UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA LA CIENCIA E INGENIERÍA

TAREA 8

“Algoritmos de Monte Carlo y Metrópolis”

Braulio Sánchez Ibáñez

16.880.977-8

Profesor: Valentino González

Auxiliar: Felipe Pesce

Santiago, Chile

PREGUNTA 1

Se calculará el centro de masas de un volumen V_s encerrado por un toro de ecuación

$$z^2 + \left(\sqrt{x^2 + y^2} - 3\right)^2 \leq 1$$

Y el cilindro de ecuación $(x-2)^2 + z^2 \leq 1$, con densidad $\rho(x,y,z) = 0.5(x^2 + y^2 + z^2)$.

Se calculará mediante el método de Monte Carlo, mediante la expresión

$$M = \iiint_V \rho(x,y,z)dV = \frac{V}{N}\sum_{i=1}^{N} \rho(x_i, y_i, z_i)$$

$$x_G = \frac{1}{M}\iiint_V x\,\rho(x,y,z)dV = \frac{1}{M}\frac{V}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i\rho(x_i, y_i, z_i)$$

Reemplazando la expresión de la masa se obtiene la expresión para las coordenadas del centro de masas:

$$x_G = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i\rho(x_i, y_i, z_i)}{\sum_{i=1}^{N} \rho(x_i, y_i, z_i)}$$

Para y_G, z_G las expresiones son análogas. Para poder realizar el cálculo, se elige el menor volumen simple V que contenga al volumen V_s a calcular. En este caso V es el paralelepípedo $[1,3] \times \left[-\sqrt{15}, \sqrt{15}\right] \times [-1,1]$. Para poder calcular las sumatorias, la función densidad será aquella que fuera de V_s vale 0 y dentro vale $\rho(x,y,z) = 0.5(x^2 + y^2 + z^2)$.

Se construye una muestra de N=1 millón de puntos (x, y, z) uniformemente distribuidos en el paralelepípedo V, mediante el módulo **`random.uniform`** y se guardan en la matriz de 3xN **v.** Cada columna representa un punto, donde la primera fila es la coordenada x, la segunda y, y la tercera z. Se realiza con ellos una iteración **`for,`** que irá calculando las sumas correspondientes, denotadas como **`contador`** para la sumatoria de la densidad y **`contadorx`** para la sumatoria de la densidad por x (análogo para as otras dos variables). Si el punto satisface las ecuaciones de V_S, entonces los contadores, que se inician en 0, agregarán el valor correspondiente asociado al punto. Si no, no se suma nada. Una vez terminadas las iteraciones, se calculan los valores del centro de masa y la masa:

$$x_G = 2.08 \pm 0.01$$

$$y_G = 0.00 \pm 0.07$$

$$z_G = 0.00 \pm 0.01$$

$$M = 71.00 \pm 0.02$$

Al tratarse de problemas de valores aleatorios, los resultados no son constantes y varían en cada cálculo. Por eso, se expresa el resultado con dos cifras significativas, que es la máxima precisión obtenida, y a lado el error asociado, que se obtienen haciendo un determinado número de cálculos y luego obteniendo el promedio y la desviación estándar de los resultados.

PREGUNTA 2

Se desea obtener un conjunto de 10 millones de valores distribuidos según la densidad de probabilidad

$$W(x) = 3.5exp\left(\frac{-(x-3)^2}{3}\right) + 2exp(-2(x+1.5)^2)$$

Para ellos se utiliza el algoritmo de Metrópolis, que consiste en comenzar desde un valor semilla, en este caso $v_0 = 0$, y luego calcular un valor de prueba v_p utilizando alguna variable aleatoria. En el presente caso se utilizará la función $v_p = v_n + \delta r$, donde v_n es el valor n-ésimo de la lista de puntos (que inicia en v_0). El valor r es una variable aleatoria uniformemente en el intervalo (-1,1) y delta es una constante a fijar por el alumno.

La lista se construye de la siguiente manera: dado un valor v_n se calcula v_p y, a través de algún criterio, se decide si este resultado se acepta como nuevo valor de la lista o no. El criterio a utilizar es que v_p es aceptado, es decir $v_{n+1} = v_p$, si ocurre que

$$\frac{W(v_p)}{W(v_n)} > r$$

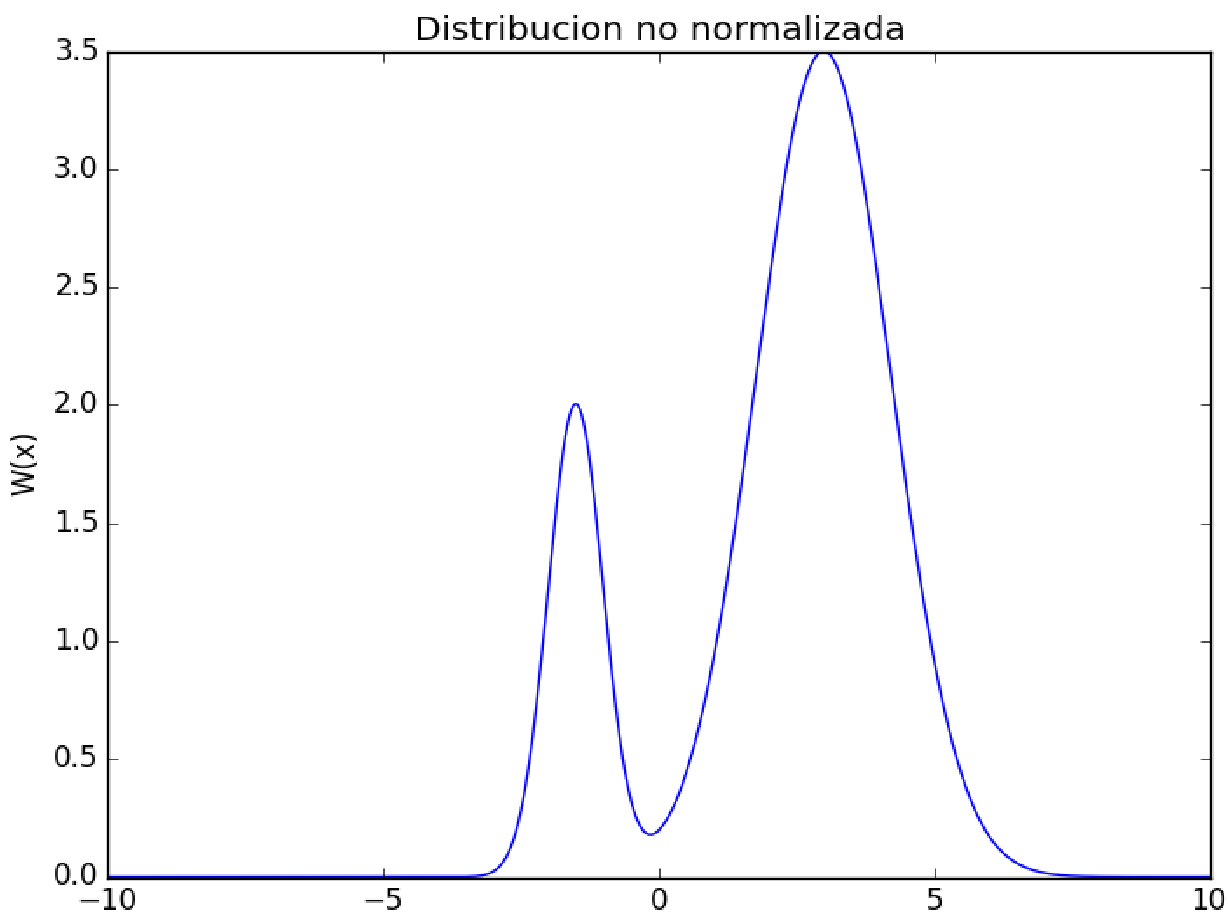
Donde r es un valor aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo (0,1). Si ocurre lo contrario, el valor no es aceptado, por lo que $v_{n+1} = v_n$. Se repite este algoritmo 10 millones de veces hasta obtener el conjunto total de números.

El valor de la constante δ debe ser tal que, aproximadamente, la mitad de los v_p sean aceptados. Para ello, se inicia con una variable `contador` en 0 que va sumando 1 cada vez que un valor es aceptado. Así, se llega a $\delta = 3.6$, que dada una razón valores aceptados sobre valores totales igual a 0.523, es decir, 52.3% de los valores son aceptados.

Una vez obtenida la lista, se grafica el histograma correspondientemente normalizado a través del módulo **`plot.hist,`** utilizando 10000 bins (número de intervalos en que se separa el rango de valores). Junto al histograma se grafica también la función W normalizada. Para ello, se calcula, mediante el método de los trapecios, el área A bajo la curva. La densidad normalizada no será más que $\widetilde{W}(x) = \frac{1}{A}W(x)$.

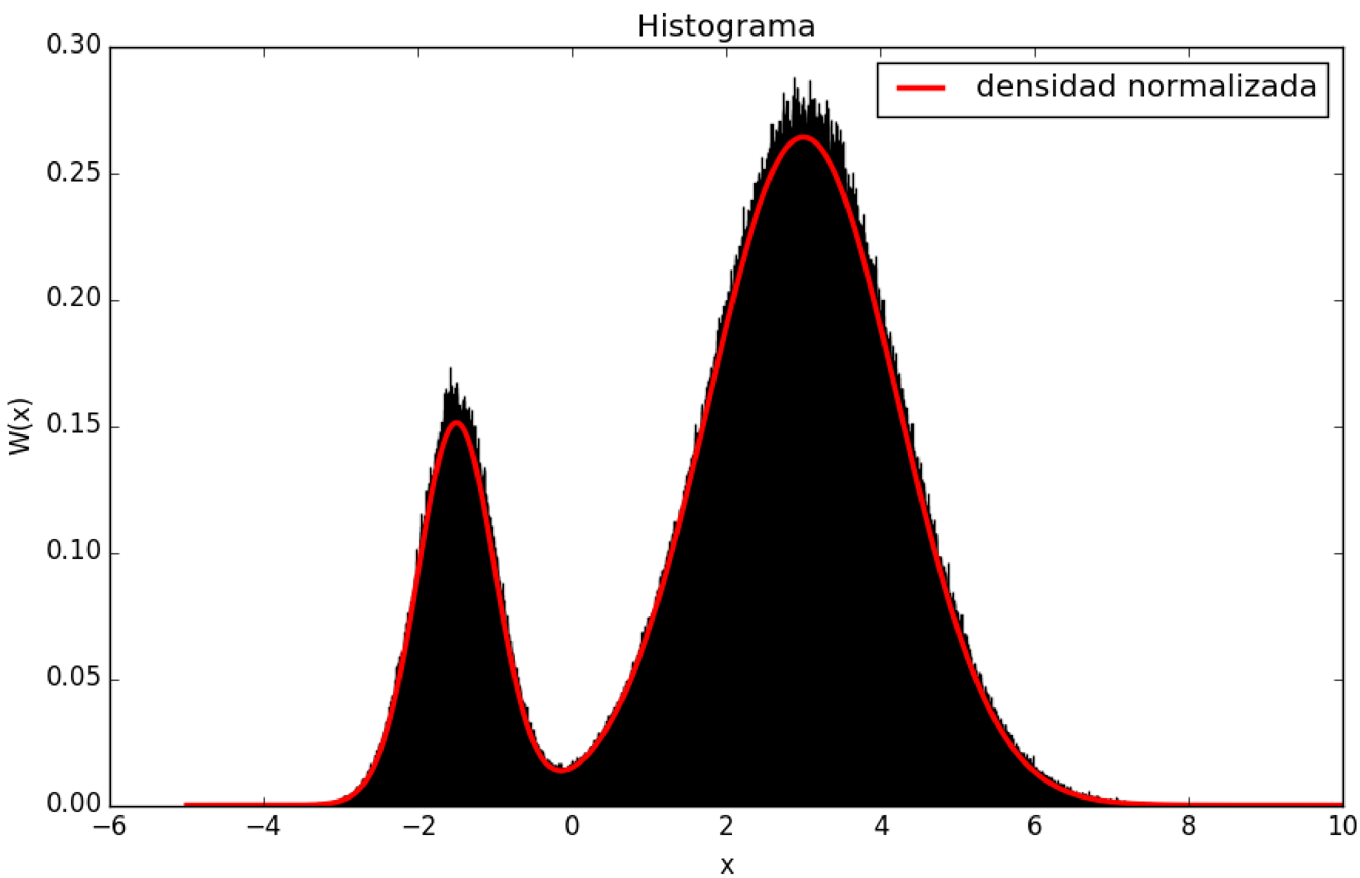
Para obtener el valor de A, se integra W entre x=-10 y x=10, ya que en estos extremos la función es prácticamente nula, como muestra el gráfico de la figura 1. El valor obtenido es A=13.252.

Figura 1: Distribución de probabilidad no normalizada



El siguiente gráfico muestra el histograma normalizado de los valores obtenidos mediante el algoritmo de Metrópolis y la curva teórica normalizada:

Figura 2: Histograma y densidad normalizada



Se puede apreciar claramente que el histograma de los valores calculados tiene un perfil idéntico al de la curva teórica, salvo por una ligera desviación al alza en las zonas en torno a los máximos. Es decir, el algoritmo generó más datos de los debidos en torno a los máximos. Sin embargo, esta diferencia es pequeña y el algoritmo genera, con gran precisión, una muestra de valores aleatorios cuya distribución es muy cercana a la función teórica, respetando tanto los valores como las derivadas de la función.