Métodos Numéricos para la Ciencia y la Ingeniería

Camila Castillo Pinto. RUT 18.889.762-2

17 de Noviembre, 2015.

1 Introducción Parte 1

En esta parte se pedía estimar la posición del centro de masa de un sólido constituido por la intersección de un cilindro con un toro de ecuaciones:

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

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

La densidad del sólido varía según:

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

Se pedía usar alguno de los métodos de integración de Monte Carlo.

1.1 Procedimiento

Se implementó el algoritmo de integración simple de Monte Carlo, para lo cual en primer lugar se definieron las funciones de densidad y funciones que permitieran determinar si el punto (x,y,z) se encontraba en el sólido o no.

Luego se setearon parámetros tales como: el número de muestras deseadas, el volumen que engloba al sólido y otros parámetros inicializados en cero para ir agregando a ellos los valores de las integrales en cada iteración.

Es importante recordar que las integrales a resolver son:

$$\int \rho dxdydz = M \tag{4}$$

$$\int \rho x dxdydz = X \tag{5}$$

$$\int \rho y dxdydz = Y \tag{6}$$

$$\int \rho z dx dy dz = Z \tag{7}$$

donde M es la masa, X, Y y Z corresponde a la 'concentración' de masa en el eje x, y, z, respectivamente.

Así la posicion del centro de masa será dividir X, Y, Z por M la masa, obteniendo x_{cm}, y_{cm} y z_{cm}.

El volumen que engloba al sólido se estimó determinando entre qué valores se movían los x, y y z en las ecuaciones (1) y (2). Así se encontró que x se movía entre 1 y 3, z entre -1 y 1 e y entre -4 y 4, entonces el volumen utilizado es $V = dxdydz = 2 \cdot 8 \cdot 2 = 32$.

Luego se pasa a la iteración desde 0 hasta el número de datos deseados, y consiste en generar números al azar para x, y, z en el volumen que engloba al sólido, para luego verificar si este punto (x, y, z) pertenece o no al sólido; si pertenece, entonces agregamos el valor de la densidad en ese punto a la suma de la masa, así como el valor de la densidad por la coordenada x, y o z en la suma que corresponda a la coordenada. Además se hace el cálculo para la varianza de la masa y para cada una de las coordenadas, que también se va agregando.

Se finaliza la iteración y se calculan los valores de las integrales en (4), (5), (6) y (7) multiplicando por el volumen definido los valores de la suma para el peso y las sumas para cada coordenada (por separado).

De esta forma las coordenadas del centro de masa quedarán determinadas por la división de cada integral de cada coordenada por la integral que corresponde a la masa total.

El error asociado se calculó mediante la fórmula de propagación de errores para la división: para $C = a/b$

$$C = < C > \pm \Delta C = \frac{< a >}{< b >} \pm \frac{< a >}{< b >}\sqrt{(\frac{\Delta a}{< a >})^2 + (\frac{\Delta b}{< b >})^2} \tag{8}$$

donde ΔC corresponde al error asociado al valor C y $< C >$ es su valor aproximado.

1.2 Resultados y Análisis

Los resultados obtenidos con sus respectivos errores asociados para un valor de muestras de 1000000 y semilla seteada en 1, fueron:

$x_{cm} = 2.0808 \pm 0.0034$
$y_{cm} = 0.0022 \pm 0.0037$
$z_{cm} = -0.0006 \pm -0.0006$

2 Introducción Parte 2

En esta parte se pedía obtener una muestra aleatoria de nmeros con la distribucin (no normalizada) dada por la siguiente ecuacin:

$$W(x) = 3.5 \times \exp\left(\frac{-(x-3)^2}{3}\right) + 2 \times \exp\left(\frac{-(x+1.5)^2}{0.5}\right) \tag{9}$$

Se pedía utilizar el algoritmo de Metrópolis con una distribución proposición $x_p = x_n + \delta * r$, donde r es una variable aleatoria de la distribución uniforme U(-1, 1).

Se pedía determinar el valor para δ tal que se acepten aproximadamente 50% de las proposiciones.

Además se pedía generar una muestra de 10 millones de puntos y graficar $W(x)$ y un histograma de sus variables aleatorias, ambas apropiadamente normalizadas.

2.1 Procedimiento

En primer lugar es importante mencionar que el valor de la integral de la función $W(x)$ vista en (9) se calculó usando el comando *.trapz* que integra usando el método del trapecio. Este valor se usó para normalizar la función.

En primer lugar se definieron funciones para: la distribución $W(x)$ mostrada en (9), normalización de la distribución $W(x)$, el algoritmo de Metrópolis, función para calcular el porcentaje de aceptación dado un valor para δ y para x_n.

La función algoritmo de metrópolis consistió (tal como fue visto en clases) en darse un valor para x_n y a partir de este valor determinar un x_p, valor de prueba, dado por la fórmula:

$x_p = x_n + \delta \cdot r$,

donde r es un valor al azar tomado desde una distribución uniforme entre -1 y 1.

Luego se determina un criterio para aceptar o rechazar el valor x_p. En este caso el criterio corresponde a un valor tomado desde una distribución uniforme entre 0 y 1.

La condición para que se acepte el valor de x_p es:

$$\frac{W(x_p)}{W(x_n)} > 1 \tag{10}$$

y cuando se acepta, retorna x_p ($x_{n+1} = x_p$). En caso contrario, retorna x_n -rechaza el valor- ($x_{n+1} = x_n$).

El procedimiento para determinar δ apropiado se implementó de la siguiente manera: Se creó una lista con los δ posibles (entre 1 y 10) y se creó una lista con ceros para guardar los porcentajes asociados a cada δ. Se recorrió la lista de deltas, elemento por elemento, llamando a la función que calcula el porcentaje para un δ y un x_n dado. En este caso se usó $x_n = 0$. La función funcionaba con dos contadores (acepta, rechaza) y una iteración que usaba a la función metrópolis para calcular el elemento siguiente x_{n+1} y lo compara con el elemento anterior; si son iguales entonces se rechazó el valor propuesto y agrega 1 al contador de rechaza, en caso contrario -si son distintos- significa que aceptó el propuesto y agrega 1 al contador de acepta. De esta manera se utilizaron los valores finales para los contadores para determinar cuál es el porcentaje de aceptados para ese δ dado, el cual es agregado al arreglo de porcentajes.

Se calculó el porcentaje para cada delta, y luego se recorrió el arreglo de porcentajes (que contenía los porcentajes asociados a cada δ) buscando por aquel que estuviese entre 49% y 51% de aprobación. La posición de este porcentaje en el arreglo de porcentajes (porcentaje esperado), correspondería al δ en esa misma posición en el arreglo de deltas posibles y además sería el δ apropiado.

Finalmente se graficó la función $W(x)$ normalizada versus x y además el histograma de la muestra aleatoria generada, también normalizada.

El histograma se graficó para una cantidad de 10 millones de puntos.

2.2 Resultados y Análisis

El gráfico resultante se muestra a continuación:

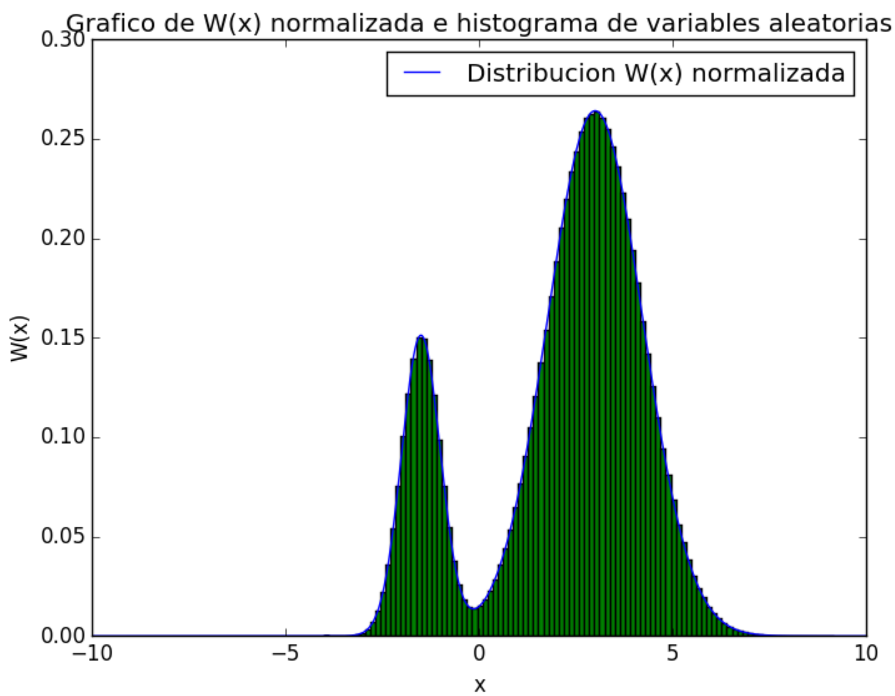

Figure 1

3 Conclusiones

De la parte 1 se concluye que los resultados obtenidos para las coordenadas del centro de masa son bastante exactos, comparados con lo que se intuía: como x se movía entre 1 y 3, x_{cm} se esperaba que estuviese en la mitad del intervalo, es decir, en 2; mediante un análisis análogo para los otros valores se intuía que y_{cm} se encontrara en 0 y z_{cm} en 0.

Los errores asociados a los valores para y_{cm} y para z_{cm} resultaron ser mayores que el valor mismo de estas cantidades. Sin embargo, cantidad y error son de magnitudes iguales (10^{-3}), por lo que no es tremendamente crucial que el error sea mayor a la cantidad.

De la parte 2 se concluye que el código implementado funciona de manera correcta, ya que en el gráfico de la Figura 1 la distribución $W(x)$ normalizada coincide con el histograma generado a partir de la muestra aleatoria obtenida con el método de metrópolis.