

Trabajo Práctico 1

“No creo que a él le gustara eso”

Métodos Numéricos

Primer Cuatrimestre 2015



The Secret of Monkey Island



El parabrisas

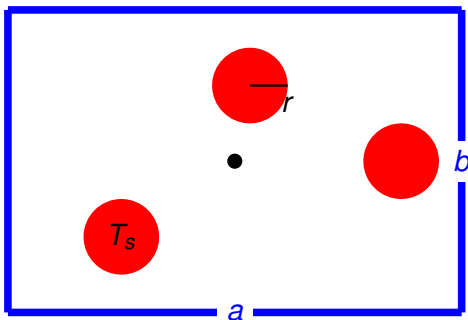
- La nave El Pepino Marino tiene un parabrisas, que está siendo atacado por sanguijuelas mutantes.
- Los bordes del parabrisas tienen un sistema de refrigeración que aplica una temperatura constante de **-100°C**.
- Las sanguijuelas aplican una temperatura (parámetro) sobre la superficie que cubren (también parámetro).

Nos interesa

- Determinar la temperatura en el **punto crítico** del parabrisas.
- Proponer una estrategia para decidir si la eliminación de una sanguijuela produce que la temperatura en el punto crítico se encuentre por debajo de los **235°C**.

El parabrisas y las sanguijuelas

- a = ancho (mts.)
- b = alto (mts.)
- r = radio de la sanguijuela (mts.)
- T_s = temp. ejercida por la sanguijuela s .



Sea $T(x, y) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ la función de temperatura en el punto $(x, y) \in \mathbb{R}^2$.

Conocemos:

- La temperatura en los bordes, -100°C , i.e.,
 $T(0, y) = T(x, 0) = T(x, b) = T(a, y) = -100^\circ\text{C}$
- Las temperaturas en los puntos cubiertos por las sanguijuelas: T_s para $s \in \text{sanguijuelas}$.

¿Qué buscamos?:

$T(x, y)$ para todo punto del parabrisas, y así podemos calcular la temperatura en el punto crítico y determinar si es seguro o no.

¿Cómo buscamos la temperatura en los puntos internos?

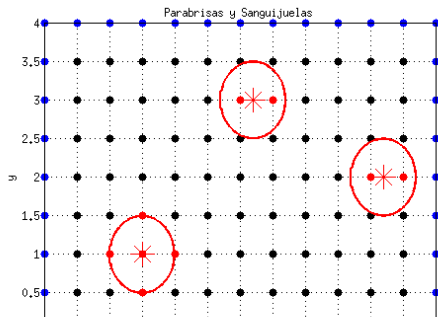
Llamamos a nuestro amigo físico y nos dice que (después de un tiempito) los puntos internos van a cumplir:

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

Ecuación de Laplace

Ecuación diferencial en derivadas parciales, utilizadas en muchos campos aplicados. En nuestro caso, describen las condiciones que se cumplen en el estado estacionario del sistema.

- Transformamos el problema **continuo** en un problema **discreto**.
- En lugar de obtener una función $T(x, y)$ que describa la temperatura en todos los puntos, calculamos la temperatura en los puntos de la discretización y la llamamos t_{ij} .



Consideramos la siguiente discretización del parabrisas:

- $h \in \mathbb{R}$ la granularidad de la discretización.
- $a = m \times h$ y $b = n \times h$, con $n, m \in \mathbb{N}$, obteniendo así una grilla de $(n+1) \times (m+1)$ puntos.
- Para $i = 0, 1, \dots, n$ y $j = 0, 1, \dots, m$, llamemos $t_{ij} = T(x_j, y_i)$ al valor (desconocido) de la función T en el punto $(x_j, y_i) = (jh, ih)$, donde el punto $(0, 0)$ se corresponde con el extremo inferior izquierdo del parabrisas.

Relación con la derivada

$$f'(a) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \underbrace{\approx}_{\text{Fijado } h} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

Definición

- Diferencia finita atrasada:

$$\frac{\partial T(x, y)}{\partial x}(x_j, y_i) \cong \frac{t_{i,j} - t_{i,j-1}}{h}$$

- Diferencia finita adelantada:

$$\frac{\partial T(x, y)}{\partial x}(x_j, y_i) \cong \frac{t_{i,j+1} - t_{i,j}}{h}$$

Solución Numérica

Diferencias finitas (cont.)

Discretizamos las de segundo orden

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial x^2}(x_j, y_i) &= \frac{\partial\left(\frac{\partial T(x,y)}{\partial x}\right)}{\partial x}(x_j, y_i) \\ &= \frac{\frac{t_{i,j+1}-t_{i,j}}{h} - \frac{t_{i,j}-t_{i,j-1}}{h}}{h} \\ &= \frac{t_{i,j-1} - 2t_{i,j} + t_{i,j+1}}{h^2}\end{aligned}$$

Análogamente,

$$\frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial y^2}(x_j, y_i) = \frac{t_{i-1,j} - 2t_{i,j} + t_{i+1,j}}{h^2}$$

Reemplazando en (1)

$$\frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial y^2} \approx \frac{t_{i-1,j} + t_{i,j-1} - 4t_{i,j} + t_{i+1,j} + t_{i,j+1}}{h^2} = 0 \quad (2)$$

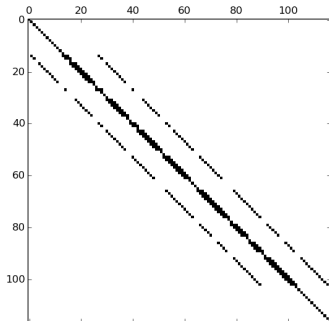
Variables

Como ya dijimos, la temperatura en cada punto de la discretización, t_{ij} , $i = 0, \dots, n$ y $j = 0, \dots, m$.

Ecuaciones

- Sabemos que cada punto en el borde del parabrisas vale -100°C .
- Sabemos que cada punto cubierto por la sanguijuela s vale T_s .
- Sabemos que cada uno de los puntos restantes cumple exactamente una ecuación (i.e., (2)) que depende de sus cuatro vecinos, en particular el promedio.

Se deberá formular un **sistema de ecuaciones lineales** que permita calcular la temperatura en todos los puntos de la grilla que discretiza el parabrisas. 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.



1. 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. 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. 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. 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:

$$(A + uv^t)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^tA^{-1}}{1 + v^tA^{-1}u}. \quad (3)$$

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.

- 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:

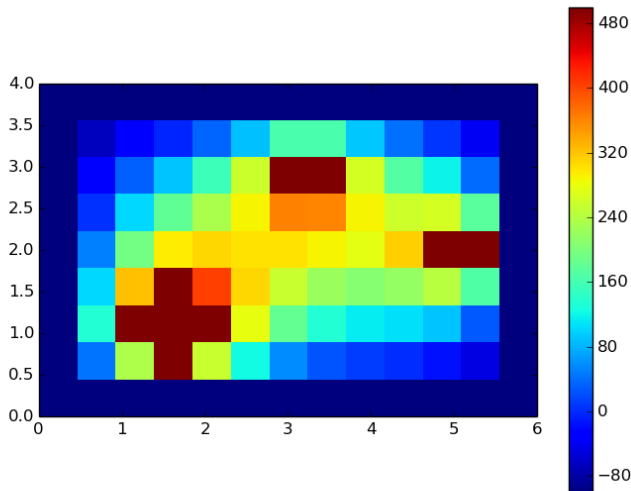
$$(A + uv^t)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^tA^{-1}}{1 + v^tA^{-1}u}. \quad (3)$$

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.

¿Para qué me sirve $(A + uv^t)^{-1}$?

Veamos un ejemplo...

- 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.



- **Informe que incluya una descripción detallada de los métodos implementados y las decisiones tomadas, experimentos realizados, junto con el correspondiente análisis y siguiendo las pautas definidas en el archivo *pautas.pdf*.**
- **El programa debe ser compilado, ejecutado y testeado utilizando los *scripts* de Python provistos, verificando que los tests pasen satisfactoriamente. Además, se debe respetar el formato especificado en el enunciado.**

- **Informe** que incluya una **descripción detallada de los métodos implementados** y las **decisiones tomadas, experimentos realizados**, junto con el correspondiente **análisis** y siguiendo las pautas definidas en el archivo *pautas.pdf*.
- El programa debe ser **compilado, ejecutado y testeado** utilizando los *scripts* de *Python* provistos, verificando que los **tests pasen satisfactoriamente**. Además, se debe **respetar el formato** especificado en el enunciado.

- Es muy importante explicar las **hipótesis** previas de cada experimento, **detallando los parámetros** para poder replicarlo. Además, **la discusión debe desprenderse de los resultados** obtenidos y **no** debe limitarse a describir qué pasa en el gráfico, sino también incluir una **justificación (o intuición) del por qué** de los resultados.

- **Viernes 27/03:** Formulación del sistema, estructuras para la representación de matriz, EG.
Consultas, consultas, consultas.
- **Miércoles 01/04:** (horario a confirmar)
Consultas, consultas, consultas.
- **Viernes 03/04:** (feriado) Descomposición LU, primeros experimentos, algoritmo eliminación de sanguijuela.
- **Lunes 06/04:** (horario a confirmar)
Consultas, consultas, consultas.
- **Jueves 09/04:** Entrega TP1 a *metnum.lab@gmail.com*

¿El Monkey Island es la aplicación? ¿En serio? ¿El Monkey Island?





**DEPARTAMENTO
DE COMPUTACION**

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires

[Mapa del Sitio](#) [Accesibilidad](#) [Contacto](#)



[Inicio](#)



[Futuros Estudiantes](#)



[Estudiantes actuales](#)



[Docentes](#)



[Graduados](#)



[ENTRAR](#)



Usted está aquí: [Inicio](#) > [Investigación](#) > [Laboratorio de Sistemas Complejos](#)

Laboratorio de Sistemas Complejos

El Laboratorio de Sistemas Complejos (LSC), Departamento de Computación (DC), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEyN), Universidad de Buenos Aires (UBA), es un grupo interdisciplinario dedicado al estudio de sistemas complejos en electroquímica y bioelectroquímica, ciencias de la vida, computación de alto rendimiento (HPC) y Grid Computing (GC).

The Role of pH Fronts in Reversible Electroporation

Pablo Turjanski¹, Nahuel Olaiz¹, Felipe Maglietti¹, Sebastian Michinski¹, Cecilia Suárez^{1,2}, Fernando Victor Molina^{1,2,3}, Guillermo Marshall^{1,2*}

¹ Laboratorio de Sistemas Complejos, Departamento de Computación, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina, ² Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Buenos Aires, Argentina, ³ INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

Abstract

We present experimental measurements and theoretical predictions of ion transport in agar gels during reversible electroporation (ECT) for conditions typical to many clinical studies found in the literature, revealing the presence of pH fronts emerging from both electrodes. These results suggest that pH fronts are immediate and substantial. Since they might

The Role of pH Fronts in Reversible Electroporation

Pablo Turjanski¹, Nahuel Olaiz¹, Felipe Maglietti¹, Sebastian Michinski¹, Cecilia Suárez^{1,2}, Fernando Victor Molina^{1,2,3}, Guillermo Marshall^{1,2*}

¹ Laboratorio de Sistemas Complejos, Departamento de Computación, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina, ² Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Buenos Aires, Argentina, ³ INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

Abstract

We present experimental measurements and theoretical predictions of ion transport in agar gels during reversible electroporation (ECT) for conditions typical to many clinical studies found in the literature, revealing the presence of pH fronts emerging from both electrodes. These results suggest that pH fronts are immediate and substantial. Since they might

at room temperature with no significant changes observed during the process.

In silico modelling is based in the description of the ECT process by a 1D system of partial differential equations governing ion transport and the electric field in a four component electrolyte and its numerical solution by deterministic finite difference methods. Assuming that ion transport is governed by diffusion and migration and electroneutrality holds true, the in silico ECT 1D model can be approximated by a new split model describing ion transport in a two-step procedure. During the ON-time step, electric current is present and transport is governed by migration and diffusion, during the OFF-time step electric current is absent and transport is solely governed by diffusion. This splitting model

Regarding boundary conditions, mass transport of species i across both electrode surfaces is assumed non-existent. Then, for $i = H^+, OH^-, Cl^-$ and Na^+ :

$$-D_i(\nabla C_i \cdot \mathbf{n}) = 0 \quad (3)$$

The split system of partial differential equations is solved, successively in time, in a two-step procedure (ON-time and OFF-time steps), in a fixed domain on a two-dimensional space-time uniform grid using strongly implicit finite differences (details can be found in [29]). During the ON-time step, the time step is