

Grado en Física

Capítulo 7: Simulación

1. Sistemas dinámicos: ecuación de Newton
2. Métodos de Monte Carlo

7 Simulación

7.1 Sistemas dinámicos: ecuación de Newton

Sea una partícula de masa m en una dimensión espacial, $x \in \mathbb{R}$, y una dimensión temporal $t \in \mathbb{R}$ sometida a una fuerza $-m f(t; x, x')$ y con condiciones iniciales (c.i.) en el instante $t = t_0$ de posición y velocidad definidas, respectivamente, por

$$x(t_0) = x_0, \quad x'(t_0) = v_0 .$$

Su trayectoria o evolución temporal está descrita por la función

$$x = x(t)$$

que satisface la ecuación de Newton (ecuación diferencial de 2º orden, EDO2), con c.i.:

$$\begin{aligned} x'' &= f(t; x, x') , \\ x(t_0) &= x_0 \quad , \quad x'(t_0) = v_0 . \end{aligned}$$

Para resolver esta EDO2 la convertimos en un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden como vimos en el tema anterior. Se realiza el cambio de variables dependientes

$$x = x, \quad v = x' ,$$

de forma que el sistema queda:

$$\begin{aligned} x' &= v , \\ v' &= f(t; x, v) , \\ x(t_0) &= x_0 \quad , \quad v(t_0) = v_0 . \end{aligned}$$

Si usamos el **método de Euler**, método de orden 1 en el paso h , para resolver esta ecuación para tiempos $t_n = t_0 + n h$ uniformemente espaciados con paso h resulta

$$\begin{cases} x(t_0) = x_0, \quad v(t_0) = v_0 , \\ f_n = f(t_n, x_n, v_n) , \\ x_{n+1} = x_n + h v_n , \\ v_{n+1} = v_n + h f_n , \\ t_{n+1} = t_n + h , \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases} .$$

donde x_n y v_n son las estimaciones del método a $x(t_n)$ y $v(t_n)$. Como veremos en un ejemplo posterior el método de Euler no conserva la energía en sistemas conservativos.

Hay otro método, denominado de **Euler-Cromer**, que aunque, como el de Euler es de primer orden en h , tiene la propiedad que para sistemas periódicos conserva la energía en cada periodo. Este método es una modificación del de Euler. Se calcula en primer lugar la velocidad en el instante siguiente, v_{n+1} , de la misma forma que con el método de Euler. Y para calcular la posición siguiente x_{n+1} en lugar de usar la velocidad previa v_n se usa la velocidad v_{n+1} ya evaluada, es decir

$$\begin{cases} x(t_0) = x_0, & v(t_0) = v_0, \\ f_n = f(t_n, x_n, v_n), \\ v_{n+1} = v_n + h f_n, \\ x_{n+1} = x_n + h v_{n+1}, \\ t_{n+1} = t_n + h; \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases} .$$

También se extienden los métodos de orden superior a la resolución de la ecuación de Newton. Escribimos explícitamente el método de Runge-Kutta2, de orden 2, aplicado al problema de Newton.

$$\begin{cases} x(t_0) = x_0, & v(t_0) = v_0, \\ f_n = f(t_n, x_n, v_n), \\ F_{1x} = h v_n, \\ F_{1v} = h f_n, \\ t_{tmp} = t_n + h, \\ x_{tmp} = x_n + F_{1x}, \\ v_{tmp} = v_n + F_{1v}, \\ f_{tmp} = f(t_{tmp}, x_{tmp}, v_{tmp}), \\ F_{2x} = h v_{tmp}, \\ F_{2v} = h f_{tmp}, \\ x_{n+1} = x_n + (F_{1x} + F_{2x})/2, \\ v_{n+1} = v_n + (F_{1v} + F_{2v})/2, \\ t_{n+1} = t_n + h, \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases} .$$

Vamos a usar estos métodos en dos ejemplos. El objetivo del primer ejemplo, oscilador armónico soluble exactamente, es comprobar cómo funcionan los métodos usados en un caso con resultado conocido antes de aplicarlos a problemas no solubles analíticamente. El segundo ejemplo es un péndulo físico no soluble exactamente.

Ejemplo: Oscilador armónico

Como ejemplo resolvemos el problema de una partícula en un potencial de oscilador armónico unidimensional con energías potencial y cinética dadas por:

$$E_{pot} = \frac{1}{2} K x^2, \quad E_{cin} = \frac{1}{2} m (x')^2$$

Utilizando que la fuerza es menos el gradiente de la energía potencial resulta la ecuación de Newton

$$m x'' = - K x,$$

eligiendo, por simplicidad, la constante del resorte $K = 1$ y la masa $m = 1$, resulta que la ecuación de Newton con c.i. es

$$x'' = -x, \quad x(t_0) = x_0, \quad x'(t_0) = v_0.$$

con solución exacta:

$$x(t) = x_0 \cos(t - t_0) + v_0 \sin(t - t_0).$$

Resolvemos numéricamente con el algoritmo de Euler ecuación de Newton del oscilador armónico con valores iniciales $t_0 = 0$, $x_0 = 1$, $x'_0 = v_0 = 0$ y paso temporal $h = 0.01$ en fortran con doble precisión. Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 7.1 con el subíndice E y en la gráfica 1 siguientes. Puesto que es un problema que deriva de una energía potencial dependiente solamente de la posición, es un problema conservativo y debe conservar la energía. Estudiamos para cada instante la energía calculada como suma de energía cinética más energía potencial y vemos que la resolución con el método de Euler no conserva la energía, si no que va incrementándose. Esto nos muestra que el método no es apropiado para el problema. Si hacemos el paso h menor entonces el crecimiento es más lento pero también tiene lugar. Vemos también los resultados obtenidos con el

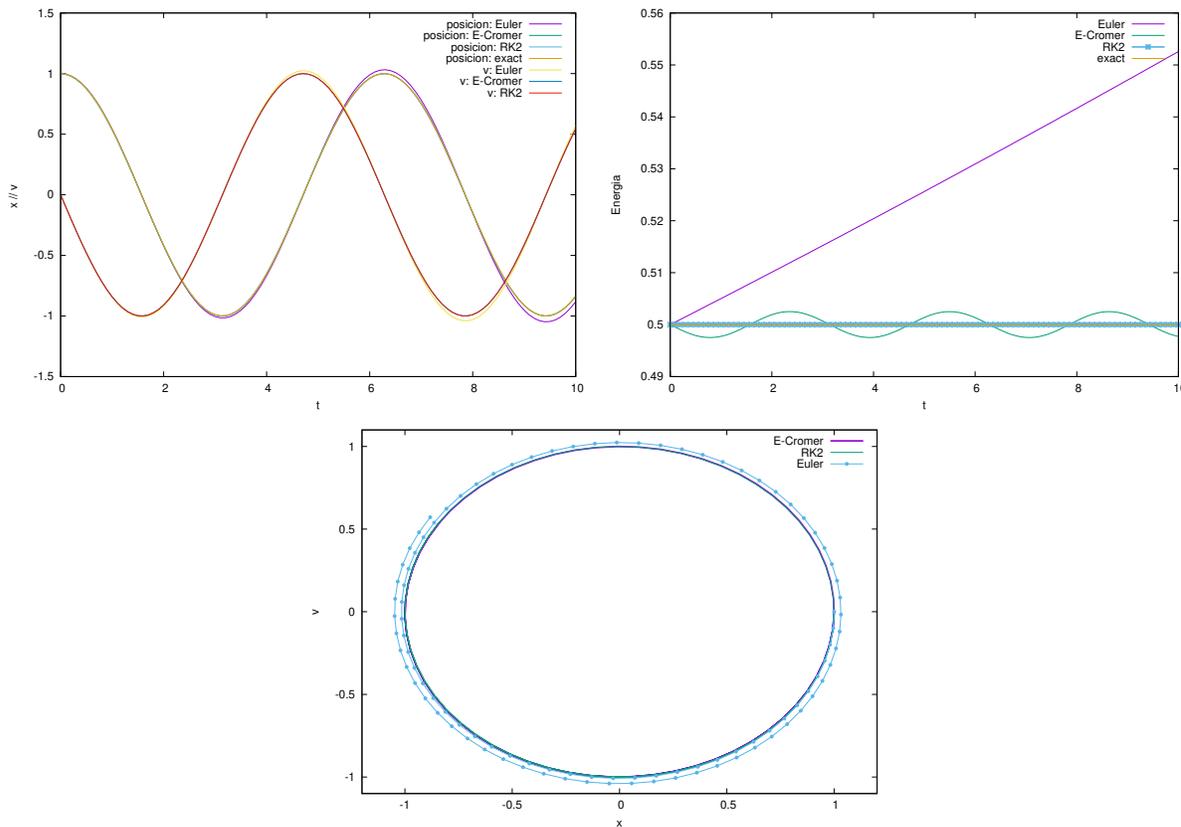


Figure 1: Resultados de trayectoria, velocidad y energía en función del tiempo para el oscilador armónico unidimensional del ejemplo usando diferentes métodos numéricos de resolución: Euler, Euler-Cromer y RK2, con paso $h = 10^{-2}$ y condiciones iniciales $x(0) = 1$, $v(0) = 0$

algoritmo de Euler-Cromer en la tabla 7.1 y en las figuras (con subíndice C de Cromer). Notamos que estos resultados son periódicos y que, aunque la energía fluctúa dentro de un periodo, vuelve

t	x_E	$x_E - x_{exac}$	E_E	x_C	$x_C - x_{exac}$	E_C	x_R	$x_R - x_{exac}$	E_R
0.0	1.000	0.0	0.500	1.000	0.0	0.500	1.000	0.0	0.500
0.5	0.880	$0.22E-2$	0.503	0.875	$-0.24E-2$	0.498	0.878	$-0.39E-5$	0.500
1.0	0.543	$0.27E-2$	0.505	0.536	$-0.42E-2$	0.498	0.540	$-0.14E-4$	0.500
1.5	0.071	$0.58E-3$	0.508	0.066	$-0.50E-2$	0.500	0.071	$-0.25E-4$	0.500
2.0	-0.420	$-0.41E-2$	0.510	-0.421	$-0.46E-2$	0.502	-0.416	$-0.30E-4$	0.500
2.5	-0.811	$-0.10E-1$	0.513	-0.804	$-0.30E-2$	0.502	-0.801	$-0.25E-4$	0.500
3.0	-1.005	$-0.15E-1$	0.515	-0.991	$-0.71E-3$	0.501	-0.990	$-0.74E-5$	0.500
3.5	-0.953	$-0.17E-1$	0.518	-0.935	$0.18E-2$	0.498	-0.936	$0.20E-4$	0.500
4.0	-0.667	$-0.13E-1$	0.520	-0.650	$0.38E-2$	0.498	-0.654	$0.50E-4$	0.500
4.5	-0.216	$-0.49E-2$	0.523	-0.206	$0.49E-2$	0.499	-0.211	$0.73E-4$	0.500
5.0	0.291	$0.70E-2$	0.526	0.288	$0.48E-2$	0.501	0.284	$0.80E-4$	0.500
5.5	0.728	$0.20E-1$	0.528	0.712	$0.35E-2$	0.503	0.709	$0.65E-4$	0.500
6.0	0.989	$0.29E-1$	0.531	0.962	$0.14E-2$	0.501	0.960	$0.29E-4$	0.500
6.5	1.009	$0.32E-1$	0.534	0.976	$-0.11E-2$	0.499	0.977	$-0.23E-4$	0.500
7.0	0.781	$0.27E-1$	0.536	0.751	$-0.33E-2$	0.498	0.754	$-0.76E-4$	0.500
7.5	0.360	$0.13E-1$	0.539	0.342	$-0.47E-2$	0.498	0.347	$-0.12E-3$	0.500
8.0	-0.151	$-0.57E-2$	0.542	-0.150	$-0.50E-2$	0.501	-0.146	$-0.13E-3$	0.500
8.5	-0.628	$-0.26E-1$	0.544	-0.606	$-0.40E-2$	0.502	-0.602	$-0.11E-3$	0.500
9.0	-0.953	$-0.42E-1$	0.547	-0.913	$-0.21E-2$	0.502	-0.911	$-0.63E-4$	0.500
9.5	-1.046	$-0.49E-1$	0.550	-0.997	$0.38E-3$	0.500	-0.997	$0.11E-4$	0.500
10.0	-0.882	$-0.43E-1$	0.553	-0.836	$0.27E-2$	0.498	-0.839	$0.90E-4$	0.500

Table 1: Resultados de oscilador armónico con parámetros $K = m = 1$, $x(0) = 1$, $x'(0) = 0$ estimados con el método de Euler: su trayectoria $x_E = x_E(t)$, su diferencia con el valor exacto $x_E - x_{exac}$ y la energía E_E calculada para varios tiempos. También se presentan las mismas magnitudes estimadas con el método de Euler-Cromer y etiquetadas como x_C , $x_C - x_{exac}$, E_C . Y las estimadas con el método de Runge-Kutta2, etiquetadas como x_R , $x_R - x_{exac}$, E_R .

al valor inicial transcurrido un periodo. También vemos en la figura del espacio de fases, plano (x, v) , que la resolución aproximada con Euler-Cromer es periódica como el resultado exacto y la resolución con Euler no lo es.

El mismo problema se resuelve con el método RK2 antes descrito con el mismo paso $h = 10^{-2}$. Se ve que la precisión del resultado obtenido es mucho mejor, como corresponde al mayor orden, 2, de precisión del método comparado con los previos.

Ejemplo: Péndulo físico

Resolvemos el péndulo físico con energías potencial y cinética dadas por:

$$E_{pot} = 2 K \sin(x/2)^2, \quad E_{cin} = \frac{1}{2} m (x')^2$$

Utilizando que la fuerza es menos el gradiente de la energía potencial resulta la ecuación de Newton

$$m x'' = -K \sin(x) ,$$

eligiendo, por simplicidad, la constante del péndulo $K = 1$ y la masa $m = 1$, resulta que la ecuación de Newton con c.i. es

$$x'' = -\sin(x), \quad x(t_0) = x_0 , \quad x'(t_0) = v_0 .$$

de la que no conocemos la solución exacta. Resolvemos numéricamente como en el caso anterior, con c.i. específicas:

$$x'' = -\sin(x), \quad x(t_0) = x_0 = 1 , \quad x'(t_0) = v_0 = 0 .$$

Vemos los resultados en las tabla 7.1 y figura 2.

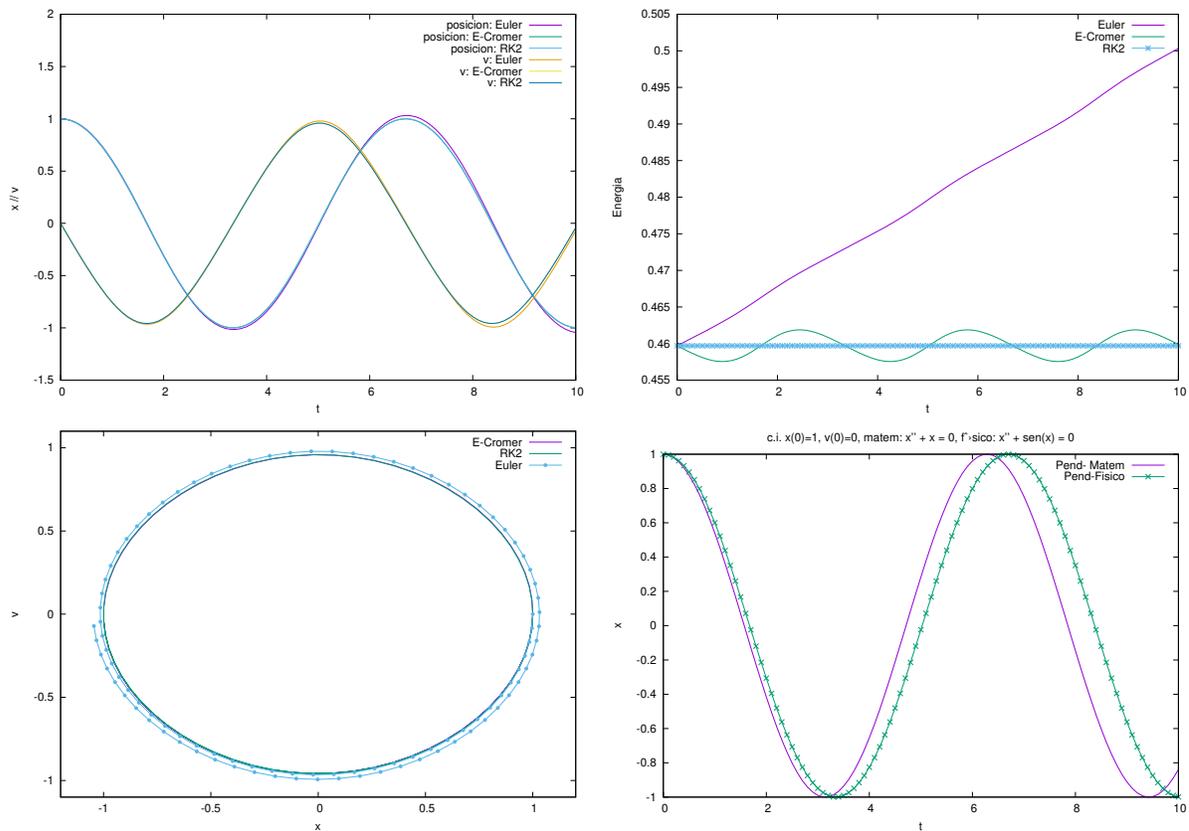


Figure 2: Resultados de trayectoria, velocidad y energía en función del tiempo para el péndulo físico del ejemplo usando diferentes métodos numéricos de resolución: Euler, Euler-Cromer y RK2, con paso $h = 10^{-2}$ y condiciones iniciales $x(0) = 1$, $v(0) = 0$. También se compara (en la figura derecha inferior) la trayectoria del péndulo físico con su aproximación matemática $\sin(x) \sim x$, que es válida para oscilaciones de amplitud pequeña, en este caso hay las diferencias son apreciables.

t	x_E	$x_E - x_R$	E_E	x_C	$x_C - x_R$	E_C	x_R	$x_R - x_R$	E_R
0.0	1.000	0.0	0.460	1.000	0.0	0.460	1.000	0.0	0.460
0.5	0.898	$0.20E - 02$	0.461	0.894	$-0.21E - 02$	0.458	0.896	0.0	0.460
1.0	0.603	$0.30E - 02$	0.463	0.596	$-0.38E - 02$	0.458	0.600	0.0	0.460
1.5	0.169	$0.19E - 02$	0.465	0.162	$-0.47E - 02$	0.459	0.167	0.0	0.460
2.0	-0.308	$-0.19E - 02$	0.468	-0.311	$-0.45E - 02$	0.461	-0.306	0.0	0.460
2.5	-0.714	$-0.73E - 02$	0.470	-0.710	$-0.33E - 02$	0.462	-0.707	0.0	0.460
3.0	-0.961	$-0.13E - 01$	0.472	-0.950	$-0.14E - 02$	0.461	-0.949	0.0	0.460
3.5	-1.007	$-0.17E - 01$	0.474	-0.990	$0.63E - 03$	0.459	-0.991	0.0	0.460
4.0	-0.844	$-0.18E - 01$	0.475	-0.823	$0.26E - 02$	0.458	-0.826	0.0	0.460
4.5	-0.497	$-0.16E - 01$	0.477	-0.477	$0.41E - 02$	0.458	-0.481	0.0	0.460
5.0	-0.032	$-0.84E - 02$	0.480	-0.019	$0.47E - 02$	0.460	-0.024	0.0	0.460
5.5	0.442	$0.35E - 02$	0.482	0.443	$0.42E - 02$	0.462	0.439	0.0	0.460
6.0	0.815	$0.17E - 01$	0.484	0.801	$0.28E - 02$	0.462	0.799	0.0	0.460
6.5	1.011	$0.28E - 01$	0.486	0.984	$0.83E - 03$	0.460	0.983	0.0	0.460
7.0	0.998	$0.36E - 01$	0.488	0.961	$-0.12E - 02$	0.459	0.962	0.0	0.460
7.5	0.777	$0.38E - 01$	0.490	0.736	$-0.31E - 02$	0.458	0.739	0.0	0.460
8.0	0.384	$0.33E - 01$	0.492	0.347	$-0.44E - 02$	0.458	0.351	0.0	0.460
8.5	-0.102	$0.18E - 01$	0.494	-0.124	$-0.47E - 02$	0.460	-0.120	0.0	0.460
9.0	-0.565	$-0.37E - 02$	0.496	-0.566	$-0.38E - 02$	0.462	-0.562	0.0	0.460
9.5	-0.901	$-0.26E - 01$	0.498	-0.877	$-0.22E - 02$	0.461	-0.875	0.0	0.460
10.0	-1.045	$-0.46E - 01$	0.500	-0.999	$-0.21E - 03$	0.460	-0.999	0.0	0.460

Table 2: Resultados de péndulo físico con con parámetros $g = m = L = 1$, $x(0) = 1$, $x'(0) = 0$ estimados con el método de Euler: su trayectoria $x_E = x_E(t)$, su diferencia con la mejor aproximación calculada x_R , $x_E - x_R$ y la energía E_E calculada para varios tiempos. También se presentan las mismas magnitudes estimadas con el método de Euler-Cromer y etiquetadas como x_C , $x_C - x_R$, E_C . Y las estimadas con el método de Runge-Kutta2, etiquetadas como x_R , $x_R - x_R$, E_R .

7.2 Método Monte Carlo

Hay una variedad enorme de uso de métodos Monte Carlo (utilizando numeros aleatorios) para resolver problemas.

En particular uno de los usos es calcular áreas, volúmenes e integrales. Veremos a continuación el cálculo de integrales de funciones definidas positivas y acotadas con Monte Carlo en una de sus formas más elementales, la de acierto/fallo. Hay protocolos mucho más sofisticados aunque la idea básica es la misma.

El uso de números aleatorios presupone la generación de dichos números con cierta distribución o densidad de probabilidad. Hay diferentes distribuciones de probabilidad: uniforme, gaussiana, exponencial,... Aquí nos restringiremos a usar un distribución de probabilidad uniforme $U(a, b)$

en un intervalo finito real $[a, b]$ definida por la densidad de probabilidad:

$$p(x) = \begin{cases} 0, & x < a \\ 1/(b-a), & a \leq x \leq b \\ 0, & b < x \end{cases}$$

Método de acierto/fallo para cálculo de integrales Se trata del cálculo de integrales definidas en intervalo finito de funciones acotadas y positivas:

$$I = \int_a^b dx f(x) \quad , \quad 0 \leq f(x) \leq M \quad ,$$

donde M es una cota superior al valor de la función $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$. Sea

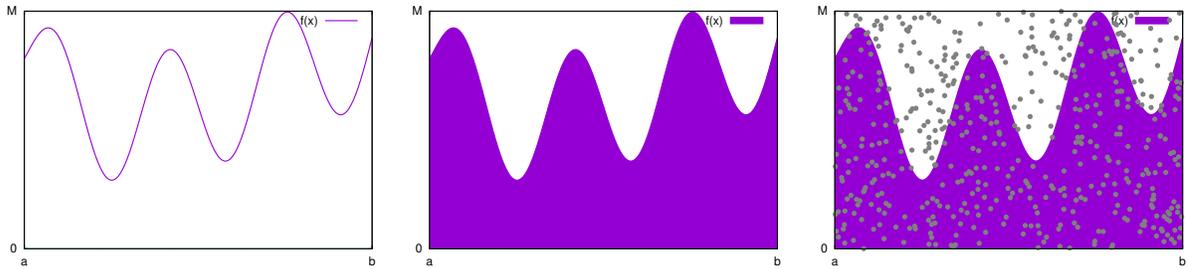


Figure 3:

$$F(x, y) = \begin{cases} 1, & f(x) \geq y \\ 0, & f(x) < y \end{cases} \\ \equiv \Theta(f(x) - y) .$$

La función Θ es conocida como función de Heavyside o función escalón, ya que $\Theta(x)$ es nula si $x < 0$ y vale 1 si $x > 0$ ¹ Usando $F(x, y)$, la integral I se puede convertir en una integral doble:

$$I = \int_a^b dx \int_0^M dy F(x, y) \\ (Dem.) = \int_a^b dx \int_0^{f(x)} dy = \int_a^b dx f(x)$$

La integral I es el área entre el eje x la curva $f(x)$ como representamos en la fig. 3, pero también es la superficie en la que $F(x, y)$ vale 1. Para calcular dicha superficie, se generan N parejas de números reales al azar (x_i, y_i) , $i = 1, 2 \dots N$ en el rectángulo $R = [a, b] \times [0, M]$ con la coordenada x distribuida con probabilidad uniforme en el intervalo $[a, b]$, es decir, $x \in U[a, b]$, y la coordenada y distribuida con probabilidad uniforme en el intervalo $[0, M]$, es decir $y \in U[0, M]$. Para cada punto (x_i, y_i) generado aleatoriamente de esta manera se evalúa $F(x_i, y_i)$ si vale 1 es que ha caído dentro del área a determinar, si vale 0 está fuera. Sea $N_{int} = \sum_{i=1}^N F(x_i, y_i)$ el número de

¹Para el valor de $\Theta(x = 0)$ hay varios convenios: 1/2 o 0 o 1, irrelevantes en general para integración

'aciertos', es decir, los puntos que han caído dentro del área que queremos evaluar de entre todos los N puntos sorteados uniformemente en el rectángulo R , entonces el cociente del área I que queremos evaluar y el área $(b - a) M$ del rectángulo R coincide con el cociente de puntos que han caído dentro N_{int} y el total de puntos 'tirados' al azar, es decir,

$$\frac{I}{M(b-a)} \simeq \frac{N_{int}}{N},$$

y la estimación de la integral viene dada por:

$$I \simeq M(b-a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F(x_i, y_i).$$

Se puede estimar no solo el valor de la integral sino también el error que se comete:

$$I = M(b-a) \left(\frac{N_{int}}{N} \pm \frac{\sqrt{N_{int}}}{N} \right)$$

Estos resultados tienen fundamento en el teorema del límite central que se establece para un número de 'tiradas' N tendiendo a infinito.

Observar que el error relativo de la estimación de la integral va como $1/\sqrt{N_{int}}$ y que el valor del resultado será más preciso cuanto mayor sea el número de aciertos, que depende del número de tiradas N y de que se haya acotado muy bien el área de interés por otro área conocida.

Ejemplo:

$$I = \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx \equiv \int_0^1 dx \int_0^1 dy \Theta(1-x^2-y^2) \equiv \pi/4$$

Usando la rutina *RAND()* del *gfortran* obtengo la siguiente tabla de estimaciones de π

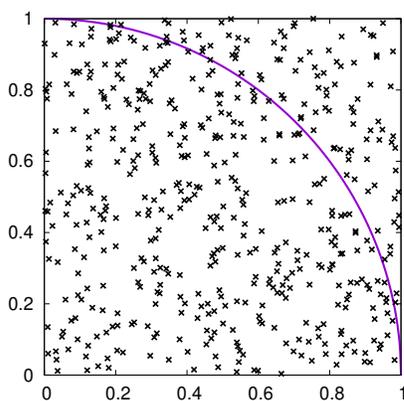


Figure 4:

N	N_{int}	$4 N_{int}/N \simeq \pi$
1000000	785524	3.14209604
2000000	1570353	3.14070606
3000000	2355597	3.14079595
4000000	3141476	3.14147592
5000000	3927028	3.14162230
6000000	4712137	3.14142466
7000000	5497439	3.14139366
8000000	6283437	3.14171839
9000000	7069026	3.14178944
10000000	7854699	3.14187956

Table 3: Estimación de π con el método de acierto/fallo integrando