

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.

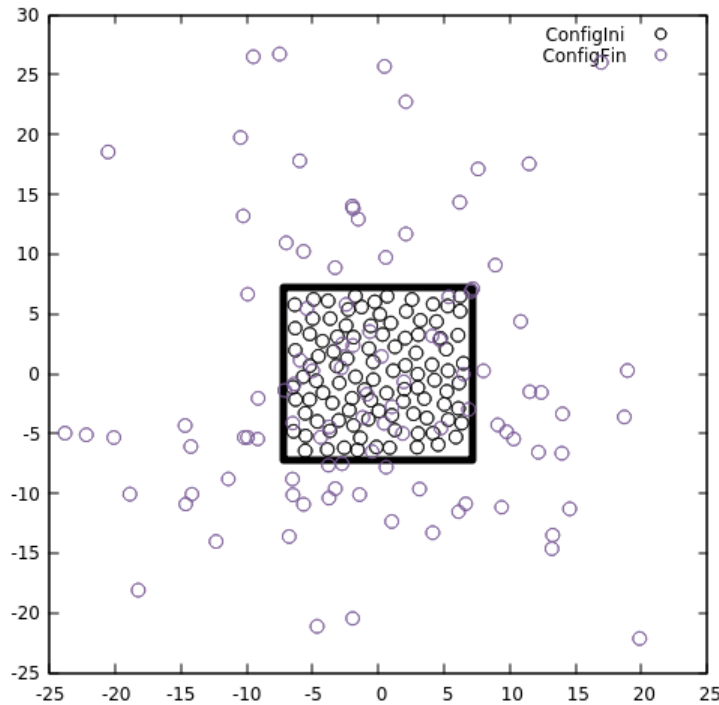


Figura 1: Configuración Inicial con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$

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.

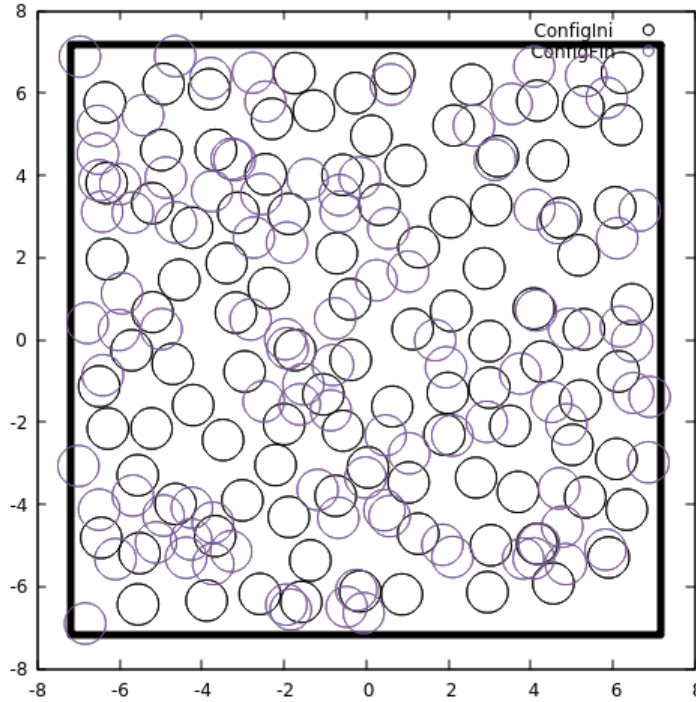


Figura 2: Configuración Inicial con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$

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.

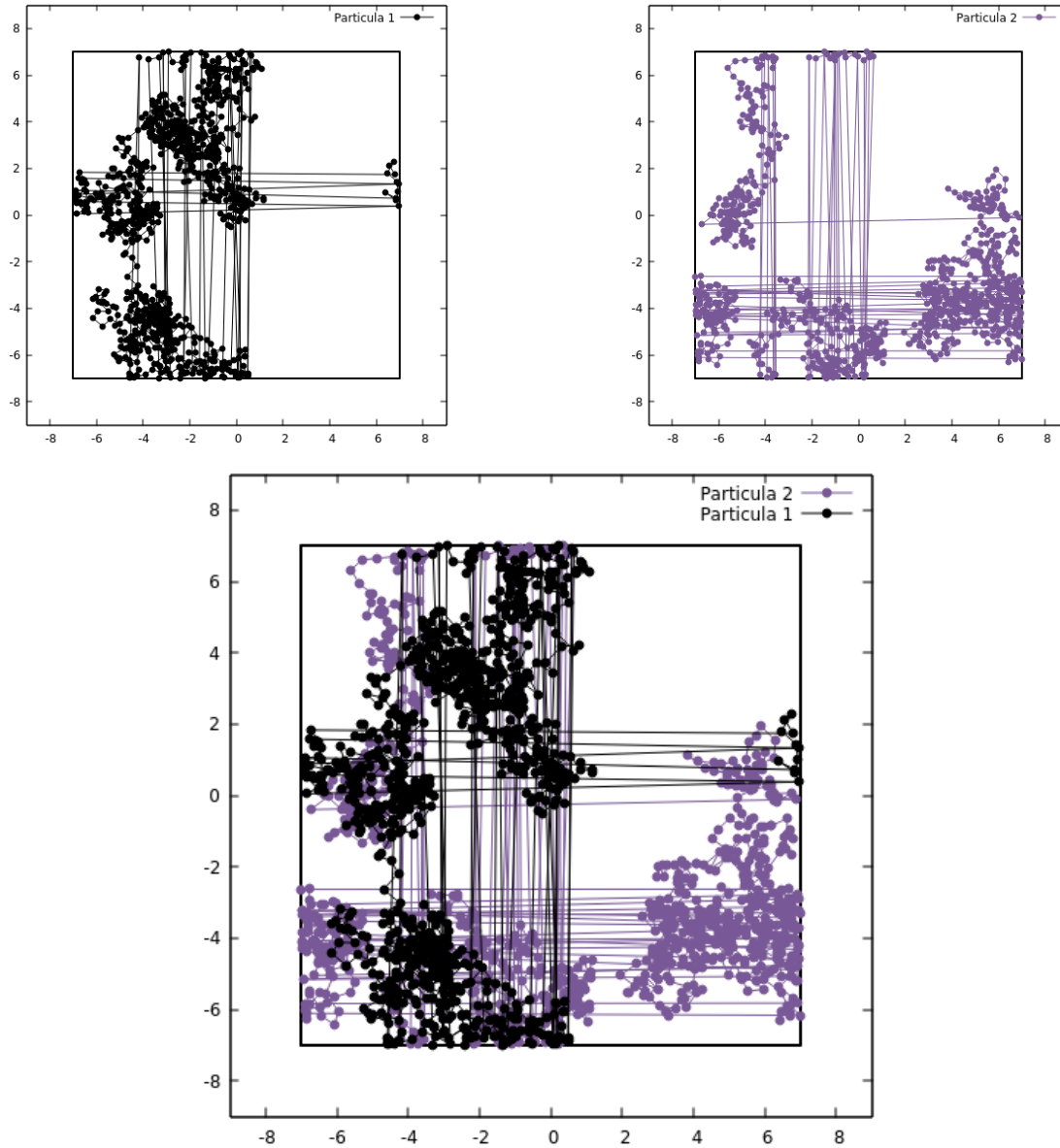


Figura 3: Con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 84 y 57.

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.

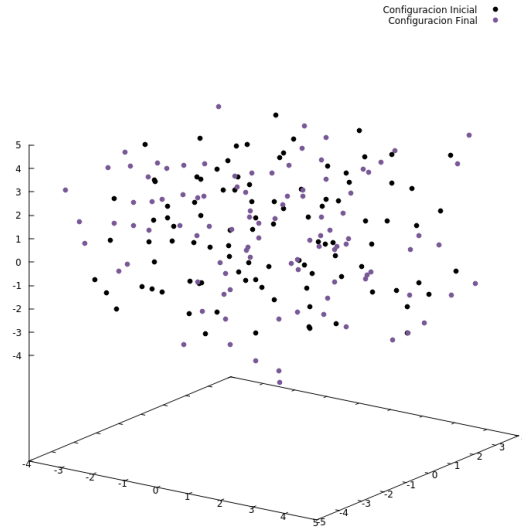


Figura 4: Con $n^* = 0.1910$, con un $NStep = 100000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$.

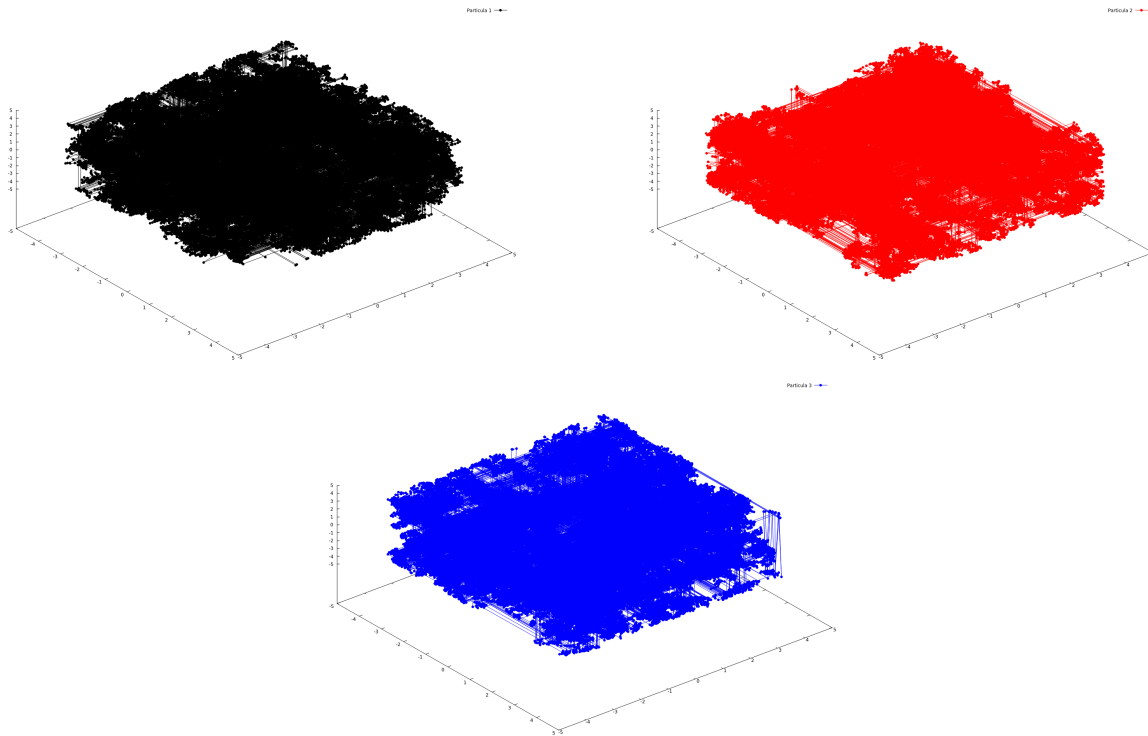


Figura 5: Con $n^* = 0.1910$, con un $NStep = 100000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 84, 57 y 4.

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

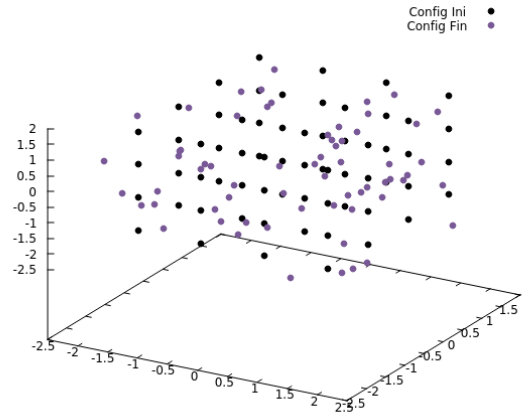


Figura 6: Con $n^* = 1.0$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$.

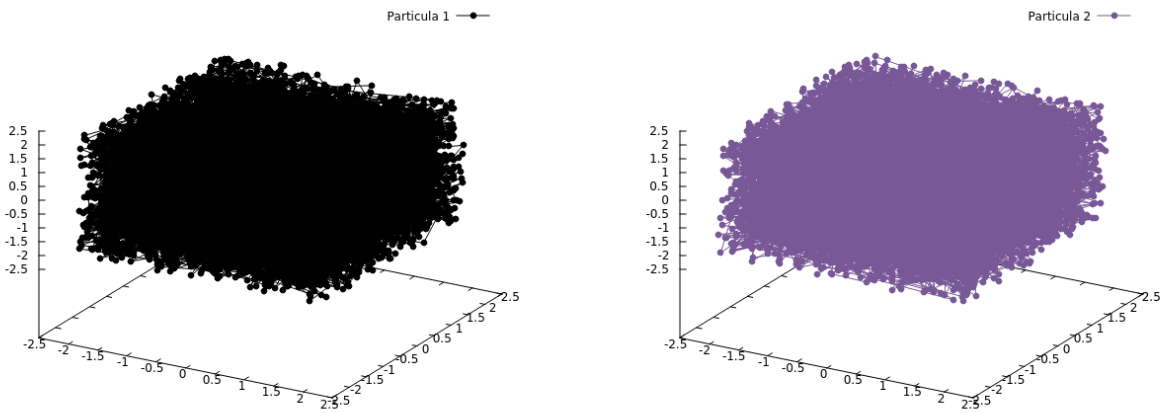


Figura 7: Con $n^* = 1.0$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 64 y 36.

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.

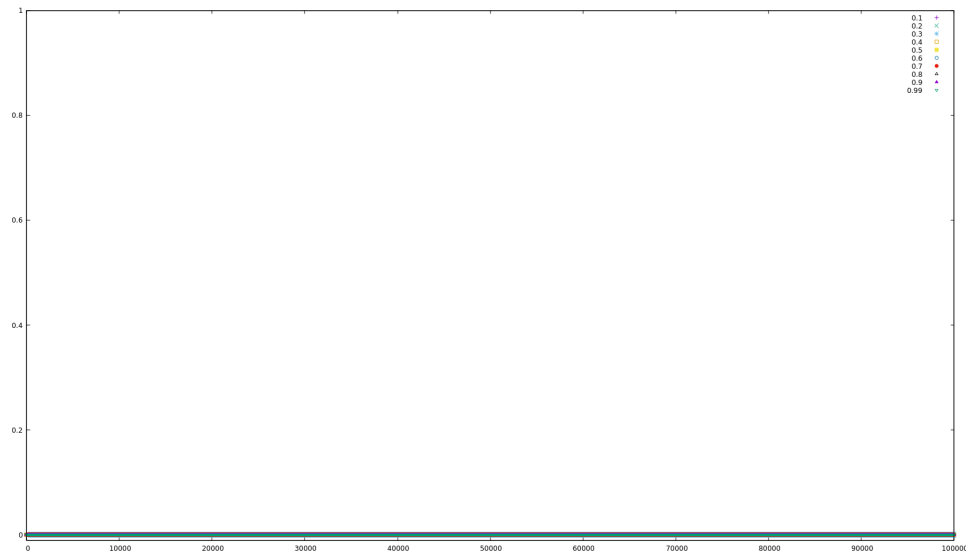


Figura 8: Termalización de HD para concentraciones de 0.1 a 0.99

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 esto es observar cuando un sistema se thermaliza, 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:

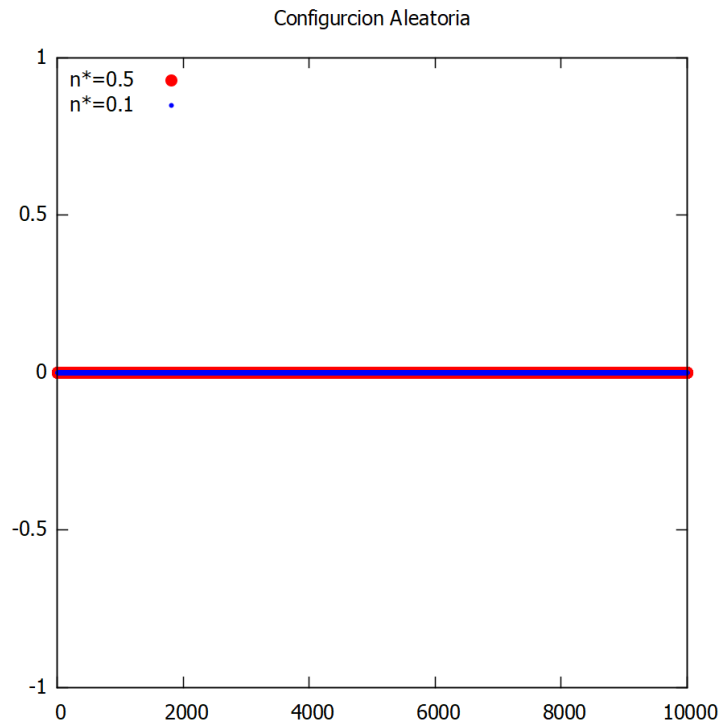


Figura 9: Thermalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Aleatoria para concentraciones de 0.1 y 0.5

Para la configuración aleatoria regular, llegamos a lo siguiente:

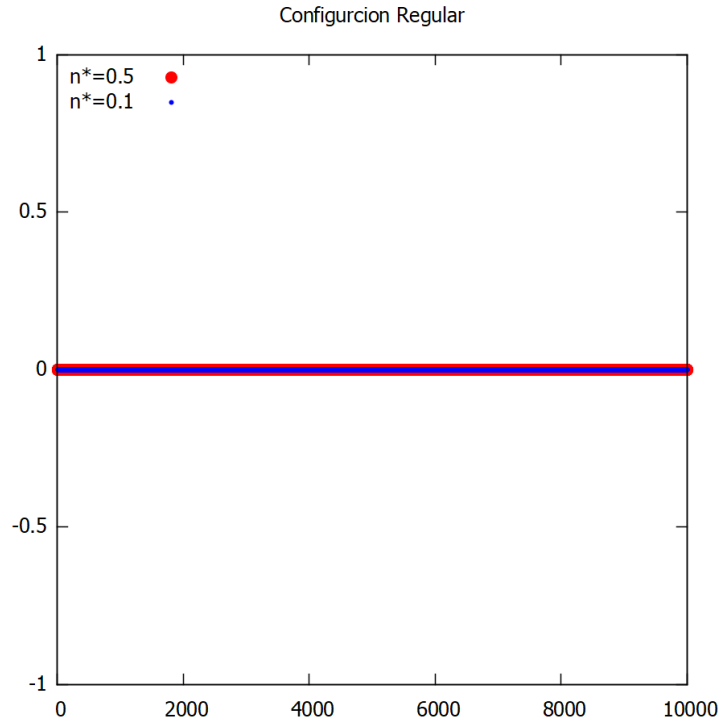


Figura 10: Termalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Regular para concentraciones de 0.1 y 0.5

Podemos apreciar que la energía en ambas siempre es cero como es de esperarse, ya que para que la energía aumente en el sistema, las 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 encuentren encimadas, el sistema comienza con mucha energía. Lo obtenido fue lo siguiente.

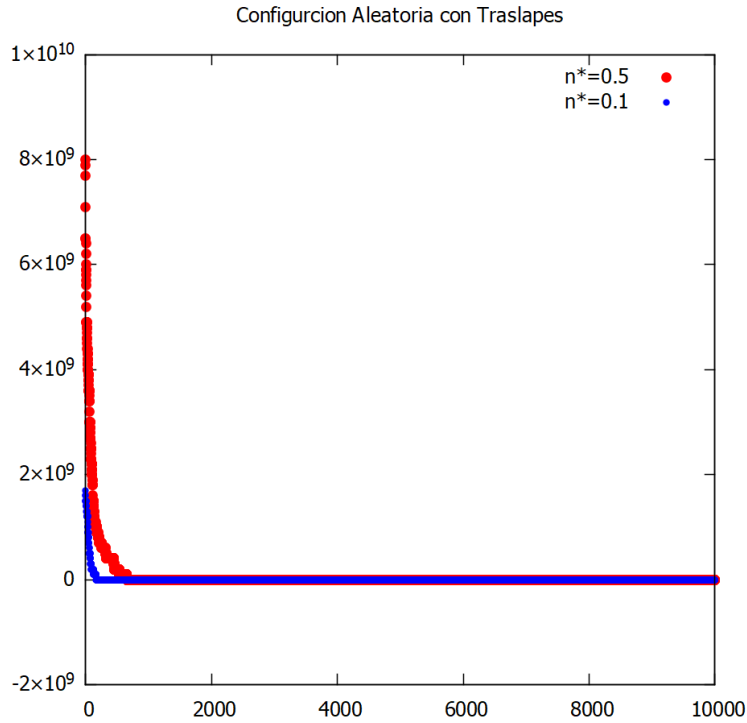


Figura 11: Termalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Aleatoria con Traslapes para concentraciones de 0.1 y 0.5

Se aprecia que gracias al Monte Carlo la energía disminuye, pero se observó que ambos casos la energía nunca 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