Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería

Informe Tarea 8

Nelson Soto Medina

Pregunta 1:

En esta pregunta se nos pidió estimar la posición del centro de masa de un sólido descrito por la intersección de un toro y un cilindro dados por las ecuaciones:

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

Donde la densidad varía según la fórmula:

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

Para resolver el problema se definieron puntos en los ejes formando un paralelepípedo que encierra todo el sólido en cuestión, para luego evaluar que cumplan con las condiciones de la intersección. Los límites del paralelepípedo en X y en Z se eligieron de forma que encerraran el área transversal del cilindro y en Y de tal forma que cubra todo el toro entre los valores anteriores. (En total unos 4 millones de puntos, los que aumentan considerablemente al aumentar un poco los puntos por eje ya que se multiplican)

Una vez evaluados los puntos, los que cumplan las condiciones del sólido son guardados para luego calcular la densidad en cada punto.

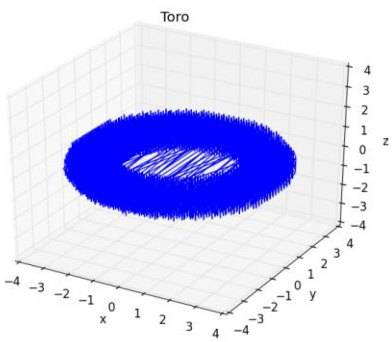
A partición de volumen constante, se puede asumir:

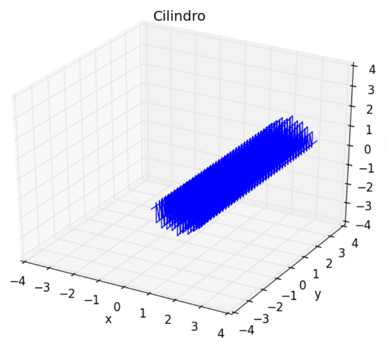
$$Xcm = \frac{\sum X \cdot M}{\sum M} = \frac{\sum X \cdot \rho \cdot V}{\sum \rho \cdot V} = \frac{V \cdot \sum X \cdot \rho}{V \cdot \sum \rho} = \frac{\sum X \cdot \rho}{\sum \rho}$$

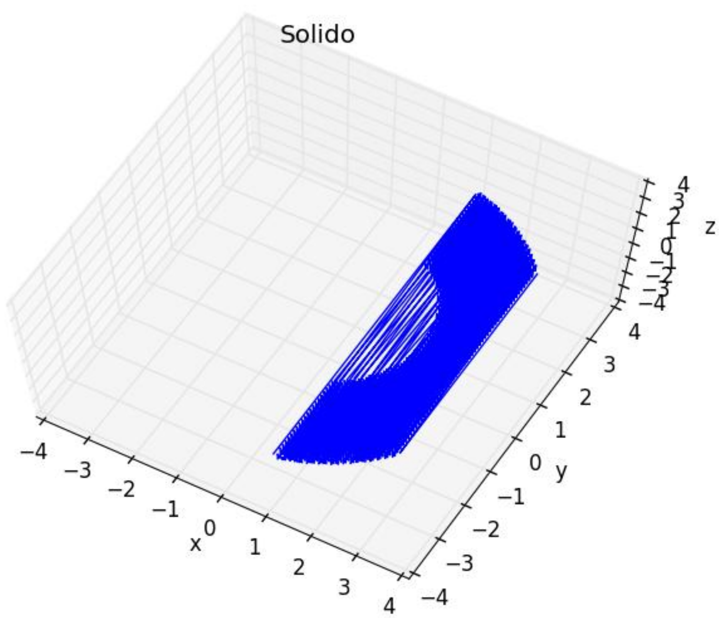
Por lo tanto para obtener el centro de masa, para cada eje se calcula la suma de cada posición multiplicada por su densidad respectiva para luego dividir por la densidad total y así obtener las 3 coordenadas del centro de masa.

Como resultado, el centro de masa entregado por el programa (redondeando al tercer decimal) fue en la posición $(x, y, z) = (2.08, 0, 0)$ lo que es lógico dado que la densidad y la figura son simétricas con respecto a los planos Y = 0 y Z = 0 pero no en X, ya que el cilindro con el cual se interseca el toro está centrado en X = 2.

A continuación se presentan imágenes del toro, el cilindro y el sólido formado con la intersección. (Los gráficos fueron hechos con particiones no muy pequeñas)







Pregunta 2:

Ahora se desea obtener una muestra aleatoria de números dada por la ecuación no normalizada:

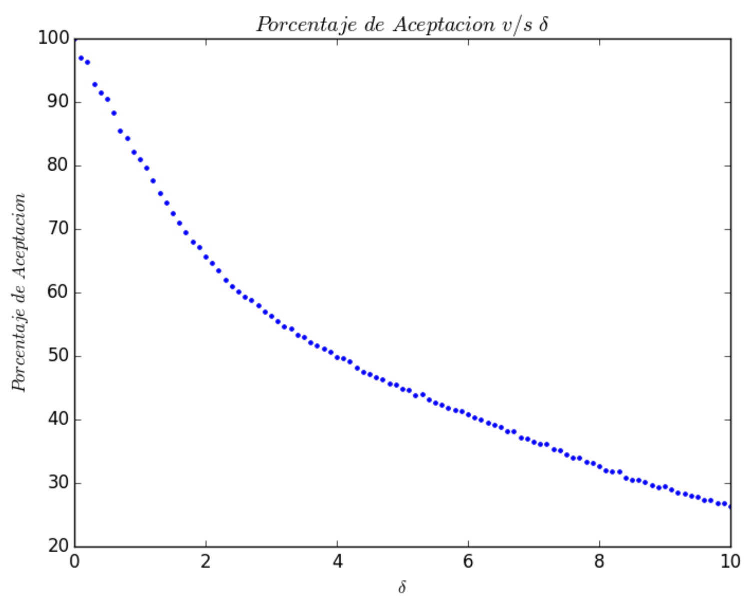
$$W(x) = 3.5 \times \exp\left(\frac{-(x-3)^2}{3}\right) + 2 \times \exp\left(\frac{-(x+1.5)^2}{0.5}\right)$$

Se pide utilizar el algoritmo de Metrópolis con una distribución proposición $xp = xn + \delta \cdot r$ donde r es una variable aleatoria de la distribución uniforme U (-1,1) y δ tiene un valor fijo el cual debe ser determinado.

Para esto se define la función W(x) tal como se presenta y la función MetrópolisW(Delta, N), la cual genera los números aleatorios, calcula xp para un determinado delta, y evalúa W para utilizar el criterio de Metrópolis para decidir si acepta o rechaza dicho valor, entregando finalmente la distribución final de W y el porcentaje de aceptación.

Luego se proponen 101 valores para delta entre 0 y 10 para buscar el que acepta aproximadamente el 50% de las proposiciones.
Para cada delta se aplica MetropolisW y se obtiene la aceptación, la cual se compara hasta tener el porcentaje más cercano a 50%.

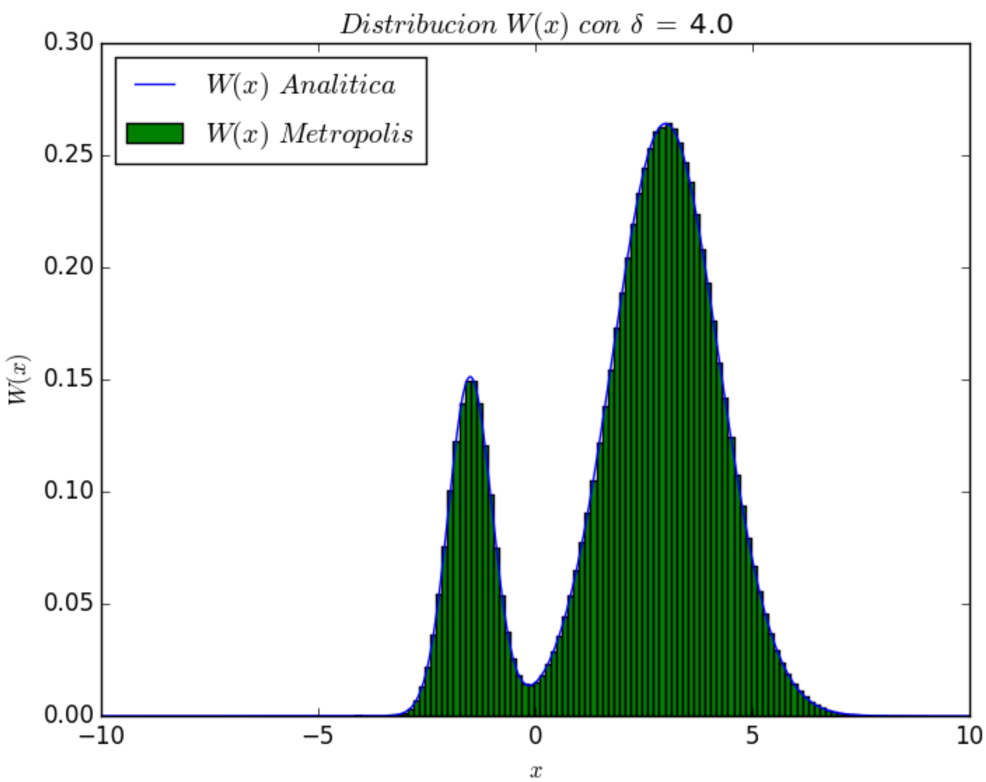
Gráfico con los deltas y sus porcentajes de aceptación correspondientes.



Donde se puede ver que el porcentaje de aceptación es máxima cuando delta es cercano a cero y tiende a disminuir al aumentar el delta.

Con el delta escogido ($\delta = 4.0$) se utiliza una vez más el algoritmo de metrópolis con una muestra de 10 millones de puntos.
Se normaliza W calculando la integral de esta función utilizando el método del trapecio de scipy.integrate. La W analítica se divide por el valor de la integral obteniendo W normalizada.

Finalmente al graficar W analítica normalizada y el histograma de W metrópolis también normalizada tenemos:



Se puede ver con números aleatorios la solución entregada por metrópolis se ajusta muy bien a la analítica para un número elevado de muestras y con un delta con el que se aceptan el 50% de las proposiciones.

A simple vista se pueden identificar las dos partes de la ecuación de W(x), notando que los centros del monte pequeño y del grande están cercanos a -1.5 y a 3 en X respectivamente, valores que restan a X en la ecuación.

Este algoritmo estadístico necesita de muchos datos para funcionar bien, lo que lo hace ocupar mucho tiempo.

En ambas preguntas demoró en entregar resultados, pero mucho más en la Pregunta 2.