Presentación de la materia
(y del TP)

Métodos Numéricos

Departamento de Computación
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA

March 24, 2024

Bienvenida

¿Quienes somos?

- Pablo Riera
- Nicolás Mastropasqua
- Belén Ticona
- Sebastián Felgueras
- Darío Turco

Organización del Labo

- Clases:
  - Viernes de 18hs a 22hs (hay excepciones, ver el calendario)

- Trabajos Ṕracticos:
  - TP1 (Presentación 22/3 - Entrega 21/4 - Reentrega 19/5)
  - TP2 (Presentación 10/5 - Entrega 2/6 - Reentrega 7/7)
  - TP3 (Presentación 14/6 - Entrega 30/6 - Reentrega 14/7)

- Taller presencial grupal:
  - Desarrollo en clase y defensa en un breve coloquio con algún docente. Presentación y entrega 24/6.

Motivaciones

Motivaciones

- Experimentación: Hacerse preguntas y poder responderlas diseñando experimentos numéricos
- Redacción de informes: Transmitir estas preguntas y sus resultados de forma convincente y clara

Aplicaciones matemáticas

Tratar con problemas continuos utilizando métodos que aproximen soluciones numéricas.
A veces, la solución exacta puede no ser viable.

- Calcular resultados de funciones
- Resolver sistemas de ecuaciones
- Computar de autovalores/autovectores
- Cálculo de integrales
- Interpolación, extrapolación, regresión
- Ecuaciones diferenciales
- Optimización

Aplicaciones de modelado

- Machine Learning
- Modelos físicos, químicos, etc
- Simulaciones
- Computación científica en general

Sobre los informes

- Introducción: explicar los conceptos necesarios para que una persona **no familiarizada con el tema**, por ejemplo un alumno de Computación antes de cursar la materia, pueda entender el núcleo de los modelos matemáticos estudiados en el TP. Es util dar referencias a la literatura, las teóricas, etc.
- Desarrollo: explicar como hicieron para resolver el problema central, dejándo en claro las hipótesis del trabajo. Detalles de implementación, demostraciones y metodología en general pueden ser parte de esta sección.

Sobre los informes

- Resultados/Discusión: pueden ser dos secciones o una sola. Deben incluir los resultados de los experimentos, mostrándolos y explicándolos de una manera comprensible para el lector. Es importante buscar la mejor forma de visualizar lo que se quiere reportar a efectos de facilitar la comprensión del lector.

- Conclusiones: resaltar/enfatizar aquellas hipótesis importantes que fueron validadas con los experimentos y vincularlas con los mismos. Lo que quieren que quede en la mente del lector.

Sobre el software numérico

Breve historia del software numérico

- 1957 - Fortran
- 1979 - BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)
- 1984 - MATLAB
- 1992 - LAPACK (Linear Algebra Package)
- 1993 - GNU Octave
- 2000 - R
- 2005 - NumPy
- 2006 - EIGEN
- 2012 - julia

Introducción al TP

¿Qué vamos a hacer?

- Modelar un fenómeno físico
- Aplicar métodos numéricos
- Experimentar y comparar algoritmos

¿Qué objeto matemático vamos a utilizar?

Principalmente...

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

¿Para qué lo vamos a usar?

- Resolución de sistemas de ecuaciones lineales

$$\left\{\begin{array}{l} a_{11}x_1 + \ldots + \; a_{1n}x_n \; = b_1 \\ a_{21}x_1 + \ldots + \; a_{2n}x_n \; = b_2 \\ \ldots\ldots + \ldots + \ldots\ldots = \ldots \\ a_{n1}x_n + \ldots + \; a_{nn}x_n \; = b_n \end{array}\right.$$

- En forma matricial, $Ax = b$

Método esencial

Eliminación Gaussiana:

- Forward elimination
- Backsubstitution

Variantes:

- Sin pivoteo
- Con pivoteo parcial

Pará, hay más

Si la matriz tiene esta pinta (tridiagonal)

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

¿Podemos hacer algo mejor?

Spoiler: Sí.

Cosas importantes

Antes de empezar, nociones importantes

Operador Laplaciano (∇^2)

Divergencia del gradiente de una función escalar.

???

Divergencia

Dado F un campo vectorial (ej. la velocidad de un fluído) y una superficie S

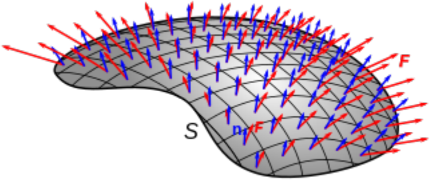


Figure: $Div\ F$ es una función escalar que mide el flujo saliente en un punto

- Signo de $Div\ F$ y su magnitud indican cuan **source**(+) o **sink (-)** es un punto.
- Más intuición, acá

Gradiente

Dado una función F, su gradiente es un campo vectorial.

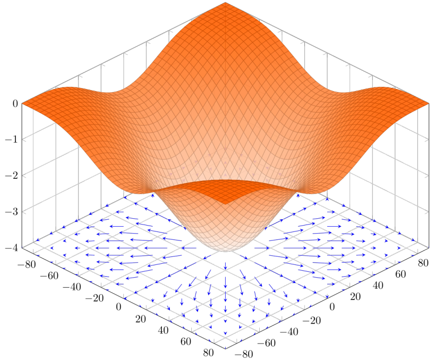


Figure: Parados en un punto, indica la dirección de máximo cambio.

Obs:

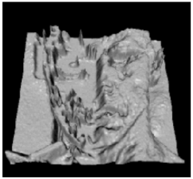
- Su magnitud es mínima en los extremos y puntos silla.
- Mínimo es punto **source**, máximo es punto **sink**.

Volvemos, Laplaciano

- La Divergencia del Gradiente de una función escalar, osea...
- Mide 'cuanto de mínimo' tiene un punto.
- Si es positivo en un punto, 'F es más chica allí que el valor promedio de su vecindad'

El Laplaciano en imágenes

Podemos pensar una imagen de un solo canal como una función $f : [a, b]x[a, b] \to \mathbb{R}$ que determina la intensidad en un punto.



El Laplaciano en imágenes

- Los bordes son regiones donde la intensidad cambia muy rápidamente.
- ¿Qué ocurriría si le aplicamos el Laplacino ahí? Cambia de signo rápidamente.
- Esta idea se puede aplicar pero puede dar 'falsos positivos'.

Detección de borde en 1D

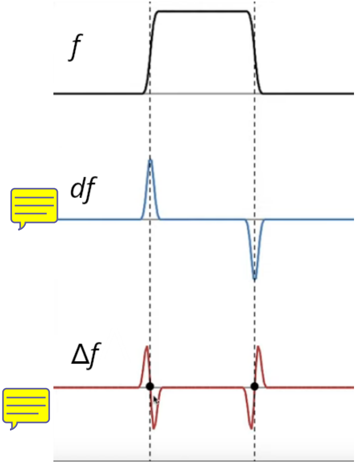


Figure: f la intensidad en una fila de la imagen, junto con su derivada y el laplaciano

En 1D, ¿A qué se parece?

La intuición anterior, en 1D, se parece a la derivada segunda (concavidad)...

Sí, de hecho:

- En 1D, el gradiente es justamente la derivada.
- En 1D, la divergencia se simplifica a la derivada.

Laplaciano discreto

- Restringido al caso 1D, ¿cómo se puede computar?
- Derivar la función dos veces, ¿no?
- ¿Cómo derivo? ¿Se puede discretizar la operación?

Diferencias finitas

Método para aproximar derivadas. Hay varias formas.

- Forward difference: $\frac{f(x+h)-f(x)}{\Delta h}$.
- Backward difference: $\frac{f(x)-f(x-h)}{\Delta h}$.

$= d$

Entonces la operación $\frac{d^2}{dx^2}u(x) = d$ se puede discretizar como

$$u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} = d_i$$

Siendo u vector de tamaño n y tomando $\Delta h = 1$, d el vector de resultados

Laplaciano forma final

Era resolver un sistema tridiagonal!

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}.$$

Laplaciano 2D

Se puede extender para el caso 2D y aplicarlo a una imagen digital.

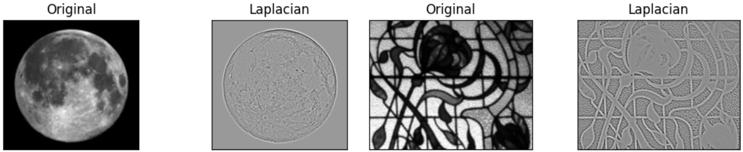
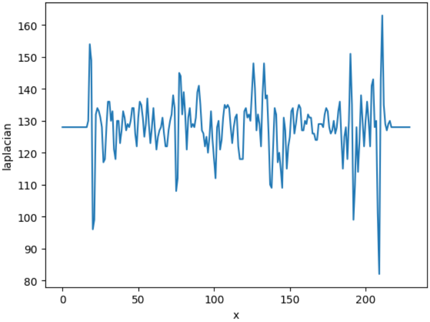


Figure: Detección de borde con filtro convolucional laplaciano. El 0 se mapea a 128

Laplaciano 2D

Podemos plotear el laplaciano en alguna fila de la luna:



Notar el salto bien marcado del borde izquierdo y derecho


Y ahora que

El problema

El problema a resolver

¿Qué queremos estudiar?

Difusión

Proceso estocástico donde una entidad se difunde típicamente de un lugar de mayor concentración hacia uno de menos.

¿Cómo evoluciona un densidad inicial de partículas a lo largo del tiempo?

Ejemplo visual difusión de tinturas

Modelado

La formulación del proceso de difusión involucra resolver la ecuación diferencial

$$\frac{du(x,t)}{dt} = \alpha \frac{d^2 u(x,t)}{dx^2}$$

Obs: Wild Laplacian operator appears!

Algo de intuición: Caminatas aleatorias

Podemos simular la trayectoria individuales de muchas particulas que parten desde el mismo punto inicial x_0 y su posición en tiempo k está dada por:

$$x_k = x_{k-1} + e$$

siendo e un variable aleatoria que toma valores -1 o 1.

Gráficamente

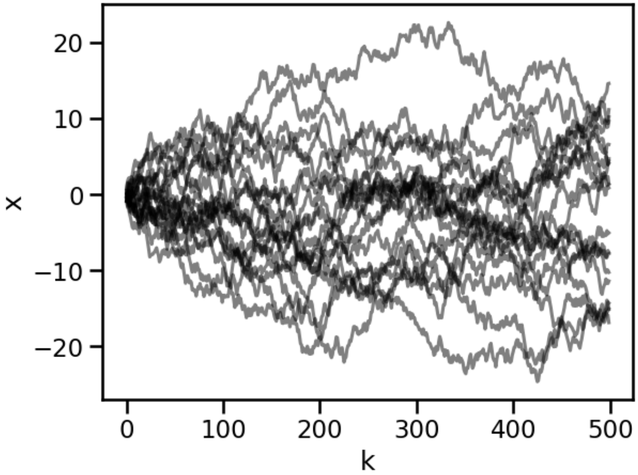


Figure: Caminata aleatoria para 20 partículas durante 500 pasos

Distribución final (1000 partículas)

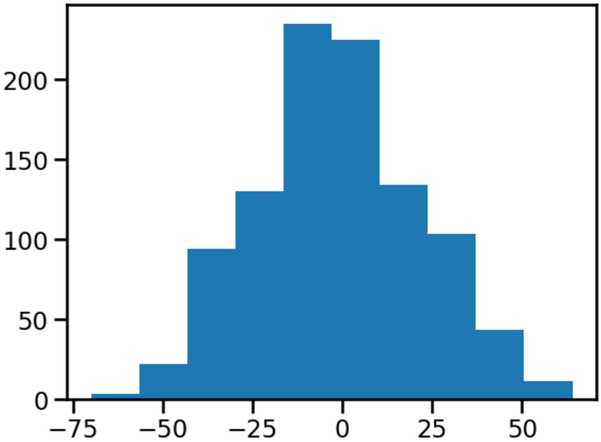
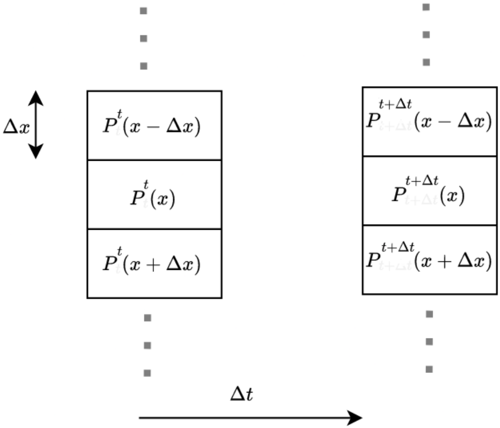


Figure: Distribución al cabo de 500 pasos para 1000 partículas

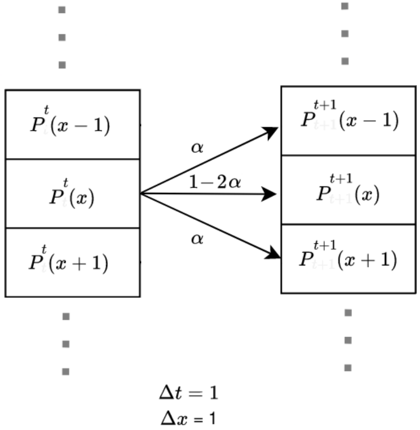
Otra forma de verlo, Dalton board

Modelo de caminata aleatoria

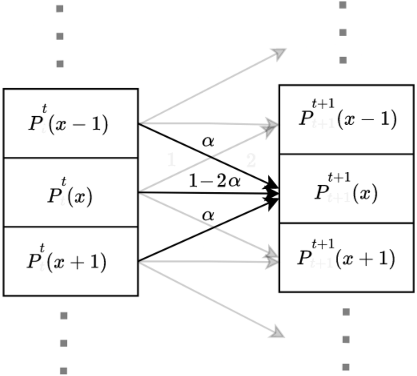
$P^t(x)$ la probabilidad que una partícula esté en la posición x en tiempo t



Modelo de caminata aleatoria



Modelo de caminata aleatoria



$\Delta t = 1$

$\Delta x = 1$

Modelo de caminata aleatoria

$$P^{t+1}(x) = \alpha P^t(x-1) + (1-2\alpha)P^t(x) + \alpha P^t(x+1)$$

$$P^{t+1}(x) = P^t(x) + \alpha\big(P^t(x-1) - 2P^t(x) + P^t(x+1)\big)$$

$$P^{t+1}(x) - P^t(x) = \alpha\big(P^t(x-1) - 2P^t(x) + P^t(x+1)\big)$$

Llamando u al vector que discretiza P, queda

Ecuación de difusión discretizada

$$u_i^{(t+1)} - u_i^{(t)} = \alpha\left(u_{i-1}^{(t)} - 2u_i^{(t)} + u_{i+1}^{(t)}\right)$$

El Laplaciano strikes back

Ejemplo

Discretizamos con 100 valores el rango [0,100], u_0 es uniforme en $[40, 60]$ y nula en el resto.

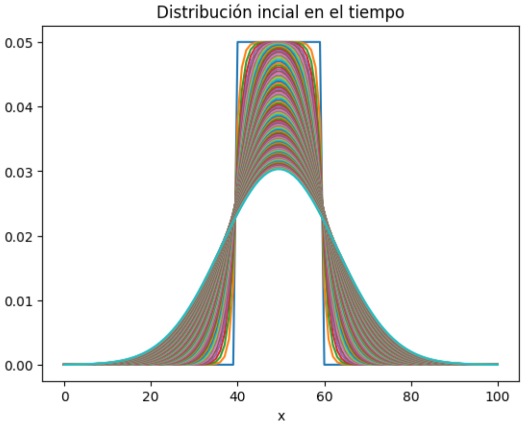


Figure: Evolución de u durante 300 pasos. Atención a la distribución final.

Mismo ejemplo