

# 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.

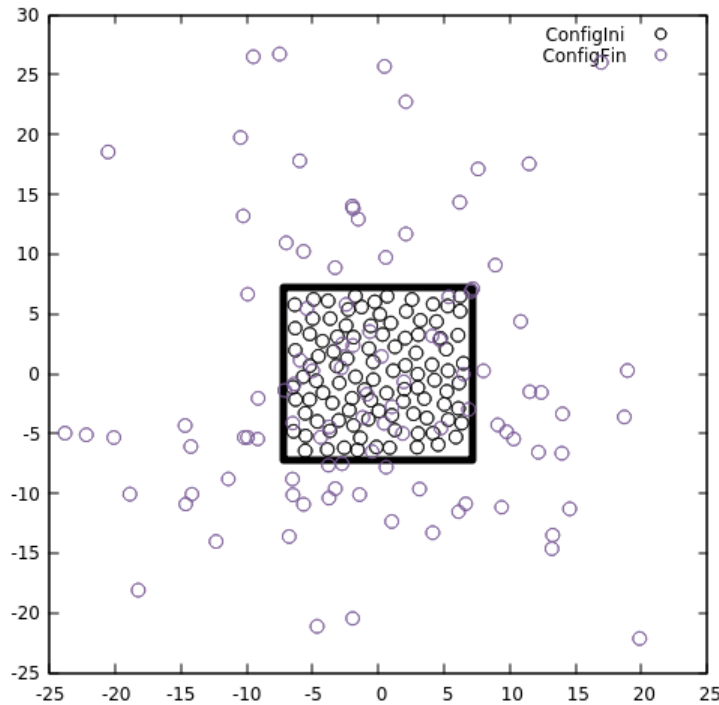


Figura 1: Configuración Inicial con  $n^* = 0.5093$ , con un  $NStep = 1000$  y un  $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$

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.

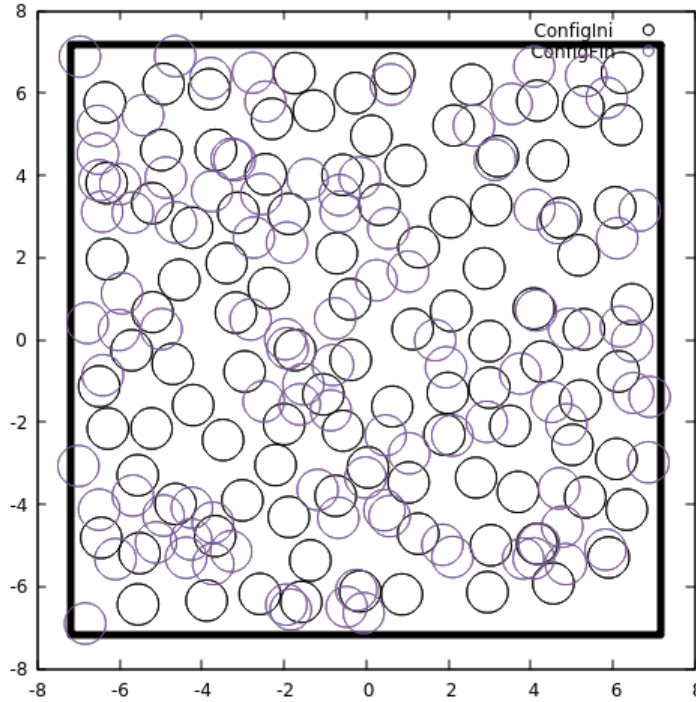


Figura 2: Configuración Inicial con  $n^* = 0.5093$ , con un  $NStep = 1000$  y un  $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$

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.

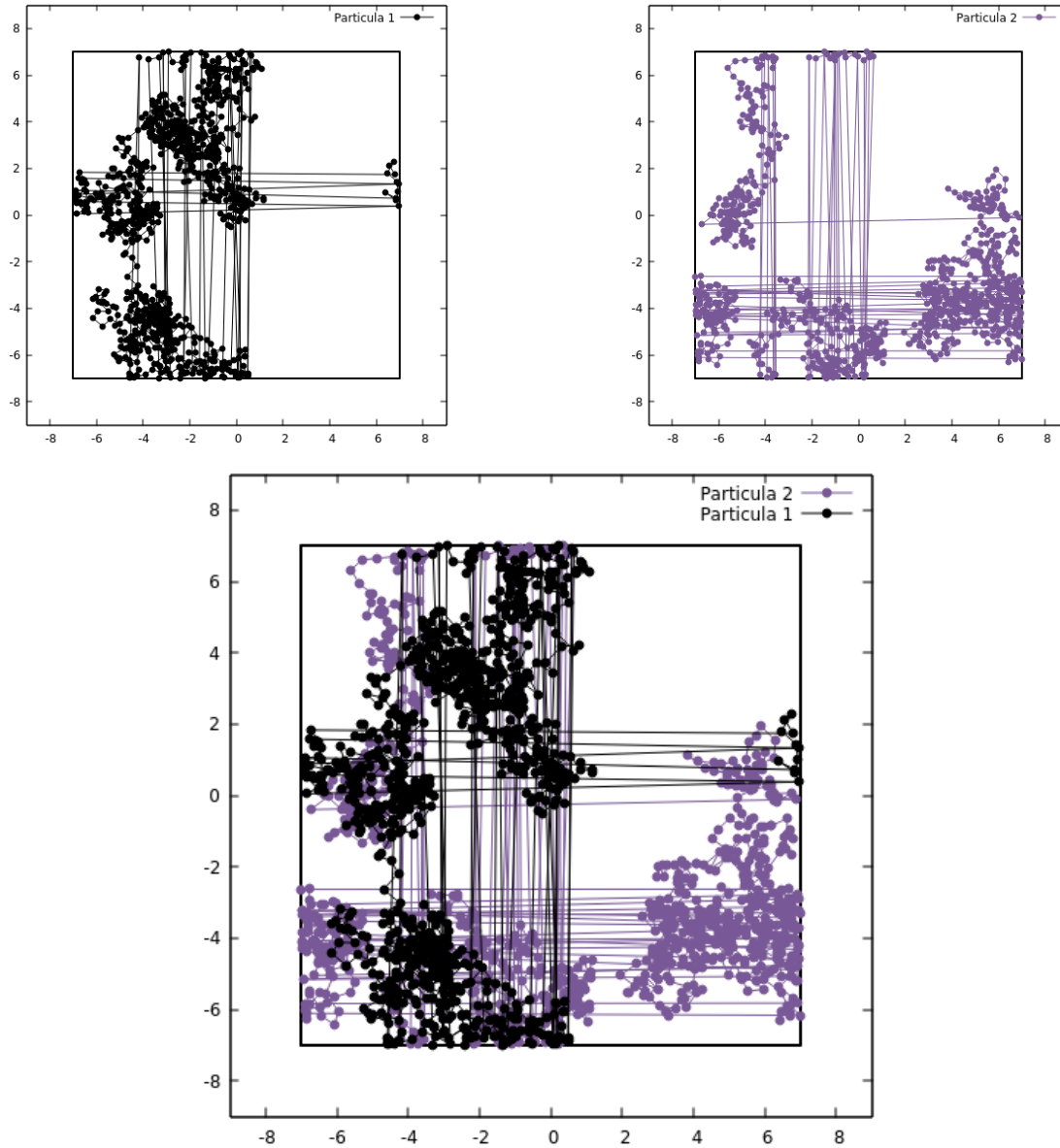


Figura 3: Con  $n^* = 0.5093$ , con un  $NStep = 1000$  y un  $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$ . Se realizo la traza de las partículas 84 y 57.

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.

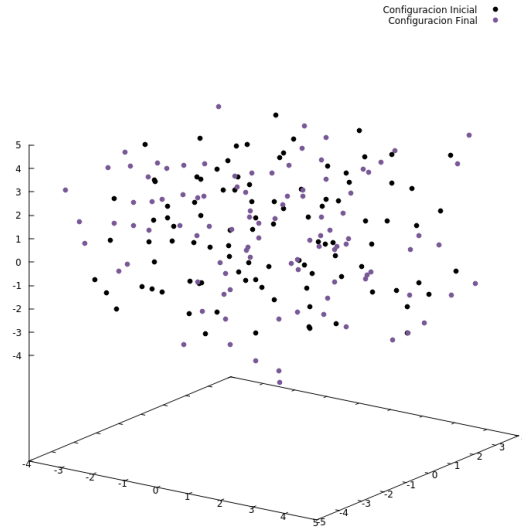


Figura 4: Con  $n^* = 0.1910$ , con un  $NStep = 100000$  y un  $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$ .

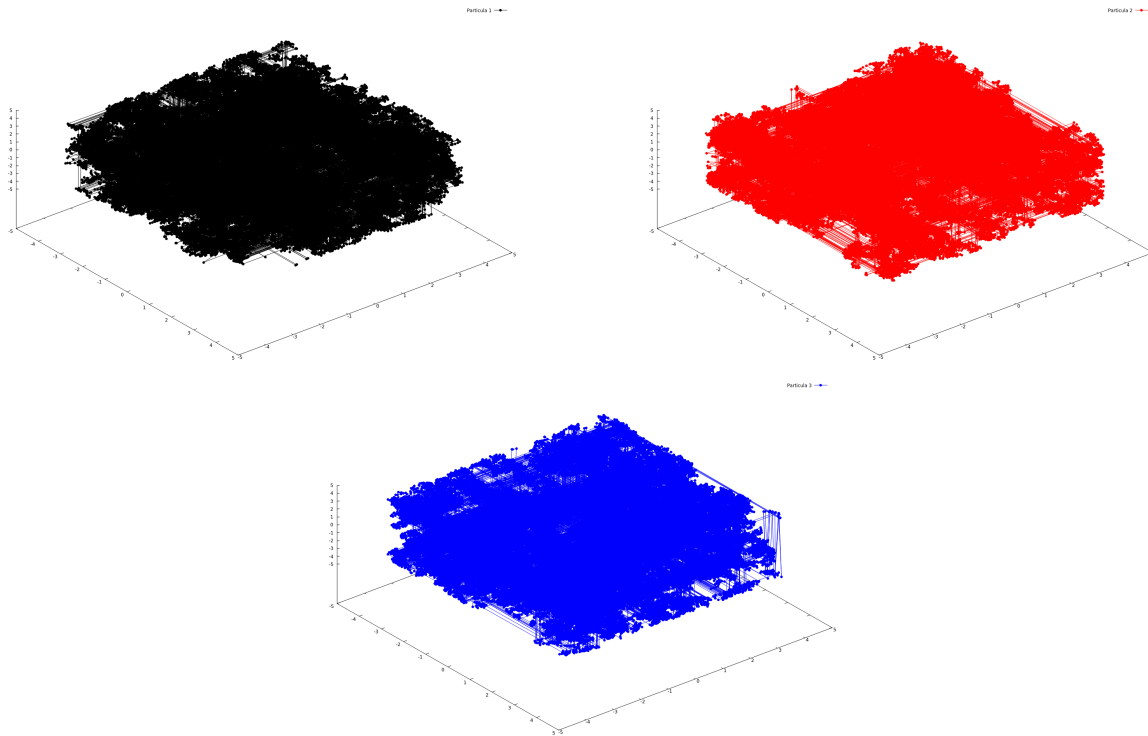


Figura 5: Con  $n^* = 0.1910$ , con un  $NStep = 100000$  y un  $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$ . Se realizo la traza de las partículas 84, 57 y 4.

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

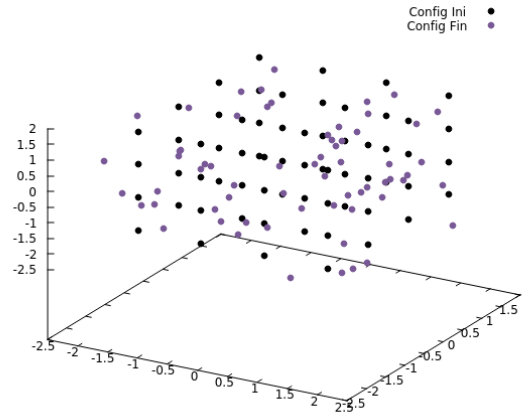


Figura 6: Con  $n^* = 1.0$ , con un  $NStep = 1000$  y un  $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$ .

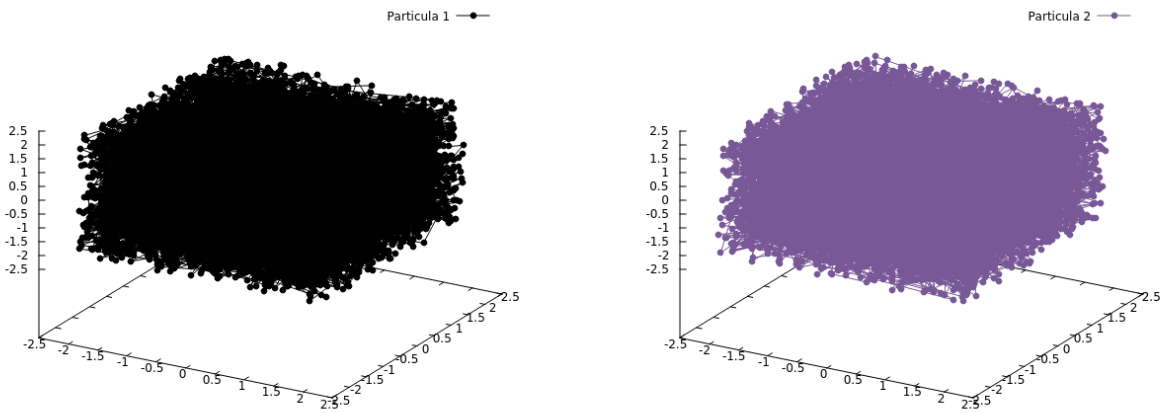


Figura 7: Con  $n^* = 1.0$ , con un  $NStep = 1000$  y un  $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$ . Se realizo la traza de las partículas 64 y 36.

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.

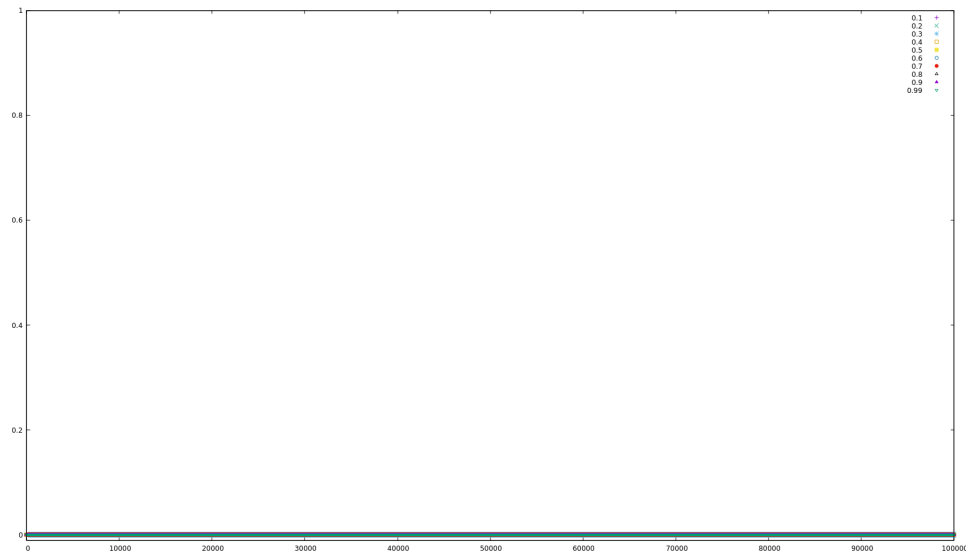


Figura 8: Termalización de HD para concentraciones de 0.1 a 0.99

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:

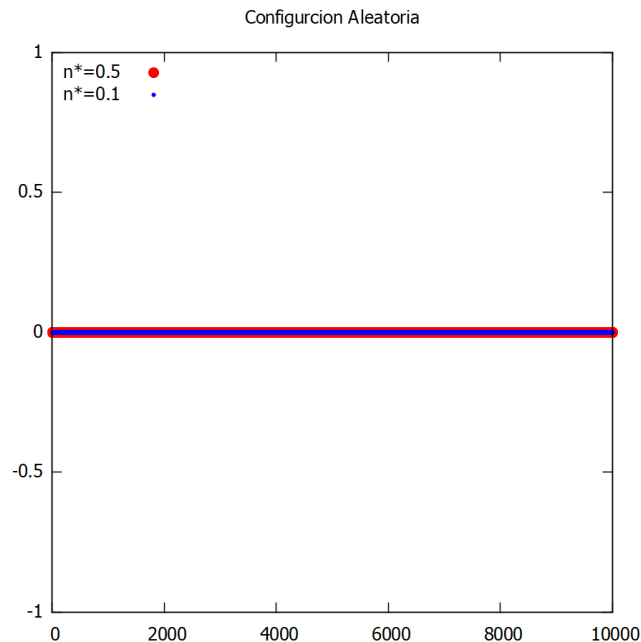


Figura 9: Termalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Aleatoria para concentraciones de 0.1 y 0.5

Para la configuración regular, llegamos a lo siguiente:



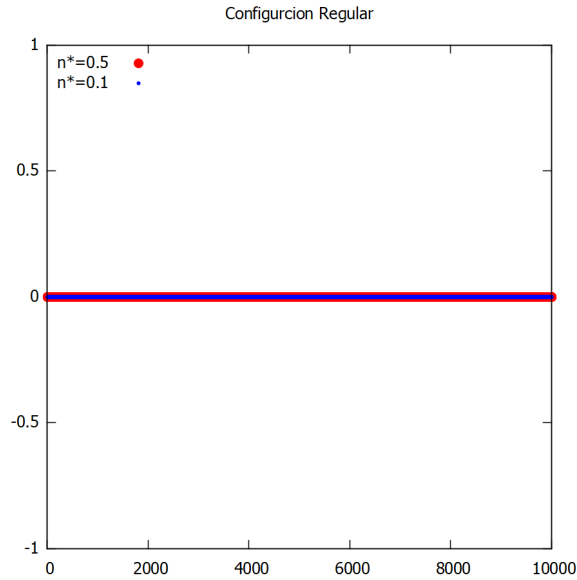


Figura 10: Termalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Regular para concentraciones de 0.1 y 0.5

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.

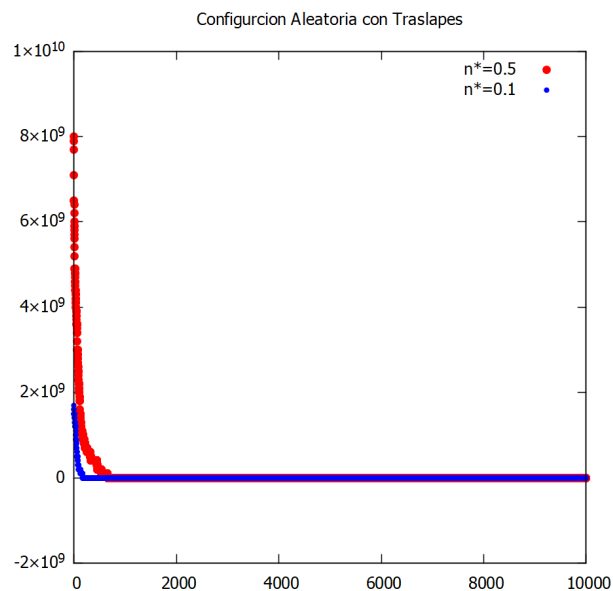


Figura 11: Termalización de simulación Monte Carlo con configuración Inicial Aleatoria con Traslapes para concentraciones de 0.1 y 0.5

Se aprecia que gracias al Monte Carlo la energía disminuye, pero se 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

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.

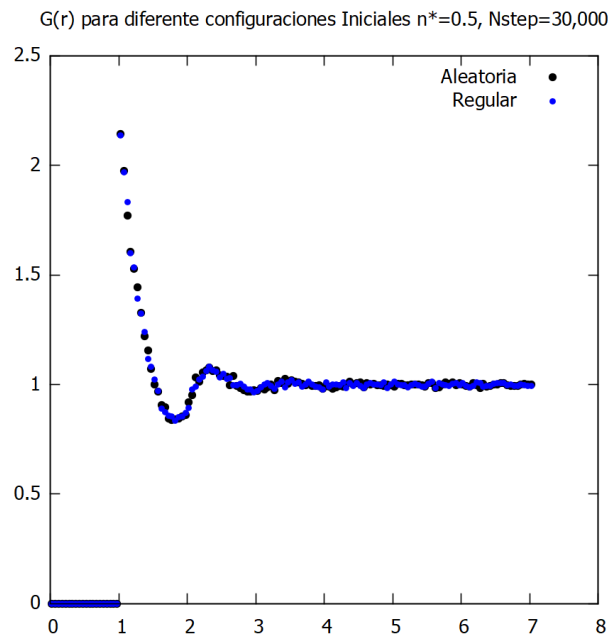


Figura 12: Distribución Radial para diferentes configuraciones iniciales

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

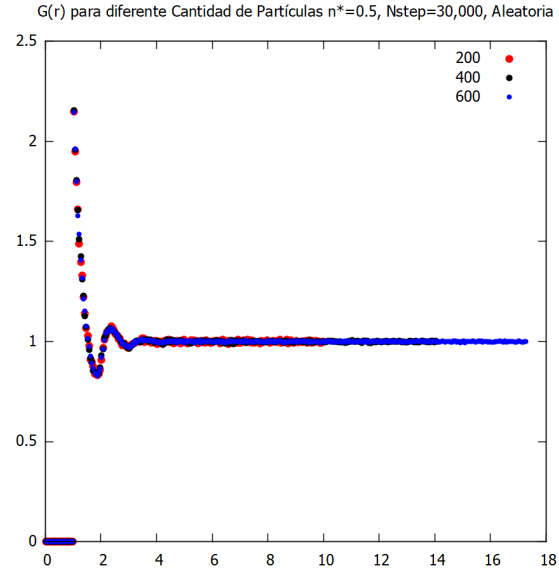


Figura 13: Distribución Radial para diferente numero de partículas

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

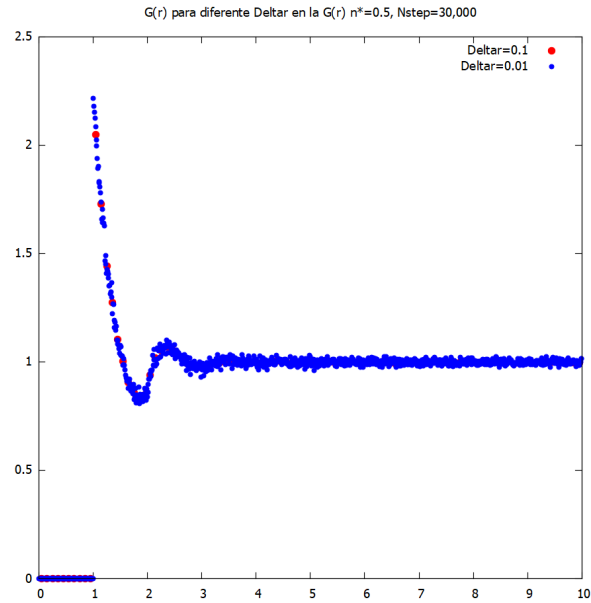


Figura 14: Distribución Radial para deltar diferentes

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:

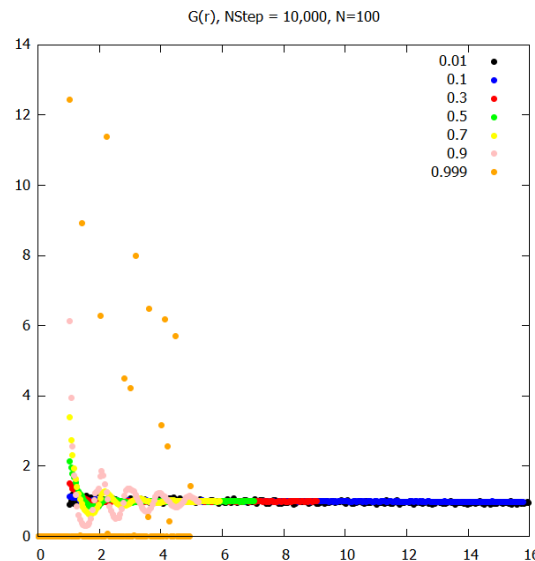


Figura 15: Distribución Radial para diferente concentraciones

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:

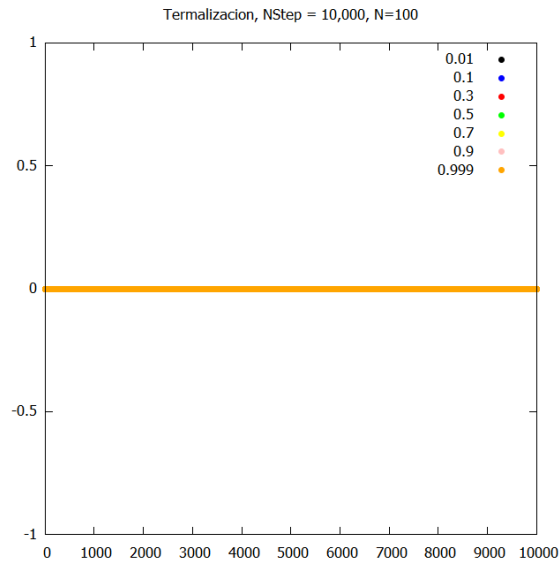


Figura 16: Termalización para diferente concentraciones

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

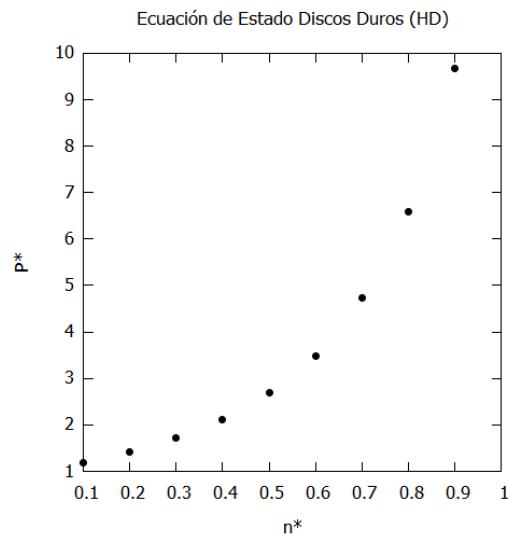


Figura 17: Ecuación de Estado para discos duros (HD)

## Código Utilizado

```

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 Módulo de Variables Globales