

Comentarios sobre la Tarea #2

Ana Gabriela Carretas Talamante

Actividad 1

Link para mostrar el código: T2-Act1

La función que utilicé para generar números aleatorios entre 0 y 1 fue `rand()`; no me ha dado problema (aún).

La guía presentada en clase fue de mucha ayuda para poder visualizar mejor el algoritmo que se tenía que hacer para esta actividad. Le puse un loop para que, dado un número de frijoles (partículas) inicial, el programa se encargara de hacerlo crecer, hasta que llegara a un valor $\approx 10^7$. Con el mayor número de partículas, el valor de $\pi_{est} \approx 3.14$; se necesita una mayor cantidad de partículas para que se pueda tener un valor para pi con mayor precisión.

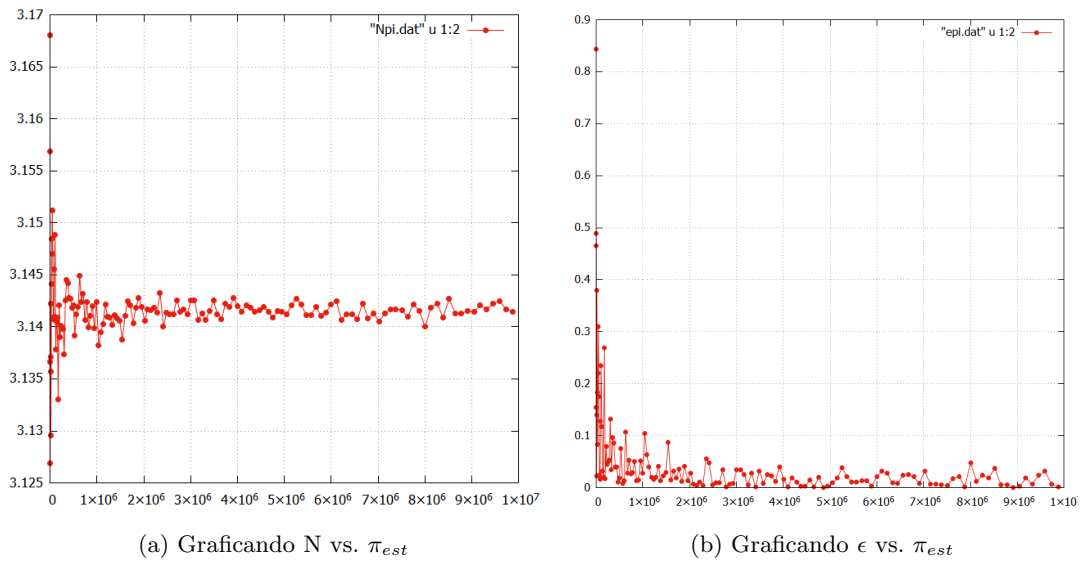


Figura 1: Gráficas obtenidas para $N=1000$.

Actividad 2

Link para mostrar el código: T2-Act2

En esta actividad lo complicado fue encontrar una manera de hacer arrays con longitud que dependía de una variable de entrada (dada por el usuario). Gracias a la sugerencia de Edgar pude poner los vectores necesarios para hacer el programa. Eran necesarios porque con ellos podía comparar posiciones para evitar traslapes, como en el código que se nos mostró en clase. También se me pasó convertir a la N en real cuando calculaba la longitud de la celda, y me redondeaba el valor hasta que lo corregí. Fuera de eso, no tuve problemas con hacer el programa.

Las gráficas obtenidas para esta actividad están en la subsección 0.1.

Actividad 3

Link para mostrar el código: T2-Act3

Como fue prácticamente la actividad 2 pero sin un loop, no tengo mucho que comentar sobre el código. Pero ocurrió algo interesante al momento de estar probando con las condiciones de concentración de la actividad 2, y fue que no terminó de acomodar las partículas con la concentración de 0.8. Así que después de una discusión en clase, nos pusimos a explorar hasta qué concentración podía acomodar las partículas aleatoriamente este código (en un tiempo razonablemente no tan largo), y fue hasta la concentración de 0.72. A concentraciones mayores quizá si se puedan acomodar con un tanto menos de tiempo, pues depende de la manera en que acomode a las primeras, y como es aleatorio no tengo manera de predecir si una vez se tardará más o menos. Lo que si puedo concluir es que no es una manera muy eficiente de acomodar a las partículas aleatoriamente, porque la fracción en volumen obtenida a partir de esa concentración (0.62) está alejada del valor del RCP para discos duros (0.82), y no debería tener problema en acomodar a las partículas. Así que, habrá que manejarse otra manera de acomodar partículas aleatoriamente.

Las gráficas obtenidas para esta actividad están en la subsección 0.2.

Actividad 4

Link para mostrar el código: T2-Act4

Como esta actividad era muy parecida a la actividad 3 de la primera tarea, básicamente modifiqué aquél código, pidiendo la concentración reducida en vez de la longitud de la celda, además de agregarle otro loop anidado para la dimensión que faltaba.

También me di cuenta que estaba pidiendo de variable de entrada un número total de partículas... ¡pero en realidad estaba acomodando $N*N*N$ en el arreglo cúbico! (Esto pasó cuando ingresé “500 partículas”). Entonces como modificación le puse una condicional que pide ingresar un número total de partículas que tuviera raíz cúbica exacta, para que realmente fuera un arreglo cúbico regular.

Las gráficas obtenidas para esta actividad están en la subsección 0.3.

Actividad 5

Máxima fracción en volumen (close packing)

Cuando se planea empaquetar esferas duras de un mismo diámetro, hay distintas maneras de acomodarlas en un espacio 3D. Si suponemos que metemos a una caja una cantidad N de esferas, dependiendo de la forma del arreglo se puede tener diferente fracción en volumen ocupado por las esferas, en relación al volumen total de la caja.

Basándose en su simetría se denominan: empaquetamiento cúbico centrado en caras (CCC) y el empaquetamiento hexagonal compacto (HC). Ambos se basan en la disposición de las esferas en los vértices de triángulos; se diferencian en la forma en que las celdas se apilan unas sobre otras. En ambos retículos cada esfera tiene doce vecinos. En los dos casos hay un hueco rodeado por seis esferas (disposición octaédrica) y dos pequeños huecos rodeados por cuatro esferas (disposición tetraédrica) [1].

Para un arreglo regular de esferas duras, la máxima fracción en volumen es:

$$\phi_{reg} = \frac{\pi}{6} \approx 0.52359 \quad (1)$$

Los valores de máxima fracción en volumen dependiendo del acomodo se obtuvieron por Conway y Sloane en 1993 [2]:

$$\phi_{CCC} = \phi_{HC} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74048 \quad (2)$$

Fracción en volumen de empaquetamiento aleatorio (random close packing)

Este es un término empírico utilizado para identificar la mayor fracción de volumen ocupado por esferas duras cuando se agregan a un contenedor de manera aleatoria, o sea, sin cuidar el arreglo que vayan a tomar. El valor máximo se obtuvo estadísticamente, llenando repetidas ocasiones cierto volumen y agitando controladamente, hasta poder estimar un valor máximo después del cual no se modifique su valor. Esta acción de agitar para que se ocupe diferente volumen la podemos ver comúnmente con los medios granulares.

El valor obtenido para RCP de esferas duras monodispersas se ha obtenido con experimentos y simulaciones:

$$\phi_{RCP} \approx 0.64 \quad (3)$$

Vemos que es considerablemente menor que el CP cuando hay un arreglo regular definido. En la siguiente tabla se comparan los valores de RCP con CP para esferas duras de un mismo diámetro:

Model	Description	Void fraction	Packing density
Thinnest regular packing	cubic lattice (Coordination number 6)	0.4764	0.5236
Very loose random packing	E.g., spheres slowly settled	0.44	0.56
Loose random packing	E.g., dropped into bed or packed by hand	0.40 to 0.41	0.59 to 0.60
Poured random packing	Spheres poured into bed	0.375 to 0.391	0.609 to 0.625
Close random packing	E.g., the bed vibrated	0.359 to 0.375	0.625 to 0.641
Densest regular packing	fcc or hcp lattice (Coordination number 12)	0.2595	0.7405

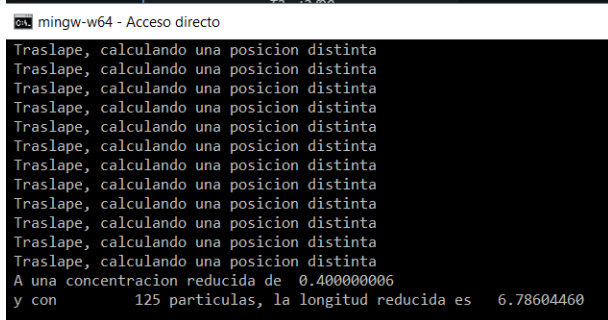
Figura 2: Comparando valores para diferentes modelos de RCP con CP de arreglos regulares [3].

Referencias

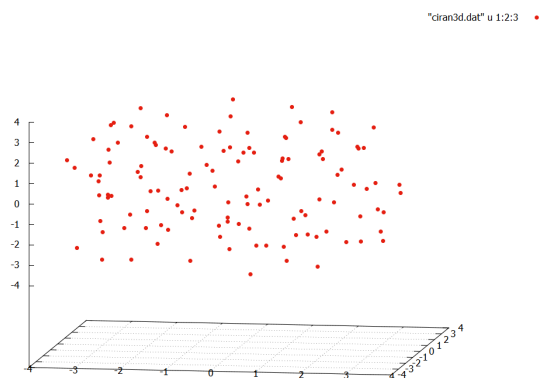
- [1] Wikipedia, *Empaquetamiento de esferas*. Recuperado de https://es.wikipedia.org/wiki/Empaquetamiento_de_esferas
- [2] Wolfram Math World, *Cubic close packing*. Recuperado de <http://mathworld.wolfram.com/CubicClosePacking.html>
- [3] Wikipedia, *Random close pack*. Recuperado de https://en.wikipedia.org/wiki/Random_close_pack#cite_ref-3

0.1. Figuras obtenidas para la actividad 2

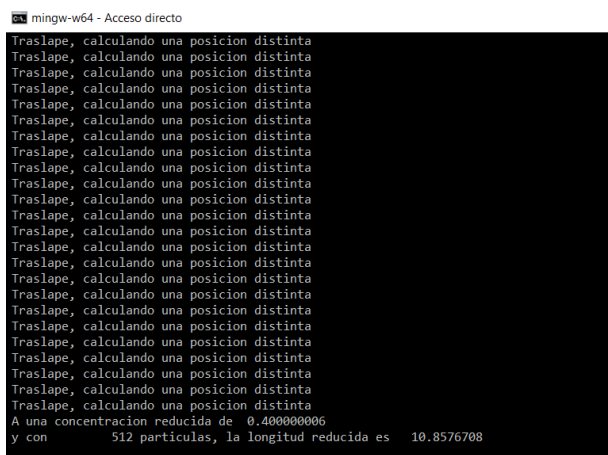
Figura 3: Gráficas obtenidas para una concentración reducida fija $n^*=0.4$, variando el número de partículas N .



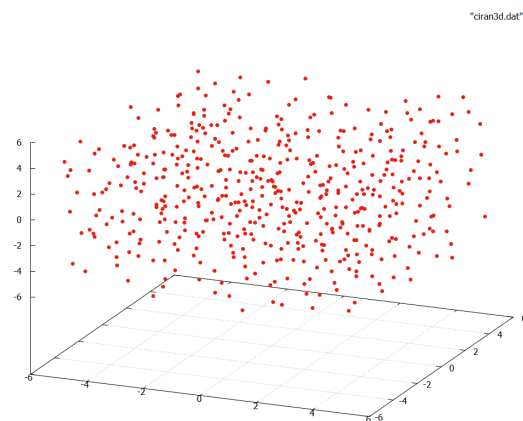
(a) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=125$



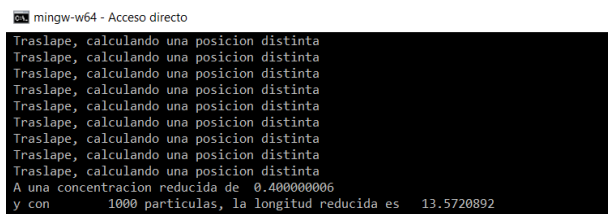
(b) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=125$



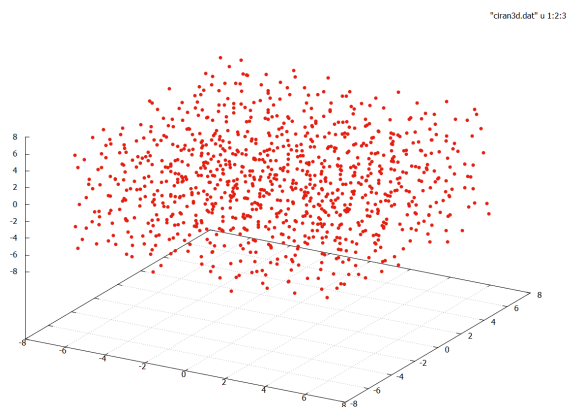
(c) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=512$



(d) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=512$



(e) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=1000$

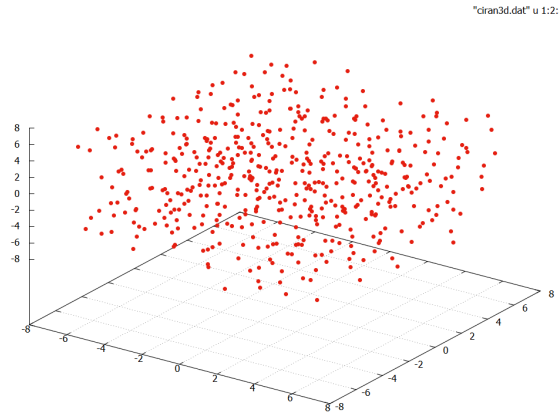


(f) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=1000$

Figura 4: Gráficas obtenidas para un número de partículas fijo $N=512$, variando la concentración reducida n^* .

```
mingw-w64 - Acceso directo
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
A una concentracion reducida de 0.200000003
y con 512 particulas, la longitud reducida es 13.6798086
```

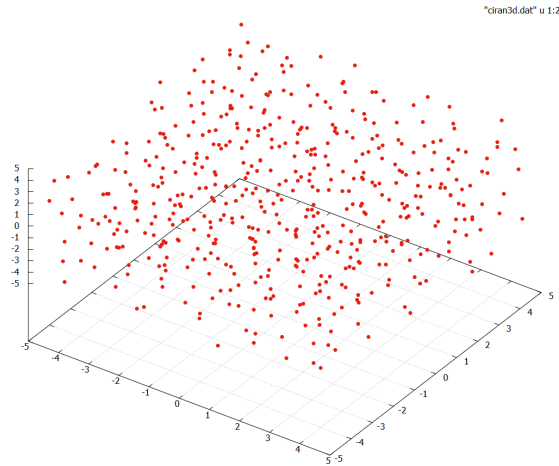
(a) Vista en terminal para $n^*=0.2$, $N=512$



(b) Arreglo para $n^*=0.2$, $N=512$

```
mingw-w64 - Acceso directo
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
A una concentracion reducida de 0.600000024
y con 512 particulas, la longitud reducida es 9.48504925
```

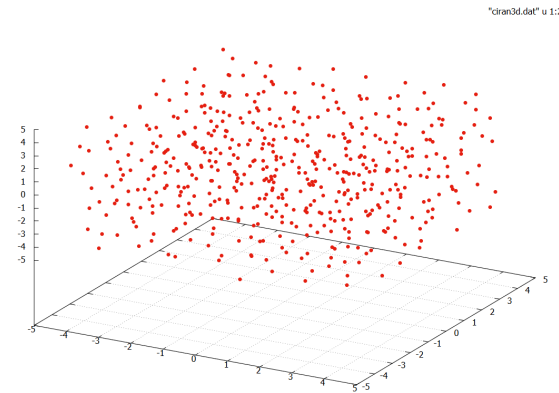
(c) Vista en terminal para $n^*=0.6$, $N=512$



(d) Arreglo para $n^*=0.6$, $N=512$

```
mingw-w64 - Acceso directo
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
A una concentracion reducida de 0.800000012
y con 512 particulas, la longitud reducida es 8.61773968
```

(e) Vista en terminal para $n^*=0.8$, $N=512$



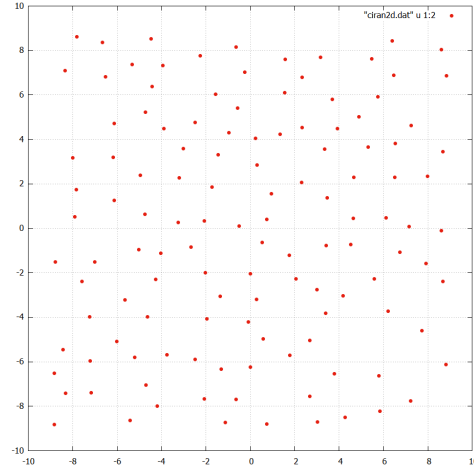
(f) Arreglo para $n^*=0.8$, $N=512$

0.2. Figuras obtenidas para la actividad 3

Figura 5: Gráficas obtenidas para una concentración reducida fija $n^*=0.4$, variando el número de partículas N .

```
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
A una concentracion reducida de 0.400000006
y con      125 particulas, la longitud reducida es  17.6776695
```

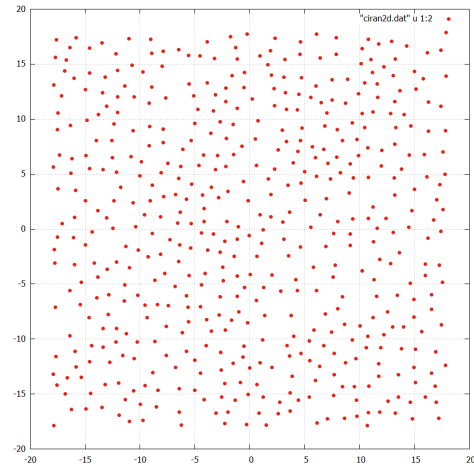
(a) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=125$



(b) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=125$

```
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
A una concentracion reducida de 0.400000006
y con      512 particulas, la longitud reducida es  35.7770882
```

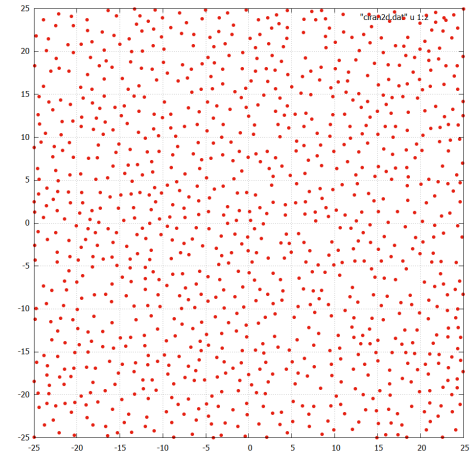
(c) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=512$



(d) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=512$

```
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
A una concentracion reducida de 0.400000006
y con     1000 particulas, la longitud reducida es  50.0000000
```

(e) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=1000$

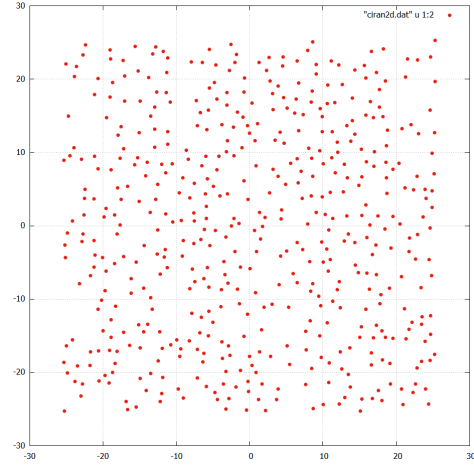


(f) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=1000$

Figura 6: Gráficas obtenidas para un número de partículas fijo $N=512$, variando la concentración reducida n^* .

```
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
A una concentracion reducida de 0.200000003
y con      512 particulas, la longitud reducida es  50.5964432
```

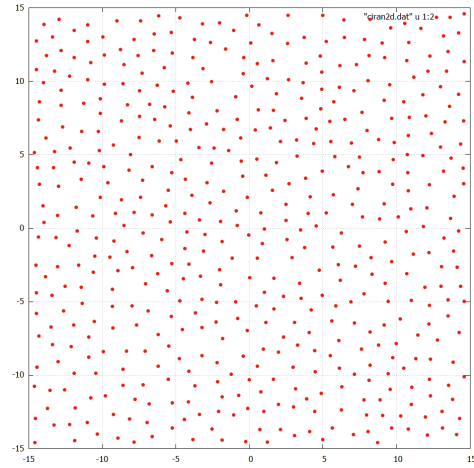
(a) Vista en terminal para $n^*=0.2$, $N=512$



(b) Arreglo para $n^*=0.2$, $N=512$

```
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
A una concentracion reducida de 0.600000024
y con      512 particulas, la longitud reducida es  29.2118702
```

(c) Vista en terminal para $n^*=0.6$, $N=512$



(d) Arreglo para $n^*=0.6$, $N=512$

```
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
Traslape, calculando una posicion distinta
^C
```

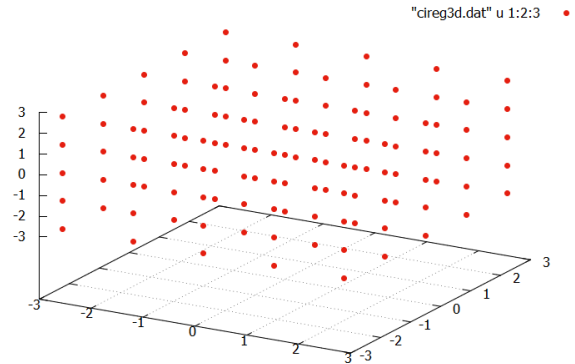
(e) Vista en terminal para $n^*>0.72$, $N=512$

0.3. Figuras obtenidas para la actividad 4

Figura 7: Gráficas obtenidas para una concentración reducida fija $n^*=0.4$, variando el número de partículas N .

```
mingw-w64 - Acceso directo
C:\Users\Gabriela\Dropbox\DesarrolloExp2\Portafolio1\Tarea2>t2-4.exe
Numero total de particulas y concentracion reducida
125 0.4
A una concentracion reducida de 0.400000006
y con 125 particulas, la longitud reducida es 6.78604460
```

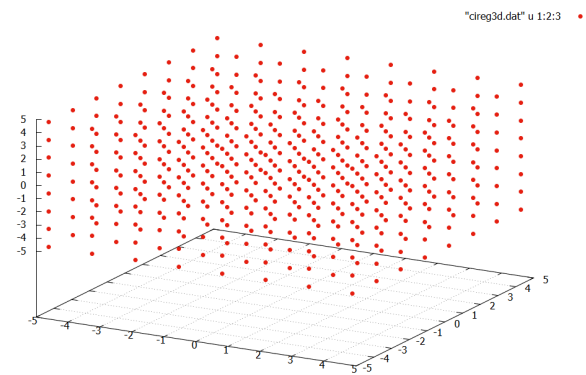
(a) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=125$



(b) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=125$

```
C:\Users\Gabriela\Dropbox\DesarrolloExp2\Portafolio1\Tarea2>t2-4.exe
Numero total de particulas y concentracion reducida
512 0.4
A una concentracion reducida de 0.400000006
y con 512 particulas, la longitud reducida es 10.8576708
```

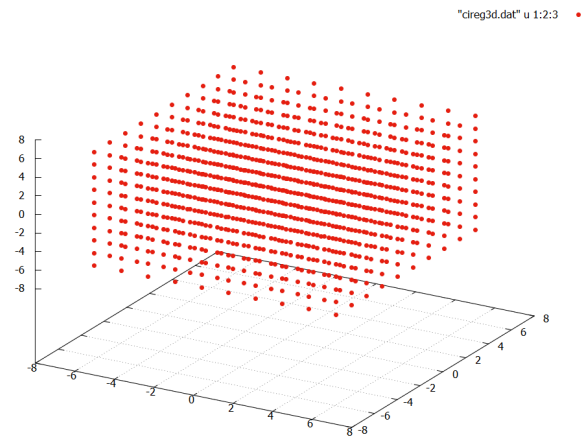
(c) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=512$



(d) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=512$

```
C:\Users\Gabriela\Dropbox\DesarrolloExp2\Portafolio1\Tarea2>t2-4.exe
Numero total de particulas y concentracion reducida
1000 0.4
A una concentracion reducida de 0.400000006
y con 1000 particulas, la longitud reducida es 13.5720892
```

(e) Vista en terminal para $n^*=0.4$, $N=1000$

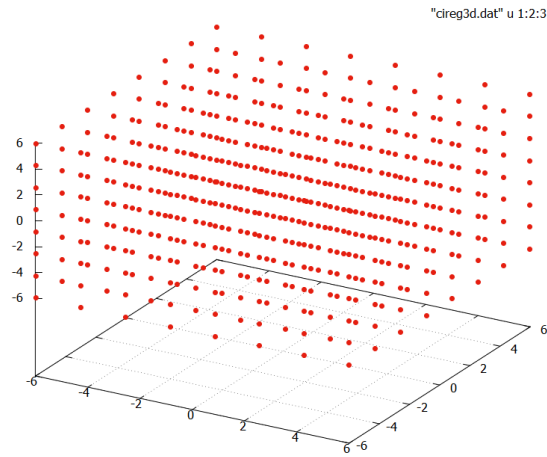


(f) Arreglo para $n^*=0.4$, $N=1000$

Figura 8: Gráficas obtenidas para un número de partículas fijo $N=512$, variando la concentración reducida n^* .

```
C:\Users\Gabiela\Dropbox\DesarrolloExp2\Portafolio1\Tarea2>t2-4.exe
Numero total de particulas y concentracion reducida
512 0.2
A una concentracion reducida de 0.200000003
y con 512 particulas, la longitud reducida es 13.6798086
```

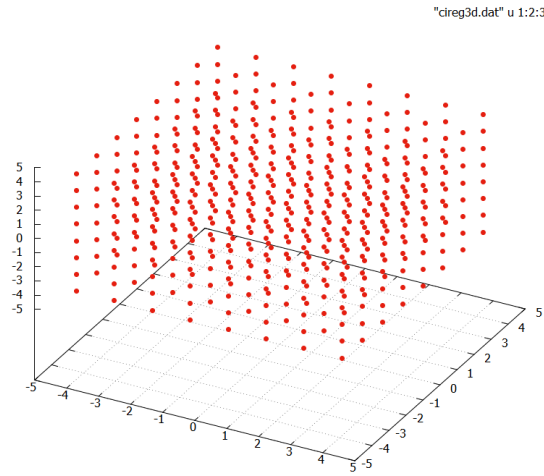
(a) Vista en terminal para $n^*=0.2$, $N=512$



(b) Arreglo para $n^*=0.2$, $N=512$

```
C:\Users\Gabiela\Dropbox\DesarrolloExp2\Portafolio1\Tarea2>t2-4.exe
Numero total de particulas y concentracion reducida
512 0.6
A una concentracion reducida de 0.600000024
y con 512 particulas, la longitud reducida es 9.48504925
```

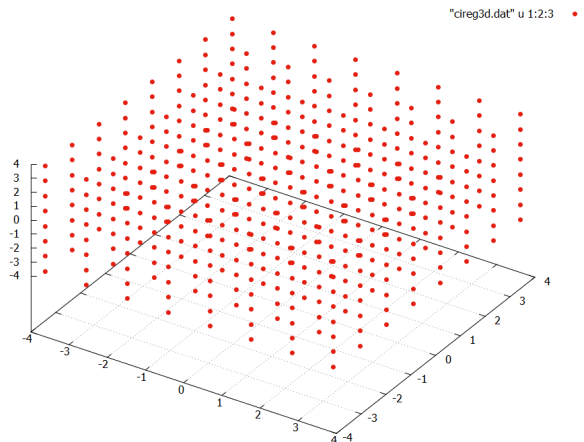
(c) Vista en terminal para $n^*=0.6$, $N=512$



(d) Arreglo para $n^*=0.6$, $N=512$

```
C:\Users\Gabiela\Dropbox\DesarrolloExp2\Portafolio1\Tarea2>t2-4.exe
Numero total de particulas y concentracion reducida
512 0.8
A una concentracion reducida de 0.800000012
y con 512 particulas, la longitud reducida es 8.61773968
```

(e) Vista en terminal para $n^*=0.8$, $N=512$



(f) Arreglo para $n^*=0.8$, $N=512$