

Física Computacional Avanzada

Simulación

Héctor Álvarez Pol

Departamento de Física de Partículas
Universidade de Santiago de Compostela

Física Computacional Avanzada - P1211101

Máster Universitario en Física - P1211V01

Curso 2020 / 2021

Contenidos de la sección de simulación

- Iniciación a la Programación.

Presentación, agenda, bibliografía, ...

- Métodos Numericos I.

Introducción a la simulacion: Definicion. Historia. Proposito, procedimientos, tipos, alcance de la simulación...

- **Simulación.**

Introducción al método de Monte Carlo: Números aleatorios y pseudoaleatorios, Generación de distribuciones de probabilidad.

- Métodos Numéricos II.

Problemas clásicos de simulación.

Agenda y organización del tema de Simulación

- Total de 16 horas: 8 clases de 2 horas de duración entre el 30 de Octubre y el 20 de Noviembre.
- Ejercicios prácticos a desarrollar a lo largo de cada sesión. La mitad de la clase se dedicará a programar los ejercicios propuestos (salvo la primera clase de introducción).
- Se evaluarán las resoluciones de todos los ejercicios propuestos, **presentados adecuadamente**:
 - Entrega de memoria (pdf) y del código de los ejercicios.
 - Habrá ejercicios básicos y avanzados (marcados como tales en los ejercicios propuestos). Se entregarán 5 ejercicios básicos y 2 ejercicios avanzados, a escoger entre los propuestos.
 - La memoria detallará para cada ejercicio el **objetivo**, los **resultados** (numéricos o gráficos) y **comentarios** acerca del ejercicio (mejoras, estudios estadísticos u operativos, variaciones realizadas, ejercicios complementarios, ...).
 - Además se podrá realizar un trabajo (voluntario) a elegir entre los propuestos para un estudio más profundo, o bien un tema de trabajo relacionado con la investigación que el alumno realice en el departamento, si es el caso.

Libros recomendados:

[Gould96] Harvey Gould, Jan Tobochnik. “*An introduction to Computer Simulation Methods. Application to Physical Systems*”. Addison-Wesley, New York, 1996.

Libro de texto recomendado para seguir muchas partes de este tema y de otros en este curso. Contiene extensiones a simulaciones en otros campos de la Física no tratados aquí. Anticuado en lenguaje y notación. Accesible en BUSC.

[Bielajew01] Alex F. Bielajew. “*Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport*”. URL: <http://www-personal.umich.edu/~bielajew/>

Libro en www con una buena introducción a los métodos Monte Carlo, especializado luego en transporte de partículas.

[Kalos08] Malvin H. Kalos, Paula A. Whitlock. “*Monte Carlo methods*”.

Detallada introducción a los métodos de Monte Carlo, matemáticamente mas rigurosa. Accesible en BUSC.

Artículos

[Bielajew12] Alex F. Bielajew. “*History of Monte Carlo*”. URL: <http://www-personal.umich.edu/~bielajew/>

Introducción histórica breve al Monte Carlo.

[Winsberg13] Eric Winsberg. “*Computer Simulation in Science*”. The Stanford Encyclopedia of Philosophy, Edward N. Zalta (ed.). URL: <http://plato.stanford.edu/entries/simulations-science>

Una visión mas descriptiva y categorizadora del concepto de Monte Carlo y simulación en Física y en otras ciencias.

[Metropolis49] N. Metropolis, S. Ulam. “*The Monte Carlo Method*”. Amer. Stat. Assoc. 44 (1949) 335 -341. URL: <http://web.maths.unsw.edu.au/~peterdel-moral/MetropolisUlam49.pdf>

Artículo original de Ulam y Metropolis donde se le da nombre al método.

[Creutz83] M. Creutz. “*Microcanonical Monte Carlo Simulation*”. Physical Review Letters 50-19 (1983) 1411-1414. URL: <http://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.50.1411>

Introducción del método del demonio en el cálculo a partir de microconfiguraciones (colectivo microcanónico).

[Marsaglia83] G. Marsaglia. “*Random numbers fall mainly in the planes*”. Nat. Acad. Sci., 61 (1968) 25 – 28. URL: <http://www.ics.uci.edu/~fowlkes/class/cs177/marsaglia.pdf>

Artículo inicial sobre el estudio de los pseudoaleatorios y sus problemas, especialmente los generados con LCG.

Bibliografía y recursos (3)

Cursos accesibles en internet (normalmente de un semestre)

[Nordlund] Kai Nordlund, “*Course on Monte Carlo simulations*”. Helsinki Institute of Physics, University of Helsinki. URL: <http://beam.helsinki.fi/~knordlun/mc/>

Curso completa en Monte Carlo de mayor duración y profundidad que el nuestro.

[Goodman] J. Goodman, “*Monte Carlo methods*”, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, URL: <http://www.math.nyu.edu/faculty/goodman/teaching/MonteCarlo2005/>

Curso de carácter matemático que presenta los principales algoritmos y estimaciones de incertidumbre.

[Rummukainen] K. Rummukainen. “*Monte Carlo simulations in Physics*”. Univ. Oulu. URL: http://www.helsinki.fi/~rummukai/lectures/montecarlo_oulu/

Curso completa en Monte Carlo de mayor duración y profundidad que el nuestro.

Bibliografía y recursos (4)

Otras fuentes

[phys.org] *“phys.org, Computer and simulation section”.*

URL: <http://phys.org/tags/computer+simulations/>

[Compadre] *“Computational Resources for Teaching, Open Source Physics”.*

URL: <http://www.compadre.org/osp/>

[NBViewer] Peter Norvig. “Probability, Paradox, and the Reasonable Person Principle”. URL: <http://nbviewer.ipython.org/url/norvig.com/ipython/Probability.ipynb>

[TheBeginning] N. Metropolis. “The beginning of the Monte Carlo Method”. URL: <https://permalink.lanl.gov/object/tr?what=info:lanl-repo/lareport/LA-UR-88-9067>

1. Introducción a la simulación

- Introducción a la simulación.
- Definiciones de simulación por ordenador.
- (Breve) Historia de la simulación.
- Propósito de la simulación.
- Procedimiento (ejecución) de una simulación.
- Tipos de simulación.
- Alcance de las simulaciones
- Simulación en Física. Algunos ejemplos.

Definición de simulación (por ordenador)

Definiciones de simulación:

Una simulación por ordenador se corresponde a un programa ejecutado en un ordenador o una red de ordenadores que intenta **reproducir un modelo** abstracto de un sistema físico particular. [\[Phys.org\]](#)

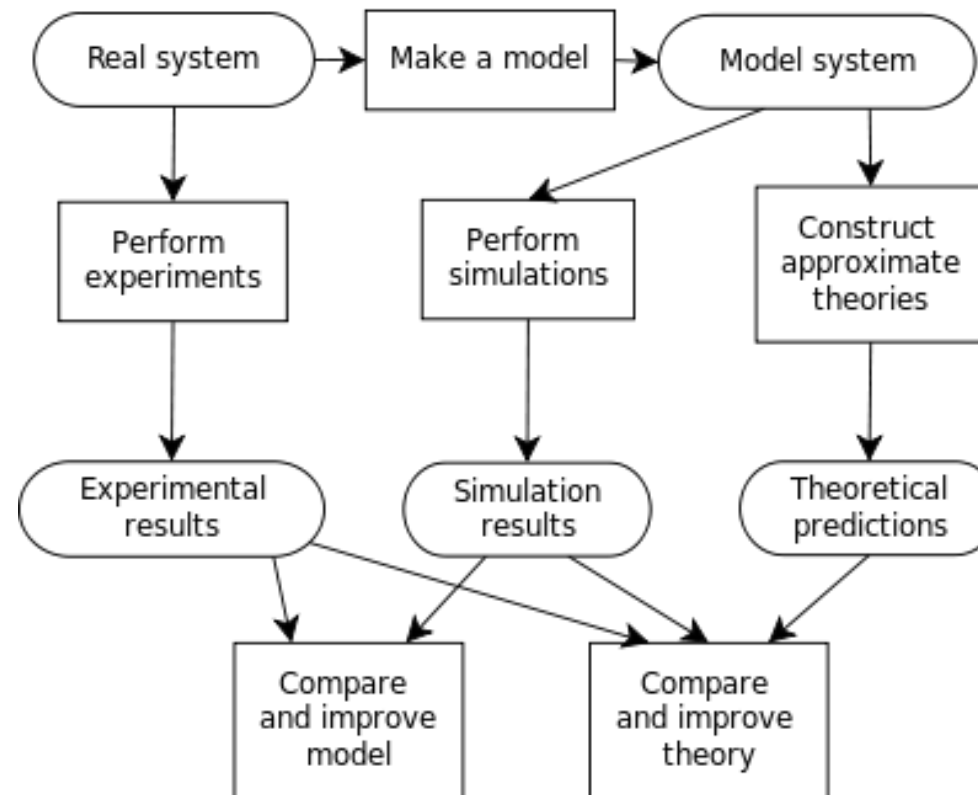
Una simulación es un **sistema controlado** que se espera que se comporte de una forma similar, o estructural o dinámicamente análoga a otro sistema que se pretende estudiar. Para este fin se puede usar **un sistema físico reducido, un sistema de comportamiento parecido** o **el conocimiento que tenemos de las leyes que gobiernan a los componentes del sistema** y de sus relaciones para codificar en un ordenador este comportamiento. [\[Winsberg13\]](#)

Se puede definir la simulación por ordenador como un método o proceso completo para el estudio y análisis de sistemas, de una manera muy amplia que permite incluir los muy variados tipo de trabajo que se realizan en distintos campos de la ciencia.

La simulación por ordenador es esencial en el **modelado matemático de muchos sistemas naturales** estudiados por la física, química y biología, estudios humanos en economía, psicología y ciencias sociales y en los procesos de ingeniería y desarrollo de nuevas tecnologías.

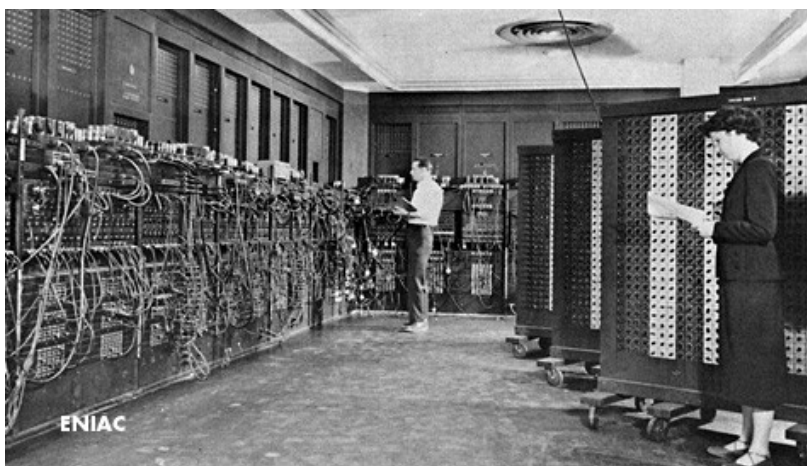
Definición de simulación (2)

De forma convencional, una simulación por ordenador se corresponde con **un programa que corre en un ordenador** o un sistema de ordenadores y que realizan las **operaciones relacionales o matemáticas siguiendo un modelo**, denominado “**modelo computacional de la simulación**”. A partir de un estado inicial se permite la evolución del sistema hasta caracterizar su estado en momentos sucesivos, **permitiendo obtener observables para todos ellos o para un estado final**. Estos estados finales intermedios o definitivos permiten la definición de los observables a determinar y su **estudio o reconocimiento mediante técnicas de análisis de datos y de visualización**.



(Breve) Historia de la simulación

La **simulación por ordenador** es una herramienta científica creada después de la segunda guerra mundial para estudiar, inicialmente, **procesos complejos relacionados con la física nuclear y la meteorología**. Actualmente se utilizan simulaciones por ordenador en prácticamente todas las ramas de las ciencias exactas y sociales, bajo distintas aproximaciones.



(Breve) Historia de la simulación (2)

Precedentes históricos: simulaciones no computacionales (ejemplo clásico).

La utilización de muestreos estocásticos no asociados a ordenadores puede trazarse históricamente a **orígenes tan remotos como 1777**, cuando Georges-Louis Leclerc, (conocido como **Conde de Buffon**) propuso determinar la **probabilidad de que una aguja de longitud determinada cruzara o no una de las líneas paralelas equidistantes marcadas en una superficie, a partir de tirar repetidamente agujas en una trama [Bielajew01]**.

El método es una realización práctica de Monte Carlo, de la que se puede derivar un valor para π . De hecho, la probabilidad de que una aguja de longitud l intersecte alguna de las líneas separadas por una distancia d es $P = \frac{2l}{\pi d}$, asumiendo $l < d$.

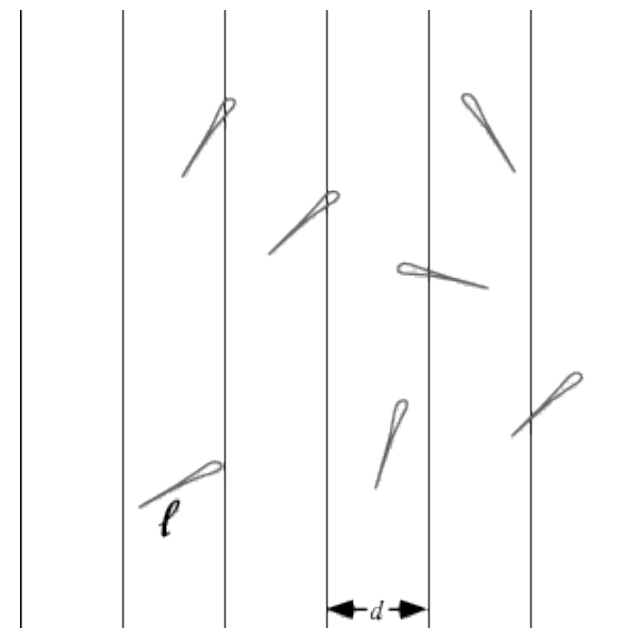
El valor de $\pi = \frac{2lN}{Md}$ se obtiene a partir de M observaciones de cruce de aguja sobre la aguja en N intentos, con N suficientemente grande (**propuesta de 1812 de Laplace**, que mejoró y corrigió la solución de Buffon a un tablero).

Ver para más información:

<http://mathworld.wolfram.com/BufonsNeedleProblem.html>

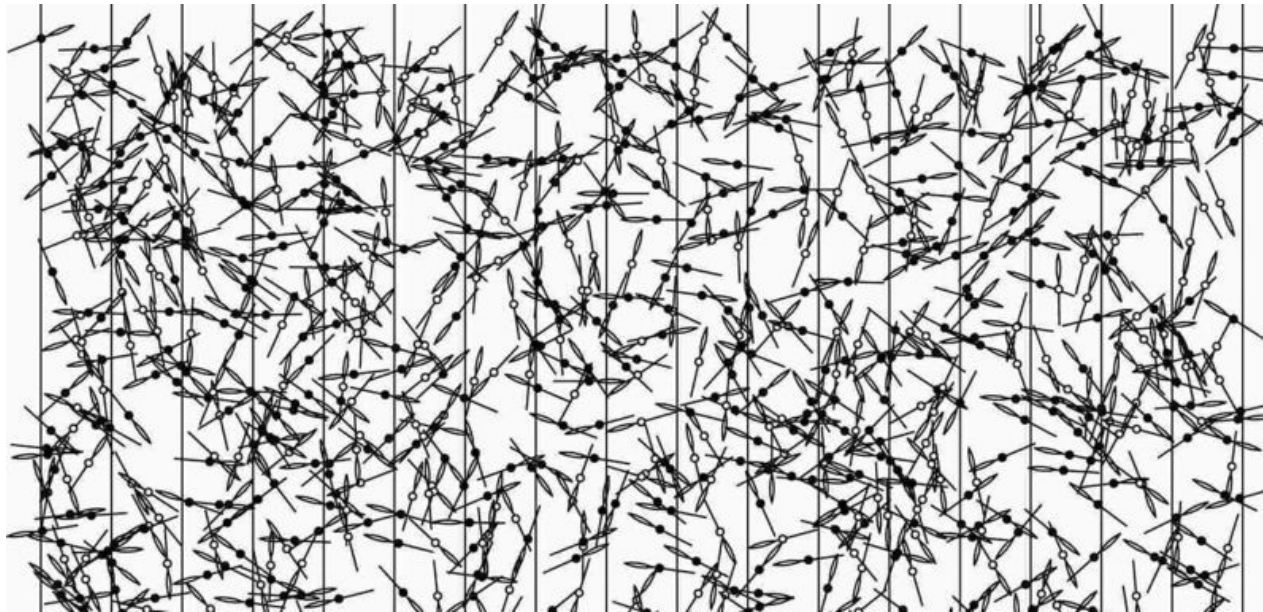
Incluyendo el truncado de Lazzarini (1901):

http://en.wikipedia.org/wiki/Buffon's_needle



(Breve) Historia de la simulación (2 bis)

- En 1901, el matemático italiano Mario Lazzarini realizó el experimento de las agujas de Buffon, lanzando la aguja 3408 veces, obteniendo el valor 355/113 para π , **que difiere de su valor real sólo en 3×10^{-7}** ! Mas adelante os propondré calcular la desviación esperada en este cálculo para $N = 3408$.
- Lazzarini **eligió agujas con una longitud 5/6 de las divisiones en su tablero**. La probabilidad de que las agujas cruzaran las líneas es de $P = 5/(3\pi)$. Por tanto, el estimador de π obtenido tras tirar N agujas y ver que M se cruzan es $\pi \approx 2l/d \cdot N/M = 5/3 \cdot N/M$.



http://en.wikipedia.org/wiki/Buffon's_needle

(Breve) Historia de la simulación (2 bisbis)

- Era un hecho conocido en su tiempo que, de forma muy aproximada, $\pi \approx 355/113$; de hecho es la mejor aproximación racional con menos de 5 dígitos en numerador y denominador.
- Teniendo en cuenta la elección de Lazzarini de la longitud de las agujas, se puede ver fácilmente que se cumple $\pi \approx 355/113 = 5/3 \cdot N/M$ cuando $M/N = (113 \cdot 5)/(355 \cdot 3) = 113 / 213$
- Esto es... **modificó las condiciones del experimento sabiendo de antemano lo que quería encontrar!** Sabía que haciendo un número de intentos (N) múltiplo de 213, obtendría lo que buscaba cuando las agujas que cruzaran la línea (M) fuera múltiplo de 113... y si no lo lograba, volvía a lanzarlo otras 213 veces.
- Lo consiguió después de 16 intentos: tras $16 \cdot 213 = 3408$ agujas lanzadas, obtuvo 1808 cruzando, lo que resulta en un valor de $\pi \approx 5/3 \cdot 3408/1808 = 3.14159292$



$$\pi = 3.14159265358979323846$$

http://en.wikipedia.org/wiki/Buffon's_needle

(Breve) Historia de la simulacion (3)

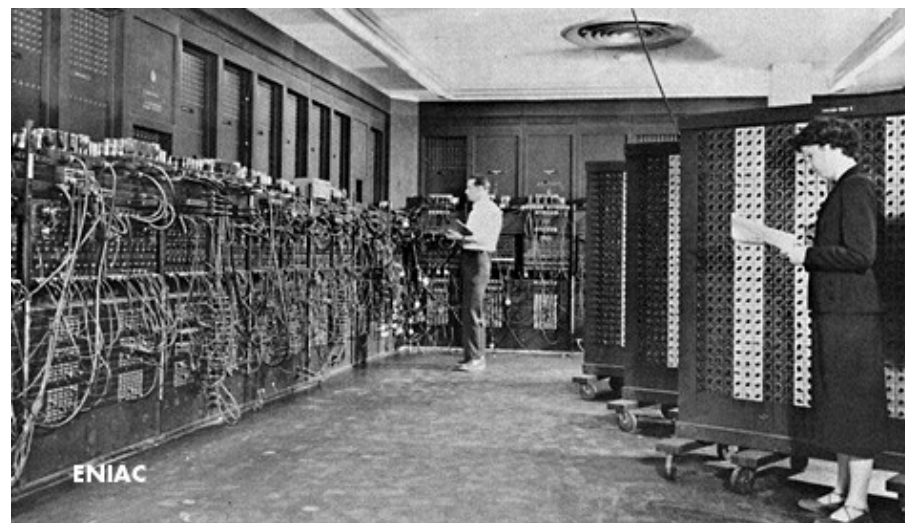
Precedentes históricos: simulaciones no computacionales.

- **Lord Kelvin** usa **métodos de muestreo aleatorio para evaluar numericamente integrales** que aparecen en la teoría cinética de los gases. Su método consistía en extraer aleatoriamente papeles numerados arreglados según distribuciones de probabilidad de interés.
- **William Sealy Gossett**, en papeles firmados como “**Student**” por razones de privacidad, utilizó métodos similares (extracción aleatoria de boletos) para sus cálculos que acabaron con los coeficientes de correlación y las distribuciones de probabilidad de Student.
- A finales de los años 20, **Richard Courant** y colaboradores mostraron la equivalencia en el **comportamiento de los resultados de los caminos aleatorios y la solución de ciertas ecuaciones diferencias parciales**.
- Ya en los años 30 **Enrico Fermi** estudió la dispersión de neutrones en la materia siguiendo experimentos numéricos similares a Monte Carlo. Estos experimentos numéricos, ampliados con **ayuda de los primeros ordenadores de los años 40, conducen a la explosión de los métodos Monte Carlo en la física nuclear**.

(Breve) Historia de la simulación (4)

Precedentes históricos: inicio del Monte Carlo computacional.

- El **método de Monte Carlo** se introduce en Física alrededor de 1949 por **N.C. Metropolis** y **S. Ulam** [**Metropolis49**], siendo esta referencia el **primer documento público** que da este nombre al **muestreo aleatorio o estocástico**.
- Sus autores trabajaban en el **proyecto Manhattan** con **Von Neumann** y en la continuación del proyecto que derivó en la construcción de la bomba de Hidrógeno y diversas pruebas nucleares.
- Existen papeles clasificados anteriores de otros científicos involucrados en el desarrollo del proyecto y que fueron desclasificados posteriormente ("Note on census-taking in Monte Carlo calculations", **E. Fermi** y **R. D. Richtmayer**, Los Alamos Archive, 1948).
- En esta utilización pionera del método se realizaron **cálculos precisos de transporte de neutrones** necesarios para el **diseño de las armas termonucleares**, utilizando la máquina **ENIAC** desde **LANL** (Los Alamos National Laboratory).



(Breve) Historia de la simulación (5)

Desarrollo histórico: desarrollos iniciales del Monte Carlo computacional.

- En el año 1950 se publican los primeros trabajos sobre **métodos de Monte Carlo para el transporte de electrones**, de utilidad en Física Médica (trabajos pioneros de **Robert R. Wilson**, conocido luego por su trabajo en radioterapia de protones).
- En 1960, **K. Douglas Tocher** desarrolló el primer programa de simulación preparado para reproducir una planta de producción con **maquinas que actuaban en función de sus diferentes estados (state machine computing)**. Este trabajo produjo además el primer libro sobre simulación: ***The Art of Simulation*** (1963).
- IBM desarrolló entre 1960 y 1961 el **General Purpose Simulation System** (GPSS). El GPSS se diseñó para realizar simulaciones de control de tráfico urbano, gestión de llamadas telefónicas, reservas de billetes de avión, ... La sencillez de uso de este sistema lo popularizó como el lenguaje de simulación más usado de su época (ver <http://www.minutemansoftware.com/simulation.htm>).
- En 1963 se desarrolló **SIMSCRIPT**, otra tecnología alternativa al GPSS basada en **FORTRAN**, más enfocada a usuarios que no tenían porqué ser obligatoriamente expertos informáticos en RAND CORPORATION. Complementariamente a los desarrollos llevados a cabo por RAND e IBM, el Royal Norwegian Computing Center inició en 1961 el desarrollo del programa **SIMULA** con ayuda de Univac. El resultado fue SIMULA I, probablemente el lenguaje de programación/simulación más importante en este periodo.

Propósito de la simulación por ordenador. Categorización:

Los propósitos que se persiguen con la realización de las simulaciones se pueden organizar en alguna de las siguientes categorías [Winsberg13]:

- **Predicción de resultados**, tanto de los resultados de algún **experimento en diseño**, como de **acontecimientos futuros** (por ejemplo, una predicción metereológica) o **pasados** (por ejemplo, la deriva de una configuración geológica).
- **Comprobación del modelo físico**, verificando la respuesta de distintos componentes al modelo y **comparando con los resultados experimentales**; o comprobando las **variaciones de la respuesta ante diferentes parámetros** de los modelos.
- **Exploratoria o heurística**, (entendida como un arte, técnica o procedimiento práctico o informal, para resolver problemas o realizar demostraciones) para la **comunicación de la información** y **visualización de los resultados de un modelo**.

La mayoría de las herramientas de resolución analíticas afrontan problemas lineales; por el contrario, **muchos fenómenos naturales se comportan de forma no lineal** y pequeños cambios en una variable pueden producir grandes cambios en otra. Las herramientas computacionales de simulación permiten estudiar estos problemas no lineales.

Procedimiento o ejecución de una simulación

Por procedimiento de una simulación se entiende la secuencia de pasos que una organización sistemática requeriría para completar el trabajo:

- la **elección del modelo físico** bajo el cual trabajaremos;
- la **implementación de estos modelos** en una forma que el ordenador pueda comprender y procesar;
- el **cálculo de los resultados** obtenidos por la aplicación de los algoritmos;
- la **conversión** de estos resultados en cantidades comparables con la teoría o la experimentación (lo que se denominan **tallies** en ciertos entornos);
- la **visualización y el análisis** de los datos obtenidos.

En ocasiones, la diferencia entre la simulación por ordenador y la realización de simples cálculos secuenciales radica en el **uso creativo de técnicas de cálculo y relaciones entre sus componentes para modelar, simplificar o describir el problema**. De esta forma trasciende de los simples cálculos sucesivos, y también resulta mucho mas complicado el determinar si sus resultados conducen a resultados fiables.

Tipos de simulación (modelo de interacción)

Se pueden categorizar las simulaciones según el tipo de interacciones que se produzcan entre sus componentes [Winsberg13]:

- **Basada en ecuaciones**, típicamente conjuntos de **ecuaciones lineales, no-lineales, diferenciales o integro-diferenciales** cuya solución se puede obtener **dinámicamente a partir del estado inicial del sistema**. Las ecuaciones que rigen la dinámica pueden referirse a partículas interactuantes o a campos o medios continuos que evolucionan en el tiempo. También existen modos de simulación mixtos denominados de “multiescala”.
- **Basada en agentes**. Este tipo de simulaciones corresponden a la **utilización de reglas locales, interacciones o acciones sobre un grupo de partículas o agentes**, en vez de reglas globales o leyes físicas de comportamiento. Estas reglas o interacciones pueden coincidir con sus intereses propios, tales como beneficio económico o estatus social y los agentes pueden aprender, adaptarse, reproducirse... Se utiliza **sobre todo en ecología, epidemiología, ciencias sociales y vida artificial**, donde se estudian relaciones entre individuos y las modificaciones globales a pequeños cambios de conducta o comportamiento localizados. Ver, por ejemplo, los **autómatas celulares**.

Alcance de las simulaciones

Ejemplos de magnitudes en simulaciones en curso:

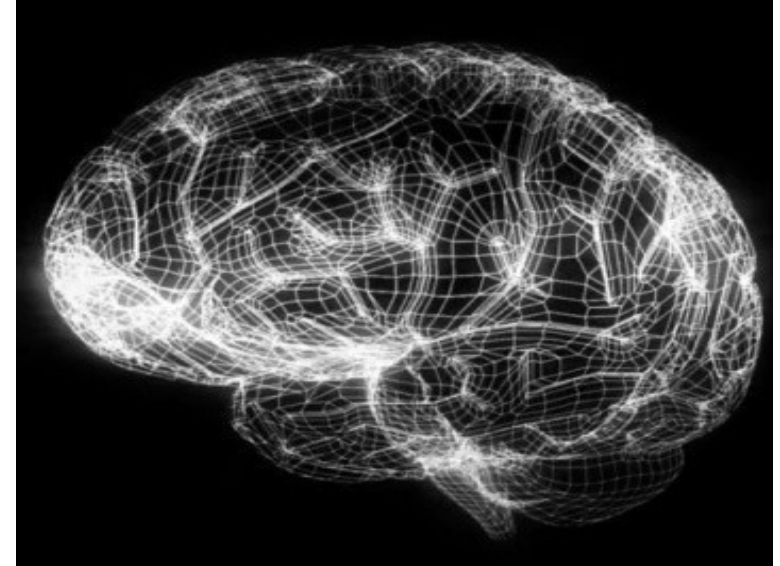
Proyectos de simulación que abarcan redes de superordenadores mundiales:

- **Human Brain Project** (<https://www.humanbrainproject.eu/>)



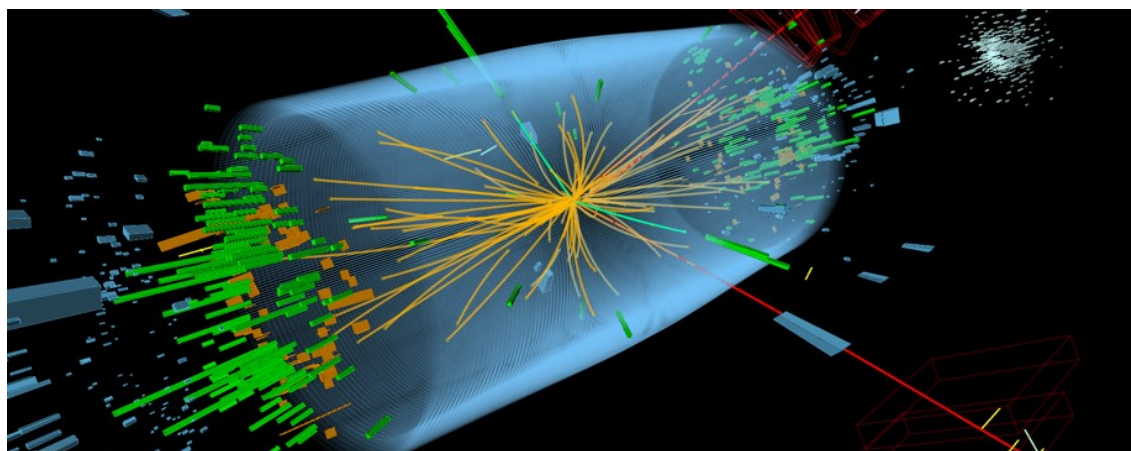
Human Brain Project

- Establecido en 2013 y con un programa a largo plazo.
- Es un proyecto de **neurociencia, medicina y computación de altas prestaciones** dedicado a **estudiar el comportamiento del cerebro y generar inteligencia artificial** (algoritmos que produzcan comportamiento inteligente y que se puedan utilizar para construir máquinas inteligente).
- Técnicamente, **un modelo a nivel molecular detallado requeriría cientos de exabytes de memoria**, algo que no se espera alcanzar en muchos años: solo en consumo eléctrico exigiría miles de GWh al día.
- El plan alternativo es utilizar supercomputadores distribuidos con almacenamiento rápido de memoria RAM conteniendo el modelo completo, mientras que simulaciones de múltiple escala acceda a detalles o modelos simplificados (modelos neuronales, sinapsis, regiones cerebrales).



Alcance de las simulaciones (2)

- **LHC Computing Grid** (<http://wlcg.web.cern.ch/>)
 - Proyecto internacional colaborativo que une en **formato GRID** la infraestructura de redes y de más de **170 centros de ordenadores en 42 países** para el análisis y la simulación de los datos del **Large Hadron Collider** (LHC, CERN).
 - En 2018 maneja del orden de ~500 Petabytes en disco (400 en cinta) entre análisis y simulación, con unos 2 millones de tareas en proceso en promedio cada día en cerca de un millón de cores.
 - WLCG es sistema GRID más grande del mundo, soportado por muchos sistemas GRID nacionales e internacionales en todo el mundo, como la **European Grid Initiative** (EU) y la **Open Science Grid** (EEUU).
- **Scientific GRID**: uso colectivo de las redes y CPUs para el análisis o simulación de datos científicos.
 - Se puede obtener un listado bastante completo de proyectos científicos en GRID en http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_distributed_computing_projects



Muestrario de los diferentes tipos de simulación en uso en Física.

- **Métodos de dinámica molecular:** dinámica clásica de partículas, dinámica de galaxias, planetaria... La idea básica consiste en construir las **ecuaciones del movimiento** con los potenciales adecuados para la interacción entre los N cuerpos que constituyen el sistema. Las ecuaciones se resuelven mediante alguna aproximación de diferencias finitas, métodos de Runge-Kutta, ... hasta alcanzar condiciones de equilibrio o determinar la dinámica de los componentes [Gould96, p. 214].
- **Simulaciones de mecánica estadística:** colectivo microcanónico y canónico, modelo de Ising, extensiones a los estudios de estado líquido y estado sólido, coloides, cambios de fase, polímeros, ...
- **Métodos basado en Monte Carlo:** Monte Carlo en sistemas estadísticos, Monte Carlo en teoría de cuántica de campos (Lattice QCD, teorías electrodébiles), dinámica de difusión, annealing, ...
- **Estructura mecánico-cuántica de átomos y moléculas:** solución a las aproximaciones de Hartree-Fock, métodos de funcional de densidad (DFT, density functional theory).
- **Método de elementos finitos** (FEM) para problemas en ecuaciones diferenciales parciales.
- **Transporte e interacción de partículas** en física de partículas, nuclear, astrofísica y física médica.
- ...