

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.

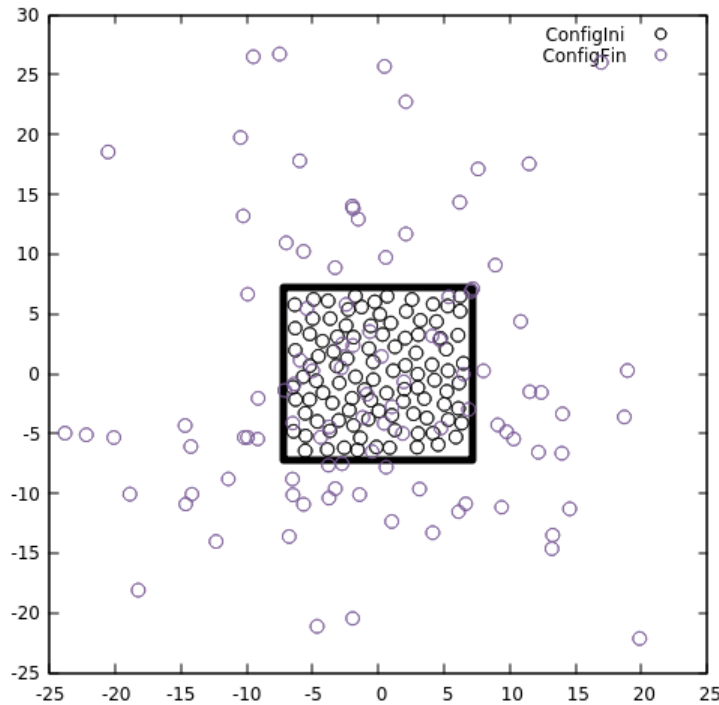


Figura 1: Configuración Inicial con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$

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.

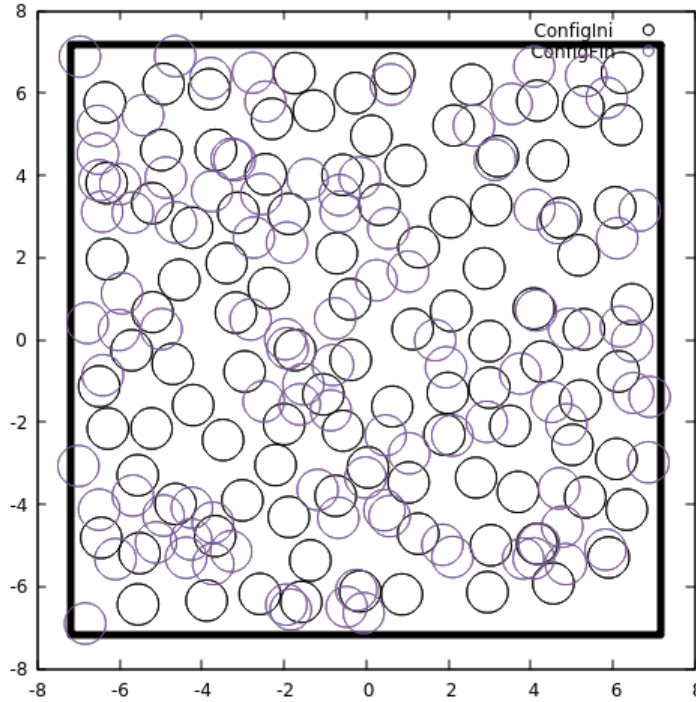


Figura 2: Configuración Inicial con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$

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 consistía en seguir el movimiento de dos partículas aleatorias. Esto permite observar las condiciones periódicas en acción.

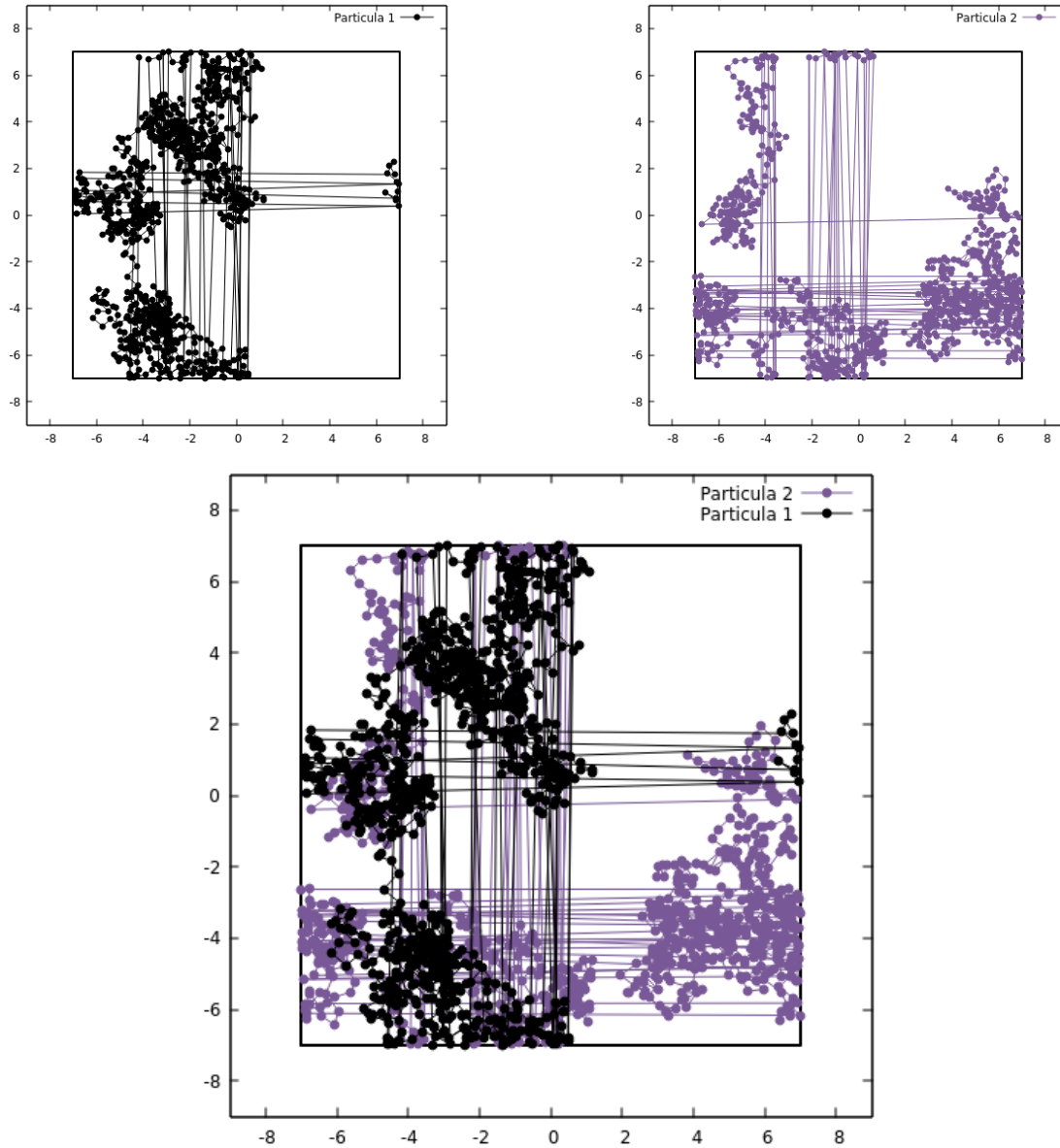


Figura 3: Con $n^* = 0.5093$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 84 y 57.

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.

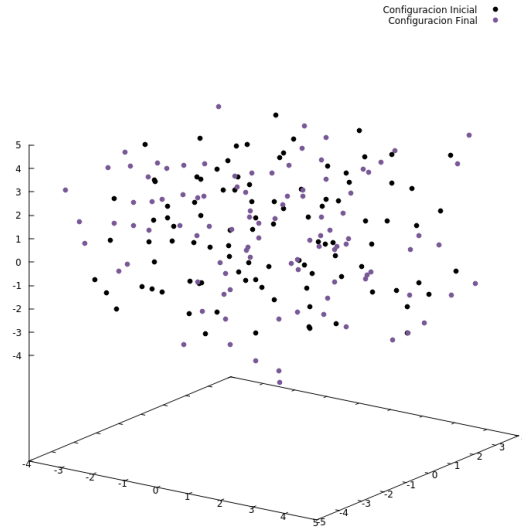


Figura 4: Con $n^* = 0.1910$, con un $NStep = 100000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$.

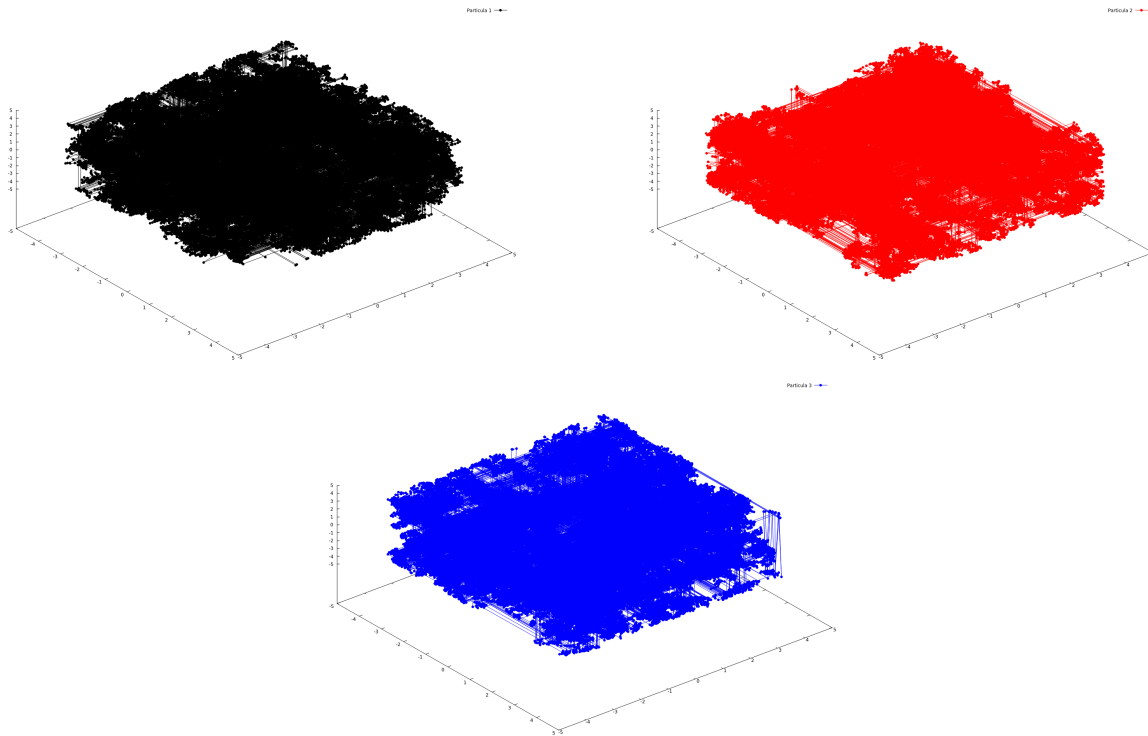


Figura 5: Con $n^* = 0.1910$, con un $NStep = 100000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 84, 57 y 4.

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

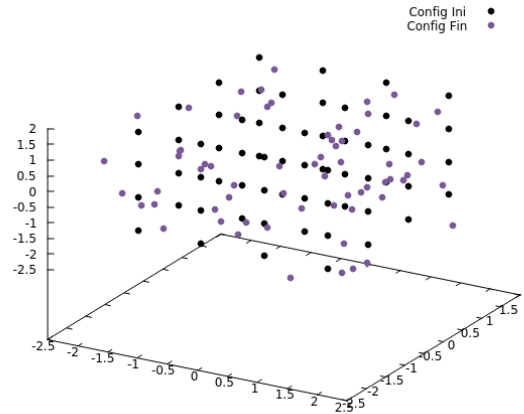


Figura 6: Con $n^* = 1.0$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$.

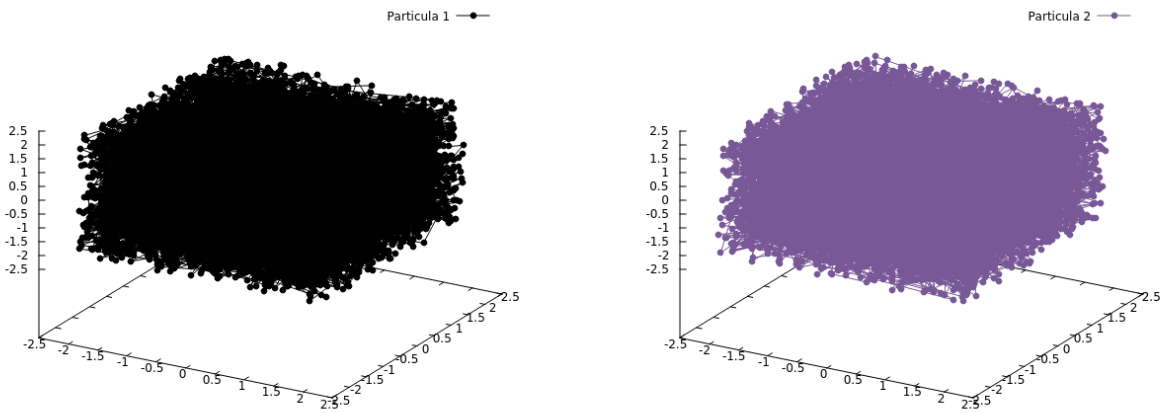


Figura 7: Con $n^* = 1.0$, con un $NStep = 1000$ y un $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$. Se realizo la traza de las partículas 64 y 36.

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.

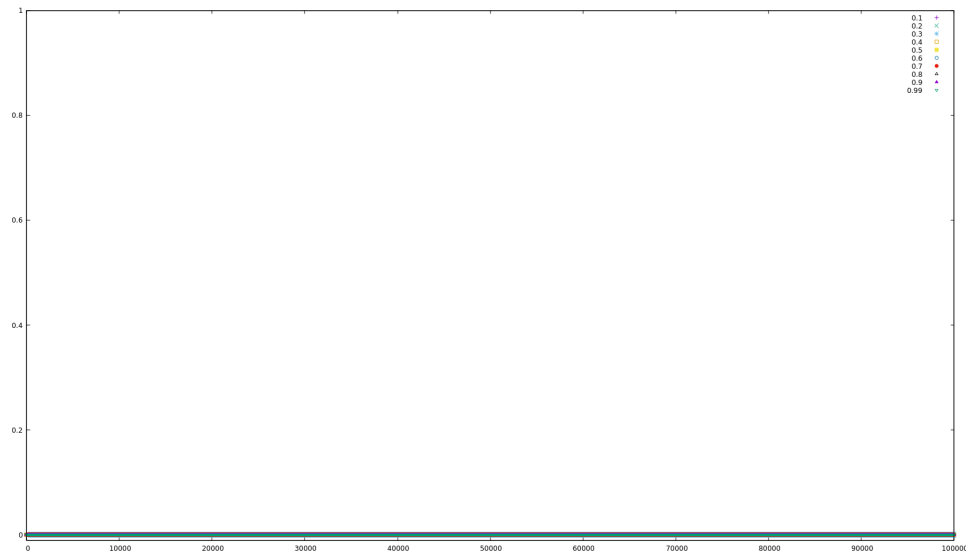


Figura 8: Termalización de HD para concentraciones de 0.1 a 0.99

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

Tarea IV

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

Actividad 7