Métodos numéricos para la ciencia y la ingeniería
Tarea 8

Jean Paul Martel

17 de noviembre 2015

1 Centro de masa de un sólido descrito por la intersección de un toro y un cilindro

1.1 Introducción

Se tienen dos volúmenes, un toro y un cilindro descritos por las siguientes ecuaciones:

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

$$\text{Cilindro}: \; (x-2)^2 + z^2 \leq 1$$

Con la intersección de estos se forma un sólido cuya densidad varía según la siguiente fórmula:

$$\rho(x,y,z) = 0.5 * (x^2 + y^2 + z^2)$$

Se busca estimar las posición del centro de masa del sólido.

1.2 Procedimiento y Resultados

En general, las coordenadas del centro de masa de un cuerpo pueden obtenerse con estas expresiones:

$$x_{cm} = \frac{\int x\rho(x,y,z)\;dx\;dy\;dz}{\int \rho(x,y,z)\;dx\;dy\;dz} \quad y_{cm} = \frac{\int y\rho(x,y,z)\;dx\;dy\;dz}{\int \rho(x,y,z)\;dx\;dy\;dz} \quad z_{cm} = \frac{\int z\rho(x,y,z)\;dx\;dy\;dz}{\int \rho(x,y,z)\;dx\;dy\;dz}$$

Donde las integrales son sobre el volumen del cuerpo. Notar que la integral de la densidad entrega la masa total. Para estimar las 4 integrales necesarias se usará una integración Monte Carlo simple en 3 dimensiones. Para un volumen V, corresponde a esta fórmula:

$$\int f(\vec{r})dV = V\langle f\rangle + V\sqrt{\frac{\langle f^2\rangle - \langle f\rangle^2}{N}}$$

Donde el segundo término de la derecha corresponde a la desviación estándar para la integral.

Se eligen N puntos aleatorios y uniformemente distribuidos en el volumen. Además los promedios se calculan como:

$$\frac{1}{N}\sum_{i}^{N} f(\vec{r_i})$$

Con esto, el valor aproximado para la integral queda:

$$\int f(\vec{r})dV = \frac{V}{N}\sum_{i}^{N} f(\vec{r_i})$$

La función f en este caso será $f(x, y, z) = x\rho(x, y, z)$, $f(x, y, z) = y\rho(x, y, z)$, o $f(x, y, z) = z\rho(x, y, z)$ para las coordenadas del centro de masa x, y, z respectivamente. Además, eligiendo $f(x, y, z) = \rho(x, y, z)$ se obtiene la masa total. En este problema en particular, el dominio es complicado, por lo que el volumen V será una caja pequeña tal que contenga el volumen del sólido. El toro tiene radio interior 2 y radio exterior 4.Es es claro que z se mueve entre -1 y 1. El cilindro se centra en $x = 2$, tiene radio 1 y recorre todos los valores de y.

Un volumen V pequeño que contiene la intersección de estos volúmenes, cumple con:

$$1 < x < 3,\ -4 < y < 4,\ -1 < z < 1$$

En el programa, primero se elige $n = 10000$ para la muestra aleatoria de puntos a probar. Se realizarán varias iteraciones del método, para luego promediar los valores, y obtener una estimación de las coordenadas del centro de masa.

En una iteración se van escociendo puntos en V con coordenadas aleatorias. Para cada punto se determina si está en el sólido; y si lo está, recordando la dependencia de la densidad de (x, y, z), se calcula ρ, $x\rho$, $y\rho$, $z\rho$. Luego se realizan las sumatorias correspondientes para cada integral según la aproximación de Monte Carlo.

Las coordenadas estimadas para el centro de masa del sólido son:

$$x_{cm} = 2.0797 \pm 0.0013$$

$$y_{cm} = 0.0105 \pm 0.0077$$

$$z_{cm} = -0.0016 \pm 0.0012$$

2 Conclusiones

El método de Monte Carlo para estimar integrales, se caracteriza por ser algoritmo simple de implementar, pero no es muy preciso pues se necesita una muestra grande para producir resultados aceptables. Debido a la simetría del sólido en la coordenada y y en la coordenada z, además de la variación simétrica de la densidad en torno al origen, no es difícil notar que el centro de masas tiene que cumplir con $y_{cm} = z_{cm} = 0$. La coordenada x es más complicada de determinar analíticamente Con una iteración del método, la estimación es bastante cruda y varia dependiendo de los números aleatorios utilizados. Por esto, es necesario repetir el proceso una mayor cantidad de veces y promediar los resultados. Hecho esto, puede observarse una razonable estimación, según lo esperado, en y y en z, aunque con un error aceptable. Estas estimaciones generan la confianza de que el valor encontrado para la coordenada x, es una buena aproximación.

3 Distribución de densidad a partir del algoritmo de Metrópolis

3.1 Introducción

Se quiere obtener una muestra aleatoria de números, tal que tengan la siguiente distribución (no normalizada):

$$W(x) = 3.5 \times \exp\left(\frac{-(x-3)^2}{3}\right) + 2 \times \exp\left(\frac{-(x+1.5)^2}{0.5}\right)$$

Para eso se busca generar una muestra de 10 millones de puntos utilizando el algoritmo de Metrópolis con una distribución proposición $x_p = x_n + \delta \cdot r$; tal que r es una variable aleatoria de la distribución uniforme U(-1, 1).

3.2 Procedimiento

El algoritmo de Metrópolis consiste en lo siguiente:

1. Se escoge una semilla (número) x_0
2. Se genera punto de prueba x_p a partir de x_n con la fórmula: $x_p = x_n + \delta \cdot r$ ("proposal distribution")
3. Se usa el algoritmo de metrópolis para decidir si aceptar o rechazar el punto de prueba. Dado una variable aleatoria u, uniforme en (0,1):

   Si $\frac{W(x_p)}{W(x_n)} > u$ entonces $x_{n+1} = x_p$. Si no se cumple, se hace $x_{n+1} = x_n$

Notar que si x_p es más probable que x_n, y por lo tanto $W(x_p) > W(x_n)$, entonces la división entre estas densidades es mayor que 1 (por tanto mayor que u) y x_p es aceptado incondicionalmente. Si x_p es menos probable que x_n, sólo es aceptado a veces.

Un correcto valor para δ es tal que se aceptan aproximadamente el 50% de las proposiciones con la condición dada. Se verá luego que un buen valor es $\delta = 4$ Entonces, se realiza el algoritmo anterior, iniciando con un valor semilla $x_0 = 0$, y luego se itera con la condición de Metrópolis. Los puntos obtenidos se van añadiéndose al arreglo $x_muestra$, y la iteración termina una vez que se ha obtenido una muestra de 10 millones de puntos.

Una vez obtenida la muestra, se compara la distribución generada con la función de densidad $W(x)$,. Para esto se genera un histograma de las variables aleatorias, junto a un gráfico de $W(x)$.

Para un análisis correcto, ambos deben normalizarse. Una función densidad $\rho(x)$ estaría normalizada si cumple:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = 1$$

Para la densidad $W(x)$ utilizada en este caso, se tiene:

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} 3.5\times\exp\left(\frac{-(x-3)^2}{3}\right)+2\times\exp\left(\frac{-(x+1.5)^2}{0.5}\right)dx = 13.2616$$

Entonces la función una vez normalizada corresponde a $\widetilde{W}(x) = \frac{W(x)}{13.13.2616}$

4 Resultados

El valor usado $delta = 4$ consiguió que el porcentaje de proposiciones aceptadas fuera del 49.99% En la figura a continuación puede observarse graficada la función de densidad W(x), junto al histograma obtenido del algoritmo de Metrópolis:

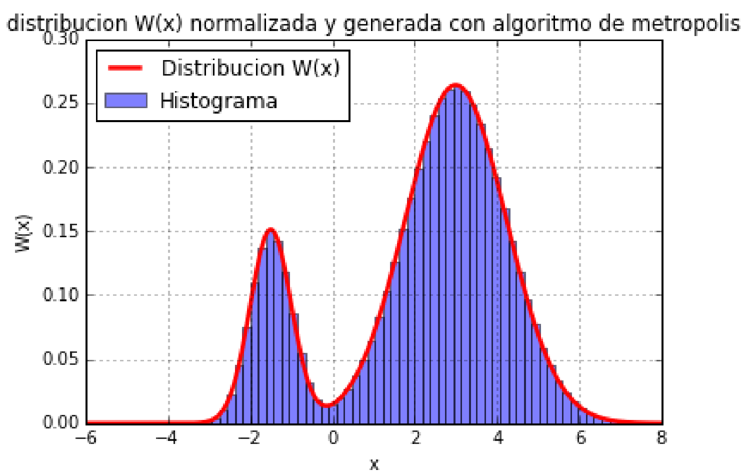

Figure 1: La curva roja representa la función de densidad W(x) normalizada. En azul se muestra el histograma, también normalizado, que representa la distribución generada con el algoritmo de Metrópolis, y con densidad propuesta $x_p = x_n + \delta \cdot r$. Corresponde a una muestra es de 10 millones de puntos.

5 Conclusiones

En la imagen 1 se aprecia que existe un buena concordancia entre la distribución generada con Metrópolis, y la distribución real W(x). Se obtiene un buen ajuste al usar suficientes puntos, pues la distribución queda bien sampleada.