Comentarios, Desarrollos u Observaciones

Desarrollo Experimental II

Docente: Dra. Laura Lorenia Yeomans Reyna

Portafolio III:

Simulación de Dinámica Browniana

Martín Alejandro Paredes Sosa

Semestre: 2018-1

Tarea VI: Resultados de la implementación de simulación de dinámica browniana

El sistema que se estudió fue el de un sistema de partículas coloidales cargadas de forma que el potencial de interacción entre ellas es tipo Yukawa. Como base se utilizaron los parametros de Gaylor.

Lo que se buscó fue conocer la propiedades estructurales del sistema, así como la propiedades que varian con el tiempo como lo son el desplazamiento cuadratico medio y el coeficiente de autodifusión.

Los resultados fueron los siguintes:

Termalización

A diferencia de Discos o Esferas Duras (HD o HS), la curva de termalización del potencial Yukawa no es siempre cero. La energía empieza muy alta, pero conforme avanzan las configuraciones esta disminuyte rapidamente hasta alcanzar un punto de equilibrio, como se muestra en la figura 1.

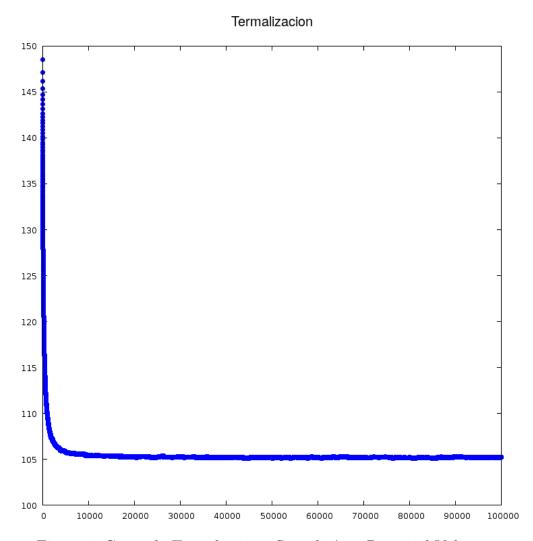


Figura 1: Curva de Termalizacion. Se utilizó un Potencial Yukawa

A partir de esta curva podemos decir cuando el sistema se encuntras en equlibrio, lo que nos permite decidir en que punto comenzar a guradar configuraciones.

Configuraciones Inicial y Final

Cuando se empieza, se genera una configuracion inicial aleatoria sin traslapes, el sistema conto con 800 particulas y una fración en volomen de 4.4×10^{-4} que aproxima a una concentracion de $n^* = 8.40338122 \times 10^{-4}$. Este ultimo es parametro de Gaylor. La celda era una caja cuadrada de lado l = 98.3736267

Las configuraciones inicial y final fueron:

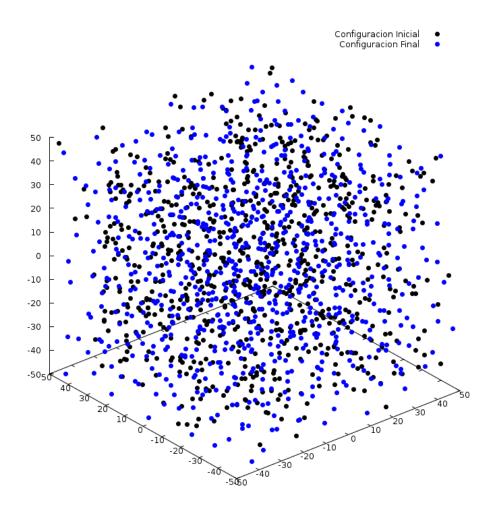


Figura 2: Configuración Inicial (Negro) y configuración Final (Azul)

Función de distribución radial G(r)

La simulación contó con 100,000 configuraciones y guardo cada 100 a partir de la configuración 20,000 que fue caundo se considero que ya alcanzó el equlibrio. Se observa en la figura 3 que aproximadamente

cuando se alcanza $r \approx 7.5$ se empiezan a encontrar las partículas. Para cuando $r \approx 10.0$ este alcanza su máximo. En la figura 4 se compara la G(r) de Gabriela con la propia. Se observa que ambas se parecen, solo que la de gabriela presenta mas ruido. Esto se puede deber a que se uso un tamaño de cinta mas fino.

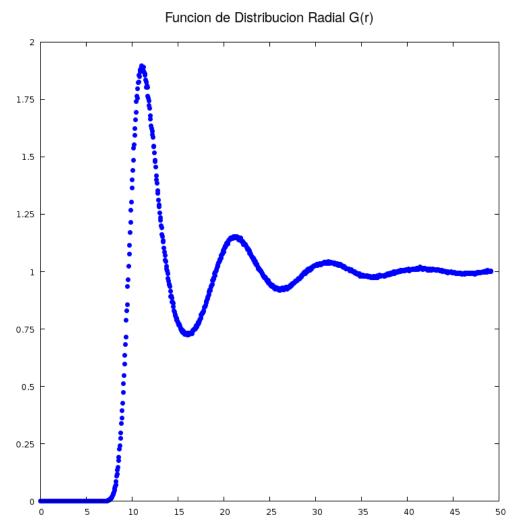


Figura 3: Funcion de Distribucion Radial de 800 particulas y $n^* = 8.4033 \times 10^{-4}$

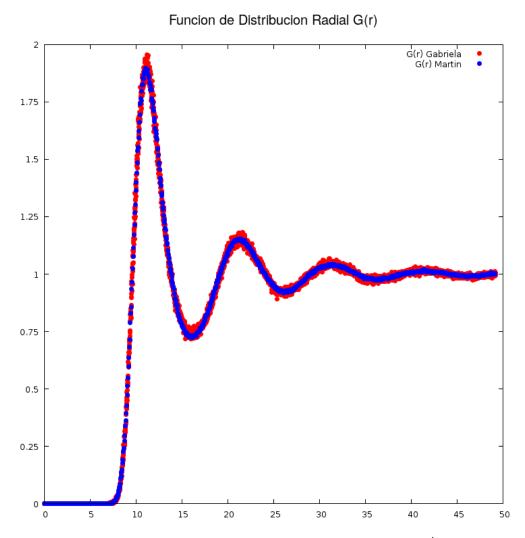


Figura 4: Funcion de Distribucion Radial de 800 particulas y $n^* = 8.4033 \times 10^{-4}$, Comparando con Gabriela

Presión

En este caso se pudo monitorear la presión del sistema conforme este evoluciono. Se obtuvo lo siguiente:

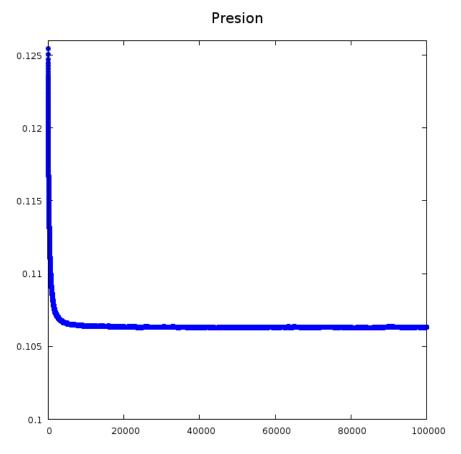


Figura 5: Presión del sistema conforme este evoluciona

Código

El codigo que se utilizo el fue le siguiente

```
1 Module cte
 2
    Implicit None
 3
    Real, Parameter :: sigma = 1.0
                                                                        !DIAMETRO DE LAS PARTICULAS
    Real, Parameter :: PI=4.0*atan(1.0)
                                                                        !PI
    Real :: YukA, YukZk
                                                                        !POTENCIAL YUKAWA
    Integer, Parameter :: CEq = 20000
                                                                        !CONFIGURACION DE
      EQUILIBRIO
    Real :: Dens, BoxL, RCut, dT
                                                                        !PARAMETROS DE LA
      SIMULACION (REALES)
8
    Integer :: N, NStep, ISave, ISave2, IPrint, IRatio, NN
                                                                        !PARAMETROS DE LA
      SIMULACION (ENTEROS)
9
    Real, Parameter :: Dim = 1.0/3.0
                                                                        !Dimensiones (2D o 3D)
10
    Real, Allocatable, Dimension(:) :: X, Y, Z, XR, YR, ZR
                                                                        !POSICIONES DE LAS
      PARTICULAS X Y Z
11
    Real, Allocatable, Dimension(:,:) :: CX, CY, CZ
                                                                        !MATRICES DE CONFIGURACION
12
    Real, Allocatable, Dimension(:,:) :: CXD, CYD, CZD
                                                                        !MATRICES DE CONFIGURACION
      WDT
```

```
Real, Allocatable, Dimension(:) :: FX, FY, FZ !FUERZAS DE INTERACCION

14 End Module cte
```

Listing 1: Modulo de Variables Globales

```
! PROGRAMA PRINCIPAL DEL LA SIMULACION, LLAMA SUBRUTINAS PARA REALIZAR
 3 ! LA SIMULACION. SE UTILIZA DINAMICA BROWNIANA
  ! AUTOR: MARTIN ALEJANDRO PAREDES SOSA
 6 Program Main
 7
    Use cte
    Implicit None
9
    Integer :: i, j, IStep , k, k2, ki
                                                               ! CONTADORES
10
    Real :: RanX, RanY, RanZ
                                                               !VALORES ALEATORIOS PARA POSICION
11
    Real :: phi
                                                               !VARIABLE TEMP FRACCION EN VOLUMEN
12
    Real :: Var
13
    Logical :: Ctrl, Ctrl1, Ctrl2
                                                               !CONTROL LOGICO
14
15
    Integer :: istat1, istat2
16
    Character (len=80) :: err_msg1, err_msg2
17
18
19
    !PARAMETROS DE SIMULADOR
20
    N = 800
21
    NStep =100000
22
                                                            !G(r)
    ISave = 100
23
    ISave2 = 100
                                                            !W(t), D(t)
24
    iPrint = 1000
25
    dt = 0.0004
26
27
    phi = 4.4D-4
28
    Dens = 6*phi/pi
29
    YukA = 556.0
30
    YukZk = 0.149
31
    YukA = YukA * Exp(YukZk)
32
    NN = ( NStep- CEq ) / ISave
33
    !Write(*,*) phi !DEBUG
34
35
    !PEDIR DENSIDAD Y NUMERO DE PARTICULAS
36
    Write(*,*) "NUMERO DE PARTICULAS"
    Write(*,*) N
37
38
    Write(*,*) "CONCENTRACION REDUCIDA"
    Write(*,*) Dens
39
40
    Write(*,*) "NUMERO DE CICLOS"
41
    Write(*,*) NStep
    Write(*,*) "MONITOREO EN PANTALLA (CADA CAUNTOS CICLOS)"
42
43
    write(*,*) IPrint
44
    Write(*,*) "NUMERO DE PASOS PARA GUARDAR CONFIGURACION (G(r))"
45
    write(*,*) ISave
```

```
Write(*,*) "NUMERO DE PASOS PARA GUARDAR CONFIGURACION (W(t),D(t))"
46
47
    write(*,*) ISave2
48
    Write(*,*) "PASO DE TIEMPO"
49
    write(*,*) DT
50
    Write(*,*) "
      ______
51
52
    !ALOJAR ESPACIO EN MEOMORIA PARA LOS ARREGLO DE POSICION DE PARTICULAS
53
    Allocate( X(N), Y(N), Z(N), STAT= istat1 , ERRMSG=err_msg1 )
    Allocate( XR(N), YR(N), ZR(N) )
54
55
56
    !ALOJAR ESPACIO EN MEMORIA PARA LAS FUERZAS DE INTERACCION
57
    Allocate(FX(N), FY(N), FZ(N))
58
59
    !ALOJAR ESPACIO EN MEOMORIA PARA LOS ARREGLOS DE CONFIGURACION
60
    Allocate(CX(N,NN), CY(N,NN), CZ(N,NN), STAT= istat2, ERRMSG=err_msg2)
61
    Allocate( CXD(N,NN), CYD(N,NN), CZD(N,NN) )
62
63
64
    !GENERAR LA CONFIGURACION INICIAL
65
    Call ConfigIni
66
    Write(*,*) "CONFIGURACION INICIAL LISTA"
67
68
    !CALCULO/PARAMETROS PARA INICIALIZAR
69
    RCut = BoxL / 2.0
70
    Var = sqrt(2.0*dt)
                                                                          !G(r)
71
    k2 = 0
72
    ki = 0
                                                                          !W(t), D(t)
73
74
75
    !CALCULO DE FUERZAS DE LA CONFIGURACION INICIAL
76
    Open(3, File="Terma.dat" )
77
    Call Fuerza(iStep)
78
79
80
    !ABRIENDO ARCHIVOS PARA GUARDAR INFO DEL SISTEMA
81
    Open(2, File="ConFin.dat")
82
83
84
    !MOVIMIENTO DE PARTICULAS
85
86
87
    Configuracion: Do iStep = 1, NStep
88
89
       Particula: Do i = 1, N
90
91
          !GENERAR VALORES ALEATORIO CON DISTRIBUCION GAUSSIANA
92
          Call RanGauss(RanX)
```

```
93
            Call RanGauss(RanY)
94
            Call RanGauss(RanZ)
95
 96
            !MOVIMINETO DE PARTICULAS EN BASE A LA ECUACION DE LANGEVIN
97
            !SOBREAMORTIGUADA, O REGIMEN DIFUSIVO
98
            !ALGORITMO DE EMARK PARA EL DESPLAZAMIENTO
99
100
            X(i) = X(i) + FX(i) * dt + Var * RanX
101
            Y(i) = Y(i) + FY(i) * dt + Var * RanY
102
            Z(i) = Z(i) + FZ(i) * dt + Var * RanZ
103
104
            XR(i) = XR(i) + FX(i) * dt + Var * RanX
105
            YR(i) = YR(i) + FY(i) * dt + Var * RanY
106
            ZR(i) = ZR(i) + FZ(i) * dt + Var * RanZ
107
            !CONDICIONES PERIODICAS (MANTENER MISMA N EN TODA CONFIGURACION)
108
109
            X(i) = X(i) - BoxL*Anint( X(i) / BoxL )
110
           Y(i) = Y(i) - BoxL*Anint(Y(i) / BoxL)
111
            Z(i) = Z(i) - BoxL*Anint(Z(i) / BoxL)
112
113
            !FIN DE MOVIMIENTO DE PARTICULAS DE LA CONFIGURACION ISTEP
114
115
        End Do Particula
116
117
         !ALMACENANDO CONFIGURACIONES DE EQUILIBRIO CX, CY, CZ PARA LA G(R)
118
         Ctrl1 = Mod( iStep, iSave) == 0
119
         Ctrl2 = iStep .GT. CEq
120
         Ctrl = Ctrl1 .AND. Ctrl2
121
122
        ConfigGR: If (Ctrl) Then
123
           k2 = k2 + 1
124
125
            SAV:Do k = 1 , N
126
127
               CX(k,k2) = X(k)
128
               CY(k,k2) = Y(k)
129
               CZ(k,k2) = Z(k)
130
               !Write(*,*) "ENTRO"
131
132
            End Do SAV
133
134
         End If ConfigGR
135
136
         !ALMACENANDO CONFIGURACIONES DE EQUILIBRIO CXD, CYD, CZD PARA W(t) Y D(t)
137
         Ctrl1 = Mod( iStep, iSave2) == 0
138
         Ctrl2 = iStep .GT. CEq
139
         Ctrl = Ctrl1 .AND. Ctrl2
140
141
        ConfigWt: If (Ctrl) Then
```

```
142
143
           ki = ki + 1
144
145
           SAV1:Do k = 1 , N
146
147
              CXD(k,ki) = XR(k)
148
              CYD(k,ki) = YR(k)
149
              CZD(k,ki) = ZR(k)
150
151
           End Do SAV1
152
153
        End If ConfigWt
154
155
        !CALCULO DE FUERZAS DE LAS CONFIGURACIONES
156
        Call Fuerza(iStep)
157
158
     End Do Configuracion
159
160
     Write(*,*) "DONE CONFIGURACIONES"
161
     Close(3)
162
163
      !GUARDAR CONFIG FINAL
164
     ConfigFin: Do i=1, N
165
166
        Write(2,*) X(i), Y(i), Z(i)
167
168
     End Do ConfigFin
169
     Close (2)
     WRITE(*,*) "DONE SAVING CONFIG FINAL"
170
171
     Deallocate( X, Y, Z, XR, YR, ZR )
172
     WRITE(*,*) "CLEAR MEMORY POSICIONES" !DEBUG
173
174
     !CALCULO DE PROPIEDADES
175
     WRITE(*,*) "CALCULANDO GDR" !DEBUG
176
     Call GdrCalc
177
     WRITE(*,*) "GDR DONE CALC" !DEBUG
178
     Deallocate( CX, CY, CZ )
179
     WRITE(*,*) "CLEAR MEMORY CONFIGURACIONES G(r)" !DEBUG
180
181
     !CALCULO DE PROPIEDADES DE WDT
182
     Write(*,*) "CALCULADO WDT" !DEBUG
183
     Call WDT(ki)
184
     WRITE(*,*) "WDT DONE CALC" !DEBUG
185
     Deallocate( CXD, CYD, CZD )
     WRITE(*,*) "CLEAR MEMORY CONFIGURACIONES W(t)" !DEBUG
186
187
188
189
     WRITE(*,*) "DONE"
190
```

```
191
192 End Program Main
```

Listing 2: Código Principal

```
! CONSTRUCCION DE UNA CONFIGURACION INICIAL ALEATORIA EN CELDA TRIDIMENSIONAL
  ! SIN TRASLAPES
  ! Autor: Martin Paredes Sosa
 7 Subroutine ConfigIni
8
    Use cte
9
    Implicit None
10
    Real :: xRan, yRan, zRan, xij, yij, zij, dist
11
                                                   ! CONTADOR
    Integer :: i, j
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
                          !BUSCAR LA POSICION ALEATORIA PARA LAS PARTICULAS
19
    Colocar: Do i=1, N
20
    2 Call Random_Number(xRan) !VALOR ALEATORIO DE POSICION X \
21
       Call Random_Number(yRan) !VALOR ALEATORIO DE POSICION Y | TENTATIVO
22
       Call Random_Number(zRan) !VALOR ALEATORIO DE POSICION Z /
23
       !COLOCAR DENTRO DE LA CELDA
24
25
       X(i) = (xRan-0.5)*(BoxL-1)
                                                     !\
26
                                                     ! [
                                                          [-(BoxL-1)/2, (BoxL-1)/2]
       Y(i) = (yRan-0.5)*(BoxL-1)
27
       Z(i) = (zRan-0.5)*(BoxL-1)
                                                     !/
28
29
       !Write(*,*) X(i), Y(i), Z(i)
                                                   ! DEBUG
30
31
       Traslape: Do j=1 , i-1
32
33
          xij = X(i) - X(j)
                                         !CALCULANDO LA DISTANCIA ENTRE PARTICULAS
34
          yij = Y(i) - Y(j)
35
          zij = Z(i) - Z(j)
36
37
          dist = xij*xij + yij*yij + zij*zij
38
39
          DectTraslape: If (dist .LE. sigma ) Then !DETECTANDO TRASLAPES
40
41
              !Write(*,*) "TRASLAPE", i, j
                                              !DEBUG
             GO TO 2
42
43
44
          End If DectTraslape
45
```

```
46 End Do Traslape
47
48 Write(1,*) X(i), Y(i), Z(i) !GUARDANDO EN ARCHIVO LA POSICION
49
50 End Do Colocar
51
52 Close(1)
53
54
55 End Subroutine ConfigIni
```

Listing 3: Código para generar la configuración Inicial Aleatoria

```
! SUBRUTINA PARA EL CALCULO DE FUERZAS DE INTERACCION Y ENERGIA DE LA
  ! CONFIGURACION PARA LA SIMULACION DE DINAMICA BROWNIANA
  ! AUTOR : MARTIN ALEJANDRO PAREDES SOSA
8 Subroutine Fuerza(L)
9
    Use cte
10
    Implicit None
11
    Real :: EnePot, U, U2, U3
                                                                      !ENERGIA
12
    Real :: FXI, FYI, FZI, fxij, fyij, fzij
                                                                  !FUERZAS TEMP
13
                                                                  !POSICIONES
    Real :: xij, yij, zij, rij
14
    Real :: Pres, Pres1
15
16
    Integer :: i, j, L
                                                                  !CONTADORES ("L" CONTADOR
     DE LA CONFIGURACION)
17
    Logical :: Ctrl1, Ctrl2
18
19
    !INICIALIZANDO
20
    EnePot = 0.0
21
    FX = 0.0
22
    FY = 0.0
23
    FZ = 0.0
24
25
    Pres1 = 0.0
26
27
    Parti1: Do i = 1, N - 1
28
29
       FXI = FX(i)
30
       FYI = FY(i)
31
       FZI = FZ(i)
32
33
       Parti2: Do j = i + 1, N
34
35
          !SEPARACION
          xij = X(i) - X(j)
36
```

```
37
           yij = Y(i) - Y(j)
38
           zij = Z(i) - Z(j)
39
40
           !CONDICION DE IMAGEN MINIMA
41
           xij = xij - BoxL * Anint( xij / BoxL )
           yij = yij - BoxL * Anint( yij / BoxL )
42
           zij = zij - BoxL * Anint( zij / BoxL )
43
44
45
           !DISTANCIA
           rij = sqrt( xij*xij + yij*yij + zij*zij )
46
47
48
           !TRASLAPES
49
           Ctrl1 = rij .LE. 1.0
50
           Traslape : If(Ctrl1) Then
51
52
              Write(*,*) "TRASLAPE", i, j
53
54
           End If Traslape
55
56
           !IMPLEMENTACION DEL POTENCIAL
57
           Ctrl2 = rij .LT. RCut
           Potencial: If(Ctrl2) Then
58
59
60
              U = Exp(-YukZk * rij)
61
              U2 = YukA * U * (YukZk * rij + 1.0) / (rij**3)
62
              U3 = U2 * rij * rij
63
              EnePot = (YukA * U) / rij + EnePot
64
65
              fxij = xij * U2
66
              fyij = yij * U2
67
              fzij = zij * U2
68
69
              FXI = FXI + fxij
70
              FYI = FYI + fyij
71
              FZI = FZI + fzij
72
73
              FX(j) = FX(j) - fxij
74
              FY(j) = FY(j) - fyij
75
              FZ(j) = FZ(j) - fzij
76
77
              !PRECALCULO DE PRESION
78
              Pres1 = Pres1 + U3
79
80
           End If Potencial
81
82
        End Do Parti2
83
84
        !GUARDANDO FUERZA
85
        FX(i) = FXI
```

```
86
        FY(i) = FYI
87
        FZ(i) = FZI
88
89
     End Do Parti1
90
91
      !CALCULO DE PRESION
92
     Pres = dens + (dens / (3.0 * real(N))) * Pres1
93
94
      !GUADANDO TERMALIZACION (ENERGIA POR PARTICULA)
95
     Write(3,*) L , EnePot / Real(N), Pres
96
97
     If( mod(L , iPrint) == 0 ) Then
98
         Write(*,*) L , EnePot / Real(N) , Pres
                                                                             !MONITOREO EN PANTALLA
99
     End If
100
101 End Subroutine Fuerza
```

Listing 4: Código para calculo de Fuerzas Potencial Yukawa

```
2 ! EL PROGRAMA REALIZA EL CALCULO DE LA GDR APARTIR DE LAS DIFERENTES
 3 ! CONFIGURACIONES REALIZADAS EN EL PROGRAMA PRINCIPAL (3D)
 5 ! AUTOR: MARTIN ALEJANDRO PAREDES SOSA
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, z0, xN, yN, zN, xON, yON, zON
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
23
    MBin = Int( RCut / delTar )
24
25
    Allocate( Histo(MBin+1) , STAT = istat1, ERRMSG = err_msg1)
26
27
    Histo = O !INICIALIZANDO EN O HITOGRAMA
28
29
    Parti0 : Do i = 1, N
30
31
       NextParti : Do j = 1, N
```

```
32
33
           NOTSAME : If (i \neq j) Then
34
35
              StepCnfg : Do k = 1, NN
36
37
                 !PARTICULA i ORIGEN
38
                 x0 = CX(i, k)
39
                 y0 = CY(i, k)
40
                 z0 = CZ(i,k)
41
42
                 !PARTICUAL j CERCANA
43
                 xN = CX(j, k)
                 yN = CY(j, k)
44
45
                 zN = CZ(j, k)
46
47
                 !DISTANCIA
48
                 xON = xN - xO
49
                 yON = yN - yO
50
                 zON = zN - zO
51
52
                 !CONDICION DE IMAGEN MINIMA
53
                 xON = xON - BoxL*Anint(xON/BoxL)
54
                 yON = yON - BoxL*Anint( yON/BoxL )
55
                 zON = zON - BoxL*Anint( zON/BoxL )
56
57
                 !DISTANCIA ENTRE LAS PARTICULAS
                 rD = sqrt((x0N * x0N) + (y0N * y0N) + (z0N*z0N))
58
59
60
                 !CERCANIA CINTA
61
                 iBin = Int( rD / delTar ) + 1
62
                 Guardar : If((iBin .LE. MBin) ) Then
63
64
65
                    Histo(iBin) = Histo(iBin) + 1
66
67
                 End If Guardar
68
69
             End Do StepCnfg
70
           End If NOTSAME
71
72
73
        End Do NextParti
74
75
    End Do PartiO
76
77
78
79
    c1 = (4.0 / 3.0) * PI * Dens
80
```

```
82
     Open(5, file="gdr.dat")
83
84
     GdrCal: Do ibin = 1 , MBin
85
86
        rL = Real(iBin - 1) * delTar
87
88
        rU = rL + delTar
89
        rM = rL + (delTar/2.0)
90
91
        c2 = c1 * ((rU**3) - (rL**3))
92
        gdr = Real( Histo(iBin) )/ Real(NN) / Real(N) / c2
93
        gdrm = gdr
94
95
        Write(5,*) rM , gdr
96
97
     End Do GdrCal
98
99
     Close(5)
100
101
     Deallocate( Histo )
102
103
     Write(*,*) "GDR DONE, SAVE"
104
105 End Subroutine GdrCalc
```

!ABRIENDO ARCHIVO PARA GDR

81

Listing 5: Código para el calculo de la G(r)

```
2 ! SUBRUTINA DE CALCULO DE PROPIEDADES DE AUTO DIFUSION. DESPLAZAMIENTO CUADRATICO MEDIO Y
   ! COEFICIENTE DE DIFUSION DEPENDIENTE DEL TIEMPO
 4!
 5 ! AUTOR: MARTIN ALEJANDRO PAREDES SOSA
 8 Subroutine WDT(k)
9
10
    Use cte
11
    Implicit None
12
13
    Integer :: k, i, j, p, nmax
                                                                !CONTADORES
14
     Real :: Ti, Time
                                                                !CONTROL DE TIEMPO
15
     Real :: Wtx, Wty, Wtz, Wt
                                                                !DESPLAZAMIENTO CUADRATICO MEDIO
16
    Real :: Dif
                                                                !DIFUSION
17
18
     Open(96, File="wdt.dat")
19
20
     !TIEMPO ENTRE CONFIGURACIONES
21
     Ti = Real(iSave2) * dt
22
```

```
23
     !BARRIDO TEMPORAL
24
     TEMPO: Do i = 1, k-1
25
26
       nmax = k - i
27
28
       Wtx = 0.0
29
       Wty = 0.0
30
       Wtz = 0.0
31
       Wt = 0.0
32
33
        !BARRIMIENTO DE PARTICULAS
        BPart: Do p = 1, N
34
35
36
           !BARRIDO EN TIEMPO
37
           Tiempo: Do j = 1, nmax
38
39
              Wtx = Wtx + (CXD(p,i+j) - CXD(p,j)) * (CXD(p,i+j) - CXD(p,j))
              wty = Wty + (CYD(p,i+j) - CYD(p,j)) * (CYD(p,i+j) - CYD(p,j)
40
41
              Wtz = Wtz + (CZD(p,i+j) - CZD(p,j)) * (CZD(p,i+j) - CZD(p,j))
42
43
           End Do Tiempo
44
45
       End Do BPart
46
       Time = Ti * Real(i)
47
       Wt = (Wtx + Wty + Wtz) / (Real(nmax) * Real(N) * 6.0)
48
49
       Dif = Wt / Time
50
        Write(96,*) Time, Wt, Dif
51
52
     End Do TEMPO
53
54
    Close(96)
55
56 End Subroutine WDT
```

Listing 6: Código del calculo de la W(t) y D(t)

```
14
    Real :: Gauss
                          !VALORES ALEATORIOS CON DISTRIBUCION GAUSSIANA
15
16
     !GENERANDO NUMEROS ALEATORIOS UNIFORMES
17 12 Call random_number(Rand1)
18
    Call random_number(Rand2)
19
20
    !PREVENIR QUE DIVERJA EL LOGARITMO AL EVALUARLO EN Rand1
21
    Diver: If (rand1.le.1E-8) Then
22
        go to 12
23
    End If Diver
24
25
     !GENERANDO UN NUMERO ALEATORIOS CON DISTRIBUCION GAUSSIANA
26
    Gauss = Sqrt ( -2.0 * log(Rand1) ) * cos(2.0 * pi * Rand2)
27
28
29 End Subroutine RanGauss
```

Listing 7: Código para generar valores aleatorios con distribución gaussiana