Condiciones iniciales

Hay que satisfacer las siguientes condiciones
(en unidades reducidas)

(a) $\mathbf{v}_{cm} = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle v_x \rangle = \langle v_y \rangle = \langle v_z \rangle = 0$

(b) Para una distribución de Maxwell en el equilibrio

$$f(v) \sim e^{-v^2/2T} \qquad (\text{si } K = 1 \text{ y } m = 1) \tag{1}$$

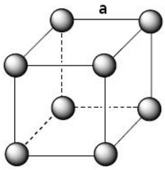
$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = T \tag{2}$$

Termalización

(a) Función H de Boltzmann

$$H = \int d^3p\, f(\mathbf{p}, t)\, \ln f(\mathbf{p}, t) \tag{3}$$

(b) Parámetro de orden de Verlet para un arreglo cúbico con separación a.



$$\lambda_x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \cos\left(\frac{2\pi}{a}\,(x_i - a/2)\right) \tag{4}$$

y lo mismo para λ_y y λ_z.

(a) Función H de Boltzmann

$$H = \int d^3p \, f(\mathbf{p}, t) \, \ln f(\mathbf{p}, t) \approx \frac{1}{3} \left(H_x + H_y + H_z \right) \tag{5}$$

$$H_x = \sum_{\Delta v_x} f(v_x) \, \ln f(v_x) \cdot \Delta v_x \tag{6}$$

y lo mismo para H_y y H_z. $f(v_x)$ es el histograma instante a instante de las velocidades, con bins $v_x \pm \Delta v_x/2$ (por ejemplo, $\Delta v_x = 0.05$).

El teorema H de Boltzmann asegura que $dH/dt \leq 0$ y $dH/dt = 0$ en el equilibrio (distribución de Boltzmann).

(a) Función H de Boltzmann

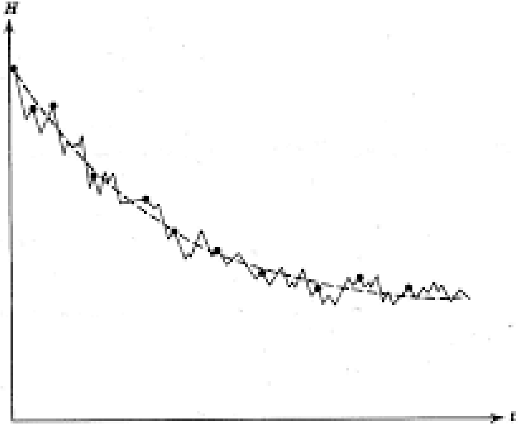


Figure: Función H de Boltzmann.

(b) Parámetro de orden de Verlet

El sistema tiene condición inicial de arreglo cúbico. Calculamos

$$\lambda = \frac{1}{3}\left[\lambda_x + \lambda_y + \lambda_z\right] \tag{7}$$

(1) Si la red cúbica está ordenada, entonces $\lambda = 1$.

(2) Cuando el sistema está completamente desordenado $\lambda \to 0$ (aunque con fluctuaciones $1/\sqrt{N}$).

(3) Entre $\lambda = 1$ y $\lambda \approx 0$ aparecen fluctuaciones que muestran agrupamientos parciales o vestigios de la red original.

Re-escaleo de velocidades

Supongamos que inicio con una temperatura (reducida)

$$T_0 = \frac{1}{3}\left[\langle v_x^2\rangle + \langle v_y^2\rangle + \langle v_z^2\rangle\right] \tag{8}$$

y deseo alcanzar una temperatura

$$T_d = \frac{1}{3}\left[\langle v_x'^2\rangle + \langle v_y'^2\rangle + \langle v_z'^2\rangle\right] \tag{9}$$

$$\Rightarrow \quad T_d = \frac{1}{3}\,\frac{T_d}{T_0}\left[\langle v_x^2\rangle + \langle v_y^2\rangle + \langle v_z^2\rangle\right] \tag{10}$$

Tengo que "re-escalar" las velocidades como $v_i' = \sqrt{\frac{T_d}{T_0}}\, v_i$.