

Trabajo Práctico 1

Cálculo de isothermas en sectores circulares

Jueves 3 de septiembre de 2015

Métodos Numéricos

Integrante	LU	Correo electrónico
Lascano, Nahuel	476/11	laski.nahuel@gmail.com
Vilerino, Silvio	106/12	svilerino@gmail.com
Chapresto, Matias Nahuel	201/12	matiaschapresto@gmail.com

En este trabajo aplicamos dos métodos de resolución de sistemas de ecuaciones lineales (Factorización LU y Eliminación Gaussiana) para el cálculo de isothermas de sectores circulares, dadas las temperaturas de las circunferencias interior y exterior.

Pudimos verificar experimentalmente que el método de factorización LU resulta más eficiente si se tienen varias posibles soluciones para una misma matriz, pero que para una única instancia es conveniente usar la eliminación gaussiana.

Palabras clave: factorización LU, eliminación gaussiana, sistemas de ecuaciones lineales, matriz banda



Ciudad Autonoma de Buenos Aires - Rep. Argentina
Tel/Fax: (54 11) 4576-3359

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

Índice

1. Introducción teórica	2
2. Desarrollo	3
2.1. Armado del sistema de ecuaciones	3
2.2. Resolución del sistema de ecuaciones	4
2.2.1. Caracterización de la matriz	4
2.2.2. Resolución sin pivoteo	5
2.3. Experimentos y mediciones	6
2.3.1. Consideraciones iniciales	6
2.3.2. Generacion de casos de prueba	6
2.3.3. Metricas de performance	6
2.3.4. Metodo de posicionamiento estimado de la isoterma	6
2.3.5. Metricas de seguridad de la isoterma	7
2.3.6. Evolucion de la temperatura y posicion de la isoterma con distintas discretizaciones	7
3. Resultados	9
4. Discusión	10
5. Conclusiones	11
6. Apéndice	11
6.1. Apéndice A: Enunciado	11
6.2. Apéndice B: Elección del orden de las incógnitas para obtener una matriz banda . . .	11
7. Referencias	11

1. Introducción teórica

2. Desarrollo

2.1. Armado del sistema de ecuaciones

De la discretización de la ecuación del calor provista por el informe resulta una nueva ecuación que nos va a servir para armar nuestro sistema discreto.

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

Esta ecuación vale para cada punto (r_j, θ_k) del modelo salvo los límites, sobre los cuales hablaremos en breve.

Para poder armar el sistema $Ax = b$ equivalente, es necesario:

- Extraer los factores que multiplican a cada una de las cinco incógnitas: $t_{j-1,k}$; $t_{j,k}$; $t_{j+1,k}$; $t_{j,k-1}$ y $t_{j,k+1}$.

Estos se obtienen de la ecuación 1.

$$\begin{aligned} t_{j-1,k} & * \left(\frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \Delta r} \right) \\ t_{j,k} & * \left(\frac{-2}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j \Delta r} - \frac{2}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} \right) \\ t_{j+1,k} & * \left(\frac{1}{(\Delta r)^2} \right) \\ t_{j,k-1} & * \left(\frac{1}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} \right) \\ t_{j,k+1} & * \left(\frac{1}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} \right) \end{aligned}$$

Por cuestiones de espacio, en adelante llamaremos $M_{j,k}$ al factor que multiplica a la incógnita $t_{j,k}$, $M_{j-1,k}$ al que multiplica a $t_{j-1,k}$ y así sucesivamente. Y resumiremos $Mt_{j,k} = M_{j,k} * t_{j,k}$, $Mt_{j-1,k} = M_{j-1,k} * t_{j-1,k}$, etc.

- Analizar los “casos borde”: aquellos puntos donde la ecuación 1 no vale.

Para evitar confusiones de variables, tomaremos $\theta_0 = 0$ como el menor valor posible de θ y θ_{n-1} como el mayor, pues vale $(r_j, \theta_n) = (r_j, \theta_0)$ para cualquier j .

Los casos interesantes para valores de j, k entonces son:

1. La pared interior del horno ($j = 0$; $k = 0, \dots, n-1$). La ecuación en esos casos es $t_{0,k} = T_i(\theta_k)$.
2. La pared exterior del horno ($j = m$; $k = 0, \dots, n-1$). La ecuación en esos casos es $t_{m,k} = T_e(\theta_k)$.
3. El valor mínimo de θ ($j = 0, \dots, m$; $k = 0$). Se debe reemplazar $t_{j,k-1}$ por $t_{j,n-1}$ en todas las ecuaciones correspondientes.
4. El valor máximo de θ ($j = 0, \dots, m$; $k = n-1$). Se debe reemplazar $t_{j,k+1}$ por $t_{j,0}$ en todas las ecuaciones correspondientes.

Estos últimos reemplazos se pueden resumir en

$$(j, k) \Rightarrow (j, k \bmod n)$$

- Combinar los puntos anteriores para plantear el sistema de ecuaciones a resolver:

$$\begin{aligned} t_{0,k} &= T_i(\theta_k) & \forall k &= 0, \dots, n-1 \\ t_{m,k} &= T_e(\theta_k) & \forall k &= 0, \dots, n-1 \\ Mt_{j-1,k} + Mt_{j,k} + Mt_{j+1,k} + Mt_{j,k-1} + Mt_{j,k+1} &= 0 & \forall j &= 1, \dots, m-1; k = 1, \dots, n-2 \\ Mt_{j-1,0} + Mt_{j,0} + Mt_{j+1,0} + Mt_{j,n-1} + Mt_{j,1} &= 0 & \forall j &= 1, \dots, m-1 \\ Mt_{j-1,n-1} + Mt_{j,n-1} + Mt_{j+1,n-1} + Mt_{j,n-2} + Mt_{j,0} &= 0 & \forall j &= 1, \dots, m-1 \end{aligned}$$

Del mismo podemos obtener la matriz A (que tendrá 5 valores no nulos por fila a lo sumo) y el vector b (que será nulo en todas sus componentes salvo aquellas correspondientes a $j = 0$ y $j = m$).

- Pensar un orden para las incógnitas que permita asegurar que la matriz resultante sea *banda*. El mismo es:

$$(0, 0); (0, 1); \dots; (0, n-1); (1, 0); (1, 1); \dots; (j, n-1); (j+1, 0); (j, 1); \dots; (m, n-1)$$

tanto para las filas como para las columnas. Este orden garantiza que la distancia máxima de un punto hasta sus vecinos en la matriz es de n posiciones (para los casos $j+1, k$ y $j-1, k$) y por lo tanto el “ancho” de la banda es de $2n$.

Notar que las filas que coinciden con la identidad no afectan esta propiedad, dado que son “banda” de ancho 1.

Una vez realizados estos pasos estamos en condiciones de plantear el sistema de ecuaciones $Ax = b$:

Lo primero que debemos notar es que como hay $n * (m+1)$ puntos diferentes tendremos $n * (m+1)$ incógnitas diferentes. Luego, $A \in \mathbb{R}^{n(m+1) \times n(m+1)}$: cada columna y cada fila de A corresponden a un punto $P_{j,k}$ del sistema. Asimismo, $x \in \mathbb{R}^{n(m+1)}$ y $b \in \mathbb{R}^{n(m+1)}$.

Lo segundo que debemos notar es que, por coincidir el orden elegido para filas y para columnas, el índice de la fila correspondiente al punto $P_{j,k}$ coincide con el de la columna correspondiente a ese punto. Llamaremos a este índice $i(j, k)$. Notar que podemos computar i fácilmente como $i(j, k) = j * n + k$ (suponiendo que indexamos por 0 tanto filas como columnas).

Por el orden elegido, las primeras n filas corresponden a los puntos $P_{0,k}$ con $k = 0, \dots, n-1$. Mirando el sistema de ecuaciones, las primeras n filas de A coinciden con la identidad (1 en la diagonal y 0 en el resto) y las primeras n filas de b coinciden con $T_i(\theta_k)$.

Lo mismo vale para las últimas n filas: corresponden a los puntos $P_{m,k}$ con $k = 0, \dots, n-1$, las filas correspondientes de A coinciden con la identidad y las componentes de b con $T_e(\theta_k)$.

Llegado este punto podemos definir completamente b : todas sus demás componentes son nulas (por ser 0 la solución al resto de las ecuaciones del sistema), por lo que resulta:

$$b = (T_i(0), T_i(1), \dots, T_i(n-1), 0, \dots, 0, T_e(0), T_e(1), \dots, T_e(n-1))$$

Para $j \neq 0, j \neq m$, las filas $i(j, k)$ de A tendrán cinco componentes no-nulas (que corresponden a los vecinos de $P_{j,k}$ en el modelo). Fijados j y k ($0 \neq j \neq m, 0 \neq k \neq n-1$), estas componentes serán $i(j-1, k); i(j, k); i(j+1, k); i(j, k-1)$ e $i(j, k+1)$ y coincidirán con lo que anteriormente llamamos $M(j-1, k); M(j, k); M(j+1, k); M(j, k-1)$ y $M(j, k+1)$ respectivamente.

Resta simplemente considerar los casos $k = 0$ y $k = n-1$, pero no reviste mayor complejidad que tomar módulo n después de las operaciones que involucren k .

2.2. Resolución del sistema de ecuaciones

2.2.1. Caracterización de la matriz

Proposición 1. *La matriz A es banda y diagonal dominante (no estricta) por filas.*

Demostración. El hecho de que es banda fue fundamentado al momento de construirla.

Resta ver que es diagonal dominante (no estricta) por filas, es decir, que

$$|a_{i,i}| \geq \sum_{j \neq i}^{n*(m+1)} |a_{i,j}| \quad \forall i = 1, \dots, n*(m+1)$$

Las primeras y últimas n filas de A coinciden con la identidad, por lo que esto vale trivialmente. Dada cualquier otra fila $i(j, k)$ con $j \neq 0, j \neq m$ debemos recordar que hay solo 5 valores no nulos, por lo que en realidad queremos probar

$$|M_{j,k}| \geq |M_{j-1,k}| + |M_{j+1,k}| + |M_{j,k-1}| + |M_{j,k+1}|$$

Reemplazando por los valores de los multiplicadores, se obtiene

$$\left| \frac{-2}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j \Delta r} - \frac{2}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} \right| \geq \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \Delta r} \right| + \left| \frac{1}{(\Delta r)^2} \right| + 2 * \left| \frac{1}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} \right|$$

Quitando el módulo en los valores claramente positivos y reordenando, tenemos

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

En este punto nos detuvimos a analizar cada caso en particular, pero pronto descubrimos que solo vale la pena uno: como sabemos $j \neq 0$, entonces $r_j \geq \Delta r$ para cualquier valor de j , pues hasta el primer radio distinto al interior hay por lo menos un incremento en la discretización. Por lo tanto

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_j \Delta r} &\leq \frac{1}{(\Delta r)^2} \\ 0 &\leq \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \Delta r} \end{aligned}$$

Por lo que podemos omitir el módulo de la derecha. Asimismo,

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_j \Delta r} &\leq \frac{1}{(\Delta r)^2} \\ \frac{1}{r_j \Delta r} &< \frac{2}{(\Delta r)^2} \\ \frac{1}{r_j \Delta r} - \frac{2}{(\Delta r)^2} &< 0 \end{aligned}$$

Y por ser $\frac{2}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} > 0$ podemos afirmar

$$\frac{1}{r_j \Delta r} - \frac{2}{(\Delta r)^2} - \frac{2}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} < 0$$

Por lo que podemos deshacernos del módulo de la izquierda negando sus términos.

$$\frac{2}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \Delta r} + \frac{2}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} \geq \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \Delta r} + \frac{1}{(\Delta r)^2} + \frac{2}{r_j^2 (\Delta \theta)^2}$$

$$\frac{2}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \Delta r} + \frac{2}{r_j^2 (\Delta \theta)^2} \geq \frac{2}{(\Delta r)^2} - \frac{1}{r_j \Delta r} + \frac{2}{r_j^2 (\Delta \theta)^2}$$

Con lo cual la desigualdad es trivialmente cierta (y de hecho resulta ser una igualdad, lo cual explica por qué no es “estrictamente” diagonal dominante).

2.2.2. Resolución sin pivoteo

Nos interesa demostrar que es posible aplicar Eliminación Gaussiana sin pivoteo en la matriz A .

Para su demostración usaremos la propiedad vista en clase teórica de que aplicar un paso de la Eliminación Gaussiana sobre una matriz estrictamente diagonal dominante preserva esa propiedad en la matriz resultante, y el siguiente lema

Lema 1. Toda fila $i(j, k)$ de la matriz A tiene un elemento no nulo a la izquierda de la diagonal, salvo aquellas que coinciden con la identidad ($j = 0$ y $j = m$).

Demostración. Surge directamente de analizar el orden elegido para los puntos: como $j \neq 0$ todo punto $P_{j,k}$ tiene un vecino $P_{j-1,k}$ que necesariamente está antes en el orden elegido.

Podemos probar entonces que si bien nuestra matriz no es *estrictamente* diagonal dominante por filas sí lo serán las filas con las que trabaje la Eliminación Gaussiana.

Proposición 2. A cada paso k de la Eliminación Gaussiana (empezando por 0), la fila k con la que trabaje será estrictamente diagonal dominante (y por lo tanto no tendrá un 0 en el elemento de la diagonal y podrá operar normalmente).

Demostración. Inducción global en k .

El caso $k < n$ es trivial, dado que las filas coinciden con la identidad (y por lo tanto son estrictamente diagonal dominantes).

Para el caso $k = n$, vale el lema 1 que nos dice que la fila k tenía un elemento no nulo a la izquierda de la diagonal en la matriz A . Pero para el paso k , las k primeras columnas fueron anuladas, es decir $A_{k,j}^{(k)} = 0 \forall j < k$. Y como por encima de $A_{k,k}$ solo había 0, la fila ahora es diagonal dominante estricta.

2.3. Experimentos y mediciones

En esta sección desarrollaremos acerca de los experimentos planteados, desde la generación de instancias de prueba hasta los criterios de medición utilizados.

2.3.1. Consideraciones iniciales

- La pared interna del horno en teoría debería ser de 1500 grados constantes, nosotros consideramos más realista que al variar los ángulos de la pared interna, la temperatura varíe uniformemente entre 1450 y 1550.

2.3.2. Generación de casos de prueba

Mati, let the game begin, explica tu testgen

2.3.3. Métricas de performance

Demo teórica o empírica de que como $\dim = n * (m + 1)$ entonces los algoritmos son $\mathcal{O}(n^k \cdot m^k)$ con k variando según el grado polinomial de la complejidad del algoritmo.

2.3.4. Método de posicionamiento estimado de la isoterma

El problema consiste en estimar, para cada ángulo, la posición radial de la isoterma α .

Consideremos la función de temperatura $T(r, \theta)$. Si fijamos $\theta = \theta_i$ podemos definir la función $g_{\theta_i}(r) = T(r, \theta_i)$ como la función de temperatura sobre todos los radios del ángulo θ_i . Esto reduce el problema a encontrar un elemento $x \in \text{Dom}(g_{\theta_i})$ tal que $g_{\theta_i}(x) = \alpha$. El método propuesto consiste en aplicar el siguiente algoritmo a cada función g_{θ_i} para todo ángulo i .

Teorema 2.1 (Método de estimación de la isoterma k). Sea g_{θ_i} la función de temperatura de un ángulo i .

1. Buscar $x_1, x_2 \in \text{Dom}(g_{\theta_i})$ tales que $g_{\theta_i}(x_1) \leq \alpha \leq g_{\theta_i}(x_2)$ y esta cota sea estrictamente ajustada.

$$2. z = x_1 + \left(\frac{x_2 - x_1}{g_{\theta_i}(x_2) - g_{\theta_i}(x_1)} \right) * (\alpha - g_{\theta_i}(x_1))$$

3. Devolver z .

z es la posicion estimada de la isoterma tal que $g_{\theta_i}(z) = \alpha$.

Proposición 3 (Dominio de correctitud de la estimacion). *El algoritmo anterior estima linealmente la isoterma α entre x_1 y x_2 si $\min_{x \in Dom(g_{\theta_i})} g_{\theta_i}(x) \leq \alpha \wedge \max_{x \in Dom(g_{\theta_i})} g_{\theta_i}(x) \geq \alpha \wedge \alpha \notin Im(g_{\theta_i})$.*

- En caso de que α este fuera del rango $[min..max]$ por convencion se establece que la isoterma se encuentra en una posicion radial $R_i - \epsilon$ o $R_e + \epsilon$ segun corresponda.
- En caso de que $\alpha \in Im(g_{\theta_i})$ entonces $z = x_1 = x_2$ y no es necesario ajuste lineal.

Demostración. Si se cumplen las hipotesis de la proposicion anterior. Entonces el algoritmo va a encontrar correctamente la cota ajustada y procedera a hacer el calculo del paso siguiente, que no es mas que un ajuste lineal entre los dos puntos de las cotas. Es decir, estamos asumiendo que el calor se disipa linealmente entre 2 puntos cualesquiera de la funcion.

Nota: Asumir esto no es necesariamente correcto, se podria hacer un analisis mas fino graficando las funciones g_{θ_i} y aplicando metodos mas avanzados, por simplicidad solo consideramos el ajuste lineal en este trabajo.

2.3.5. Metricas de seguridad de la isoterma

Plantemos una metrica que estima la estabilidad o seguridad de la pared del horno estableciendo una relacion relativa entre la posicion de la isoterma y el radio externo.

Proposición 4 (Metrica de seguridad del horno basada en la posicion relativa de la isoterma).

Consideremos $\Delta_{iso_\alpha} = \left(\frac{f(iso_\alpha) - R_i}{R_e - R_i} \right)$.

Donde $f(iso_\alpha)$ es una funcion de la isoterma, en nuestro caso, consideramos que el maximo o el promedio son buenas metricas.

Salvo casos patologicos, vale que $0 \leq \Delta(iso_\alpha) \leq 1$. Luego basta establecer un **limite de seguridad** $0 \leq \gamma_0 \leq 1$ tal que si vale $\Delta(iso_\alpha) > \gamma_0$ se considera inestable o insegura la pared del horno.

2.3.6. Evolucion de la temperatura y posicion de la isoterma con distintas discretizaciones

Para evaluar la calidad de nuestros estimadores. Planteamos el siguiente experimento:

- Se plantean los radios internos, externos y la isoterma buscada y se mantienen fijos durante todo el experimento.
- Se plantean un conjunto de temperaturas internas y externas iniciales y se mantienen fijas durante todo el experimento.
- Se plantea un numero de angulos de la discretizacion y se mantiene fijo durante todo el experimento. (Tengamos en cuenta que variar este parametro no nos permite sostener el item anterior y que lo unico que varia con este parametro es la cantidad de funciones a ajustar.)
- Se plantea un rango $[r_{min}, r_{max}]$ que denota la cobertura de discretizaciones distintas del experimento.
- Se generan archivos de entrada $test_i$ variando unicamente la cantidad de radios de la discretizacion a utilizar con una instancia por archivo.
- Se ejecutan todos los archivos de entrada con el metodo de resolucion mas conveniente.

- Se grafica, para cada archivo de test, la posicion de la isoterma y el mapa de temperaturas del horno.
- Se considera un video que tiene por frames los graficos ordenados en el rango $[r_{min}..r_{max}]$ del item anterior relacionado con la posicion de la isoterma.
- Se considera un video que tiene por frames los graficos ordenados en el rango $[r_{min}..r_{max}]$ del item anterior relacionado con la temperatura de la pared del horno.
- Se grafica una funcion en el plano que denota la **maxima** posicion relativa de la isoterma en la pared del horno a medida que varia ordenadamente el rango $[r_{min}..r_{max}]$.
- Se grafica una funcion en el plano que denota la posicion relativa **promedio** de la isoterma en la pared del horno a medida que varia ordenadamente el rango $[r_{min}..r_{max}]$.

Se espera poder obtener conclusiones acerca de la suavidad de la curva estimada de la isoterma a medida que disminuye la granularidad de la discretizacion(aumenta la cantidad de radios). Asimismo en las funciones que grafican el maximo y el promedio, se espera poder obtener conclusiones similares respecto a la variacion radial de la curva polar de la isoterma.

Se consideraron 2 experimentos de este tipo con diferente la cantidad de angulos y temperaturas aleatorias distintas entre los experimentos.

3. Resultados

4. Discusión

5. Conclusiones

6. Apéndice

6.1. Apéndice A: Enunciado

6.2. Apéndice B: Elección del orden de las incógnitas para obtener una matriz banda

7. Referencias