Métodos Numéricos TP1

3 de septiembre de 2015

Integrante	LU	Correo electrónico
Martin Baigorria	575/14	martinbaigorria@gmail.com
Federico Beuter	827/13	federicobeuter@gmail.com
Mauro Cherubini	835/13	cheru.mf@gmail.com
Rodrigo Kapobel	695/12	$rok_35@live.com.ar$

Reservado para la cátedra

Instancia	Docente	Nota
Primera entrega		
Segunda entrega		

Resumen: El siguiente trabajo practico tiene como objetivo implementar, utilizar y evaluar el método de eliminación gausiana y la factorización LU para resolver un problema que involucra la propagación del calor en la pared de un horno descripta con un laplaciano. Para ello se discretizara esta ecuación diferencial y luego se planteara un sistema matricial de la forma Ax = b para calcular la temperatura en los diferentes puntos de la discretizacion en la pared del horno. Se analizaran diferentes escenarios en las condiciones del problema para evaluar en que escenarios una factorización supera a la otra. Se evaluaran algunas cuestiones relacionadas con el problema en sí, como por ejemplo la presición de un algoritmo de búsqueda de isotermas en la pared del horno y la velocidad de convergencia a la isoterma empírica. Finalmente concluiremos que la factorización LU supera ampliamente a la eliminación gausiana en cuanto a complejidad temporal en escenarios donde cambia el vector b de forma recurrente. A su vez, notamos que la presición del algoritmo de búsqueda de isotermas no es estrictamente decreciente en función de la discretización, aunque por supuesto mejora a medida que aumenta en múltiplos de 2.

Keywords: Gaussian Elimination, LU Factorization.

${\rm \acute{I}ndice}$

1.	Introducción	3
2.	Desarrollo 2.1. Discretización	4 5 5 6 6 7 7 7
3.	3.1. Metodología	10 10 10 11 12 12 13 14
4.	Conclusiones	15
5.	Apéndice A: Enunciado	16
6.	F	19 19 23 27

1. Introducción

Existe una gran variedad de problemas que pueden ser modelados por medio de sistemas de equaciones lineales. Estas ecuaciones pueden ser expresadas mediante un sistema matricial que se puede escribir de la forma Ax = b donde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ y $x, b \in \mathbb{R}^{n \times 1}$. Una vez representado, se debe buscar alguna forma de resolver el sistema, es decir, buscar el vector x. Existen numerosas maneras de resolver este problema, entre ellas tenemos por ejemplo el clásico algoritmo de eliminación gaussiana y la factorización LU.

El objetivo de este trabajo práctico es modelar y resolver el problema de la difusión del calor en la pared de un horno circular. A priori, lo que sabemos es que el calor se propaga siguiendo la ecuación diferencial dada por el laplaciano en función del ángulo y la distancia desde el centro del horno. Aunque esta ecuación diferencial tiene una solución analítica, el trabajo practico apunta a que modelemos este problema discretizando el dominio en coordenadas polares y planteando el sistema de ecuaciones dado por el laplaciano de forma matricial. De esta forma podemos encontrar una aproximación de la temperatura en cada punto de la discretización.

Por cuestiones de seguridad e integridad estructural del horno, la isoterma 500°C (una curva inducida por la temperatura interna y externa, y en donde la temperatura es efectivamente de 500°C) deberá hallarse en el rango definido entre el radio interno y externo de la pared. Por esta razón, una vez calculada la temperatura aproximada en diferentes puntos de la discretización, tendremos como objetivo encontrar de alguna forma ésta isoterma, y asi comprobar la estabilidad del horno. Para ello propondremos diferentes algoritmos que aprovechen dicha discretización para aproximar la ubicación de la misma. Estas problemáticas pueden verse claramente en las siguientes figuras:

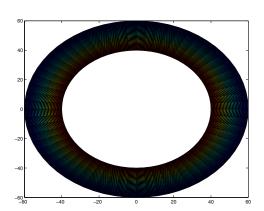


Figura 1: Heat map.

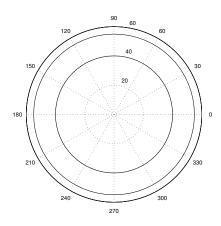


Figura 2: Isoterma.

En el heat map se puede ver como la temperatura representada con colores va bajando a medida que uno se aleja de la pared interna del horno. A su vez, en el gráfico de la isoterma podemos ver la pared interna del horno y la isoterma 500°C. En este caso, dado que no toca la pared externa del horno decimos que el mismo es estable. Notar que las isotermas no necesariamente son circulares, dado que la temperatura externa puede variar dependiendo del angulo. Este es simplemente un ejemplo ilustrativo.

En un primer momento, implementaremos y experimentaremos con el método de eliminación gausiana y la factorización LU. Evaluaremos que método es mejor dependiendo de las diferentes condiciones del horno y del grado de granularidad. A su vez analizaremos que método se comporta mejor al tener condiciones de temperatura variables, como por ejemplo en el caso en el que el vector de variables independientes b_t varie con el tiempo. A priori, sabemos que para una única instancia la eliminación gaussiana y la factorización LU pertenecen a $\mathcal{O}(n^3)$. Esto se debe a que la eliminación gaussiana simplemente transforma el sistema original en uno equivalente que es triangular superior en $\mathcal{O}(n^3)$, en donde n es el numero de incógnitas. Luego se resuelve este sistema en $\mathcal{O}(n^2)$. Por otro lado, la factorización LU transforma el sistema original en un sistema del tipo LUx = b, donde L es una matriz triangular inferior y U es una matriz triangular superior en costo $\mathcal{O}(n^3)$. Finalmente, se resuelven los sistemas Ly = b y Ux = y para obtener una solución x en $\mathcal{O}(n^2)$.

En términos asintóticos, ambos métodos tienen la misma complejidad. Sin embargo, la factorización LU tiene la ventaja de que para instancias adicionales la solución del sistema se puede computar en $\mathcal{O}(n^2)$, mientras que la eliminación gaussiana debe repetir todo el procedimiento nuevamente en $\mathcal{O}(n^2)$. Por lo tanto, esperamos que la experimentación confirme este resultado teórico a medida que aumentemos la dimension y el número de instancias.

Una parte importante de este trabajo práctico es evaluar la integridad estructural de los hornos. Por lo tanto, analizaremos la velocidad de convergencia de nuestro algoritmo a la isoterma teórica dependiendo del nivel de discretización y de las variables del horno. Finalmente analizaremos el trade off entre tiempo de ejecución y que tan buenas son las aproximaciones de la isoterma al cambiar la granularidad.

2. Desarrollo

Dado el problema del horno, en primer lugar debemos modelarlo. Consideremos la sección horizontal de un horno de acero cilíndrico como el de la siguiente figura. El sector A es la pared del horno, y el sector B es el interior del mismo, en el cual se funde el acero a temperaturas elevadas. Tanto el borde externo como el borde interno de la pared son circulares con un centro en común. Suponemos que la temperatura del acero dentro del horno es constante e igual a 1500°C.

Existen sensores ubicados en la parte externa del horno para medir la temperatura exterior. La misma se encuentra habitualmente entre 50°C y 200°C. El problema que debemos resolver consiste en estimar la isoterma de 500°C dentro de la pared del horno. Si esta isoterma está demasiado cerca de la pared externa del horno, existe el riesgo que la integridad estructural del horno este comprometida.

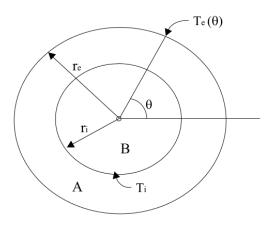


Figura 3: Sección circular del horno

Sea $r_e \in \mathbb{R}$ el radio exterior de la pared y sea $r_i \in \mathbb{R}$ el radio interior de la pared. Llamemos $T(r, \theta)$ a la temperatura en el punto dado por las coordenadas polares (r, θ) , siendo r el radio y θ el angulo polar de dicho punto. En el estado estacionario, esta temperatura satisface la ecuación del calor dada por el laplaciano:

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

Para resolver esta ecuación de forma numérica, discretizamos la superficie de la pared como en la siguiente figura y luego aproximamos las derivadas parciales utilizando diferencias finitas.

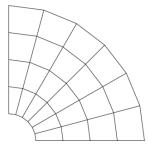


Figura 4: Discretización de la pared del horno.

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

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

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

Reemplazando la aproximación numérica en el laplaciano y el radio por su respectiva discretización obtenemos:

$$\frac{t_{j-1,k} - 2t_{jk} + t_{j+1,k}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j} \frac{t_{j,k} - t_{j-1,k}}{\Delta r} + \frac{1}{r_j^2} \frac{t_{j,k-1} - 2t_{jk} + t_{j,k+1}}{(\Delta \theta)^2} = 0$$

Donde $r_j = r_i + j \times \Delta r$, $\Delta r = \frac{(r_e - r_i)}{m}$ y $\Delta \theta = \frac{2\pi}{n}$. De esta manera aproximamos de forma discreta la ecuación diferencial dada por el laplaciano.

Si llamamos $T_i \in \mathbb{R}$ a la temperatura en el interior del horno (sector B) y $T_e: [0,2\pi] \to \mathbb{R}$ a la función de temperatura en el borde exterior del horno (de modo tal que el punto (r_e, θ) tiene temperatura $T_e(\theta)$), entonces tenemos que

$$T(r,\theta) = T_i \quad para\ todo\ punto\ (r,\theta)\ con\ r \le r_i$$
 (5)

$$T(r_e, \theta) = T_e(\theta)$$
 para todo punto (r_e, θ) (6)

2.1. Discretización

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

De esta manera, terminamos con un sistema de (m+1) * n ecuaciones lineales, que puede ser experesado como Ax = b. Para cada temperatura $t_{j,k}$, tendremos un laplaciano. Esto no sucede con los valores de las temperaturas en las puntas, donde ya a priori sabemos el valor final t_i y $t_e(\theta)$. Estas temperaturas en las puntas formaran parte del vector de valores independientes b al armar el sistema, al que le corresponde un canónico. La discretización muchas veces depende de los valores anteriores y posteriores, por lo que hay que tener cuidado de no caer en uno de estos casos borde al formular el sistema.

2.2. Sistema Lineal

Para formular el sistema lineal, en primer lugar debemos despejar cada una de las variables $t_{j,k}$ de la aproximación discreta del laplaciano:

$$\frac{t_{j-1,k} - 2t_{j,k} + t_{j+1,k}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_i} \frac{t_{j,k} - t_{j-1,k}}{\Delta r} + \frac{1}{r_i^2} \frac{t_{j,k-1} - 2t_{j,k} + t_{j,k+1}}{(\Delta \theta)^2} = 0$$

Reescribiendo:

$$\alpha_{j,k} \times t_{j,k} + \alpha_{j-1,k} \times t_{j-1,k} + \alpha_{j+1,k} \times t_{j+1,k} + \alpha_{j,k+1} \times t_{j,k+1} + \alpha_{j,k-1} \times t_{j,k-1} = 0$$

Donde:

$$\alpha_{j,k} = \frac{-2}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j \times \Delta r} + \frac{-2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2}$$
(7)

$$\alpha_{j,k+1} = \frac{1}{r_j^2 \times (\Delta\theta)^2} \tag{8}$$

$$\alpha_{j,k-1} = \frac{1}{r_j^2 \times (\Delta\theta)^2} \tag{9}$$

$$\alpha_{j+1,k} = \frac{1}{(\Delta r)^2} \tag{10}$$

$$\alpha_{j-1,k} = \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \times \Delta r} \tag{11}$$

2.2.1. Matriz del sistema

Con las ecuaciones (7)-(11) armamos la matriz del sistema, en donde los coeficientes serán los α anteriores, expresando en cada fila su valor para cada temperatura. Hay que tener en cuenta que en todas las ecuaciones habrá un α para cada uno de los $t_{j,k}$, valiendo 0 en aquellos casos en que no aparezca dicha incógnita, 1 en caso de ser t_i o $t_e\theta$, o en su defecto α como se han definido en el desarrollo anterior.

Por cuestiones de optimización organizamos la matriz con el orden de sus columnas (inducidas por los $t_{k,j}$), de acuerdo al orden de aparición impartido por el recorrido de θ_0 a θ_{n-1} (variando el radio luego de cada vuelta) desde r_i hasta r_e inclusive.

Gráficamente dicha matriz queda definida de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{0,0} & \alpha_{0,1} & \cdots & \alpha_{0,(m+1)(n-1)} \\ \alpha_{1,0} & \alpha_{1,1} & \cdots & \alpha_{1,(m+1)(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{(m+1)(n-1),0} & \alpha_{(m+1)(n-1),1} & \cdots & \alpha_{(m+1)(n-1),(m+1)(n-1)} \end{pmatrix}$$

Notese que la indexación de los coeficientes empieza en 0, en vez de en 1 como es habitual; el motivo es el de generar una mayor cohesión con la idexación de las temperaturas, que a su vez, son indexadas de acuerdo a los r_i y los θ_i correspondientes (indexados efectivamente desde el 0).

Ahora bien como las primeras y últimas n filas corresponden al radio interior y exterior respectivamente, sabemos que en ese rango $\alpha_{jj} = 1$ y $\alpha_{ji} = 0, \forall j \neq i$. Lo que nos genera una matriz identidad de n*n en las esquinas superior izquierda e inferior derecha; dando además a la matriz del sistema la condición de matriz banda.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{n-2,0} & \cdots & \alpha_{n-2,n-2} & \cdots & \alpha_{n-2,(m+1)(n-1)-n} & \cdots & \alpha_{n-2,\dots} \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \alpha_{\dots,\dots} & \ddots & \alpha_{(m+1)(n-1)-n,n-2} & \cdots & \alpha_{(m+1)n-n,(m+1)(n-1)-n} & & \alpha_{\dots,\dots} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Si bien no se muestra explicitamente en la figura, para sistemas lo suficientemente grandes se podrá apreciar como debajo de la Id superior izquierda y arriba de la Id inferior derecha, se generan submatrices diagonales que estrecharan la anchura de la banda, dejandonos una matriz banda-n.

2.3. Isoterma

Una vez que resolvamos el sistema lineal, debemos buscar la isoterma. Dado que es una aproximación discreta, es muy probable que no encontremos valores de temperatura iguales a la curva de nivel. Por lo tanto debemos tener cierta tolerancia de error, o hasta interpolar de alguna manera las curvas de nivel adyacentes en la discretización. Es decir, debemos definir algún criterio de búsqueda sobre el vector b. Nuestros criterios de búsqueda se basaran en el supuesto de que a medida que nos alejamos del centro del horno en estado estacionario, las temperaturas serán menores. Una consideración sumamente importante en el contexto de nuestro problema: intentaremos buscar métodos que sean pesimistas, es decir, que sigan el principio de prudencia. Esto significa que nuestros algoritmos intentaran ubicar la aproximación de la isoterma mas cerca de la pared del horno de lo que efectivamente esta, para poder evaluar de forma certera si el horno es estructuralmente estable o no.

2.3.1. Algoritmo: Primer menor

El primer criterio de búsqueda consiste en tomar el primer valor de temperatura menor al que estamos buscando para cada angulo en la discretización. Esto se puede ver en el siguiente pseudo-código:

```
 \begin{array}{l} \mathbf{procedure} \  \, \mathrm{Lower} \\ \quad \mathrm{posicion} \leftarrow \mathrm{Vector}(|\mathrm{angulos}|) \\ \quad \mathbf{for} \ i \ \mathbf{in} \ \mathrm{angulos} \ \mathbf{do} \\ \quad \quad posicion_i \leftarrow \mathbf{primer} \ \mathbf{radio} \ \mathbf{con} \ \mathbf{temperatura} \ \mathbf{menor} \ \mathbf{a} \ \mathbf{la} \ \mathbf{isoterma} \\ \mathbf{return} \ \mathbf{posicion} \end{array}
```

2.3.2. Algoritmo: Promedio pesado

Este criterio buscara ubicar la isoterma de forma inteligente, buscando el valor mayor y menor entre los que se ubica la isoterma y haciendo un promedio pesado. Esto se puede ver en el siguiente pseudo-código:

2.4. Estabilidad del horno

Para determinar si el horno se encuentra en peligro, utilizamos la posicion de la isoterma y su distancia respecto al radio exterior. Esto se puede ver en el siguiente pseudo-código:

```
procedure IsStable(isoterma, radio_{ext}, distancia) for pos in isoterma do
if radio_{ext} - isoterma_{pos} \geq distancia then
return false
return true
```

La distancia es la posicion mas cercana a la pared externa donde puede ubicarse la isoterma segun el material de la pared.

2.5. Propiedades del sistema

Como ya se ha visto en la materia, no es posible aplicar los métodos propuestos para la resolución a cualquier sistema de ecuaciones. Por ello deberemos demostrar la siguiente proposición.

Proposición 2.1 Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz obtenida para el sistema definido por (1)-(6). Demostrar que es posible aplicar Eliminación Gaussiana sin pivoteo.

Con este proposito es que analizaremos algunas propiedades que satisface nuestra matriz, y como aún bajo el proceso de Eliminación Gaussiana, se mantienen fieles e invariantes.

A es d.d.(no estricta)

Demostremos primero que la matriz A del sistema lineal, definida como antes, cumple la propiedad de ser diagonal dominante (no estricta).

Esto en nuestro caso es pedir que:

$$|\alpha_{jj}| \ge \sum_{k=0, k \ne j}^{(m+1)(n-1)} |\alpha_{jk}|, \forall j \in \{0, ..., (m+1)(n-1)\}$$
 (12)

En el caso de que $j \in \{0,...,n-1\} \cup \{(m+1)(n-1)-n,...,(m+1)(n-1))\}$, es decir, que se trate de las primeras o últimas n filas, (12) es satisfecha trivialmente, pues $|\alpha_{jj}|=1 \geq \sum_{k=0,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} |\alpha_{jk}| = \underbrace{0+\ldots+0}_{(m+1)(n)} = 0$ pues $\alpha_{jk_{k\neq j}}=0$

Nos queda ver el caso contrario. Para ello debemos desarrollar la sumatoria y despejar los α_{jk} mediante (7)...(11), de los cuales los siguientes 5 seán los únicos α_{jk} distintos de 0.

De este caso, en particular llegaremos a una equivalencia.

$$|\alpha_{jj}| = |\alpha_{j+1k}| + |\alpha_{j-1k}| + |\alpha_{jk-1}| + |\alpha_{jk+1}| \tag{13}$$

$$\left| \frac{-2}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j \times \Delta r} + \frac{-2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right| = \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} \right| + \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \times \Delta r} \right| + \left| \frac{1}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right| + \left| \frac{1}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right| \tag{14}$$

$$\left| -\left(\frac{-2}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j \times \Delta r} + \frac{-2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right) \right| = \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} \right| + \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \times \Delta r} \right| + \left| \frac{2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right| \tag{15}$$

$$\left| \frac{1}{(\Delta r)^2} + \underbrace{\frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \times \Delta r}}_{>0} + \frac{2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right| = \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} \right| + \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \times \Delta r} \right| + \left| \frac{2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right|$$
(16)

$$\left| \frac{1}{(\Delta r)^2} \right| + \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \times \Delta r} \right| + \left| \frac{2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right| = \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} \right| + \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \times \Delta r} \right| + \left| \frac{2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} \right|$$
 (17)

Con este resultado probamos que la matriz inicial A es diagonal dominante (no estricta), ahora nos toca ver que el algoritmo preserva esta propiedad a lo largo de cada iteración. Naturalmente lo probaremos por inducción.

* De ahora en mas notaremos como $\alpha_{jk}^{(i)}$ al coeficiente situado en la posición de α_{jk} en A, de la matriz $A^{(i)}$ obtenida como resultado tras aplicar las primeras i-1 iteraciones de la Eliminación Gaussiana. Ej: $\alpha_{jk}^{(2)}$ alude al nuevo α_{jk} obtenido tras triangular sólo la sección de la primera columna.

Veamos el caso base:

Siendo A d.d. (no estricta), probemos que $\left|\alpha_{jj}^{(2)}\right| \geq \sum_{k=0, k \neq j}^{(m+1)(n-1)} \left|\alpha_{jk}^{(2)}\right|, \forall j \in \{1, ..., (m+1)(n-1)\}$

$$\alpha_{jk}^{(2)} = \alpha_{jk} - \frac{\alpha_{0k}}{\alpha_{00}} \alpha_{j0} \tag{18}$$

$$\sum_{k=1,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left| \alpha_{jk}^{(2)} \right| = \sum_{k=1,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left| \alpha_{jk} - \frac{\alpha_{0k}}{\alpha_{00}} \alpha_{j0} \right| \le \sum_{k=1,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left| \alpha_{jk} \right| + \sum_{k=1,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left| \frac{\alpha_{0k} \alpha_{j0}}{\alpha_{00}} \right|$$
(19)

$$\leq |\alpha_{jj}| - |\alpha_{j0}| + \frac{|\alpha_{j0}|}{|\alpha_{00}|} (|\alpha_{00}| - |\alpha_{0j}|) \leq |\alpha_{jj}| - \frac{|\alpha_{j0}| |\alpha_{0j}|}{|\alpha_{00}|} \leq \left| \alpha_{jj} - \frac{\alpha_{j0}\alpha_{0j}}{\alpha_{00}} \right| = \left| \alpha_{jj}^{(2)} \right|$$
(20)

Paso inductivo:

Por hipotesis tenemos que $\left|\alpha_{jj}^{(i)}\right| \geq \sum_{k=0, k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left|\alpha_{jk}^{(i)}\right|, \forall j \in \{i-2, ..., (m+1)(n-1)\}$ para las primeras i-1 iteraciones.

Queremos ver que: $\left|\alpha_{jj}^{(i+1)}\right| \ge \sum_{k=0, k \ne j}^{(m+1)(n-1)} \left|\alpha_{jk}^{(i+1)}\right|, \forall j \in \{i-1, ..., (m+1)(n-1)\}$

$$\alpha_{jk}^{(i+1)} = \alpha_{jk}^{(i)} - \frac{\alpha_{i-2,k}^{(i)}}{\alpha_{i-2,i-2}^{(i)}} \alpha_{j,i-2}^{(i)}$$
(21)

$$\sum_{k=i-1,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left| \alpha_{jk}^{(i+1)} \right| = \sum_{k=i-1,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left| \alpha_{jk}^{(i)} - \frac{\alpha_{i-2,k}^{(i)}}{\alpha_{i-2,i-2}^{(i)}} \alpha_{j,i-2}^{(i)} \right| \le \sum_{k=i-1,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left| \alpha_{jk}^{(i)} \right| + \sum_{k=i-1,k\neq j}^{(m+1)(n-1)} \left| \frac{\alpha_{i-1,k}^{(i)} \alpha_{j,i-2}^{(i)}}{\alpha_{i-2,i-2}^{(i)}} \right|$$
(22)

$$\stackrel{\text{Por Hip.}}{\leq} \left| \alpha_{jj}^{(i)} \right| - \underbrace{\sum_{k=0, k \neq j}^{i-2} \left| \alpha_{j,k}^{(i)} \right|}_{=0} + \frac{\left| \alpha_{j,i-2}^{(i)} \right|}{\left| \alpha_{i-2,i-2}^{(i)} \right|} \left(\left| \alpha_{i-2,i-2}^{(i)} \right| - \underbrace{\sum_{k=0, k \neq j}^{i-2} \left| \alpha_{i-2,k}^{(i)} \right|}_{=0} \right) \tag{23}$$

$$\leq \left| \alpha_{jj}^{(i)} \right| - \frac{\left| \alpha_{j,i-2}^{(i)} \right| \left| \alpha_{i-2,j}^{(i)} \right|}{\left| \alpha_{i-2,i-2}^{(i)} \right|} \leq \left| \alpha_{jj}^{(i)} - \frac{\alpha_{j,i-2}^{(i)} \alpha_{i-2,j}^{(i)}}{\alpha_{i-2,i-2}^{(i)}} \right| = \left| \alpha_{jj}^{(i+1)} \right|$$
 (24)

Finalizada así esta demostración, sabemos que podemos contar con que tanto la matriz inicial A como $A^{(i)}$, son d.d. (no estricta). Por desgracia, si bien esta hipotesis parece alentadora, es insuficiente para garantizar que a A se le pueda aplicar la Eliminación Gaussiana sin pivoteo. Esto es así porque $A^{(i)}$ aún puede caer en un caso borde, el de tener al 0 como valor en alguno de los elementos de su diagonal principal, y obviamente a algún otro distinto de 0 en la parte inferior de su misma columna; lo que induciría a un intercambio de filas (pivoteo).

Teniendo en claro cual es el conflicto al que nos enfrentamos, de ahora en mas, nos enfocaremos en probar que para la matriz $A^{(i)}$ del sistema esta situación no se nos presenta.

$A^{(i)}$ no tiene al 0 en su diagonal

Para empezar podemos observar que dicha situación sólo podría suceder en cierta sección conflictiva, en particular sobre la submatriz central que resulta de recortar las primeras y últimas n filas y columnas. La razón de esto, es porque las primeras n filas son e_1 a e_n ordenadas de manera triangular; de esta forma no solo ese tramo de la diagonal posee todos sus elementos distintos de 0, sino que además la Eliminación Gaussiana triangulará la primera sección de n columnas, sin alterar a la sección complementaria; y obviamente sin emplear pivoteo. Analogamente resulta que las últimas n filas son $e_{(m+1)(n-1)-n}$ a $e_{(m+1)(n-1)}$, de nuevo, ordenadas de manera triangular; por lo que al llegar a aquella sección, ya no es necesario seguir transformando la matriz, dado que la obtenida hasta el momento, ya es triangular. Dicho esto, llamemos $A^{(*)}$ a la sección de A delimitara por aquel recorte.

Sobre $A^{(*)}$, veremos que se cumple una segunda hipótesis bastante útil, y es que todos los elementos de la diagonal son negativos, y los que no lo son, son 0 o positivo; al menos 1 de ellos es de esta última forma (ignorando el caso trivial de que $A^{(*)}$ sea de 1x1). Para esto basta ver que los únicos coeficientes definidos (distinto de 0) en las filas de $A^{(*)}$ son $\alpha_{jj}, \alpha_{j-1,j}, \alpha_{j+1,j}, \alpha_{j,j-1}, \alpha_{j,j+1}$, donde los últimos tres son cocientes positivos, puesto que sólo involucran a Δr , $\Delta \theta$, y rj, como denominador (que son positivos). Y como $rj \times \Delta r > (\Delta r)^2$, $\alpha_{j-1,j}$ también es positivo. Sólo queda analizar si efectivamente α_{jj} es negativo.

$$\alpha_{jj} = \frac{-2}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j \times \Delta r} + \frac{-2}{r_j^2 \times (\Delta \theta)^2} < \frac{-2}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j \times \Delta r} < \frac{-2}{r_j \times \Delta r} + \frac{1}{r_j \times \Delta r} = \frac{-1}{r_j \times \Delta r} < 0 \quad \blacksquare$$
 (25)

Con esto, ya podemos justificar porque $A^{(i)}$ no tiene ceros en algún elemento de su diagonal. Usando una obsevación mas, en la que nos restrigiremos a $A^{(*)}$ e ignoraremos la última fila (pues ya no necesitamos usar el elemento de su diagonal). Primero notemos que para cada fila habrá un elemento detrás (con respecto al recorrido de un radio en particular) del de la diagonal (el $\alpha_{j,j+1}$), que como ya vimos, es positivo. Al ser este elemento positivo, en la iteración número i al elemento $\alpha_{j,j+1}$ se le restará $\alpha_{i,j+1} * \alpha j, i * (\alpha_{ii})^{-1}$, que al ser $\alpha_{i,j+1} y \alpha j, i$ positivos, y $\alpha_{i,i}$ negativo, $\alpha_{j,j+1}$ no podrá hacerse mas chico (pues se le esta restando algo negativo). Habrá que rescatar un caso borde; en el argumento anterior estamos usando que $\alpha_{j,j+1}$ esta situado detrás de $\alpha_{j,j}$, pero esto sólo ocurre si $\alpha_{j,j}$ no es el ultimo elemento del anillo conformado por el radio r_j . No obstante habrá otro elemento situado mas hacia atrás (el $\alpha_{j+1,j}$) que corresponde al radio inmediatamente superior, también mayor a cero. El último caso borde ocurre si ese radio inmediatamente superior es el r_e (que no figura en $A^{(*)}$), pero a esto se le puede restar importancia, pues en ese caso $\alpha_{j,j}$ será el último elemento de la diagonal de $A^{(*)}$. Toda esta descripción de la matriz se ve para un sistema lo suficientemente grande, como su condición de matriz banda.

Ahora por último, como sabemos que $A^{(i)}$ es d.d. (no estricta) y que además siempre tiene un elemento positivo en cada fila (ignorando a la última), α_{jj} jamas podrá ser igual 0, porque sería equivalente a pedir que todos los elementos de su fila, fueran 0.

3. Experimentación

3.1. Metodología

Los siguientes experimentos fueron generados a partir de archivos de entrada para nuestro algoritmo que siguen ciertas reglas. En todos los casos donde analizamos el tiempo de ejecución de los algoritmos, decidimos generar 5 instancias para el mismo experimento y luego tomar la media. Esto se debe a que el uso del CPU no es uniforme (principalmente causado por el algoritmo de scheduling del SO y el uso de memoria) y lleva a que las mediciones estén sesgadas.

3.2. Evaluación de los métodos

3.2.1. Tiempo de ejecución variando la dimensión

Para este experimento, decidimos analizar el tiempo de ejecución de nuestro algoritmo en función de la dimensión de la matriz A. A priori, dado que ambos algoritmos son $\mathcal{O}(n^3)$ y sólo se están ejecutando sobre una única instancia, esperamos que los tiempos de ejecución sean sumamente similares.

Para la generación de instancias, utilizamos m = 3, n = 3, $r_i = 10$, $r_e = 100$, ninst = 1, con m y n aumentando de a 1. Aumentamos estos valores para incrementar la dimensión de la matriz A, dado que lo relevante al tiempo de ejecución final del algoritmo es la dimensión total, no de donde proviene la misma.

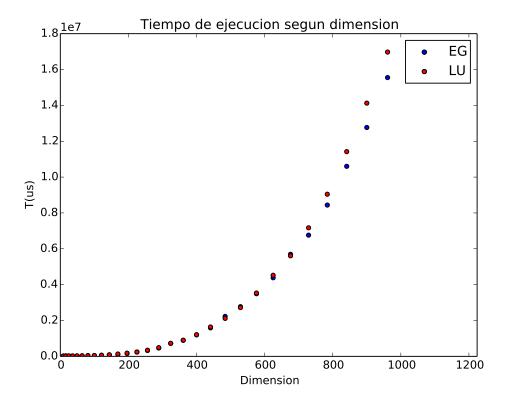


Figura 5: Tiempos de ejecución según dimensión, EG vs LU.

Como se puede observar en estos gráficos, ambos algoritmos tienen casi los mismos tiempos de ejecución para una dimensión dada. Esto coincide con la teoría.

3.2.2. Tiempo de ejecución variando número de instancias

Para este experimento la idea es ver la diferencia en performance de la eliminación gaussiana y la factorización LU a medida que aumenta el número de instancias, es decir, a medida que cambiamos la matriz b. Aunque ambos algoritmos pertenecen a $\mathcal{O}(n^3)$, esperamos que la factorización LU sea superior a la eliminación gaussiana dado que para la factorización LU el costo adicional de resolver otras instancias es de $\mathcal{O}(n^2)$ (es un simple producto de matrices) mientras que la eliminación gaussiana debe repetir todo el procedimiento en $\mathcal{O}(n^3)$.

Para generar las instancias utilizadas en el gráfico, estos fueron los valores que utilizamos: m = 10, n = 10, $r_i = 10$, $r_i = 10$

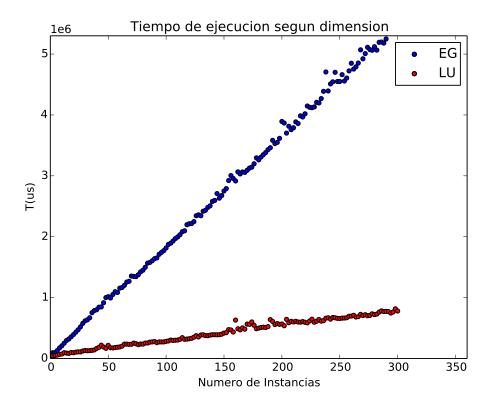


Figura 6: Tiempos de ejecución variando numero de instancias, EG vs LU.

Coincidiendo nuevamente con la teoría, aquí es donde se pueden ver efectivamente las ganancias de la factorización LU. Aunque ambos algoritmos son cúbicos, en este problema la EG se ejecuta en $\mathcal{O}(ninst \times n^3)$ mientras que la factorización LU en $\mathcal{O}(n^3 + ninst \times n^2) \in \mathcal{O}(n^3)$. Esto se puede ver claramente en el gráfico. Como n está fijo, es razonable que los tiempos de ejecución formen dos rectas.

3.3. Comportamiento del Sistema

3.3.1. Isoterma Empírica

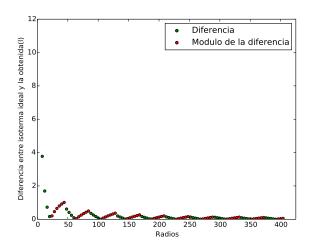
La idea de los siguientes experimentos es ver como varia la diferencia entre la isoterma empírica y la isoterma numérica a medida que cambiamos el nivel de granularidad, es decir, a medida que cambiamos la cantidad de radios y ángulos. Haremos este análisis para nuestros dos algoritmos de búsqueda.

Una pregunta natural que puede surgir es como obtener la isoterma empírica a partir de una aproximación numérica. Al estar aproximando una ecuación diferencial de forma discreta para encontrar la temperatura, si tendemos la granularidad a valores muy grandes, las aproximaciones de todas las derivadas de primer y segundo orden convergerán a su valor verdadero, ergo el laplaciano convergerá a su valor verdadero y podremos obtener la isoterma empírica con un alto grado de precisión.

3.3.2. Variando el numero de radios

En este experimento vamos a evaluar la calidad de las isotermas a medida que aumentamos el número de radios. A priori, esperábamos que la calidad de la solución fuese monótona creciente con el nivel de granularidad, en este caso particular en la cantidad de radios. A su vez, pensábamos que hacer un promedio pesado (weighted) nos iba a acercar más a la isoterma empírica que simplemente utilizando el método lower.

Para este experimento utilizamos instancias con los siguientes parámetros: $m=8, n=2, r_i=10, r_e=100, ninst=1, con m$ aumentando de a 4.



Diferencia

Modulo de la diferencia

Figura 7: Algoritmo: Lower

Figura 8: Algoritmo: Weighted

En contra de lo que pensábamos que iba a suceder, la calidad de la solución no es monótona creciente con el nivel de granularidad. A su vez, se puede ver que el algoritmo de tomar la isoterma justo menor a la que se busca supera ampliamente al método weighted. En un principio pensábamos que nuestros experimentos podían estar mal, pero la realidad es que existe una explicación para estos resultados.

Cuando discretizamos el dominio de búsqueda en coordenadas polares y resolvemos el sistema lineal, lo que estamos haciendo es básicamente buscar una aproximación de la temperatura en cada punto de la discretización. Esta aproximación cambia a medida que variamos la granularidad. A mayor granularidad, la aproximación de la temperatura en cierto punto dado por cualquiera de nuestros algoritmos no es necesariamente mejor. La única forma de garantizar esto es que la nueva discretización no solo pase por los puntos que tenia la vieja discretización, si no que también agregue nuevos puntos. Dada la definición de nuestro problema, esto solo sucede cuando la granularidad en cualquiera de sus dimensiones aumenta en múltiplos de 2. Al observar estos múltiplos, aquí si podremos observar como la isoterma se comporta de la forma en la que nosotros originalmente habíamos esperado.

Otro factor sumamente importante que debemos considerar es el **trade off** entre calidad de la solución y tiempo de computo (Figura 9). A medida que aumentamos la cantidad de radios, la ganancia adicional en términos de calidad de la solución es cada vez menor. Sin embargo, dado que los algoritmos para resolver el sistema son $\mathcal{O}(n^3)$, el tiempo de computo sube de forma cúbica. A fines prácticos no es una buena idea tender la granularidad a infinito dado que aunque la solución numérica tienda a la solución empírica, el tiempo de ejecución seria extremadamente alto. Por supuesto que esto depende de la tolerancia de error que tenga el usuario.

En cuanto a la razón de por que el método lower se comporta mejor que el weighted, conjeturamos que esto sucede debido a que quizás la temperatura no se propaga de forma uniforme en la pared del horno. El método weighted hace un promedio pesado asumiendo uniformidad, y quizá este supuesto es incorrecto.

3.3.3. Propagación del calor

Para evaluar nuestro supuesto de propagación del calor, generaremos instancias con las siguientes características:

- 1. Radio Interno = 10
- 2. Radio Externo = 100
- 3. Isoterma = 200
- 4. Temperatura Externa = 10
- 5. Cantidad de Radios = 35
- 6. Cantidad de Ángulos = 35

Para la temperatura se tomó un valor inicial de 250, por cada iteración se multiplicó a este valor inicial por el número de iteraciones. Se generaron 20 instancias distintas con los parámetros indicados, actualizando la temperatura interna de la forma descripta anteriormente.

De esta manera podremos evaluar si al duplicar la temperatura, la distancia de la isoterma empírica al centro del horno efectivamente se duplica o no. A priori, y considerando la experimentación del punto anterior, parece claro que este supuesto es incorrecto. Pensemos esto con un poco de intuición física (le pido disculpas a los físicos por lo siguiente). El calor se transmite entre átomos. Dado que el horno es circular, podemos pensar que la pared del mismo esta compuesto de múltiples capas. Una capa tiene $\pi \times r^2$ átomos. Es decir, para que el calor se transfiera de una capa a otra, se debe transferir desde $\pi \times r^2$ átomos a $\pi \times (r+\epsilon)^2$ átomos. Por lo tanto, dado que la cantidad de átomos entre capas crece de forma cuadrática, el calor no se va a transferir de forma uniforme. De esta forma se podría sacar una fórmula para la propagación del calor entre dos radios y mejorar el promedio pesado, que conjeturamos que será función de la raíz de la distancia entre capas.

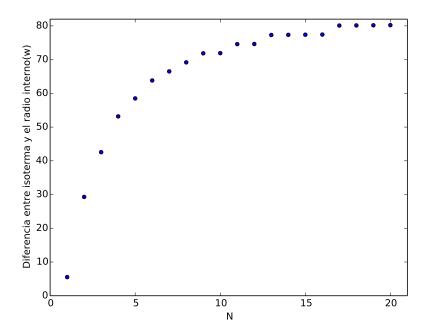


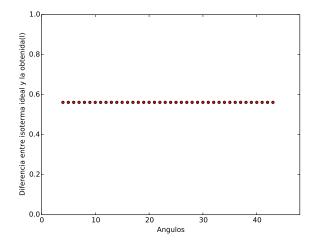
Figura 9: Propagación del calor

En este gráfico tenemos los multiplos de la temperatura inicial en el eje X, el mismo confirma nuestra intuición física y los resultados de los experimentos anteriores.

3.3.4. Variando el numero de ángulos

Para este experimento, utilizaremos instancias con las siguientes características: m = 30, n = 4, $r_i = 10$, $r_e = 100$, ninst = 1, con n aumentando de a 1.

A partir de las conclusiones del experimento anterior, ya no esperamos que la calidad de la solución mejore monotonamente a medida que aumentamos la cantidad de ángulos.



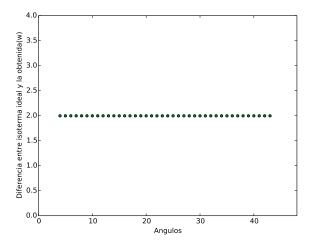


Figura 10: Algoritmo: Lower

Figura 11: Algoritmo: Weighted

Como se puede observar, ambos algoritmos tienen una performance sumamente similar y no se observan mejoras significativas en la calidad de las isotermas a medida que aumenta la cantidad de ángulos. Esto se debe a que nuestro caso de prueba fue un caso simétrico, donde para cualquier ángulo las temperaturas para cualquier radio son idénticas. Esto nos trae una conclusión bastante importante: en casos que sean bastante simétricos, tomando como temperatura externa el máximo, tomando solo 1 ángulo y aumentando solo la cantidad de radios es la estrategia óptima para evaluar la integridad estructural de un horno. Bajamos el tiempo de ejecución al no tener que evaluar todos los ángulos explotando la simetría del problema y solo aumentamos la granularidad en la dimensión m relevante.

4. Conclusiones

El modelado de problemas utilizando sistemas de ecuaciones lineales de la forma Ax = b es sumamente útil, principalmente debido a que se presentan de forma frecuente y sus metodologías de resolución han sido ampliamente estudiadas la literatura. Para resolver este tipo de problemas, en este trabajo sólo utilizamos la eliminación gaussiana y la factorización LU, aunque cabe resaltar que existen muchos mas métodos que toman provecho de la estructura del problema en cuestión y logran una complejidad temporal y espacial superior. Para problemas 'chicos', estos factores pueden no ser muy importantes, aunque en la práctica muchas veces se presentan sistemas donde si se tornan relevantes.

En el desarollo de este trabajo práctico utilizamos dos métodos de resolución clásicos, la eliminación gaussiana y la factorización LU. Estos métodos son conocidos por tener una complejidad en $\mathcal{O}(n^3)$. Al cambiar el vector del sistema lineal b, la eliminación gaussiana debe repetir todo el procedimiento nuevamente para encontrar una solución al sistema. Aquí es donde entra la factorización LU, que guarda la información de las operaciones entre filas y logra resolver instancias adicionales en $\mathcal{O}(n^2)$. Este resultado teórico fue luego confirmado experimentalmente. No obstante, a priori, no toda matriz cuadrada admite esta factorización; esto nos ha llevado a estudiar un poco más la naturaleza del sistema. En concecuencia, tras develar algunas propiedades, hemos podido demostrar que la aplicación de la eliminación gaussiana reduce nuestra matriz a una triangular superior con elementos distintos de cero en su diagonal (de lo que se deduce que es no singunlar) y sin necesidad de aplicar pivoteo total ni parcial. Como hemos visto en las clases teóricas, dichas hipótesis nos llevan a concluir que el sistema siempre tendrá una única solución, y en particular que posee factorización LU.

Otra carácteristica que pudimos comprobar en la matriz del sistema es su condición de banda-n, esto a priori, puede no representarnos ventajas para los dos métodos empleados; no obstante somos concientes que usando otras estructuras de datos, y aprovechando la redundancia de ceros acumulados en la esquina superior izquierda e inferior derecha, se podría reducir para casos lo suficientemente grandes, la complejidad espacial (almacenando sólo aquellos elementos que se encuentre dentro del rango de la banda) y también la complejidad temporal, pudiendo ignorar a aquellas filas en las cuales el elemento de la misma columna del pivot actual se encuentra fuera del rango de la banda.

Para resolver el problema del horno, tuvimos en primer lugar que buscar alguna manera de buscar una isoterma dentro de una aproximación numérica de las temperaturas. Esto en principio es problemático, dado que no siempre las aproximaciones numéricas son buenas, y además porque es necesario definir algún tipo de criterio de interpolación al no poder encontrar temperaturas exactamente iguales a las que estamos buscando. Por esta razón definimos dos métodos de búsqueda y luego llevamos a cabo experimentaciones numéricas para definir cual era mejor.

Nos sorprendió notar que aumentar la granularidad no necesariamente aumenta la calidad de las isotermas encontradas. Al aumentar la cantidad de radios, esto solo sucede cuando aumentamos la granularidad en múltiplos de 2, dado que bajo estas condiciones todos los puntos anteriores al aumento se encuentran contenidos en la nueva discretización.

Por otro lado, muchas veces nos encontramos ante problemas simétricos, donde la temperatura externa es uniforme para todos los ángulos. Aquí es donde notamos que podemos explotar esta simetría y solo considerar un angulo para el sistema. Utilizando esto podemos lograr una presición mucho mayor de las isotermas para una dada dimensión de la matriz A.

Un dato que puede sonar bastante intuitivo, la propagación del calor no es uniforme en una estructura circular. Uno de nuestros algoritmos de búsqueda de isotermas se basaba incorrectamente en el supuesto de que la propagación si era uniforme, razón por la cual el algoritmo de búsqueda 'naive' termino dando mejores resultados.

En conclusión, al aproximar sistemas continuos mediante discretizaciones, como en el caso de ecuaciones diferenciales mediante diferencias finitas, uno debe tener sumo cuidado con los algoritmos y el grado de granularidad que considera. Muchas veces sucede que al aproximar de forma numérica uno piensa que la calidad de la solución aumenta de forma monótona al aumentar la granularidad, aunque los resultados pueden llegar a ser sumamente contra intuitivos.

5. Apéndice A: Enunciado

Laboratorio de Métodos Numéricos - Segundo Cuatrimestre 2015 Trabajo Práctico Número 1: Con 15 θ s discretizo alto horno...

Introducción

Consideremos la sección horizontal de un horno de acero cilíndrico, como en la Figura 1. El sector A es la pared del horno, y el sector B es el horno propiamente dicho, en el cual se funde el acero a temperaturas elevadas. Tanto el borde externo como el borde interno de la pared forman círculos. Suponemos que la temperatura del acero dentro del horno (o sea, dentro de B) es constante e igual a 1500°C.

Tenemos sensores ubicados en la parte externa del horno para medir la temperatura de la pared externa del mismo, que habitualmente se encuentra entre 50°C y 200°C. El problema que debemos resolver consiste en estimar la isoterma de 500°C dentro de la pared del horno, para estimar la resistencia de la misma. Si esta isoterma está demasiado cerca de la pared externa del horno, existe peligro de que la estructura externa de la pared colapse.

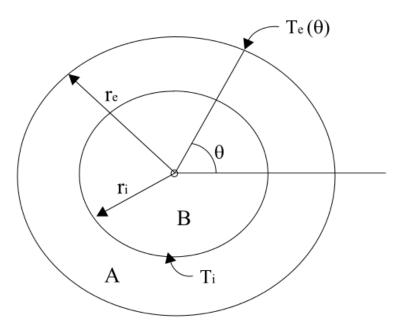


Figura 12: Sección circular del horno

El objetivo del trabajo práctico es implementar un programa que calcule la isoterma solicitada, conociendo las dimensiones del horno y las mediciones de temperatura en la pared exterior.

El Modelo

Sea $r_e \in \mathbb{R}$ el radio exterior de la pared y sea $r_i \in \mathbb{R}$ el radio interior de la pared. Llamemos $T(r, \theta)$ a la temperatura en el punto dado por las coordenadas polares (r, θ) , siendo r el radio y θ el ángulo polar de dicho punto. En el estado estacionario, esta temperatura satisface la ecuación del calor:

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

Si llamamos $T_i \in \mathbb{R}$ a la temperatura en el interior del horno (sector B) y $T_e : [0, 2\pi] \to \mathbb{R}$ a la función de temperatura en el borde exterior del horno (de modo tal que el punto (r_e, θ) tiene temperatura $T_e(\theta)$), entonces tenemos que

$$T(r,\theta) = T_i$$
 para todo punto (r,θ) con $r \le r_i$ (2)

$$T(r_e, \theta) = T_e(\theta)$$
 para todo punto (r_e, θ) (3)

El problema en derivadas parciales dado por la primera ecuación con las condiciones de contorno presentadas recientemente, permite encontrar la función T de temperatura en el interior del horno (sector A), en función de los datos mencionados en esta sección.

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

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

$$\frac{\partial T(r,\theta)}{\partial r}(r_j,\theta_k) \cong \frac{t_{j,k} - t_{j-1,k}}{\Delta r} \tag{5}$$

$$\frac{\partial^2 T(r,\theta)}{\partial \theta^2}(r_j,\theta_k) \cong \frac{t_{j,k-1} - 2t_{jk} + t_{j,k+1}}{(\Delta \theta)^2} \tag{6}$$

Es importante notar que los valores de las incógnitas son conocidos para los puntos que se encuentran sobre el borde exterior de la pared, y para los puntos que se encuentren dentro del sector B. Al realizar este procedimiento, obtenemos un sistema de ecuaciones lineales que modela el problema discretizado. La resolución de este sistema permite obtener una aproximación de los valores de la función T en los puntos de la discretización.

Enunciado

Se debe implementar un programa en C o C++ que tome como entrada los parámetros del problema $(r_i, r_e, m+1, n, valor de la isoterma buscada, <math>T_i, T_e(\theta))$ que calcule la temperatura dentro de la pared del horno utilizando el modelo propuesto en la sección anterior y que encuentre la isoterma buscada en función del resultado obtenido del sistema de ecuaciones. El método para determinar la posición de la isoterma queda a libre elección de cada grupo y debe ser explicado en detalle en el informe.

El programa debe formular el sistema obtenido a partir de las ecuaciones (1) - (6) y considerar dos métodos posibles para su resolución: mediante el algoritmo clásico de Eliminación Gaussiana y la Factorización LU. Finalmente, el programa escribirá en un archivo la solución obtenida con el formato especificado en la siguiente sección.

Como ya se ha visto en la materia, no es posible aplicar los métodos propuestos para la resolución a cualquier sistema de ecuaciones. Sin embargo, la matriz del sistema considerado en el presente trabajo cumple con ser diagonal dominante (no estricto) y que, ordenando las variables y ecuaciones convenientemente, es posible armar un sistema de ecuaciones cuya matriz posee la propiedad de ser *banda*. Luego, se pide demostrar (o al menos dar un esquema de la demostración) el siguiente resultado e incluirlo en el informe:

Proposición 5.1 Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz obtenida para el sistema definido por (1)-(6). Demostrar que es posible aplicar Eliminación Gaussiana sin pivoteo.¹

La solución del sistema de ecuaciones permitirá saber la temperatura en los puntos de la discretización. Sin embargo, nuestro interés es calcular la isoterma 500, para poder determinar si la estructura se encuentra en peligro. Luego, se pide lo siguiente:

- Dada la solución del sistema de ecuaciones, proponer una forma de estimar en cada ángulo de la discretización la posición de la isoterma 500.
- 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.

En función de la experimentación, se busca realizar dos estudios complementarios: por un lado, analizar cómo se comporta el sistema y, por otro, cuáles son los requerimientos computacionales de los métodos. Se pide como mínimo realizar los siguientes experimentos:

- 1. Comportamiento del sistema.
 - Considerar al menos dos instancias de prueba, generando distintas discretizaciones para cada una de ellas y comparando la ubicación de la isoterma buscada respecto de la pared externa del horno. Se sugiere presentar gráficos de temperatura o curvas de nivel para los mismos, ya sea utilizando las herramientas provistas por la cátedra o implementando sus propias herramientas de graficación.

¹Sugerencia: Notar que la matriz es diagonal dominante (no estrictamente) y analizar qué sucede al aplicar un paso de Eliminación Gaussiana con los elementos de una fila.

■ Estudiar la proximidad de la isoterma buscada respecto de la pared exterior del horno en función de distintas granularidades de discretización y las condiciones de borde.

2. Evaluación de los métodos.

- Analizar el tiempo de cómputo requerido para obtener la solución del sistema en función de la granularidad de la discretización. Se sugiere presentar los resultados mediante gráficos de tiempo de cómputo en función de alguna de las variables del problema.
- Considerar un escenario similar al propuesto en el experimento 1. pero donde las condiciones de borde (i.e., T_i y $T_e(\theta)$) cambian en distintos instantes de tiempo. En este caso, buscamos obtener la secuencia de estados de la temperatura en la pared del horno, y la respectiva ubicación de la isoterma especificada. Para ello, se considera una secuencia de ninst vectores con las condiciones de borde, y las temperaturas en cada estado es la solución del correspondiente sistema de ecuaciones. Se pide formular al menos un experimento de este tipo, aplicar los métodos de resolución propuestos de forma conveniente y compararlos en términos de tiempo total de cómputo requerido para distintos valores de ninst.

De manera opcional, aquellos grupos que quieran ir un poco más allá pueden considerar trabajar y desarrollar alguno(s) de los siguientes puntos extra:

- 1. Notar que el sistema resultante tiene estructura banda. Proponer una estructura para aprovechar este hecho en términos de la complejidad espacial y como se adaptarían los algoritmos de Eliminación Gaussiana y Factorización LU para reducir la cantidad de operaciones a realizar.
- 2. Implementar dicha estructura y las adaptaciones necesarias para el algoritmo de Eliminación Gaussiana.
- 3. Implementar dicha estructura y las adaptaciones necesarias para el algoritmo de Factorización LU.

Finalmente, se deberá presentar un informe que incluya una descripción detallada de los métodos implementados y las decisiones tomadas, el método propuesto para el cálculo de la isoterma buscada y los experimentos realizados, junto con el correspondiente análisis y siguiendo las pautas definidas en el archivo pautas.pdf.

Programa y formato de archivos

Se deberán entregar los archivos fuentes que contengan la resolución del trabajo práctico. El ejecutable tomará tres parámetros por línea de comando, que serán el archivo de entrada, el archivo de salida, y el método a ejectutar (0 EG, 1 LU).

El archivo de entrada tendrá la siguiente estructura:

- La primera línea contendrá los valores r_i , r_e , m+1, n, iso, ninst, donde iso representa el valor de la isoterma buscada y ninst es la cantidad de instancias del problema a resolver para los parámetros dados.
- A continuación, el archivo contendrá ninst líneas, cada una de ellas con 2n valores, los primeros n indicando los valores de la temperatura en la pared interna, i.e., $T_i(\theta_0), T_i(\theta_1), \dots, T_i(\theta_{n-1})$, seguidos de n valores de la temperatura en la pared externa, i.e., $T_e(\theta_0), T_e(\theta_1), \dots, T_e(\theta_{n-1})$.

El archivo de salida obligatorio tendrá el vector solución del sistema reportando una componente del mismo por línea. En caso de ninst > 1, los vectores serán reportados uno debajo del otro.

Junto con el presente enunciado, se adjunta una serie de scripts hechos en python y un conjunto instancias de test que deberán ser utilizados para la compilación y un testeo básico de la implementación. Se recomienda leer el archivo README.txt con el detalle sobre su utilización.

Fechas de entrega

- Formato Electrónico: Jueves 3 de Septiembre de 2015, hasta las 23:59 hs, enviando el trabajo (informe + código) a la dirección metnum.lab@gmail.com. El subject del email debe comenzar con el texto [TP1] seguido de la lista de apellidos de los integrantes del grupo.
- Formato físico: Viernes 4 de Septiembre de 2015, de 17:30 a 18:00 hs.

Importante: El horario es estricto. Los correos recibidos después de la hora indicada serán considerados re-entrega. Los grupos deben ser de 3 o 4 personas, sin excepción. Es indispensable que los trabajos pasen satisfactoriamente los casos de test provistos por la cátedra.

6. Apéndice B: Código

6.1. matrix.h

```
1
   /*
2
    * File:
               matrix.h
3
    * Author: Federico
5
    * Created on August 16, 2015, 9:54 PM
6
7
8
   #ifndef MATRIX_H
9
   #define MATRIX_H
10
11
   #include <algorithm>
   #include <math.h>
12
   #include <vector>
13
   #include <stdio.h>
14
15
16
   using namespace std;
17
   // La matriz respeta la notacion de la catedra, es decir, el primer subindice
18
19
   // es la fila y el segundo es la columna
20
21
   template < class T>
   class Matrix {
22
23
        public:
24
            Matrix();
            Matrix(int rows); // Columnas impllicitas (col = 1)
25
26
            Matrix(int rows, int col);
27
            Matrix (int rows, int col, const T& init);
28
            Matrix (const Matrix < T>& other);
29
            ~ Matrix();
30
31
            Matrix<T>& operator=(const Matrix<T>& other);
32
            Matrix<T> operator*(const Matrix<T>& other);
33
            Matrix<T>& operator*=(const Matrix<T>& other);
34
            Matrix<T> operator+(const Matrix<T>& other);
35
            Matrix<T>& operator+=(const Matrix<T>& other);
36
            Matrix<T> operator -(const Matrix<T>& other);
            Matrix<T>\& operator ==(const Matrix<T>\& other);
37
38
            Matrix<T> operator*(const T& scalar);
39
40
            Matrix<T> operator / (const T& scalar);
41
42
            T& operator()(int a, int b);
43
            const T& operator()(const int a, const int b) const;
44
            T& operator()(int a);
45
            const T& operator()(const int a) const;
46
47
            int rows();
48
            int columns();
49
            void printMatrix();
50
51
        private:
52
            vector < vector < T>> _values;
53
            int _rows;
            int _columns;
54
55
```

```
};
56
57
58
    template < class T>
    Matrix<T>::Matrix()
59
         : _{\text{values}}(1), _{\text{rows}}(1), _{\text{columns}}(1)
60
61
62
         _values [0]. resize (1);
63
    }
64
    template < class T>
65
    Matrix<T>::Matrix(int rows)
66
         : _values(rows), _rows(rows), _columns(1)
67
68
    {
69
         for (int i = 0; i < rows; i++) {
             _values[i].resize(1);
70
71
         }
72
    }
73
74
    template < class T>
    Matrix<T>::Matrix(int rows, int col)
75
76
         : _values(rows), _rows(rows), _columns(col)
77
    {
78
         for (int i = 0; i < rows; i++) {
79
              _values[i].resize(col);
80
         }
81
    }
82
83
    template < class T>
84
    Matrix<T>::Matrix(int rows, int col, const T& init)
85
         : _values(rows), _rows(rows), _columns(col)
86
    {
87
         for (int i = 0; i < rows; i++) {
88
              _values[i].resize(col, init);
89
         }
    }
90
91
92
    template < class T>
93
    Matrix<T>:: Matrix (const Matrix<T>& other)
         : _values(other._values), _rows(other._rows), _columns(other._columns)
94
95
    {}
96
97
    template < class T>
    Matrix<T>::~Matrix() {}
98
99
100
    template < class T>
    Matrix<T>& Matrix<T>::operator=(const Matrix<T>& other) {
101
102
       if (\& other = this)
103
         return *this;
104
105
       int new_rows = other._rows;
106
       int new_columns = other._columns;
107
108
       _{rows} = new_{rows};
109
       _columns = new_columns;
110
111
       _values.resize(new_rows);
112
       for (int i = 0; i < new\_columns; i++) {
113
           _values[i].resize(new_columns);
114
       }
```

```
115
116
       for (int i = 0; i < new\_rows; i++) {
117
         for (int j = 0; j < new\_columns; j++) {
           _{\text{values}}[i][j] = other(i, j);
118
119
120
121
122
      return *this;
123
    }
124
125
    template < class T>
    Matrix<T> Matrix<T>::operator*(const Matrix<T>& other) {
126
127
         // ASUME QUE LAS DIMENSIONES DAN
128
         Matrix<T> result (_rows, other._columns);
129
         int innerDim = _columns; // Tambien podria ser other._rows
130
131
132
         for(int i = 0; i < result.\_rows; i++) {
133
             for (int j = 0; j < result.\_columns; j++) {
                  result(i,j) = 0;
134
135
                  for (int k = 0; k < innerDim; k++) {
136
                      result(i,j) \leftarrow values[i][k] * other(k,j);
137
                  }
138
             }
         }
139
140
141
         return result;
142
143
144
    template < class T>
145
    Matrix<T>\& Matrix<T>::operator*=(const Matrix<T>\& other) {
146
         Matrix < T > result = (*this) * other;
147
         (*this) = result;
         return (*this);
148
149
    }
150
151
    template < class T>
152
    Matrix<T> Matrix<T>::operator+(const Matrix<T>& other) {
153
         // ASUME QUE LAS DIMENSIONES DAN
154
         Matrix<T> result (_rows, other._columns);
155
         for (int i = 0; i < result.rows; i++) {
156
157
             for (int j = 0; j < result.\_columns; j++) {
                  result(i,j) = \_values[i][j] + other(i,j);
158
159
             }
160
         }
161
162
         return result;
163
    }
164
165
    template < class T>
    Matrix<T>& Matrix<T>::operator+=(const Matrix<T>& other) {
166
167
         Matrix < T > result = (*this) + other;
168
         (*this) = result;
169
         return (*this);
170
    }
171
172
    template < class T>
173
    Matrix<T> Matrix<T>::operator -(const Matrix<T>& other) {
```

```
// ASUME QUE LAS DIMENSIONES DAN
174
175
         Matrix<T> result (_rows, other._columns);
176
         for (int i = 0; i < result.rows; i++) {
177
178
             for (int j = 0; j < result.\_columns; j++) {
179
                  result(i,j) = \_values[i][j] - other(i,j);
180
         }
181
182
183
         return result;
184
    }
185
186
    template < class T>
187
    Matrix<T>& Matrix<T>::operator -= (const Matrix<T>& other) {
188
         Matrix < T > result = (*this) - other;
189
         (*this) = result;
190
         return (*this);
191
    }
192
    template < class T>
193
194
    Matrix<T> Matrix<T>::operator*(const T& scalar) {
195
         Matrix<T> result (_rows , _columns);
196
197
         for (int i = 0; i < result.rows; i++) {
             for (int j = 0; j < result.\_columns; j++) {
198
                  result(i,j) = \_values[i][j] * scalar;
199
             }
200
201
         }
202
203
         return result;
204
    }
205
206
    template < class T>
    Matrix<T> Matrix<T>::operator/(const T& scalar) {
207
208
         Matrix < T > result (_rows , _columns);
209
         for(int i = 0; i < result.rows; i++) {
210
211
             for (int j = 0; j < result.\_columns; j++) {
212
                  result(i,j) = _values[i][j] / scalar;
213
             }
         }
214
215
216
         return result;
217
    }
218
219
    template < class T>
220
    T& Matrix<T>::operator ()(int a, int b) {
221
         return _values[a][b];
222
    }
223
224
    template < class T>
    const T& Matrix<T>::operator ()(const int a, const int b) const {
225
226
         return _values[a][b];
227
    }
228
229
    template < class T>
230 T& MatrixT>::operator ()(int a) {
231
         return _values[a][0];
232
    }
```

```
233
234
    template < class T>
235
    const T& Matrix<T>::operator ()(const int a) const {
        return _values[a][0];
236
237
    }
238
239
    template < class T>
240
    int Matrix<T>::rows() {
241
        return _rows;
242
    }
243
244
    template < class T>
    int Matrix<T>::columns() {
245
246
        return _columns;
247
    }
248
249
    template < class T>
250
    void Matrix<T>::printMatrix() {
        for (int i = 0; i < rows; i++) {;
251
             252
253
254
                 // cout << _values[i][j] << "
255
            }
256
            cout << endl;
257
        }
258
        cout << endl;
259
    }
260
261
    #endif
            /* MATRIX_H */
```

6.2. eqsys.h

```
1
2
    * File:
               eqsys.h
3
    * Author: Federico
4
5
    * Created on August 17, 2015, 5:57 PM
6
7
8
   #ifndef EQSYS_H
9
   #define EQSYS_H
10
11
   #include <algorithm>
12
   #include <math.h>
13
   #include <vector>
14
   #include "matrix.h"
15
16
   template < class T>
17
   class EquationSystemLU {
18
        public:
19
            EquationSystemLU(const Matrix<T>& inicial);
20
21
            Matrix<T> solve (Matrix<T>& b_values);
22
23
        private:
24
            Matrix<T> lower;
25
            Matrix<T> upper;
26
            bool isPermutated;
27
            Matrix<T> permutation;
```

```
};
28
29
30
   template < class T>
   EquationSystemLU<T>::EquationSystemLU(const Matrix<T>& inicial)
31
32
        : upper(inicial), isPermutated(false)
33
   {
34
       T coef;
35
       int i, j, k, l;
36
37
        // Armar la matriz lower
38
        lower = Matrix<T>(upper.rows(), upper.columns(), 0);
39
40
        for (i = 0; i < upper.columns(); i++) {
41
            for(j = i + 1; j < upper.rows(); j++) {
42
                if(upper(i, i) == 0) {
43
                    // Hay que buscar la proxima fila sin cero
44
                     for (k = i + 1; k < upper.rows(); k++) {
45
                         if(upper(k, i) != 0) {
46
                             break;
47
                    }
48
49
50
                     if(k = upper.rows())  { // No hay files para permutar
51
                         abort();
52
                     } else {
53
                         if (!isPermutated) {
                             // Generamos la matriz de permutacion con uno en la diagonal
54
55
                             isPermutated = true;
56
                             permutation = Matrix<T>(upper.rows(), upper.columns(), 0);
57
58
                             for (1 = 0; 1 < permutation.rows(); 1++)
59
                                 permutation (1,1) = 1;
60
                             }
61
62
                         // Permutamos las filas
63
                         for (1 = 0; 1 < permutation.columns(); 1++) {
                             if(1 == k) {
64
                                 permutation(i, l) = 1;
65
66
                             } else {
67
                                 permutation(i, l) = 0;
68
69
                             if(1 == i) {
70
                                 permutation(k, l) = 1;
71
                             } else {
72
                                 permutation (k, 1) = 0;
73
74
75
                         // Hacemos el producto para efectivamente permutar
76
                         upper = permutation * upper;
77
                         lower = permutation * lower;
78
                    }
79
                }
80
81
                // Calculamos y guardamos el coeficiente
                // cout << upper(j,i) << " , " << upper(i,i) << endl;
82
83
                coef = upper(j, i) / upper(i, i);
84
                lower(j, i) = coef;
                // Colocamos cero en la columna bajo la diagonal
85
86
                upper(j,i) = 0;
```

```
87
                 for (k = i + 1; k < upper.columns(); k++)
88
                      upper(j, k) = upper(j, k) - coef * upper(i, k);
89
                 }
90
             }
91
92
         // Agrego la diagonal de unos a lower
93
         for (i = 0; i < lower.rows(); i++){
94
             lower(i,i) = 1;
95
96
    }
97
    template < class T>
98
99
    Matrix<T> EquationSystemLU<T>::solve(Matrix<T>& b_values) {
100
101
         Matrix<T> temp_values = Matrix<T>(b_values);
102
         Matrix<T> y_values = Matrix<T>(b_values.rows());
103
         Matrix < T > x_values = Matrix < T > (b_values.rows());
104
105
         if(isPermutated) {
106
             temp_values = permutation * temp_values;
107
108
109
         // Resuelvo el sistema L * y = b
110
         for (int i = 0; i < temp_values.rows(); i++) {
             for (int j = 0; j < i; j++) {
111
112
                 temp_values(i) -= y_values(j) * lower(i,j);
113
114
             if(i = 0) {
115
                 y_values(0) = temp_values(0) / lower(0,0); // Calculo aparte el primer
                     valor
116
             } else {
                 y_values(i) = temp_values(i) / lower(i,i);
117
118
             }
119
         }
120
121
         // Resuelvo el sistema U * x = y
         temp_values = y_values;
122
         for (int i = temp\_values.rows() - 1; i >= 0; i--) {
123
124
             for (int j = temp\_values.rows() - 1; j > i; j--) {
125
                 temp_values(i) = x_values(j) * upper(i,j);
126
             }
127
             if(i = x_values.rows() - 1) {
                 x_values(x_values.rows() - 1) = temp_values(temp_values.rows() - 1) /
128
                     upper (upper . rows () -1, upper . columns () -1);
129
             } else {
130
                 x_values(i) = temp_values(i) / upper(i,i);
131
             }
132
        }
133
134
         // Retorno la solucion al sistema LU * x = b
135
         return x_values;
136
137
    }
138
139
140
    template < class T>
141
    class EquationSystem {
142
143
         public:
```

```
EquationSystem(const Matrix<T>& inicial);
144
145
146
             Matrix<T> solve(const Matrix<T>& b_values);
147
148
         private:
             Matrix<T> _matrix;
149
150
    };
151
152
    template < class T>
    EquationSystem <T>:: EquationSystem (const Matrix <T>& inicial)
153
154
         : _matrix(inicial)
155
    {}
156
157
    template < class T>
    Matrix<T> EquationSystem<T>:::solve(const Matrix<T>& b_values) {
158
159
        T coef;
         160
161
         bool isPermutated;
162
         Matrix<T> temp_matrix(_matrix);
         Matrix<T> temp_values(b_values);
163
164
         Matrix<T> permutation;
165
         for(i = 0; i < temp_matrix.columns(); i++) {
166
167
             for(j = i + 1; j < temp_matrix.rows(); j++) {
168
                 if(temp_matrix(i, i) == 0) {
169
                      // Hay que buscar la proxima fila sin cero
                      for(k = i + 1; k < temp_matrix.rows(); k++) {
170
171
                          if(temp_matrix(k, i) != 0)  {
172
                              break;
173
                          }
174
                     }
175
176
                      if(k = temp\_matrix.rows())  { // No hay files para permutar
177
                          abort();
178
                     } else {
                          if (!isPermutated) {
179
                              // Generamos la matriz de permutacion con uno en la diagonal
180
181
                              isPermutated = true;
                              permutation = Matrix<T>(temp_matrix.rows(), temp_matrix.
182
                                  columns(), 0);
183
                              for (1 = 0; 1 < permutation.rows(); 1++) {
184
185
                                  permutation(1,1) = 1;
186
187
                          // Permutamos las filas
188
189
                          for (1 = 0; 1 < permutation.columns(); 1++)
190
                              if(1 == k) {
191
                                  permutation(i, l) = 1;
192
                              } else {
                                  permutation(i, l) = 0;
193
194
195
                              if(l == i) {
196
                                  permutation (k, l) = 1;
197
                              } else {
198
                                  permutation(k, l) = 0;
199
200
201
                          // Hacemos el producto para efectivamente permutar
```

```
202
                          temp_matrix = permutation * temp_matrix;
203
                          temp_values = permutation * temp_values;
204
                     }
205
                 }
206
207
                 // Calculamos y guardamos el coeficiente
                 coef = temp\_matrix(j, i) / temp\_matrix(i, i);
208
209
                 // Colocamos cero en la columna bajo la diagonal
210
                 temp_matrix(j, i) = 0;
                 for (k = i + 1; k < temp_matrix.columns(); k++) {
211
212
                     temp_matrix(j, k) = temp_matrix(j, k) - coef * temp_matrix(i, k);
213
214
                 temp_values(j) = temp_values(j) - coef * temp_values(i);
215
             }
         }
216
217
218
         Matrix < T > x_values = Matrix < T > (temp_values.rows());
219
220
         // Resultvo el sistema A * x = b, con A triangular superior
221
         for (int i = temp\_values.rows() - 1; i >= 0; i--)  {
222
             for (int j = temp\_values.rows() - 1; j > i; j--) {
223
                 temp_values(i) -= x_values(j) * temp_matrix(i,j);
224
225
             if(i = x_values.rows() - 1) {
226
                 x_values(x_values.rows() - 1) = temp_values(temp_values.rows() - 1) /
                     temp_matrix(temp_matrix.rows() - 1, temp_matrix.columns() - 1);
227
             } else {
                 x_values(i) = temp_values(i) / temp_matrix(i,i);
228
229
             }
230
         }
231
232
         // Retorno la solucion a A * x = b
233
         return x_values;
234
235
236
    #endif
             /* EQSYS_H */
```

6.3. buildSystem.cpp

```
1 #include <iostream>
2 #include <math.h>
3 #include <stdio.h>
4 #include <fstream>
   #include <sstream>
5
6 #include <stdio.h>
7
   #include <string.h>
8
   #include <time.h>
   #include <new>
  #include "eqsys.h"
10
11
12
   using namespace std;
13
   void load_a(Matrix<double>& A, double r_i, double r_e, int n, int m);
14
15
   void load_b(Matrix<double>&b, double r_i, double r_e, int n, int m, double* t_i,
       double* t_e);
   void insert_a (Matrix<double>& A, int j, int k, double r_i, double r_e, int n, int m);
   void insert_b (Matrix < double > & b, int j, int k, double r_i, double r_e, int n, int m,
17
       double * t_i , double * t_e);
   void load_temps(ifstream& inputFile, double* t_i, double* t_e, int n);
```

```
void save_result(Matrix<double>& m, FILE * pFile);
   void generate_isotherm_lower(FILE * pFile, Matrix<double>& b, int m, int n, double
       r_i, double r_e, double iso);
   void generate_isotherm_weighted(FILE * pFile, Matrix<double>& b, int m, int n, double
21
        r_i, double r_e, double iso);
   int mod(int a, int b);
22
23
24
   int main(int argc, char** argv) {
25
26
        if (argc < 4) {
27
            printf("Usage: % inputFile outputFile method (0: EG, 1: LU) isoFile (
               optional) \ n, argv[0];
28
            return 0;
29
        }
30
31
        ifstream inputFile(argv[1]);
32
33
        if (!inputFile.good()) {
34
            printf("Non-existant input file.\n");
35
            return 0;
36
37
38
       // granularity
39
        int n; // 0 = O0 < 0_k < ... < 0_n = 2PI
40
        int m; // ri = r0 < r_{-j} < ... < r_{-m} = re
41
42
        double r_i, r_e;
43
44
        double iso;
45
        int ninst; // instances of the problem to solve
46
47
        string line;
48
        getline (inputFile, line);
49
        sscanf(line.c_str(),"%1f %1f %1 %1 %1f %1",&r_e,&m,&n,&iso,&ninst);
50
51
        int solver = (int) (*argv[3] - (0));
52
        if (solver != 0 \&\& solver != 1) {
53
            printf("Error: Invalid solver.\n");
54
            return 0;
55
        }
56
        {\rm cout} \ << \ {\rm r_{-i}} \ : \ " \ << \ {\rm r_{-e}} \ : \ " \ << \ {\rm r_{-e}} \ << \ " \ m+1: \ " \ << \ m \ << \ " \ n: \ " \ << \ n \ << \ " \ n'
57
       58
           \ll \arg v[3] \ll \operatorname{endl};
59
60
        double t_i[n];
       double t_e[n];
61
62
63
       FILE * pFile = fopen(argv[2],"w");
64
        // build system: Ax = b
65
66
        Matrix < double > A(n*m, n*m, 0);
67
        Matrix < double > b(n*m, 1, 0);
68
       FILE * pIsoFile = NULL;
69
        if (solver == 0) { // Gaussian Elimination
70
            load_a(A, r_i, r_e, n, m);
71
            clock_t before = clock();
72
            EquationSystem < double > e(A); //temp
```

```
for (int j = 0; j < ninst; ++j) { // for every instance
73
74
                 load_temps(inputFile, t_i, t_e, n);
75
                 load_b(b,r_i,r_e,n,m,t_i,t_e);
76
77
                 Matrix < double > result (e.solve(b));
78
                 save_result (result , pFile);
79
                 if (argc = 5 \&\& j = 0) {
80
                     pIsoFile = fopen(argv[4], "w");
81
                 }
82
                 if (argc = 5) {
83
                     generate_isotherm_lower(pIsoFile, result, m, n, r_i, r_e, iso);
84
                      // generate_isotherm_weighted(pIsoFile, result, m, n, r_i, r_e, iso);
85
                 }
86
87
             clock_t result = clock() - before;
             cout << "method 0 takes: " << result/float(CLOCKS.PER.SEC) << " seconds" <<
88
89
         } else {
             load_a(A, r_i, r_e, n, m);
90
91
             clock_t before = clock();
             EquationSystemLU < double > e(A); //temp
92
93
             for (int j = 0; j < ninst; ++j) { // for every instance
94
                 load_temps(inputFile, t_i, t_e, n);
95
                 load_b(b, r_i, r_e, n, m, t_i, t_e);
96
                 Matrix < double > result (e.solve(b));
97
                 save_result (result , pFile);
98
                 if (argc = 5 \&\& j = 0)
99
                      pIsoFile = fopen(argv[4], "w");
100
101
                 if (argc = 5) {
102
                     generate_isotherm_lower(pIsoFile, result, m, n, r_i, r_e, iso);
103
                      // generate_isotherm_weighted(pIsoFile, result, m, n, r_i, r_e, iso);
104
                 }
105
             clock_t result = clock() - before;
106
             cout << "method 1 takes: " << result/float(CLOCKS_PER_SEC) << " seconds" <<</pre>
107
                endl;
108
         }
109
110
         inputFile.close();
111
         fclose (pFile);
112
113
         if (pIsoFile != NULL) fclose(pIsoFile);
114
115
         return 0;
116
    }
117
    void generate_isotherm_lower(FILE * pFile, Matrix<double>& b, int m, int n, double
118
        r_i, double r_e, double iso) {
119
120
         double dR = (r_e - r_i) / (m - 1);
         for (int k = 0; k < n; k++) {
121
122
             for (int j = 0; j < m; j++) {
123
                 if ((b(j * n + k) \le iso || j == m-1) \&\& j != 0) {
                      fprintf(pFile, "% \r_n", r_i + j*dR);
124
125
                     break;
                 else if (b(j * n + k) \le iso \&\& j == 0) 
126
                      fprintf(pFile, "% \r\n", r_i);
127
128
                      break;
```

```
129
               }
           }
130
        }
131
132
133
    }
134
135
    void generate_isotherm_weighted (FILE * pFile, Matrix<double>& b, int m, int n, double
        r_i, double r_e, double iso) {
136
137
        double dR = (r_e - r_i) / (m - 1);
138
        for (int k = 0; k < n; k++) {
139
140
            for (int j = 0; j < m; j++) {
141
                if (b(j * n + k) < iso && j != m-1 && j != 0) {
142
                   + k)) / iso * dR);
143
                   break;
144
                \{ else \ if \ (b(j * n + k) < iso \&\& j == 0) \} 
                   145
146
                   break;
147
                else if (j = m-1) {
                   148
149
                   break;
150
               }
151
           }
        }
152
153
154
    }
155
    void save_result(Matrix<double>& m, FILE * pFile) {
156
157
158
        if (pFile != NULL) {
159
            for (int i = 0; i < m.rows(); i++) {
                fprintf(pFile, "\%1.6 f\r\n", m(i));
160
161
            // fprintf(pFile, "\r");
162
163
        } else {
164
           cout << "Failed to open file." << endl;
165
166
    }
167
    void load_temps(ifstream& inputFile, double* t_i, double* t_e, int n) {
168
169
        string line;
170
        getline(inputFile, line);
171
172
        char* buffer = strtok(strdup(line.c_str()), "");
173
174
        for (int i = 0; i < n; ++i) {
            sscanf(buffer, "%f", &t_i[i]);
175
            buffer = strtok(NULL, "");
176
177
178
179
        for (int i = 0; i < n; ++i) {
            sscanf(buffer, "%f", &t_e[i]);
180
            buffer = strtok(NULL, "");
181
182
        }
183
    }
184
    void load_a(Matrix<double>& A, double r_i, double r_e, int n, int m) {
```

```
for (int j = 0; j < m; j++) { // radius
186
187
               for (int k = 0; k < n; k++) { // angle
188
                    insert_a(A, j, k, r_i, r_e, n, m);
189
          }
190
191
192
193
     void load_b(Matrix<double>&b, double r_i, double r_e, int n, int m, double* t_i,
         double* t_e) {
194
          for (int j = 0; j < m; j++) { // radius
195
               for (int k = 0; k < n; k++) { // angle
196
                    insert_b(b, j, k, r_i, r_e, n, m, t_i, t_e);
197
               }
198
          }
199
     }
200
201
     /* Laplacian matrix helper function
202
      * r0 < r_{j} < ... < r_{m}
203
      * O0 < 0_k < ... < 0_n
204
     void\ insert\_a \,(\,Matrix\!<\!double\!>\!\&\ A,\ int\ j\ ,\ int\ k\ ,\ double\ r\_i\ ,\ double\ r\_e\ ,\ int\ n\ ,\ int\ m)
205
206
207
          double dO = 2*M_PI / n;
208
          double dR = (r_e - r_i) / (m - 1);
209
210
          int r = j * n + k;
211
          double r_{-j} = r_{-i} + j*dR;
212
213
          if (j = 0) {
214
              A(r,r) = 1;
215
               return;
216
          else if (j = m - 1) {
              A(r,r) = 1;
217
218
               return;
219
          }
220
221
          // t_{-j}, k
          A(r,r) += (-2/pow(dR, 2)) + (1/(r_j*dR)) - 2/(pow(r_j, 2)*pow(dO, 2));
222
223
224
          // t<sub>-j</sub>, k+1, border case! k > n, angle = 0
225
          A(r, j * n + mod(k+1, n)) += 1/(pow(r_{-j}, 2)*pow(dO, 2));
226
227
          // t<sub>j</sub>,k-1, border case! k < 0
228
          A(r, j * n + mod(k-1, n)) += 1/(pow(r_{-j}, 2)*pow(dO, 2));
229
230
          // t_{-j} - 1, k
231
          if (j != 1) \{ // \text{ inner circle} \}
              A(\, r \; , (\, j \, -1) \; * \; n \; + \; k\,) \; + = \; 1/pow(\, dR \, , \; \; 2) \; - \; 1/(\, r \, \_j \; * \; dR) \; ;
232
233
          }
234
          // t_{-j} + 1,k
235
236
          if (j+1 != m-1) \{ // \text{ outer circle} \}
237
              A(r, (j+1) * n + k) += (1/pow(dR, 2));
          }
238
239
240
     }
241
```

```
242
    void insert_b (Matrix < double > & b, int j, int k, double r_i, double r_e, int n, int m,
         double * t_i , double * t_e) {
243
244
         double dR = (r_e - r_i) / (m - 1);
245
246
         int r = j * n + k;
247
         double r_{-j} = r_{-i} + j*dR;
248
         b(r) = 0;
249
250
251
         if (j = 0) {
              b(r) = t_i[k];
252
253
              return;
254
         else if (j = m - 1) {
255
              b(r) = t_e[k];
256
              return;
257
         }
258
259
         if (j = 1) { // inner circle
              b\,(\,r\,) \ -\!= \ t_{\,\text{-}} i\,[\,k\,] \ * \ (1/pow\,(\,dR\,,\ 2\,) \ - \ 1/(\,r_{\,\text{-}} j \ * \ dR\,)\,)\,;
260
261
262
263
         // t_{-j} + 1, k
264
         if (j+1 = m-1) { // outer circle
265
              b(r) = t_e[k] * (1/pow(dR, 2));
266
267
268
    }
269
270
    void insertValue (Matrix < double > & A, Matrix < double > & b, int j, int k, double r_i,
         double r_e, int n, int m, double* t_i, double* t_e) {
271
272
         double dO = 2*M_PI / n;
273
         double dR = (r_e - r_i) / (m - 1);
274
275
         int r = j * n + k;
276
         double r_{-j} = r_{-i} + j*dR;
277
278
         if (j = 0) {
279
              A(r,r) = 1;
              b(r) = t_i[k];
280
281
              return;
282
         else if (j = m - 1) {
283
              A(r,r) = 1;
284
              b(r) = t_e[k];
285
              return;
         }
286
287
288
         // t_j ,k
         A(r,r) += (-2/pow(dR, 2)) + (1/(r_j*dR)) - 2/(pow(r_j, 2)*pow(dO, 2));
289
290
291
         // t_{-j}, k+1, border case! k > n, angle = 0
292
         A(r, j * n + mod(k+1, n)) += 1/(pow(r_j, 2)*pow(dO, 2));
293
294
         // t<sub>-j</sub>, k-1, border case! k < 0
295
         A(r, j * n + mod(k-1, n)) += 1/(pow(r_{-j}, 2)*pow(dO, 2));
296
297
         // t_{-j} - 1,k
         if (j == 1) { // inner circle
298
```

```
b\,(\,r\,) \,\,-\!\!=\,\, t\,\lrcorner\,i\,[\,k\,] \ *\ (1/pow\,(dR,\ 2)\,\,-\,\,1/(\,r\,\lrcorner\,j\ *\ dR)\,)\,;
299
300
           } else {
                A(r,(j-1) * n + k) += 1/pow(dR, 2) - 1/(r_j * dR);
301
302
303
304
           // t_{-j} + 1, k
           if (j+1 == m-1) { // outer circle b(r) -= t_e[k] * (1/pow(dR, 2));
305
306
307
           } else {
                A(r, (j+1) * n + k) += (1/pow(dR, 2));
308
309
310
311
     }
312
313
     int mod(int a, int b) {
314
           int r = a \% b;
           return r < 0 ? r + b : r;
315
316
```