

Estudio de las propiedades estructurales del sistema simulado mediante la distribución radial, la triangulación de Delaunay y la teselación de Voronoi.

Se estudian las diferentes propiedades en el archivo `structure.py`

Función de distribución radial

La función de distribución radial $g(r)$ es una medida de la probabilidad de encontrar una partícula a una cierta distancia de otra partícula. Sirve para entender la estructura local del sistema simulado, ya que proporciona información sobre cómo se distribuyen espacialmente sus componentes.

En el programa se leen todos los ficheros de posiciones generados de la simulación `MD_numpy.py`, que se disponen en sendas matrices `xMat` e `yMat` de forma que cada columna indique un estado diferente de cada partícula, que constituyen las filas. Tras calcular las distancias del resto para cada una de ellas, se grafica el histograma correspondiente.

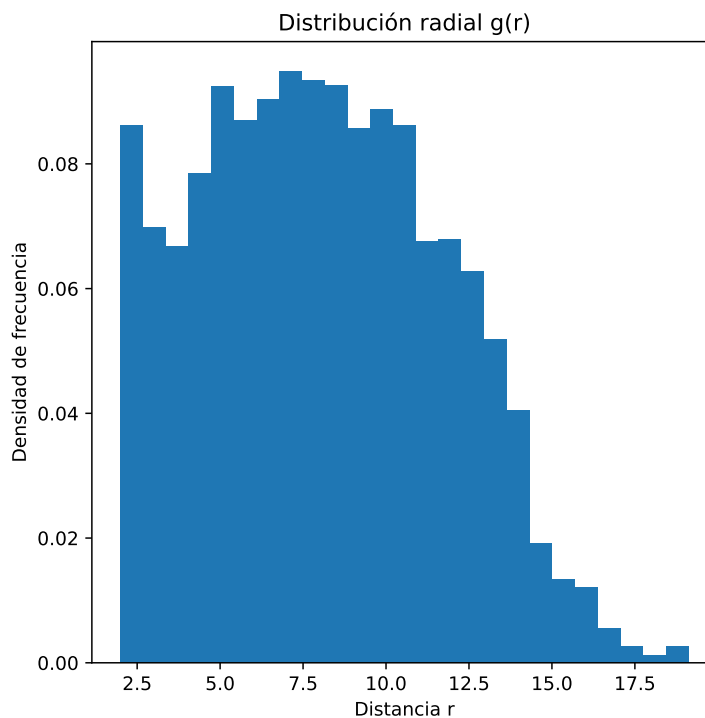


Figura 1: Distribución radial del sistema simulado con 25 partículas y 250 colisiones.

Como era de esperar no se encuentra ninguna dentro de una distancia $r = 1$, ya que en nuestra simulación el radio R de las partículas es la unidad. Se observa una distribución relativamente uniforme hasta unas 15 unidades de distancia de la partícula central, donde empieza a decaer rápidamente.

Triangulación de Delaunay

La triangulación de Delaunay es una forma de dividir un conjunto de puntos en triángulos de forma que ninguno de ellos se encuentre dentro del circuncírculo definido por ninguno de los triángulos. De esta manera se maximiza el ángulo más pequeño de todos los triángulos. Es equivalente al gráfico dual de la teselación de Voronoi.

Comenzamos graficando la triangulación correspondiente al estado inicial, previo a la primera colisión entre dos partículas o partícula-pared. Empleamos la función `Delaunay` de la librería `scipy.spatial`, que se encarga de realizar el cálculo. Invocando a su método `simplices` podemos obtener las aristas de los diferentes triángulos.

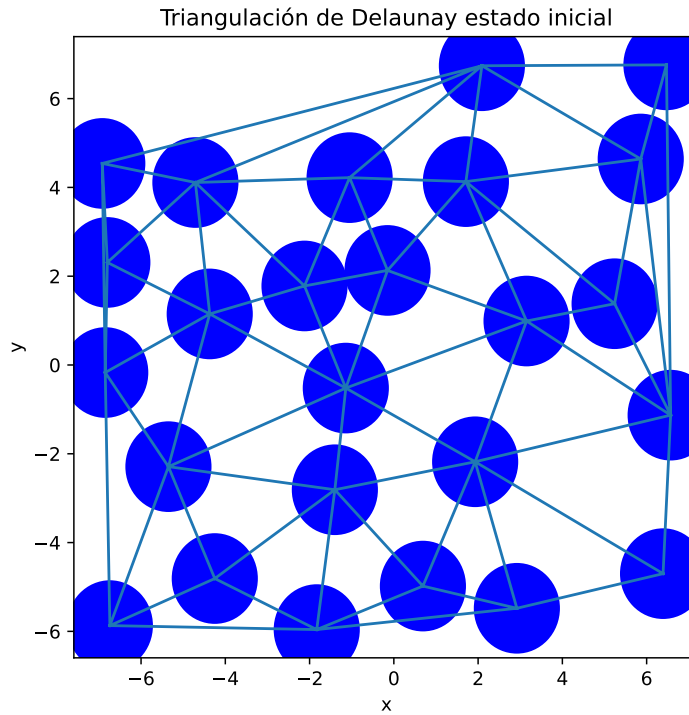


Figura 2: Triangulación de Delaunay en el estado inicial

Se observa un grado de similitud en la parte central medianamente alto, de lo que se deduce que las partículas se encuentran distribuidas en cierta forma uniformemente en esta zona. En el programa se genera un gif mediante la función `delaunay_gif()` con la evolución de la triangulación a medida que las partículas van colisionando.

Teselación de Voronoi

La teselación de Voronoi es una forma de dividir un conjunto de puntos, que en nuestro caso representan las diferentes partículas del sistema, en regiones tal que área que encierra a cada una de ellas representa la zona de influencia de las mismas. Los circuncentros de los triángulos obtenidos mediante Delaunay corresponden a los vértices de la teselación, mientras que los bordes de esta última se derivan de las relaciones de adyacencia de los triángulos.

En el programa se comienza graficando la teselación correspondiente al estado inicial del sistema, previo a la primera colisión, mediante el método `Voronoi` y `voronoi_plot_2d` de la librería `scipy.spatial`. Así mismo, mediante la función definida en la primera celda `voronoi_gif()` se genera un gif con la evolución de la teselación a lo largo de los diferentes estados simulados. Observando la parte central encontramos hexágonos medianamente regulares, que indican que el sistema se asimila a una red hexagonal distribuida uniformemente en esta zona; mientras que las zonas del borde exhiben comportamientos más irregulares causados por la presencia de éstos.

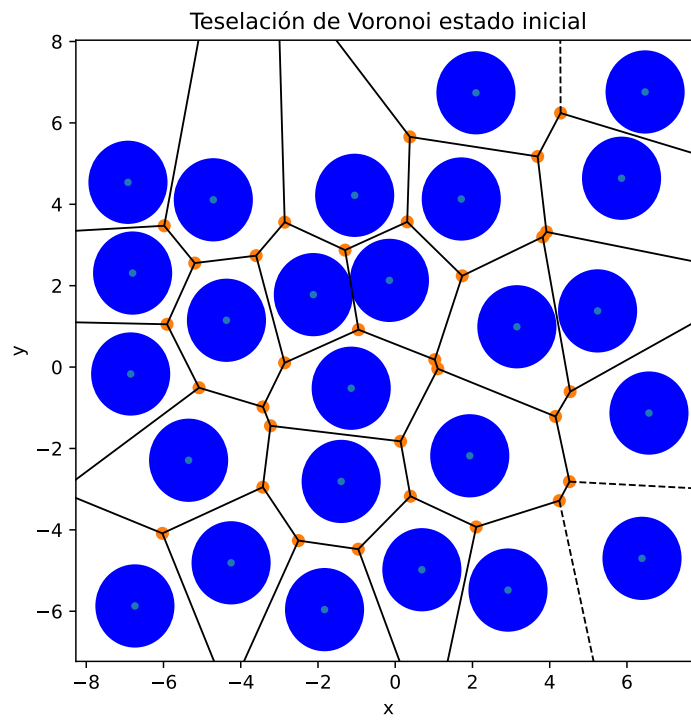


Figura 3: Teselación de Voronoi del sistema en el estado inicial.