Optimización de la energía libre de Helmholtz a través de un programa en Visual Studio 2005 del método Monte Carlo Annealing

https://doi.org/10.56238/levv15n39-182

Francisco Javier Martínez Ruíz
Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"
Zacatecas, México
E-mail: Javier.martinezruiz@uaz.edu.mx
ORCID: https://orcid.org/0000-0002-8842-7556

Luis Humberto Mendoza Huizar
Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
Hidalgo, México
E-mail: hhuizar@uaeh.edu.mx
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-2373-4624

José Manuel Cervantes Viramontes
Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"
Zacatecas, México
E-mail: joscervant@yahoo.com
ORCID: https://orcid.org/0009-0009-8379-6713

Mario Molina Almaraz
Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"
Zacatecas, México
E-mail: mmolina@uaz.edu.mx
ORCID: http://orcid.org/0000-0002-4779-6312

Ireri Aydee Sustaita Torres
Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"
Zacatecas, México
E-mail: Ireri.sustaita@gmail.com
ORCID: http://orcid.org/0000-0002-6381-6387

Osbaldo Vite Chávez
Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"
Zacatecas, México
E-mail: osvichz@uaz.edu.mx
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-0438-8105

Sahara Araceli Pereyra López
Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"
Zacatecas, México
E-mail: sahara@uaz.edu.mx

ORCID: https://orcid.org/0000-0001-7659-6697

Eduardo García Sánchez
Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"
E-mail: eduardogarciasanchez@gmail.com
ORCID: http://orcid.org/0000-0002-5219-4623

RESUMEN
En el presente trabajo, se presenta el diseño de un programa en Visual Studio 2005 implementando el Método Monte Carlo Annealing (MCA), para minimizar el funcional de la energía de Helmholtz para estudiar la transición de fase Isotrópica-Nemática. El programa se realizó en Visual Studio 2005 utilizando el lenguaje de programación C#, esto debido a que es un lenguaje orientado a objetos, de fácil interacción con bases de datos, múltiples funciones matemáticas y facilita la creación de gráficos, con esto, se permitió observar claramente los resultados arrojados por el programa. Además, al utilizar C# permite montar la aplicación sobre un servidor o Workstation, para que así, el programa pueda ser descargado desde internet y, además, pueda ser actualizado en tiempo real. En este mismo contexto, se utilizó Microsoft Access como gestor de la base de datos.

Palavras-chave: Monte Carlo Annealing, Cristales Líquidos, Isotrópico-Nemático.

1 INTRODUCCION

Los cristales líquidos (CL) [1-2] son sustancias que exhiben una fase de la materia que tiene características entre un líquido convencional y un cristal sólido, pueden fluir como un líquido pero las moléculas están orientadas como un cristal, además presentan birrefringencia (doble refracción de la luz producida por cristales minerales, pueden llegar a producir dos imágenes de un mismo objeto visto a través del cristal). Cuando están vistas debajo de un microscopio usando una fuente de la luz polarizada, diversas fases de cristal líquido parecerán tener una textura distinta. Cada remiendo en la textura corresponde a un dominio donde las moléculas del CL se orientan en una diversa dirección. La mayoría de los CL presentan polimorfismo o una condición donde más de una fase es observada (mesofases), entre las cuales, unas de las más importantes son la fase Isotrópica (I), en donde las moléculas no presentan orden orientacional ni orden posicional (presente en los gases y en los líquidos) y la fase Nemática (N), en donde las moléculas no poseen un orden posicional, pero tienen una tendencia de apuntar en promedio en la misma dirección que definen al campo director. Una de las transiciones más importante que presentan los CL es la transición I-N, la cual es utilizada para fabricar dispositivos electrónicos, entre los cuales destacan los indicadores electro-ópticos y las pantallas de CL. Tradicionalmente dicha transición de fase se efectúa por medio de funcionales de la densidad, Monte Carlo y diversos procesos de optimización y minimización, sin embargo, en el presente trabajo se llevara a cabo a través del método Monte Carlo Annealing. Es decir, El proceso de optimización realizará una serie de cálculos matemáticos que permitan efectuar la minimización de la energía a través del lenguaje de programación C # con Visual Studio 2005 basado en el método Monte Carlo Annealing (MCA), esto, para minimizar el funcional de la energía libre de Helmholtz para la transición de fase I-N [3].

El método Monte Carlo fue llamado así en honor del principado de Mónaco por ser la capital del juego de azar, fue inventado por John von Neumann y Stanislaw Ulam durante la segunda guerra mundial para mejorar la toma de decisiones en condiciones inciertas [4]. El método de Monte Carlo es un método no determinístico o estadístico numérico usado para aproximar expresiones matemáticas complejas y costosas de evaluar con exactitud. Por otro lado, el método de Monte Carlo Annealing es una herramienta de investigación y planeamiento, básicamente es una técnica de muestreo artificial, empleada para operar numéricamente sistemas complejos que tengan componentes aleatorios. Para ello son realizadas diversas simulaciones donde, en cada una de ellas, son generados valores aleatorios para el conjunto de variables de entrada y parámetros del modelo que están sujetos a incertidumbre. Tales valores aleatorios generados siguen distribuciones de probabilidades específicas que deben ser identificadas o estimadas previamente. El programa se realizará en Visual Studio 2005 utilizando el lenguaje de programación C#, esto debido a que es un lenguaje orientado a objetos, de fácil interacción con bases de datos, múltiples funciones matemáticas y que facilita la creación de gráficos, con esto,

permitirá observar claramente los resultados arrojados por el programa. Además, permitirá montar la aplicación sobre un servidor o workstation, y así, el programa podrá ser descargado desde internet y por otro lado, podrá ser actualizado en tiempo real. En este mismo contexto, se utilizará Microsoft Access como gestor de la base de datos porque es compatible con Visual Studio 2005 y permitirá almacenar los datos.

2 METODOLOGIA

En este trabajo se generó un programa en Visual Studio 2005 basado en el método Monte Carlo Annealing (MCA), el cual minimizará el funcional de la energía de Helmholtz para la fase Nemática e Isotrópica, en este, se reemplazarán valores al azar con el fin de minimizar la energía libre. Para esto se considerará inicialmente la restricción.

$$\int f(\theta)d\Omega = 2\pi\Delta\theta \sum_{i=1}^{c} f(\theta_i)\text{sen}\theta_i = 1 \qquad (1)$$

La energía libre de Helmholtz para esferocilindros rígidos uniaxiales está descrita de la siguiente manera:

$$\frac{A}{NkT} = \frac{\mu_0}{kT} - 1 + \ln C + \sigma(f) + C\rho(f) \qquad (2)$$

Aquí μ_0 representa al potencial químico estándar de las partículas a una temperatura T en un disolvente de potenciales químicos μ_0. La concentración de la densidad C = η (L / D) se escribe en términos de la fracción de empaquetamiento $\eta = NV_o / V$, para el modelo de esferocilindros rígidos formados por un cilindro de longitud L y diámetro semiesférico D, N es el número de partículas, V es el volumen total del sistema, y V_0 es el volumen del esferocilindro. Para determinar σ(f) y ρ(f) se utilizan las expresiones siguientes, que son funcionales de la función de distribución de partículas f(Ω):

$$\sigma(f) = \int f(\Omega)\ln(4\pi f(\Omega))d\Omega \qquad (3)$$

y

$$\rho(f) = 4/\pi \int |\sin\gamma| f(\Omega)f(\Omega')d\Omega d\Omega' \qquad (4)$$

En estas expresiones γ es el ángulo entre los dos vectores que describe la orientación molecular. Aquí se considera que el volumen excluido entre dos esferocilindros es $2(L/D)^2 \text{ sen } \gamma$; ya que las demás contribuciones al volumen excluido son más pequeños.

Cada orientación Ω comprende dos ángulos, un ángulo polar θ y un ángulo acimutal Φ. Así σ(f) representa una doble integral y ρ(f) una integral cuádruple. Sin embargo, el esferocilindro posee simetría cilíndrica sobre su eje molecular, y, por tanto, la función de distribución orientacional depende del ángulo polar θ. Las funcionales σ(f) y ρ(f), por lo tanto, pueden ser descritas por las ecuaciones:

$$\sigma(f) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} f(\theta) \ln(4\pi f(\theta)) \sin\theta \, d\theta d\varphi \tag{5}$$

y

$$\rho(f) = 4/\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |\sin\gamma| f(\theta) f(\theta') \sin\theta \, d\theta d\varphi \sin\theta' \, d\theta' d\varphi' \tag{6}$$

Debido que f(θ) no depende de Φ, la dependencia acimutal de σ(f) puede ser integrada dando un factor de 2π. En el caso de ρ(f) la posición de la primera molécula con respecto al ángulo acimutal es arbitraria, sin embargo, el valor de γ depende del segundo ángulo acimutal. En consecuencia, el funcional puede ser escrito como:

$$\rho(f) = 2\pi \int_0^{\pi} f(\theta) \ln(4\pi f(\theta)) \sin\theta \, d\theta \tag{7}$$

y

$$\sigma(f) = 8 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} |\sin\gamma| f(\theta) f(\theta') \sin\theta \, d\theta \sin\theta' \, d\theta' d\varphi' \tag{8}$$

Es necesario separar la dependencia acimutal de dependencia senγ del ángulo polar. Esto se puede hacer, utilizando la expansión de Legendre de cosγ,

$$\sin\gamma = \sum_{n=0}^{\infty} d_n Pn(\cos\gamma) \tag{9}$$

Donde d_n son los coeficientes de expansión y P_n son los polinomios Legendre utilizando el teorema de adición a la serie Legendre, se tiene que

$$P_n(\cos\gamma) = P_n(\cos\theta) P_n(\cos\theta') + 2 \sum_{m=1}^{n} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos\theta) P_n^m(\cos\theta') \cos m\varphi' \tag{10}$$

Después de integrar con respecto de Φ y evaluar en los limites Φ entre 0 y 2π, la dependencia acimutal se presenta como un factor de 2π, y la dependencia simplemente se convierte en una expansión de los polinomios Legendre.

$$k(\theta,\theta') = \int_0^{2\pi} \sin\gamma \, d\varphi' = 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} d_n \, P_n(\cos\theta) P_n(\cos\theta') \qquad (11)$$

Ahora los funcionales dependen sólo de los ángulos polares. Formalmente, la expresión de la energía libre de Helmholtz puede reducirse al mínimo con respecto a las variaciones de f(θ), y el resultante de la ecuación integral nos da,

$$\ln(4\pi f(\theta)) = \lambda - \frac{8C}{\pi} \int \text{sen}\,\gamma\,(\Omega,\Omega') f(\theta') d\Omega' \qquad (12)$$

Dicha expresión puede resolverse numéricamente por una serie de métodos. Aquí λ es el multiplicador indeterminado de Legendre consiste en expandir el Kernel $|\text{Sen}\,\gamma|$ y a f(θ) como separador una serie de Legendre [5,6] y con esto, la ecuación (12) se resuelve con respecto a los coeficientes de expansión desconocidos utilizando una técnica iterativa. Otro método fue utilizado por Lekkerkerker et al. [7], es idéntico al primero, excepto que en lnf(θ) es una serie de Legendre. El tercer método consiste en una ecuación exponencial de los ángulos polares [8]; que es minimizado utilizando un esquema iterativo. En lugar de utilizar cualquiera de las anteriores técnicas, para determinar el mínimo de la energía libre funcional, usamos el método de Monte Carlo Annealing (MCA).

En la técnica MCA, se propone que la función de distribución orientacional discreta por partícula f(θ) pueda ser descrita en términos de un histograma en θ con c columnas de igual anchura Δθ. La energía libre primero es calculada para una distribución isotrópica, en donde todas las columnas tienen una altura 1/(4π). El siguiente paso consiste en realizar cambios al azar de f(θ) asegurándose que f(θ) permanezca normalizada de acuerdo a la restricción:

$$\int f(\theta) d\Omega = 2\pi\Delta\theta \sum_{i=1}^{c} f(\theta_i)\text{sen}\theta_i = 1 \qquad (13)$$

La restricción puede ser satisfecha cambiando al azar dos columnas del histograma, realizando un cambio positivo al azar + |D| en la altura de una columna y un cambio negativo - |D| de igual magnitud en otra. |D| es un número al azar entra 0 y D_{max}. La integral en la expresión de la energía libre, se convierte en una sumatoria expresada de la manera siguiente:

$$\sigma(f) = 2\pi\Delta\theta \sum_{i=1}^{c} f(\theta_i) \ln(4\pi f(\theta_i)) \sin(\theta_i) \qquad (14)$$

y

$$\rho(f) = 16\pi(\Delta\theta)^2 \sum_{i=1}^{c}\sum_{j=1}^{c} k(\theta_i\ )\, f(\theta_i, \theta_j)\, f(\theta_i)\, \sin(\theta_i)\, \sin(\theta_j) \qquad (15)$$

Donde, después de realizar un cambio al azar en f(θ), se procede a calcular el cambio en la energía libre que este dado por Δ(A/**N**kT)=[A(nueva) – A vieja)]/**N**kT. Siguiendo un procedimiento estándar Monte Carlo, la nueva distribución f(θ) es aceptada si Δ(A/kT) ≤ 0; esto significa que el sistema tiende a un estado de mínima energía y, si Δ(A/**N**kT) ≥ 0, para aceptar la nueva distribución, f(θ) se compara con el número al azar (ξ) generado uniformemente entre 0 y 1 con el pseudo factor de Boltzmann exp[-Δ(A/**N**kT)/T^A], donde T^A es la temperatura annealing, la cual es disminuida lentamente conforme la rutina Monte Carlo converge al mínimo en su energía. Si ξ es menor que el pseudo factor de Boltzmann la nueva distribución es aceptada. Se puede observar que esta última condición permite aceptar cambios para valores de energía positivos. Esto se hace con el fin de que el sistema, desde el inicio, no quede atrapado en un mínimo local de la energía libre. Es de gran ayuda comenzar con un valor relativamente grande para el máximo cambio en la altura de la columna $\mathbf{D}_{max}$ y disminuir gradualmente este valor conforme el procedimiento annealing converge.

Una vez que la energía libre es minimizada, la presión, el potencial químico y la ecuación de estado para la parte nemática, pueden ser calculados por medio de las siguientes relaciones termodinámicas estándar:

$$P = -(\partial A/\partial V)_{NT} \qquad (16)$$

y

$$\mu = (\partial A/\partial N)_{VT} \qquad (17)$$

Así, por nuestro sistema a nivel del segundo coeficiente virial, se tiene:

$$\frac{P\upsilon_0}{kT} = C(1 + C\rho(f)) \qquad (18)$$

y

$$\frac{\mu - \mu^0}{kT} = \ln C + \sigma(f) + 2C\rho(f) \qquad (19)$$

Usando las expresiones de las propiedades de condiciones termodinámicas dimensionales para la fase de transición Isotrópica-Nemática (I-N) pueden ser resueltos T^I=T^N, P^I=P^N y μ^I=μ^N. Es útil observar que σ(f)=0 y ρ(f)=1 en la fase isotrópica, el Annealing en consecuencia, no tiene que ser utilizado para la Fase Isotrópica. Es conveniente describir el ordenamiento orientacional en la fase anisotrópica lo cual se evalúa utilizando el parámetro de orden P_2.

$$P_2 = \int f(\theta)\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right) d\Omega \qquad (20)$$

La representación discreta de f (θ) se puede escribir con:

$$P_2 = 2\pi\Delta\theta \sum_{i=1}^{c} f(\theta_i)\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)\sin\theta_i \qquad (21)$$

3 IMPLEMENTACION Y RESULTADOS

El procedimiento para obtener datos del modelo teórico se puede apreciar en la Figura 1 y es el siguiente. En la primera etapa, se introducen los valores de las variables leg, hnist, eta, nmove, nsub, icont, nons, fmax, rld y t, con los cuales se generan los valores θ_i, que nos permiten evaluar f(θ). En una segunda etapa se selecciona la fase con la cual se hará el estudio, ya sea fase isotrópica (f(θ)=1/4π) o fase Nemática (f(θ) propuesta por Onsager), con estos valores de f(θ) se determinan parámetros esenciales para estudiar la transición Isotrópico-Nemático que son sigmaf, rhof, y fexold. En la tercera etapa se calcula la subrutina Monte Calo Annealing. En la cuarta etapa se determinan las propiedades que nos permiten analizar la transición. En la quinta etapa se aplican las condiciones de equilibrio que implica tener una igualdad de presiones y temperaturas para al final determinar p2ave y press.

En la figura 2 se describe el diagrama de flujo del proceso del método Monte Carlo Annealing. Dicho diagrama consta de las siguientes etapas. En la primera etapa se toman los valores de las variables sigmaf(i), rhof(i), fexold(i), θ_i y f(θ_i), los cuales fueron generados en procedimientos anteriores. En una segunda etapa se seleccionan 2 números al azar i y k, enseguida se hace una comparación entre fexold (j) y fexold (k), si son diferentes de 0, se genera otros dos números al azar y se efectúa el proceso de manera iterativa, hasta que la diferencia entre fexold (j) y fexold (k) se acerca a 0 con un error de 10^{-6}, cumpliéndose esta restricción, se evalúan los parámetros finales.

Figura 1. Diagrama de flujo del Monte Carlo Annealing.

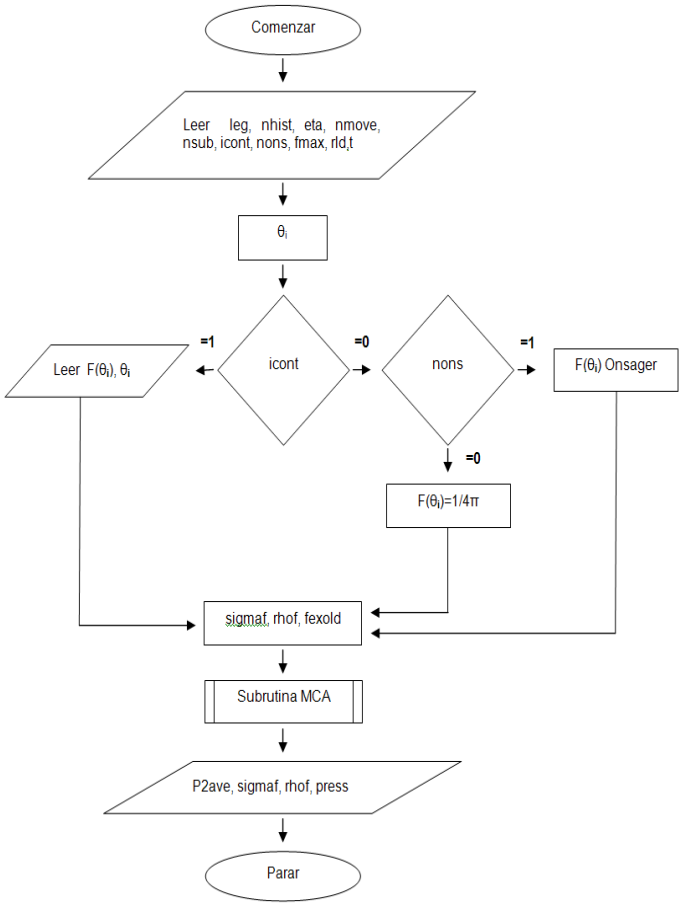
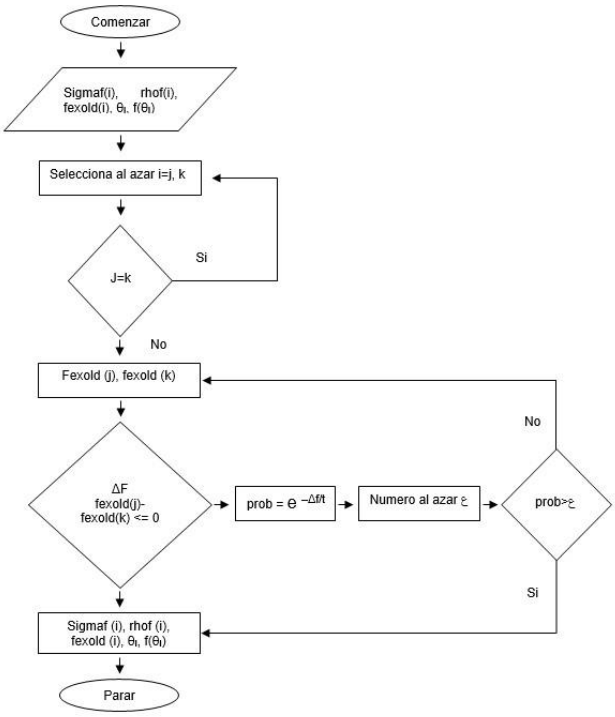


Figura 2. Diagrama de flujo de la subrutina MCA.



De manera inicial, el estudio para la fase Isotrópica, se hizo mediante una corrida inicial con 1000 ciclos, para eta=0.6586, icont=0 y nons= 0, el resultado se muestra en la figura 3, como se pueden apreciar, los valores para la función son constantes, lo cual está de acuerdo a la consideración de que en la fase Isotrópica esta función es constante. Al aplicar el Método Monte Carlo Annealing, es necesario efectuar varias corridas y efectuar análisis del comportamiento de la función f(θ). En la figura 4 se muestra una segunda corrida con 1000 ciclos, con eta=0.6586, icont=1 y nons= 0, como se puede apreciar el comportamiento se mantiene ya que la función sigue siendo constante y presentan los mismos valores, por lo que ya no es necesario seguir efectuando más corridas.

Figura 3. Gráfica de la corrida inicial en la fase Isotrópica.

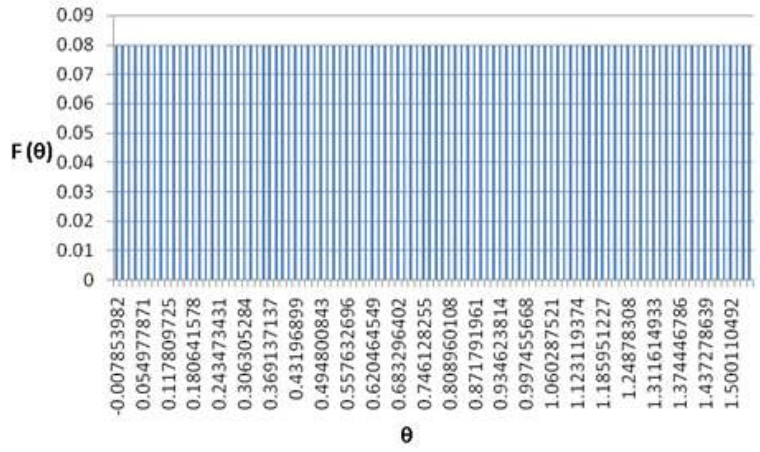
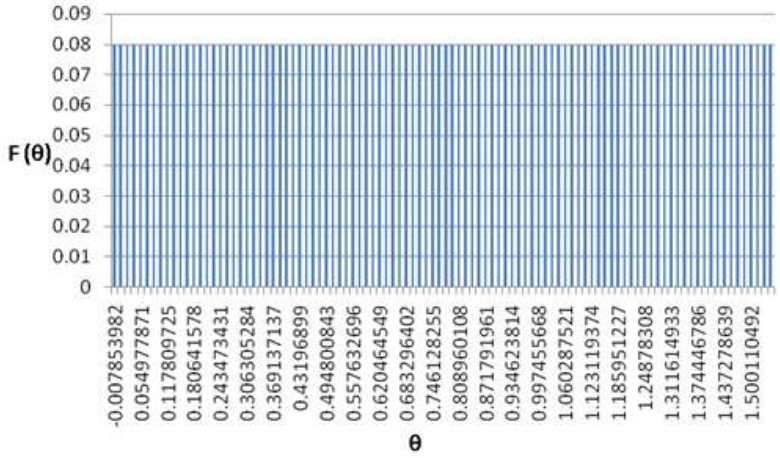


Figura 4. Gráfica de la segunda corrida en la fase Isotrópica.



De manera inicial, el estudio para la fase nemática, se hizo mediante una corrida inicial con 1000 ciclos, con eta=0.84, icont=0, nons= 1 y el resultado se muestra en la Figura 5, como se pueden apreciar, los valores de la función describen un comportamiento de tipo Gaussiano. Al aplicar el método Monte Carlo Annealing, es necesario efectuar varias corridas y efectuar análisis en el comportamiento de la función f (θ). En la figura 6 se muestra una segunda corrida con 1000 ciclos,

con eta=0.84, icont=1, nons= 1, como se puede apreciar el comportamiento se mantiene, ya que la función sigue presentando un comportamiento tipo Gaussiano, se pudiera pensar que con esta etapa es suficiente en lo que respecta al comportamiento de la función, pero se requieren más corridas dependiendo del comportamiento de las diferentes variables incluidas en el programa.

Figura 5. Gráfica de la corrida inicial en la fase Nemática.

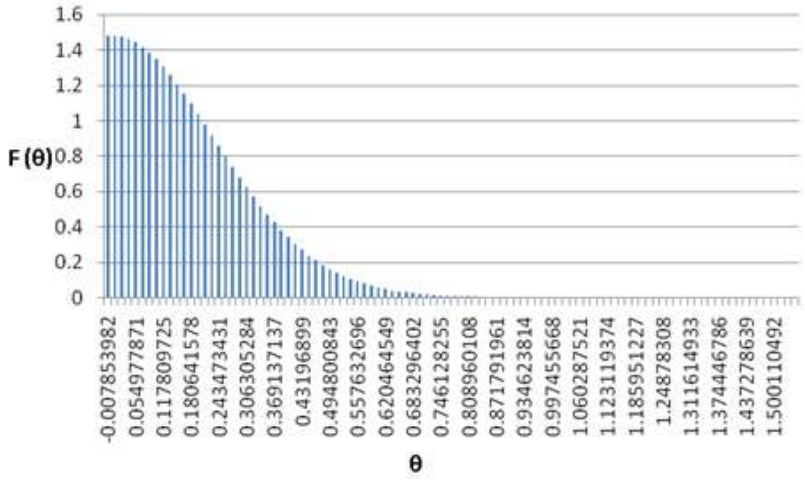
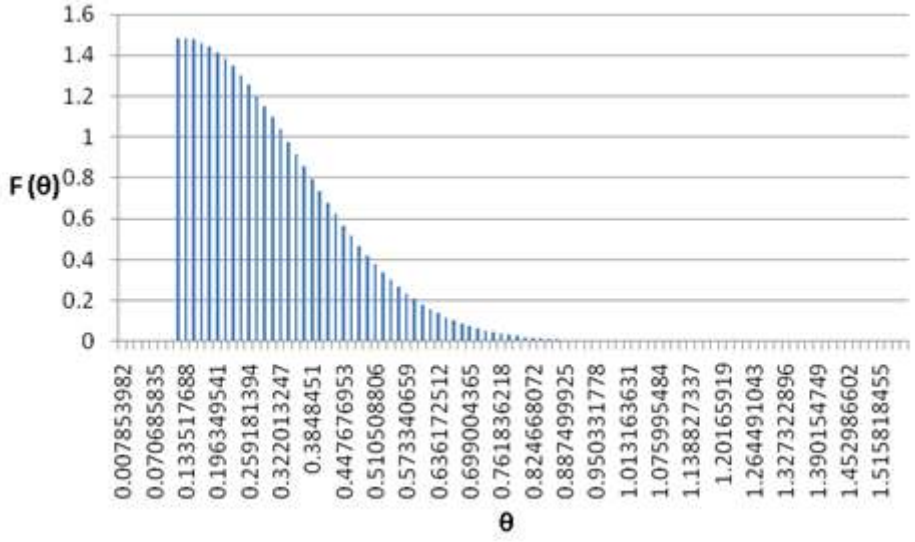


Figura 6. Gráfica de la segunda corrida en la fase Nemática.



En esta sección se procedió a efectuar la optimización del proceso de simulación en la fase Isotrópica con respecto a parámetros esenciales en desarrollo teórico, específicamente parámetro de orden y presión reducida. En la figura 7 se puede observar que conforme se efectúan diferentes números de ciclos (entre 1000 y 4000), el valor que se obtiene para el parámetro de orden es constante, lo que nos llevaría a concluir que con 1000 ciclos es suficiente para calcular dicho parámetro. En la figura 8 se muestra que el comportamiento anterior se mantiene, ya que conforme se incrementa el

número de ciclos, el valor de la presión reducida se mantiene constante, por lo que se puede concluir que con 1000 ciclos son suficientes para determinar el valor de la presión para la fase Isotrópica.

Figura 7. Gráfica que presenta los parámetros de orden en la fase Isotrópica.

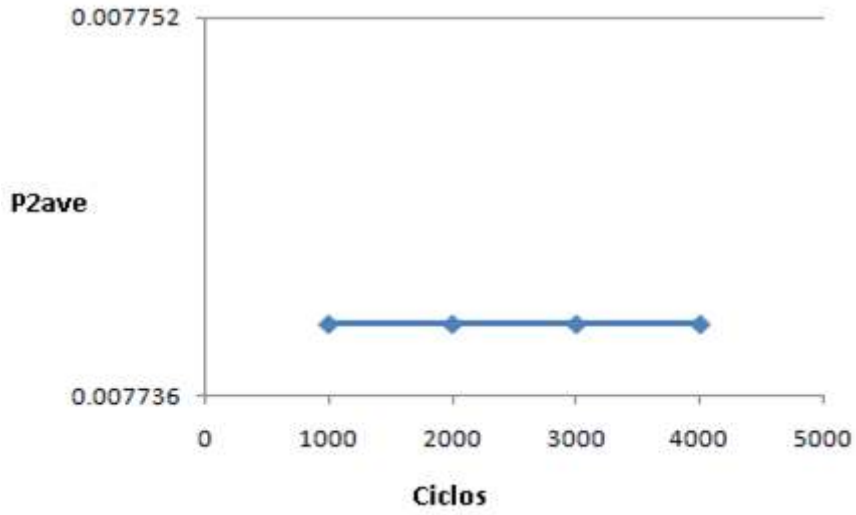
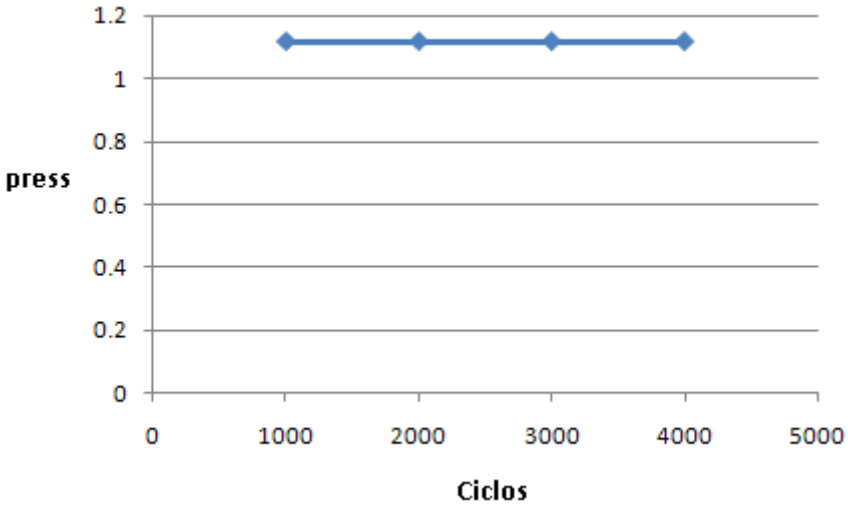
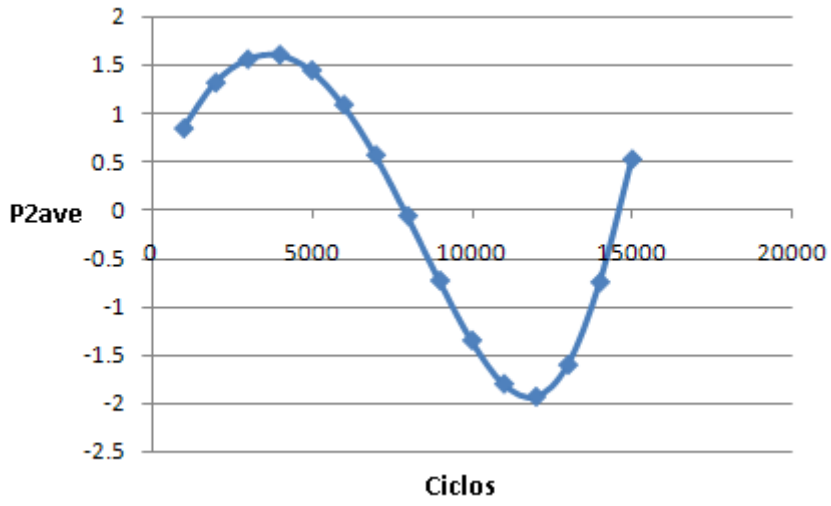


Figura 8. Gráfica que presenta la presión en la fase Isotrópica.



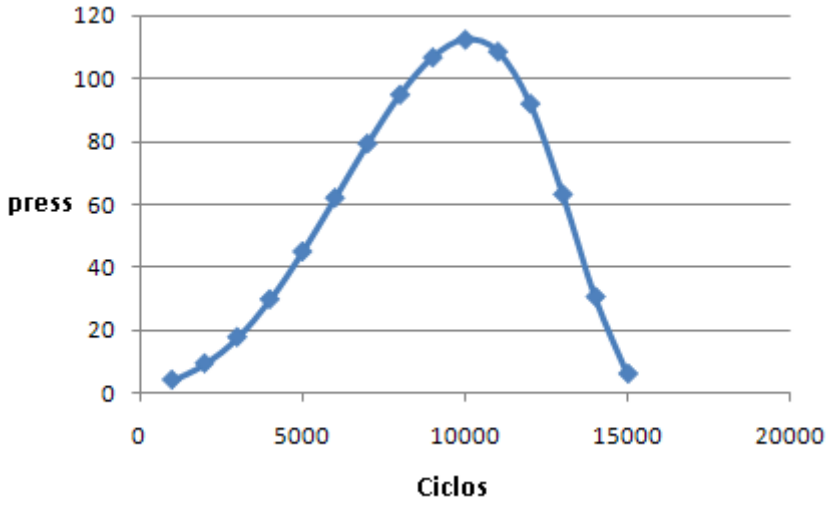
En la figura 9 se puede observar que conforme se efectúan diferentes números de ciclos (entre 1000 y 15000) el valor que se obtiene para el parámetro de orden no es constante, pero tiene un comportamiento cíclico o periódico, cualitativamente parecido a la gráfica de una función seno o coseno, suponiendo que se realicen más ciclos se esperaría que dicho comportamiento se mantenga, por lo que se sugiere considerar el valor para el número de ciclos correspondiente a un valor entre 0.5 y 0.6, que caracteriza al valor que presentaría el parámetro de orden en la fase Nemática, esto nos llevaría a concluir que con 15000 ciclos es suficiente para calcular dicho parámetro.

Figura 9. Gráfica que presenta el parámetro de orden en la fase Nemática.



En la figura 10 se puede observar que conforme se efectúan diferentes números de ciclos (entre 1000 y 15000) el valor que se obtiene para la presión reducida no es constante, pero se tiene un comportamiento tipo Gaussiano, suponiendo que se realicen más ciclos se esperaría que dicho comportamiento se mantenga, por lo que se sugiere considerar el valor para el número de ciclos correspondiente a un valor entre 0.5 y 0.6 en el parámetro de orden, que caracteriza al valor que presentaría en la fase Nemática, esto nos llevaría a concluir que con 15000 ciclos es suficiente para calcular dicho parámetro.

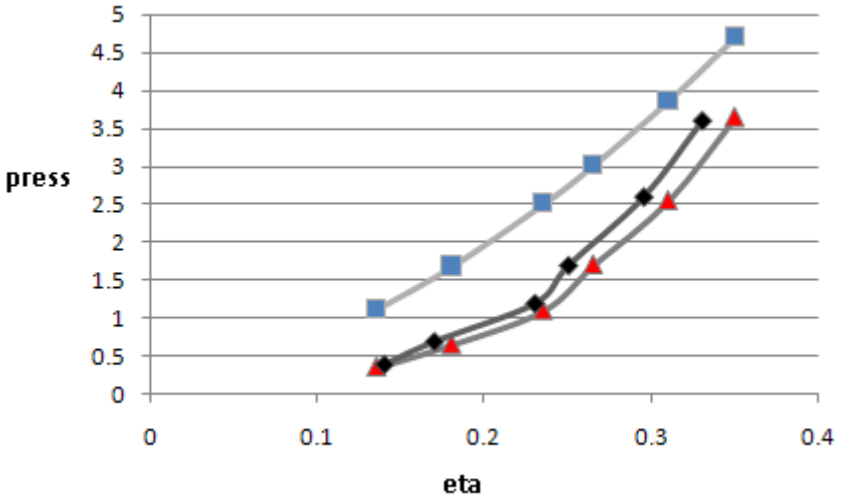
Figura 10. Gráfica que presenta la presión en la fase Nemática.



Como se puede apreciar en la Figura 11, la línea azul con cuadros representa los datos obtenidos por medio del Método Monte Carlo Annealing con la teoría descrita en este trabajo, la línea roja con triángulos representa la ecuación de estado de Boublik [10] que se encuentra debajo de los resultados

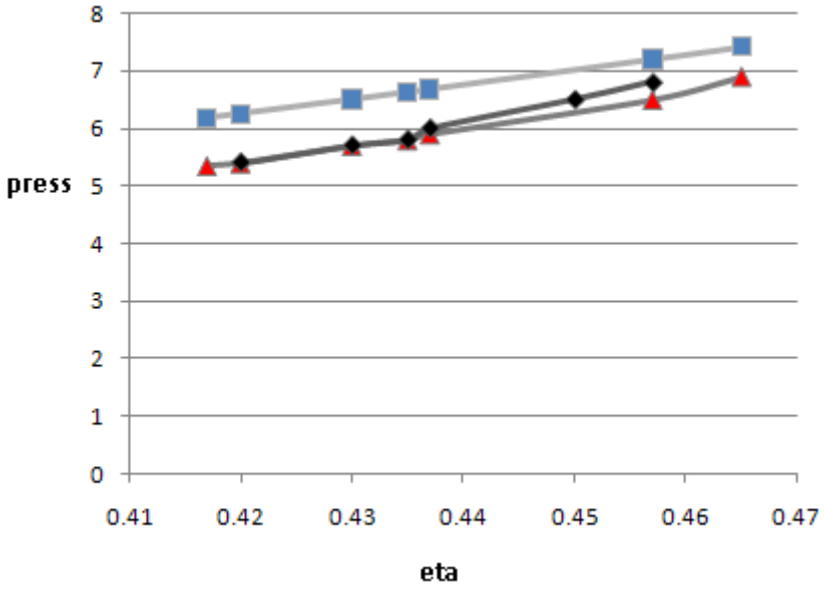
anteriores de la línea azul, esto era de esperarse ya que dicha ecuación de estado presenta términos adicionales en la energía libre de Helmholtz. En la línea negra con rombos se presentan los resultados de datos de simulación tipo Monte Carlo y se encuentran situados entre las 2 predicciones anteriores, que como se puede apreciar cualitativamente predicen el comportamiento isotrópico. Cuantitativamente no predicen dicho comportamiento, en virtud de que los métodos utilizados no presentan la misma teoría, pero para conocer que método es más eficiente, sería necesario efectuar una comparación de estos resultados con datos experimentales.

Figura 11. Gráfica de comparación de resultados de la fase Isotrópica para L/D=5.



Como se puede apreciar en la Figura 12, la línea azul con cuadros representa los datos obtenidos por medio del método Monte Carlo Annealing con la teoría descrita en este trabajo, la línea roja con triángulos representa la teoría de Boublik [10] que se encuentra abajo de los resultados anteriores de la línea azul, debido a que la ecuación de estado presenta términos adicionales en la energía libre de Helmholtz. En la línea negra con rombos se presentan los resultados de datos de simulación tipo Monte Carlo, se encuentran situados entre las 2 predicciones anteriores, que como se puede apreciar cualitativamente predicen el comportamiento nemático. Al igual que el caso isotrópico, cuantitativamente no predicen dicho comportamiento, en virtud de que los métodos utilizados no presentan la misma teoría, pero para conocer que método es más eficiente, sería necesario efectuar una comparación de estos resultados con datos experimentales.

Figura 12. Gráfica de comparación de resultados de la fase Nemática para L/D=5.



En base a los resultados obtenidos en la figura anterior, y con el objetivo de mejorar las predicciones del método Monte Carlo Annealing, se procedió a ampliar valores para el número de ciclos para la fase Nemática, esto en base a que el valor de la presión reducida está fuertemente relacionada con respecto al número de ciclos, esto se puede apreciar en la tabla 1.

Tabla 1. Resultados teóricos del Monte Carlo Annealing.

eta=0.417						
P2ave	Sigmaf	Rhof	Press	fmax	t	corridas iniciales
0.84558381	1.91914897	0.49520798	4.2377805	0.01	0.001	1000
1.31832009	3.64E+00	1.69937174	9.47255133	0.01	0.0001	2000
1.56040795	5.09E+00	3.61302272	17.7916227	0.01	0.00001	3000
1.60699985	6.49E+00	6.37751904	29.8095102	0.001	0.000001	4000
1.4464133	7.80526163	9.85970556	44.9473585	0.001	0.0000001	5000
1.08978332	9.02895675	13.7768706	61.9761564	0.001	0.00000001	6000
0.57021451	10.1472731	17.7420551	79.2137053	0.0001	1E-09	7000
-0.05957412	11.1532064	21.3179623	94.7589786	0.0001	1E-10	8000
-0.72905386	12.0404485	24.0355312	106.572862	0.0001	1E-10	9000
-1.34769893	12.7667729	25.3324253	112.210753	0.00001	1E-11	10000
-1.79752922	13.1481736	24.4590242	108.413882	0.00001	1E-11	11000
-1.93097046	12.7237745	20.6552441	91.8779936	0.00001	1E-11	12000
-1.60162024	10.8299541	14.0378568	63.1107219	0.000001	1E-12	13000
-0.7461032	7.13804244	6.56099962	30.6071416	0.000001	1E-12	14000
0.52568792	2.33555282	0.9431638	6.18514524	0.000001	1E-12	14001
0.52568792	2.33555282	0.9431638	6.18514524	0.000001	1E-12	14002
1.0369489	2.73351852	0.95328076	6.22912596	0.000001	1E-12	14003

En la tabla 1 se puede apreciar que para 14001 ciclos se tiene un valor de 0.52568792 en el parámetro de orden, valor característico de moléculas en la fase Nemática, analizando dicha tabla se puede observar que para 14003 ciclos el parámetro de orden es muy alto, por lo que se puede concluir que para 14001 ciclos se tiene la mejor predicción para el valor de la presión reducida.

4 CONCLUSIONES

Se encontró en este trabajo, que, para el nivel de concurrencia requerido, se tiene para un valor nhist igual a 100 columnas entre $\theta=0$ y $\pi/2$ y son suficientes para describir $f(\theta)$ durante la minimización de la energía libre de Onsager. Para la temperatura Annealing se toma un valor inicial $T=1x10^{-3}$ para comenzar la minimización y un valor final de $T=1x10^{-12}$ cuando la solución a convergido en 2 decimales. El valor inicial conveniente para $fmax=1x10^{-2}$, ya que permite cambios en $f(\theta)$, con el propósito de explorar grandes áreas de intervalos de la energía libre. El método Monte Carlo Annealing usualmente toma entre 12000 y 15000 ciclos para convergir.

En conclusión, para determinar las propiedades de la transición de fase Isotrópico-Nemático se tomarán 1000 ciclos para determinar las propiedades en la fase isotrópica y de 14000 a 15000 ciclos para la fase Nemática, con la restricción de que el valor para el parámetro de orden debe estar entre 0.5 y 0.6. Este caso se analizó el comportamiento en la transición para el caso particular L/D=5 teniendo una predicción adecuada de dicha transición de fase.

REFERENCIAS

F. Reinitzer (1888), Beiträge zur Kenntniss des Cholesterins, Monatsh. Chem. 421-441. https://doi.org/10.1007/BF01516710

Sydney T. Bowden, 1950, The Phase Rule and Phase Reactions Theoretical and Practical, MacMillan and Co., Limited st. Martin's; Street London.

Cristales Líquidos, http://www.uam.es/personal_pdi/ciencias/evelasco/ doctorado04-05/Cristales _Liquidos1.pdf, Consultado el 22 de agosto de 2007.

IBM, ¿Que es la simulación Monte Carlo?, Disponible en https://www.ibm.com/mx-es/topics/monte-carlo-simulation, Consultado el 25 de julio de 2024.

G. Lasher (1970), Nematic ordering of hard rods derived from a scaled particle treatment, J. Chem. Phys. 53, 4141-4146. https://doi.org/10.1063/1.1673914

K. Lakatos (1970), On the statistics of a three-dimensional gas of a long thin rods, J. Stat Phys. 2, 121-136. https://link.springer.com/article/10.1007/BF01009734

H. N. W. Lekkerkerker, Ph. Coulon, R. van der Haegen and R. Deblieck (1984), On the isotropic-liquid crystal phase separation in a solution of rodlike particles of different lengths, J. Chem. Phys. 80, 3427-3433. https://doi.org/10.1051/jphyscol:1985307

J. Herzfeld, A. E. Berger and J. Wingate (1984), A highly convergent algorithm for computing the orientation distribution functions of rodlike particles, Macromolecules 17, 1718-1723. https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ma00139a014

Onsager, L. (1949). The effects of shape on the interaction of colloidal particles, Ann. N. Y. Acad. Sci. 51, 627-659. https://doi.org/10.1111/j.1749-6632.1949.tb27296.x

T. Boublik and I. Nezbeda (1986), P-V-T behavior of hard body fluids. Theory and experiment. Collect. Czech. Chem. Commun. 51, 2301-2432. https://doi.org/10.1135/cccc19862301