

Comentarios sobre la Tarea #3

Ana Gabriela Carretas Talamante

23 de marzo de 2018

Actividad 1

Link para mostrar el código: T3-Act1

En esta actividad metimos por primera vez una subrutina para mover a las partículas del programa. Aunque no lo hacíamos con un algoritmo que evitara traslapes, podemos ver cómo sin las condiciones periódicas las partículas escapan de la caja. La concentración inicial y la final difieren en gran medida.

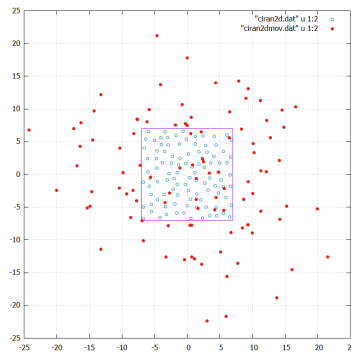


Figura 1: Partículas tras moverse sin condiciones periódicas.

Actividad 2

Link para mostrar el código: T3-Act2

La diferencia con la actividad anterior es el poner las líneas con las condiciones periódicas. Me di cuenta qué tan importantes son esas líneas que parecen hasta cuchareadas en las simulaciones que realizamos. La concentración vuelve a ser constante con estas condiciones.

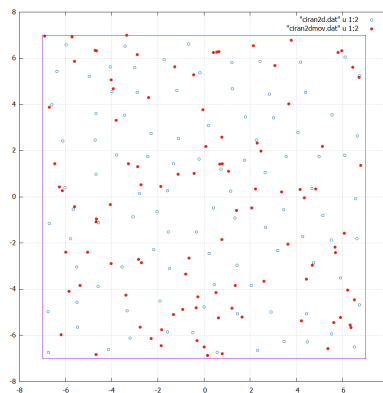


Figura 2: Partículas tras moverse con condiciones periódicas.

Actividad 3

Link para mostrar el código: T3-Act3

Al principio pensé que era un error, pero lo que hacen las condiciones periódicas es forzar a la partícula que se sale de la caja a entrar por el otro extremo de la celda, así como el movimiento de Pac-Man. Y si uno todas las posiciones con líneas se ve bien dramático si seguimos el movimiento de las dos trazadoras.

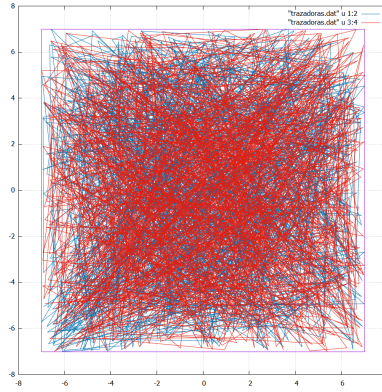
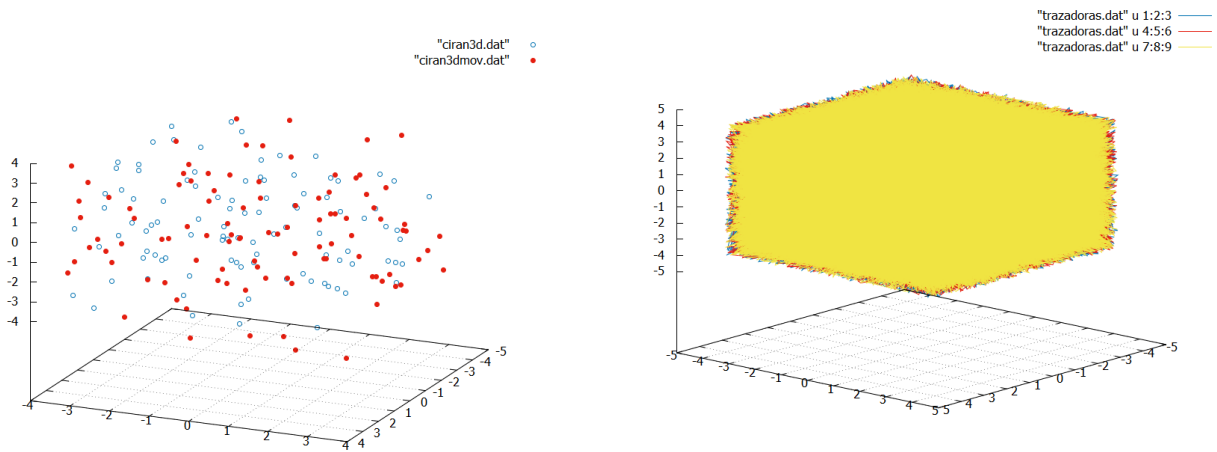


Figura 3: Partículas trazadoras tras moverse con condiciones periódicas.

Actividad 4

Link para mostrar el código: T3-Act4

Ajusté los parámetros para que el código de la actividad anterior fuera para tres dimensiones. Lo que tiene de especial esta actividad es que con esta comencé a reformar todos mis códigos con el uso de subrutinas. Actualicé todas las actividades de esta tarea con formato de subrutinas, y dejé listas las configuraciones iniciales para poder utilizarlas más adelante al hacer el esqueleto completo para simulaciones.



(a) Configuración inicial y final aleatoria 3D.

(b) “Seguimiento” de 3 trazadoras con condiciones periódicas.

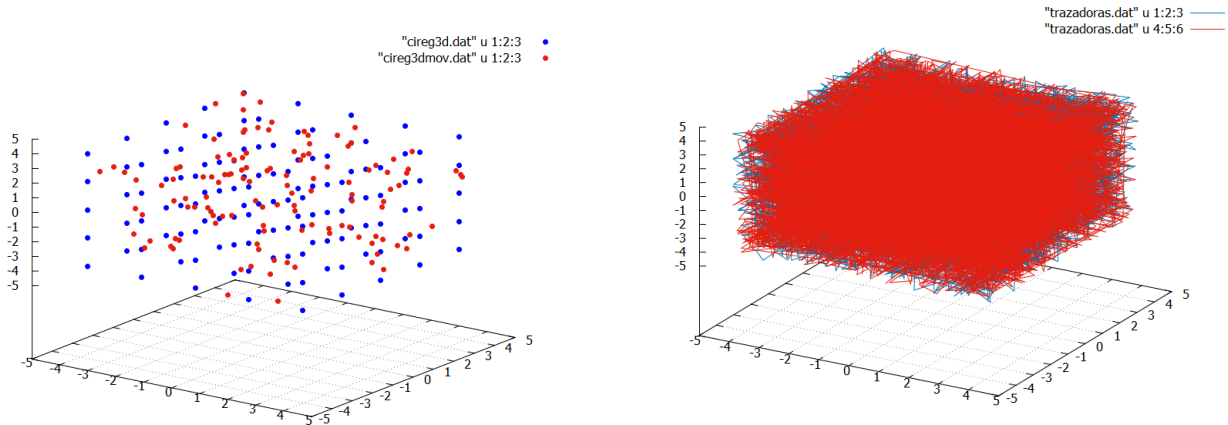
Figura 4: Probando el movimiento de partículas en 3D.

Actividad 5

Link para mostrar el código: T3-Act5

Ahora, del código anterior, cambié la subrutina de configuración inicial a una regular 3D que rescaté del primer portafolio. Las partículas trazadoras ahora no se eligieron arbitrariamente, sino que, por la forma en que mi código acomoda las partículas agarré las etiquetadas a mi conveniencia. La de la orilla fue la primera, porque mi código empieza a acomodar en el extremo positivo en los tres ejes; la del centro simplemente fue la $N/2$.

Con las condiciones iniciales sugeridas ($N=125$, $NSTEP=1000000$, $dmax=1.0$) mi computadora tardó demasiado en hacer los movimientos de partículas. Por lo que corté el número de configuraciones a 1000.



(a) Configuración inicial y final regular 3D.

(b) “Seguimiento” de 2 trazadoras con condiciones periódicas.

Figura 5: Probando el movimiento de partículas en 3D.

Actividad 6

Link para mostrar el código: T3-Act6

Esta actividad la realicé tiempo después de haber abordado el esqueleto de MonteCarlo, por lo que el aprendizaje sobre el cálculo de las energías realmente lo tuve al hacer las subrutinas para el esqueleto. Al ser un código no tan monstruoso, pude hacer que corriera un super loop para la concentración reducida, con un costo alto. Al tener una configuración inicial aleatoria sin traslapes, la concentración máxima que me permitió mi algoritmo es la de 0.63. Después descubrí que podía poner una condición para iniciar con una regular pasando esas concentraciones, pero aquí no viene esa consideración.

Las primeras corridas fueron sin el algoritmo de montecarlo (con los movimientos de las actividades anteriores). Pero luego hice al cambio para tener mejor referencia de lo que debía valer la energía potencial, y tuve el problema de que mi código ya no jala.

Esta actividad está pendiente.