



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	10
4.4.1. Proximidad porcentual simple	10
4.4.2. Proximidad porcentual promediada	10
5. Experimentación	12
5.1. Comportamiento del sistema	12
5.1.1. Distintas discretizaciones	12
5.1.2. Proximidad de la isoterma	12
5.2. Evaluación de los métodos	12
5.2.1. Tiempo de cómputo	12
5.2.2. Variación a lo largo del tiempo	12
6. Conclusión	13

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.

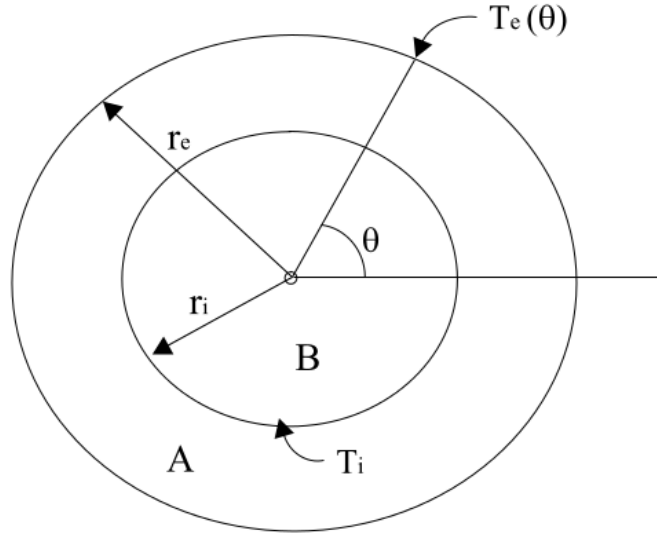


Figura 1: Sección circular del horno

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 $t_{m,n-1}$.

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

Figura 2: Matriz del Sistema

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 respectivamente de la discretización, tal que $n = uv$. Demostrar que es posible aplicar Eliminación Gaussiana sin pivoteo.

Para poder demostrar la proposición, utilizamos los siguientes lemas, que demostramos a continuación:

(L_1) A es una matriz banda.

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

Lema 2. A es una matriz banda

Demostración. MUESTRO LA MATRIZ Y SU FORMA Vease Figura 2 □

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 últimas v filas, ya que el único 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 definición sabemos que $|\alpha| = \alpha$ y $|\beta| = \beta$

COMPLETAR □

Demostración. 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:

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

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.

Sin embargo, falta ver que para cada paso, k , de la Eliminación Gaussiana, el elemento de la diagonal, $a_{k,k}$ de $A^{(k)}$, es distinto de 0. Para poder demostrar esto, usamos L_2 y la forma específica de A dada por el Modelo. Veamos los distintos casos:

- Para $0 \leq k \leq v-1$, sabemos que $a_{k,k}^{(k)} = a_{k,k}^{(0)} = 1$, ya que $\forall j = 0, \dots, n-1 \wedge j \neq k, a_{k,j}^{(k)} = 0$, es decir los valores de la diagonal de las v primeras filas no cambian en los primeros v pasos de la Eliminación Gaussiana, debido a que esas filas solo tienen un valor distinto de 0 en la diagonal, valor que no es afectado por las filas que las preceden, por definición del procedimiento de Eliminación Gaussiana.
- Para $v \leq k \leq n-v-1$, sabemos que para $k = v$, $a_{k,k}^{(k)} = a_{k,k}^{(0)}$, (mismo argumento del punto anterior), basta ver que sucede en el resto de los casos. Sabemos, por la forma del Modelo, que esta franja de filas definen la banda de $A^{(0)}$, en particular la banda q en $A^{(0)}$ esta compuesta por los valores β_i , donde i representa su fila. Por lo tanto estos valores no varían cuando $k \leq i$, es decir $a_{i,j}^{(k)} = a_{i,j}^{(0)}$ donde j es la columna de β_i , y como ya vimos que todos los $\beta_i \neq 0$, sumado al hecho, ya demostrado, que se preserva la característica de diagonal dominante, podemos concluir que $a_{k,k}^{(k)} \neq 0$.
- Por último para $n-v \leq k \leq n-1$, tenemos la misma situación que las primeras v filas.

Habiendo demostrado que los elementos de la diagonal, en cada paso de la Eliminación Gaussiana, son distintos de 0, podemos concluir que es posible aplicar Eliminación Gaussiana sin pivoteo.

□

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 termino 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.** 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 quisiéramos 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
```

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 $t_{i,j}$ en la solución del sistema 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)

Este método utiliza el algoritmo de regresión lineal para, dado un ángulo j , y usando todos los puntos $t_{i,j}$ con $0 \leq i \leq m$, hallar una función lineal que aproxime dichos puntos lo mejor posible. Como la función que estamos buscando es lineal, es de la forma: $y(x) = a + bx$, donde b es el coeficiente principal, a el termino independiente, x es un radio sobre el ángulo j y $y(x)$ es la temperatura para dicho radio.

Luego, el algoritmo de regresión lineal básicamente utiliza la minimización de la suma de las distancias al cuadrado desde los puntos a la función lineal. Esto se logra calculando la derivada con respecto a a y b y fijando estos en cero.

Entonces, si definimos:

$$\bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m r_i \quad \bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m t_{i,j}$$
$$S_x = \sum_{i=0}^m (r_i - \bar{x})^2 \quad S_{xy} = \sum_{i=0}^m (r_i - \bar{x})(t_{i,j} - \bar{y})$$

Tenemos que:

$$b = \frac{S_{xy}}{S_x} \quad a = \frac{\bar{y} - b\bar{x}}{m}$$

Una vez obtenidos a y b , para hallar la isoterma C en el ángulo j , basta con calcular:

$$r_C = |C - a|/b$$

En pseudocódigo:

```

Poner solucion = vector de n elementos
Para j desde 0 hasta n hacer:
    Poner avgX = 0
    Poner avgY = 0
    Para i desde 0 hasta m hacer:
        Poner avgX = avgX + ri
        Poner avgY = avgY + ti,j
    Fin para
    Poner avgX = avgX / m
    Poner avgY = avgY / m
    Poner numerador = 0
    Poner denominador = 0
    Para i desde 0 hasta m hacer:
        Poner numerador = numerador + (ri - avgX) * (ti,j - avgY)
        Poner denominador = denominador + (ri - avgX) * (ri - avgX)
    Fin para
    Si denominador == 0 hacer:
        Poner denominador = 1
    Fin si
    Poner coeficiente = numerador / denominador
    Poner independiente = (avgY - slope * coeficiente) / m
    Poner solucion[j] = abs(C - independiente) / coeficiente
Fin para

```

4.4. Evaluación del peligro de la estructura

Una vez obtenida la isoterma C , queremos evaluar la peligrosidad de la estructura en función de la distancia de la isoterma a la pared externa del horno. En este sentido, estamos asumiendo que la temperatura C es elevada y que mientras más cercana está la temperatura de la pared externa a C , entonces más peligrosa es la estructura.

En base a esto, proponemos dos medidas distintas para evaluar la peligrosidad.

4.4.1. Proximidad porcentual simple

Para cada ángulo j , podemos calcular el coeficiente porcentual $\Delta_j(C) = (r_e - r_C)/(r_e - r_i)$, donde r_e es el radio de la pared externa del horno, r_i el radio de la pared interna, y r_C el radio de la isoterma C para el ángulo j .

Notese que $r_i \leq r_C \leq r_e$, y por lo tanto si $r_C = r_i \implies \Delta_j(C) = 1$, y si $r_C = r_e \implies \Delta_j(C) = 0$.

De esta forma, podemos definir un ε_C , con $0 < \varepsilon_C < 1$, tal que decimos que la estructura se encuentra en peligro si:

$$\varepsilon_C \geq \min_{1 \leq j \leq n-1} (\Delta_j(C))$$

4.4.2. Proximidad porcentual promediada

En la medida anterior, podría pasar que para un j' dado $\Delta_{j'}(C) < \varepsilon_C$ pero el resto de los $\Delta_j(C)$ sean mayores a ε_C , en cuyo caso, igualmente la estructura sería catalogada como peligrosa.

Entonces, querriamos dar una medida de la peligrosidad de la estructura que tome en cuenta todos los angulos. Para esto, vamos a tomar el promedio de todos los $\Delta_j(C)$, definidos como en la medida anterior para cada ángulo j , y decimos que la estructura se encuentra en peligro si:

$$\Delta(C) = \frac{\sum_{j=1}^n \Delta_j(C)}{n} \leq \varepsilon_C$$

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