



DEPARTAMENTO DE GEOCIENCIAS

Laura Alejandra Jáuregui Molina

Tarea 5

MONTE CARLO
Métodos Computacionales

Profesor:
Verónica Arias

Tarea 5 - Métodos Computacionales

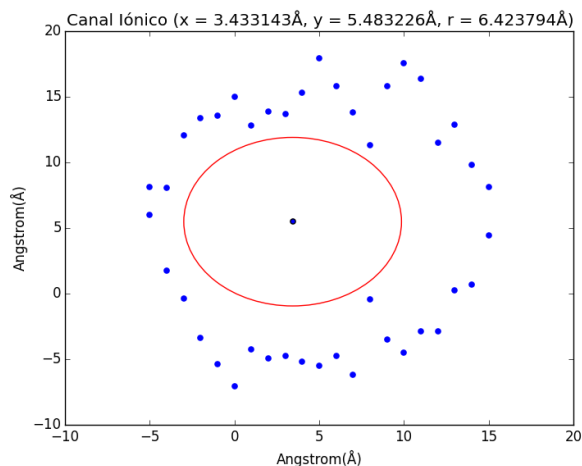
Alejandra Jáuregui Molina - 201412468

MONTE CARLO
Universidad de los Andes
26 de mayo de 2017

1. Canales Iónicos

Mediante el método de MCMC se obtuvo el círculo más grande posible en las moléculas obtenidas con los archivos de texto previamente proporcionados. Este entonces, efectuó el modelo en 2D de dichos canales iónicos. Adicionalmente se graficaron tanto los histogramas de los valores de las coordenadas x , y del centro del círculo y el círculo máximo obtenido.

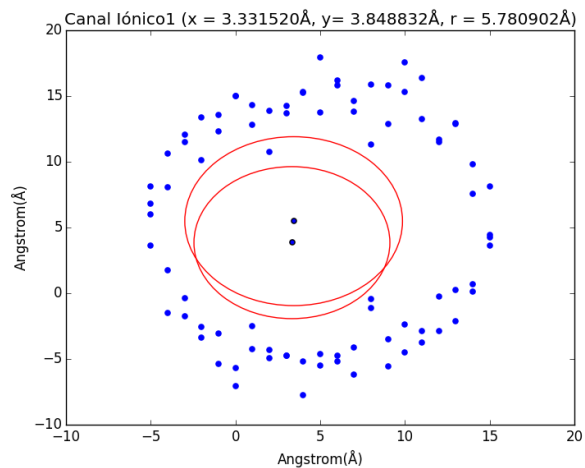
Figura 1. Gráfica $\text{Canales}_{i\text{onicos}}$



Gráfica de moléculas junto al poro propuesto (círculo más grande) entre ellas para el primer archivo de datos.

La gráfica anterior, además incluye los valores de los resultados finales obtenidos en el archivo *canales_ionicos.c*

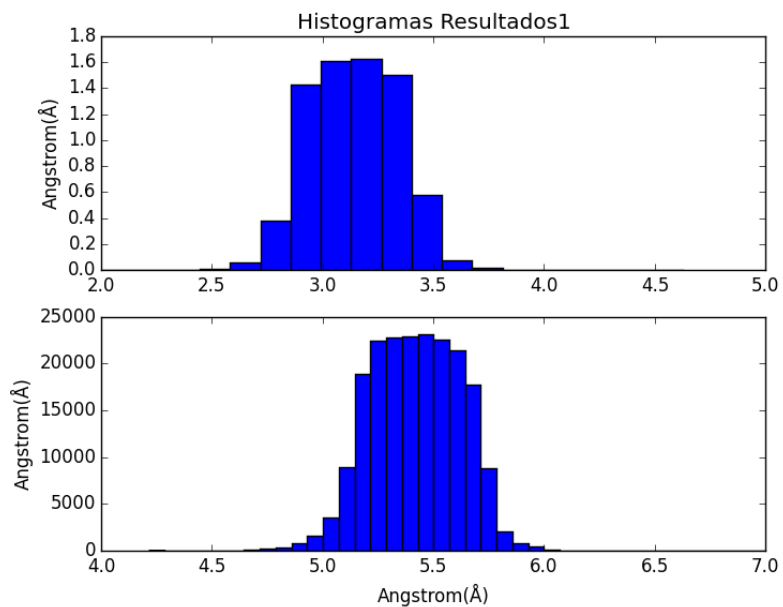
Figura 2. Gráfica Canales_ionicos1



Gráfica2 de moléculas junto al poro propuesto (círculo más grande) entre ellas para el segundo archivo de datos.

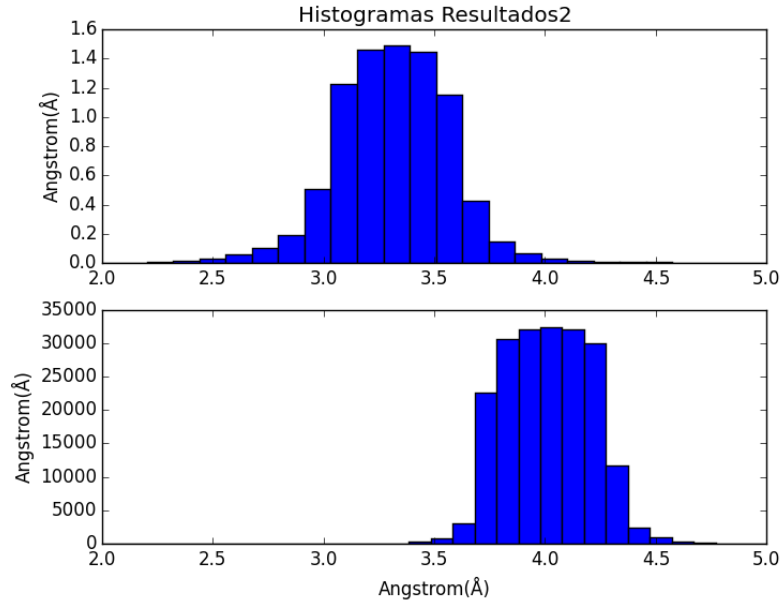
La gráfica anterior, además incluye los valores de los resultados finales obtenidos en el archivo *canales_ionicos.c*

Figura 3. Histograma Primer Archivo



Histograma de las coordenadas x,y para el centro del círculo, del archivo 1.
Se puede evidenciar que la tendencia del histograma va hacia la posición final del círculo

Figura 4. Histograma Segundo Archivo

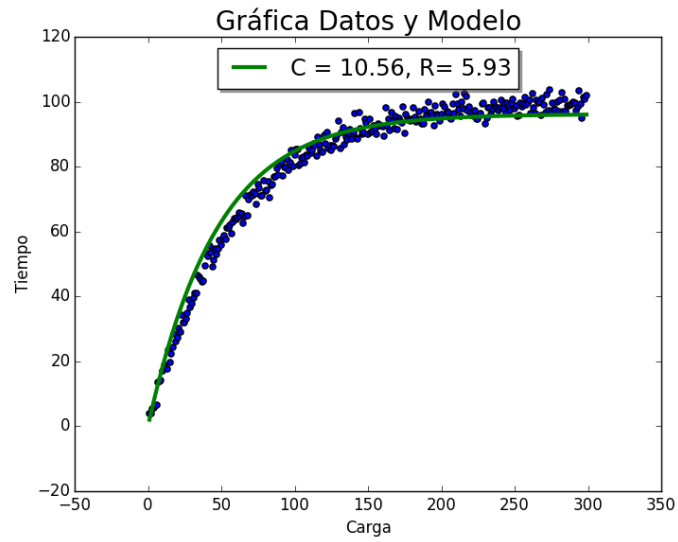


Histograma de las coordenadas x,y para el centro del círculo, del archivo 1.
Se puede evidenciar que la tendencia del histograma va hacia la posición final del círculo

2. Carga de un circuito RC

Para este ejercicio se graficaron los resultados al uso del método de MCMC Bayes. El walk correspondiente se llevó a cabo con Q_{max} y μ de tal forma que fuese posible despejar de ahí los valores respectivos de R Y C, teniendo en cuenta que $Q_{max} = 10C$ y $= \frac{1}{RC}$.

Figura 5. Gráfica de los datos del circuito con el ajuste



La gráfica anterior muestra la relación entre los datos del circuito con el ajuste realizado usando determinación bayesiana de parámetros.

Adicionalmente, en ella se encuentran los resultados obtenidos

Figura 6. Gráfica de los valores de R y de C en función de la función de verosimilitud

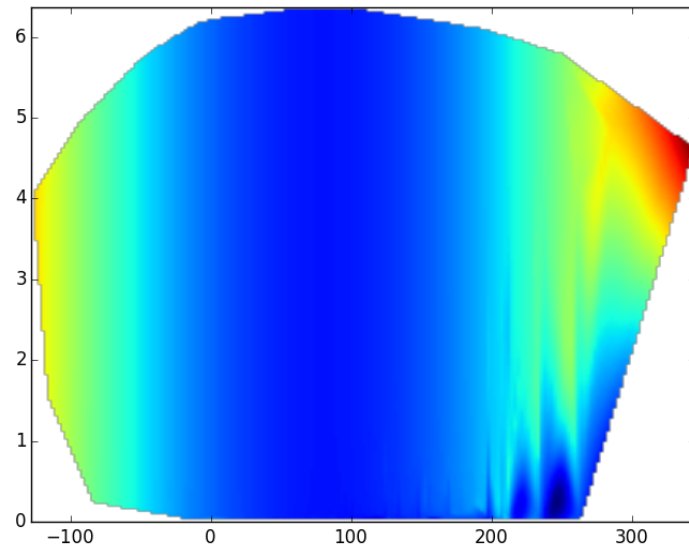
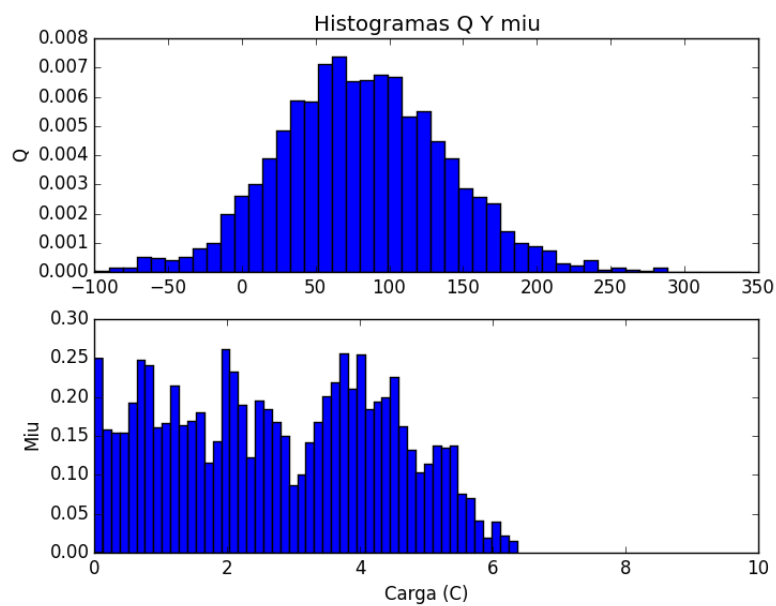
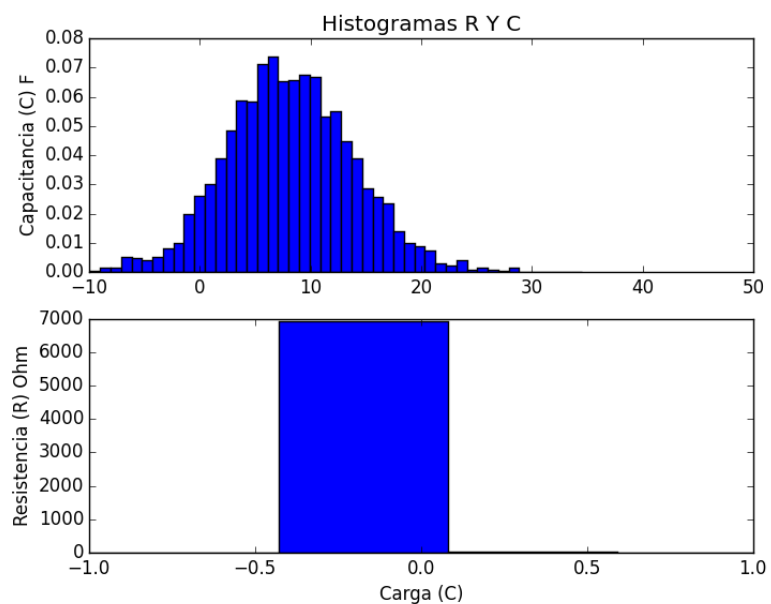


Figura 7. Histograma Q y Miu



Histograma del walk de Q obtenido indirectamente a partir del walk de Miu

Figura 8. Histograma de R y C



Histograma del walk de R y C obtenidos previamente de la relación de los valores de Q y Miu