Laboratorio de Métodos Numéricos - Primer Cuatrimestre 2015
Trabajo Práctico Número 1: *"No creo que a él le gustará eso"*

Introducción

El afamado Capitán Guybrush Threepwood se encuentra nuevamente en problemas. El parabrisas de su nave El Pepino Marino está siendo atacado simultáneamente por varios dispositivos hostiles vulgarmente conocidos como *sanguijuelas mutantes*. Estos artefactos se adhieren a los parabrisas de las naves y llevan a cabo su ataque aplicando altas temperaturas sobre la superficie, con el objetivo de debilitar la resistencia del mismo y permitir así un ataque más mortífero. Cada sanguijuela consta de una *sopapa de ataque* circular, que se adhiere al parabrisas y aplica una temperatura constante sobre todos los puntos del parabrisas en contacto con la sopapa.

Para contrarrestar estas acciones hostiles, el Capitán Guybrush Threepwood cuenta con el sistema de refrigeración de la nave, que puede aplicar una temperatura constante de -100^{o}C a los bordes del parabrisas. El manual del usuario de la nave dice que si el punto central del parabrisas alcanza una temperatura de 235^{o}C, el parabrisas no resiste la temperatura y se destruye. Llamamos a este punto el *punto crítico* del parabrisas.

En caso de que el sistema de refrigeración no sea suficiente para salvar el punto crítico, nuestro Capitán Guybrush Threepwood tiene todavía una posibilidad adicional: puede destruir alguna de las sanguijuelas. Es importante destacar que solo puede destruir una de ellas, ya que la eliminación de muchas sanguijuelas consumiría energía vital para la finalización de la misión, y llevaría únicamente al fracaso de la misma. La situación es desesperante, y nuestro héroe debe tomar una rápida determinación: debe decidir, cuando sea posible, qué sanguijuela eliminar de modo tal que el parabrisas resista hasta alcanzar la base más cercana.

El modelo

Suponemos que el parabrisas es una placa rectangular de a metros de ancho y b metros de altura. Llamemos $T(x,y)$ a la temperatura en el punto dado por las coordenadas (x,y). En el estado estacionario, esta temperatura satisface la ecuación del calor:

$$\frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial y^2} = 0. \tag{1}$$

La temperatura constante en los bordes queda definida por la siguiente ecuación:

$$T(x,y) = -100^o\text{C} \qquad \text{si } x = 0, a \text{ ó } y = 0, b. \tag{2}$$

De forma análoga es posible fijar la temperatura en aquellos puntos cubiertos por una sanguijuela, considerando T_s a la temperatura ejercida por las mismas.

El problema en derivadas parciales dado por la primera ecuación con las condiciones de contorno presentadas recientemente, permite encontrar la función T de temperatura en el parabrisas, en función de los datos mencionados en esta sección.

Para estimar la temperatura computacionalmente, consideramos la siguiente discretización del parabrisas: sea $h \in \mathbb{R}$ la granularidad de la discretización, de forma tal que $a = m \times h$ y $b = n \times h$, con $n, m \in \mathbb{N}$, obteniendo así una grilla de $(n+1) \times (m+1)$ puntos.

Luego, para $i = 0, 1, \ldots, n$ y $j = 0, 1, \ldots, m$, llamemos $t_{ij} = T(x_j, y_i)$ al valor (desconocido) de la función T en el punto $(x_j, y_i) = (ih, jh)$, donde el punto $(0, 0)$ se corresponde con el extremo inferior izquierdo del parabrisas. La aproximación por *diferencias finitas* de la ecuación del calor afirma que:

$$t_{ij} \; = \; \frac{t_{i-1,j} + t_{i+1,j} + t_{i,j-1} + t_{i,j+1}}{4}. \tag{3}$$

Es decir, la temperatura de cada punto de la grilla debe ser igual al promedio de las temperaturas de sus puntos vecinos en la grilla. Adicionalmente, conocemos la temperatura en los bordes, y los datos del problema permiten conocer la temperatura en los puntos que están en contacto con las sanguijuelas.

Enunciado

Se debe implementar un programa en `C` o `C++` que tome como entrada los parámetros del problema (a, b, h, junto con las posiciones, radio y temperatura de las sanguijuelas) y calcule la temperatura en el parabrisas utilizando el modelo propuesto en la sección anterior.

Para resolver este problema, se deberá formular un sistema de ecuaciones lineales que permita calcular la temperatura en todos los puntos de la grilla que discretiza el parabrisas, e implementar el método de Eliminación Gaussiana (EG) para resolver este sistema particular. Dependiendo de la granularidad utilizada en la discretización, el sistema de ecuaciones resultante para este problema puede ser muy grande. Luego, es importante plantear el sistema de ecuaciones de forma tal que posea cierta estructura (i.e., una matriz banda), con el objetivo de explotar esta característica tanto desde la *complejidad espacial* como *temporal* del algoritmo. Además de la estructura banda, en determinados casos es posible utilizar la descomposición LU del sistema para acelerar el cómputo de evaluar qué sucedería si una sanguijuela fuese eliminada.

En función de la implementación, como mínimo se pide:

1. *Explotando la estructura:* Representar la matriz del sistema aprovechando la estructura banda de la misma, haciendo hincapié en la complejidad espacial. Realizar las modificaciones necesarias del algoritmo de EG clásico para que aproveche la estructura banda de la matriz, e implementarlo.

2. *Factorización LU:* Implementar un algoritmo que permita calcular la descomposición LU de la matriz, aprovechando la estructura banda de la misma. Además, se deben implementar los algoritmos de *forward/back substitution* para resolver el sistema utilizando la factorización LU. Discutir alternativas de implementación buscando minimizar el espacio utilizado.

3. *Última Esperanza:* Implementar un algoritmo para decidir si es posible salvar el parabrisas de la destrucción mediante la eliminación de *una* sanguijuela. En caso de ser posible, el algoritmo debe determinar la *mejor* sanguijuela a eliminar, (i.e., aquella que al ser removida genera la menor temperatura en el punto crítico).

4. *No hay tiempo que perder:* Existen casos donde la eliminación de una sanguijuela modifica *levemente* el sistema, alterando solo una *fila* de este. En estos casos, es posible utilizar la factorización LU y lo que se conoce como fórmula de Sherman–Morrison [1]:

$$(A + uv^t)^{-1} \; = \; A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^tA^{-1}}{1 + v^tA^{-1}u}. \tag{4}$$

para acelerar el cómputo de evaluar la temperatura de eliminar una sanguijuela. Identificar estos casos, analizar cómo se modifica el sistema, e implementar una versión del algoritmo propuesto en 3 que explote esta propiedad cuando sea posible.

En función de la experimentación, como mínimo debe realizarse lo siguiente:

- Considerar al menos tres instancias originales de prueba, generando discretizaciones variando la granularidad para cada una de ellas y comparando el valor de la temperatura en el punto crítico. Se sugiere presentar gráficos de temperatura para los mismos, ya sea utilizando las herramientas provistas por la cátedra o implementando sus propias herramientas de visualización.
- Analizar el tiempo de cómputo requerido en función de la granularidad de la discretización, buscando un compromiso entre la calidad de la solución obtenida y el tiempo de cómputo requerido. Comparar los resultados obtenidos para alguna de las variantes propuestas en 1 y 2, y analizar ventajas y desventajas de ambos esquemas. ¿Cómo impacta en los resultados la elección del esquema 1 y 2? ¿Por qué?
- Estudiar el comportamiento del método propuesto para la estimación de la temperatura en el punto crítico y para la eliminación de sanguijuelas, comparando las variantes propuestas en 3 y 4.

Finalmente, se deberá presentar un informe que incluya una descripción detallada de los desarrollos teóricos propuestos, métodos implementados y las decisiones tomadas, incluyendo las estructuras utilizadas para representar la matriz banda y los experimentos realizados, junto con el correspondiente análisis y siguiendo las pautas definidas en el archivo `pautas.pdf`.

Opcional:

- Al aplicar Eliminación Gaussiana sobre el sistema asociado a este problema en particular, ¿Es necesario pivotear? ¿Por qué?
- ¿Cómo modificaría el algoritmo propuesto en 3 para aprovechar la fórmula de Sherman–Morrison [1] para cualquier tipo de sanguijuela?

Programa y formato de archivos

El programa debe tomar tres parámetros (y en ese orden): el archivo de entrada, el archivo de salida y el método a ejecutar, (*0:* Eliminación Gaussiana banda, *1:* Factorización LU explotando la propiedad banda y utilizando forward/back substitution, *2:* Algoritmo de eliminación de sanguijuela simple, *3:* Algoritmo de eliminación de sanguijuela mejorado, usando la fórmula de Sherman–Morrison cuando sea posible).

El archivo de entrada contiene los datos del problema (tamaño del parabrisas, ubicación, radio y temperatura de las sanguijuelas) desde un archivo de texto con el siguiente formato:

```
(a)  (b)  (h)  (k)
(x1) (y1) (r1) (t1)
(x2) (y2) (r2) (t2)
```

```
...
(xk) (yk) (rk) (tk)
```

En esta descripción, $a \in \mathbb{R}_+$ y $b \in \mathbb{R}_+$ representan el ancho y largo en metros del parabrisas, respectivamente. De acuerdo con la descripción de la discretización del parabrisas, h es la longitud de cada intervalo de discretización, obteniendo como resultado una grilla de $n+1 \in \mathbb{N}$ filas y $m+1 \in \mathbb{N}$ columnas. Además, $k \in \mathbb{N}$ es la cantidad de sanguijuelas. Finalmente, para $i = 1, \ldots, k$, el par (x_i, y_i) representa la ubicación de la i-ésima sanguijuela en el parabrisas, suponiendo que el punto $(0, 0)$ corresponde al extremo inferior izquierdo del mismo, mientras que $r_i \in \mathbb{R}_+$ representa el radio de la sopapa de ataque de la sanguijuela (en metros), y $t_i \in \mathbb{R}$ es la temperatura de dicha sopapa.

El archivo de salida contendrá los valores de la temperatura en cada punto de la discretización utilizando la información original del problema (es decir, antes de aplicar el método de remoción de sanguijuela), y será utilizado para realizar un testeo parcial de correctitud de la implementación. El formato del archivo de salida contendrá, una por línea, el indicador de cada posición de la grilla i, j junto con el correspondiente valor de temperatura. A modo de ejemplo, a continuación se muestran cómo se reportan los valores de temperatura para las posiciones $(3, 19)$, $(3, 20)$, $(4, 0)$ y $(4, 1)$.

```
...
3   19  -92.90878
3   20  -100.00000
4   0   -100.00000
4   1   60.03427
...
```

El programa debe ser compilado, ejecutado y testeado utilizando los *scripts* de *python* que acompañan este informe. Estos permiten ejecutar los tests provistos por la cátedra, incluyendo la evaluación de los resultados obtenidos e informando si los mismos son correctos o no. Es requisito que el código entregado pase satisfactoriamente los casos de tests provistos para su posterior corrección. Junto con los archivos podrán encontrar un archivo `README` que explica la utilización de los mismos.

Sobre la entrega

- Formato electrónico: Jueves 09 de Abril de 2015, hasta las 23:59 hs., enviando el trabajo (`informe` + `código`) a `metnum.lab@gmail.com`. El `asunto` del email debe comenzar con el texto `[TP1]` seguido de la lista de apellidos de los integrantes del grupo. Ejemplo: `[TP1] Acevedo, Miranda, Montero`
- Formato físico: Viernes 05 de Abril de 2015, de 17:30 a 18:00 hs.

Referencias

[1] Golub, G. H. and Van Loan, C. F. Matrix Computations, 3rd ed. Baltimore, MD: Johns Hopkins, p. 51, 1996.