Computación de Altas Prestaciones

Seminario 6

1

Contenido

1. Sistemas de ecuaciones lineales.
2. Vibración de una membrana:
   - 2.1 Formulación matemática.
   - 2.2 Método de resolución.
   - 2.3 Ejercicios.
3. Descomposición LU y resolución de sistemas triangulares (recordatorio).

DEPARTAMENTO DE SISTEMAS INFORMÁTICOS Y COMPUTACIÓN

2

1. Sistemas de ecuaciones lineales

- Los sistemas de ecuaciones lineales son uno de los principales problemas a resolver en Ingeniería.
- En algunos casos, hay que resolver muchos sistemas de ecuaciones en poco tiempo.
- En otros, los problemas requieren la solución de grandes sistemas de ecuaciones lineales, incluso de millones de incógnitas.

3

CAP-MUIinf

2. Vibración de una membrana. Formulación matemática

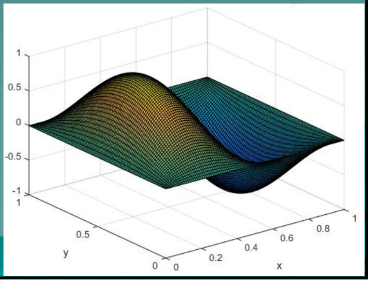
- El movimiento ondulatorio de una membrana elástica cuadrada de lado *L* viene dado por la siguiente ecuación en derivadas parciales:

$$\frac{d^2u}{dt^2} = \left(\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{d^2u}{dy^2}\right) \quad 0 \le x \le L,\ 0 \le y \le L,\ t \ge 0$$

donde *u(x,y,t)* representa el valor del desplazamiento del punto *x, y* en el instante *t*.

- La deformación *u(x,y,t)* de la membrana en su contorno es nula para cualquier instante *t*:

$$u(0,y,t) = 0; \quad u(L,y,t) = 0;$$
$$u(x,0,t) = 0; \quad u(x,L,t) = 0$$



4

2.1. Formulación matemática

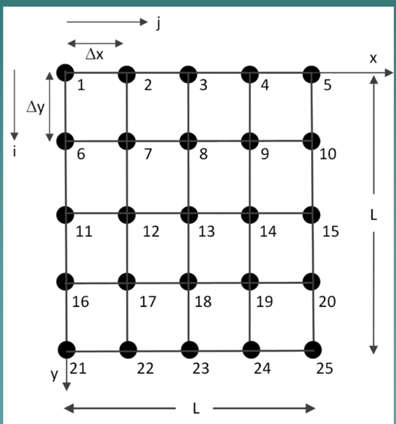
- En general, este tipo de ecuaciones sólo se pueden resolver mediante aproximaciones, como la de las *diferencias finitas*.
- Dichas aproximaciones permiten transformar la ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones lineales, a resolver para cada instante de tiempo:

$$Au = b$$

CAP-MUIinf

2.2. Método de resolución

- El primer paso consiste en:
  - Discretizar la membrana mediante un conjunto de nodos (i,j) igualmente espaciados:



$$\Delta x = \Delta y = \frac{L}{n-1},$$

$$x = (j-1)\Delta x, \quad j = 1,\dots,n$$
$$y = (i-1)\Delta y, \quad i = 1,\dots,n$$

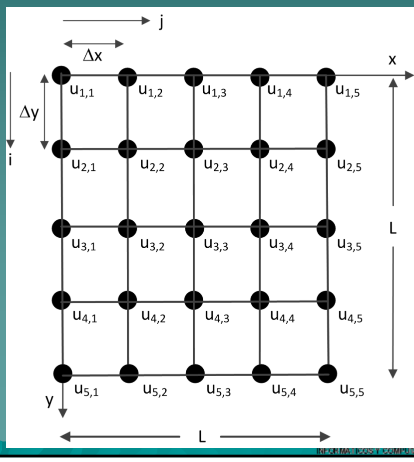
2.2. Método de resolución

- Discretizar el tiempo en intervalos Δt igualmente espaciados:

$$t = k\Delta t,\ k \geq 0$$

- Notación:

$$u_{i,j}^{k} = u\left(\left(i-1\right)\Delta y, \left(j-1\right)\Delta x, k\Delta t\right),$$
$$i, j = 1, \ldots, n,\ k \geq 0$$



7

2.2. Método de resolución

- Aproximación por diferencias finitas:

$$\frac{d^2u}{dx^2} \approx \frac{u_{i,j-1}^{k} - 2u_{i,j}^{k} + u_{i,j+1}^{k}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{d^2u}{dy^2} \approx \frac{u_{i-1,j}^{k} - 2u_{i,j}^{k} + u_{i+1,j}^{k}}{\Delta y^2}$$

$$\frac{d^2u}{dt^2} \approx \frac{u_{i,j}^{k} - 2u_{i,j}^{k-1} + u_{i,j}^{k-2}}{\Delta t^2}$$

8

2.2. Método de resolución

- La ecuación en derivadas parciales queda como:

$$\frac{d^2u}{dt^2} = \left(\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{d^2u}{dy^2} \right)$$

$$\frac{u_{i,j}^{k} - 2u_{i,j}^{k-1} + u_{i,j}^{k-2}}{\Delta t^2} = \frac{u_{i,j-1}^{k} - 2u_{i,j}^{k} + u_{i,j+1}^{k}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i-1,j}^{k} - 2u_{i,j}^{k} + u_{i+1,j}^{k}}{\Delta y^2}$$

$$\left(1 + 4\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) u_{i,j}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{i-1,j}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{i,j-1}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{i+1,j}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{i,j+1}^{k} = 2u_{i,j}^{k-1} - u_{i,j}^{k-2}$$

CAP-MUIinf

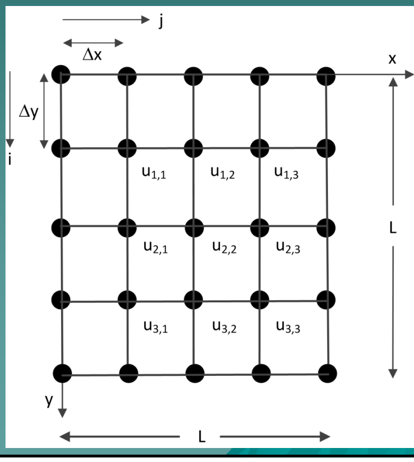
2.2. Método de resolución

- Resultando un sistema de la forma:

$$\begin{aligned}
u_{1,1}^{k} &= 0 \\
u_{1,2}^{k} &= 0 \\
&\vdots \\
u_{1,n}^{k} &= 0 \\
u_{2,1}^{k} &= 0 \\
\left(1 + 4\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) u_{2,2}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{1,2}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{2,1}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{3,2}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{2,3}^{k} &= 2u_{2,2}^{k-1} - u_{2,2}^{k-2} \\
\left(1 + 4\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) u_{2,3}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{1,3}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{2,2}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{3,3}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{2,4}^{k} &= 2u_{2,3}^{k-1} - u_{2,3}^{k-2} \\
&\vdots \\
\left(1 + 4\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) u_{n-1,n-1}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{n-2,n}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{n-1,n-2}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{n,n-1}^{k} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{n-1,n}^{k} &= 2u_{n-1,n-1}^{k-1} - u_{n-1,n-1}^{k-2} \\
u_{n-1,n}^{k} &= 0 \\
u_{n,1}^{k} &= 0 \\
&\vdots \\
u_{n,n}^{k} &= 0
\end{aligned}$$

2.2. Método de resolución

- Puesto que la deformación en los nodos frontera será igual a 0, sólo trabajaremos con los nudos interiores:



11

2.2. Método de resolución

- Ejemplo para n=3 (3x3 nodos interiores). Matricialmente:

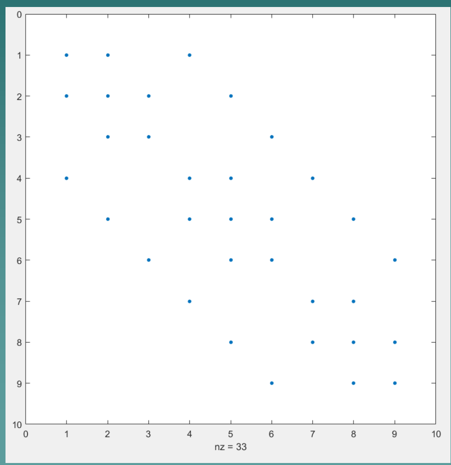
$$
\begin{bmatrix}
1+4\mu & -\mu & 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-\mu & 1+4\mu & -\mu & 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\mu & 1+4\mu & 0 & 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 \\
-\mu & 0 & 0 & 1+4\mu & -\mu & 0 & -\mu & 0 & 0 \\
0 & -\mu & 0 & -\mu & 1+4\mu & -\mu & 0 & -\mu & 0 \\
0 & 0 & -\mu & 0 & -\mu & 1+4\mu & 0 & 0 & -\mu \\
0 & 0 & 0 & -\mu & 0 & 0 & 1+4\mu & -\mu & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -\mu & 0 & -\mu & 1+4\mu & -\mu \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mu & 0 & -\mu & 1+4\mu
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
u_{1,1}^k \\ u_{1,2}^k \\ u_{1,3}^k \\ u_{2,1}^k \\ u_{2,2}^k \\ u_{2,3}^k \\ u_{3,1}^k \\ u_{3,2}^k \\ u_{3,3}^k
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
2u_{1,1}^{k-1} - u_{1,1}^{k-2} \\
2u_{1,2}^{k-1} - u_{1,2}^{k-2} \\
2u_{1,3}^{k-1} - u_{1,3}^{k-2} \\
2u_{2,1}^{k-1} - u_{2,1}^{k-2} \\
2u_{2,2}^{k-1} - u_{2,2}^{k-2} \\
2u_{2,3}^{k-1} - u_{2,3}^{k-2} \\
2u_{3,1}^{k-1} - u_{3,1}^{k-2} \\
2u_{3,2}^{k-1} - u_{3,2}^{k-2} \\
2u_{3,3}^{k-1} - u_{3,3}^{k-2}
\end{bmatrix}
$$

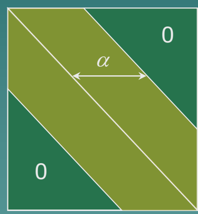
- siendo $\mu = \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}$

12

2.2. Método de resolución

- Patrón de dispersidad de la matriz A para n=3 (ancho de banda igual a n):





α =ancho de banda

2.2. Método de resolución

- Descargarse el archivo *membrana.m* (disponible en poliformaT):
  - La función toma como argumento:
    - n: número de nodos interiores (en una dimensión y sin contabilizar a los nodos frontera) en los que dividimos a la membrana. Cuantos más nodos, más precisión, pero mayor coste computacional.
    - opcion: determina el modo de resolución del sistema.
  - La función realiza la inicialización, resuelve el problema en 100 pasos de tiempo y genera una película ensamblando las imágenes de la membrana.
  - En cada uno de los 100 pasos se resuelve un sistema de ecuaciones lineales. Si el número de nodos interiores es n, la dimensión de los sistemas de ecuaciones lineales es n^2.
- Descargarse de poliformaT el archivo *crea_matriz.m*, encargado de generar la matriz A de coeficientes.

2.2. Método de resolución

- Los sistemas de ecuaciones lineales se resuelven mediante las funciones recogidas en los siguientes ficheros de Matlab (disponibles en poliformaT) y de acuerdo a la secuencia de tres pasos estudiada en teoría:
  - Cálculo de la descomposición LU (*lu_kji.m*).
  - Resolución de un sistema de ecuaciones triangular inferior (*solve_tril_unidad.m*).
  - Resolución de un sistema de ecuaciones triangular superior (*solve_triu.m*).

```
…
 [LU]=lu_kji(A);
 y= solve_tril_unidad(LU,b);
 u=solve_triu(LU,y);
…
```

DSIC DEPARTAMENTO DE SISTEMAS INFORMÁTICOS Y COMPUTACIÓN

2.3. Ejercicio 1

- Probar el comportamiento de la función *membrana*.
- Trabajar con un valor de *n* igual a 30.
- Emplear los valores 1 y 2 para la variable *opcion*:
  - opcion = 1 -> resolución mediante el operador "\" de Matlab.
  - opcion = 2 -> resolución mediante las 3 funciones de la transparencia anterior.
- Anotar el tiempo de ejecución invertido con ambas opciones.

DSIC DEPARTAMENTO DE SISTEMAS INFORMÁTICOS Y COMPUTACIÓN

2.3. Ejercicio 2

- Escribir las funciones *lu_kji.m, solve_tril_unidad.m y solve_triu.m* en forma de archivos mex.
- En poliformaT se proporcionan los ficheros *lu_kji_mex.c, solve_tril_unidad_mex.c y solve_triu_mex.c* con la implementación en C de las funciones.
- Invocarlas desde el archivo *membrana.m*, cuando la variable *opcion* sea igual a 3*.*
- Comprobar que, al usarlas, la solución se obtiene correctamente (basta con comprobar visualmente que la vibración de la membrana es correcta).
- Analizar la ganancia o pérdida de tiempo obtenida.

17

2.3. Ejercicio 2

- Aclaración importante:
  - Los argumentos de entrada de un mex (prhs) NO se pueden modificar (const mxArray *prhs[]), ni por tanto sobreescribir.
  - Sin embargo, las tres funciones anteriores sobreescriben alguno de sus datos de entrada.
  - Es necesario tratar de forma especial los argumentos de entrada que se vayan a modificar. Para ello:
    - Crearemos una variable auxiliar de la misma dimensión.
    - Copiaremos el contenido de la variable de entrada a la variable auxiliar.
    - Emplearemos a dicha variable auxiliar como parámetro en las invocaciones a las funciones correspondientes.

18

2.3. Ejercicio 2

- Ejemplo para la comprobación en la resolución del sistema Au=b mediante los ficheros mex, siendo:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 1 \end{pmatrix},\ b = \begin{pmatrix} 8 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

```
>> LU = lu_kji_mex (A)
```

$$LU = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 2 & 3 & -4 \\ 3 & 1.3333 & 0.3333 \end{pmatrix}$$

19

CAP-MUIinf

2.3. Ejercicio 2

```
>> y = solve_tril_unidad_mex (LU, b)
```

$$y = \begin{pmatrix} 8 \\ -17 \\ 0.6667 \end{pmatrix}$$

```
>> u = solve_triu_mex (LU, y)
```

$$u = \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

20

CAP-MUIinf

2.3. Ejercicio 3

- La matriz A se genera fuera del bucle y por lo tanto no varía durante todo el proceso. ¿Te sugiere eso alguna optimización?
- Incorporar el código necesario en la función *membrana* para resolver el sistema de ecuaciones con dicha optimización, cuando se cumpla que la variable *opcion* valga 4.
- Tomar el tiempo invertido comparándolo con el de los ejercicios anteriores.

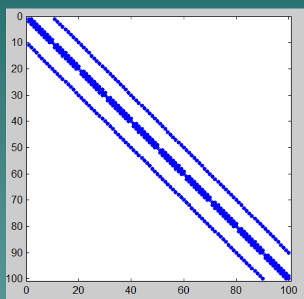
DSIC DEPARTAMENTO DE SISTEMAS INFORMÁTICOS Y COMPUTACIÓN

21

CAP-MUIinf

2.3. Ejercicio 4

- Como ya sabemos, el número de nodos interiores es n, la dimensión de la matriz A es n^2 y tiene estructura de "banda", con un ancho de banda igual a n.
- De este modo, los factores L y U también presentan el mismo ancho de banda, con lo cual no es necesario realizar cálculos "fuera de la banda".
- ¿Puedes aprovechar este hecho para optimizar el cálculo en los tres ficheros mex? Incluye esas modificaciones en los ficheros *lu_kji_banda_mex.c*, *solve_tril_unidad_banda_mex.c* y *solve_triu_banda_mex.c.*



- Incorpora las invocaciones a los nuevos ficheros en la función *membrana* (*opcion*=5) y toma tiempos de ejecución.

DSIC DEPARTAMENTO DE SISTEMAS INFORMÁTICOS Y COMPUTACIÓN

22

2.3 Tabla de tiempos

- Completa la siguiente tabla a partir de los tiempos de ejecución obtenidos con *n=30* y con los diferentes valores de la variable *opcion*:

opcion	1	2	3	4	5
Tiempo (segs.)					

DSIC DEPARTAMENTO DE SISTEMAS INFORMÁTICOS Y COMPUTACIÓN

23

3. Recordatorio

- Resolución de un sistema de ecuaciones lineales $Ax=b$, con $A \in \Re^{n \times n}$, $x \in \Re^{n}$, $b \in \Re^{n}$. Para ello:

1. Realizamos la descomposición LU de A, tal que A=LU.
2. Resolvemos dos sistemas de ecuaciones triangulares:

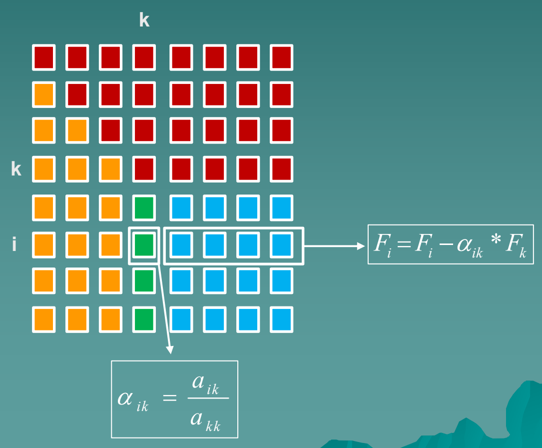
$$Ax = b \longleftrightarrow L\underbrace{(Ux)}_{y} = b \quad \begin{cases} 1^{\circ}: Ly = b. \\ 2^{\circ}: Ux = y. \end{cases}$$

DSIC DEPARTAMENTO DE SISTEMAS INFORMÁTICOS Y COMPUTACIÓN

24

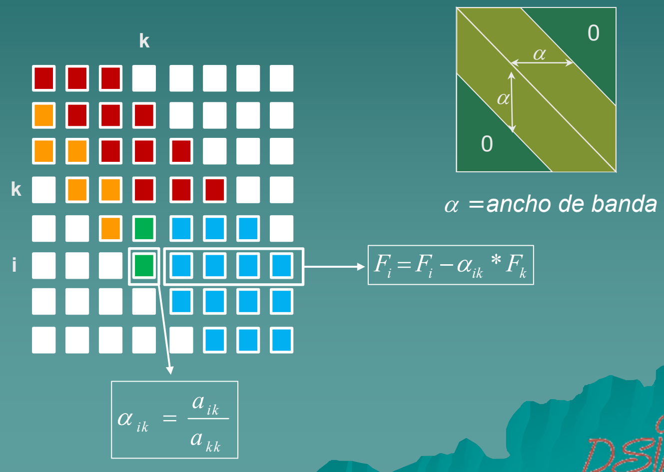
3. Recordatorio

- Descomposición LU: modificamos las filas que están por debajo de la fila k, desde la columna k en adelante:



3. Recordatorio

- Descomposición LU: modificamos las filas que están por debajo de la fila k, desde la columna k en adelante:



CAP-MUIinf

3. Recordatorio

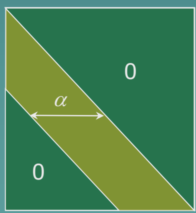
- Método de sustitución directa o progresiva:

$$\left.\begin{array}{lr} a_{11}x_1 & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 & = b_2 \\ \vdots & \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n & = b_n \end{array}\right\}$$

Ecuación i-ésima ($1 \leq i \leq n$):

$$\boxed{a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{ii-1}x_{i-1} + a_{ii}x_i = b_i}$$

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j}{a_{ii}}$$



α =*ancho de banda*

27

CAP-MUIinf

3. Recordatorio

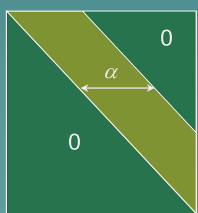
- Método de sustitución inversa o regresiva:

$$\left.\begin{array}{r} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{nn}x_n = b_n \end{array}\right\}$$

Ecuación i-ésima ($1 \leq i \leq n$):

$$\boxed{a_{ii}x_i + a_{ii+1}x_{i+1} + \cdots + a_{in}x_n = b_i}$$

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j}{a_{ii}}$$



α =*ancho de banda*

28