Métodos de Monte Carlo - 3

Curso de Física Computacional

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

7 de mayo de 2018

1. Caminatas aleatorias
   - Definición
2. Universalidad e invarianza de escala
3. Ejemplos de caminatas aleatorias
4. Construir una caminata aleatoria

Definición

Las *caminatas* aleatorias son trayectorias en donde se dan pasos sucesivos en direcciones aleatorias.

Definición

Las *caminatas* aleatorias son trayectorias en donde se dan pasos sucesivos en direcciones aleatorias.

Surgen en la mecánica estadística: como sumas parciales de cantidades que varían, como trayectorias de partículas sometidas a colisiones repetidas, y como las estructuras largas de sistemas vinculados como los polímeros.

Comportamiento emergente

Presentan dos clases de comportamiento emergente:

1. En primer lugar, una caminata aleatoria individual, después de un gran número de pasos, se convierte en invariante fractal o de escala.

Comportamiento emergente

Presentan dos clases de comportamiento emergente:

1. En primer lugar, una caminata aleatoria individual, después de un gran número de pasos, se convierte en invariante fractal o de escala.
2. En segundo lugar, el punto final de la caminata aleatoria tiene una distribución de probabilidad que obedece a una ley continua simple: la ecuación de difusión.

Comportamiento emergente

Ambos comportamientos son en gran parte independientes de los detalles microscópicos de la caminata, son universales.

Las caminatas aleatorias ilustran perfectamente muchos de los temas y métodos de la mecánica estadística.

Universalidad e invarianza de escala

La mecánica estadística suele exigir sumas o promedios de una serie de cantidades que varían:

$$s_N = \sum_{i=1}^{N} \ell_i$$

La energía de un material es la suma sobre las energías de las moléculas que componen el material.

Tu calificación final de física computacional es la suma de los puntos tanto de tareas como de exámenes. Ahora imagínate sumando cada término a la vez.

La trayectoria $s_1, s_2, \ldots$ forma un ejemplo de una caminata aleatoria unidimensional.

1. Caminatas aleatorias

2. Universalidad e invarianza de escala

3. Ejemplos de caminatas aleatorias
   - Lanzamiento de monedas
   - Una molécula de perfume
   - El problema del borracho

4. Construir una caminata aleatoria

Lanzamiento de monedas

Considera el lanzar una moneda y registrar la diferencia s_N entre el número de águilas y soles encontradas.

Cada lanzamiento de moneda aporta $\ell_i = \pm 1$ del total.

Lanzamiento de monedas

Considera el lanzar una moneda y registrar la diferencia s_N entre el número de águilas y soles encontradas.

Cada lanzamiento de moneda aporta $\ell_i = \pm 1$ del total.

Lanzamiento de monedas

¿Qué tan grande será la suma

$$s_N = \sum_{i=1}^{N} \ell_i = \text{ águilas - soles}$$

luego de N lanzamientos?

Lanzamiento de monedas

El promedio de s_N no es una buena medida para la suma, porque es cero (son igualmente probables tanto pasos positivos, como negativos).

Lanzamiento de monedas

Podemos medir el valor absoluto promedio $\langle |s_N| \rangle$, pero resulta que una distancia característica más agradable es la raíz media cuadrática (RMS) de la suma

$$\sqrt{\left\langle s_N^2 \right\rangle}$$

Lanzamiento de monedas

Luego del primer lanzamiento de la moneda, el cuadrado de la media es

$$\left\langle s_1^2 \right\rangle = 1 = \frac{1}{2}\left(-1\right)^2 + \frac{1}{2}\left(1\right)^2 \tag{1}$$

Lanzamiento de monedas

Luego del primer lanzamiento de la moneda, el cuadrado de la media es

$$\left\langle s_1^2 \right\rangle = 1 = \frac{1}{2}(-1)^2 + \frac{1}{2}(1)^2 \tag{1}$$

Luego del segundo y tercer lanzamiento de la moneda

$$\begin{aligned} \left\langle s_2^2 \right\rangle &= 2 = \frac{1}{4}(-2)^2 + \frac{1}{2}(0)^2 + \frac{1}{4}(2)^2 \\ \left\langle s_3^2 \right\rangle &= 3 = \frac{1}{8}(-3)^2 + \frac{3}{8}(-1)^2 + \frac{3}{8}(1)^2 + \frac{1}{8}(3)^2 \end{aligned} \tag{2}$$

Lanzamiento de monedas

Por ejemplo, la probabilidad de tener dos águilas en tres lanzamientos es tres de ocho: AAS, SAS y SSS.

Sin usar la computadora, ¿cuál es el valor de $\left\langle s_7^2 \right\rangle$?

¿Patrón de lanzamientos?

¿Este patrón continua con los siguientes lanzamientos?

Veamos la RMS en N pasos en términos de la misma RMS después de $N - 1$ pasos, más el último paso.

¿Patrón de lanzamientos?

Debido a que el promedio de la suma es la suma del promedio, encontramos

$$\left\langle s_N^2 \right\rangle = \left\langle (s_{N-1}^2 + \ell_N)^2 \right\rangle = \left\langle s_{N-1}^2 \right\rangle + 2 \left\langle s_{N-1}\, \ell_N \right\rangle + \left\langle \ell_N^2 \right\rangle \quad (3)$$

Ahora, ℓ_N es ± 1 con igual probabilidad, independientemente de lo que ocurrió antes (y por tanto independiente de s_{N-1}).

¿Patrón de lanzamientos?

Así

$$\langle s_{N-1}\, \ell_N \rangle = \frac{1}{2}\, s_{N-1}\, (+1) + \frac{1}{2}\, s_{N-1}\, (-1) = 0$$

¿Patrón de lanzamientos?

Así

$$\langle s_{N-1}\, \ell_N \rangle = \frac{1}{2}\, s_{N-1}\,(+1) + \frac{1}{2}\, s_{N-1}\,(-1) = 0$$

Y como sabemos que $\ell_N^2 = 1$ resulta

$$\left\langle s_N^2 \right\rangle = \left\langle s_{N-1}^2 \right\rangle + 2\, \langle s_{N-1} \ell_N \rangle + \left\langle \ell_N^2 \right\rangle = \left\langle s_{N-1}^2 \right\rangle + 1 \qquad (4)$$

¿Patrón de lanzamientos?

Si suponemos que

$$\left\langle s_{N-1}^2 \right\rangle = N - 1$$

hemos demostrado por inducción sobre N que

$$\left\langle s_N^2 \right\rangle = N$$

De aquí que la raíz cuadrada de la media cuadrada (RMS) de (águilas - soles) es igual a la raíz cuadrada del número de lanzamientos de la moneda

$$\sigma_s = \sqrt{\left\langle s_N^2 \right\rangle} = \sqrt{N} \tag{5}$$

Naturaleza de las caminatas aleatorias

Las caminatas aleatorias también se pueden ver como trayectorias de colisiones sucesivas o giros aleatorios.

Una molécula de perfume

Por ejemplo, la trayectoria de una molécula de perfume en una muestra de aire.

Dado que el aire es diluido y las interacciones son de corto alcance, la molécula viajará básicamente en línea recta, con cambios bruscos de velocidad durante pocas colisiones.

Una molécula de perfume

Después de algunas colisiones sustanciales, la velocidad de la molécula no estará correlacionada con su velocidad original.

La trayectoria que toma la molécula será una caminata irregular, aleatoria en tres dimensiones.

Una molécula de perfume

La caminata aleatoria de una molécula de perfume involucra direcciones, velocidades aleatorias y pasos, todos ellos aleatorios.

Es más conveniente estudiar los pasos a intervalos de tiempo regulares, por lo que consideraremos el *problema clásico del borracho*.

El problema del borracho

Se supone que un borracho comienza a moverse a partir de un poste en $x = y = 0$.

Hace pasos ℓ_N cada uno de longitud L, en intervalos regulares de tiempo.

No hagan esto en casa!!

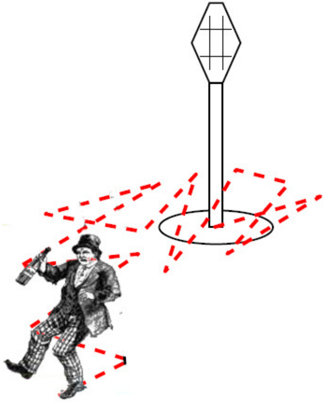

Figura 1: *Ejemplo de un borracho caminando por la calle.*

El problema del borracho

Como el amigo está borracho, los pasos que da, están en direcciones completamente aleatorias, cada uno de los pasos no está correlacionado con los pasos anteriores.

El problema del borracho

Esta falta de correlación indica que el promedio del producto punto entre dos pasos $\boldsymbol{\ell}_m$ y $\boldsymbol{\ell}_n$ es cero, ya que todos los ángulos relativos θ entre las dos direcciones son igualmente probables

$$\langle \boldsymbol{\ell}_m \cdot \boldsymbol{\ell}_n \rangle = L^2 \langle \cos\theta \rangle = 0$$

El problema del borracho

Esto implica que el producto de ℓ_N con $s_{N-1} = \sum_{m=1}^{N-1} \ell_m$ es cero.

Usemos esto para nuevamente recurrir a la inducción:

El problema del borracho

$$
\begin{aligned}
\left\langle s_N^2 \right\rangle &= \left\langle \left(s_{N-1} + \ell_N \right)^2 \right\rangle \\
&= \left\langle s_{N-1}^2 \right\rangle + \left\langle 2\, s_{N-1} \cdot \ell_N \right\rangle + \left\langle \ell_N^2 \right\rangle \\
&= \left\langle s_{N-1}^2 \right\rangle + L^2 \\
&= N\ L^2
\end{aligned}
\tag{6}
$$

El problema del borracho

$$
\begin{aligned}
\left\langle s_N^2 \right\rangle &= \left\langle \left(s_{N-1} + \ell_N \right)^2 \right\rangle \\
&= \left\langle s_{N-1}^2 \right\rangle + \left\langle 2\, s_{N-1} \cdot \ell_N \right\rangle + \left\langle \ell_N^2 \right\rangle \\
&= \left\langle s_{N-1}^2 \right\rangle + L^2 \\
&= N\ L^2
\end{aligned}
\tag{6}
$$

así que la raíz media cuadrática de la distancia recorrida es $\sqrt{N}\ L$.

Invariancia de escala

Con N pasos, ¿qué tipo de trayectoria tendríamos con una longitud de $\sqrt{N}$?

Invariancia de escala

Con N pasos, ¿qué tipo de trayectoria tendríamos con una longitud de $\sqrt{N}$?

Las caminatas aleatorias forman trayectorias que parecen irregulares y revueltas.

De hecho, son tan irregulares que si hacemos un zoom en una de ellas, la ventana que veremos se ve tan irregular.

Ejemplo de una caminata aleatoria

La longitud de esta caminata es de 32000 pasos

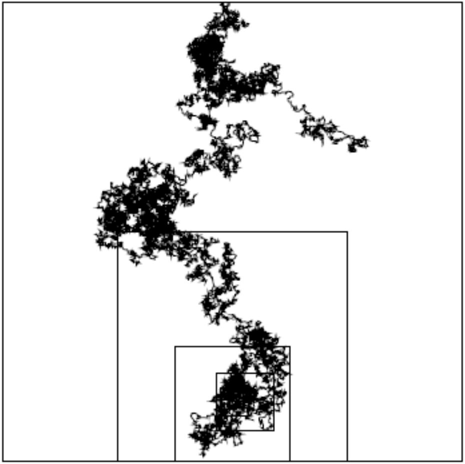

Figura 2: *Hacemos un zoom a una cuarta parte de la imagen.*

Cambio de escala

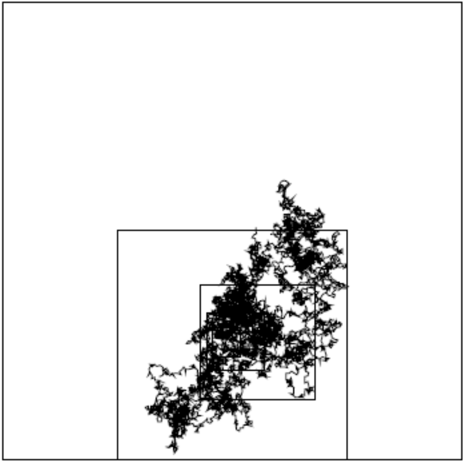

Figura 3: *La caminata aleatoria de longitud $N/4$, se asemeja a la anterior de longitud N.*

Cambio de escala

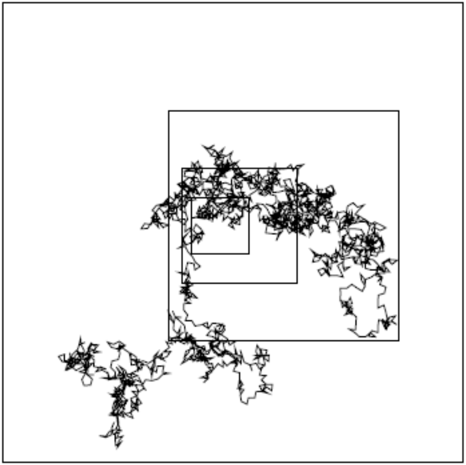

Figura 4: *Caminata aleatoria de longitud* $N/16$.

Cambio de escala

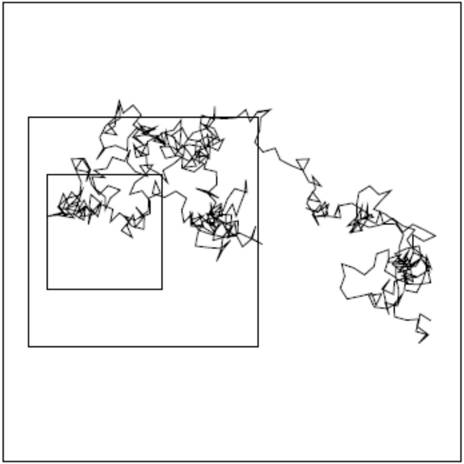

Figura 5: *Seguimos haciendo zoom a la caminata aleatoria.*

Cambio de escala

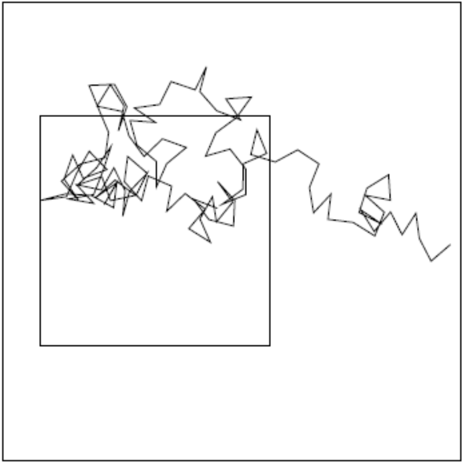

Figura 6: *Ya se distinguen los pasos de la caminata.*

Cambio de escala

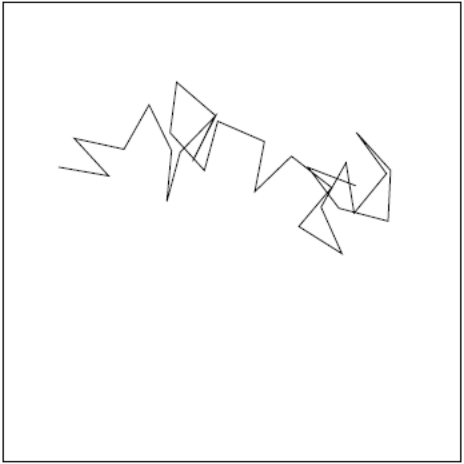

Figura 7: *Se aprecian los pasos de la caminata, la longitud es de 31 pasos.*

Invariancia de escala

Las caminatas aleatorias son invariantes de escala:

Se ven iguales en todas las escalas

Invariancia de escala

Las caminatas aleatorias son invariantes de escala:

Se ven iguales en todas las escalas

Las caminatas aleatorias tienen una dimensión fractal $D = 2$.

Construyamos una caminata aleatoria

Utilizaremos un módulo llamado **`turtle`** de `python`.

Es una interfaz gráficas popular para la acercar a los menores y adolescentes en la programación.

Caminata aleatoria con `turtle`

Imagínate una tortuga robótica comenzando en $(0, 0)$ en el plano $x - y$.

Después de “llamar” con el módulo a una tortuga, usamos la función **`turtle.forward(15)`**

Caminata aleatoria con `turtle`

Imagínate una tortuga robótica comenzando en $(0,0)$ en el plano $x - y$.

Después de "llamar" con el módulo a una tortuga, usamos la función **`turtle.forward(15)`**

La tortuga se mueve 15 píxeles en pantalla en dirección hacia adelante, dibujando una línea a medida que se mueve.

Caminata aleatoria con `turtle`

Si usamos ahora la función **`turtle.right(25)`**, ésta gira un ángulo de 25 grados en el sentido de las manecillas del reloj.

Con la combinación de éstos comandos y otros similares, podemos dibujar formas complejas fácilmente.

Algo muy breve de teoría del color

El modelo HSV (del inglés Hue, Saturation, Value – Matiz, Saturación, Valor), también llamado HSB (Hue, Saturation, Brightness – Matiz, Saturación, Brillo), define un modelo de color en términos de sus componentes.

El Matiz

El matiz es el término más básico del color y denota el color de un objeto.

Cuando decimos “azul”, “rojo” o “verde”, se habla de matices.

La saturación

La saturación se refiere a cómo un matiz aparece bajo ciertas condiciones de luz.

Podemos pensar en la saturación en términos de débil vs. fuerte o matices pálidos vs. puros.

El valor

El valor podría ser llamado también “claridad”.

Se refiere a qué tan claro u oscuro es un color.
Los colores claros tienen valores más altos.

Por ejemplo, el naranja tiene un valor más alto que el azul marino. El negro tiene el menor valor de todos los colores y el blanco tiene el más alto.

¿Para qué queremos el HSV

Para la caminata aleatoria que elaboraremos, se va a dibujar la trayectoria con un color, para evitar que con el mismo color negro se empalmen los trazos.

Entonces lo que haremos será decirle a la computadora que cambie el color de acuerdo a cierta instrucción, que recibirá la función **`hsv_to_rgb`**, que modificará el color con el modelo RGB (rojo, verde, azul), que es el que utiliza `python`.

Código con python I

Código 1: Definición del espacio de trabajo

```python
import turtle
from random import randint
from colorsys import hsv_to_rgb

#longitud del paso
paso = 30

#numero de pasos
npasos = 2000

#cambia el valor de matiz de color
hinc = 1.0/npasos
```

Código con python II

```

#ancho de la linea
turtle.width(2)
```

Código con python I

Código 2: Aspecto gráfico del entorno

```
#frontera para la caminata
(w,h) = turtle.screensize()

#velocidad al dibujar
turtle.speed('fastest')

#establece el color del modelo (1:255)
turtle.colormode(1.0)

#pone el fondo de color negro
turtle.bgcolor('black')
```

Código con python II

```

#define el matiz
hue = 0.0
```

Código con python I

Código 3: Definición de pasos y dirección

```
for i in range(npasos):
  #proporciona el valor del angulo del paso
    turtle.setheading(randint(0,359))

    #cambia el color RGB del lapiz
    turtle.color(hsv_to_rgb(hue, 1.0, 1.0))

    #cambia el color
    hue += hinc
```

Código con python II

```

    #hace un paso hacia adelante
    turtle.forward(paso)

    #calcula la posicion de la tortuga
    (x,y) = turtle.pos()

    #revisa si esta dentro del cuadro
    if abs(x) > w or abs(y) > h:

      #si esta por fuera, se regresa
```

Código con python III

```
        turtle.backward(paso)

turtle.done()
```

Tortuga-Ventana de salida