

Métodos Numéricos y Optimización:

Trabajo práctico 1

Zöe Velazquez Zorzi y Martina Grünewald

7 de Septiembre 2023

Abstract

En este trabajo se realizó un estudio del comportamiento de diferentes métodos numéricos y su aplicación en distintos ejercicios prácticos. Se llevaron a cabo dos estudios con métodos de interpolación como Lagrange, Splines cúbicos y quínticos. En primer lugar se intentó hallar una trayectoria que una un conjunto de puntos extraídos de un archivo csv para luego compararla con su *ground truth*; en segundo, se comparó el comportamiento de estos métodos en dos funciones de diferentes dimensiones y con puntos tanto equiespaciados como no equiespaciados. En el primer punto se llegó a la conclusión que sostiene que las aproximaciones de la trayectoria hechas con Splines cúbicos y quínticos son las más acertadas, con un error relativo máximo entre los puntos interpolados y los de la función original de 0.777 en x, y de 0.088 en y. Por otro lado, para el segundo punto se demostró que más allá de que uno de los métodos posea un menor error relativo (como por ejemplo los Splines cúbicos, con 9.798), todos los métodos tienen en común que interpolaron mejor los puntos dados dependiendo de la densidad y distribución de estos, por lo que estas decisiones fueron cruciales para determinar el mejor método o el más óptimo.

Introducción

Para el desarrollo del primer ejercicio se extrajeron los datos de los archivos csv proporcionados por los docentes y fueron utilizados para trazar una aproximación de la trayectoria de un tractor de riego y compararla con la original. Luego se delimitó la zona con las ecuaciones de las rectas dictadas en la consigna y utilizando el método de Newton Raphson se hallaron las intersecciones de la trayectoria aproximada con estas barreras. Por otro lado, para el segundo ejercicio se observó el comportamiento de los métodos de interpolación de Lagrange, Splines cúbicos y quínticos; primero con puntos equiespaciados y luego utilizando la distribución Chebyshev para distribuir los puntos de manera no equiespaciada, para finalmente así comparar los máximos errores relativos en ambas funciones. A lo largo del trabajo se decidió utilizar en la gran mayoría de los casos el error relativo, ya que muchas veces es una mejor alternativa que el absoluto debido a que toma en consideración el tamaño del número aproximado.

1 Métodos de interpolación utilizados

Lagrange

Una manera de interpolar puntos tanto equiespaciados como no, es mediante al polinomio de Lagrange. Se propone que existe un único polinomio $P(x)$ de grado n que cumple

$$P(x_i) = f(x_i)$$

Es decir que existe un solo polinomio de grado n que pasa por todos los data-points de la función original. El polinomio queda definido como

$$P(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L_{n,k}(x)$$

donde \mathbf{n} es el grado del polinomio, \mathbf{k} el elemento al cual se le determina una base que toma valor $\mathbf{1}$ cuando la función pasa por ese punto, o $\mathbf{0}$ cuando no lo hace; y

$$L_{n,k}$$

siendo esta la ecuación para las bases

$$L_{n,k} = \prod_{i=0}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

Splines

Los Splines son un método utilizado frecuentemente a la hora de aproximar una función a trozos.

Splines cúbicos

Este tipo de Spline divide la función en intervalos para los cuales se establece una función cúbica local que pase por los puntos. Este Spline trabaja con la primera y segunda derivada del polinomio que aproxima la función por lo que se podrá ver una curva más suave al interpolar los puntos.

$$S_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i$$

donde a_i, b_i, c_i, d_i son coeficientes a encontrar mediante a sistemas de ecuaciones lineales que cumplen con las medidas de continuidad: al dos funciones cruzarse en un punto de interpolación deben poseer el mismo valor y la misma derivada primera para hacer el Spline suave en toda su trayectoria.

Splines quínticos

En el caso del Spline quíntico es igual al cúbico, variando únicamente en el grado de los polinomios (5) y las condiciones de continuidad que incluyen la coincidencia de las derivadas primeras, segundas y terceras en los puntos de interpolación. Es por estas razones que el Splines quínticos es más suave.

2 Otras herramientas utilizadas

Puntos Chebyshev

La técnica de los puntos de Chebyshev es utilizada para escoger puntos, dentro de un intervalo, que resulten no ser equidistantes. Suelen ser usados en el intervalo de $[-1, 1]$.

$$\text{Puntos Chebyshev} = \cos \left(\pi \cdot \frac{2 \cdot \text{arreglo}(n) + 1}{2 \cdot n} \right) \quad (1)$$

donde \mathbf{n} es la cantidad de puntos se que quieren para la interpolación y $2 \cdot \text{arreglo}(\mathbf{n})+1$ nos brinda un arreglo de los \mathbf{n} numeros impares comenzando por el 1.

Método de Newton Rhapson

Este método es un algoritmo ampliamente utilizado para encontrar aproximaciones de las raíces de una función real. Se basa en la idea de utilizar la derivada de una función para encontrar la pendiente de la tangente en un punto dado y luego usar esa tangente para estimar la raíz de la función.

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^k(x_0)}{k!} (x - x_0)^k \quad (2)$$

El método tiende a converger rápidamente hacia una raíz cuando la suposición inicial es lo suficientemente cercana a la raíz real y cuando la función tiene una derivada continua y no cambia abruptamente en la vecindad de la raíz.

Error relativo

$$\text{Error relativo} = \frac{\text{valor real} - \text{valor aproximado}}{\text{valor real}} \quad (3)$$

Donde el Valor Real se refiere al valor verdadero o el valor de referencia que desees comparar con tu valor aproximado; el Valor Aproximado se refiere al valor que se obtiene a través de algún método de aproximación.

3 Desarrollo experimental

Ejercicio 1: Construcción de trayectoria y búsqueda de raíces

Este ejercicio planteaba el desafío de, mediante 2 archivos csv con mediciones acerca de la posición de un tractor de riego, hallar una trayectoria aproximada del recorrido del vehículo. Al mismo tiempo, esta trayectoria debía encontrarse delimitada por las rectas:

$$x_1 = 10 \quad (4)$$

$$0.35x_1 + x_2 = 3.6 \quad (5)$$

Para darle un *approach* más amigable al tema, se decidió relacionarlo con la película "Cars", específicamente con la parte del escape del rayo de la cosechadora. De esta manera, el camino realizado por el Mqueen fue la trayectoria a interpolar, las tranqueras del campo fueron las rectas y las intersecciones, los lugares donde Mqueen las atravesó.



Figure 1: Escena del escape de la película cars

Una vez extraídos y manipulados los datos de los archivos proporcionados se puso en práctica diferentes métodos de interpolación como el de Lagrange, Splines cúbicos y quínticos para encontrar una trayectoria que uniera los puntos de la manera más parecida al *ground truth*, es decir, con el menor error, ya que de usar una trayectoria con más error, llevándolo al contexto de la película, el rayo tardaría más en escapar. Los tres métodos de interpolación fueron implementados a través de las librerías del paquete de Python, Scipy. Una vez realizada la interpolación se debían hallar los puntos en los que la trayectoria interpolada por los Splines cúbicos atravesaba las rectas delimitantes, es decir, los puntos donde Mqueen rompe las tranqueras para escapar del campo. Para llevar a cabo esta tarea se utilizó el método de Newton Rhapsod debido a su rapidez para converger y su eficiencia computacional. Cabe aclarar que al tener dos rectas diferentes se tuvo que realizar dos veces por separado.

Ejercicio 2: Estudio de interpolaciones sobre funciones conocidas con puntos equidistantes y no equidistantes

En este ejercicio, se realizaron varios estudios de comparación para evaluar los efectos y errores de los métodos numéricos utilizados en la aproximación de trayectorias en las siguientes funciones:

$$f_a(x) = 0.05\|x\| \cdot \sin(5x) + \tanh(2x) + 2, \text{ con } x \in [-3, 3]$$

$$f_b(x) = 0.7 \exp \left(-\frac{(9x_1 - 2)^2}{4} - \frac{(9x_2 - 2)^2}{4} \right) + 0.45 \exp \left(-\frac{(9x_1 + 1)^2}{9} - \frac{(9x_2 + 1)^2}{5} \right) \\ + 0.55 \exp \left(-\frac{(9x_1 - 6)^2}{4} - \frac{(9x_2 - 3)^2}{4} \right) - 0.01 \exp \left(-\frac{(9x_1 - 7)^2}{4} - \frac{(9x_2 - 3)^2}{4} \right), \\ \text{con } x \in [-1, 1]$$

Para el caso de la función *a* primero se definieron el tipo y la cantidad de puntos a utilizar para la interpolación. Para el primer estudio se utilizaron 10 puntos equiespaciados e se realizó la interpolación con el método con Lagrange, Splines cúbicos y quinticos. En un segundo estudio se utilizaron nuevamente 10 puntos pero espaciados con la técnica de Chebyshev y se procedió a realizar la interpolación con los mismos métodos. En ambos casos, las nuevas funciones interpoladas se representaron en un eje cartesiano, y también se calculó su error relativo con respecto a la función inicial, junto con la cantidad de puntos. Por otro lado, para el caso de la función *b* el razonamiento fue similar, pero el procedimiento fue de cierto modo más complejo debido a su multidimensión. En primer lugar se graficó la función original evaluada en una malla con 200 puntos equiespaciados en el correspondiente intervalo. Luego, utilizando la librería *griddata* proporcionada por Scipy, se procedió a realizar la interpolación cúbica de la figura con 25 puntos equiespaciados. Se decidió utilizar directamente una interpolación cúbica debido a los resultados obtenidos con los estudios previos sobre la función *a*. De la misma manera se interpoló nuevamente la figura pero esta vez con 35 puntos Chebyshev. Paralelamante se calculó y graficó el máximo error relativo de interpolar con puntos equidistantes y con puntos Chebyshev dependiendo de la cantidad de puntos para más tarde poder determinar cual estrategia era mejor.

4 Resultados y discusiones

Ejercicio 1

Una vez realizadas las interpolaciones, se graficaron los resultados de las mismas para tener una acercamiento al resultado más visual. Gráficamente se pudo ver como los Splines quinticos al comienzo parecían ser la solución, pero solo en los extremos, ya que fuera de estas zonas (aunque por poco), los Splines cúbicos generaron la trayectoria más aproximada al *ground truth*. Cabe aclarar que Lagrange se comportó terriblemente mal, específicamente en los extremos de la interpolación y mientras más oscilaciones tuviera, peor parecía pegarse.

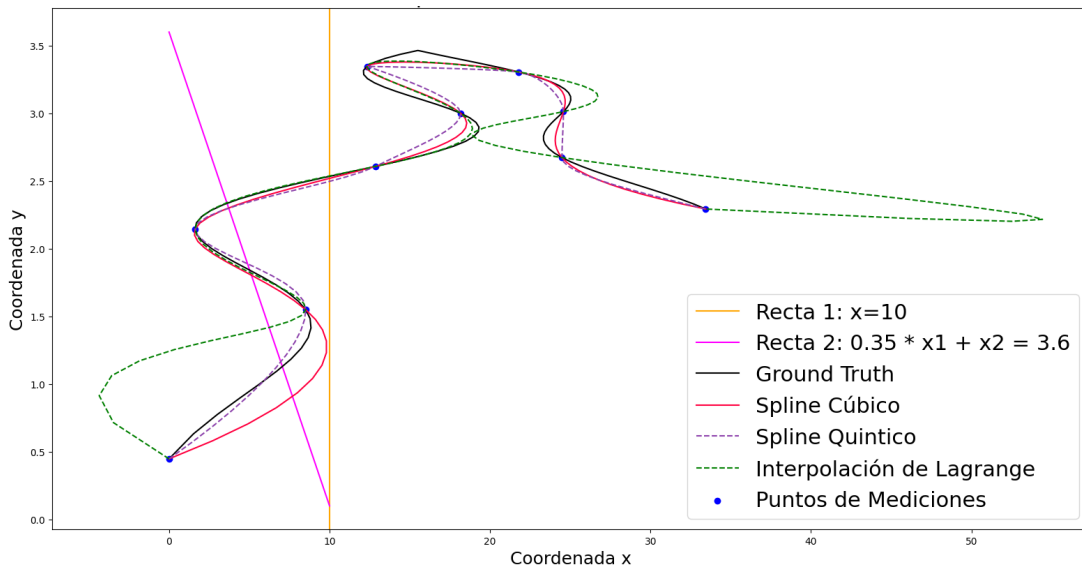


Figure 2: Métodos interpolantes de la trayectoria con las respectivas rectas delimitantes

Por otro lado, para poder demostrar certeramente qué método aproximaba mejor analíticamente, se calculó el error relativo promedio de cada uno de los métodos con respecto al *ground truth* y se obtuvo que los Splines cúbicos ciertamente poseían el menor error, con un valor de 100.636, contra Splines quínticos que tuvo una cifra de 160.979 y Lagrange con 25601079.803, confirmando nuestra teoría. También el estudio analítico avaló lo previamente dicho acerca de Lagrange, siendo significativa la diferencia de error.

Como fue explicado previamente, también se debían hallar las intersecciones de la trayectoria con las rectas proporcionadas. Luego de ver que Splines cúbicos proporcionaba la mejor aproximación, se procedió a aplicar el método de Newton-Rhapson a esa trayectoria. Se obtuvieron, entre las dos rectas, un total de 4 raíces: **Recta 1 (4):** Raiz 1: 2.792, **Recta 2 (5):** Raiz 2: 0.339, Raiz 3: 1.369, Raiz 4: 2.319

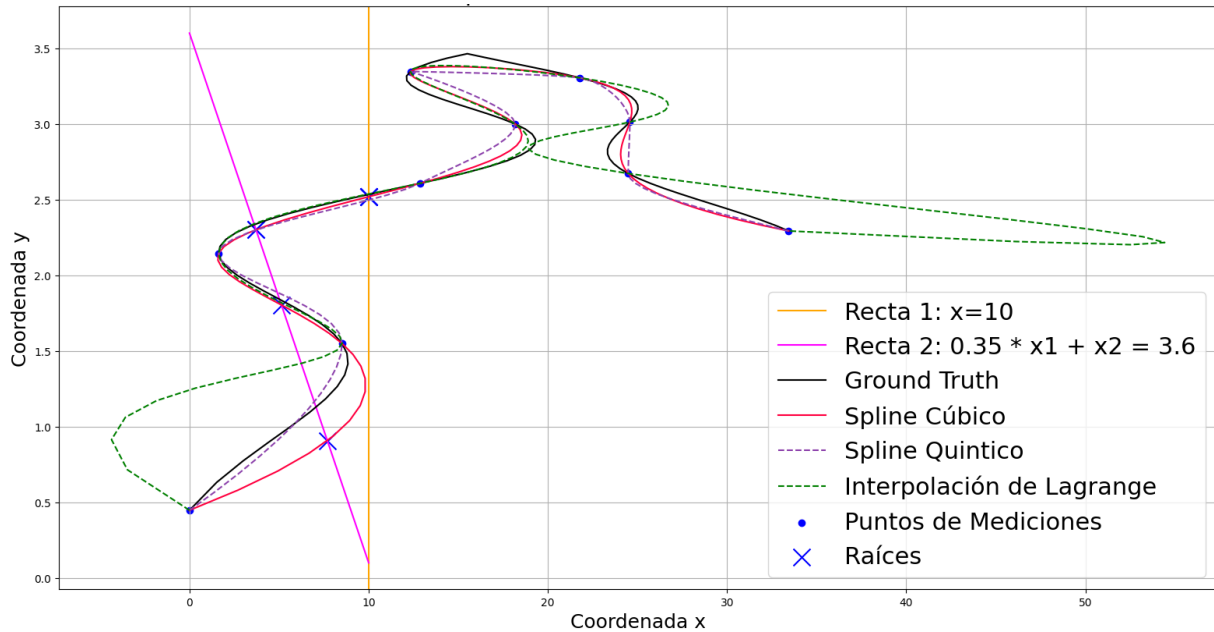


Figure 3: Interpolaciones y sus intersecciones con las barreras del campo

Ejercicio 2

Función a

A partir de las interpolaciones y sus resultados fue posible apreciar como funcionó cada método de interpolación con gráficos que superponen los mismos, para así ver las diferencias de una manera más visual. En el caso base de 10 puntos **equidistantes** se obtuvo el siguiente gráfico, donde se aprecia que los Splines cúbicos son el método que mejor aproximó, incluso en algunos lugares pegándose hasta el punto de ser una con la función original.

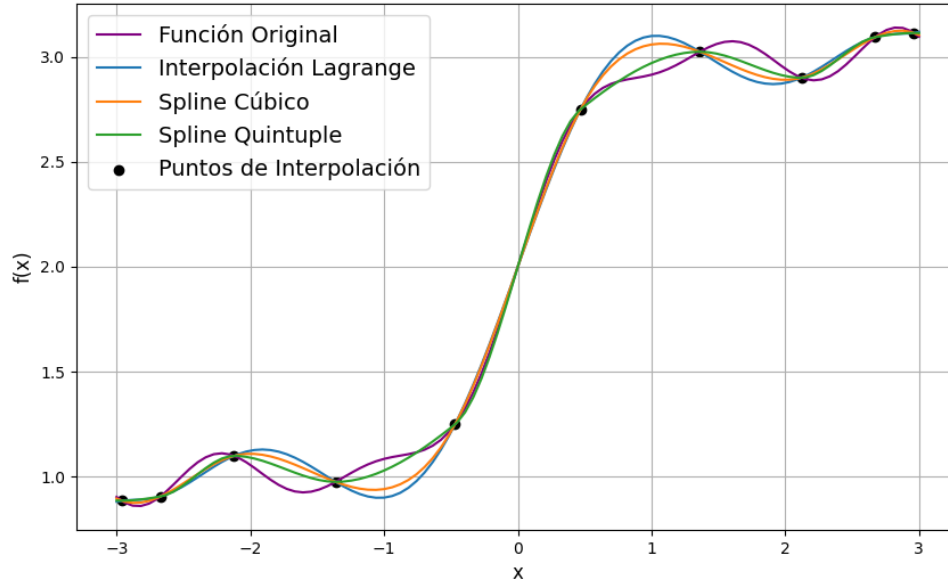


Figure 4: Comparación de métodos interpolantes sobre f_a con 10 puntos equidistantes

Y aquí, un análisis cambiando la cantidad de puntos equiespaciados:

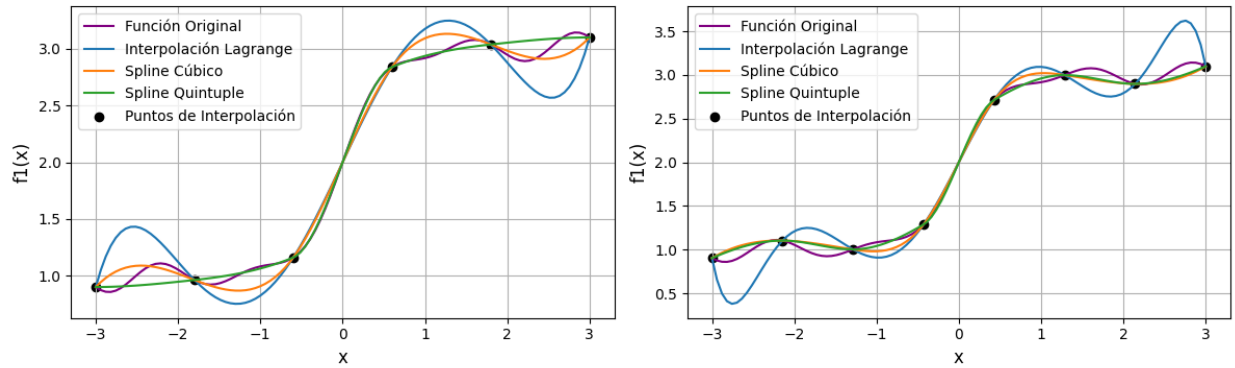


Figure 5: Interpolaciones con 6 puntos (izq.) y con 8 puntos (der.) equiespaciados

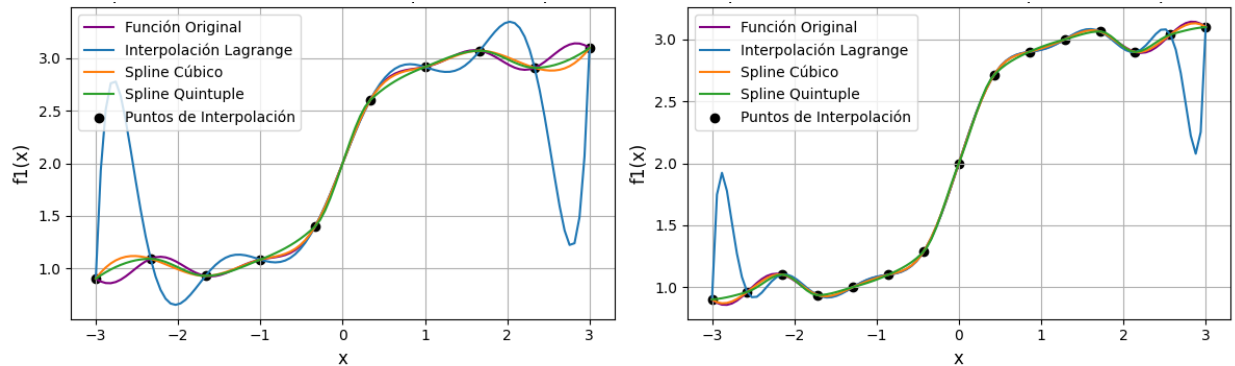


Figure 6: Interpolaciones con 10 puntos (izq.) y con 15 puntos (der.) equiespaciados

Una de las primeras cosas que se pudieron apreciar a partir de estos gráficos es que mientras mayor es la cantidad de puntos que utiliza la interpolación, más fácil es ver la función a . Junto a eso se pudo definir

que las interpolaciones que más se acercan a la función original son las de Splines. Los Splines quinticos mostraron ser más efectivos en las interpolaciones con menos puntos, como la de 6 y 8; mientras que en las de 10 y 15 puntos los Splines cúbicos permanecieron más cercanos a la función original.

Con estos cuatro gráficos de las interpolaciones también fue posible captar cómo el método de interpolación de Lagrange tiene una desviación mucho mayor en los extremos a medida que se van agregando puntos a la interpolación. Esto se da debido al fenómeno de Runge, que explica cómo a medida que aumenta el grado del polinomio de Lagrange, tiende a oscilar mucho más en los intervalos de la interpolación.

Paralelamente, los datos analíticos acompañan estas hipótesis, lo cual es posible observar con este gráfico:

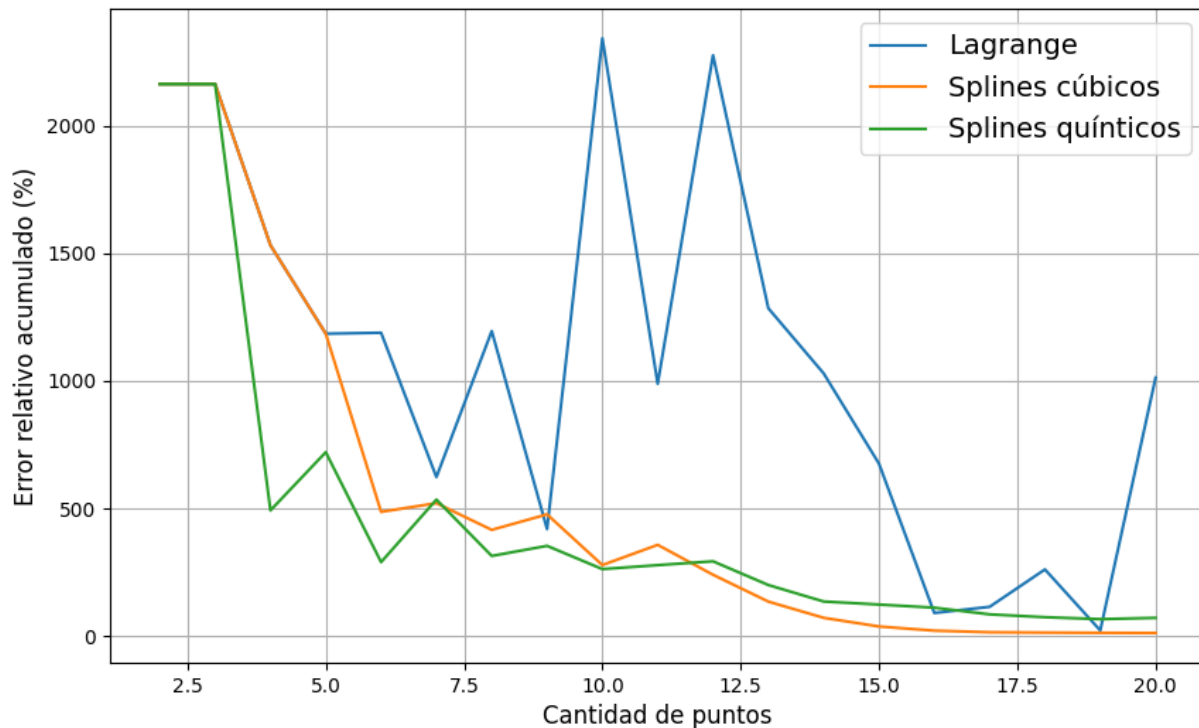


Figure 7: Error relativo acumulado en respecto a la cantidad de puntos utilizados para interpolar

Tras hacer un análisis de estos números fue notable que el máximo error relativo acumulado por el método de Lagrange fue de 2163,879 y el mínimo de 1012,553, los máximos y mínimos del método de Splines cúbicos fueron 2163,879 y 11,6772, y los de la interpolación por Splines quinticos fueron 2163,879 y 70,923. Tras analizar estos resultados se pudo observar como el mínimo error de Lagrange era mucho mayor que los errores de ambos tipos de Splines. A la vez se encontró una pequeña diferencia entre los errores de los Splines cúbicos y quinticos, que demuestra lo que se había podido apreciar en las interpolaciones, y es que con una cantidad menor de puntos (hasta 10, por ejemplo) la interpolación que más logra acercarse a la función original es la que fue hecha con Splines quinticos; pero a medida que va subiendo la cantidad de puntos utilizados termina acercándose mejor la interpolación hecha con Splines cúbicos.

El otro caso base estudiado fue con 10 puntos Chebyshev, el cual se utilizó para comparar específicamente con el caso de Lagrange. Si se observan en modo comparativo las siguientes imágenes, que muestran los errores relativos y las interpolaciones hechas con puntos equidistantes y con Chebyshev, se puede detectar cómo es que la interpolación de Lagrange se aleja mucho más a la función original en los extremos en el caso de los puntos equidistantes, mientras que en el de los no equidistantes se pega mucho mejor a la función original.

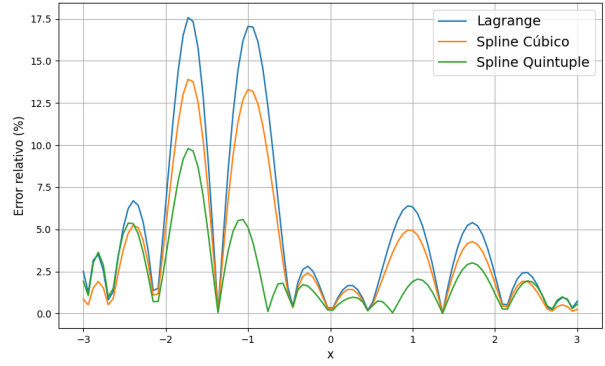
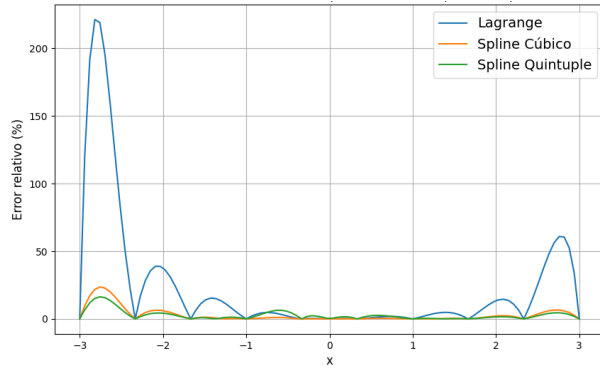


Figure 8: Error relativo con 10 puntos equidistantes Figure 9: Error relativo con 10 puntos no equidistantes

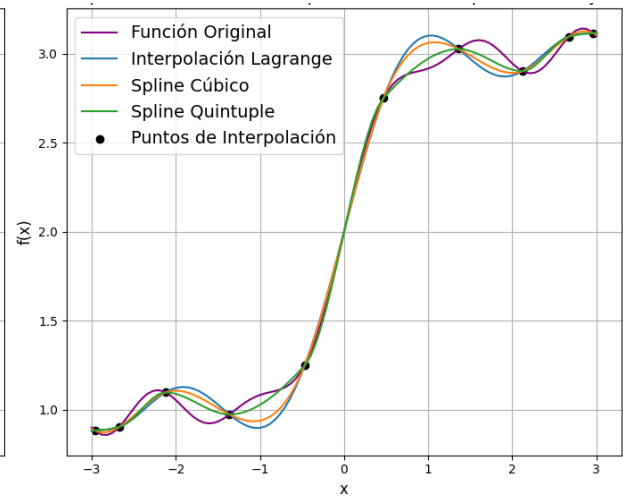
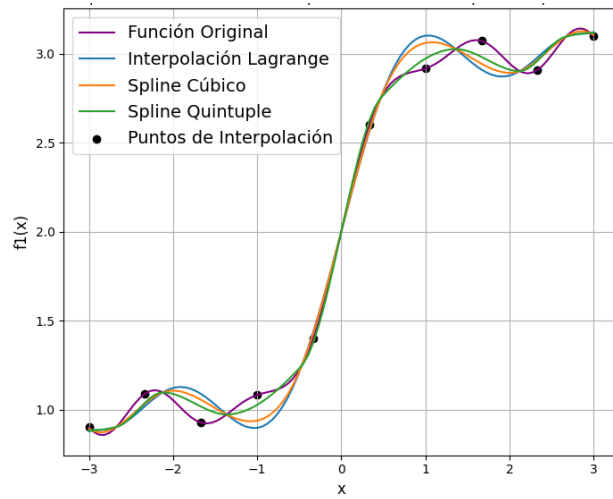


Figure 10: Interpolaciones con 10 puntos equidistantes (izq.) y con 10 puntos Chebyshev (der.)

Función b

Para esta segunda función se realizó la interpolación cúbica en tres dimensiones utilizando la herramienta `griddata` sacada de la librería de Scipy para poder trabajar en espacios de más de una variable, como lo era el caso de la función b . Para la interpolación de esta función también fue analizado tanto el caso de puntos equidistantes (225) y no equidistantes (1225), utilizando la técnica de Chebyshev para este último.

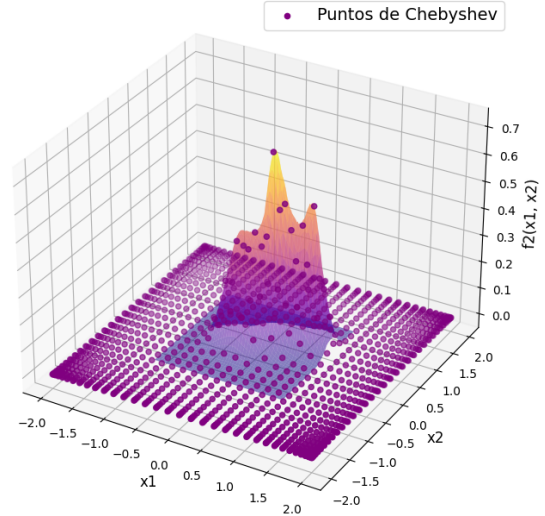
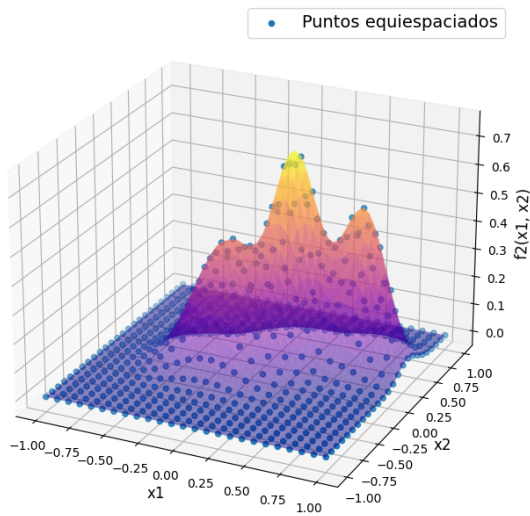


Figure 11: Interpolación con 225 puntos equidistantes Figure 12: Interpolación con 1225 puntos Chebyshev

Tras observar ambos gráficos de las interpolaciones se pudo concluir que, al utilizar puntos equiespaciados la función interpolada termina siendo mucho más suave que si se utilizan puntos no equiespaciados. Si se observa el siguiente gráfico, se puede apreciar como el error es considerablemente menor en el caso de los puntos equiespaciados en comparación con los puntos no equiespaciados de Chebychev, los cuales requieren más puntos para minimizar el error.

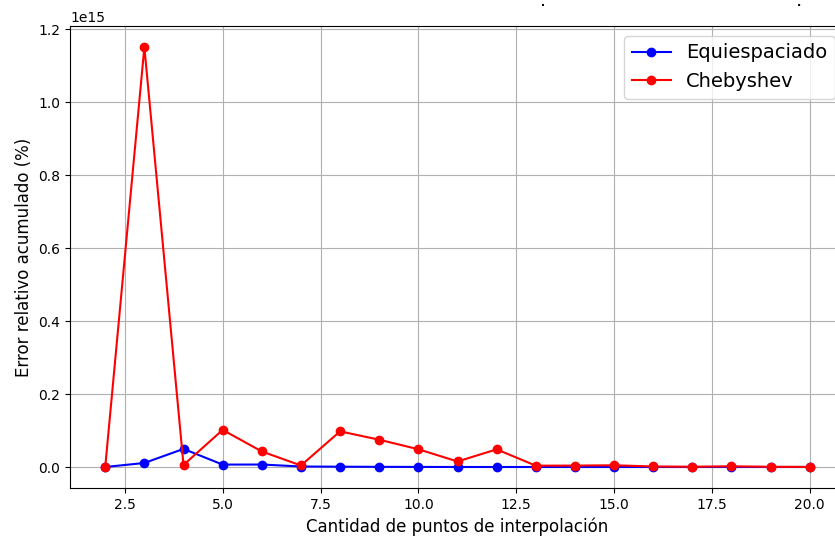


Figure 13: Error relativo acumulado con respecto al tipo y la cantidad de puntos utilizados

5 Conclusiones

Tras llevar a cabo una serie de exhaustivos análisis sobre ambos ejercicios y considerando los resultados obtenidos, desde una perspectiva gráfica como también cualitativa, se llegó a la conclusión y evaluación de los métodos empleados y sus respectivos resultados.

En ambos ejercicios fue posible observar que el método de interpolación de Lagrange mostró un rendimiento significativamente inferior en comparación con los otros métodos evaluados. Los gráficos generados y los cálculos de error relativo revelaron que, a medida que se incrementaba el número de puntos interpolantes, el método de Lagrange experimentaba un deterioro significativo en su precisión al intentar acercarse a la función original, especialmente en las regiones ubicadas en los extremos de las interpolaciones. La única solución relativamente efectiva a la hora de mitigar este problema parecía ser emplear una distribución de puntos Chebyshev, la cual tiende a concentrar más puntos en los extremos del intervalo, contribuyendo así a la disminución del error de Lagrange. Sin embargo, incluso en estas circunstancias favorables, el error relativo acumulado continuó siendo mayor al error de los otros métodos aplicados.

Por otro lado, los Splines quinticos se destacaron en ambos ejercicios, demostrando un desempeño consistente y favorable en la mayoría de los experimentos realizados. Este método de interpolación se posicionó como el segundo mejor de los tres analizados en términos de error relativo, ya sea acumulado o por puntos. Los resultados gráficos sugirieron en algunos casos que podría considerarse el mejor método, dado que inicialmente mostró una mayor precisión en las regiones de los extremos de las funciones. Sin embargo, a medida que se observaba el interior de los intervalos, se presentaron diferencias más notables en comparación con los Splines cúbicos. En resumen, los Splines quinticos se perfilan como una opción sólida, aunque no la más óptima.

Finalmente, la conclusión a la cual se llegó fue que el método de Splines cúbicos logró ser el más eficaz a lo largo de los experimentos realizados. En términos gráficos, en la mayoría de los casos, se evidenció un mínimo error con respecto a las funciones y trayectorias originales, siendo en algunos casos prácticamente indistinguible la diferencia con la función a interpolar. Lo notable de este método, a diferencia de otros como el de Lagrange, es que su superioridad persiste independientemente del tipo de distribución de puntos empleada, ya sean equidistantes o Chebyshev. La única excepción a esta regla se presentó en el caso de la función multivariable, donde, con la distribución de puntos Chebyshev, se observó un error relativo acumulado un poco más alto en comparación con el método de puntos equidistantes; y en adición a esto, incluso se tuvo que aumentar la cantidad de puntos para que la interpolación se pareciera más a la original. Para concluir, sería sabio recomendarle al Rayo Mqueen elegir la interpolación cúbica para escapar más rápido de la cosechadora...

6 Bibliografía

- Burden, R. L. y Faires, J. D. (1978). Numerical Analysis, 9na Edición.
- Cars (2006), Disney Pixar Animation Studios
- Nasini, S. (2015). Minimizar el error de interpolación considerando las raíces del polinomio de Chebyshev.
- Scipy, Interpolation (scipy.interpolate). Source: <https://docs.scipy.org/doc/scipy/tutorial/interpolate.html>