Elementos de Cálculo Numérico / Cálculo Numérico

Primer Cuatrimestre 2023

Trabajo Práctico.

La resolución del TP podrá hacerse en grupos de a lo sumo dos personas. Cada grupo deberá elegir un único tema para resolver.

Tema 1: Ajuste de formas geométricas.

En muchas aplicaciones es necesario resumir un conjunto de datos con una primitiva geométrica. Consideremos, por ejemplo, el caso de un círculo. Imaginemos la siguiente situación. Un robot provisto de un palpador puede obtener una serie de puntos sobre una circunferencia de eje cilíndrico, que puede estar afectado por desgaste o mala alineación. Se desea entonces calcular el radio y la posición del centro de su base a los datos medidos.

Una idea simple es la siguiente. Un círculo de centro (x_0, y_0) y radio r está descripto por la ecuación $(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 = r^2$. Desarrollando: $x^2 - 2xx_0 + x_0^2 + y^2 - 2yy_0 + y_0^2 = r^2 \quad \Leftrightarrow \quad 2xx_0 + 2yy_0 + (r^2 - x_0^2 - y_0^2) = x^2 + y^2$.

Si disponemos de N datos (x_i, y_i), $i = 1, \dots, N$, esperaríamos encontrar valores x_0, y_0 y r tales que se cumplen las N ecuaciones

$$2x_ix_0 + 2y_iy_0 + (r^2 - x_0^2 - y_0^2) = x_i^2 + y_i^2.$$

Este problema no tiene solución, pero podemos pensarlo en el sentido de cuadrados mínimos: hallar A, B, C que minimicen $\sum_{i=1}^{N}(x_iA + y_iB + C - (x_i^2 + y_i^2))^2$. Este problema siempre tiene solución, y luego podemos interpretar: $A = 2x_0$, $B = 2y_0$, $C = r^2 - x_0^2 - y_0^2$.

Ejercicio 1. Escribir un programa que implemente esta idea. Debe recibir una matriz de N pares (x_i, y_i) y devolver los parámetros de la circunferencia.

Ejercicio 2. Para probar el programa podemos simular su aplicación sobre datos generados artificialmente. Generar conjuntos de datos según las siguientes pautas y graficarlos junto con el círculo obtenido a partir de ellos:

a) datos sobre un círculo completo, sin ruido,

b) datos sobre un círculo completo, con ruido aleatorio

c) datos sobre un arco de circunferencia de amplitud $0 < \alpha \leq 2\pi$, con ruido. ¿Qué pasa para α chico (del orden de $\pi/4$, por ejemplo)?

Testear más de un conjunto de datos por cada categoría.

El abordaje anterior es lo que se llama “ajuste algebraico”. Son los cuadrados de los residuos de la representación algebraica de la figura geométrica los que se minimizan, y no la distancia cuadrática a la curva.

Para implementar un "ajuste geométrico", se desea minimizar

$$\varepsilon_g(x_0, y_0, r) = \sum_{i=1}^{N} d_i^2(x_0, y_0, r),$$

donde $d_i(x_0, y_0, r)$ es la distancia del punto (x_i, y_i) al círculo de parámetros x_0, y_0, r. Para resolver el problema, y estimar los valores x_0, y_0, r, utilizaremos el método de Newton para minimizar ε_g. El método de Newton consiste en aproximar la función en un punto v^k por su polinomio de Taylor de orden 2 y luego minimizar ese polinomio, obteniendo un nuevo punto v^{k+1}. Esto da lugar a la iteración:

$$v^{k+1} = v^k - H(v^k)^{-1} \nabla \varepsilon_g(v^k),$$

donde $H(v)$ es la matriz hessiana de ε_g evaluada en v. Se puede tomar como valor inicial, por ejemplo $v^0 = (v_1^0, v_2^0, v_3^0)$, donde (v_1^0, v_2^0) es el punto promedio de los datos, y v_3^0 es el promedio de las distancias a ese centro.

Ejercicio 3. Implementar un programa que reciba como input una función f y un punto z y calcule el vector gradiente de f evaluado en z, y un programa que calcule el hessiano de f evaluado en z. Ambos utilizando diferencias forward.

Ejercicio 4. Implementar un programa que aplique el método de Newton, utilizando los programas del ejercicio anterior para computar el gradiente y el Hessiano y el método de Cholesky para resolver el sistema.

Verificar el comportamiento del ajuste geométrico sobre los conjuntos de datos generados anteriormente.

Tema 2: Obtención de la curva braquistocrona.

El problema de la braquistocrona fue propuesto en 1696 por Johann Bernoulli. Consiste en encontrar la curva, digamos la forma del tobogán, que une dos puntos de manera que los cuerpos que caen por ella lo hagan en el menor tiempo posible. Una primera conjetura que se podría hacer es que la braquistocrona es una recta, que es la curva más corta que une dos puntos. La solución correcta, sin embargo, es un arco de cicloide, la curva descrita por un punto en el borde de una moneda que rueda a lo largo de una regla.

El objetivo de este trabajo práctico es realizar una aproximación numérica de la curva. Para esto, fijemos primero unas ideas del problema. Digamos que inicialmente nuestra partícula se halla en reposo en el punto $(0, 1)$ donde 1 es la altura en metros y debe llegar al punto $(L, 0)$, moviéndose sobre el vínculo $y = y(x)$ sometida únicamente a la fuerza de gravedad. Consideramos que todo rozamiento resulta despreciable.

Se sabe que unas de las características de este movimiento es la conservación de la energía, por lo que se puede afirmar que

$$E = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + mgy.$$

Donde m es la masa de la partícula, $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ es la aceleración gravitatoria.

Luego como E es constante, en particular para $t = 0$ se tiene que $E = mg$. Observemos que además vale que

$$\dot{y} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}x}{\Delta t} = y'\,\dot{x}.$$

Concluimos que

$$mg = \frac{m}{2}\dot{x}^2(1 + y'^2) + mgy.$$

De la ecuación de arriba podemos despejar $\dot{x}$ llegando a que

$$\dot{x} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \sqrt{\frac{2g(1 - y(x))}{1 + y'(x)^2}}.$$

Finalmente

$$\mathrm{d}t = \sqrt{\frac{1 + y'(x)^2}{2g(1 - y(x))}}\,\mathrm{d}x.$$

El tiempo que tardará nuestra partícula en recorrer toda la curva $y = y(x)$ para llegar de un extremo a otro será entonces igual a

$$F(y) = \int_0^L \sqrt{\frac{1 + y'(x)^2}{2g(1 - y(x))}}\,\mathrm{d}x$$

Donde se asume que $F : C^2(0, L) \to \mathbb{R}$.

Para resolver este problema consideramos una discretización del intervalo $[0, L]$ dado por $x_0 = 0, x_1 = h, \ldots, x_n = L - h, x_{n+1} = L$, para algún parámetro h. Notamos y_i a la aproximación de la curva $y(x)$ en el punto x_i. Sabemos que $y_0 = 1$ e $y_{n+1} = 0$. Las incógnitas del problema son $y_1, \ldots, y_n$. Dada esta discretización, si asumimos que y es lineal en cada intervalo $[x_i, x_{i+1}]$, se tiene que:

$$\begin{aligned}
F(y) &= \sum_{i=0}^{n}\int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt{\frac{1 + \left(\frac{y_{i+1}-y_i}{h}\right)^2}{2g(1 - y(x))}}\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n}\int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt{1 + (\frac{y_{i+1} - y_i}{h})^2}(2g)^{-\frac{1}{2}}(1 - y(x))^{-\frac{1}{2}}\mathrm{d}x \\
&= \sum_{i=0}^{n} \sqrt{1 + \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h}\right)^2}(2g)^{-\frac{1}{2}}\frac{2h}{y_{i+1} - y_i}\left(\sqrt{1 - y_i} - \sqrt{1 - y_{i+1}}\right) \\
&= (2/g)^{\frac{1}{2}}\sum_{i=0}^{n}\left(\sqrt{1 - y_{i+1}} - \sqrt{1 - y_i}\right)\sqrt{\left(\frac{h}{y_{i+1} - y_i}\right)^2 + 1},
\end{aligned}$$

donde en el último paso asumimos (razonablemente), que y es decreciente.

Ejercicio 1. Implementar una función que reciba un vector y de cierta longitud n y calcule el valor del funcional evaluado en y: $F(y)$.

Para resolver el problema, y estimar la braquistocrona, utilizaremos el método de Newton para minimizar F. El método de Newton consiste en aproximar la función en un punto y^k

por su polinomio de Taylor de orden 2 y luego minimizar ese polinomio, obteniendo un nuevo punto y^{k+1}. Esto da lugar a la iteración:

$$y^{k+1} = y^k - H(y^k)^{-1}\nabla F(y^k),$$

donde $H(y)$ es la matriz hessiana de F evaluada en y.

Ejercicio 2. Implementar un programa que reciba como input una función f y un punto z y calcule el vector gradiente de f evaluado en z, y un programa que calcule el Hessiano de f evaluado en z. Ambos utilizando diferencias forward.

Ejercicio 3. Finalmente, implementar un programa que aplique el método de Newton al funcional F. Utilizar los programas del ejercicio anterior para computar el gradiente y el Hessiano, y el método de Gauss Seidel para resolver el sistema.

Resolver el problema tomando como dato inicial la recta que une los puntos $(0,1)$ y $(L,0)$. Resolver para $L = \pi/2$. Graficar la solución para cada iteración de Newton. Comparar con la solución exacta, que viene dada por: $x = (\theta - \operatorname{sen}(\theta))/2, \quad y = 1 - (1-\cos(\theta))/2$; para $\theta \in [0,\pi]$.