Métodos Numéricos para Ingeniería
Factorización de Doolittle con sustitución progresiva y regresiva

Introducción

Considere el sistema de ecuaciones de la forma:

$$
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\
a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\
\vdots & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\
a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}x_n & = & b_n
\end{array} \tag{0.1}
$$

Para $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^t$, dado $A = (a_{ij})$ con $i, j = 1, 2, \ldots, n$ y $b = (b_i)$ para $i = 1, 2, \ldots, n$.

Escribiendo el sistema (0.1) en forma matricial, se tiene:

$$Ax = b.$$

La matriz no singular A de $n \times n$, puede factorizarse en la forma LU, donde L es una matriz triangular inferior con elementos 1 en la diagonal y U es matriz triangular superior, es decir:

$$A = LU.$$

Una vez encontradas las matrices L y U, la solución del sistema (0.1) puede determinarse en dos pasos:

1. Calcule y resolviendo $Ly = b$. (Sustitución progresiva).
2. Calcule x resolviendo $Ux = y$. (Sustitución regresiva).

Algoritmo de factorización de Doolittle con sustitución progresiva y regresiva

Para resolver el sistema (0.1) usaremos el algoritmo de factorización de Doolittle con sustitución progresiva y regresiva.

ENTRADA La dimensión n; los elementos a_{ij}, $1 \leq i, j \leq n$ de A; la diagonal $l_{11} = \cdots = l_{nn} = 1$ de L; los elementos b_i, $1 \leq i \leq n$ de b.

SALIDA Solución $x_1, x_2, \ldots, x_n$.

Paso 1 Tome $u_{11} = \dfrac{a_{11}}{l_{11}}$.

Paso 2 Para $j = 2, \ldots, n$ tome

$$u_{1j} = \frac{a_{1j}}{l_{11}}; \text{ (primera fila de } U).$$

$$l_{j1} = \frac{a_{j1}}{u_{11}}. \text{ (primera columna de } L).$$

Paso 3 Para $i = 2, \ldots, n-1$ haga los pasos 4 y 5.

Paso 4 Tome $u_{ii} = \dfrac{1}{l_{ii}}\left[a_{ii} - \displaystyle\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{ki}\right]$

Paso 5 Para $j = i+1, \ldots, n$ tome

$$u_{ij} = \frac{1}{l_{ii}}\left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}\right]; \text{ (i-ésima fila de U.)}$$

$$l_{ji} = \frac{1}{u_{ii}}\left[a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}u_{ki}\right]. \text{ (i-ésima columna de L.)}$$

Paso 6 Tome $u_{nn} = \dfrac{1}{l_{nn}}\left[a_{nn} - \displaystyle\sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}u_{kn}\right]$.

Paso 7 Tome $y_1 = \dfrac{b_1}{l_{11}}$. (Comienza sustitución progresiva).

Paso 8 Para $i = 2, \ldots, n$ tome $y_i = \dfrac{1}{l_{ii}}\left[b_i - \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j\right]$.

Paso 9 Tome $x_n = \dfrac{y_n}{u_{nn}}$. (Comienza sustitución regresiva).

Paso 10 Para $i = n-1, \ldots, 1$ tome $x_i = \dfrac{1}{u_{ii}}\left[y_i - \displaystyle\sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j\right]$.

Paso 11 SALIDA $x_1, x_2, \ldots, x_n$.
PARAR.

Problema: Análisis en estado estacionario de un sistema de reactores

Uno de los principios de organización más importantes en la ingeniería química es la conservación de la masa. En términos cuantitativos, el principio se expresa como un balance de masa que toma en cuenta todas las fuentes y sumideros de un material que entra y sale de un volumen. En un periodo finito, esto se expresa como

$$\text{Acumulación} = \text{entradas–salidas} \tag{0.2}$$

El balance de masa representa un ejercicio de registro para la sustancia en particular que semodela. Para el periodo en que se calcula, si las entradas son mayores que las salidas, la masa de la sustancia dentro del volumen aumenta. Si las salidas son mayores que las entradas, la masa disminuye. Si las entradas son iguales a las salidas, la acumulación es cero y la masa permanece constante. Para esta condición estable, o en estado estacionario, la ecuación (0.2) se expresa como

$$\text{Entradas} = \text{salidas}$$

Emplee la conservación de la masa para determinar las concentraciones en estado estacionario del siguiente problema.

Como su nombre lo dice, la contaminación del aire interior se refiere a la contaminación del aire en espacios cerrados, como casas, oficinas, áreas de trabajo, etc. Suponga que usted está diseñando el sistema de ventilación para un restaurante como se ilustra en la figura. El área de servicio del restaurante consiste en dos habitaciones cuadradas y otra alargada. La habitación 1 y la 3 tienen fuentes de monóxido de carbono que proviene de los fumadores y de una parrilla defectuosa, respectivamente. Es posible plantear los balances de masa en estado estacionario para cada habitación. Por ejemplo, para la sección de fumadores (habitación 1), el balance es el siguiente

$$W_{fumador} + Q_a c_a - Qac_1 + E_{13}\left(c_3 - c_1\right) = 0$$

Para las demás habitaciones se pueden escribir balances similares.

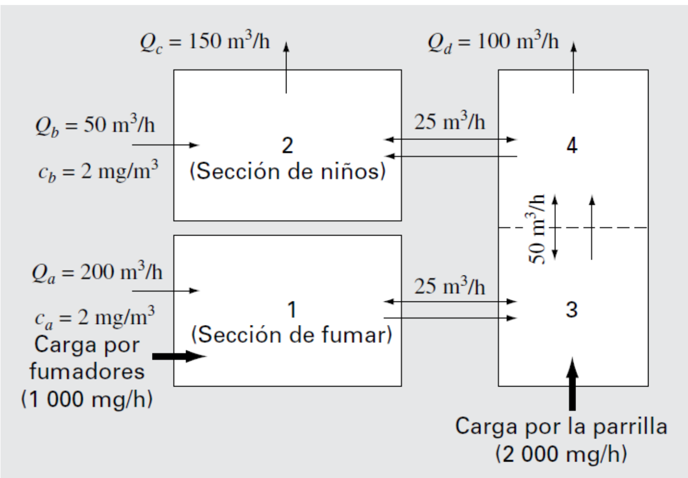

Figura
Vista de arriba de las áreas en un restaurante. Las flechas en un solo sentido representan flujos volumétricos de aire, mientras que las de dos sentidos indican mezclas difusivas. Las cargas debidas a los fumadores y a la parrilla agregan masa de monóxido de carbono al sistema pero con un flujo de aire despreciable.

Hint: Puede consultar el libro “Métodos Numéricos para Ingenieros” de Steven C. Chapra en las páginas 253, 254 y 255 de la 7ma edición.

Actividades

1) Programe en Python una rutina que implemente el algoritmo de factorización de Doolittle con sustitución progresiva y regresiva.

2) Resuelva para la concentración de monóxido de carbono en estado estacionario en cada habitación usando la rutina implementada en el ítem anterior.