



DEPARTAMENTO
DE COMPUTACION

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA

Trabajo Práctico 1

Con 15 θ s discretizo alto horno...

Jueves 3 de septiembre de 2015

Métodos Numéricos

Integrante	LU	Correo electrónico
Lascano, Nahuel	476/11	laski.nahuel@gmail.com
Vileriño, 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 una corona circular, 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



Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Universidad de Buenos Aires Ciudad Autónoma de Buenos Aires - Rep. Argentina
Ciudad Universitaria - (Pabellón I/Planta Baja) Tel/Fax: (54 11) 4576-3359
Intendente Güiraldes 2160 - C1428EGA <http://www.fcen.uba.ar>

Índice

1. Introducción teórica	2
1.1. Eliminación Gaussiana	2
1.2. Backward substitution	3
1.3. Factorización LU	3
2. Desarrollo	5
2.1. Discretización	5
2.2. Armado del sistema de ecuaciones	5
2.3. Resolución del sistema de ecuaciones	7
2.3.1. Caracterización de la matriz	7
2.3.2. Resolución sin pivoteo	8
2.4. Experimentos y mediciones	9
2.4.1. Consideraciones iniciales	9
2.4.2. Generación de casos de prueba	9
2.4.3. Métricas de performance	9
2.4.4. Método de posicionamiento estimado de la isoterma	9
2.4.5. Métricas de seguridad de la isoterma	10
2.4.6. Evolución de la temperatura y posición de la isoterma con distintas discretizaciones	10
3. Resultados	11
4. Discusión	12
5. Conclusiones	13
6. Apéndice	13
6.1. Apéndice A: Enunciado	13

1. Introducción teórica

En el presente trabajo se intentó evaluar computacionalmente la seguridad térmica de un horno circular. El problema presentado consistía en estimar el riesgo que corre el mismo de fracturarse por efecto de la elevada temperatura. Dicho de otro modo, dadas las temperaturas de las paredes internas y externas del horno (obtenidas a través de sensores) se quiere estimar la ubicación de la isoterma de 500°C, cuya cercanía a la pared externa es un indicador de la peligrosidad de la estructura.

Dado un corte transversal del horno podemos definir r_i y r_e como los radios de la pared interna y externa, ambos circulares. Para referirnos a los puntos de dicha corona circular utilizaremos coordenadas polares, por lo que cada punto p quedará definido por un radio r y un ángulo θ . Si llamamos $T(r, \theta)$ a la temperatura del punto $p_{r,\theta}$, podemos utilizar la ecuación del calor de Laplace para encontrar el estado de equilibrio del sistema:

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

la cual debe cumplirse para todos los puntos internos del horno.

Por estar trabajando con aritmética finita, usamos una discretización de los puntos que nos interesa analizar (todos los pertenecientes a la pared del horno, que forman una sección circular) y discretizamos asimismo la ecuación 1. De esa manera arribamos a un sistema de ecuaciones lineal que podemos representar en su versión matricial como $Ax = b$ y que intentaremos resolver usando dos métodos: la Eliminación Gaussiana y Factorización LU.

Nos interesa comparar estos dos métodos por el tiempo que les lleva resolver un único sistema $Ax = b$ en función de la granularidad de la discretización. Posteriormente podemos complejizar el problema suponiendo que tenemos múltiples mediciones para las temperaturas de las paredes (a lo largo del tiempo), por lo que debemos comparar su performance a la hora de resolver múltiples sistemas $Ax = b_i$ con diferentes vectores b_i .

La solución del sistema de ecuaciones nos permitirá conocer el valor de la función T en los puntos de la discretización elegida, pero es posible que ninguno de ellos coincida con el valor de la isoterma buscada. Otro objetivo del trabajo será evaluar diferentes formas de estimar esa isoterma y compararlas variando la granularidad de la discretización.

1.1. Eliminación Gaussiana

La Eliminación Gaussiana es un método que consiste en resolver el sistema triangulando la matriz (aplicando restas entre filas) y aplicando las mismas operaciones al vector solución, para obtener un sistema equivalente pero con una matriz triangular superior que se puede resolver de manera sencilla mediante *backward substitution*.

El algoritmo de trabajo con la matriz ampliada del sistema:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

En cada paso k el algoritmo produce, mediante operaciones de filas, la aparición de ceros debajo de la diagonal en la columna k :

$$\begin{aligned}
F_i &\leftarrow F_i - \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} F_1 & \forall i = 2, \dots, n \\
F_i &\leftarrow F_i - \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} F_2 & \forall i = 3, \dots, n \\
&\dots \\
F_i &\leftarrow F_i - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} F_k & \forall i = k+1, \dots, n \\
&\dots \\
F_n &\leftarrow F_n - \frac{a_{n(n-1)}^{(n-2)}}{a_{(n-1)(n-1)}^{(n-2)}} F_{n-1}
\end{aligned}$$

Notemos que es necesario pedir que ningún valor de la diagonal se anule en ningún paso del algoritmo. Más adelante veremos que esto se puede garantizar gracias a la estructura de nuestra matriz.

El algoritmo tiene complejidad $\mathcal{O}(n^3)$ para una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ya que realiza $\mathcal{O}(n)$ operaciones escalares por fila por paso; hay n filas y realiza $n-1$ pasos.

1.2. Backward substitution

Dada una matriz triangular superior A sin elementos nulos en la diagonal, entonces el vector solución x es único, y se obtiene haciendo

$$\begin{aligned}
x_n &= \frac{b_n}{a_{nn}} \\
x_{n-1} &= \frac{b_{n-1} - a_{(n-1)n}x_n}{a_{(n-1)(n-1)}} \\
&\vdots \\
x_1 &= \frac{b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \dots - a_{1n}x_n}{a_{11}}
\end{aligned}$$

Notemos nuevamente la importancia de que los elementos de la diagonal sean no nulos para que las operaciones estén bien definidas.

Este algoritmo tiene complejidad $\mathcal{O}(n^2)$ pues para despejar cada incógnita realiza $\mathcal{O}(n)$ operaciones y hay n incógnitas.

1.3. Factorización LU

El método de Factorización LU consiste en aplicar el método de Eliminación Gaussiana pero “almacenando” las operaciones realizadas para obtener una factorización $A = LU$ con L triangular inferior (con unos en la diagonal) y U triangular superior. Más formalmente, cada paso k de la Eliminación Gaussiana es equivalente a multiplicar a la matriz $A^{(k-1)}$ a izquierda por la matriz

$$M_k = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & 1 & & \vdots \\ 0 & \dots & -\frac{a_{(k+1)k}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & -\frac{a_{nk}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

por lo que el resultado de la Eliminación Gaussiana es una matriz triangular superior U que coincide con $M_{n-1} \dots M_1 A$. Pero como todas las matrices M_k son inversibles por ser triangulares inferiores con unos en la diagonal, vale $A = M_1^{-1} \dots M_{n-1}^{-1} U = LU$.

Notemos que es posible ir armando L a cada paso de la Eliminación Gaussiana por lo que la complejidad computacional se mantiene: computar la factorización LU toma también $\mathcal{O}(n^3)$.

Luego, dado cualquier vector b , para resolver el sistema $Ax = b$ alcanza con calcular y tal que $Ly = b$ y luego x tal que $Ux = y$. El primer sistema se puede resolver en $\mathcal{O}(n^2)$ por ser L triangular inferior (usamos *forward substitution*, que es igual que *backward* pero a la inversa) y el segundo también, por ser U triangular superior (usamos *backward substitution* normalmente).

De este modo vemos que, si para una misma matriz A y múltiples vectores b_1, \dots, b_k queremos resolver todos los sistemas $Ax = b_i$, en lugar de aplicar k veces la Eliminación Gaussiana (que toma $\mathcal{O}(n^3)$) parecería conveniente calcular una única vez la factorización LU en $\mathcal{O}(n^3)$ y luego usarla para resolver los k sistemas en $\mathcal{O}(n^2)$. Este trabajo práctico tiene como objetivo principal contrastar dicha conjetura experimentalmente.

2. Desarrollo

2.1. Discretización

Para discretizar el problema limitaremos la cantidad de radios y la cantida de ángulos a evaluar, y una vez elegidas dichas cantidades los distribuiremos de manera uniforme por la corona circular. Así, los puntos de la discretización serán los puntos $P_{j,k}$ de radio r_j y ángulo θ_k con $j = 0, \dots, m$; $k = 0, \dots, n$ que cumplan

$$\begin{aligned} r_0 &= r_i \\ r_m &= r_e \\ \theta_0 &= 0 \\ \theta_n &= 2\pi \\ r_{j+1} - r_j &= \Delta r \text{ constante } \forall j = 0, \dots, m-1 \\ \theta_{k+1} - \theta_k &= \Delta \theta \text{ constante } \forall \theta = 0, \dots, n-1 \end{aligned}$$

Llamaremos $t_{j,k}$ a la temperatura del punto $P_{j,k}$ una vez alcanzado el equilibrio térmico.

De la discretización elegida y de la ecuación 1 resulta una nueva ecuación que nos permitirá armar nuestro sistema de ecuaciones¹.

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

Esta ecuación vale para cada punto $P_{j,k}$ del modelo salvo los límites, sobre los cuales hablaremos en breve.

2.2. Armado del sistema de ecuaciones

Para poder armar el sistema $Ax = b$ 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 2.

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

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 2 no vale.

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

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

¹Los detalles sobre la discretización de la ecuación pueden encontrarse en el Apéndice 6.1

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 dos 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*. La importancia de esta propiedad se tratará en breve. El mismo es:

$$t_{0,0}; t_{0,1}; \dots; t_{0,n-1}; t_{1,0}; t_{1,1}; \dots; t_{j,n-1}; t_{j+1,0}; t_{j+1,1}; \dots; t_{m,n-2}; t_{m,n-1}$$

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

2.3. Resolución del sistema de ecuaciones

2.3.1. 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.

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

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

2.3.2. Resolución sin pivoteo

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

Para su demostración usaremos los siguientes lemas:

Lema 1. *Aplicar un paso de la Eliminación Gaussiana sobre una matriz diagonal dominante preserva esa propiedad en la submatriz que resta triangular.*

Idea de demostración. Igual que la demostración vista en clase teórica de que un paso de la Eliminación Gaussiana sobre una matriz *estrictamente* diagonal dominante preserva esa propiedad en la submatriz que resta triangular, pero relajando la condición de *estrictamente* para pedir que simplemente preserve la propiedad de diagonal dominante (cambiar los $<$ por \leq). \square

Lema 2. *A cada paso k de la Eliminación Gaussiana la fila F_k con la que trabaje tendrá un elemento no nulo en la columna $k+n$, o bien será una fila de la identidad.*

Demostración. Empecemos por ver que el ancho de la banda de la matriz es estricto para las filas que no coinciden con la identidad: toda fila F_k tiene siempre como último elemento no nulo el de la columna $k+n$ o bien es una fila de la identidad. Esto surge directamente de observar el orden elegido para las incógnitas.

Ya vimos que en la matriz original A toda fila F_k o bien coincide con la identidad o bien tenía como último elemento no nulo el de la columna $k+n$. Veamos ahora que esto no se puede haber alterado en ningún paso del algoritmo: de alterarse, quiere decir que a la fila F_k se le restó una fila F_x en algún paso x , $x < k$ que tenía un elemento no nulo en la columna $k+n$. Pero por ser $x < k$, el último elemento no nulo de la fila F_x debe ser $x+n < k+x$. Absurdo, que provino de suponer que se podría alterar la propiedad en algún paso del algoritmo. \square

Proposición 2. *A cada paso k de la Eliminación Gaussiana la fila k con la que trabaje tendrá un componente no nulo en la columna k , y por lo tanto el algoritmo podrá continuar normalmente sin realizar pivoteo.*

Demostración. Queremos ver que al comenzar el paso k de la Eliminación Gaussiana $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$.

Por el lema 1, al comenzar el paso k de la Eliminación Gaussiana la submatriz que aún resta triangular (llamémosla B) es diagonal dominante. B incluye parte de la fila F_k , en particular a partir de la columna k en adelante, por lo que a_{kk} es parte de su diagonal.

A su vez, por el lema 2, al comenzar el paso k de la Eliminación Gaussiana la fila F_k tiene un elemento no nulo en su columna $k+n$. Es decir, el elemento $a_{k(k+n)}$ es no nulo, y este elemento pertenece a B . Por lo que, por definición de diagonal dominante $|a_{kk}| \geq |a_{k(k+n)}| \neq 0 \Rightarrow a_{kk} \neq 0$ como queríamos demostrar. \square

2.4. Experimentos y mediciones

En esta seccion desarrollaremos acerca de los experimentos planteados, desde la generacion de instancias de prueba hasta los criterios de medicion utilizados y los experimentos planteados.

2.4.1. Consideraciones iniciales

- La pared interna del horno en teoria deberia ser de 1500 grados constantes, nosotros consideramos mas realista que al variar los angulos de la pared interna, la temperatura varie uniformemente entre 1450 y 1550.

2.4.2. Generacion de casos de prueba

Mati, let the game begin, explica tu testgen

2.4.3. Metricas de performance

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

2.4.4. Metodo de posicionamiento estimado de la isoterma

El problema consiste en estimar, para cada angulo, la posicion radial de la isoterma α .

Consideremos la funcion de temperatura $T(r, \theta)$. Si fijamos $\theta = \theta_i$ podemos definir la funcion $g_{\theta_i}(r) = T(r, \theta_i)$ como la funcion de temperatura sobre todos los radios del angulo θ_i . Dado que nosotros conocemos $m + 1$ puntos aproximados de dicha funcion, esto reduce el problema a aproximar el elemento $z_\alpha \in Dom(g_{\theta_i})$ tal que $g_{\theta_i}(z_\alpha) = \alpha$. El metodo propuesto consiste en aplicar el siguiente algoritmo a las aproximaciones discretas conocidas de las funciones g_{θ_i} , para todos los angulos.

Teorema 2.1 (Metodo de estimacion de la isoterma k). *Sea \hat{g}_{θ_i} la funcion **discreta de aproximaciones** de temperatura de un angulo i .*

1. Buscar $x_1, x_2 \in Dom(\hat{g}_{\theta_i})$ tales que $\hat{g}_{\theta_i}(x_1) \leq \alpha \leq \hat{g}_{\theta_i}(x_2)$ y esta cota sea ajustada.
2. $z_\alpha = x_1 + \left(\frac{x_2 - x_1}{\hat{g}_{\theta_i}(x_2) - \hat{g}_{\theta_i}(x_1)} \right) * (\alpha - \hat{g}_{\theta_i}(x_1))$
3. Devolver z_α .

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

Proposición 3 (Dominio de correctitud de la estimacion). *El algoritmo anterior estima linealmente la isoterma α entre x_1 y x_2 si:*

- $\min_{x \in Dom(\hat{g}_{\theta_i})} \hat{g}_{\theta_i}(x) \leq \alpha \leq \max_{x \in Dom(\hat{g}_{\theta_i})} \hat{g}_{\theta_i}(x)$.
- $\alpha \notin Im(\hat{g}_{\theta_i})$.
- 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 $\alpha \in Im(\hat{g}_{\theta_i})$ entonces $z = x_1 = x_2$ y no es necesario ajuste lineal.

Demostración. Si se cumplen las hipotesis de la proposicion anterior. Entonces la cota existe y el algoritmo procedera a hacer el calculo aproximado 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 de estimacion para que la curva quede mas suave. Por simplicidad solo consideramos el ajuste lineal en este trabajo. \square

2.4.5. 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.

2.4.6. 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

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.

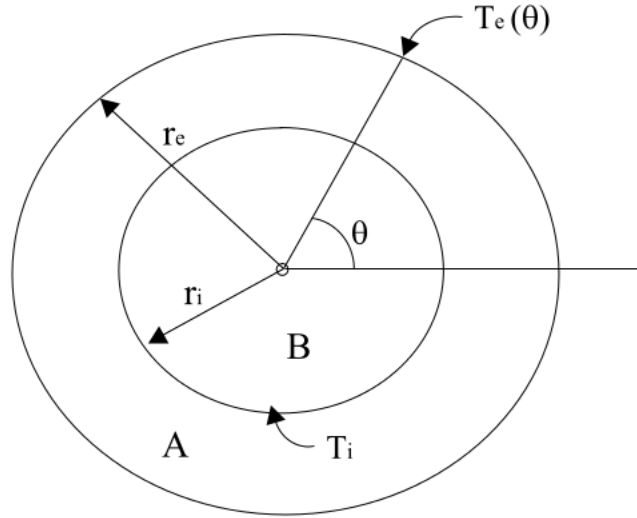


Figura 1: Sección circular del horno

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:

$$\frac{\partial^2 T(r, \theta)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T(r, \theta)}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T(r, \theta)}{\partial \theta^2} = 0 \quad (3)$$

Si llamamos $T_i \in \mathbb{R}$ a la temperatura en el interior del horno (sector B) y $T_e : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}$ 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

$$T(r, \theta) = T_i \quad \text{para todo punto } (r, \theta) \text{ con } r \leq r_i \quad (4)$$

$$T(r_e, \theta) = T_e(\theta) \quad \text{para todo punto } (r_e, \theta) \quad (5)$$

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 $0 = \theta_0 < \theta_1 < \dots < \theta_n = 2\pi$ en n ángulos discretos con $\theta_k - \theta_{k-1} = \Delta\theta$ para $k = 1, \dots, n$, y una partición $r_i = r_0 < r_1 < \dots < r_m = r_e$ en $m + 1$ radios discretos con $r_j - r_{j-1} = \Delta r$ para $j = 1, \dots, m$.

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

Para encontrar estos valores, transformamos la ecuación (2) en un conjunto de ecuaciones lineales sobre las incógnitas t_{jk} , evaluando (2) 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 (2) por medio de las siguientes fórmulas de diferencias finitas:

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

$$\frac{\partial T(r, \theta)}{\partial r}(r_j, \theta_k) \cong \frac{t_{j,k} - t_{j-1,k}}{\Delta r} \quad (7)$$

$$\frac{\partial^2 T(r, \theta)}{\partial \theta^2}(r_j, \theta_k) \cong \frac{t_{j,k-1} - 2t_{jk} + t_{j,k+1}}{(\Delta \theta)^2} \quad (8)$$

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, $T_i, T_e(\theta)$) 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. 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.²

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.
- 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 n_{inst} 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 n_{inst} .

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.

²Sugerencia: 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.

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 ejecutar (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 de 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.