

Métodos Computacionales 2: Taller 5

MCMC

Por Santiago Henao Castellanos

Este taller se centra en aplicaciones de las cadenas de Markov.

El taller debe ser presentado varios archivos `.py`, uno por punto (`Punto_1.py`, `Punto_2.py`, etc) que debe correr sin errores invocando simplemente `python Punto_1.py`.

El código no debe tener ningún `plt.show()`, y tampoco debe interrumpir su ejecución o esperar ningún input. Todos los resultados que se pidan guardar (gráficas, videos, etc) deben estar en la misma carpeta del código, y deben ser los mismos que produce el código al ser ejecutado. Si se especifica que debe definir una función, debe usar el nombre asignado. Se penalizará con nota si no se cumplen estas especificaciones.

Si el código alza una excepción, se calificará hasta ese punto.

Se recomienda usar `numba` para acelerar los procesos cuando sea posible.

Este taller-parcial vale como Taller 5 y parcial 3. Tiene dos puntos, cada uno valiendo 2.7/5 puntos; sin embargo, la nota máxima es de 5.

1 Modelo de Ising 2D

El modelo de Ising en dos dimensiones consiste en una malla de espines $\sigma_{ij} = \pm 1$ que pueden estar apuntando hacia arriba o hacia abajo; simplemente una matriz de $N \times N$ con elementos -1 o 1 .

Inicialmente, estos espines están desordenados, es decir, los generamos de manera aleatoria, pero por efectos de temperatura algunos de ellos cambiarán y tenderán al estado de menor energía.

La energía de este sistema está dada por la expresión

$$\varepsilon_{i,j} = -J\sigma_{i,j}(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j-1})$$

Es decir, la suma de productos de cada espín por sus vecinos más cercanos. Se considerarán condiciones de frontera periódicas.

La versión del algoritmo de Metrópolis para evolucionar el sistema de Ising es la siguiente:

1. Perturbar el sistema, es decir, cambiar de sentido un solo espín en una posición i, j elegida aleatoriamente.
2. Calcular la nueva energía¹ con ese espín perturbado ε_{new} , y calcular la diferencia de energía $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\text{new}} - \varepsilon_{\text{old}}$.
3. Si $\Delta E \leq 0$, aceptar esta nueva configuración.
4. De lo contrario, lanzar un número aleatorio u , uniforme de 0 a 1, y comparar
 - Si $u \leq \exp(-\beta\Delta\varepsilon)$, aceptar la nueva configuración.
 - de lo contrario, dejar la configuración vieja.
5. Repetir desde el paso 1 hasta alcanzar el equilibrio.

Durante la simulación quisiéramos medir la energía y la magnetización del sistema.

Para medir la energía promedio E del sistema, Calcule la energía de cada espín y súmelas todas antes de simular (ε_0). Mientras esté haciendo la simulación, en cada paso retorne el cambio de energía $\Delta\varepsilon$, y al final haga la suma acumulativa. Hay que normalizar la energía dividiendo por $4N^2$, el número de espines por el número de vecinos. Claramente si no se cambia ningún espín, $\Delta\varepsilon = 0$

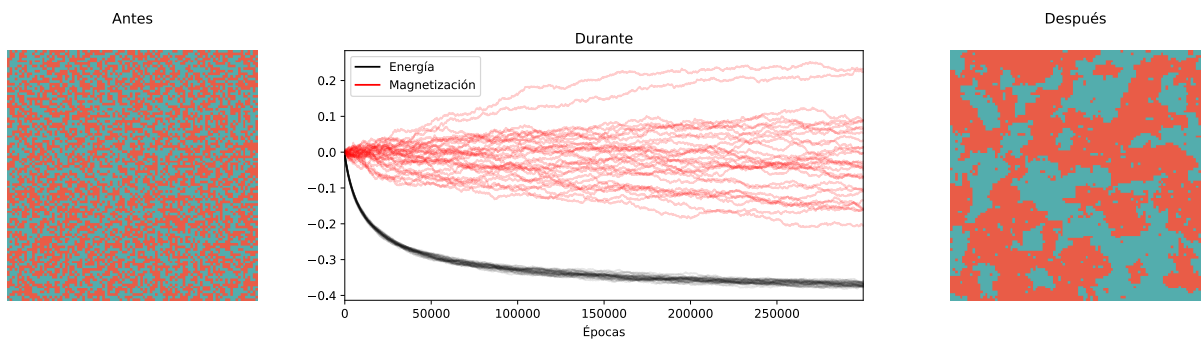
$$E(t = t_k) = \frac{1}{4N^2} \left(\varepsilon_0 + \sum_{i=1}^k \Delta\varepsilon_i \right)$$

La magnetización m es simplemente la suma de todos los valores de espín en la grilla. En cada paso, si se cambió el espín $\sigma_{i,j}$, el cambio en la magnetización será $\Delta m = 2\sigma_{i,j}$. La magnetización se normaliza dividiendo por N .

$$M(t = t_k) = \frac{1}{N} \left(\overbrace{\sum_{i,j=0}^N \sigma_{i,j}}^{\text{inicial}} + \sum_{i=0}^k \Delta m_i \right)$$

¹Note que no necesita recorrer de nuevo todo el array para calcular la diferencia de energía, ya que sólo cambió un elemento. La diferencia de energías entre los dos estados será la misma diferencia de energías entre los vecinos.

1.a Alcanzar el equilibrio [1pt]



Simule con $J = 1$, $\beta = \frac{1}{2}$, y trate de replicar el gráfico mostrado, partiendo desde $\beta = 0$, es decir, un estado inicial donde cada espín está aleatoriamente en $+1$ o -1 , lo que podría considerarse temperatura infinita. En la gráfica se muestran muchas trayectorias para resaltar el comportamiento estocástico de la simulación, pero usted sólo tiene que hacer una. [1.a.pdf](#)

Note cómo el sistema empieza desde energía casi cero y va disminuyendo, tendiendo lentamente al equilibrio térmico.

BONO: ¿es capaz de medir el tamaño promedio de los dominios magnéticos mientras el sistema alcanza el equilibrio? ¿qué cree que suceda en el cambio de fase?

1.b Cambio de fase [1.7pt]

Según la termodinámica, la capacidad calorífica macroscópica del sistema viene dada por

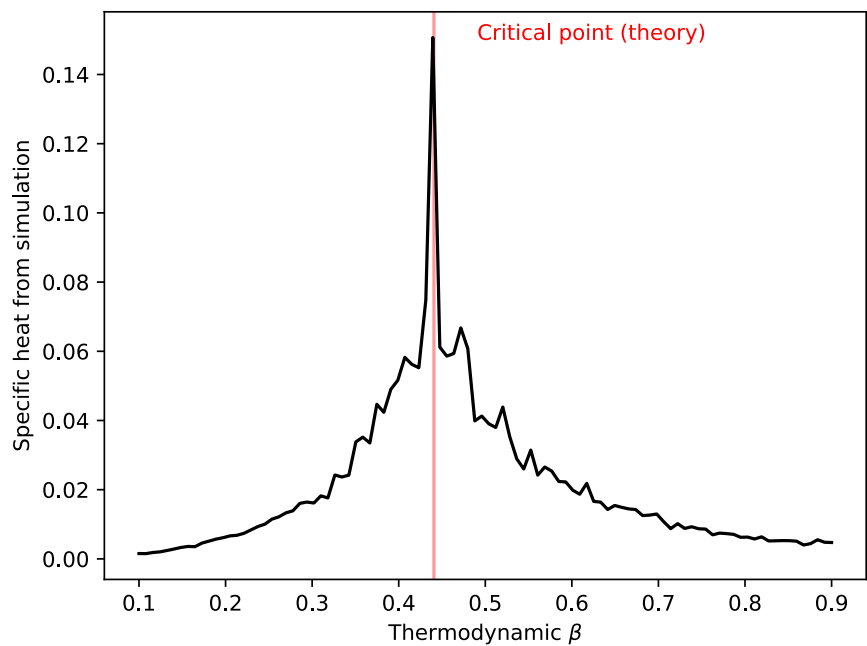
$$C_v(\beta) = \beta^2 N^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

Es decir, la varianza de la energía tras muchas iteraciones en estado de equilibrio.

Cuando N es muy grande, la capacidad calorífica se indetermina en una temperatura crítica. Si $J = 1$, según la solución teórica de Onsager:

$$\beta_{\text{crítico}} = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2})$$

Calcule la capacidad calorífica como la varianza de la energía de un sistema cuando oscila alrededor de su estado de equilibrio. Haga eso para varios $\beta \in (0, 1)$ y reproduzca la gráfica que evidencia el cambio de fase en [1.b.pdf](#) :



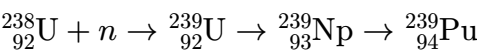
Pista: Comience con estado a $\beta = 0$ (espines aleatorios), y simule hasta que el primer β (digamos 0.1) alcance el equilibrio. Cuando haya medido el C_v , use el estado final de esa simulación como el estado inicial de la siguiente simulación, digamos con $\beta = 0.15$. Si no empieza de cero cada vez, demorará menos en alcanzar el equilibrio.

2 Evolución temporal de procesos estocásticos

El Cornel Aureliano Buendía decidió dejar la guerra y retirarse a Macondo, a la vieja platería donde cuando joven habría aprendido a forjar pescaditos de oro. El Honorable quiere dedicar sus últimos días a mejorar las condiciones de su comunidad, y debido a las fallas eléctricas constantes por la maña infraestructura gubernamental, decide abrazar las nuevas tecnologías y montar un reactor nuclear. Para eso, recordando cómo usted lo ayudó con el problema de balística en los tiempos de antaño, contrata a su científico de confianza para revisar el diseño de la planta de purificación para el reactor: nuestro objetivo será revisar si se acumula mucho material radioactivo en la planta.

El Uranio que se encuentra en la naturaleza se compone principalmente de dos isótopos, $^{238}_{92}\text{U}$, siendo el 99.3%, y el resto en $^{235}_{92}\text{U}$, que es el radioactivo, pero en trazas tan pequeñas que no podemos usarlo.

Sin embargo, $^{238}_{92}\text{U}$ puede capturar un neutrón y convertirse en $^{239}_{92}\text{U}$, que es inestable, y tiene decaimientos beta que lo convierten en Plutonio, que sí puede usarse como combustible para un reactor. La cadena es la siguiente:



En este problema, asumiremos que estamos bombardeando una muestra de $^{238}_{92}\text{U}$ que produce una cierta cantidad A de $^{239}_{92}\text{U}$ por día, que luego pasa por la cadena mostrada anteriormente. Ya que el Plutonio resultante es radioactivo, la planta está diseñada para evacuar constantemente parte de ese Plutonio al día a una tasa B , para evitar que se acumule y alcance la criticalidad mientras está en almacenamiento.

En nuestra simulación sólo contabilizaremos las cantidades $U = ^{239}_{92}\text{U}$, $Np = ^{239}_{93}\text{Np}$, $Pu = ^{239}_{94}\text{Pu}$.

Evento	Descripción	Tasa	Resultado
$^{238}_{92}\text{U} + n \rightarrow \text{U}$	Creación de $^{239}_{92}\text{U}$	A	$U+=1$
$\text{U} \rightarrow \text{Np}$	Decaimiento beta de Uranio	$U\lambda_U$	$U-=1; \text{Np}+=1$
$\text{Np} \rightarrow \text{Pu}$	Decaimiento beta de Neptunio	$\text{Np} \lambda_{\text{Np}}$	$\text{Np}-=1; \text{Pu}+=1$
$\text{Pu} \rightarrow \emptyset$	Extracción del Plutonio	$\text{Pu} B$	$\text{Pu}-=1$

Se tienen los datos $A = 1000$, $B = 20$, y las vidas medias de decaimiento beta son $t_{\frac{1}{2}}(^{239}_{92}\text{U}) = 23.4 \text{ min}$ y $t_{\frac{1}{2}}(^{239}_{93}\text{Np}) = 2.36 \text{ días}$. Para esto necesitamos la constante de decaimiento λ , es decir, cuántos decaimientos se esperan por unidad de tiempo.

2.a Sistema determinista [0.2pt]

Agarrando todo lo que suma y todo lo que resta por cada variable, podemos expresar esto como el sistema de ecuaciones diferenciales, sumando los eventos de creación y restando los de destrucción:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}U(t) &= A - \lambda_U U(t) \\ \frac{d}{dt}N_p(t) &= \lambda_U U(t) - \lambda_{N_p} N_p(t) \\ \frac{d}{dt}P_u(t) &= \lambda_{N_p} N_p(t) - BP_u(t)\end{aligned}$$

Simule 30 días de operación de la planta, que comienza con 10 unidades de cada isótopo. ¿Llegan las variables a un estado estable? Si es así, responda cuál, y cuánto tiempo demoran.

Debería usar una técnica parecida a la del taller 3 para detectar automáticamente este estado estable, poniendo un evento cuando la magnitud de la derivada del sistema sea pequeña.

Grafique la solución para los tres isótopos en `2.a.pdf`. La gráfica debe ser visible en sus características principales; considere qué ejes y qué organización usar.

2.b Ecuación diferencial estocástica [0.5pt]

Si consideramos que los eventos suceden aleatoriamente, la ecuación diferencial tendrá un término de ruido aleatorio que puede modelarse como movimiento Browniano. Eso se vería así:

$$dU(t) = \overbrace{(A - \lambda_U U(t))}^{\text{drift } \mu(U)} dt + \overbrace{\sqrt{A + \lambda_U U(t)}}^{\text{volatility } \sigma(U)} dW$$

Donde el término $\sigma(t)$ que acompaña a dW , llamado volatilidad, se encarga de ese ruido aleatorio. Note que el término en la raíz es lo mismo que el drift, pero todo positivo.

Para simular una ecuación así, se usa la versión estocástica del algoritmo de Runge-Kutta. En su versión de orden 2 esto es:

$$U(t + dt) = U(t) + \frac{1}{2}(K_1 + K_2)$$
$$K_1 = dt \mu(U(t)) + (W + S)\sqrt{dt} \sigma(U(t))$$
$$K_2 = dt \mu(U(t) + K_1) + (W + S)\sqrt{dt} \sigma(U(t) + K_1)$$

donde $W \sim \mathcal{N}(0, 1)$ y $S \in \{-1, 1\}$ elegidos aleatoriamente para cada paso.

Simule el sistema completo hasta $t = 30$, comenzando con 10 unidades de cada isótopo. Note que cada trayectoria generada por este método será diferente. Dibuje cinco trayectorias por debajo de la solución determinista del punto anterior, y examine el comportamiento. 2.b.pdf

2.c Simulación exacta [0.5pt]

Existe un algoritmo de simulación estocástica que es exacto a nivel molecular, en el sentido de que deja a las variables como números enteros. La estadística es diferente a niveles bajos.

(A quienes estén interesados en los detalles matemáticos del algoritmo presentado a continuación, los invito a leer [Daniel T. Gillespie, 1976, Journal of Computational Physics, 22, 403-434](#))

Tenemos un sistema $\vec{Y} = [U, Np, Pu]$ donde pueden ocurrir cinco eventos, que codificaremos² como vectores de cambio al vector de estado del sistema:

$$\vec{R} = ([1, 0, 0] \quad [-1, 1, 0] \quad [0, -1, 1] \quad [0, 0, -1])$$

Cada evento tiene su tasa de ocurrencia:

$$\text{Tasas} = (A \quad U \quad \lambda_U \quad Np \quad \lambda_{Np} \quad B \quad Pu)$$

Como fue discutido en clase, el tiempo hasta la siguiente reacción será una variable aleatoria, digamos τ , con distribución exponencial $\tau \sim \text{Exponential}(\mu = 1/\sum \text{Tasas})$, y la siguiente reacción será elegida aleatoriamente, cada una con distribución de probabilidad $\text{Tasas} / \sum \text{Tasas}$.

Cada paso de evolución temporal del sistema se hace de la siguiente manera:

1. Se re-calculan las tasas, ya que éstas dependen del estado del sistema.
2. Se calcula el tiempo de siguiente reacción `tau = random.exponential(1/tasas.sum())`
3. Se elige la siguiente reacción `r = random.choice(R, p=Tasas/Tasas.sum())`
4. Se aplica la reacción `Y_new = Y_old + r`
5. Se evoluciona el tiempo `t_new = t_old + tau`
6. Posiblemente se guarda el estado del sistema.
7. Si $t_{\text{new}} < t_{\text{max}}$, repita desde 1.

Simule el sistema completo hasta $t = 30$, comenzando con 10 unidades de cada isótopo. Dibuje cinco trayectorias por debajo de la solución determinista del punto anterior, y examine el comportamiento. [2.c.pdf](#)

²Esto es sólo una sugerencia; es de hecho más rápido tener variables individuales en vez de arrays para esto.

2.d Probabilidad de concentración crítica [1.5pt]

Con $N \approx 1000$ trayectorias, estime la probabilidad de alcanzar la concentración crítica de 80 unidades de Plutonio en la planta, en el ciclo de 30 días de antes.

Llamando k a el número de trayectorias que alcanzan esa concentración, puede usar una aproximación frecuentista:

$$\hat{p} = p \pm \sqrt{\frac{p(1-p)}{N}} \quad \text{donde} \quad p = \frac{k}{N}$$

o una aproximación Bayesiana, si sabe lo que está haciendo:

$$\hat{p} \sim \text{Beta}(1 + k, 1 + k - N) \quad (\text{usamos un prior uniforme})$$

Guarde en `2.d.txt` la probabilidades para cada método de simulación y sus incertidumbres, en porcentajes, junto con una discusión de este resultado en un par de frases máximo.

Mejor aún si puede producir un intervalo de confianza.