- Métodos computacionales:
  Alejandro Segura
  Taller 2
  Fecha de entrega: Viernes 02/04/2020, 11:00 pm

1 Generador de números aleatorios

1. **(10 Puntos)** Un test simple para probar la calidad de un generador de eventos es evaluar las correlaciones con los k-vecinos más cercanos, donde $k \sim 20$.

$$C(k) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i x_{i+k}, \ (k = 0, 1, 2...) \tag{1}$$

   a) Implemente un código (en `C++` y en `Python`) que estime los coeficientes de correlación para los primeros k=20 vecinos. Use $N = 10^3$ eventos para ambos generadores (*simple* y *drand48*).

   b) Haga una gráfica entre el valor del coeficiente $C(k)$ en función del momento de la distribución k. ¿Qué diferencia encuentra entre ambos generadores?

   c) Note que solo debe implementar el generador simple en `C++`, dado que ya implementé el *drand48*.

2 Generación 3D de eventos

1. **(10 Puntos)** Escriba un código que genere una secuencia uniforme de eventos, contenidas en una esfera de radio $R = 2$ como se muestra en la Figura [1].

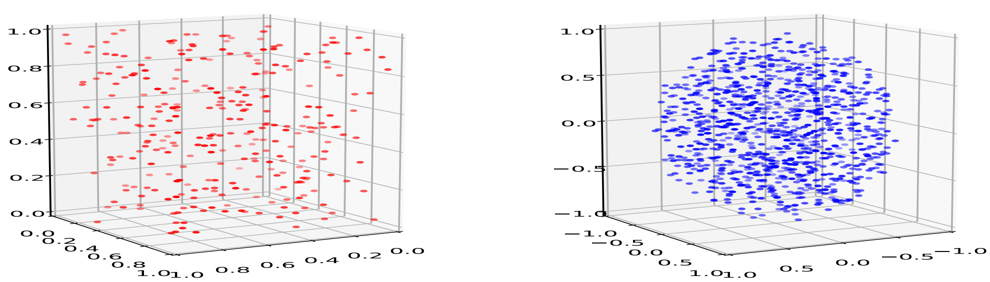

Figure 1: Generación de eventos cartesiana (izquierda) y esférica para $R = 1$ (derecha).

3 Integración MonteCarlo

1. **(10 Puntos)** Usando la generación de puntos sobre una esfera estime la siguiente integral (en `C++` y en `Python`), para $\{x^2 + y^2 + z^2 \leq 1\}$:

$$\int\int\int e^{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} dxdydz = 4\pi(e-2) \tag{2}$$

2. Haga una gráfica entre la precisión $\epsilon(I_{estimated}/I_{exact})$ y el número de puntos muestrales, el cuál debe tener un rango de valores adecuado para ver el comportamiento. ¿Qué dependecia se observa?

4 Metrópolis Hastings - Integración

1. **(10 Puntos)** Definiendo el volumen d-dimensional (V_d) como:

$$V_d = \int_{-\infty}^{\infty} cos(||r||)exp(-||r||^2)dr^d, \tag{3}$$

donde $||r|| = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} x_i^2}$ y $dr^d = dx^1 \cdots dx^d$. El volumen de normalización de esta función es $(2\pi\sigma^2)^{\frac{d}{2}}$, en este caso usar $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

a) Usando el método de Metrópolis-Hasting para $N = 10^5$ eventos, muestre que los volúmenes $d = 2, 3$ son respectivamente $V_2 \approx 1.817671646$ y $V_3 \approx 2.167233695$.

5 Metrópolis Hastings - Estimación de parámetros

1. **(10 Puntos)** Con los datos de `https://github.com/asegura4488/MetodosCompu2021/blob/main/Week7/data/MCMC_data.dat`, use el algoritmo de Metrópolis-Hastings para encontrar los parámetros que describen esos datos en los siguientes modelos.

a) Modelo 1: $a_0 + a_1 x$

b) Modelo 2: $a_0 + a_1 x + a_2 x^2$

c) Modelo 3: $a_0 e^{a_1 x}$

¿Qué modelo describe mejor los datos y porqué elije ese modelo?

6 Máxima Verosimilitud - Estimación de parámetros

1. **(10 Puntos)** Con los datos de `https://github.com/asegura4488/MetodosCompu2021/blob/main/Week7/data/Likelihood.dat`. Trazar las curvas de nivel del logaritmo de la verosimilitud asociados a los dos parámetros de la distribución μ y σ. La siguiente estrategia podría ser útil:

a) Incluir σ como parámetro en la definición del likelihood.

b) Calcular el logaritmo del likelihood en cada punto del espacio de parámetros. `np.meshgrid(x,y)` es buena opción.

c) Dado que trabajamos con el logaritmo, el likelihood total en un punto específico será la suma de cada punto muestral de los datos.

d) Use `plt.contour(MU, SIGMA, np.exp(Likelihood-Likelihood.max()))` para visualizar.

2. Para esta muestra de datos ¿cuál es el valor aproximado de μ y de σ?

7 Método de Verlet - Colisiones 2D de duración finita

1. **(10 Puntos)** Un modelo interesante para simular interacción partícula a partícula es:

$$\vec{f}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} K|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^5 \hat{n} & si \quad |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| < R_1 + R_2 \\ 0 & \qquad En\ otro\ caso. \end{cases} \tag{4}$$

donde R_1, R_2 son los radios de las esferas, que podrían ser diferentes. Usar $K = 100\ N/m^3$.

a) Crear una clase en `C++` llamada `Particle` con los atributos necesarios para caracterizar cada partícula.

b) Para el caso de 2 partículas use las siguientes condiciones iniciales.
$P1(x_0 = -10., y_0 = 4.0, v_{x_0} = 40., v_{y_0} = 0., m = 10., r = 5.)$
$P2(x_0 = 0., y_0 = 0., v_{x_0} = 0., v_{y_0} = 0., m = 10., r = 5.)$

c) Evolucionar el sistema siguiendo una versión adecuada del algoritmo de Verlet:

$$\begin{aligned} \vec{r}(t+\Delta t) &= \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \vec{a}(t)\Delta t^2/2 \\ \vec{v}(t+\Delta t) &= \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\Delta t \end{aligned} \tag{5}$$

Un ejemplo es:

```
x += vx*deltat + 0.5*ax*pow(deltat,2);
y += vy*deltat + 0.5*ay*pow(deltat,2);
vx += ax*deltat;
vy += ay*deltat;
```

d) Debe verificar que la cantidad de movimiento lineal ($\vec{p}$) se conserve durante la colisión.

e) Es **muy importante** usar pasos pequeños como $\Delta t = 0.001\ s$ en la simulación de fuerzas de contacto de duración finita, debido a que se puede crear energía durante el choque.

8 Método de Verlet - Gas 2D con interacción finita

1. **(30 Puntos)** Usar el modelo anterior para simular un gas de $N = 50$ partículas, con $m = 10\ kg$ y $R = 4\ m$.

a) Use adecuadamente el concepto de clase en `C++` para crear un array de objetos.

b) Las posiciones y velocidades iniciales pueden ser inicializadas aleatoriamente dentro de la región R$(-50, -50, 50, 50)$. La velocidades deben ser coherentes con el tiempo de simulación $V_{x0} < 100$ & $V_{y0} < 100\ m/s$.

c) Evolucionar cada objeto físico usando el método de Verlet. Verificar que se cumple la tercera ley de Newton durante las colisiones.

d) Modele adecuadamente las paredes del recipientes para contener las partículas al interior de la región $r(-50, -50, 50, 50)$. Lo más sencillo, es considerar choques perfectamente elásticos.

e) Animar la simulación usando `Gnuplot`. Para poder hacer más ligero el tiempo de computo, mandar por *pipe* cada 100 iteraciones.

f) Verificar la conservación del vector de momento ($\vec{p}$). Equilibrar la energía es complicado, para este ejercicio la temperatura tiende a disminuir por acumulación de error en las colisiones.

g) La distribución de velocidades cuadráticas que se obtiene es [2]:

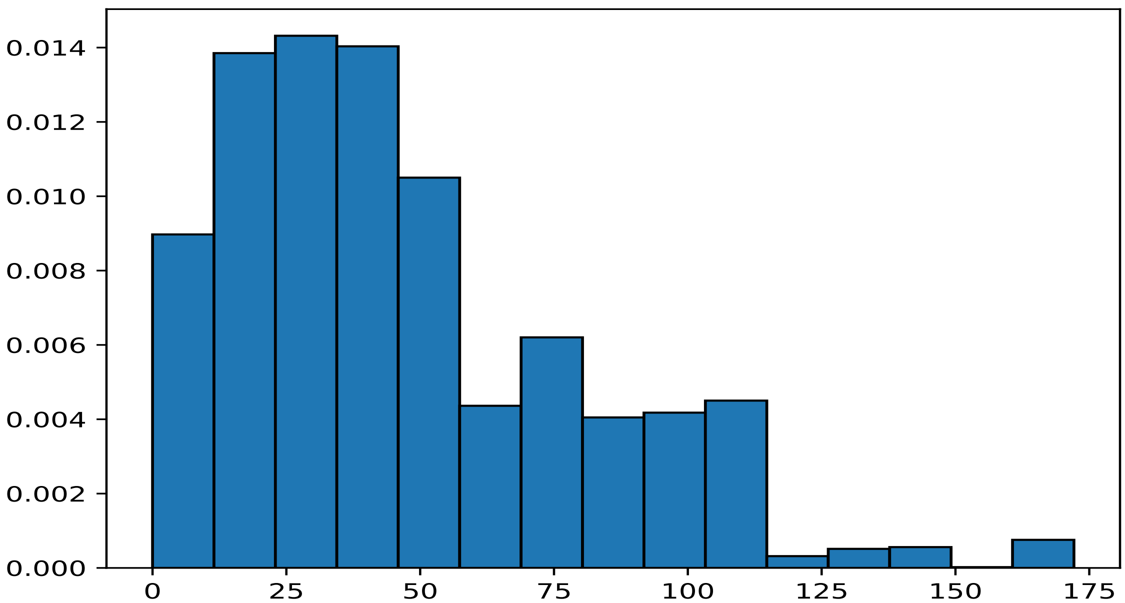

Figure 2: Distribución de velocidades cuadráticas para el gas de 50 partículas. Se tomaron las segundas 10000 iteraciones de las 50 partículas para generar la gráfica. Notar el parecido con el límite termodinámico (Distribución de Maxwell-Boltzman)