Informe Tarea 8 - Métodos Numéricos: ”Cálculo de centro de masa y muestras aleatorias”

Ignacio Andrés Sánchez Barraza
Rut: 18933808-2

November 18, 2015

1 Pregunta 1

1.1 Introducción

- En esta pregunta se pide resolver el problea de encontrar el centro de masa de un sólido rígido a través del método de Monte Carlo. Para ello primero se hará una breve introducción. Los métodos de Monte Carlo o experimentos de Monte Carlo son una clase de algoritmos numericos basados en repetir muestras aleatorias de un problema para obtener resultados numericos cuando es dificil o ”imposible” usar otros métodos. Estos métodos son usados principalmente en optimización, integración numérca y problemas de probabilidad. Esto último es especialmente útil en problemas físicos con muchos grados de libertad, coo fluidos, etc.
  Para este problema, se usará el método de Monte Carlo para poder calcular el centro de masa de la intersección entre dos sólidos rígidos, un toro de revolución y un cilindro, ambos caracterizados por las siguientes ecuaciones:

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

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

  y con densidad variable a lo largo del espacio, definida por

$$\rho(x,y,z) = 0.5 * (x^2+y^2+z^2) \tag{3}$$

  dado esto, se procederá a integrar sobre dicho sólido y asi obtener el centro de masa con respecto a un sistema de referencia arbitrario.

1.2 Procedimiento

- Para poder comenzar a resolver el problema, se debe hacer incapié en que el método de Monte Carlo para calcular una integral en 3 dimensiones, se debe definir un volumen que contenga la región sobre la cual se desea integrar. En este caso, como se desea obtener el centro de masa de un solido rígido, se debe definir un volumen que englobe dicho solido. En este caso como la ecuacion (1) da cuenta de un toro de revolución en el plano xy y que se genera a partir de la revolución de un circulo en torno al eje z, se tiene que la distancia desde el centro del toro (fuera del solido) hasta el centro del circulo que lo genera es de 3 unidades, siendo además el radio de dicha circulo 1 unidad. Asi mismo se tiene que la ecuación (2) del cilindro define uno acostado sobre el plano xy, y que esta desplazado en 2 unidades con respecto al origen en el eje x. Dicho esto la intersección de ambos sólidos será una sección del toro similar a lo que pasaría con la intersección de un rectangulo con una corona circular.
  Dicho esto el mínimo volumen que engloba a los sólidos es una caja de dimensiones 8x8x2 unidades cúbicas, dado que el toro cubre un cuadrado de 8x8 en el plano xy y dada su altura en z, se tiene

luego la altura de 2 unidades por el diámetro del cilindro. Entonces ahora se procede a definir el problema en sí. Como se quiere calcular el centro de masas, tenemos que el centro de masas en x, y y z están definidos por:

$$Cx = \frac{1}{M_{total}} \Sigma_i^n m_i x_i \tag{4}$$

$$Cy = \frac{1}{M_{total}} \Sigma_i^n m_i y_i \tag{5}$$

$$Cz = \frac{1}{M_{total}} \Sigma_i^n m_i z_i \tag{6}$$

Entonces se define m_i como $\rho(x, y, z)\Delta V$, con $\Delta V = V0/N$ siendo $V0$ el volumen que se definió anteriormente como el de la caja que engloba a los sólidos y N el número de puntos que se discretizan dentro de este volumen para poder integrar en distintas regiones del del mismo. Con esto las ecuaciones (4), (5), y (6) se reescriben como:

$$Cx = \frac{1}{\rho(x_i, y_i, z_i)\frac{V0}{N}} \Sigma_i^n x_i \rho(x_i, y_i, z_i) \frac{V0}{N} \tag{7}$$

$$Cy = \frac{1}{\rho(x_i, y_i, z_i)\frac{V0}{N}} \Sigma_i^n y_i \rho(x_i, y_i, z_i) \frac{V0}{N} \tag{8}$$

$$Cz = \frac{1}{\rho(x_i, y_i, z_i)\frac{V0}{N}} \Sigma_i^n z_i \rho(x_i, y_i, z_i) \frac{V0}{N} \tag{9}$$

Entonces ahora dado que los métodos de Monte Carlo usan muestras aleatorias para poder encontrar los resultados, entonces se le asigna a las variables x_i (análogamente para y y z) un valor aleatorio (equiprobable) dentro del volumen de la caja y bajo la condición de que se encuentre además dentro de la intersección de los sólidos, se usa este valor de x para poder obtener un sumando de la sumatoria de la ecuación (4). Entonces repitiendo el procesos la misma cantidad de veces como número de puntos dentro de la caja se quieren discretizar, se obtienen los demás sumandos de la sumatoria. Entonces calculando además la masa total M_{total} como $\Sigma_i^n \rho(x_i, y_i, z_i)\Delta V$, se obtiene entonces el centro de masa en X. Ahora, dada la naturaleza aleatoria de los resultados, se procede a ejecutar el algoritmo más de una vez, obteniéndose varios valores para el centro de masa, entonces tomando el promedio se encuentra una buena aproximación y solución al problema que se desea resolver.

1.3 Resultados

- Dado que como se explicó anteriormente el toro esta acostado en el plano xy al igual que el cilindro, se esperaría que la coordenada z del centro de masas fuera cero, al igual que la coordenada y dado que el cilindro solo depende de x y z. Dicho esto, los resultados obtenidos para el centro de masas fueron $\vec{r}_{cm} = c_x, c_y, c_z = 2.1640, 0.1538, -0.0070$ y $\vec{r}_{cm-promedio} = c_x, c_y, c_z = 2.0922, -0.0027, -0.0037$ con un error asociado a cada componente $\vec{Error}_{r_{cm}} = Err_{cx}, Err_{cy}, Err_{cz} = 0.0534, 0.2343, 0.0431$

1.4 Conclusiones

- Como fue dicho anteriormente, el resultado esperado era un centro de masas de la forma $\vec{r}_{cm} = c_x, c_y, c_z = x, 0, 0$ que no es demasiado distante a los resultados obtenidos por el método usado, mas aún para cada ejecución del algoritmo, las aproximaciones del centro de masas no eran demasiado distantes a lo esperado como se puede ver en los resultados del $\vec{r}_{cm}$ y $\vec{r}_{cm-promedio}$. Además de esto se puede apreciar que el error asociado es de un orden mayor a los resultados, pero esto puede deberse a error aleatorios provenientes de la naturaleza aleatoria del método o a errores sistemáticos en el código (siendo este último bastante probable) dado que el error del método de Monte Carlo debiese disminuir como $1/\sqrt{(N)}$ a pesar de que la cantidad de puntos tomados para discretizar fue de $N = 1000$.

- A pesar de los errores que se podrían encontrar, este método es un buen método de aproximación de centro de masas (con una integral en su forma continua), considerando además que se parte con variables aleatorias dentro de la caja que contiene la region a integrar, este método es una potente herramienta cuando no se pueden calcular dichas variales explícitamente o cuando es bastante tedioso hacerlo.

2 Pregunta 2

2.1 Introducción

- En esta pregunta se desea obtener una muestra aleatoria de una distribución desconocida con una densidad $W(x)$ dada por la siguiente fórmula:

$$W(x) = 3.5 \times \exp\left(\frac{-(x-3)^2}{3}\right) + 2 \times \exp\left(\frac{-(x+1.5)^2}{0.5}\right) \tag{10}$$

  Para ello se pide utiizar el método de Metrópolis para resolver el problema y obtener una muestra de tamaño 10^7. Además para poder resolverlo con este método se propone una distribución proposición $x_p = x_n + \delta r$, con δ un parámetro a determinar que reduce la cantidad de valores aceptados para la distribución anterior propuesta y r una varaiable aleatoria con distribución uniforme $U(-1, 1)$.

2.2 Procedimiento

- Para poder encontrar la solución al problema se debe seguir el procedimiento general para encontrar una muestra aleatoria para el método de Metrópolis. Esto consiste en primero definir el valor inicial arbitrario de la muestra aleatoria, x_0, para poder comenzar con la iteración que dará paso a la obtención de los siguientes valores de la muestra (en el programa en específico se uso el valor $x_0 = 10$). Luego dada la distribución proposición $x_p = x_n + \delta r$, se debe definir un criterio para el cual se acepte o no el valor x_p como parte de la muestra aleatoria, si es aceptado, ese valor sera la componente siguiente de la muestra, si no lo es, el valor siguiente será el mismo valor anterior. Entonces definiendo el criterio como que el cuociente entre la función densidad de probabilidad en el punto x_p y la función densidad de probabilidad en el punto x_n (con x_n el valor anterior dentro de la muestra) sea mayor que el valor de una variabe aleatoria r' (con distribución uniforme $U(0, 1)$, donde el valor de r' no necesariamente debe ser igual al valor de r dentro de la fórmula de la distribución proposición), es decir, $\frac{W(x_p)}{W(x_n} > r'$, se procede a iterar el procedimiento para una cantidad determinada de veces, en este caso, para $N = 10^7$ veces.Para cada iteración, si se cumple el criterio entonces el valor siguiente de la muestra, x_{n+1}, será $x_{n+1} = x_p = x_n + \delta r$. Si el criterio no se cumple entonces $x_{n+1} = x_n$.

- Cabe destacar también antes de seguir con el procedimiento que el método de metrópolis tiene una debilidad, que consiste en que x_n y x_{n+1} no son independientes. Para ello una forma de arreglarlo es no tomar todos los valores aceptados dentro de la muestra, sino que tomar uno de cada δ valores. Es decir que la forma de la distribución proposición esta definida de tal forma que solucione ese problema y en este problema δ corresponde al factor que determina cuantos valores se aceptan, específicamente, es aquel factor que acepta aproximadamente un 50% de los valores aceptados valga la redundancia. Con esto colocando un contador para contar cuantos valores se aceptan, se puede determinar experimentalmente que δ cumple con eso y con esto se obtuvo que $\delta \approx 70$.

- Luego de tener realizada la parte mas importante, el diseño del código del programa, se procede a graficar en un histograma la frecuencia con que cada valor de la muestra aleatoria aparece en la misma, junto con el gráfico de la curva $w(x)$ para los mismos valores, para así poder ver a simple vista si la distribución prposición estaba correcta o no (ie, el histograma debe rellenar el aréa bajo la curva descrita por $w(x)$). Además de esto cabe señalar que el histograma está normalizado y la curva descrita por $w(x)$ también, siendo la nueva curva descrita por $w'(x) = \frac{1}{13.2516} w(x)$ obtenida de normalizar dicha densidad de prbabilidades, dado que para serlo, su integral sobre todo el dominio debe ser igual a 1 (de ahora en adelante se hablará de $w(x)$ y $w'(x)$ indistintamente).

2.3 Resultados

- Dado el procedimiento anterior se logró graficar el histograma para cada valor de la muestra (o bin, siendo esto último cada una de las barras del histograma, que en el código serán asignadas una para cada valor de la muestra) junto con la curva descrita or $w(x)$, obteniéndose el siguiente gráfico:

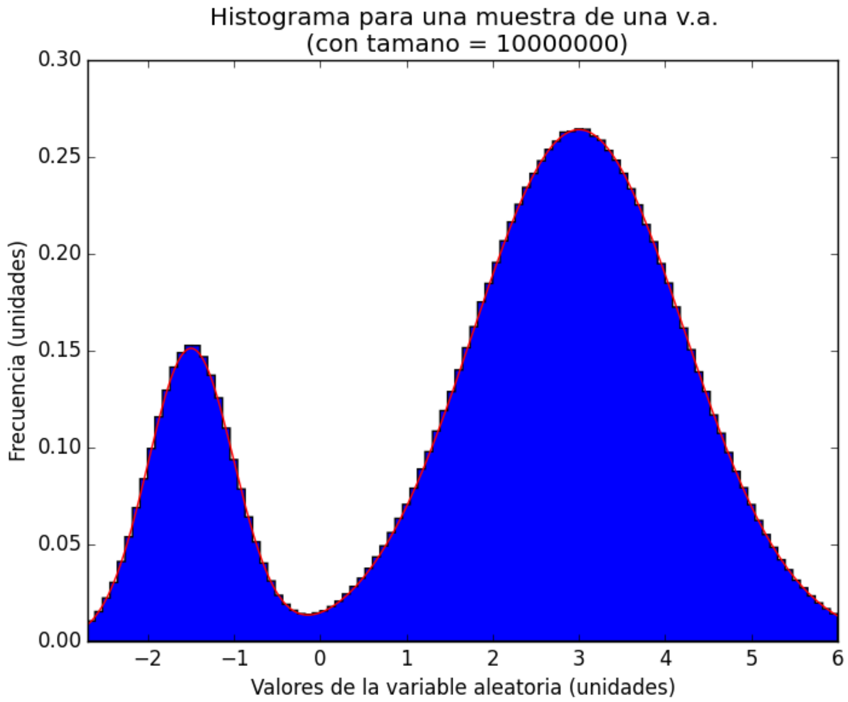

Figure 1: Gráfico que muestra, en un histograma, la frecuencia con que distintos valores de la variable aleatoria (caracterizada por la función distribución de probabilidades $w(x)$) son aceptados por el método de Métropolis y compara estas frecuencias con las probabilidades de obtener cada uno de los valores definidas por la función $w(x)$. En rojo se muestra la curva descrita por $w(x)$ y en negro los valores de las frecuencias en el histograma, para un número de 10^5 bins

2.4 Conclusiones

- Dado el gráfico anterior, se puede ver que la distribución proposición si era una buena aproximación a la distribución caracterizada por una función densidad como $w(x)$. Además de ello se puede ver que el valor con que se inicia la muestra aleatoria determina los demás por la dependencia antes explicada pero al ser una cantidad considerable de datos, esto disminuye su acción y se obtienen resultados similares a pesar de la naturaleza aleatoria del método de metropolis.

- También cabe destacar que al aumentar el número de bins en el histograma estos disminuyen su frecuencia, lo que es razonable debido a que al tomar una cantidad mayor de números, es decir un rango de valores de la muestra, la probabilidad de que un valor aceptador esté en un rango mayor, aumenta, por lo que las barras asociados a esos bins deberían crecer.

- Por útlimo cabe destacar que este método es una gran herramienta para poder determinar muestras aleatorias de una distribución cuya forma es desconocida pero se conoce su densidad de probabilidad o distribución de probabilidades. Con este método se logran obtener datos que realmente dan cuenta de la naturaleza estadística de un problema y se logran obtener resultados que van de acuerdo a la teoría.
  Este es un buen método numérico que permite realizar cálculos de grandes órdenes de magnitud que no podrían ser realizados analíticamente por su complejidad o por el tiempo que llevaría hacerlo y con ello logra colocarse como un útil algoritmo que a pesar de su simplicidad cumple con su propósito.