

La solución a este taller debe subirse por SICUA antes de las 11:50PM del jueves 25 de mayo de 2017. Los archivos código fuente deben subirse en un único archivo `.zip` con el nombre `NombreApellido_hw5.zip`, por ejemplo yo debería subir el zip `VeronicaArias_hw5.zip`. Este archivo debe descomprimirse en un directorio de nombre `NombreApellido_hw5` que sólo contenga los códigos fuente, adicionalmente éstos deben estar en un repositorio de Github cuyo enlace también deben subir a Sicua (10 puntos). Recuerden que es un trabajo totalmente individual.

Todas las gráficas de esta tarea se deben presentar en un archivo `Resultados_hw5.pdf`, generado por un makefile `Tarea5.mk` a partir de un archivo `Resultados_hw5.tex`. Este archivo debe (5 puntos):

- Organizar las gráficas obtenidas en ambos ejercicios, con una pequeña descripción. Este archivo debe estar incluido dentro de las dependencias del makefile y debe permitir generar un archivo `Resultados_hw5.pdf`

El archivo `Tarea5.mk` debe (15 puntos):

- Incluir todas las dependencias y reglas necesarias para generar y/o actualizar el archivo `Resultados_hw5.pdf`.
Los archivos que deben subir a Sicua (comprimidos en `NombreApellido_hw5.zip`) son: `Tarea5.mk`, `canal_ionico.c`, `plots_canal_ionico.py`, `circuitoRC.py` y `Resultados_hw5.tex`.

1. (40 points) **Canales iónicos** En biofísica han desarrollado un método para determinar el tamaño de los poros de canales iónicos (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC1225986/pdf/biophysj00081-0189.pdf>). La idea de este ejercicio es hacer una versión en 2D de dicho método de la siguiente manera: Suponga que tiene los datos de las posiciones de las moléculas que conforman el canal iónico (para este caso use los datos de `Canal_ionico.txt` y `Canal_ionico1.txt`) y suponga que dichas moléculas tienen un radio de 1\AA . Estas moléculas conforman las paredes del canal iónico y para determinar el tamaño del poro usted debe encontrar, usando MCMC, el círculo de radio máximo que cabe dentro del poro sin tocar ninguna de las moléculas de los "bordes".

Para este ejercicio deben escribir un programa en C llamado `canal_ionico.c` que resuelva el problema descrito anteriormente. Deben además escribir una rutina de python llamada `plots_canal_ionico.py` que lea los datos producidos por el programa en C y los grafique. Finalmente, dichas gráficas deben presentarlas en el archivo `Resultados_hw5.pdf`.

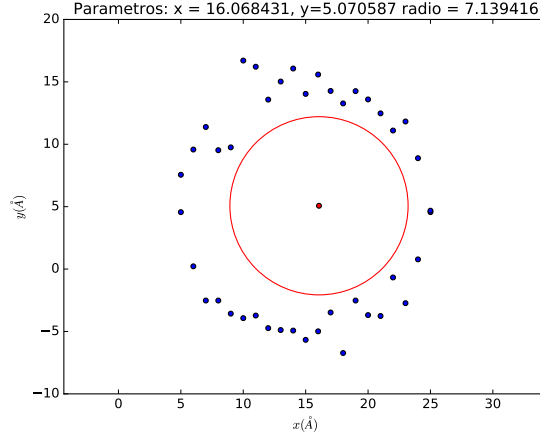
El código `canal_ionico.c` debe (25 puntos):

- Descargar y almacenar los datos de `Canal_ionico.txt` y de `Canal_ionico1.txt`
- Usar un método de Monte Carlo para determinar el círculo de radio máximo que cabe dentro del poro sin tocar ninguna de las moléculas de los "bordes" para ambas series de datos. Almacenando los datos de los parámetros para cada iteración.

El código `plots_canal_ionico.py` debe (15 puntos):

- Leer y guardar los datos generados por `canal_ionico.c`

- Hacer gráficas (guardándolas sin mostrarlas) de los histogramas de los valores de las coordenadas x , y del centro del círculo y una gráfica del círculo máximo obtenido (ver figura). En dicha figura, escriba además los valores de x , y y radio máximo obtenidos.



2. (30 points) **Carga de un circuito RC** Un circuito RC está compuesto de una resistencia R , una *f.e.m.* y un condensador de capacitancia C conectados en serie. Si el condensador está inicialmente descargado y se cierra el circuito, dicho condensador empieza a acumular carga y la ecuación que describe dicha carga en función del tiempo es:

$$q(t) = Q_{max}(1 - e^{(-t/RC)}) \quad (1)$$

donde Q_{max} es la carga máxima alcanzada por el condensador, C es la capacitancia del condensador y R la resistencia del circuito. En un circuito RC hay una además una relación entre la capacitancia C , el voltaje V y la carga máxima Q_{max} del condensador: $Q_{max} = V_0 \cdot C$. Suponga además que el potencial es $V_0 = 10V$.

En el archivo `CircuitoRC.txt` están datos correspondientes a la carga de un condensador en un circuito RC. El objetivo de este ejercicio es, usando MCMC, determinar R y C , y calcular Q_{max} .

El código `circuitoRC.py` debe (30 puntos):

- Descargar y almacenar los datos del archivo `CircuitoRC.txt`
- Usar un método de determinación bayesiana de parámetros con Monte Carlo para obtener R y C a partir de los datos experimentales.
- Hacer gráficas de los valores de R y de C en función de la función de verosimilitud (como las de los notebooks vistos en clase) y hacer los respectivos histogramas.
- Graficar los datos y el modelo para los mejores parámetros R y C obtenidos (indicando sus valores en la gráfica).