1-stochastic_methods

October 22, 2020

0.1 Introducción

Imagina que quisieras modelar computacionalmente (como en esta clase) un sistema con muchísimos componentes, por ejemplo, tránsito, apostadores, difusión de gases, la economía de un páis o localidad, etc. ¿Cómo le harías?

Por ejemplo, para el caso de como se diluye una gota de tinta en un vaso con agua, la aproximación clásica (o sea, usando todo el aparato matemático clásico de las ecuaciones diferenciales) es:

- Tomar la posición $\vec{x}$ y el momento $\vec{p}$ de cada molécula en el vaso + la gota de la tinta, en un momento $t = t_0$.
- Usar las ecuaciones de Newton para el sistema (que son ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden).
- Escribirlas como un sistema (más grande!) de ecuaciones diferenciales de primer orden.
- Resolverlas con un método de integración.

¿Estamos de acuerdo? Yo sé que es mucho trabajo, pero bueno, en realidad, lo va a hacer la computadora ¿Qué nos preocupa?

Bueno, pensemos en la implementación:

Existen 10^{23} moléculas (aproximadamente, y este dato proviene del número de avogadro). Cada partícula tiene 6 grados de libertad (6 *dof*) : 3 para la posición y 3 para la velocidad.

Ejercicio ¿Por qué 6 grados de libertad?

Ejercicio ¿Cuánta memoria se tiene que utilizar para guardar la configuración de las moléculas en el tiempo t_0? ¿Cabe en tu compu? ¿Cuántos discos duros requieres para guardarlo? ¿Cuánto costaría?

Además del problema que encontraron, el resolver el sistema *así* no nos da mucho entendimiento, ya que habría que ejecutarlo para **cada** pregunta que hagamos: *¿Cuánto tiempo toma a que las moléculas de la gota de tinta se dispersen por todo el vaso?* Calculamos y (suponiendo que se puede hacer) obtenemos una respuesta, pero y si queremos responder *¿Qué tal si el vaso es el doble de grande?* ¡hay que calcularlo de nuevo!

0.2 Métodos estocásticos

Una técnica que puede ser empleada (y muy relacionada con Montecarlo) son los *métodos estocásticos*.

La idea básica es la siguiente:

Un *ensamble* o *colectivo* actúa de una manera **promedio** aún si los elementos que conforman el ensamble actúan al azar.

El resultado de esto es la pérdida de la información sobre los componentes del sistema, para ganar conocimiento sobre el colectivo.

0.2.1 Ejemplo: Caminata aleatoria

[1]:
```
%pylab inline
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import random
```

```
Populating the interactive namespace from numpy and matplotlib
```

La ***caminata aleatoria*** o ***caminata del borracho*** es el recorrido que se obtiene si en cada instante de tiempo "elegimos al azar" la siguiente dirección.

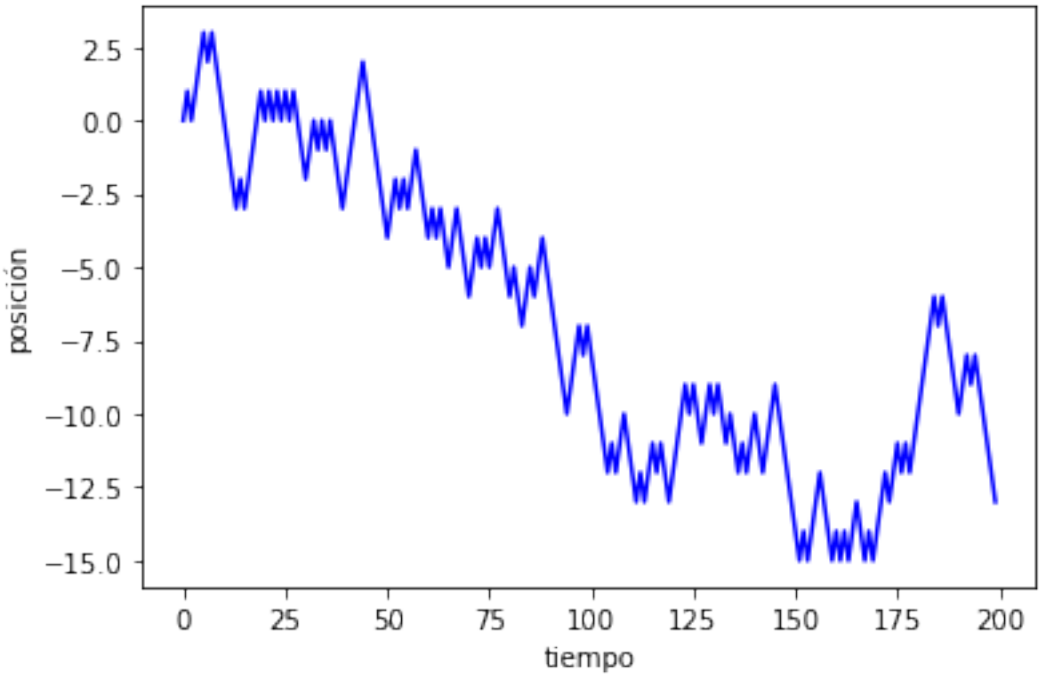
El siguiente código calcula la caminata aleatoria en una dimensión (x).

[2]:
```
# Inicialización

steps = 200

posicion = np.zeros([steps])

tiempo = range(steps)
```

[14]:
```
# caminamos ...
#Iniciamos en la posicion 0 en el step 0
for i in range(1,steps):
    #Nos da un random de arriba o abajo
    if random.choice([u'arriba', u'abajo']) == u'abajo':
        posicion[i] = posicion[i-1] - 1
    else:
        posicion[i] = posicion[i-1] + 1
```

[15]:
```
plt.plot(tiempo,posicion, 'b-')
plt.xlabel('tiempo')
plt.ylabel(u'posición')
```

[15]:
```
Text(0, 0.5, 'posición')
```



Al parecer uno puede avanzar (¡o inclusive llegar a su casa si está borracho¡ -por lo menos en una dimensión.)

Pero como mencionamos arriba, lo que queremos es el *comportamiento promedio* del borracho.

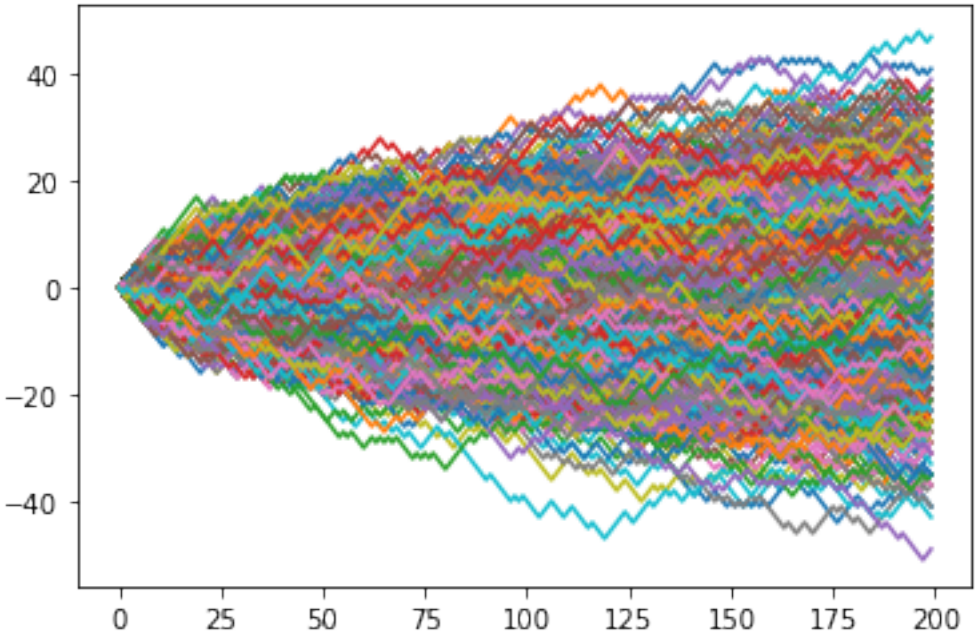
Para lograrlo, utilizaremos miles de borrachos no interactuantes y calcularemos la **media cuadrática** o **RMS**.

Ejercicio: ¿Por qué utilizar una media cuadrática? ¿Qué pasa si hubiésemos usado el promedio simple?

[18]:
```
# Inicialización
#Simulacion para 2000 borrachos

pasos = 200
borrachos = 2000

posicion = np.zeros([borrachos, pasos])  # todos empiezan en ceros
tiempo = range(steps)

for borracho in range(borrachos):
    for paso in range(1, pasos):
        if random.choice(['arriba', u'abajo']) == u'abajo':
            posicion[borracho, paso] = posicion[borracho,paso - 1] - 1
        else:
            posicion[borracho, paso] = posicion[borracho,paso - 1] + 1
```

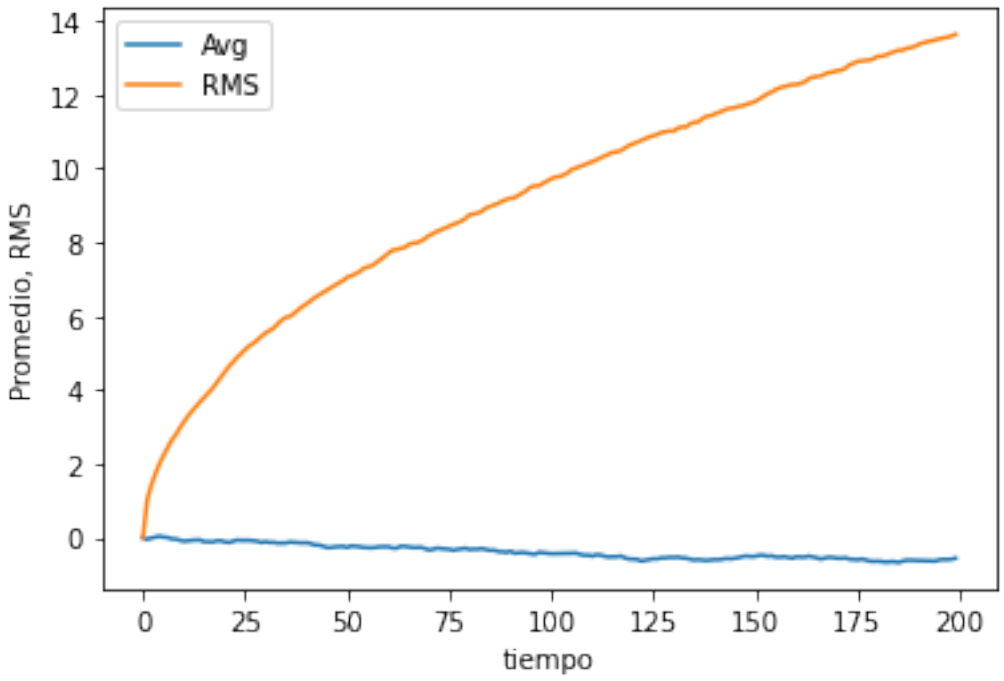
```
promedio = np.mean(posicion, axis=0) # promedio sobre columnas
rms = np.sqrt(np.mean(np.square(posicion), axis=0)) # media cuadrática
```

[19]:
```
# Todos los borrachos a la vez
for borracho in range(borrachos):
    plt.plot(tiempo, posicion[borracho, :], '-')
```



[20]:
```
plt.plot(tiempo, promedio, label='Avg')
plt.plot(tiempo, rms, label='RMS')
plt.xlabel('tiempo')
plt.ylabel('Promedio, RMS')
plt.legend(loc='best')
```

[20]:
```
<matplotlib.legend.Legend at 0x7f721d8b21f0>
```



[21]:
```
from scipy.optimize import curve_fit

power_law = lambda x, a, b: a*x**b

popt, pcov = curve_fit(power_law, tiempo, rms)
```

Estamos proponiendo que los datos ajustan a una ley de potencias del tipo

$$y(t) = At^B$$

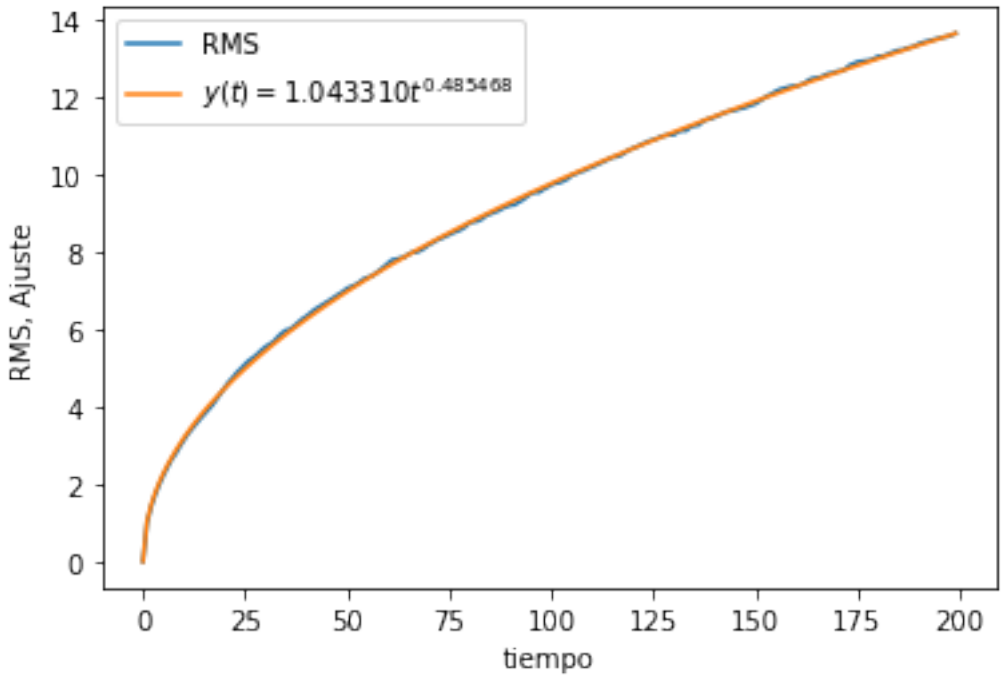
Que en este caso en particular es:

[22]:
```
print ("A = %f +/- %f." % (popt[0], sqrt(pcov[0,0])))
print ("B = %f +/- %f." % (popt[1], sqrt(pcov[1,1])))
```

```
A = 1.043310 +/- 0.004027.
B = 0.485468 +/- 0.000802.
```

[23]:
```
plt.plot(tiempo, rms, label="RMS")
plt.plot(tiempo,power_law(tiempo, popt[0], popt[1]), label=r"$y(t) = %f t␣
 ↪^{%f}$" % (popt[0], popt[1]))
plt.xlabel('tiempo')
plt.ylabel(r'RMS, Ajuste')
plt.legend(loc='best')
```

[23]: <matplotlib.legend.Legend at 0x7f721e609d30>

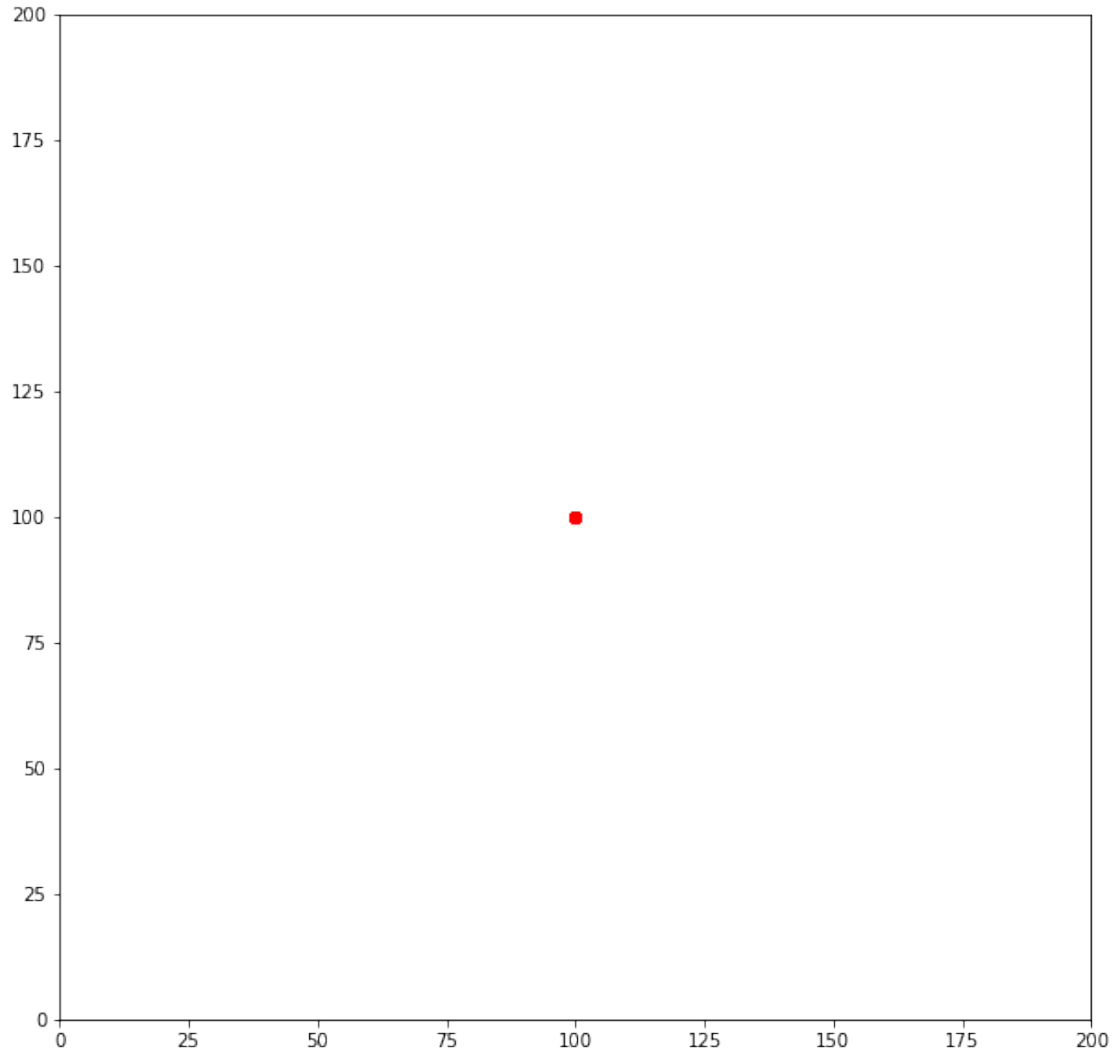


0.2.2 Ejemplo: Difusión

La difusión es el ejemplo con el que iniciamos la discusión, básicamente es una caminata aleatoria en 2D.

[24]:
```
plt.figure(figsize = (10,10))

num_particulas = 400

particulas = np.ones([num_particulas,2])*100  # Todas las partículas en el␣
↪punto (100,100)


# Dibujamos la posición inicial
line, = plt.plot(particulas[:,0], particulas[:,1], 'ro')
plt.xlim(0,200)
plt.ylim(0,200)

#Psición inicial
```

[24]: (0.0, 200.0)

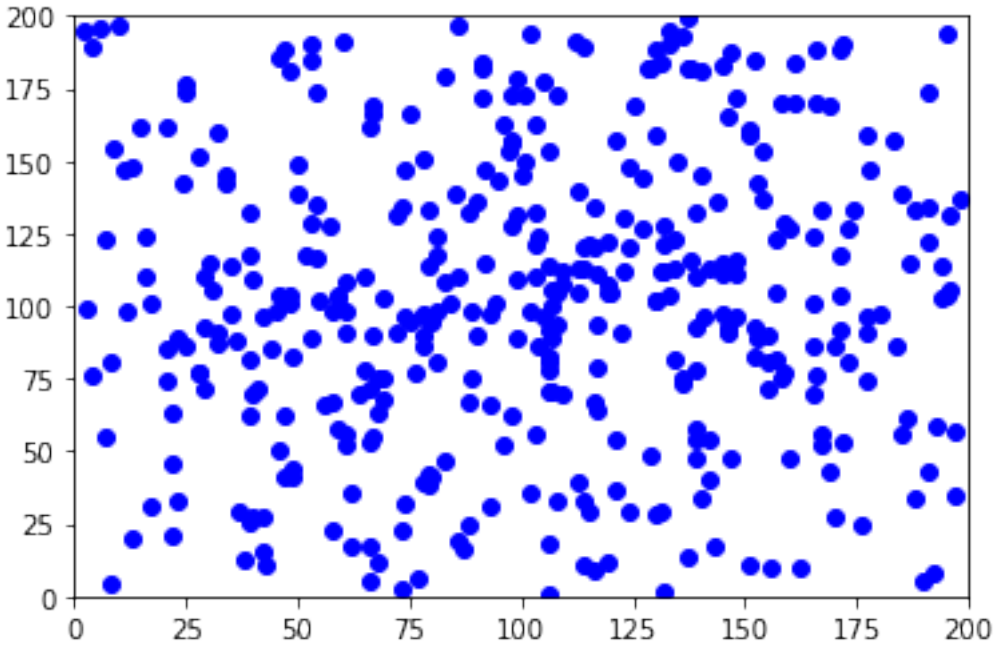


[25]:
```
steps = 5000

for i in range(steps):
    for particula in range(num_particulas):
        particulas[particula, 0] += random.randint(-1, 1)
        particulas[particula, 1] += random.randint(-1, 1)

        # Verificar colisión
        x, y = (particulas[particula, 0], particulas[particula, 1])
        if x == 200:
            particulas[particula, 0] = 198
        elif x == 0:
            particulas[particula, 0] = 2
```

```
        if y == 200:
            particulas[particula, 1] = 198
        elif y == 0:
            particulas[particula, 1] = 2
```

[27]:
```
# Dibujamos la posición de las 400 partículas luego de N steps
line, = plt.plot(particulas[:,0], particulas[:,1], 'bo')
plt.xlim(0,200)
plt.ylim(0,200)

#Las posiciones finales de las particulas
```

[27]: (0.0, 200.0)



Ejercicio: ¿Cómo modificarías el código para que pudieras usarlo en una animación?

Ejercicio: ¿Y para mostrarlo en un subplot cada 10 pasos?