Universidad de los Andes

Departamento de Física

Herramientas Computacionales - Tarea 12

Semana 14- Métodos Monte Carlo.

2018-I

La solución debe subirse a SicuaPlus en un único archivo .ipynb con el nombre `NombreApellido_hw12.ipynb`, el cual debe contener la solución del taller.

En este ejercicio vamos a explorar una de las aplicaciones más importantes de los métodos Monte Carlo, la estimación de parámetros. Como se vió en el video de la semana, el algorítmo de Metropolis-Hastings sirve para muestrear números aleatorios de una distribución arbitraria de manera eficiente. En nuestro caso, se desea muestrear la distribución de probabilidad de los parámetros que ajustan un conjunto de datos experimentales. En particular, trabajaremos con un conjunto de observaciones que parecen seguir una tendencia lineal y nuestro objetivo será caracterizar la distribución de probabilidad de las posibles pendientes que ajustan estos datos. Para lograrlo, usaremos una caminata aleatoria cuyo tamaño de paso sigue una distribución gaussiana.

Comenzamos considerando una serie de N observaciones que consisten de una variable independiente $x^i_{\rm dat}$ y una dependiente $y^i_{\rm dat}$, donde $i = 1, \cdots, N$. Para estimar la pendiente que relaciona a las observaciones dependientes con las independientes, realizaremos un algorítmo de Metropolis-Hastings con M iteraciones. En cada paso del algorítmo se va a generar un número aleatorio, a_j con $j = 1, \cdots, M$, que pretende estimar dicha pendiente. Así, vamos a comparar las observaciones dependientes con observaciones ficticias que se generarán en cada paso del algorítmo. Estas observaciones ficticias se generan de acuerdo a la relación $y^i_j = a_j \times x^i_{\rm dat}$. En este contexto, si se considera que los errores con respecto al modelo lineal son gaussianos, se puede llegar a que los datos ficticios van a estar distribuidos como

$$p(\{y^i_j\}_{i=1\cdots N}) \propto \exp\left(-\chi^2\right), \tag{1}$$

donde

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(y^i_j - y^i_{\rm dat})^2}{N}. \tag{2}$$

Dado que y^i_j depende del parámetro a_j, cuando muestremos la distribución de y^i_j vamos a estar muestreando implicitamente la distribución de las pendientes que ajustan el modelo lineal entre $x^i_{\rm dat}$ y $y^i_{\rm dat}$. Para lograr estimar adecuadamente el valor de la pendiente entre estos datos se seguirán los pasos a continuación.

1. (0.5 puntos) Comenten todo su código.
2. (0.5 puntos) Carguen los datos en el archivo `datosLineales.txt` en dos arreglos de `numpy`. El que corresponde a la primera columna se llamará `xdatos`. El que corresponde a la segunda columna se llamará `ydatos`.
3. (0.5 puntos) grafiquen una dispersiíon entre `ydatos` y `xdatos`.

4. (0.5 puntos) Definan dos funciones. La primera, `chisq` debe tener como entrada dos arreglos de `numpy` y como salida el valor de χ^2 tal como aparece en la ecuación 2. La segunda función se llamará `ymod`. Esta función tendrá como entrada un arreglo de `numpy`, `x`, y un número flotante,`x`, y deverá devolver `a*x`. Adicionalmente, definan la lista vacía `awalk`.

5. (2 puntos) Implementen el algorítmo de Metropolis con $M = 100000$ iteraciones, donde ahora el papel de la función que se intenta muestrear va a estar dada por la ecuacíon 1. Se inicia el algorítmo muestreando un número aleatorio a_0 (el cual se añade a la lista `awalk`) y calculando la probabilidad de observar los datos ficticios $\{y_0^i\}_{i=1\cdots N}$ determinadas por a_0, $p_0 = \exp(-\chi^2)$. En cada paso se genera un número aleatorio r distribuído aleatoriamente según una distribución gaussiana con $\mu = 0$ y $\sigma = 0{,}1$ (esto se hace con el comando `np.random.normal(0,0.1)`). La muestra de la posible pendiente en la iteración presente va a ser $a_j = r + a_{j-1}$. Luego, se calcula la probabilidad $p_j = \exp(-\chi^2)$ usando el parámetro a_j. Ahora, se calcula la razón $\alpha = p_j/p_{j-1}$. Con esto, el resto del algorítmo es idéntico al propuesto en el video de la semana.

6. (1 punto) Grafiquen el histograma de `awalk` y calculen la moda y la desviación estándar de esta distribución. Comenten, ¿Cuál el el valor de la pendiente y su incertidumbre?.