

Comentarios sobre la Tarea #4

Ana Gabriela Carretas Talamante

23 de marzo de 2018

Esqueleto para implementar el algoritmo de MonteCarlo

Link para mostrar el código: T4

El realizar por completo la estructura del programa nos tomó algo de tiempo, diría que unas dos semanas desde que comenzamos a hacer las subrutinas de energías hasta que calculamos la presión del sistema. El código que está en la carpeta incluye las subrutinas:

- Configuración inicial regular ($n^* > 0.6$) o aleatoria ($n^* \leq 0.6$)
- Cálculo de la energía de la configuración
- Cálculo de la energía por partícula
- Algoritmo de MonteCarlo para aceptar/rechazar movimientos tentativos
- Cálculo de la $g(r)$, de la presión y de la aproximación del número de partículas

Los problemas que tuve al ir formando el esqueleto completo fueron mínimos (typos), hasta el día de hoy. El código había funcionado (chechar la carpeta $g(r)$ dentro de la carpeta Esqueleto del link de arriba), y hasta el momento no he encontrado el error; creo que el detalle está en la subrutina del cálculo de energía por partícula y/o el MonteCarlo, por las energías potenciales normalizadas que arroja. Entre los datos guardados, solo incluí las configuraciones inicial y final, y el archivo de la $g(r)$, junto con el valor de la presión. No guardé los datos de la termalización en ese momento por lo que no puedo realizar la gráfica solicitada (aún).

Aparte de las malas noticias, me parece muy genial que la simulación con MonteCarlo se asimile a las ideas físico-estadísticas como el ensemble, la manera aleatoria como se mueven las partículas, el criterio de aceptación y rechazo, entre otras. Se me hizo sencillo entender el mecanismo del algoritmo, más aún teniendo el trasfondo de la física estadística.