Exercici 2: Difusió de la calor i matrius en banda

Álvaro Ortiz Villa

Àlgebra Lineal Numèrica (G. Matemàtiques, FME). Març 2021

1. Considera un sistema amb matriu simètrica en banda, amb semiample de banda s. Si s'adapta l'algoritme del mètode de Gauss per evitar operacions innecessàries, quantes operacions cal fer per resoldre'l? Justifica la teva resposta.

Sigui n la dimensió de la matriu. Observant l'algorisme a `eliminacioGaussiana.py` a cada pas k (per $k = 1, ..., n-1$) fem:

- $(k+s)-(k+1)+1 = s$ divisions per a calcular el paràmetre α.
- El nombre de sumes/restes és el mateix que el nombre de productes: $s^2+s = s\cdot(s+1)$. És a dir, tenim $2s^2$ per a modificar els coeficients de la matriu i $2s$ el vector solució.

  Tenim $n-1$ passos, aleshores el nombre total d'operacions és:

$$\sum_{k=1}^{n-1} 2\cdot s\cdot(s+1)+s = (n-1)\cdot(2s+3)\cdot s = 2s^2n+3sn-2s^2-3s$$

A teoria hem vist que el nombre total d'operacions de l'algorisme d'eliminació Gaussiana estàndard és de $\frac{2}{3}n^3+\frac{1}{2}n^2-\frac{7}{6}n$ de manera que amb l'algorisme adaptat passem d'un ordre de $O(\frac{2}{3}n^3)$ a $O(2s^2n)$.

2. Escriu una funció en Python que permeti resoldre un sistema amb matriu triangular superior adaptat a matrius en banda. Fes-la servir per resoldre el sistema resultant del procés d'eliminació Gaussiana i comprova que s'obté la mateixa solució.

A la funció `eliminacioGaussiana_banda(A,b, s)` s'ha modificat l'algorisme de substitució enrera adaptat a matrius amb semiample de banda. Com que $a_{i,j} = 0$ si $\mid i-j \mid > s$, hem de calcular

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j}\cdot x_j}{a_{i,i}} = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{i+s+1} a_{i,j}\cdot x_j}{a_{i,i}}$$

per $i = n-1, ..., 1$. Considerem el cas en què $i+s+1 > n$ i per això prenem el mínim entre ambdós.

Codi 1 – Substitució enrera adaptat a matrius en banda s

```
def substitucioEnrera_banda(A,b,s):
    n=len(A)
    x=np.zeros(n)
    x[n-1]=b[n-1]/A[n-1, n-1]
    for i in range(n-2, -1, -1):
        r=0
        for j in range(i+1, min(n, i+s+1)):
            r=r+A[i,j]*x[j]
        x[i]=(b[i]-r)/A[i,i]
    return x
```

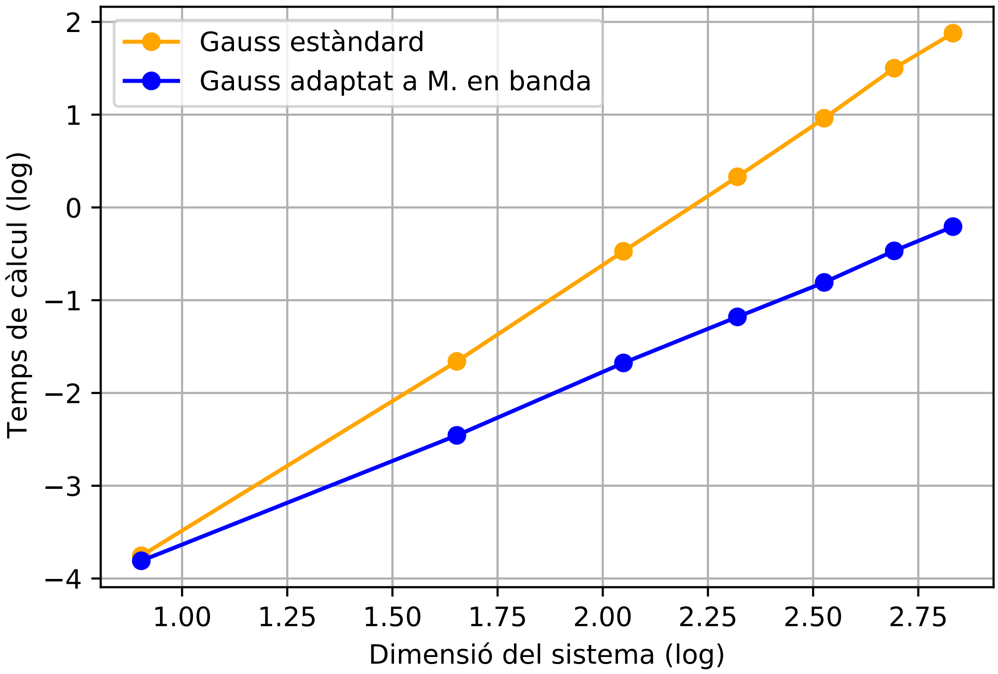
3. Modifica l'arxiu `calor2d.py` per poder resoldre el problema de la calor per diferents nivells de refinament (`nRefinament` = 1, 2, ..., 7). Per cada refinament cal guardar:

- **La dimensió del sistema.**
- **El temps de càlcul emprat en resoldre el sistema mitjançant el mètode de Gauss per matrius plenes i el mètode adaptat a matrius en banda.**
- **El número de coeficients no nuls de la matriu original i després de l'eliminació gaussiana.**

Prenem el logaritme en base 10. El temps de càlcul de Gauss adaptat a matrius en banda en funció de la dimensió del sistema té un pendent d'entre 1.5 i 2 mentre que el pendent referent a l'algorisme estàndard de Gauss és major, proper a 3. En efecte, això és coherent amb el que s'ha explicat a l'apartat 1 i il·lustra el temps de càlcul que ens estalviem si adaptem l'algorisme a matrius amb banda.

En segon lloc, observem que la matriu resultant de l'eliminació Gaussiana té més coeficients no nuls que la matriu del sistema original, i aquesta diferència s'eixampla a mesura que augmenta la dimensió del sistema. Sabem que els mètodes directes mantenen l'*skyline* i, a més, veiem que la matriu del sistema original presenten una banda força buida. Després de l'eliminació Gaussiana, tots els coeficients nuls dins de l'amplada de banda ara són coeficients no nuls.

Gràfica 1 – *Logaritme del temps de càlcul en funció del logaritme de la dimensió del sistema*



Gràfica 2 – *Logaritme del número de coeficients no nuls en funció del logaritme de la dimensió del sistema*