PAULA RANGEL LÓPEZ prangell@alumnos.unex.es

TAREA 1 Física Estadística Computacional

26-04-2024

Código principal de simulación de dinámica molecular de un sistema 2D de discos duros junto con ediciones realizadas.

El programa se ha dividido en celdas para poder ejecutarlo por partes en el entorno Spyder, denominando cada una de ellas por su papel dentro de la simulación. Se imprime el resumen de los datos con los que se realiza la simulación al comienzo de la ejecucción. Dentro de la función write_micro_state se ha modificado el tipo de archivo en el que se imprimen las posiciones y velocidades de las partículas, empleando la librería pandas y su objeto estrella el DataFrame. De igual manera, se ha modificado la escritura de la media de las evoluciones. Se ha incluido una función llamada generate_gif(), que gracias a la librería imageio se encarga de generar un gif con la evolución del sistema simulado. A su vez, se ha hecho uso del método ProgressBar de la librería bars con el objetivo de imprimir por pantalla una barra de progreso actualizada según el número de colisión simulada en el que se encuentre el sistema, en vez de imprimir directamente el nombre del archivo que el programa está escribiendo, puesto que de esta última forma se pierde en consola el resumen inicial.

Para poder correr el programa se debe modificar el *path* de las carpetas y archivos en el directorio en el que se encuentre el usuario. El gif generado tras simular 250 colisiones en un sistema no cuadrado constituido por 25 partículas se encuentra en el repositorio.