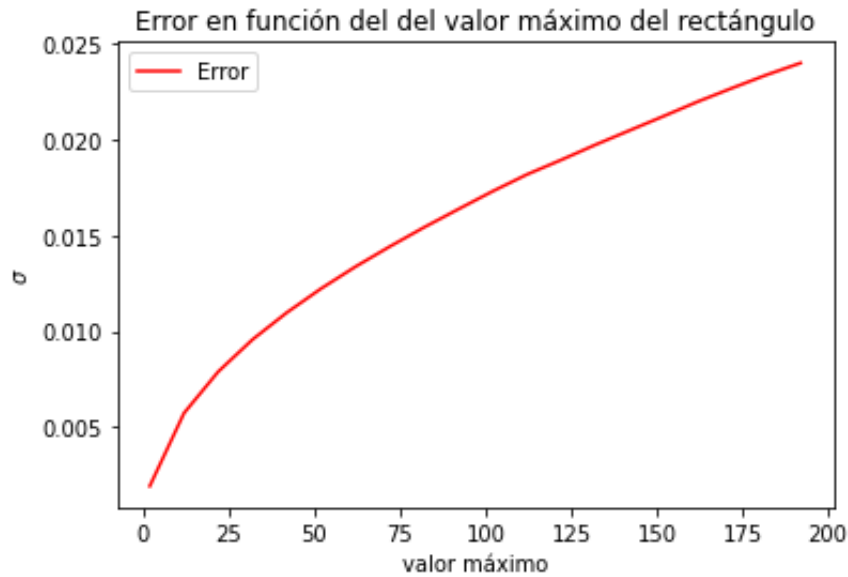


Figura 29: Error de $f(x)$ en función del valor máximo del rectángulo

Tal y como puede verse en las figuras anteriores, tanto el valor de la integral como su error aumentan a medida que aumenta el valor máximo del rectángulo. Esto era de esperar, pues si se aumenta el valor máximo del rectángulo a un valor mucho mayor al valor máximo de la función (en este caso era 1 pues el seno está acotado superiormente) manteniendo el número de pasos Monte Carlo, la proporción de puntos fuera y dentro del área a calcular es mucho menos exacta porque son necesarios muchos más puntos para cubrir toda el área. Por lo tanto, cuanto más cercano sea el valor máximo del rectángulo al valor máximo de la función, menos puntos Monte Carlo serán necesarios para que el valor de la integral converja correctamente.

5.2. $g(x)$

Como extra se puede realizar el mismo estudio para otra función que no tenga una primitiva analítica, la función en este caso será:

$$g(x) = e^{-x^2} \quad (5)$$

que tiene la siguiente forma:

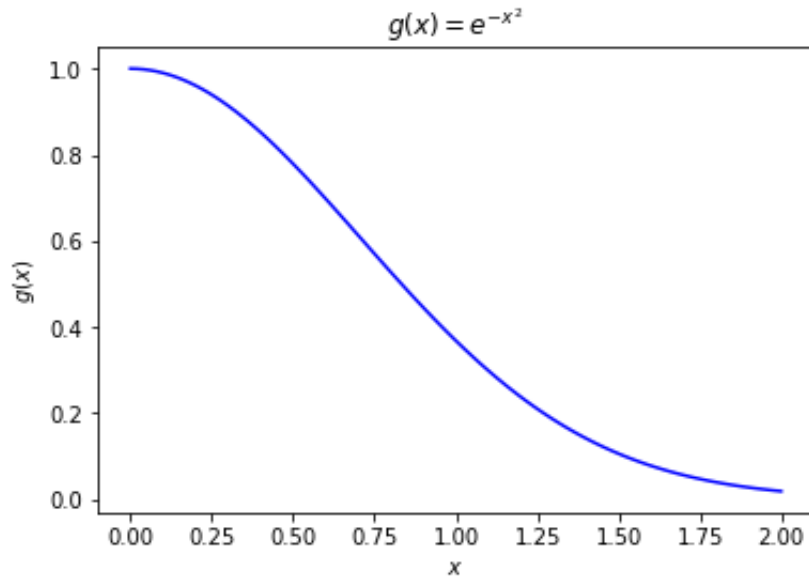


Figura 30: $g(x)$

Si se representa la misma función junto con los puntos que están por debajo de la función, es decir, el conjunto de puntos aceptados, se obtiene lo siguiente:

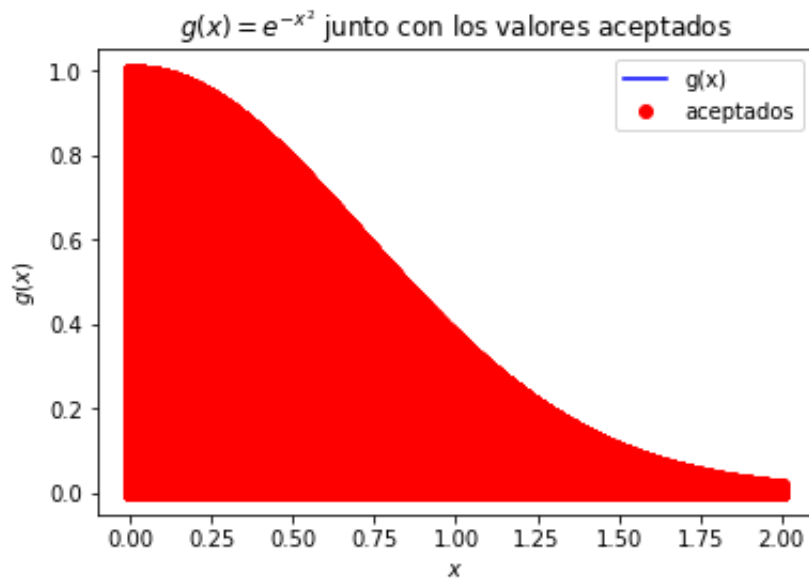


Figura 31: $g(x)$ junto con los puntos aceptados

Considerando en este caso de nuevo como número máximo del rectángulo $y_0 = 2$ y el número de pasos Monte Carlo $N = 10000000$ se obtiene que el valor de la integral es $I = 0,8804$ u.a y su error es $\sigma = 0,0005$ u.a.

De nuevo, se puede representar el valor de la integral y su error en función del número de pasos:

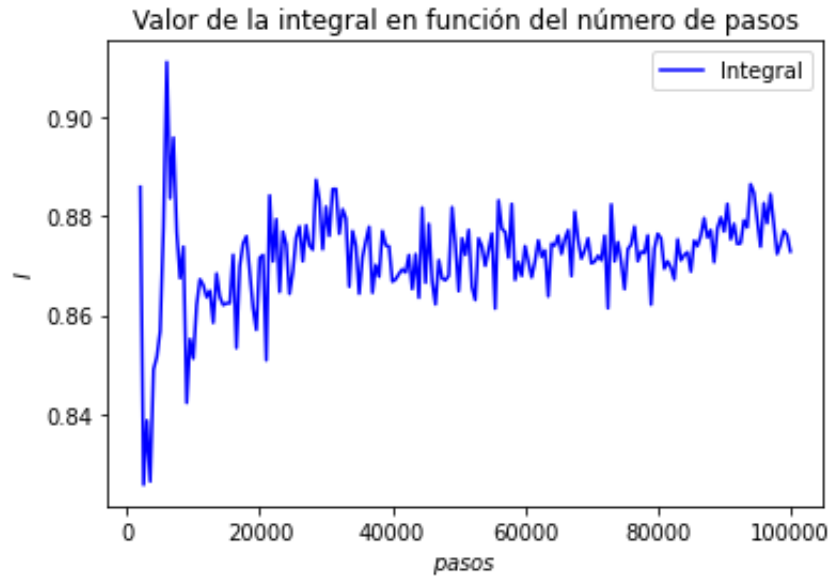


Figura 32: Integral de $g(x)$ en función del número de pasos

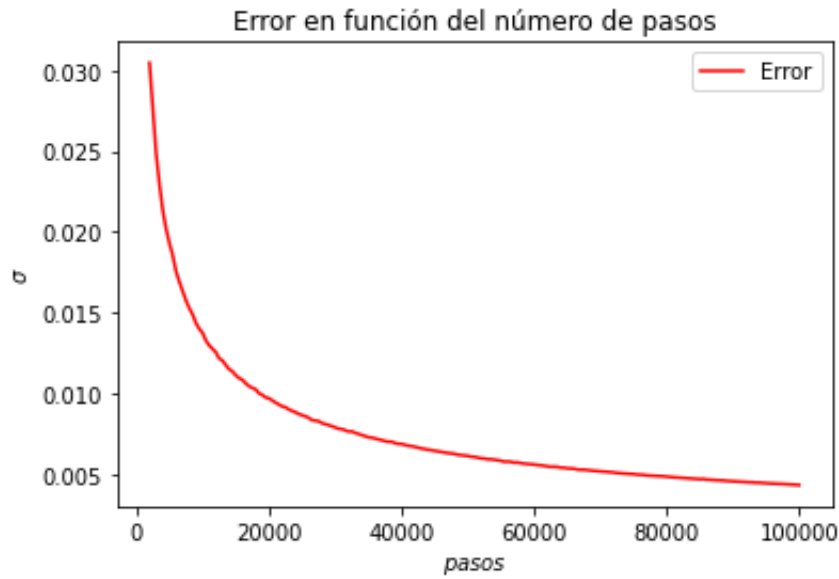


Figura 33: Error de $g(x)$ en función del número de pasos

obteniéndose de nuevo, que a medida que aumenta el número de pasos, el valor de la integral converge al valor real.

5.3. Círculo e hiperesfera

Otro extra consiste en implementar una función Monte Carlo para un círculo de radio 1 para posteriormente generalizar a una hiperesfera de dimensión 10.

En primer lugar, el círculo de radio 1 tiene la siguiente forma:

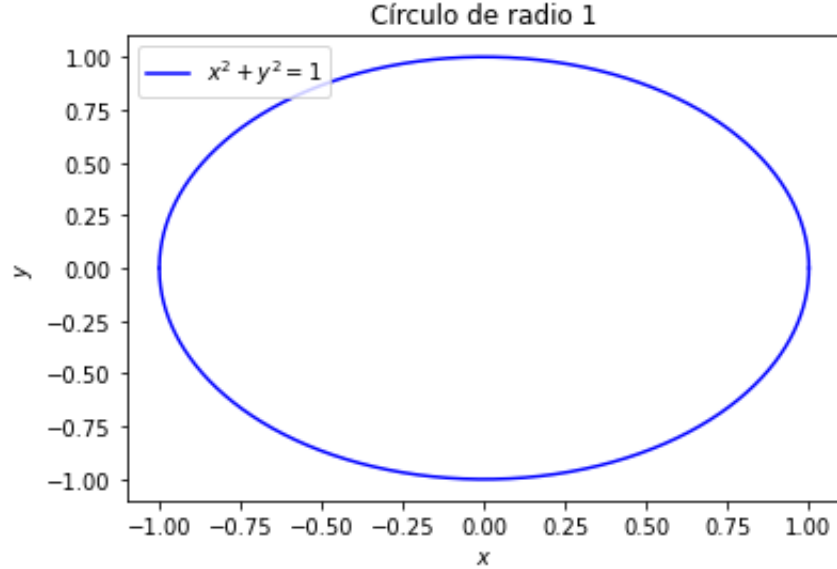


Figura 34: Círculo de radio 1

Cabe destacar que parece una elipse pero es por la relación de aspecto 16:9 de la imagen. Si se representa el círculo de la figura 34 junto con el conjunto de puntos aceptados se obtiene lo siguiente:

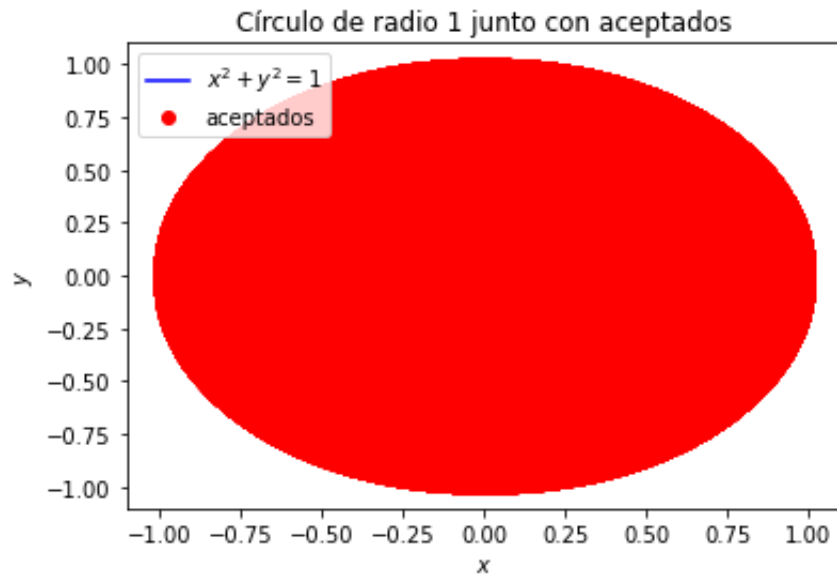


Figura 35: Círculo de radio 1 junto con los puntos aceptados

En este caso tomando como valor máximo $y_0 = 1$ y como número de pasos Monte Carlo $N = 10000000$ se obtiene que el valor de la integral es $I = 3,1412$ u.a y su error es $\sigma = 0,0005$ u.a, siendo el valor esperado de la integral π , por lo tanto está bien implementado.

Por último se generaliza a una hiperesfera de 10 dimensión que obviamente no se puede representar en el plano. El valor real de la integral sea $I_{10} = \frac{\pi^5}{5!}$ u.a. Tomando como valor máximo para cada dimensión $y_0 = 1$ (ya que la hiperesfera es de radio 1) y el número de pasos Monte Carlo $N = 10000000$ se ha obtenido que el valor de la integral es $I = 2,5394$ u.a $\approx \frac{\pi^5}{5!}$ y su error es $\sigma = 0,0161$ u.a.

6. Ejercicio 6

Este ejercicio consiste en implementar el método de Metropolis Monte Carlo para un sistema sencillo compuesto por un gas ideal de masa m en una caja cúbica de longitud L con energía que depende de tres números cuánticos: n_x, n_y, n_z :

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

El objetivo es obtener el valor de la energía total del sistema en equilibrio, siendo la energía total del sistema la suma de la energía de cada una de las partículas:

$$E = \sum_{i=1}^N E(n_x^i, n_y^i, n_z^i) \quad (7)$$

Para realizar el cambio de estado se elige una partícula del sistema aleatoriamente así como la dirección del cambio de estado. Después se elige si el cambio será $+1$ o -1 también de forma aleatoria, por ejemplo si se obtiene que el cambio será en la dirección x los cambios pueden ser los siguientes:

- Si aumenta $n_x + 1$:

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL} (2n_x + 1) \quad (8)$$

- Si disminuye $n_x - 1$:

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL} (-2n_x + 1) \quad (9)$$

A continuación se realiza el cambio y se comprueba si se acepta el cambio o se rechaza considerando el algoritmo de Metropolis, siendo en este caso la distribución de Boltzmann.

El sistema se inicia en el estado de mínima energía, es decir, con todos los números cuánticos de todas las partículas valiendo 1. Cabe destacar que si el número cuántico de una partícula en una cierta dirección es 1 y el cambio elegido de forma aleatoria resulta ser -1 , este cambio se rechaza pues el valor de un número cuántico no puede ser menor a 1.

Los resultados se mostrarán con gráficos de la energía total del sistema en función del número de pasos de Monte Carlo, para poder ver como evoluciona la energía a medida que se realizan pasos de Monte Carlo. Para ver como cambia el sistema en función de cada parámetro se fijarán todos los parámetros menos uno que irá variando, siendo los parámetros a variar los siguientes:

- Temperatura del sistema KT
- Tamaño del sistema L
- Número de partículas N
- Número de pasos Monte Carlo m

Cabe destacar también que se consideran todas las constantes igual a 1.

6.1. Energía del sistema para diferentes valores de la temperatura

En este caso se fijan los parámetros con los siguientes valores:

- Tamaño del sistema $L = 1$
- Número de partículas $N = 1000$
- Número de pasos Monte Carlo $m = 1000000$

A continuación se muestran gráficas para diferentes valores de KT :

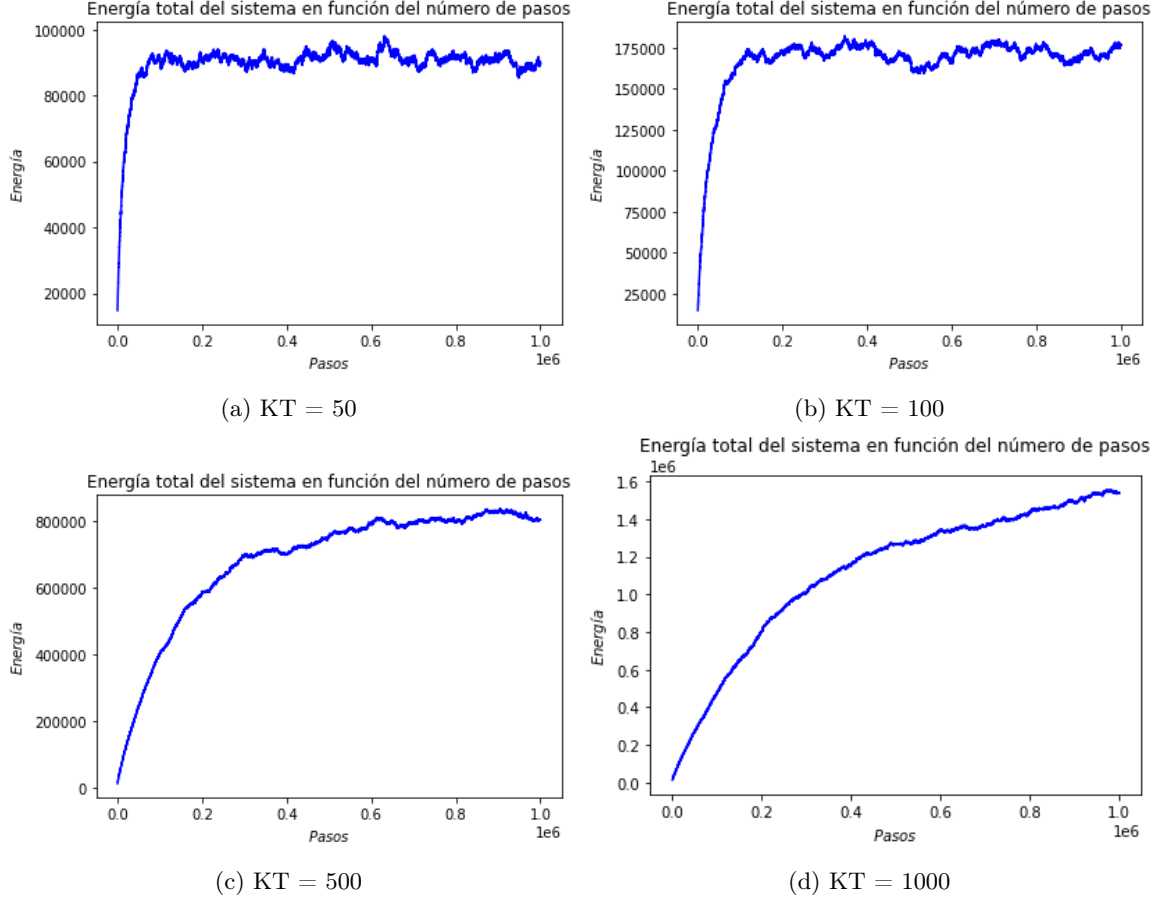


Figura 36: Energía total del sistema en función del número de pasos Monte Carlo para diferentes valores de la temperatura KT

Como se puede ver en las gráficas de la figura 36 a medida que aumenta la temperatura son necesarios más pasos Monte Carlo para obtener la energía de equilibrio del sistema. Por lo tanto, si se mantiene constante el número de Pasos Monte Carlo pero se aumenta la temperatura como es el caso de la figura 36 a partir de cierta temperatura no se llega a obtener la energía de equilibrio.

6.2. Energía del sistema para diferentes tamaños del sistema

En este caso se fijan los parámetros con los siguientes valores:

- Temperatura del sistema $KT = 200$
- Número de partículas $N = 1000$
- Número de pasos Monte Carlo $m = 1000000$

A continuación se muestran gráficas para diferentes tamaños del sistema L :

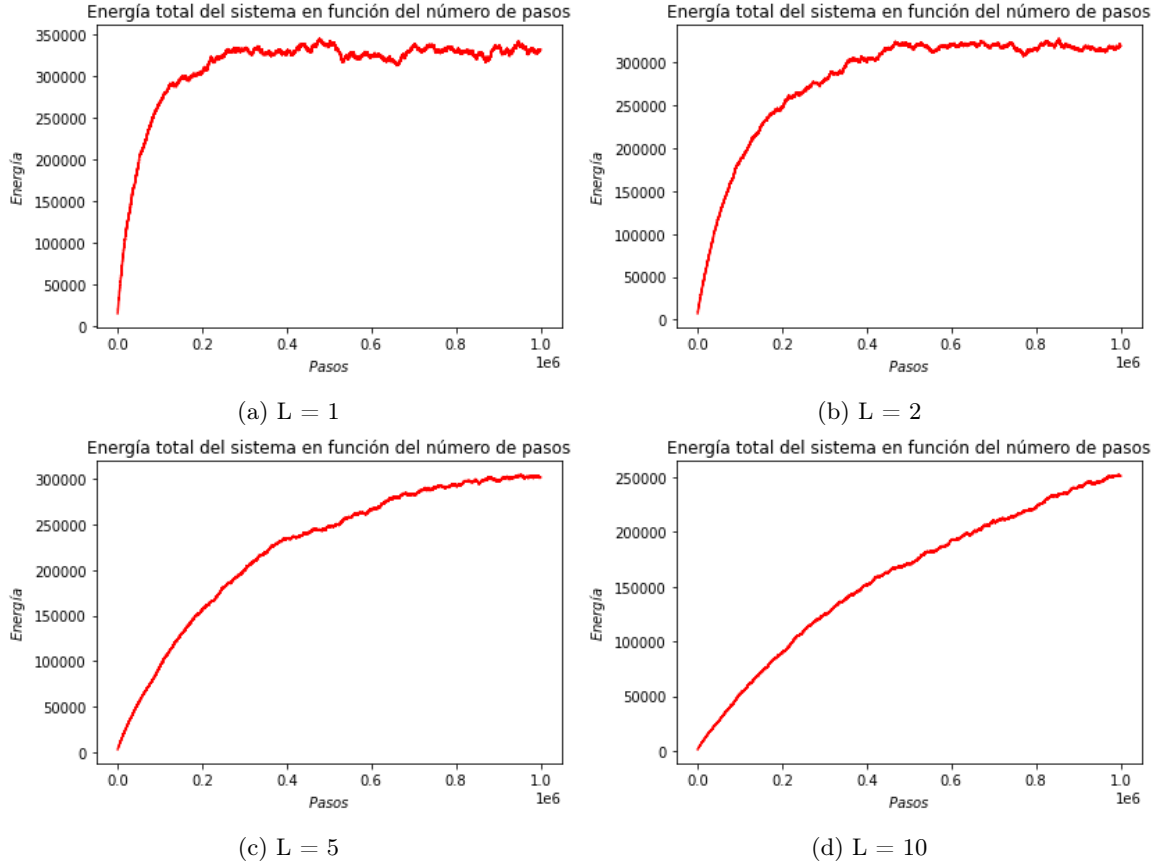


Figura 37: Energía total del sistema en función del número de pasos Monte Carlo para diferentes valores del tamaño del sistema L

Como se puede ver en la figura 37 ocurre lo mismo que en la figura 36, a medida que aumenta el tamaño del sistema son necesarios más pasos Monte Carlo para obtener la energía de equilibrio del sistema y manteniendo el número de pasos Monte Carlo constantes a partir de cierto tamaño del sistema L no se obtiene la energía de equilibrio.

6.3. Energía del sistema para diferentes números de partículas

En este caso se fijan los parámetros con los siguientes valores:

- Tamaño del sistema $L = 1$
- Temperatura del sistema $KT = 200$
- Número de pasos Monte Carlo $m = 1000000$

A continuación se muestran gráficas para diferentes valores del número de partículas N :

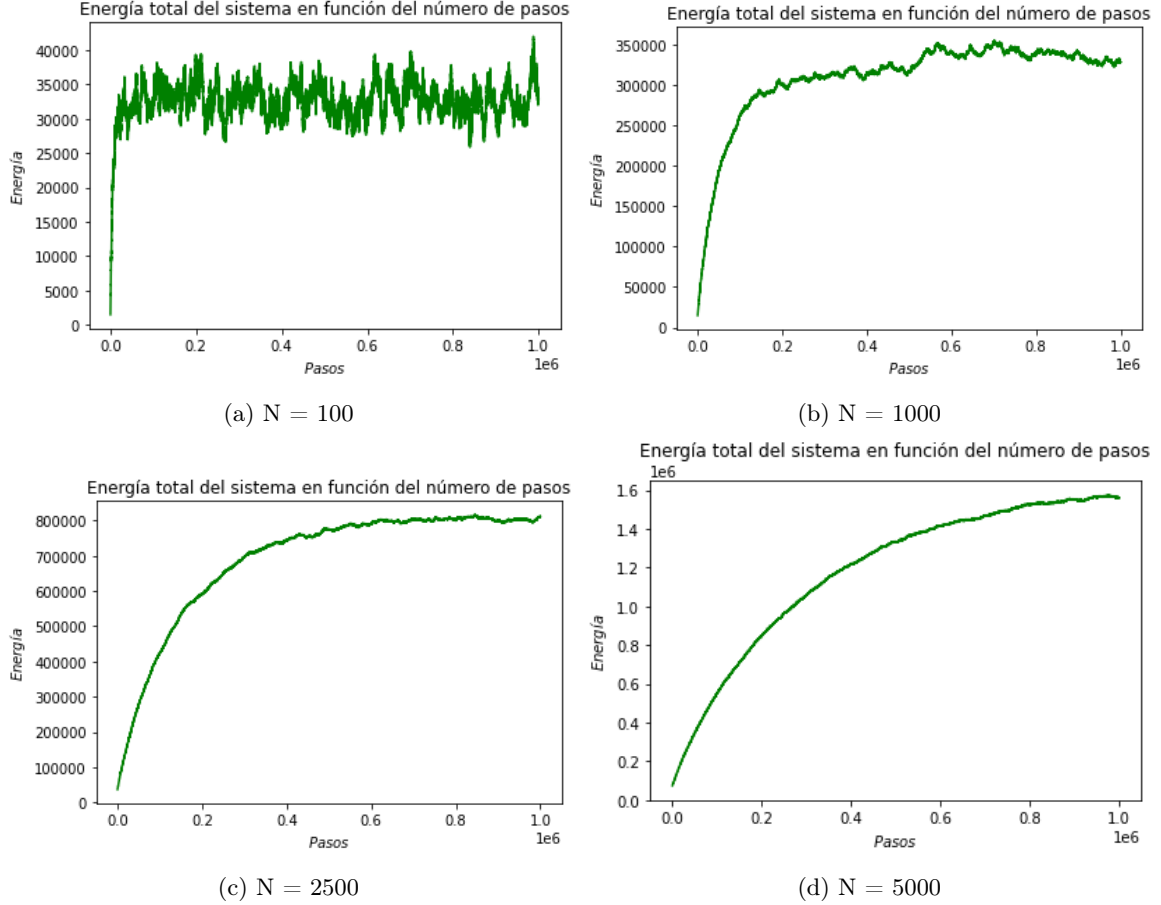


Figura 38: Energía total del sistema en función del número de pasos Monte Carlo para diferentes valores del número de partículas N

Una vez más ocurre lo mismo que para los apartados anteriores, a medida que aumenta el número de partículas son necesarios más pasos Monte Carlo para obtener el valor de la energía de equilibrio del sistema y si se mantiene constante el número de pasos Monte Carlo pero se aumenta el número de partículas del sistema N , a partir de cierto valor del número de partículas no se llegará a obtener el valor de la energía de equilibrio.

6.4. Energía del sistema para diferentes números de pasos Monte Carlo

En este caso se fijan los parámetros con los siguientes valores:

- Tamaño del sistema $L = 1$
- Temperatura del sistema $KT = 200$
- Número de partículas $N = 1000$

A continuación se muestran gráficas para diferentes valores del número de partículas N :

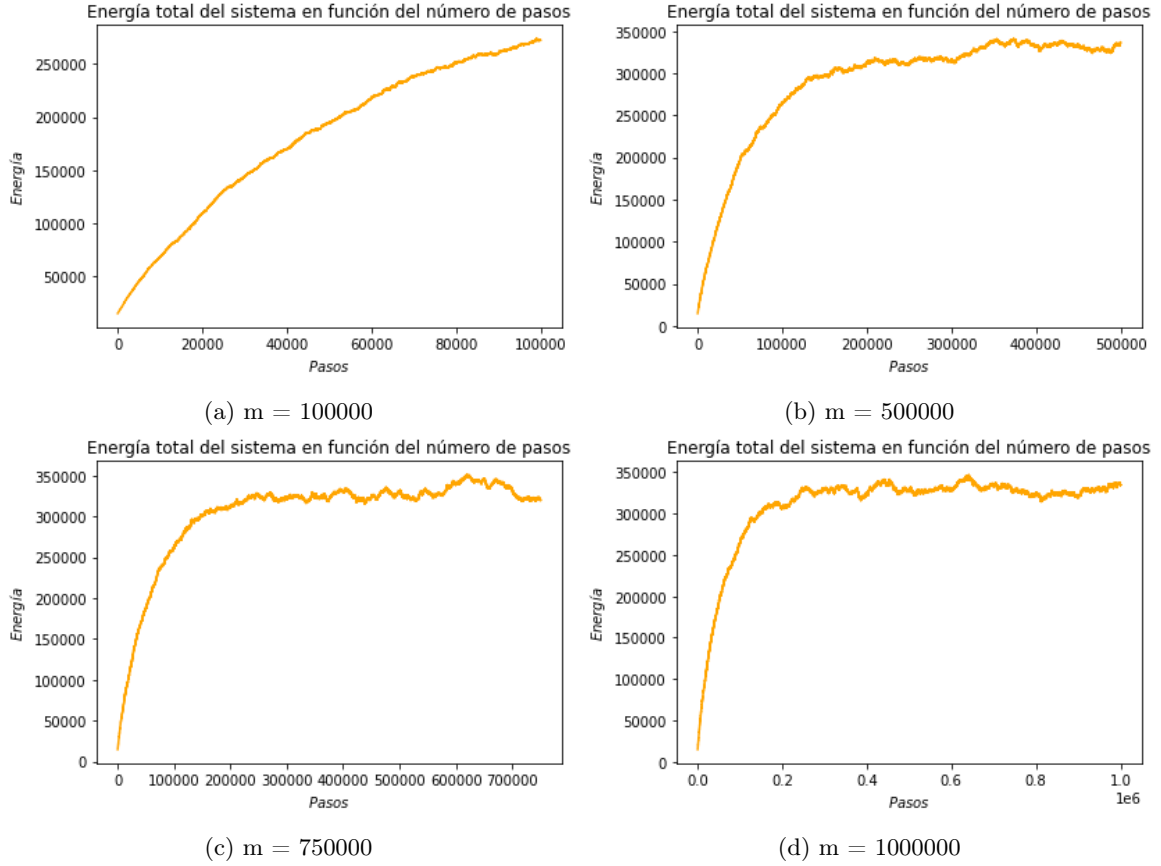


Figura 39: Energía total del sistema en función del número de pasos Monte Carlo para diferentes valores pasos Monte Carlo

Como se puede ver en la figura 39, para un determinado sistema si no se dan suficientes pasos Monte Carlo, es decir, si no se iteran suficientes veces, no se llega a obtener el valor de la energía de equilibrio del sistema.

Se puede concluir por tanto, que cuanto mayor sea el tamaño del sistema, ya sea en número de partículas o el tamaño de la caja, o mayor sea la temperatura, más pasos Monte Carlo son necesarios para obtener la energía de equilibrio del sistema.