

Comentarios, Desarrollos u Observaciones

Desarrollo Experimental II

Docente: Dra. Laura Lorenia Yeomans Reyna

Portafolio II: Simulación de Monte Carlo

Martín Alejandro Paredes Sosa

Semestre: 2018-1

Tarea III: Ejercicios para movimientos arbitrarios de partículas, condiciones periódicas y energía de la configuración

A continuación se muestran los comentarios y avances relacionados con la tarea 3 del portafolio II.

Actividad 1: Sin Condiciones Periódicas

La actividad consistió en realizar el movimiento de partículas de manera aleatoria, sin considerar condiciones periódicas, es decir las partículas no vuelven a entrar a la celda.

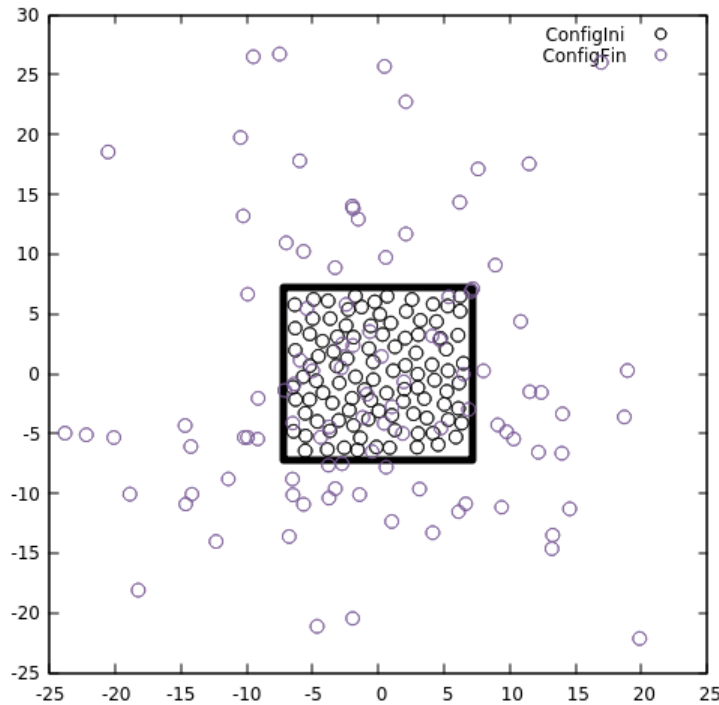


Figura 1: Configuración Inicial con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$

Se observa que las partículas se alejan considerablemente de las fronteras de la celda original.

Actividad 2

La actividad consistió en realizar el movimiento de partículas de manera aleatoria, ahora considerando condiciones periódicas, es decir las partículas vuelven a entrar a la celda, cuando una sale, así asegurando que la concentración en la celda original se mantiene.

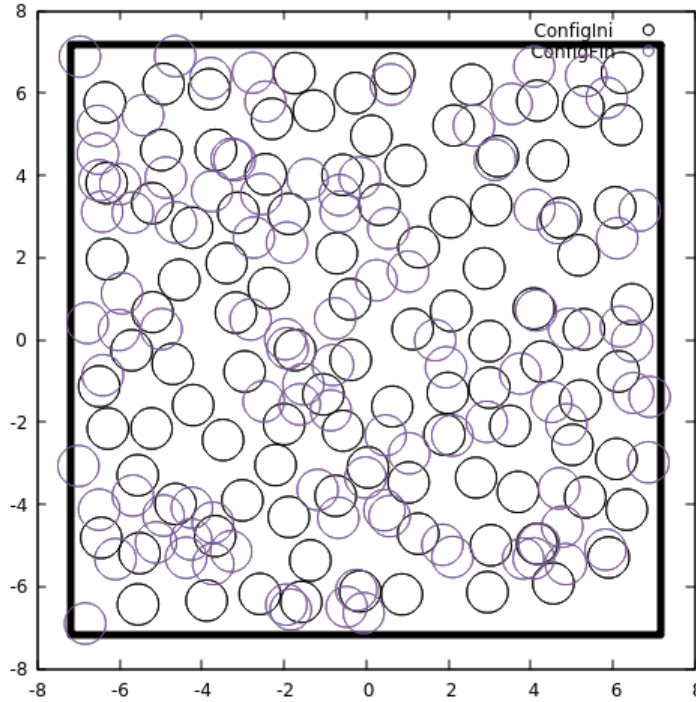


Figura 2: Configuración Inicial con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$

Se observa que todas las partículas están dentro de la celda original, ligeramente afuera pero sus centros siguen dentro de las fronteras.

Estas dos actividades permiten observar la forma en la que se mueven las partículas. La aplicación de condiciones periódicas es sencillo de implementar ya que consiste en volver a ingresar una partícula de lado opuesto de donde salió la otra.

Actividad 3

La tercera actividad consistió en seguir el movimiento de dos partículas aleatorias. Esto permite observar las condiciones periódicas en acción.

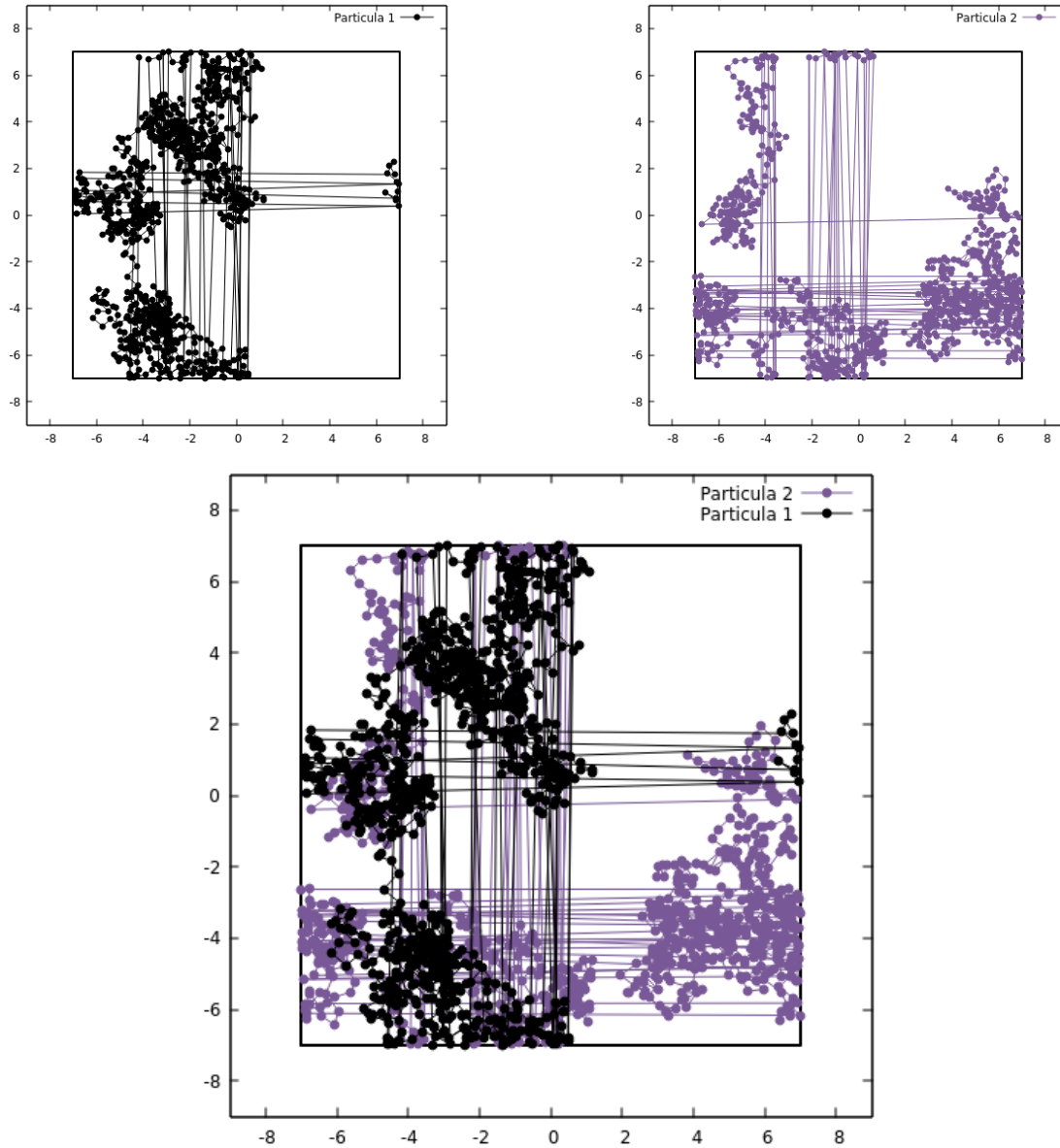


Figura 3: Con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 84 y 57.

Se aprecia como cuando una partícula sale de las fronteras de la celda esta entra de lado opuesto cuando aparecen las líneas largas que atraviesan la celda.

Actividad 4

La cuarta actividad consistió en realizar lo mismo que las actividades anteriores solo que adaptando a tres dimensiones.

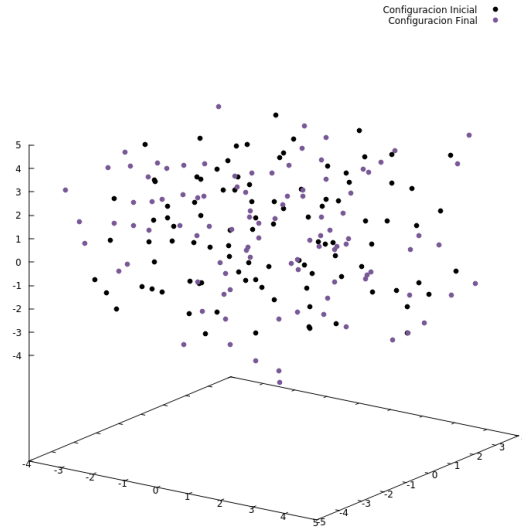


Figura 4: Con $n^* = 0.1910$, con un $NStep = 100000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$.

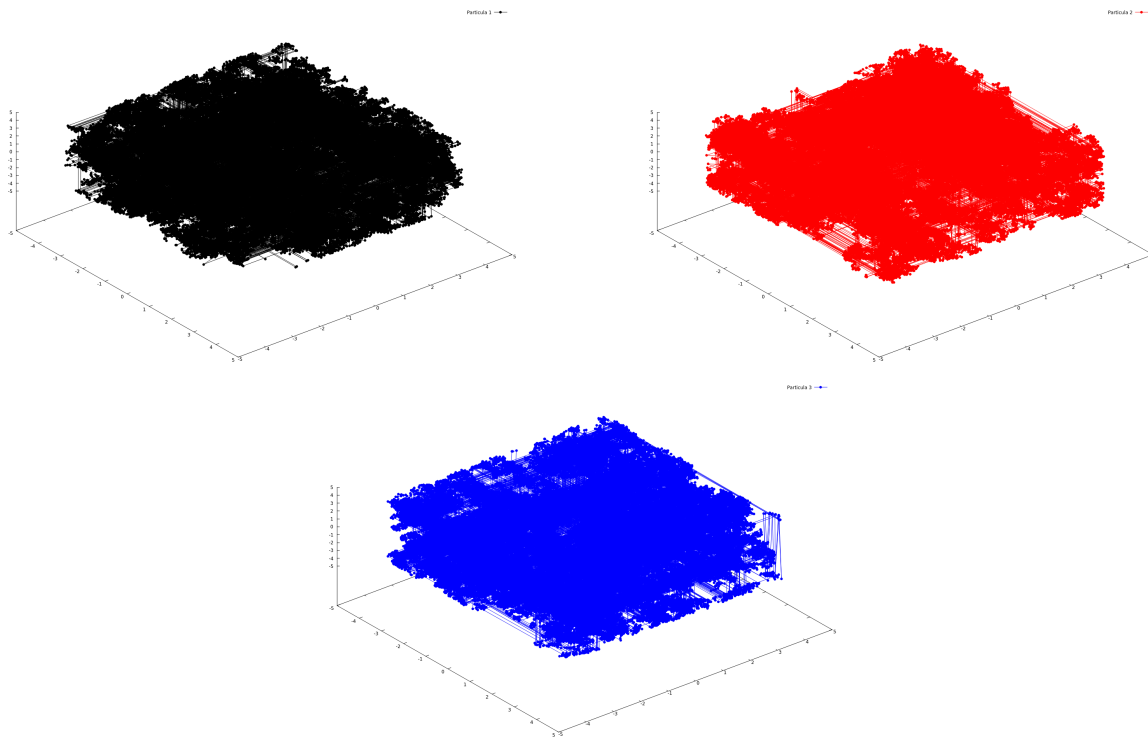


Figura 5: Con $n^* = 0.1910$, con un $NStep = 100000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 84, 57 y 4.

Se observa las configuraciones inicial y final de un arreglo en 3D. Las trazas de las partículas se aprecia algo parecido a la de la actividad 3 por las condiciones periódicas.

Actividad 5

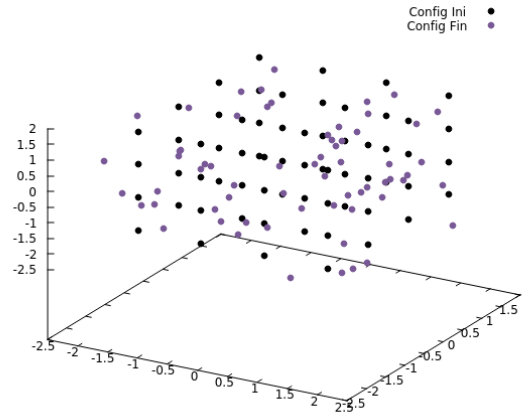


Figura 6: Con $n^* = 1.0$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$.

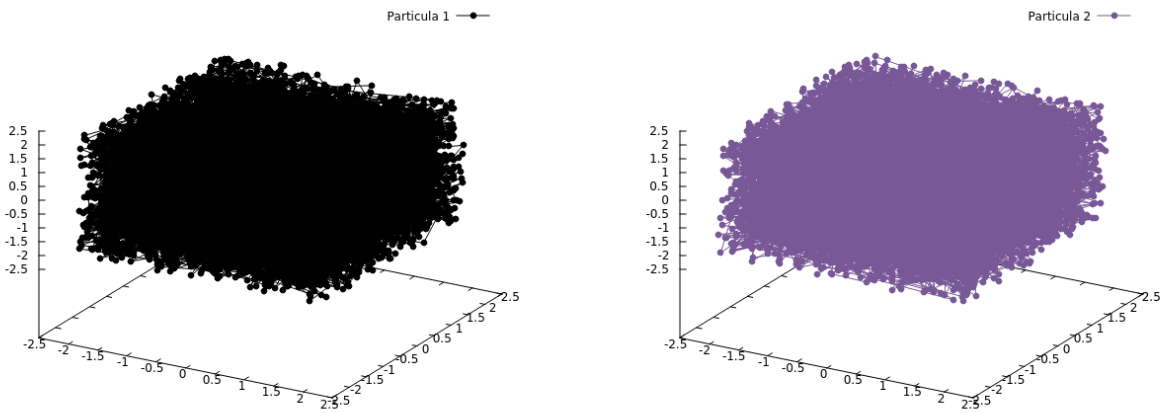


Figura 7: Con $n^* = 1.0$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 64 y 36.

En la actividad se utilizó una configuración regular cúbica en lugar de una aleatoria. y se observan las mismas cosas.

Actividad 6

En esta actividad se realizo el cálculo de la energía de un sistema de disco duros (HD). Se obtuvo lo siguiente.

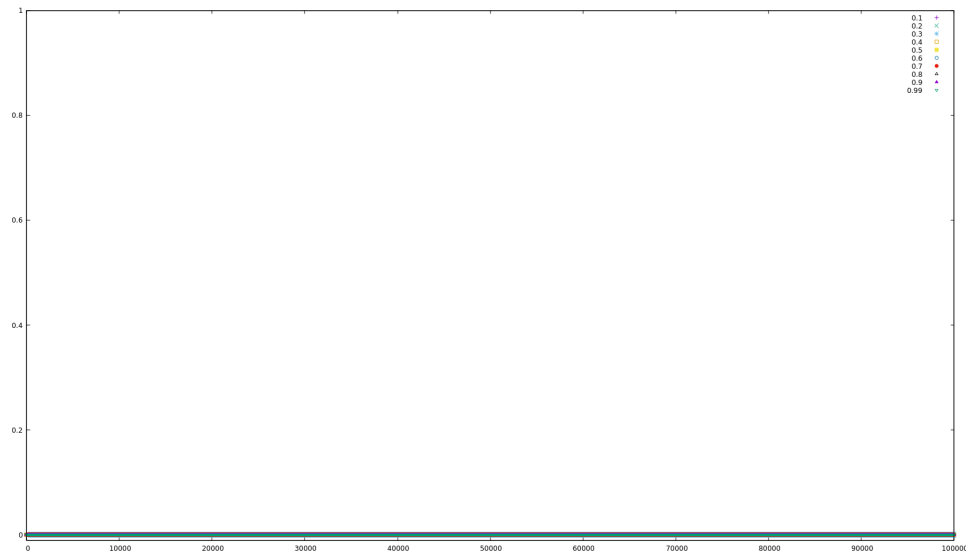


Figura 8: Termalización de HD para concentraciones de 0.1 a 0.99

Como es el potencial de discos duro, todas las configuraciones tuvieron energía 0 como era de esperarse.

Tarea IV: Ejecución de Código Monte Carlo

La tarea 4 consiste de una actividad, en la cual se implementó el código de Montecarlo.

Actividad 7

Lo que se realizó en la actividad fue generar los archivos que nos permiten observar como se va comportando la energía conforme pasan las configuraciones. El objetivo de este es observar cuando un sistema se termaliza, es decir, cuando este alcanza un estado de equilibrio.

Se realizaron corridas de la simulación de Monte Carlo para las concentraciones de $n^* = 0.1$ y para la de $n^* = 0.5$, con 10,000 configuraciones y 100 partículas. Se escogieron estas ya que se nos pide realizar estas corridas para configuraciones iniciales diferentes, pero para altas concentraciones la configuración aleatoria sin traslapes, suele tomar mucho tiempo o no se puede llegar a una que cumpla con las condiciones.

Empezando para la configuración aleatoria sin traslapes, llegamos a lo siguiente:

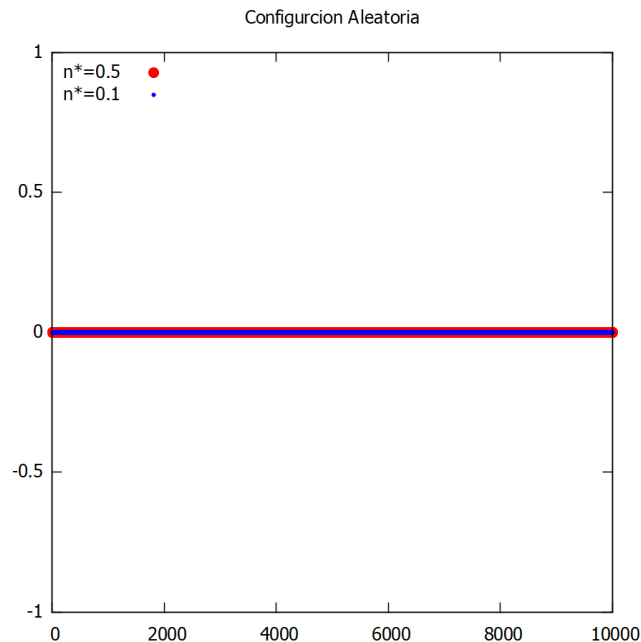


Figura 9: Termalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Aleatoria para concentraciones de 0.1 y 0.5

Para la configuración regular, llegamos a lo siguiente:

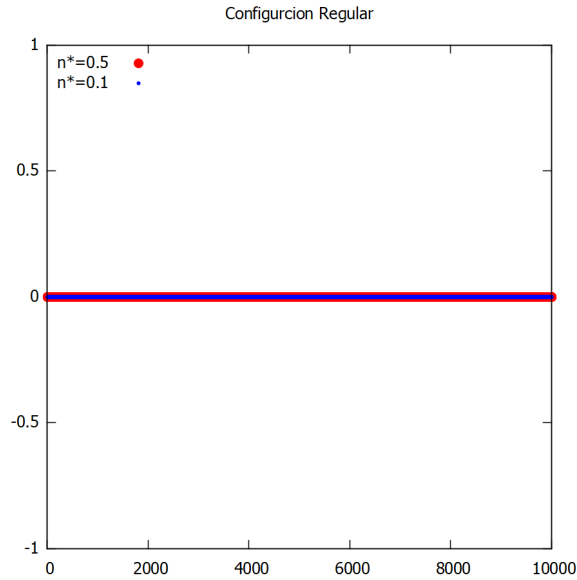


Figura 10: Termalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Regular para concentraciones de 0.1 y 0.5

Podemos apreciar que la energía en ambas siempre es cero como es de esperarse, ya que para que la energía aumente en el sistema, la partículas se deberían encontrar traslapadas, es decir que estas al colisionar no fueran duras.

Para la configuración aleatoria con traslapes es otra historia, ya que al permitir que estas se encuentre encimadas, el sistema comienza con mucha energía. Lo obtenido fue lo siguiente.

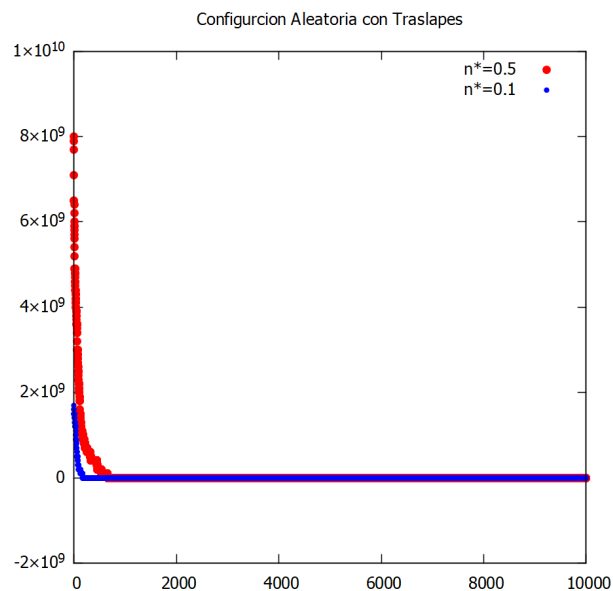


Figura 11: Termalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Aleatoria con Traslapes para concentraciones de 0.1 y 0.5

Se aprecia que gracias al Monte Carlo la energía disminuye, pero se observa que en ambos casos la energía nunca que llegó a cero. Para el caso de $n^* = 0.5$ la energía por partícula se estabilizó en -184.320007 , mientras que para $n^* = 0.1$ se estabilizó en 143.360001 .

Esto me permite decir que las configuraciones que inician con traslapes no son tan confiables para este caso de estudio.

Tarea V: Propiedades Estructurales de un Sistema de Discos Duros

Esta tarea consistió en observar las gráficas de las $G(r)$ y como se altera con los diferentes parámetros en la simulación.

Actividad 8: $G(r)$ bajo diferentes parámetros

Lo primero que se realizó fue realizar una simulación con diferentes configuraciones iniciales. Estas se realizaron para concentraciones de $n^* = 0.5$ y con 30,000 configuraciones y 100 partículas.

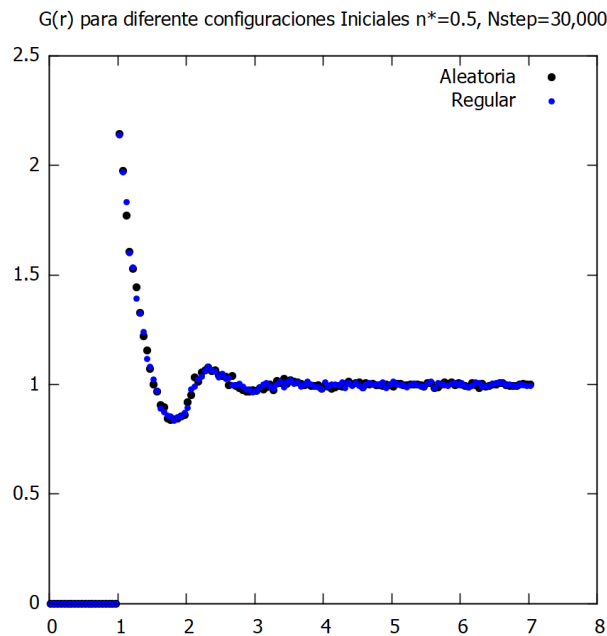


Figura 12: Distribución Radial para diferentes configuraciones iniciales

Luego se realizó variando el número de partículas bajo las mismas condiciones.

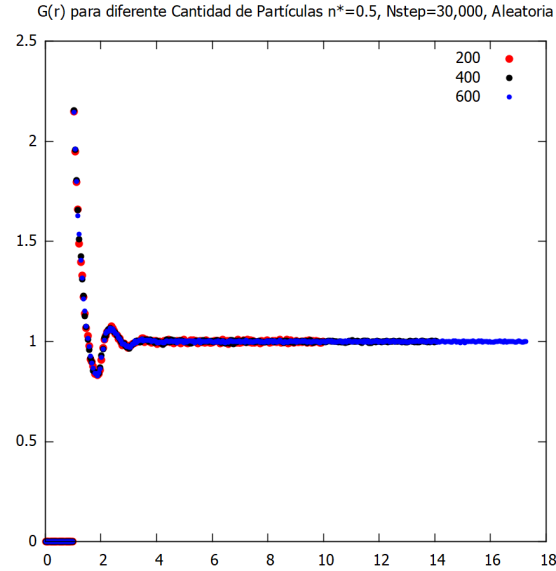


Figura 13: Distribución Radial para diferente numero de partículas

Finalmente se realizó para un deltar diferente y mismas condiciones que al principio.

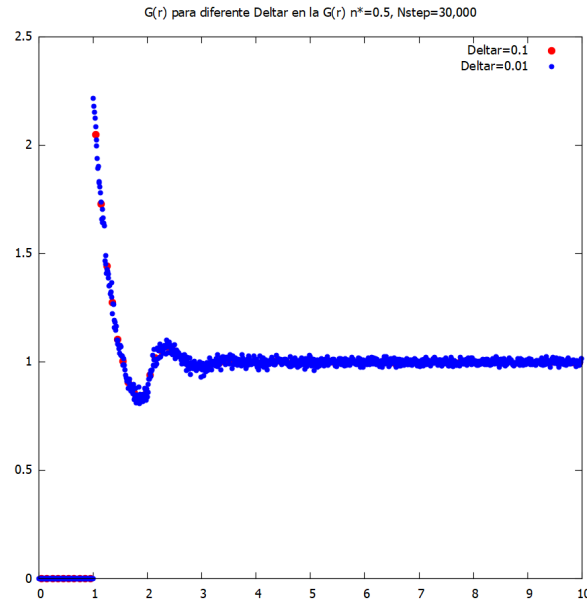


Figura 14: Distribución Radial para deltar diferentes

En figura 12 nos muestra que la configuración aleatoria tiene mejor comportamiento, esto se debe a que la regular no ha olvidado la configuración inicial. La figura 13 se observa que entre más partículas, existen mas datos para realizar el calculo de la distribución radial. La figura 14 nos muestra que un deltar pequeño puede llegar a generar mas ruido y es mas recomendable que no se ni muy pequeño ni muy grande.

Actividad 9: Densidad local de partículas

La función de distribución nos permite obtener un estimado de cuantas partículas consistió la simulación. Lo que se realizó fue tomar los archivos de la gdr de la actividad anterior para diferente numero de partículas.

Nuestros resultados fueron los siguientes:

N (Entrada)	N (g(r))
200	198.77
400	396.39
600	597.36

Tabla 1: Número de partículas.
El que se dio de entrada y el que se calcula.

Actividad 10: Función de correlación radial $g(r)$ para las concentraciones reducidas

Lo que se busca es observar el comportamiento que tiene la $g(r)$ con la variación de la concentración. Se realizaron corridas para las concentraciones de $n^* = 0.01$, $n^* = 0.1$, $n^* = 0.3$, $n^* = 0.5$, $n^* = 0.7$, $n^* = 0.9$ y $n^* = 0.999$

Los resultados fueron lo siguientes:

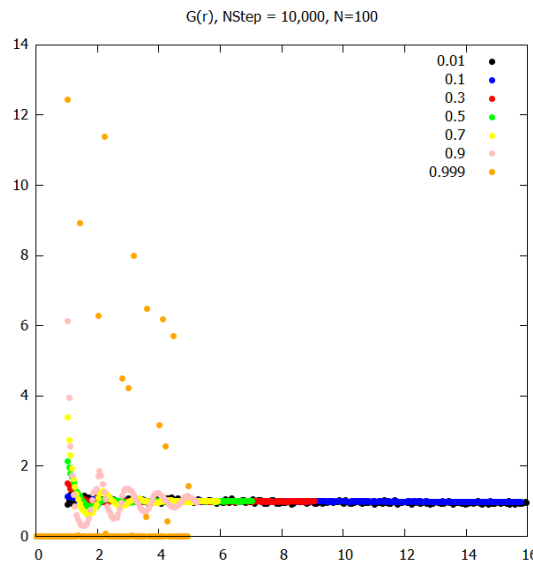


Figura 15: Distribución Radial para diferente concentraciones

Se observa que a bajas concentraciones no alcanza a tomar forma ya que las partículas se encuentran alejadas. Para la concentración de $n^* = 0.999$ no alcanzo a olvidar la configuración inicial regular, lo que explica su forma.

La termalización fue la siguiente:

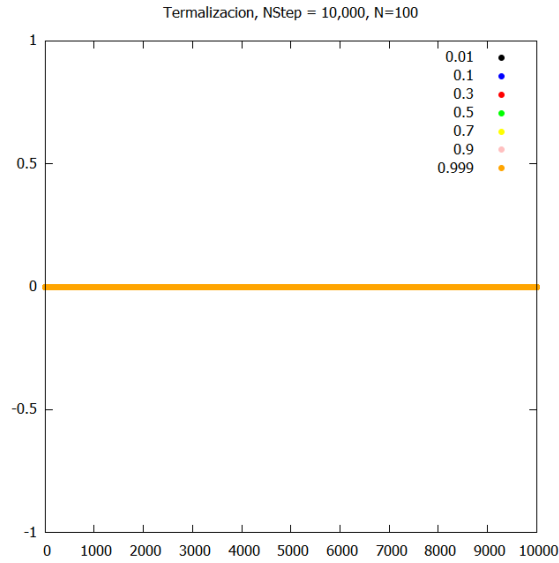


Figura 16: Termalización para diferente concentraciones

Como era de esperarse la energía siempre fue 0.

Actividad 11: Ecuación de Estado

Lo que se realizó fue calcular la presión del sistema a partir de los archivos de la GDR. Se tomaron los archivos de la actividad anterior y se procedió a calcular la presión.

Los resultados fueron los siguientes

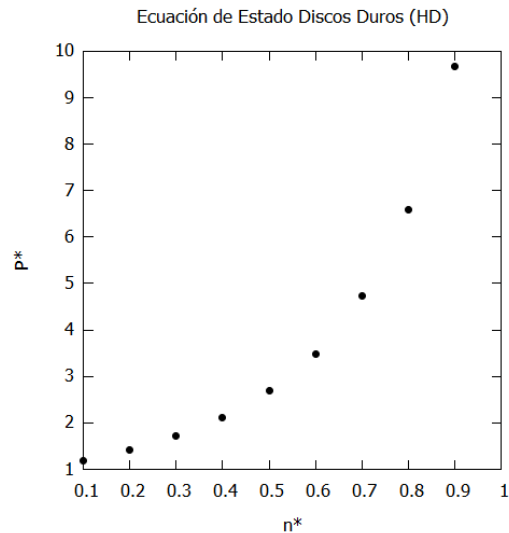


Figura 17: Ecuación de Estado para discos duros (HD)

Comparando con la de Gas Ideal:

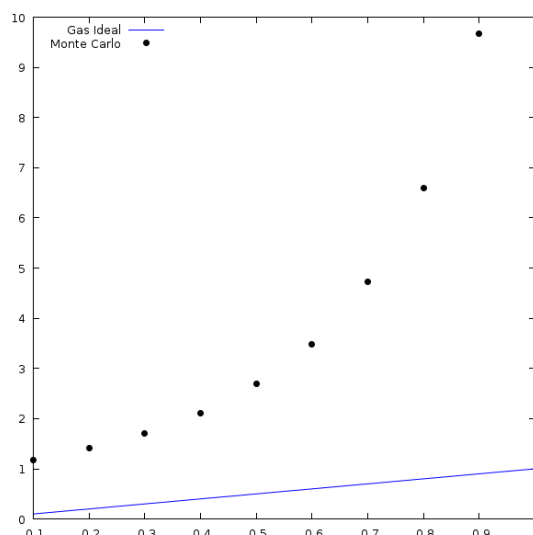


Figura 18: Ecuación de Estado para discos duros (HD) y Gas Ideal

Código Utilizado

A continuación se muestra código que se utilizó. Estos no se utilizaron tal cual en todas las actividades, sino que son la base, es decir, este se adaptó según lo que se pedía.

```

1 Module cte
2   Implicit None
3   Real, Parameter :: sigma = 1.0
4   Real, Parameter :: PI=4*atan(1.0)
5   Integer, Parameter :: CEq = 1000           !CONFIGURACION DE EQUILIBRIO (SEGUN USER)
6   Real :: BoxL, RCut, dRMax!, Dens
7   Integer :: NN                               !, N, NStep, ISave, IPrint, IRatio,
8   Real, Parameter :: Dim = 1.0/2.0          !Dimensiones (2D o 3D)
9   Real, Allocatable, Dimension(:) :: X, Y    !POSICIONES
10  Real, Allocatable, Dimension(:, :) :: CX, CY !MATRICES DE LAS CONFIGURACIONES
11
12  ! PARA CORRIDAS SIN INTERACCION DE USER
13  Integer, Parameter :: N = 100              !NUMERO DE PARTICULAS
14  Integer, Parameter :: NStep = 10000        !NUMERO DE CONFIGURACIONES (PASOS)
15  Integer, Parameter :: Iprint = 1000        !IMPRESION EN PANTALLA
16  Real, Parameter :: Dens=0.999              !VARIAR SEGUN CORRIDA(CONCENTRACION)
17  Integer, Parameter :: ISave = 10            !CUANDO GUARDAR UNA CONFIGURACION
18  Integer, Parameter :: IRatio = 10          !CUANDO CAMBIAR EL TAMANO DE PASO
19 End Module cte

```

Listing 1: Código del Modulo de Variables Globales

```

1 !=====

```

```

2 ! PROGRAMA PRINCIPAL DEL LA SIMULACION, LLAMA SUBROUTINAS PARA REALIZAR
3 ! LA SIMULACION
4 ! Autor: Martin Alejandro Paredes Sosa
5 !=====
6 Program Main
7   Use cte
8   Implicit None
9   Integer :: i, j, IStep , k, k2           !CONTADORES
10  Real :: VLRC, VI, V, VOld, VNew, DV, VN   !ENERGIAS
11  Real :: OldX, OldY, OldZ, NewX, NewY, NewZ !VALORES TEMP DE POSC
12  Real :: RanX, RanY, RanZ, Dummy          !VALORES ALEATORIOS
13  Real :: MAcep, Ratio                     !VARIABLES DE CONTROL DE
      DRMAX
14  Logical :: Ctrl, Ctrl1, Ctrl1A, Ctrl2     !CONTROL LOGICO
15  Integer :: istat1, istat2
16  Character (len=80) :: err_msg1, err_msg2
17  Character (len=10):: Filename, cons       ! NOMBRE DE ARCHIVO
18
19  !Dens = 0.1
20  !CONCE: Do While(Dens .LT. 1.0)
21
22  !PEDIR DENSIDAD Y NUMERO DE PARTICULAS
23  Write(*,*) "NUMERO DE PARTICULAS"
24  Write(*,*) N
25  Write(*,*) "CONCENTRACION REDUCIDA"
26  Write(*,*) Dens
27  Write(*,*) "NUMERO DE CICLOS"
28  Write(*,*) NStep
29  Write(*,*) "MONITOREO EN PANTALLA (CADA CAUNTOS CICLOS)"
30  Write(*,*) IPrint
31  Write(*,*) "NUMERO DE PASOS PARA GUARDAR CONFIGURACION"
32  Write(*,*) ISave
33  Write(*,*) "FRECUENCIA DE CORRECCION EN DESPLAZAMIENTO"
34  Write(*,*) IRatio
35  Write(*,*) "
      =====
      "
36
37  !CONC:Do while (Dens .LT.1.0)
38  !ALOJAR ESPACIO EN MEOMORIA PARA LOS ARREGLO DE POSICION DE PARTICULAS
39  Allocate( X(N), Y(N), STAT= istat1 , ERRMSG=err_msg1 )
40
41
42  !GENERAR LA CONFIGURACION INICIAL
43  Cnfg: If (Dens .LE. 0.65) Then
44    Call ConfigIni
45    Write(*,*) "CONFIGURACION ALEATORIA INICIAL LISTA"
46  Else
47    Call ConfigIniReg

```



```

48     Write(*,*) "CONFIGURACION REGULAR INICIAL LISTA"
49 End If Cnfg
50 !CALCULO/PARAMETROS PARA INICIALIZAR
51 RCut = BoxL / 2.0
52 dRMax = 0.1
53 MAcep = 0.0
54 k2 = 0
55 NN = ( NStep- CEq ) / ISave
56
57 !ALOJAR ESPACIO EN MEOMORIA PARA LOS ARREGLOS DE CONFIGURACION
58 Allocate( CX(N,NN), CY(N,NN), STAT= istat2 , ERRMSG=err_msg2 )
59
60
61 !CORRECCION DE LARGO ALCANCE
62 VLRC = 0 !NO SE OCUPA LA CORRECCION POR SER DE CORTO ALCANCE
63
64 !CALCULAR LA ENERGIA DE LA CONFIGURACION
65 Call EnergyConfig(V)
66 VI = V + VLRC
67 Write(*,*) "ENERGIA DE LA CONFIGURACION INICIAL:", VI
68
69 !ABRIENDO ARCHIVOS PARA GUARDAR INFO DEL SISTEMA
70 Open(2, File="ConFin.dat")
71
72 Write(Cons,256) Int(100.0*Dens)
73 Filename = "Terma"//trim(Cons)//".dat"
74
75 Open(3, File=Trim(Filename) )
76 !MOVIMIENTO DE PARTICULAS ALEATORIA
77
78
79 Configuracion: Do iStep = 1, NStep
80
81     Particula: Do i = 1, N
82
83         !TOMANDO POSICION DE PARTICULA i
84         OldX = X(i)
85         OldY = Y(i)
86
87         !CALCULAR LA ENERGIA DE LA i-PARTICULA
88         Call EnergyPart(OldX, OldY, i, VOld)
89
90         !GENERAR VALORES ALEATORIOS PARA MOV TENTATIVOS
91         Call Random_Number(RanX)
92         Call Random_Number(RanY)
93
94         !MOVIMIENTO TENTATIVO
95         NewX = OldX + (2.0*RanX - 1.0)*dRMax
96         NewY = OldY + (2.0*RanY - 1.0)*dRMax

```

```

97
98      !CONDICIONES PERIODICAS (MANTENER MISMA N EN TODA CONFIGURACION)
99      NewX = NewX - BoxL*Anint(NewX/BoxL)
100     NewY = NewY - BoxL*Anint(NewY/BoxL)
101
102     !CALCULAR LA ENERGIA DE LA PARTICULA EN LA NUEVA POSICION
103     Call EnergyPart(NewX, NewY, i, VNew)
104
105     !MONTECARLO (CRITERIO DE ACEPTACION O RECHAZO DE MOV)
106     DV = VNew - VOld          !CAMBIO DE ENERGIA ENTRE CONFIG
107     Call Random_Number(Dummy) !PARA CRITERIO ENTRE 0.0 Y 75.0
108
109     !MONTECARLO (ACEPTANDO MOVIMIENTOS POR CRITERIOS)
110     MONTECARLO1: If(DV .LT. 75.0 ) Then      !CRITERIO 1 DV MENOR A 75
111
112         MONTECARLO2: If(DV .LE. 0.0 ) Then  !CRITERIO 2 ACEPTANDO MOVIMIENTOS
113
114             V = V + DV
115             X(i) = NewX
116             Y(i) = NewY
117
118             MAcep = MAcep + 1.0 !MOVIMIENTO ACEPTADOS POR MONTECARLO
119
120             ElseIf( EXP(-DV) .GT. Dummy ) Then !CRITERIO 3 OTRA FORMA DE ACEPTAR
MOVIMIENTO
121                 V = V + DV
122                 X(i) = NewX
123                 Y(i) = NewY
124
125                 MAcep = MAcep + 1.0 !MOVIMIENTOS ACEPTADOS POR MONTECARLO
126
127             End If MONTECARLO2
128
129         End If MONTECARLO1
130
131         !ENERGIA POR PARTICULA
132         VN = (V+VLRC)/Real(N)
133
134     End Do Particula
135
136     !GUARDANDO LA THERMALIZACION DE CADA CONFIGURACION DEL SISTEMA
137     Write(3,*) IStep, VN
138
139     !AJUSTE DE DESPLAZAMIENTO DRMAX
140     Ctrl1 = Mod(IStep, IRatio) == 0          !CHECA SI TOCA AJUSTAR EL DESPLAZAMIENTO
141     NdR : If (Ctrl1) Then
142
143         Ratio = MAcep / Real( N * IRatio ) !RAZON DE ACEPTADOS
144

```

```

145      LDensG: If (Dens .GT. 0.2) Then
146
147          Ctrl1A = Ratio .GT. 0.5          !CRITERIO DE ACEPTACION GDens
148
149      Else
150
151          Ctrl1A = Ratio .GT. 0.99          !CRITERIO DE ACEPTACION LDens
152
153      End If LDensG
154
155      CriterioDes : If ( Ctrl1A ) Then
156
157          dRMax = dRMax * 1.05          !CRECER DESPLAZAMIENTO
158
159      Else
160
161          dRMax = dRMax * 0.95          !DISMINUIR DESPLAZAMIENTO
162
163      End If CriterioDes
164
165      MAcep = 0.0          !REINICIAR CONTADOR DE MOV ACEPTADOS
166
167  End If NdR
168
169      !MONITOREO EN PANTALLA
170      Ctrl = Mod(ISTep,IPrint) == 0          !CADA QUE TANTO IMPRIMIR EN PANTALLA
ENERGIA, DRMAX
171      MonitoreoEne: If (Ctrl) Then
172
173          Write(*,*) ISTEP, VN, Ratio , dRMax !CONFIG - ENERGIA/PARTICULA - RAZON
ACEPTADOS - DESPLAZAMIENTO
174
175      End If MonitoreoEne
176
177      !GUARDANDO CONFIGURACION (EN EQUILIBRIO)
178      Ctrl2 = ( Mod(ISTep,ISave) == 0 ) .AND. ( IStep .GT. CEq ) !CONTROL DE GUARDADO
179      SAV: If (Ctrl2) Then
180
181          k2 = k2 + 1          !CONFIG GUARDADA (CONTADOR)
182
183          SAV1: Do k = 1 , N          !CORRER LA PARTICULA
184
185              CX(k,k2) = X(k)          !GUARDANDO LA PARTICULA Y SU CONFIG
186              CY(k,k2) = Y(k)
187
188          End Do SAV1
189
190      End If SAV
191

```

```

192 End Do Configuracion
193
194 Write(*,*) "DONE ALL CONFIGURATIONS"
195
196 !GUARDAR CONFIG FINAL
197 ConfigFin: Do i=1, N
198
199     Write(2,*) X(i), Y(i)
200
201 End Do ConfigFin
202 Close (2)
203 WRITE(*,*) "DONE SAVING CONFIG FINAL"
204
205 Deallocate( X, Y )
206 WRITE(*,*) "CLEAR MEMORY" !DEBUG
207
208 Call GdrCalc
209 WRITE(*,*) "GDR DONE CALC" !DEBUG
210
211 Deallocate( CX, CY )
212
213 Close(3)
214 !Dens = Dens + 0.1
215 ! End Do CONCE
216
217 WRITE(*,*) "DONE"
218
219 256 Format (I3.3)
220
221 End Program

```

Listing 2: Código Principal

```

1  !=====
2  ! CONSTRUCCION DE UNA CONFIGURACION INICIAL ALEATORIA EN CELDA BIDIMENSIONAL
3  ! SIN TRASLAPES
4  ! Autor: Martin Alejandro Paredes Sosa
5  !=====
6
7  Subroutine ConfigIni
8      Use cte
9      Implicit None
10     Real :: xRan, yRan, xij, yij, dist          !POSC
11     Integer :: i, j                            !CONTADOR
12
13     !CALCULANDO DIMENSIONES DE LA CAJA
14     BoxL = (1.0*N/Dens)**Dim
15     Write(*,*) "LONGITUD DE LA CELDA:", BoxL
16
17     Open (1, File = "ConIni.dat" )

```

```

18
19 Colocar: Do i=1, N           !BUSCAR LA POSICION ALEATORIA PARA LAS PARTICULAS
20   2 Call Random_Number(xRan) !VALOR ALEATORIO DE POSICION X \
21     Call Random_Number(yRan) !VALOR ALEATORIO DE POSICION Y | TENTATIVO
22
23
24   !COLOCAR DENTRO DE LA CELDA
25
26   X(i) = (xRan-0.5)*(BoxL-1)      !\
27   Y(i) = (yRan-0.5)*(BoxL-1)      !|  [-(BoxL-1)/2 , (BoxL-1)/2]
28
29
30   Traslape: Do j=1 , i-1
31
32     xij = X(i) - X(j)              !CALCULANDO LA DISTANCIA ENTRE PARTICULAS
33     yij = Y(i) - Y(j)
34
35
36     dist = xij*xij + yij*yij
37
38     DectTraslape: If(dist .LE. sigma ) Then
39
40       GO TO 2
41
42     End If DectTraslape
43
44   End Do Traslape
45
46   Write(1,*) X(i), Y(i)           !GUARDANDO EN ARCHIVO LA POSICION
47
48 End Do Colocar
49
50 Close(1)
51
52
53 End Subroutine ConfigIni

```

Listing 3: Código para generar la configuración Inicial Aleatoria

```

1  !=====
2  ! CONSTRUCCION DE UNA CONFIGURACION INICIAL REGULAR EN CELDA BIDIMENSIONAL
3  ! SIN TRASLAPES
4  ! Autor: Martin Paredes Sosa
5  !=====
6
7 Subroutine ConfigIniReg
8   Use cte
9   Implicit None
10  Real :: xRan, yRan, xij, yij, dist
11  Real :: dBoxl

```

```

12 Integer :: i, j, k ,l           !CONTADOR
13 Integer :: N2, N3
14 Real, Dimension(:), Allocatable :: nX, nY           !GEN
15
16
17 !CALCULANDO DIMENSIONES DE LA CAJA
18 N2 =anint( N**(Dim) )
19
20 !BoxL = (1.0*N/Dens )**(Dim)
21
22 N3 = N2**(1.0/Dim)
23 !N = N3
24 BoxL = (1.0*N/Dens )**(Dim)
25
26 Write(*,*) "LONGITUD DE LA CELDA:", BoxL
27 Write(*,*) "TOTAL DE PARTICULAS COLOCADAS EN LA CELDA:", N3
28 dBoxL = BoxL/N2
29
30
31 Allocate( nX(N2), nY(N2) )
32
33 !GENERANDO COORDENADAS PARA POSICIONES DE LAS PARTICULAS
34 GEN: Do i=1, N2
35
36     nx(i) = (-BoxL)/2.0 + dBoxL/2.0 + dBoxL*(i-1)
37     ny(i) = (-BoxL)/2.0 + dBoxL/2.0 + dBoxL*(i-1)
38
39 End Do GEN
40
41 !ESCRIBIENDO EN ARCHIVO
42 Open (1, File = "ConIni.dat" )
43 l = 0
44 EscribirX: Do i = 1, N2
45
46     EscribirY: Do j = 1, N2
47
48         l = l + 1
49         X(l) = nX(i)
50         Y(l) = nY(j)
51
52     End Do EscribirY
53
54 End Do EscribirX
55
56 !Write(*,*) l !DEBUG
57
58 Do i=1, N3
59     Write(1,*) X(i), Y(i)
60 End Do

```

```

61
62
63 Deallocate(nX, nY)
64
65 Close(1)
66
67
68 End Subroutine ConfigIniReg

```

Listing 4: Código para generar la configuración Inicial Regular

```

1  !=====
2  ! CALCULO DE LA ENERGIA DE UNA DE LA CONFIGURACION DE LA CELDA
3  !
4  ! Autor: Martin Alejandro Paredes Sosa
5  !=====
6
7 Subroutine EnergyConfig(V)
8   Use cte
9   Implicit None
10  Real :: V, Rx1, Rxd, Ry1, Ryd, Dist, VNew
11  Integer :: i, j
12  V = 0
13  IterPart: Do i=1, N-1
14
15     Rx1 = X(i)
16     Ry1 = Y(i)
17
18     IterPart2: Do j = i+1, N
19        Rxd = Rx1 - X(j)
20        Ryd = Ry1 - Y(j)
21
22        !CONDICION DE IMAGEN MINIMA (LOCALIZAR PARTICULAS EN CELDAS CERCANAS)
23        Rxd = Rxd - BoxL*Anint(Rxd/BoxL)
24        Ryd = Ryd - BoxL*Anint(Ryd/BoxL)
25
26        !INGRESANDO MODELO DE INTERACCON (DISCOS DUROS)
27        Dist = sqrt( Rxd*Rxd + Ryd*Ryd )
28
29        ChecarInter: If(Dist .LT. RCut) Then
30
31            ChecarCercania: If (Dist .LE. 1.0) Then
32                VNew = 1.0E+10
33            Else
34                VNew = 0
35            End If ChecarCercania
36
37            V = V + VNew
38        End If ChecarInter
39

```

```

40     End Do IterPart2
41 End Do IterPart
42
43 End Subroutine EnergyConfig

```

Listing 5: Código para calculo de Energía de la Configuración de HD

```

1  !=====
2  ! CALCULO DE LA ENERGIA DE UNA DE LAS PARTICULAS DE LA CELDA
3  !
4  ! Autor: Martin Alejandro Paredes Sosa
5  !=====
6 Subroutine EnergyPart(Rx1, Ry1, i, V)
7   Use cte
8   Implicit None
9   Real :: V, VNew, Dist, Rx1, Rxd, Ry1, Ryd
10  Integer :: i, j
11  !INICIAR ENERGIA EN 0
12  V = 0
13
14  BuscarPart: Do j=1, N
15
16     NoLaMisma: If(i .NE. j) Then
17
18         Rxd = Rx1 - X(j)
19         Ryd = Ry1 - Y(j)
20
21         !CONDICION DE IMAGEN MINIMA (LOCALIZAR PARTICULAS EN CELDAS CERCANAS)
22         Rxd = Rxd - BoxL*Anint(Rxd/BoxL)
23         Ryd = Ryd - BoxL*Anint(Ryd/BoxL)
24
25         !INGRESANDO MODELO DE INTERACCON (DISCOS DUROS)
26         Dist = sqrt( Rxd*Rxd + Ryd*Ryd )
27
28         ChecarInter: If(Dist .LT. RCut) Then
29
30             ChecarCercania: If (Dist .LE. 1.0) Then
31                 VNew = 1.0E+10
32             Else
33                 VNew = 0
34             End If ChecarCercania
35             V = V + VNew
36         End If ChecarInter
37
38     End If NoLaMisma
39
40 End Do BuscarPart
41
42 End Subroutine EnergyPart

```


Listing 6: Código para calculo de Energía por partícula de HD

```

1  !=====
2  ! EL PROGRAMA REALIZA EL CALCULO DE LA GDR APARTIR DE LAS DIFERENTES
3  ! CONFIGURACIONES REALIZADAS EN EL PROGRAMA PRINCIPAL
4  !
5  ! AUTOR: Martin Alejandro Paredes Sosa
6  !=====
7
8  Subroutine GdrCalc
9
10  Use cte
11  Implicit None
12
13  Integer, Allocatable, Dimension(:) :: Histo
14  Real, Parameter :: delTar = 0.05
15  Integer :: MBin, iBin
16  Integer :: i, j, k                                ! CONTADORES
17  Real :: x0, y0, xN, yN, xON, yON
18  Real :: rD, rU, rL, rM, c1, c2, gdr, gdrM, press
19  Integer :: istat1
20  Character (len=80) :: err_msg1
21  logical :: Ctrl1, Ctrl2
22  Character (len=12):: Filename, cons                ! NOMBRE DE ARCHIVO
23
24  MBin = Int( RCut / delTar ) ! CINTA MAXIMA
25
26  Allocate( Histo(MBin+1) , STAT = istat1, ERRMSG = err_msg1)
27  Histo = 0 ! ESTABLECER TODO EL ARREGLO EN 0
28
29  Parti0 : Do i = 1, N
30      NextParti : Do j = 1, N
31          NOTSAME : If (i /= j ) Then
32              StepCnfg : Do k = 1, NN
33
34                  !PARTICULA i ORIGEN
35                  x0 = CX( i , k )
36                  y0 = CY( i , k )
37
38                  !PARTICUAL j CERCANA
39                  xN = CX( j , k )
40                  yN = CY( j , k )
41
42                  !DISTANCIA
43                  xON = xN - x0
44                  yON = yN - y0
45
46                  !CONDICION DE IMAGEN MINIMA

```

```

47      xON = xON - BoxL*Anint( xON/BoxL )
48      yON = yON - BoxL*Anint( yON/BoxL )
49      rD = sqrt( (xON * xON) + (yON * yON) )
50      If (rd .LE. 1.0 ) write(100,*) rD, i, j , k
51
52      !CERCANIA CINTA
53      iBin = Int( rD / delTar ) + 1
54
55      Guardar : If((iBin .LE. MBin) ) Then
56
57          Histo(iBin) = Histo(iBin) + 1 !ACUMULANDO PARTICULAS EN CINTAS
58
59      End If Guardar
60
61      End Do StepCnfg
62
63      End If NOTSAME
64      End Do NextParti
65  End Do Parti0
66
67
68  c1 = PI * Dens
69
70  !ABRIENDO ARCHIVO PARA GDR
71  Write(Cons,256) Int(100.0 * Dens)
72      Filename = "gdr"//trim(Cons)//".dat"
73  Open( 5, file= Filename )
74
75  GdrCal: Do ibin = 1 , MBin
76
77      rL = Real(iBin - 1) * delTar      !CINTA INFERIOR
78
79      rU = rL + delTar                  !CINTA SUPERIOR
80      rM = rL + ( delTar/2.0 )          !CINTA INTERMEDIA
81
82      c2 = c1 * ((rU*rU) - (rL*rL))      !PRECALCULO G(r)
83      gdr = Real( Histo(iBin) )/ Real(NN) / Real(N) / c2 !CALCULANDO G(r)
84      Write(5,*) rM , gdr
85
86  End Do GdrCal
87
88  Close(5)
89
90  Deallocate( Histo )
91
92  Write(*,*) "GDR DONE, SAVE"
93
94 256 Format (I2.2)
95

```

96 End Subroutine GdrCalc

Listing 7: Código para el calculo de la $G(r)$

```

1  !=====
2  ! CALCULO DE LA PRESION PARA EL CASO DE DE DISCOS DUROS CON LOS ARCHIVOS DE
3  ! DE LA  $G(r)$  OBTENIDOS DE LA SIMULACION
4  !
5  ! AUTOR : MARTIN ALEJANDRO PAREDES SOSA
6  !=====
7
8  !DECLARACION DE VARIABLES
9  Program Calc
10 !Use Basic
11 Implicit None
12 Integer :: DENS                ! PARA NOMBRE DE ARCHIVO
13 Integer :: State               ! ESTADO DE LECTURA
14 Integer :: k, i, j            ! CONTADOR
15 Character (len=3), Parameter :: Start = "gdr" ! NOMBRE DE ARCHIVO DE ENTRADA
16 Character (len=4), Parameter :: En = ".dat"  ! EXTENSION ARCHIVO DE ENTRADA
17 Character (len=12):: Filename, cons         ! NOMBRE DE ARCHIVO
18 Real, Parameter :: PI = 4.0 * ATAN(1.0)     ! VALOR DE PI
19 Real :: Des                                ! CONCENTRACION
20 Real, Dimension(:), Allocatable :: R , G    ! RADIO | DISTRIBUCION RADIAL
21 Real :: gr1                                ! PARAMETROS PARA CALCULO DE a Y b
    VAN DER WAALS
22 Real :: Press                             ! ACUMULADOR PARA INTEGRACION
23
24 Write(*,*) "=====
25 !Open(8, File = "a_starT1.dat", Action= "write")
26 Open(9, File = "Pres.dat", Action= "write") !ARCHIVO DE SALIDA
27
28 Archivo: Do Dens = 1, 9
29
30     !TAMANO DEL ARCHIVO POR LEER
31     Write(Cons,256) Dens*10                ! SELECCION DEL ARCHIVO PARA LEER
32     Filename = start//trim(Cons)//En        ! VARIAR SEGUN NOMBRO EL ARCHIVO; Start Y
    En TAMBIEN CAMBIAR
33     Write(*,*) "Archivo: ",Filename        ! CHECAR QUE ARCHIVO VA A LEER (SI NO ES EL
    MISMO NOMBRE FALLA LA CORRIDA)
34
35     Open( 1, File = Trim(Filename), action= "read", Status ="old" ) !ARCHIVO DE
    ENTRADA
36
37     k = 0 !REINICIA CONTADOR PARA NUEVO ARCHIVO (RECuento DE FILAS)
38
39     Sizes: Do                                !BUSCANDO TAMANO DE ARCHIVO (REngLONES QUE
    QUE TIENE)
40
41     Read( 1,*, iostat = state )

```

```

42      k = k + 1
43      If ( state .LT. 0 ) Exit          !CONDICION DE SALIDA (YA NO HAY MAS REGLONES
EN EL ARCHIVO)
44
45      End Do Sizes
46
47      Write(*,*) "Tiene", k, "Renglones" !DEBUG LINE (SIZE OF FILE)
48
49      Rewind 1 !REINICIAR ARCHIVO DE ENTRADA
50      Allocate ( R(k), G(k) ) !ALOJAR ESPACIO EN MEMORIA
51
52      !SAVING FILE DATA
53      Saves : Do i = 1, k+1
54
55          Read( 1,*, iostat = state ) R(i), G(i)    ! CONSIDERAR EL NUMERO DE COLUMNAS
56          If ( state .LT. 0 ) Exit                    ! CONDICION DE SALIDA (YA NO HAY
MAS REGLONES EN EL ARCHIVO) POR SEGURIDAD
57
58      End Do Saves
59
60      Write(*,*) "DATOS GUARDADOS EN MEMORIA"
61
62      !CALC DE PRESION HD
63
64      Locate: Do i = 1, k                      ! BUSCANDO EL PRIMER DATO .GE. 0
65
66          If (G(i) .GT. 0.0) Exit
67
68      End Do Locate
69
70      gr1 = G(i)                                ! Ghd(1+)
71      Des = Real(Dens)*0.1                      ! CONCENTRACION A PARTIR DEL NOMBRE DEL ARCHIVO
72      Press = 1.0 + 0.5*Pi*Des*gr1             ! CALCULO PRESION HD
73
74      Write(9,*) Des , press                    ! ESCRITURA EN ARCHIVO DE SALIDA
75
76      Deallocate(R,G)                          ! LIBERANDO MEMORIA PARA SIGUIENTE ARCHIVO O
FINAL
77      Write(*,*) "=====
78 End Do Archivo
79
80 512 Format (I5.5)
81 256 Format (I2.2)
82 End Program Calc

```

Listing 8: Código del calculo de presión para HD