Pautas para el trabajo práctico

1. Formar grupos de dos o tres personas.

2. Enviar un e-mail a la dirección `ecn.octave@gmail.com` antes del lunes 13 de junio a las 20 horas con los datos de los integrantes del grupo (nombre y número de libreta) y con el número de enunciado elegido (que no podrá ser modificado).

3. La entrega del trabajo es presencial, en un laboratorio u otro lugar a determinar, que será publicado en la página de la materia, y dentro del horario habitual de la materia. No hay que entregar código impreso. Se debe enviar por e-mail a la dirección `ecn.octave@gmail.com` el conjunto de archivos del programa que se pide en el enunciado. De ser necesario, se puede mostrar en papel todo aquello que complemente o explique la resolución. Haremos preguntas a cada integrante del grupo.

Elementos de Cálculo Numérico / Cálculo Numérico

Primer Cuatrimestre 2016

Trabajo Práctico N° 1: Curva Dosis-Respuesta.

Se tiene el siguiente sistema de reacciones químicas, que representa el sistema bacterial EnvZ-OmpR:

$$\mathrm{X} \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} \mathrm{XT} \xrightarrow{k_3} \mathrm{X}_p$$

$$\mathrm{X}_p + \mathrm{Y} \underset{k_5}{\overset{k_4}{\rightleftarrows}} \mathrm{X}_p\mathrm{Y} \xrightarrow{k_6} \mathrm{X} + \mathrm{Y}_p$$

$$\mathrm{XT} + \mathrm{Y}_p \underset{k_8}{\overset{k_7}{\rightleftarrows}} \mathrm{XTY}_p \xrightarrow{k_9} \mathrm{XT} + \mathrm{Y}_p$$

Se nota entre corchetes a la concentración de cada especie química, y se las ordena de la siguiente manera: $x_1 = [\mathrm{X}]$, $x_2 = [\mathrm{XT}]$, $x_3 = [\mathrm{X}_p]$, $x_4 = [\mathrm{Y}]$, $x_5 = [\mathrm{Y}_p]$, $x_6 = [\mathrm{X}_p\mathrm{Y}]$, $x_7 = [\mathrm{XTY}_p]$. Las ecuaciones del sistema bajo cinética de acción de masas son:

$$\begin{aligned}
f_1 &= \frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 + k_2x_2 + k_6x_6,\\
f_2 &= \frac{dx_2}{dt} = k_1x_1 - (k_2+k_3)x_2 - k_7x_2x_5 + (k_8+k_9)x_7,\\
f_3 &= \frac{dx_3}{dt} = k_3x_2 - k_4x_3x_4 + k_5x_6,\\
f_4 &= \frac{dx_4}{dt} = -k_4x_3x_4 + k_5x_6 + k_9x_7,\\
f_5 &= \frac{dx_5}{dt} = k_6x_6 - k_7x_2x_5 + k_8x_7,\\
f_6 &= \frac{dx_6}{dt} = k_4x_3x_4 - (k_5+k_6)x_6,\\
f_7 &= \frac{dx_7}{dt} = k_7x_2x_5 - (k_8+k_9)x_7.
\end{aligned}$$

Notemos que $f_1+f_2+f_3+f_6+f_7 = 0$ y $f_4+f_5+f_6+f_7 = 0$, por lo que existen constantes C_1 y C_2 tales que $x_1(t)+x_2(t)+x_3(t)+x_6(t)+x_7(t) = C_1$ y $x_4(t)+x_5(t)+x_6(t)+x_7(t) = C_2$ para todo $t \geq 0$. En particular, $x_1(0)+x_2(0)+x_3(0)+x_6(0)+x_7(0) = C_1$ y $x_4(0)+x_5(0)+x_6(0)+x_7(0) = C_2$.

Se desea estudiar la concentración en equilibrio de ciertas especies del sistema a medida que las cantidades (totales) C_1 y C_2 aumentan. Se proponen las siguientes constantes de reacción: $k_1 = 0{,}1, k_2 = 0{,}2, k_3 = 0{,}01, k_4 = 0{,}01, k_5 = 0{,}01, k_6 = 0{,}1, k_7 = 0{,}02, k_8 = 0{,}2, k_9 = 0{,}05$.

Ejercicio 1 Resolver el sistema numéricamente para distintas cantidades totales C_1, tomando como dato inicial al vector $x_1 = C_1$, $x_5 = C_2 = 100$, $x_i = 0$ para todo $i \neq 1,\ 5$.

Utilizar los siguientes métodos numéricos:

1. El método multipaso Adams-Bashforth del Ejercicio 22 a) de la Práctica 8. Los primeros términos se calculan utilizando el método de Euler visto en la Práctica 2.

2. El comando `lsode` si utiliza `Octave` (o el comando `ode45` si utiliza `Matlab`).

En cada caso, avanzar hasta un tiempo T lo suficientemente grande como para considerar el sistema en equilibrio. Graficar superpuestos los valores en equilibrio de x_1 y x_5 contra las distintas cantidades totales de C_1, para ambos métodos.

Ejercicio 2 Repetir el ejercicio anterior para distintas cantidades C_2, tomando como dato inicial al vector $x_1 = C_1 = 100$, $x_5 = C_2$, $x_i = 0$ para todo $i \neq 1,\ 5$. Graficar superpuestos los valores en equilibrio de x_1 y x_5 contra las distintas cantidades totales de C_1, para ambos métodos.

Notar que los valores en equilibrio de Y_p no varían, sin importar las cantidades iniciales (totales). Se puede ver que $(1 + \frac{k_8}{k_9})(f_1 + f_5 + f_7) + \frac{k_8}{k_9} f_2 = 0$ por lo que, en equilibrio, se tiene que $k_3(1 + \frac{k_8}{k_9})x_2 - k_7 x_2 x_5 = 0$, y si x_2 en equilibrio es positivo, entonces $x_5 = \frac{k_3(1+\frac{k_8}{k_9})}{k_7}$. Esta constante es independiente de los valores de C_1 y C_2. Este fenómeno se lo conoce como "robustez de concentración absoluta" en la especie Y_p y fue descripto en [1].

Referencias

[1] G. Shinar y M. Feinberg, *Structural sources of robustness in biochemical reaction networks*, Science 327(5971), (2010), pp. 1389–1391.

Elementos de Cálculo Numérico / Cálculo Numérico

Primer Cuatrimestre 2016

Trabajo Práctico N° 2: Oscilaciones de una membrana cuadrada.

El problema de la oscilación de una membrana cuadrada fija por sus bordes puede ser descripto, al menos para pequeñas elongaciones, por la ecuación de ondas con condición de contorno:

$$\begin{cases} u_{tt} = c^2 \Delta u & (x,y) \in \Omega = [0,1] \times [0,1] \\ & u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

Donde $\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$. Los datos iniciales adecuados son, por ejemplo, la posición inicial de la membrana y su velocidad inicial. Sin pérdida de generalidad supondremos que $c = 1$.

Para resolver este problema numéricamente, se discretiza el dominio con una malla $(x_i, y_j) = (i/N, j/N), 0 \leq i, j \leq N$, y el tiempo $t_n = nk$ hasta un T máximo.

Considerando $u_{i,j}^n$, la aproximación de $u(x_i, y_j, t_n)$ (el valor de la función en el nodo (x_i, y_j, t_n) de la malla), se propone el siguiente esquema, que proviene de la discretización usual de la derivada segunda.

$$u_{i,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^n + u_{i,j}^{n-1} = \frac{k^2}{h^2}[u_{i-1,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1} - 4u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j+1}^{n+1}] \tag{1}$$

donde $h = 1/N$. Por lo tanto, suponiendo conocidos la posición de la membrana a tiempo 0 y a tiempo $-k$, se puede calcular la posición para cualquier t_n posterior. La solución a tiempo cero se conoce por el dato inicial. La condición inicial en la derivada respecto del tiempo permite plantear una ecuación adicional

$$u_{i,j}^0 - u_{i,j}^{-1} = k\, u_t(x_i, y_j, t_0)$$

de la cual despejar el valor de $u_{i,j}^{-1}$. Reemplazando este valor en la ecuación (1), para $n = 0$, se obtiene el valor de u^1.

Ejercicio 1 Escribir un programa que resuelva el problema de la membrana, con dato de contorno 0, posición inicial

$$u_0(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y) \qquad (x,y) \in [0,1] \times [0,1]$$

y velocidad inicial cero.

Ejercicio 2 Comparando con la solución exacta

$$u(x,y,t) = \cos(\sqrt{2}\pi ct)\sin(\pi x)\sin(\pi y),$$

graficar el error cometido al aproximar $u(x,y,1)$ en función de h y k, para algún (x,y) en el interior de la malla.

Ejercicio 3 Usando los comandos `drawnow` y `pause(·)` obtener una *película* mostrando la evolución de la solución.

Elementos de Cálculo Numérico / Cálculo Numérico

Primer Cuatrimestre 2016

Trabajo Práctico N° 3: Resonancia de la cuerda vibrante.

El problema de la oscilación de una cuerda fija en sus extremos, con un forzante f, puede ser descripto, al menos para pequeñas elongaciones, por la ecuación de ondas con condición de contorno:

$$\begin{cases} u_{tt}(x,t) = \alpha u_{xx}(x,t) + f(x,t) & x \in \Omega = [0,1], t > 0 \\ u(0) = u(1) & = 0 \end{cases} \tag{1}$$

Los datos iniciales adecuados son, por ejemplo, la posición inicial de la cuerda y su velocidad inicial. Sin pérdida de generalidad supondremos que $\alpha = 1$.

Resolviendo el problema con $f = 0$, por el método de separación de variables, se buscan soluciones de la forma $U(t,x) = T(t)Z(x)$; de modo que

$$\frac{T''(t)}{T(t)} = \frac{Z''(x)}{Z(x)} = \lambda,$$

para alguna constante λ. Usando las condiciones de contorno, tenemos que

$$Z(0) = Z(1) = 0$$

es decir que λ es un autovalor de la ecuación de Laplace con datos de contorno Dirichlet homogéneo

$$\begin{cases} Z'' - \lambda Z = 0 & x \in [0,1] \\ Z(0) = Z(1) & = 0 \end{cases} \tag{2}$$

Se sabe que la ecuación (2) tiene una sucesión de autovalores negativos $\{\lambda_n\}_n$ con correspondientes autofunciones $Z_n(x)$ y que $\lambda_n \to -\infty$ cuando $n \to +\infty$. La correspondiente función T_n es una solución de la ecuación

$$T'' - \lambda_n T = 0$$

Si $\lambda_n = -\omega_n^2$ resulta que $T_n(t) = a_n \cos(\omega_n t) + b_n \sin(\omega_n t)$, y de este modo, las soluciones de (1) son de la forma

$$u(t,x) = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(\omega_n t) + b_n \sin(\omega_n t)) Z_n(x) \tag{3}$$

donde los valores a_n y b_n se obtienen a partir de las condiciones iniciales. A los autovalores λ_n se los llama los modos *normales de oscilación*.

Ejercicio 1 Calcular los autovalores y las autofunciones del laplaciano. Para ello, considerar una discretización del dominio $\Omega = [0,1]$ con una malla $x_i = i/N$, $0 \le i \le N$.

Llamando $h = 1/N$ se obtiene el siguiente esquema, sobre la malla introducida, para aproximar la ecuación (2).

$$\frac{z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1}}{h^2} = \lambda z_i \quad i = 1, \dots, N-1.$$

Reescribir esto como un problema lineal $Az = \lambda z$. Y resolver numéricamente. Graficar los 9 primeros autovectores (aproximaciones de las autofunciones). (Consultar la documentación de los comando `eigs` y `subplot`).

Finalmente, se desea resolver el problema (1), considerando datos iniciales:

$$\begin{array}{c} u(x,0) = g(x), \\ u_t(x,0) = 0. \end{array},$$

y forzante dado por una función periódica de la forma: $\cos(\omega t)v(x)$. Cuando la frecuencia de oscilación ω se corresponde con un autovalor del laplaciano se produce el fenómeno de resonancia: como la frecuencia del forzante coincide con una frecuencia propia de la cuerda, la oscilación se hace cada vez más grande.

Discretizando la ecuación en un esquema implícito se obtiene:

$$\frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u^{n-1}j}{dt^2} = \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f_j^n,$$

donde u_j^n es la aproximación de $u(x_j, t_n)$ y $f_j^n = f(x_j, t_n)$. La solución a tiempo cero se conoce por el dato inicial. La condición inicial en la derivada respecto del tiempo permite plantear una ecuación adicional

$$u_j^0 - u_j^{-1} = dt\, u_t(x_j, t_0)$$

de la cual despejar el valor de u_j^{-1}.

Ejercicio 2 Teniendo en cuenta las condiciones de contorno, escribir el sistema lineal que debe resolverse en cada iteración para calcular u^{n+1} en función de u^n, u^{n-1} y f^n. Implementar un programa que resuelva el problema y grafique la evolución de la solución en función del tiempo, aprovechando los comandos `pause` y `drawnow`.

Resolver considerando $f(x,t) = \cos(\sqrt{|\lambda|}t)v(x)$, donde λ y v son un autovalor del laplaciano y su correspondiente autovector, calculados con el programa del ejercicio anterior. En principio considerar $g = 0$. Observar qué sucede, por ejemplo, cuando se toma g igual al primer autovector del laplaciano (multiplicado por 0,1) y v el tercer autovector. Resolver también con dato inicial $g(x) = 0{,}1x(1-x)$.

Elementos de Cálculo Numérico / Cálculo Numérico

Primer Cuatrimestre 2016

Trabajo Práctico N° 4: 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. Concretamente es un arco que parte de uno de sus puntos picudos.

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, $g = 9{,}8\ mts/seg^2$ es la aceleración de la gravedad y $\dot{x} = \frac{dx}{dt}$, $\dot{y} = \frac{dy}{dt}$.

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

$$\dot{y} = \frac{dy}{dt} = \frac{dy}{dx}\frac{dx}{dt} = y'\,\dot{x}$$

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

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2g(1 - y(x))}{1 + y'(x)^2}}$$

Finalmente

$$dt = \sqrt{\frac{1 + {y'(x)}^2}{2g(1 - y(x))}}\,dx$$

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

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

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 $y_{n+1} = L$. 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:

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

Ejercicio 1 Implementar una función `f_braq` 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 está dado por:

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

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 con dato inicial dado por la recta que une los puntos $(0, 1)$ y $(L, 0)$. Resolver para $L = \pi/2$. Utilizando los comandos `pause` y `drawnow`, graficar la solución para cada iteración de Newton. Comparar con la solución exacta, que viene dada por: $x = (\theta - sin(\theta))/2, \quad y = 1 - (1 - cos(\theta))/2$; para $\theta \in [0, \pi]$.