



DEPARTAMENTO
DE COMPUTACION

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA

Trabajo Práctico I

Métodos Numéricos
Segundo Cuatrimestre de 2015

Integrante	LU	Correo electrónico
Iván Arcuschin	678/13	iarcuschin@gmail.com
Martín Jedwabny	885/13	martiniedva@gmail.com
José Massigoge	954/12	jmmassigoge@gmail.com
Iván Pondal	??/??	ivan.pondal@gmail.com



Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires

Ciudad Universitaria - (Pabellón I/Planta Baja)

Intendente Güiraldes 2160 - C1428EGA

Ciudad Autónoma de Buenos Aires - Rep. Argentina

Tel/Fax: (54 11) 4576-3359

<http://www.fcen.uba.ar>

Índice

1. Introducción	3
2. Modelo	4
2.1. Descripción	4
2.2. Representación del sistema	5
3. Demostración: Eliminación Gaussiana sin pivoteo	6
4. Implementación	8
4.1. Eliminación Gaussiana	8
4.1.1. Descripción del método	8
4.1.2. Utilizando que la matriz es Banda	8
4.2. Factorización LU	9
4.2.1. Descripción del método	9
4.3. Determinación de la Isoterma	9
4.3.1. Promedio simple	9
4.3.2. Búsqueda binaria mediante sistemas de ecuaciones	9
4.3.3. Regresión lineal (Linear fit)	9
4.4. Evaluación del peligro de la estructura	9
5. Experimentación	10
5.1. Comportamiento del sistema	10
5.1.1. Distintas discretizaciones	10
5.1.2. Proximidad de la isoterma	10
5.2. Evaluación de los métodos	10
5.2.1. Tiempo de cómputo	10
5.2.2. Variación a lo largo del tiempo	10
6. Conclusión	11

1. Introducción

El objetivo de este Trabajo Práctico es implementar diferentes algoritmos de resolución de sistemas de ecuaciones lineales y experimentar con dichas implementaciones en el contexto de un problema de la vida real.

El problema a resolver es hallar la isoterma 500C en la pared de un Alto Horno. Para tal fin, deberemos particionar la pared del horno en puntos finitos, y luego resolver un sistema de ecuaciones lineales, en el cual cada punto de la pared interior y exterior del Horno es un dato, y las ecuaciones para los puntos internos satisfacen la ecuación del calor.

Los experimentos realizados se dividen en dos partes: Comportamiento del sistema y Evaluación de los métodos. En la primera parte, analizaremos con los distintas instancias de prueba y se estudiará la proximidad de la isoterma buscada respecto de la pared exterior del horno. En la segunda parte, analizaremos el tiempo de computo requerido para la resolución del sistema en función de la granularidad de la discretización y analizaremos el escenario en el cual las temperaturas de los bordes varían a lo largo del tiempo.

2. Modelo

2.1. Descripción

El Alto Horno está definido por las siguientes variables:

- El radio de la pared exterior: $r_e \in \mathbb{R}$
- El radio de la pared interior: $r_i \in \mathbb{R}$
- La temperatura en cada punto de la pared: $T(r, \theta)$, donde (r, θ) se encuentra expresado en coordenadas polares, siendo r el radio y θ el ángulo polar de dicho punto.

Son datos del problema, las temperaturas de la pared interior y exterior:

- $T(r_i, \theta) = T_i$ para todo punto (r, θ) con $r \leq r_i$
- $T(r_e, \theta) = T_e(\theta)$ para todo punto (r_e, θ)

La Figura 1 muestra las variables al tomar una sección circular del horno.



Figura 1: Sección circular del horno

En el estado estacionario, cada punto de la pared satisface la ecuación del calor:

$$\frac{\partial^2 T(r, \theta)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T(r, \theta)}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T(r, \theta)}{\partial \theta^2} = 0 \quad (1)$$

Para resolver este problema computacionalmente, discretizamos el dominio del problema (el sector A) en coordenadas polares. Consideramos una partición $0 = \theta_0 < \theta_1 < \dots < \theta_n = 2\pi$ en n ángulos discretos con $\theta_k - \theta_{k-1} = \Delta\theta$ para $k = 1, \dots, n$, y una partición $r_i = r_0 < r_1 < \dots < r_m = r_e$ en $m + 1$ radios discretos con $r_j - r_{j-1} = \Delta r$ para $j = 1, \dots, m$.

El problema ahora consiste en determinar el valor de la función T en los puntos de la discretización (r_j, θ_k) que se encuentren dentro del sector A. Llamemos $t_{jk} = T(r_j, \theta_k)$ al valor (desconocido) de la función T en el punto (r_j, θ_k) .

Para encontrar estos valores, transformamos la ecuación (1) en un conjunto de ecuaciones lineales sobre las incógnitas t_{jk} , evaluando (1) en todos los puntos de la discretización que se encuentren dentro del sector A. Al hacer esta evaluación, aproximamos las derivadas parciales de T en (1) por medio de las siguientes fórmulas de diferencias finitas:

$$\frac{\partial^2 T(r, \theta)}{\partial r^2}(r_j, \theta_k) \cong \frac{t_{j-1,k} - 2t_{jk} + t_{j+1,k}}{(\Delta r)^2} \quad (2)$$

$$\frac{\partial T(r, \theta)}{\partial r}(r_j, \theta_k) \cong \frac{t_{j,k} - t_{j-1,k}}{\Delta r} \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 T(r, \theta)}{\partial \theta^2}(r_j, \theta_k) \cong \frac{t_{j,k-1} - 2t_{jk} + t_{j,k+1}}{(\Delta \theta)^2} \quad (4)$$

2.2. Representación del sistema

Para representar el sistema de ecuaciones presentado, se utilizará una matriz simple, implementada como un vector de vectores. A continuación, se muestra como quedaría la matriz para las ecuaciones de los puntos $t_{0,0}$, $t_{0,n-1}$, $t_{i,j}$, $t_{m,0}$ y $t_{m,n-1}$.

$$\begin{array}{c} \begin{array}{cccccccccccccccc} & t_{0,0} & \dots & t_{0,n-1} & \dots & t_{i-1,j} & \dots & t_{i,j-1} & & t_{i,j} & & t_{i,j+1} & \dots & t_{i+1,j} & \dots & t_{m,0} & \dots & t_{m,n-1} & & b \end{array} \\ \begin{array}{l} t_{0,0} \\ \vdots \\ t_{0,n-1} \\ \vdots \\ t_{i,j} \\ \vdots \\ t_{m,0} \\ \vdots \\ t_{m,n-1} \end{array} \left[\begin{array}{cccccccccccccccc} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & & 0 & & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & & t_{0,0} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & & 0 & & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & & t_{0,n-1} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & \beta - \gamma & \dots & \alpha & -2\alpha - 2\beta + \gamma & \alpha & \dots & \beta & \dots & 0 & \dots & 0 & & 0 & & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & & 0 & & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & \dots & 0 & & t_{m,0} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & & 0 & & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & & t_{m,n-1} \end{array} \right] \end{array}$$

Donde,

- $\alpha = \frac{1}{(\Delta \theta)^2 * r^2}$
- $\beta = \frac{1}{(\Delta r)^2}$
- $\gamma = \frac{1}{(\Delta r) * r}$
- $0 < i < n$
- $0 < j < m + 1$

Notese que la ecuación del punto $t_{i,j}$ tiene ceros en todas sus celdas, excepto en las correspondientes a $t_{i-1,j}$, $t_{i,j}$, $t_{i+1,j}$, $t_{i,j-1}$ y $t_{i,j+1}$. Se puede ver que para cada fila de la matriz, hay una “banda” de tamaño $2n$ alrededor de la diagonal donde hay 5 elementos que no son cero.

3. Demostración: Eliminación Gaussiana sin pivoteo

Proposición 1. Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz obtenida para el sistema definido por las ecuaciones del Modelo, en donde u y v corresponden a la cantidad de radios y ángulos, tal que $n = uv$. Demostrar que es posible aplicar Eliminación Gaussiana sin pivoteo.

Demostración. Para poder demostrar la proposición, utilizamos los siguientes lemas (que luego serán demostrados):

(L_1) A es una matriz banda.

(L_2) A es diagonal dominante (no estricta).

(L_3) En cada paso k , con $0 \leq k \leq n - 1$, de la Eliminación Gaussiana, para cada fila i de $A^{(k)}$, existe, al menos, un $a_{i,j} \neq 0$, con $j = 0, \dots, n - 1$

Por L_2 sabemos que A es diagonal dominante (no estricta) y por definición del Modelo sabemos que $a_{0,0} = 1$. Sea $A^{(1)}$ la matriz resultante luego de aplicar un paso de la Eliminación Gaussiana. Para toda fila $i = 1, \dots, n - 1$ se cumple que:

$$a_{i,j}^{(1)} = a_{i,j}^{(0)} - \frac{a_{0,j}^{(0)} a_{i,0}^{(0)}}{a_{0,0}^{(0)}}, \text{ para } 1 \leq j \leq n - 1$$

Sabemos que $a_{i,0}^{(1)} = 0$. Luego:

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} |a_{i,j}^{(1)}| &= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} \left| a_{i,j}^{(0)} - \frac{a_{0,j}^{(0)} a_{i,0}^{(0)}}{a_{0,0}^{(0)}} \right| \\ &\leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} |a_{i,j}^{(0)}| + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} \left| \frac{a_{0,j}^{(0)} a_{i,0}^{(0)}}{a_{0,0}^{(0)}} \right| \\ &\leq |a_{i,i}^{(0)}| - |a_{i,0}^{(0)}| + \frac{|a_{i,0}^{(0)}|}{|a_{0,0}^{(0)}|} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} |a_{0,j}^{(0)}| \\ &\leq |a_{i,i}^{(0)}| - |a_{i,0}^{(0)}| + \frac{|a_{i,0}^{(0)}|}{|a_{0,0}^{(0)}|} (|a_{0,0}^{(0)}| - |a_{0,i}^{(0)}|) \\ &= |a_{i,i}^{(0)}| - \frac{|a_{i,0}^{(0)}| |a_{0,i}^{(0)}|}{|a_{0,0}^{(0)}|} \\ &\leq \left| a_{i,i}^{(0)} - \frac{a_{i,0}^{(0)} a_{0,i}^{(0)}}{a_{0,0}^{(0)}} \right| = |a_{i,i}^{(1)}| \end{aligned}$$

Por lo tanto, el dominio diagonal no estricto se establece en los renglones $1, \dots, n - 1$, y como el primer renglón de $A^{(1)}$ y de A son iguales, $A^{(1)}$ será diagonal dominante no estricto.

Este proceso lo podemos repetir hasta obtener $A^{(n-1)}$ que será diagonal dominante no estricto. Por L_3 podemos afirmar que todos los elementos de la diagonal son no cero, por lo tanto es posible aplicar Eliminación Gaussiana sin pivoteo. \square

Lema 2. A es una matriz banda

Demostración. COMPLETAR \square

Lema 3. A es diagonal dominante (no estricta).

Demostración. Por definición, una matriz es diagonal dominante (no estrictamente) cuando se cumple que, $\forall i = 0, 1, \dots, n-1$:

$$|a_{i,i}| \geq \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n-1} |a_{i,j}|$$

Esta desigualdad es evidente para las primeras y ultimas u filas, ya que el unico valor distinto de 0 se encuentra en la diagonal. Falta ver el caso para el resto de A . Tenemos que probar que para fila, se cumple:

$$|-2\alpha - 2\beta + \gamma| \geq |\beta - \gamma| + |\alpha| + |\alpha| + |\beta|$$

Por definicion sabemos que $|\alpha| = \alpha$ y $|\beta| = \beta$

COMPLETAR

□

Lema 4. En cada paso k , con $0 \leq k \leq n-1$, de la Eliminación Gaussiana, para cada fila i de $A^{(k)}$, existe, al menos, un $a_{i,j} \neq 0$, con $j = 0, \dots, n-1$

Demostración. Lo probamos por Induccion en la cantidad k de pasos de la Eliminación Gaussiana, utilizando L_1 .

Caso base: $A^{(0)} = A$

1. Para las primeras y ultimas u filas, el elemento de la diagonal es 1.
2. Para el resto de las filas, basta ver que algun valor es distinto de 0. Por definicion sabemos que $\beta \neq 0$

Paso Inductivo: Queremos ver que en el paso k de la Eliminación Gaussiana, para cada fila i de $A^{(k)}$, existe, al menos, un $a_{i,j} \neq 0$, con $j = 0, \dots, n-1$

Sabemos, por definición del procedimiento de Eliminación Gaussiana, que las filas $i = 0, \dots, k$ de $A^{(k)}$ son iguales a las de $A^{(k-1)}$, por lo tanto, por Hipotesis Inductiva, existe, al menos, un $a_{i,j} \neq 0$, con $j = 0, \dots, n-1$.

Queda por ver que sucede con las filas $i = k+1, \dots, n-1$ de $A^{(k)}$. Tenemos dos casos:

1. Filas que tienen un valor (β) como extremo derecho de la banda
2. Filas que no tienen valores en los extremos de las bandas (las filas correspondientes a las u primeras y ultimas de A)

COMPLETAR (POSIBLE PROBLEMA)

□

4. Implementación

4.1. Eliminación Gaussiana

4.1.1. Descripción del método

El método de Eliminación Gaussiana consiste en una serie de pasos que permiten resolver un sistema de ecuaciones lineales de, en principio, n ecuaciones y n variables.

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz tal que el elemento en la fila i y columna j ($a_{i,j}$) representa el coeficiente de la variable j en la ecuación i . Y sea $b \in \mathbb{R}^n$ el vector tal que el elemento en la fila i (b_i) representa el término independiente en la ecuación i .

Podemos dividir el método en 2 partes centrales:

1. Llevar la matriz A a una forma **Triangular Superior**, es decir, una matriz equivalente a A tal que tiene ceros debajo de los elementos de la diagonal. El siguiente pseudocódigo muestra como es el algoritmo para realizar esta tarea:

```
Para j desde 0 hasta n-1 hacer:
  Poner pivote = A[j][j]
  Para i desde j+1 hasta n-1 hacer:
    Poner coeficiente = A[i][j] / pivote
    Poner A[i][j] = 0
    Para k desde j+1 hasta n-1 hacer:
      Poner A[i][k] = A[i][k] - coeficiente * A[j][k]
    Fin para
    b[i] = b[i] - coeficiente * b[j]
  Fin para
Fin para
```

Notese que no validamos que la variable “pivote” sea distinta de cero. Esto es así ya que por la forma en la que se modeló el problema el pivote siempre es distinto de cero.

2. **Resolver el sistema equivalente** que obtuvimos en el paso anterior. Para esto, vamos a utilizar que la matriz es Triangular Superior. La idea es empezar despejando el valor de la n -ésima variable, luego usar este valor para despejar la $(n-1)$ -ésima variable, y así sucesivamente hasta la primera variable. En pseudocódigo:

```
Poner X = vector de n elementos
Para i desde n-1 hasta 0 hacer:
  Poner X[i] = b[i]
  Para j desde i+1 hasta n-1 hacer:
    Poner X[i] = X[i] - U[i][j] * X[j]
  Fin para
  Poner X[i] = X[i] / U[i][i]
Fin para
```

Donde U es la matriz que calculamos en el paso 1.

4.1.2. Utilizando que la matriz es Banda

Si miramos la matriz con la cual representamos el modelo del problema, podemos ver que alrededor de los elementos de la diagonal hay una “banda” de tamaño $2n$. Es decir, si quisieramos poner elementos debajo del elemento $a_{i,i}$, nos bastaría con modificar las filas desde $i+1$ hasta $i+2n+1$, ya que $\forall a_{j,i}, j > i+2n+1 \implies a_{j,i} = 0$.

Usando esto podemos optimizar significativamente el primer paso de la Eliminación Gaussiana, que consiste en hallar la matriz equivalente Triangular Superior. El pseudocódigo es el siguiente:


```
Para j desde 0 hasta n-1 hacer:
  Poner pivote = A[j][j]
  Poner inicioBanda = max(i+1, n)
  Poner finBanda = min(n, inicioBanda + n)
  Para i desde inicioBanda hasta finBanda hacer:
    Si A[i][j] != 0 hacer:
      Poner coeficiente = A[i][j] / pivote
      Poner A[i][j] = 0
      Para k desde j+1 hasta n-1 hacer:
        Poner A[i][k] = A[i][k] - coeficiente * A[j][k]
      Fin para
      b[i] = b[i] - coeficiente * b[j]
    Fin si
  Fin para
Fin para
```

4.2. Factorización LU

4.2.1. Descripción del método

4.3. Determinación de la Isoterma

Recordemos que nuestra discretización particiona una sección circular del Alto Horno de la siguiente forma:

- $0 = \theta_0 < \theta_1 < \dots < \theta_n = 2\pi$ en n ángulos discretos, y
- $r_i = r_0 < r_1 < \dots < r_m = r_e$ en $m + 1$ radios discretos

Luego, para cada ángulo j tenemos los puntos: $t_{i,j}$ con $0 \leq i \leq m$.

Entonces, hallar la isoterma C equivale a, para cada ángulo j , hallar el radio r_C tal que $T(r_C, \theta_j) = C$.

4.3.1. Promedio simple

Este método consiste en, dado un ángulo j , buscar un punto $t_{i,j}$ tal que $t_{i,j} \leq C \leq t_{i+1,j}$.

Una vez hallado este punto, tenemos que $r_C = \frac{r_i + r_{i+1}}{2}$.

4.3.2. Búsqueda binaria mediante sistemas de ecuaciones

4.3.3. Regresión lineal (Linear fit)

4.4. Evaluación del peligro de la estructura

En función de la aproximación de la isoterma, proponer una forma (o medida) a utilizar para evaluar la peligrosidad de la estructura en función de la distancia a la pared externa del horno.

5. Experimentación

5.1. Comportamiento del sistema

5.1.1. Distintas discretizaciones

5.1.2. Proximidad de la isoterma

5.2. Evaluación de los métodos

5.2.1. Tiempo de cómputo

5.2.2. Variación a lo largo del tiempo

6. Conclusión