



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE LA COMPUTACIÓN
CÓMPUTO CIENTÍFICO CON ALTO VALOR AGREGADO
DR. LUIS MIGUEL DE LA CRUZ SALAS

Becerra Pedraza Daniel

Ciudad de México, 12 de Junio del 2018

Proyecto Final

Descripción

Implementar los métodos Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, CGM, BICGSTAB y GMRES. Probar la convergencia para un problema en 2D y diferentes parámetros (tamaño de malla, iteraciones, tolerancia, etc.)

Breve descripción del desarrollo de los métodos

Los algoritmos usados para implementar los métodos fueron tomados del libro de Yousef Saad: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, para el caso de GMRES la implementación que se realizó fue la de GMRES básico, es decir, sin reinicio.

Desarrollo del software

El software desarrollado, es una modificación a los desarrollos del Dr. Luis Miguel de la Cruz Salas del cual se retomaron los algoritmos básicos (Jacobi, Gauss-Seidel, SOR y CGM), y del Ing. Alejandro Urrutia Salazar del cual se usaron las clases para implementar el método de funciones en base radial.

Lo que se añadió fueron los métodos de BICGSTAB y GMRES (Sin reinicio), así como soporte para pruebas a los algoritmos implementados por el Dr. Luis Miguel. También se modificó la clase Solver del desarrollo del Ing. Alejandro para soportar los métodos de solución de matrices implementados.

La dirección del repositorio donde se encuentra el código del software empleado es:

<https://github.com/baloo284/MatrixSolversComp>

Instrucciones de ejecución

1. Descargar los archivos del repositorio en una carpeta local
2. Abrir el IDE Spyder(Python 3.x)
3. Abrir los archivos Example - FDM - L2D_v01.py(ejercicio para resolver el Laplaciano en 2D usando el método de diferencias finitas), Example - RBF - AD2D_v01.py(ejercicio para resolver Advección-Difusión en 2D usando el método de funciones de base radial), Example -

RBF - L2D_v01.py(ejercicio para resolver el Laplaciano en 2D usando el método de funciones de base radial).

Para todos los archivos todos los parámetros (tamaño de malla, valores en las fronteras, tolerancia, número máximo de iteraciones y algunos parámetros particulares) pueden ser modificados.

4. Ejecutar el archivo (de los descritos anteriormente) para visualizar la comparación de las aproximaciones realizadas así como la comparación de la convergencia de los algoritmos implementados.

Resultados

Para realizar una comparación más completa de la convergencia de los métodos se realizaron pruebas con matrices de dos tipos: diagonal-dominante y dispersas, sin embargo, dado que todos los métodos convergieron con matrices del tipo diagonal-dominante para este tipo de matrices se realizaron pruebas para mallas de diferente tamaño, para una tolerancia menor y para un número máximo de iteraciones mayor.

Pruebas con Método de diferencias Finitas

La matriz que se busca resolver con el método de diferencias finitas para el problema del Laplaciano en 2D es pentadiagonal, además es diagonal dominante como se muestra a continuación:

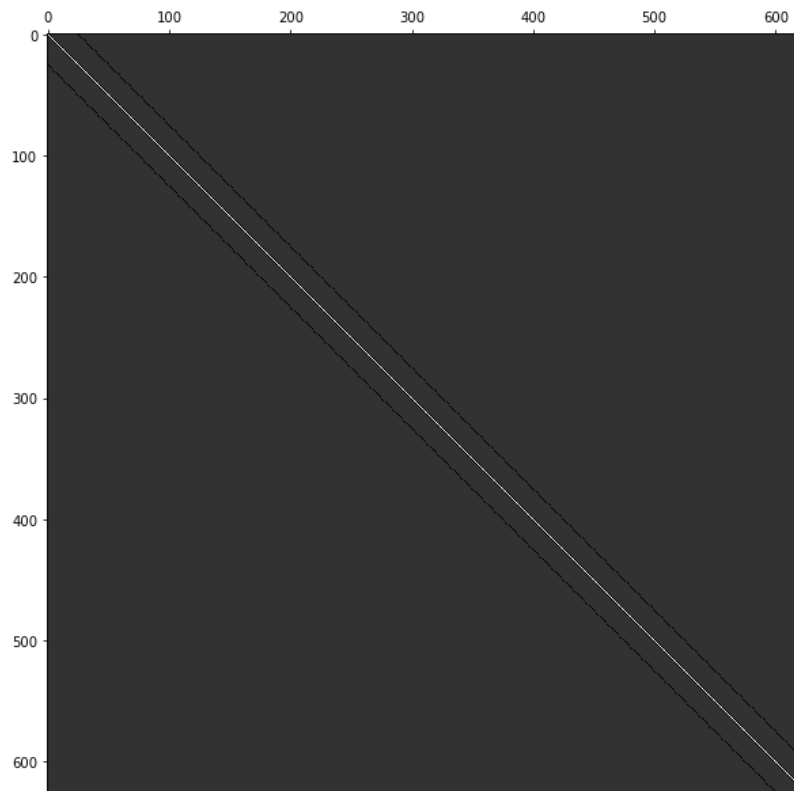


Figura 1: Forma de la matriz planteada para el problema del Laplaciano en 2D usando FDM.

Las pruebas iniciales se realizaron para un tamaño relativamente pequeño de malla (25×25), una tolerancia aceptable (10^{-8}) y un número máximo de iteraciones de 200.

El método que mejor convergió para estas pruebas fue BICGSTAB.

Malla: 25x25 - Tolerancia: 1e-8 - Max. Iter.: 200

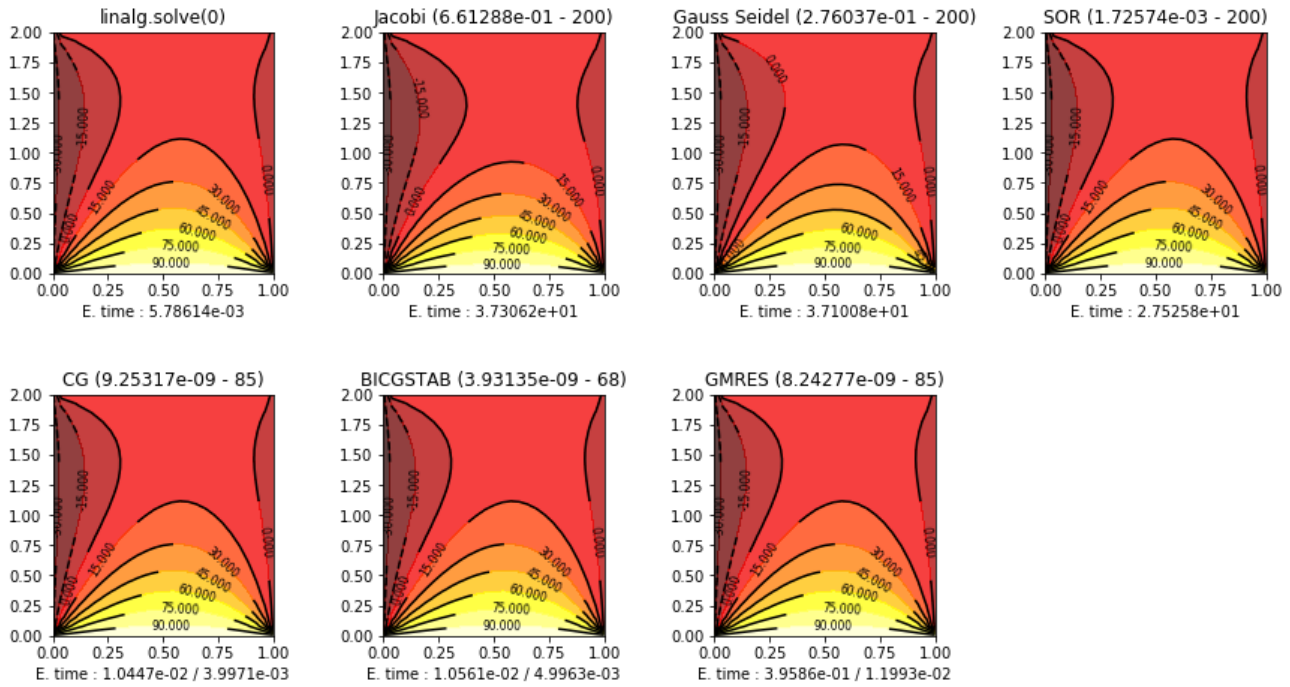


Figura 2: Comparación de soluciones obtenidas.

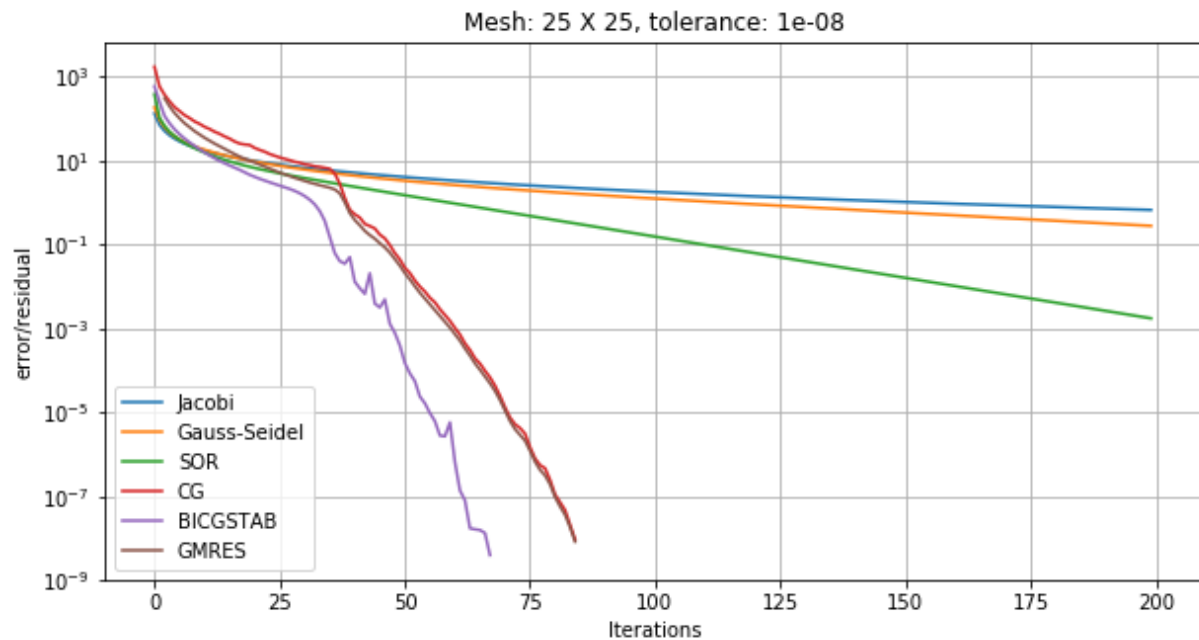


Figura 3: Comparación de la convergencia de los métodos.

Para esta prueba todos los métodos convergieron, sin embargo, comparando los métodos del subespacio de Krylov y los básicos se puede apreciar que los primeros convergieron más rápido que los segundos, esto tanto en iteraciones como en tiempo, de hecho, los segundos agotaron el número máximo de iteraciones y no cumplieron la tolerancia deseada.

Malla: 45x45 - Tolerancia: $1e-8$ - Max. Iter.: 200

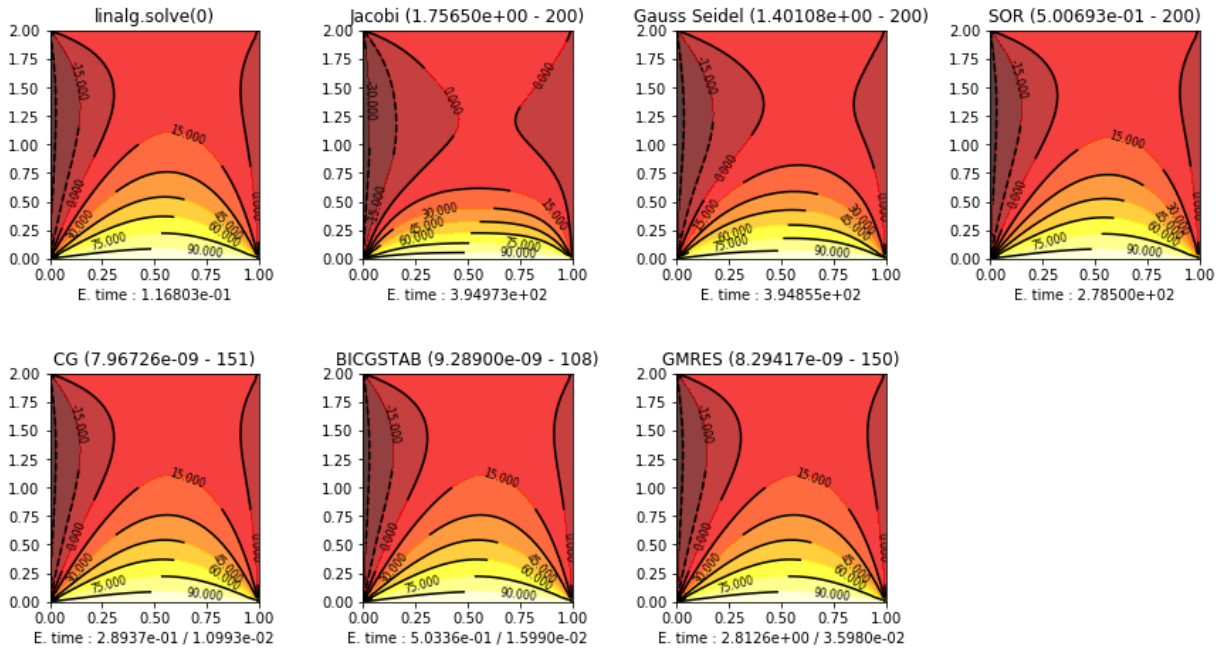


Figura 4: Comparación de soluciones obtenidas.

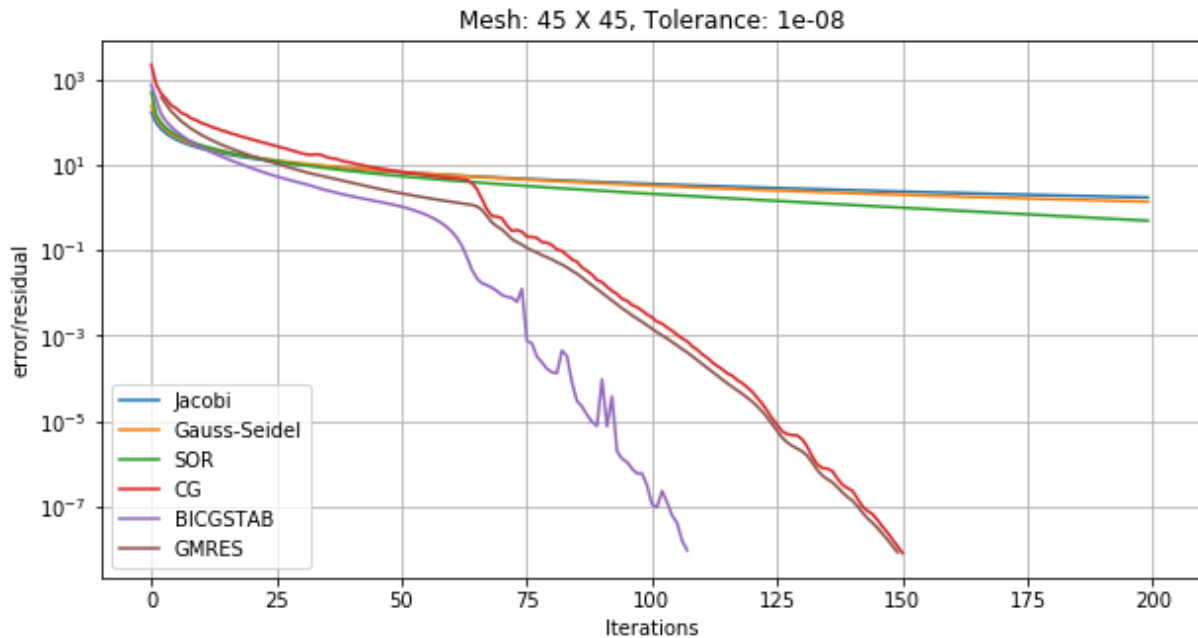


Figura 5: Comparación de la convergencia de los métodos.

En los resultados arrojados por esta prueba se puede apreciar que los métodos básicos se tardan aún más en converger, tanto en tiempo como en iteraciones, debido a que ahora debe hacerse más procesamiento de puntos.

Malla: 45x45 - Tolerancia: 1e-8 - Max. Iter.: 200 - ω : 2

Esta prueba se hizo para mostrar lo que sucede cuando el parámetro de relajación ω de SOR se encuentra fuera del rango recomendado.

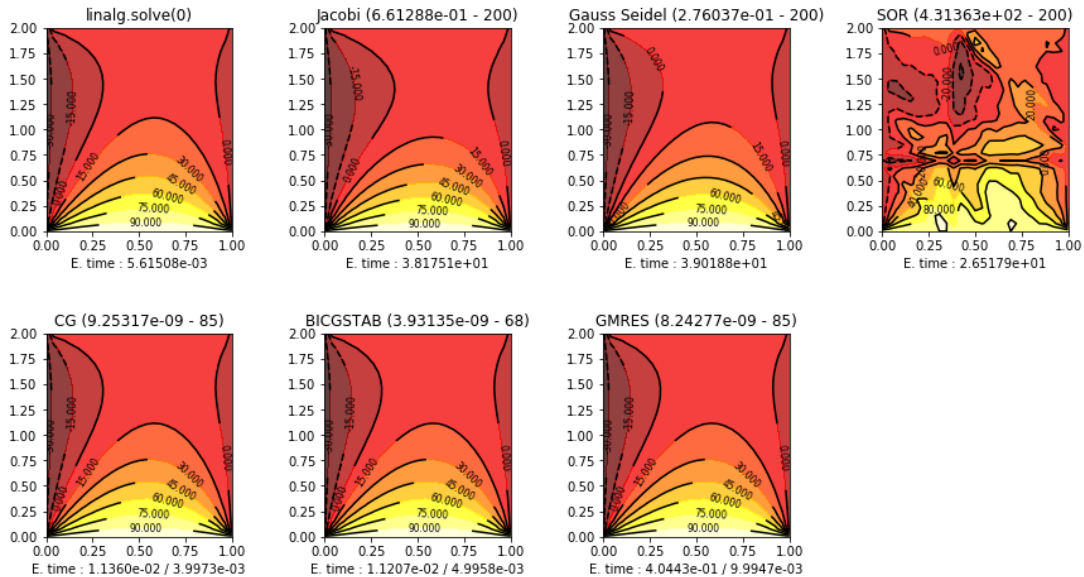


Figura 6: Comparación de soluciones obtenidas.

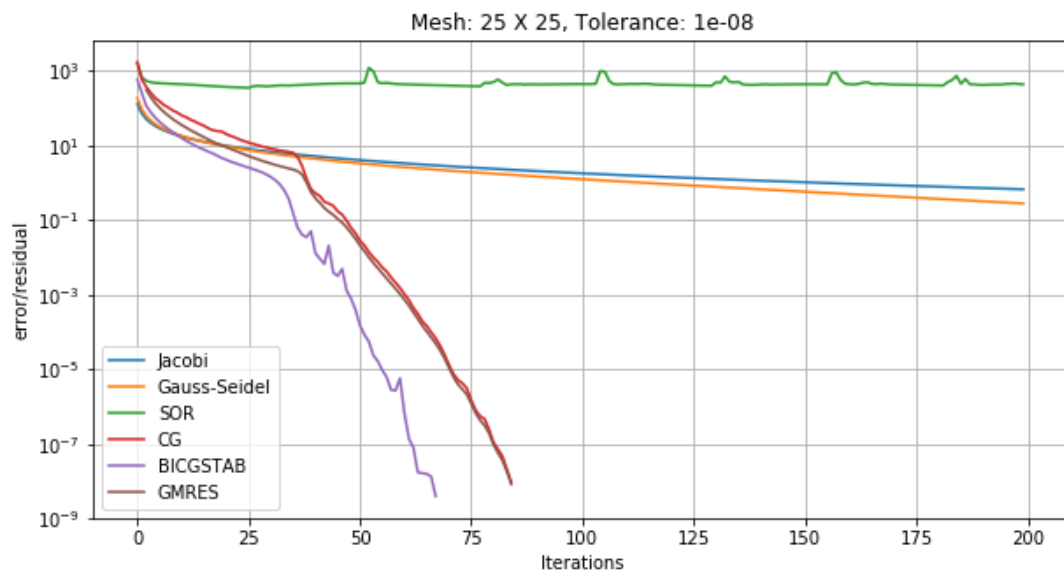


Figura 7: Comparación de la convergencia de los métodos.

Como se puede apreciar en la solución así como en la comparación de convergencia, en efecto se corrobora que un valor para el parámetro de relajación ω fuera del rango sugerido deriva en la

no convergencia de éste método.

Malla: 25x25 - Tolerancia: 1e-20 - Max. Iter.: 200

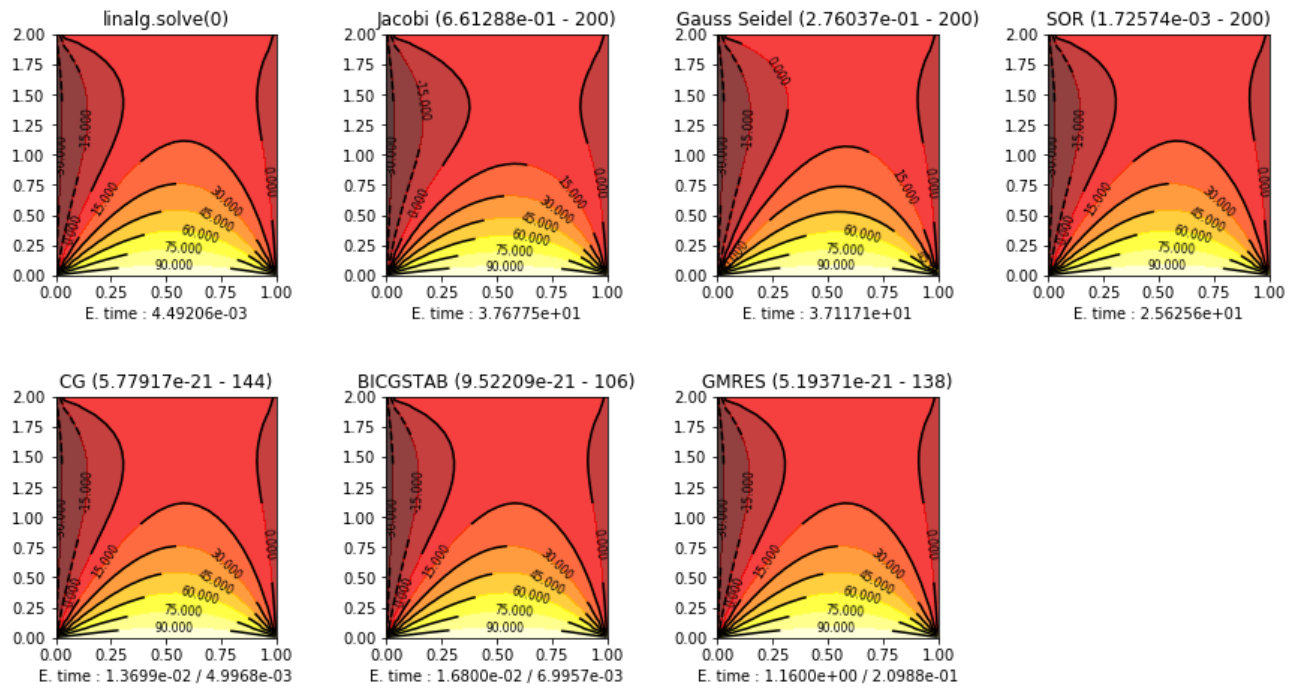


Figura 8: Comparación de soluciones obtenidas.

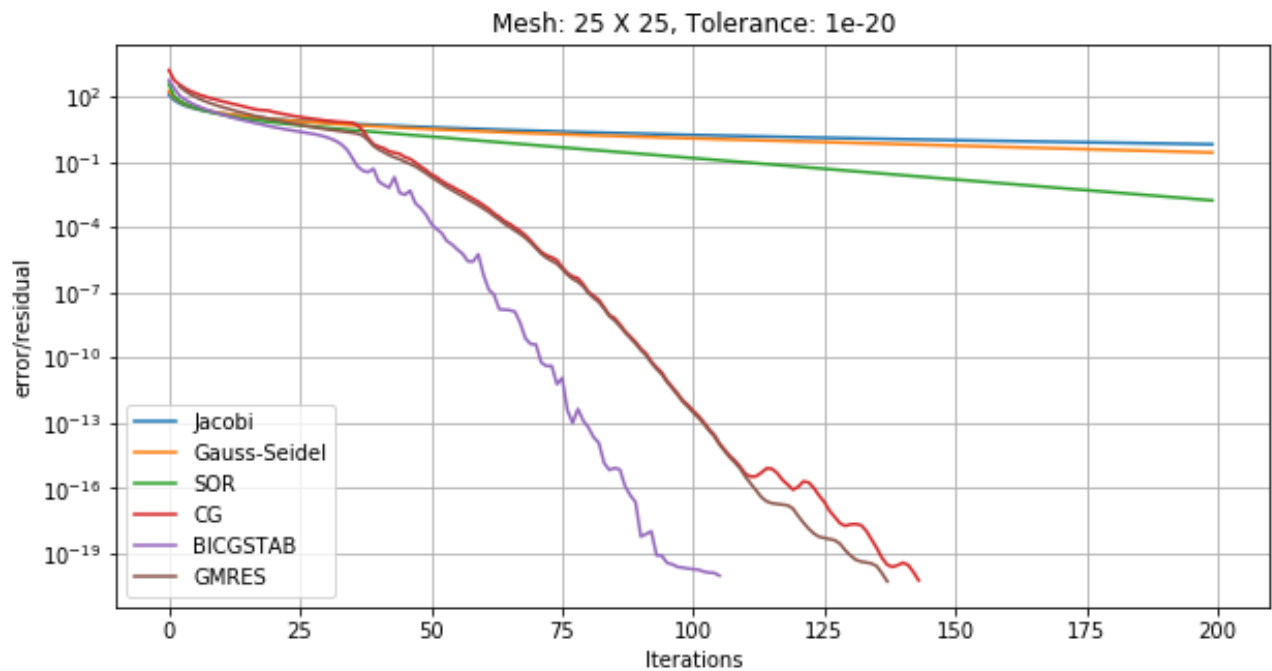


Figura 9: Comparación de la convergencia de los métodos.

De los resultados de esta prueba se aprecia que aún con un límite razonable de iteraciones los métodos del subespacio de Krylov aún convergen y el número de iteraciones efectuadas aumentó también en un nivel razonable.

Malla: 100x100 - Tolerancia: 1e-20 - Max. Iter.: 200

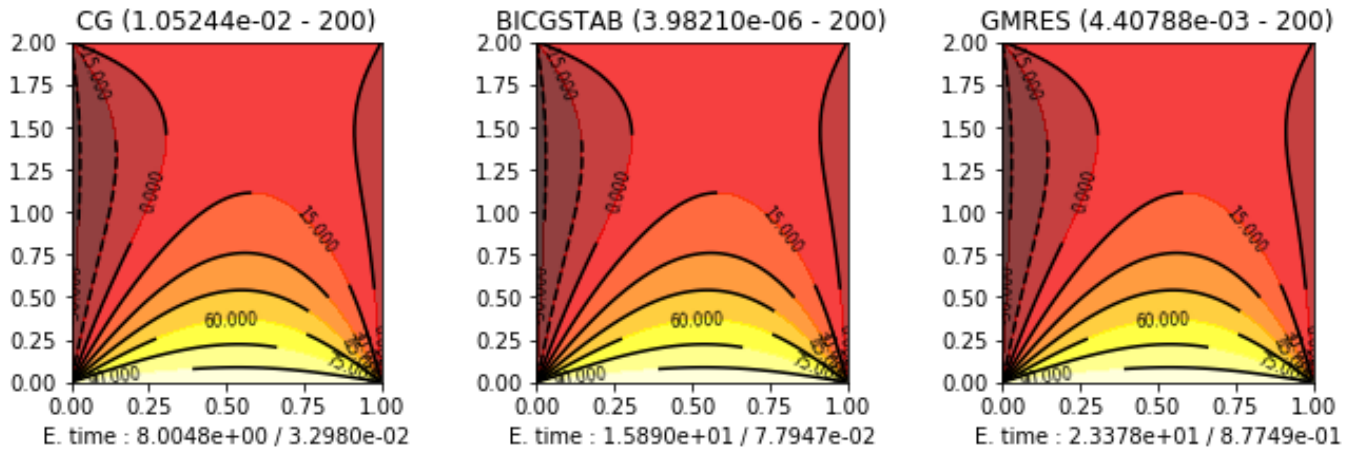


Figura 10: Comparación de soluciones obtenidas.

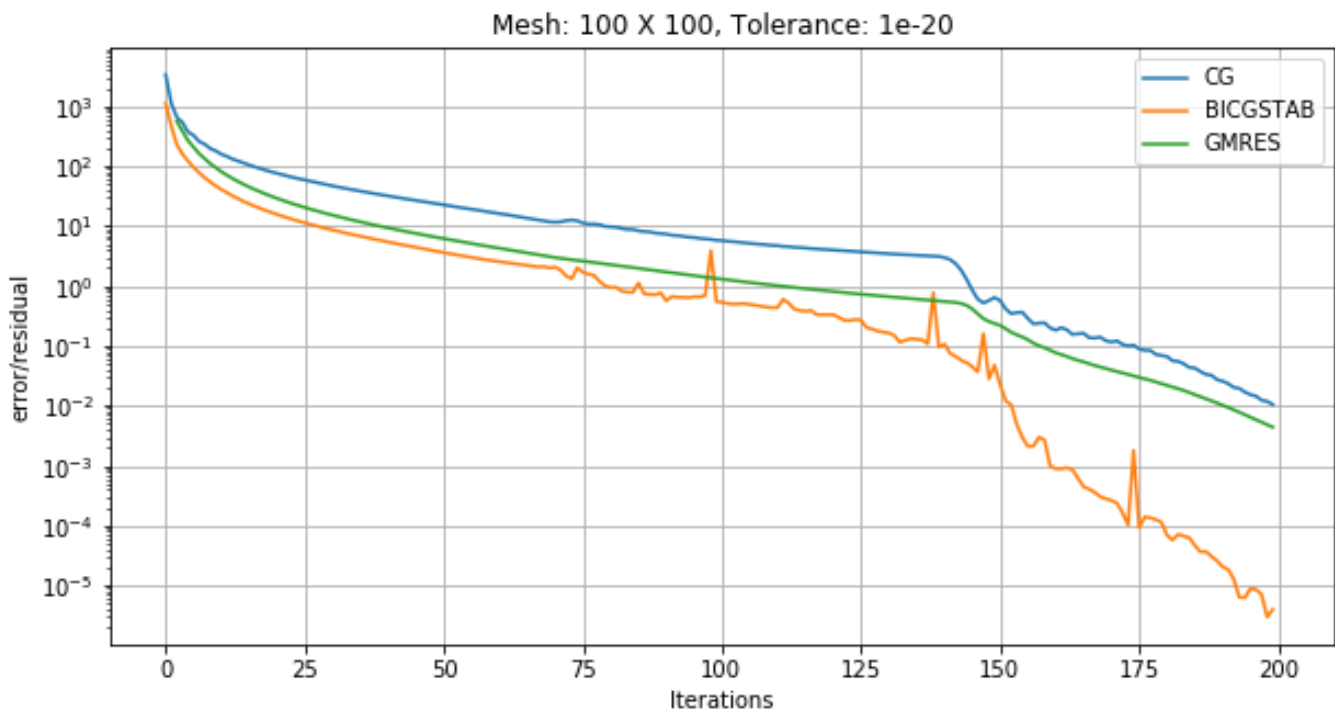


Figura 11: Comparación de la convergencia de los métodos.

Para esta prueba los métodos básicos tardaron demasiado en converger por lo que la comparación se enfocó en los métodos del subespacio de Krylov, entre los cuales resalta BICGSTAB, ya que, aunque ningún método alcanzó la tolerancia deseada, fue el que convergió más rápido.

Malla: 100x100 - Tolerancia: 1e-20 - Max. Iter.: 450

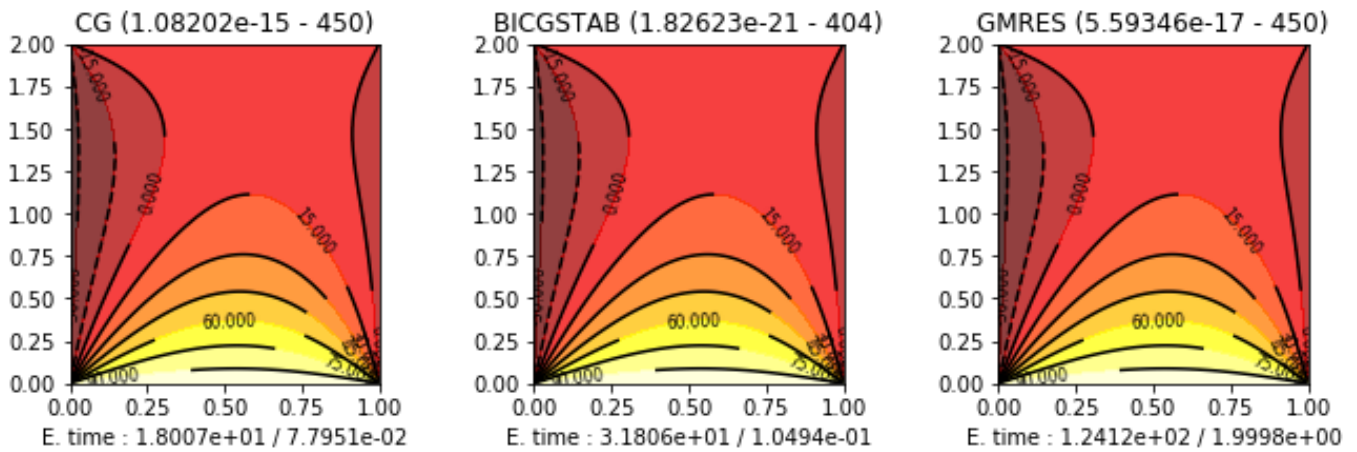


Figura 12: Comparación de soluciones obtenidas.

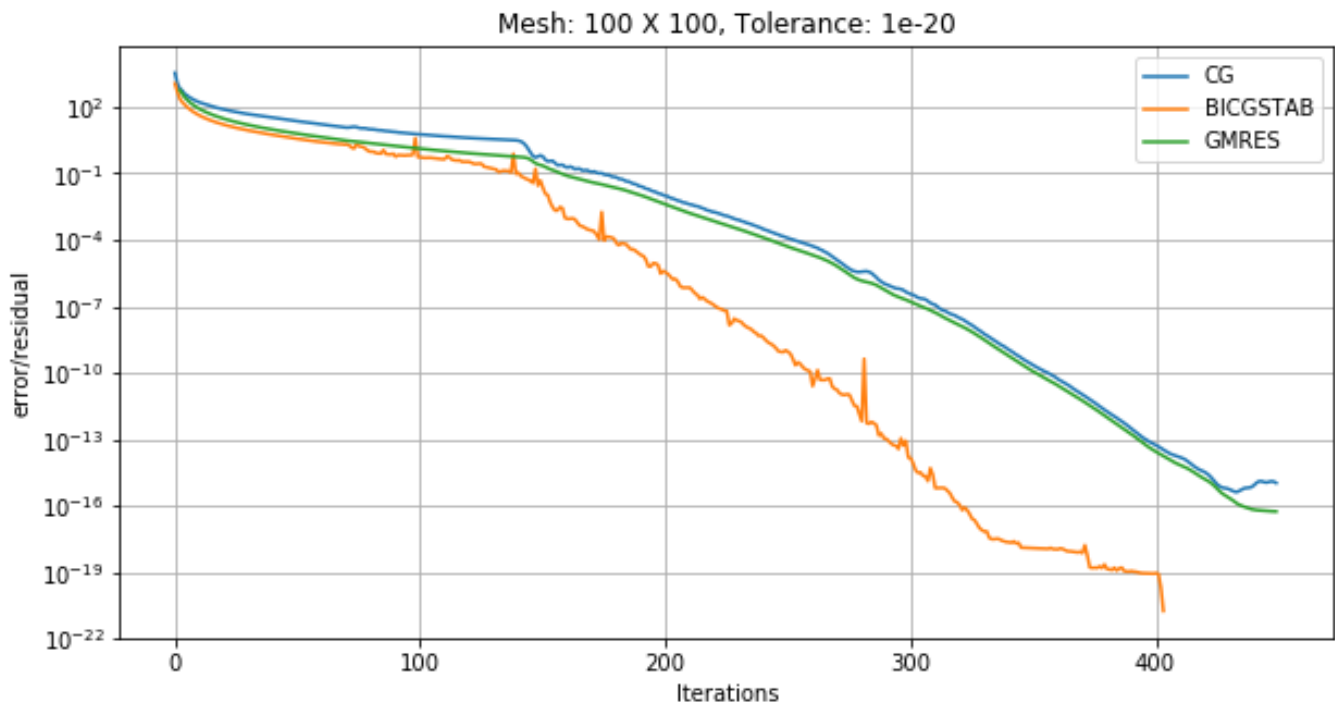


Figura 13: Comparación de la convergencia de los métodos.

De esta prueba se puede apreciar que un aumento en el número de iteraciones máximas para una tolerancia deseada pequeña, y una malla de tamaño considerable tiene como consecuencia una solución que se ajusta a los parámetros deseados de tolerancia.

Pruebas con Funciones de Base Radial

Se realizaron pruebas con matrices construidas usando funciones de base radial para solucionar los problemas del Laplaciano y de Advección-Difusión en 2D, por lo que las matrices a resolver son matrices dispersas y con lo que se comprobó que los métodos básicos y de gradiente conjugado no convergieron.

Problema: Transferencia de calor - Malla: 25x25 - Tolerancia: 1e-8 - Max. Iter.: 290

La matriz que se busca resolver con el método de funciones de base radial para el problema del Laplaciano en 2D es de tipo dispersa, como se muestra a continuación:

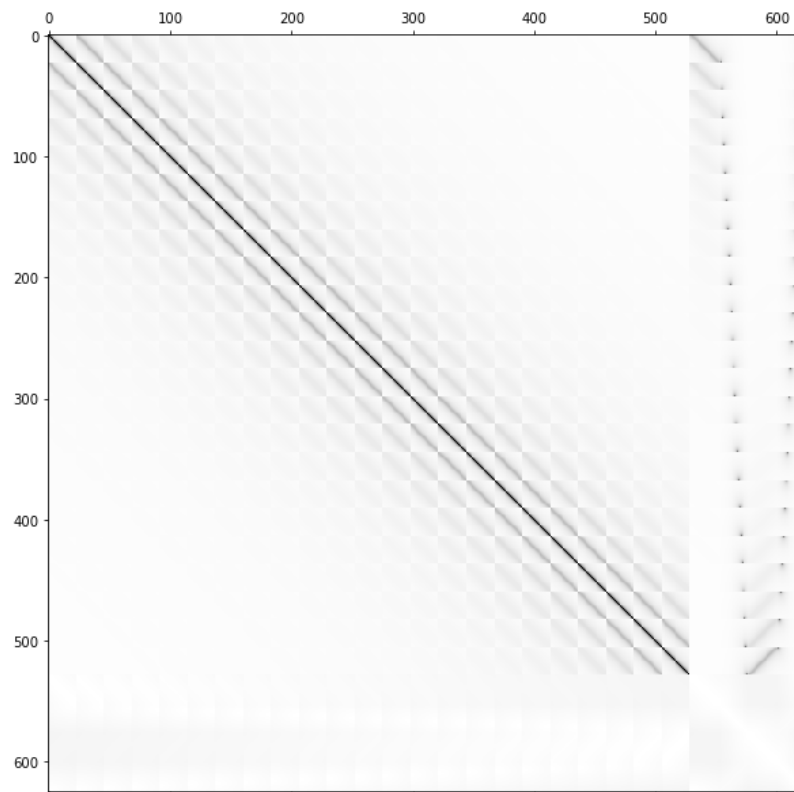


Figura 14: Forma de la matriz planteada para el problema del Laplaciano en 2D usando RBF.

Las pruebas iniciales se realizaron para un tamaño relativamente pequeño de malla (25×25), una tolerancia aceptable (10^{-8}) y un número máximo de iteraciones de 200, buscando poder comparar los resultados de esta prueba con los de las anteriores.

El método que mejor convergió para estas pruebas fue GMRES.

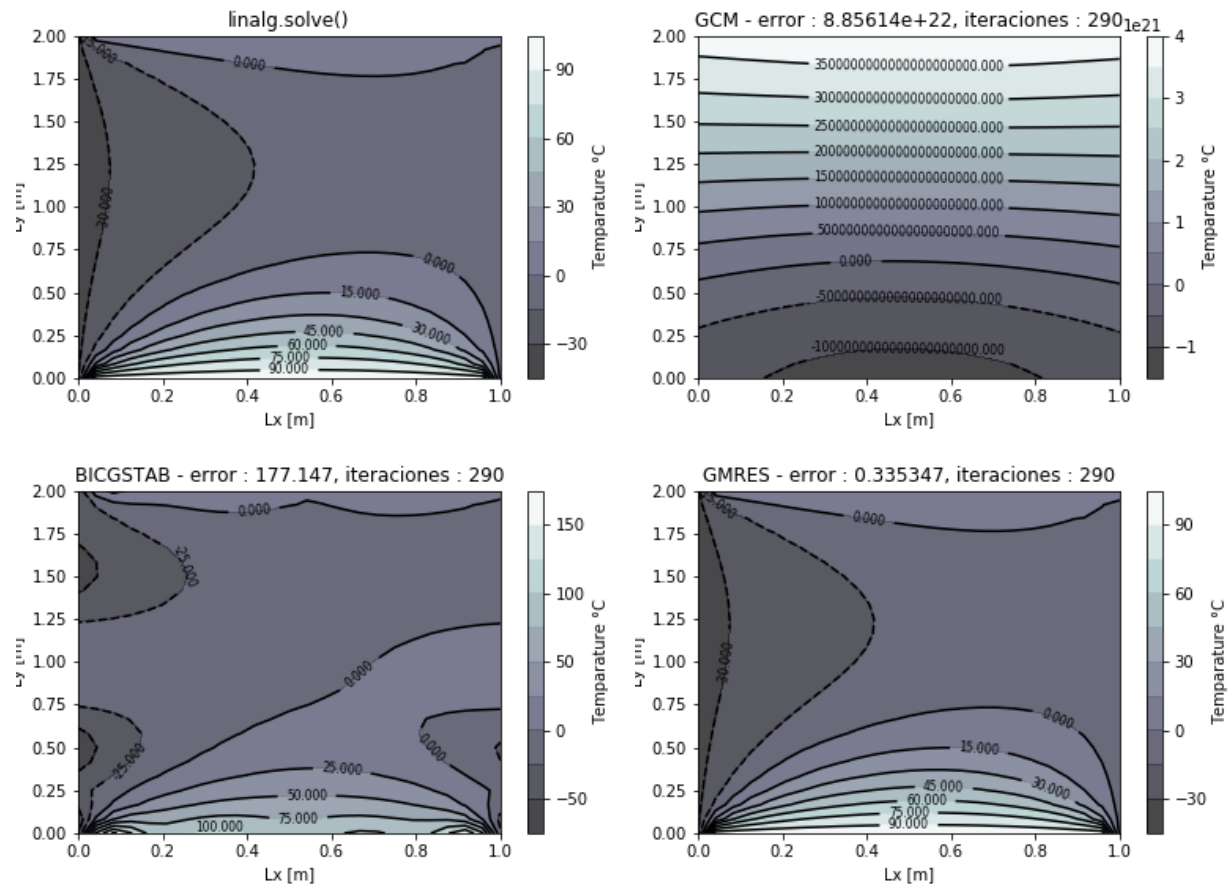


Figura 15: Comparación de soluciones obtenidas.

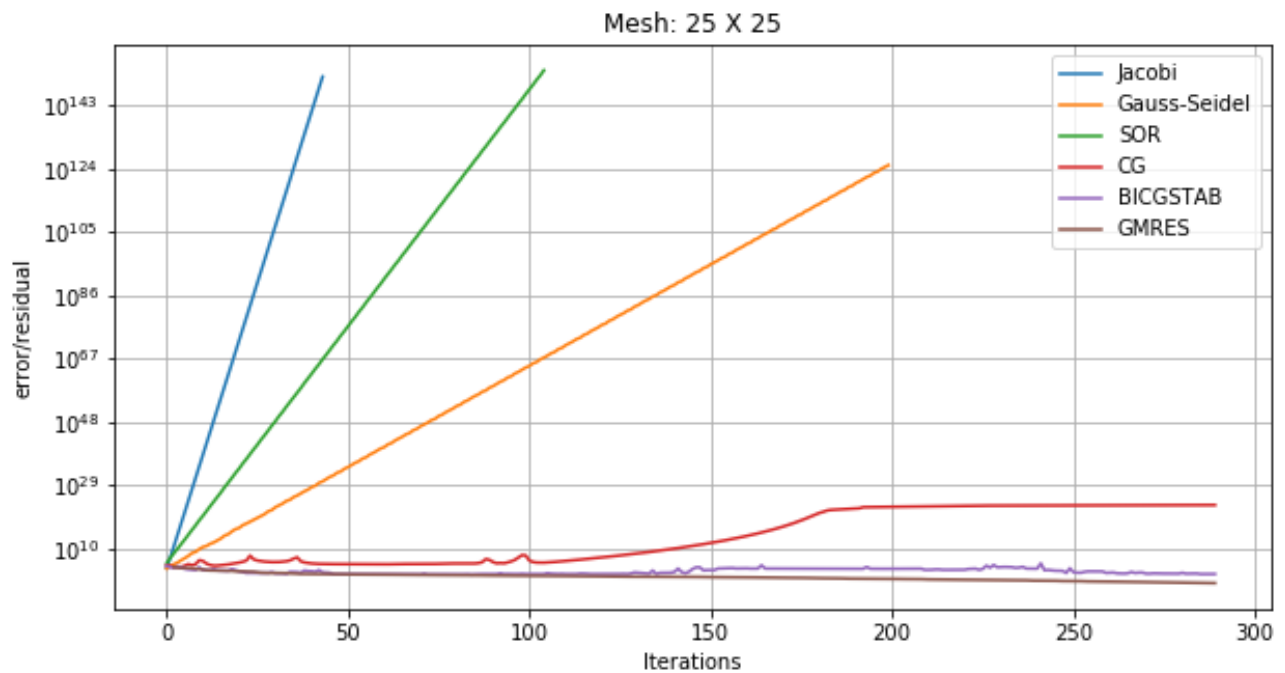


Figura 16: Comparación de la convergencia de todos los métodos.

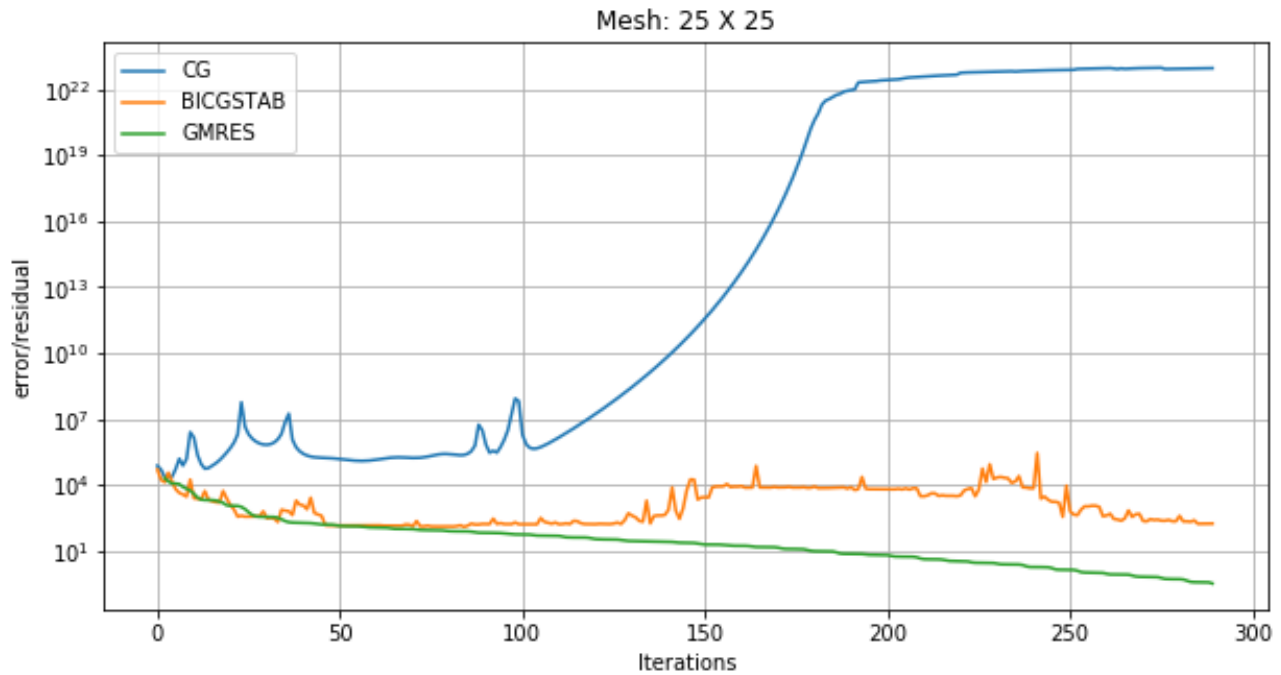


Figura 17: Comparación de la convergencia de los métodos del subespacio de Krylov.

De los resultados arrojados por esta prueba se observó que los métodos tradicionales divergieron muy rápido, el método de Gradiente conjugado, que precisamente diverge para este tipo de matrices, lo hizo de manera lenta, el método de BICGSTAB no convergió, caso contrario a GMRES el cual sí convergió, sin embargo, tardó considerablemente más que cuando se resolvió el mismo problema con el método de diferencias finitas.

La matriz que se busca resolver con el método de funciones de base radial para el problema de Advección-Difusión es de tipo dispersa, como se muestra a continuación:

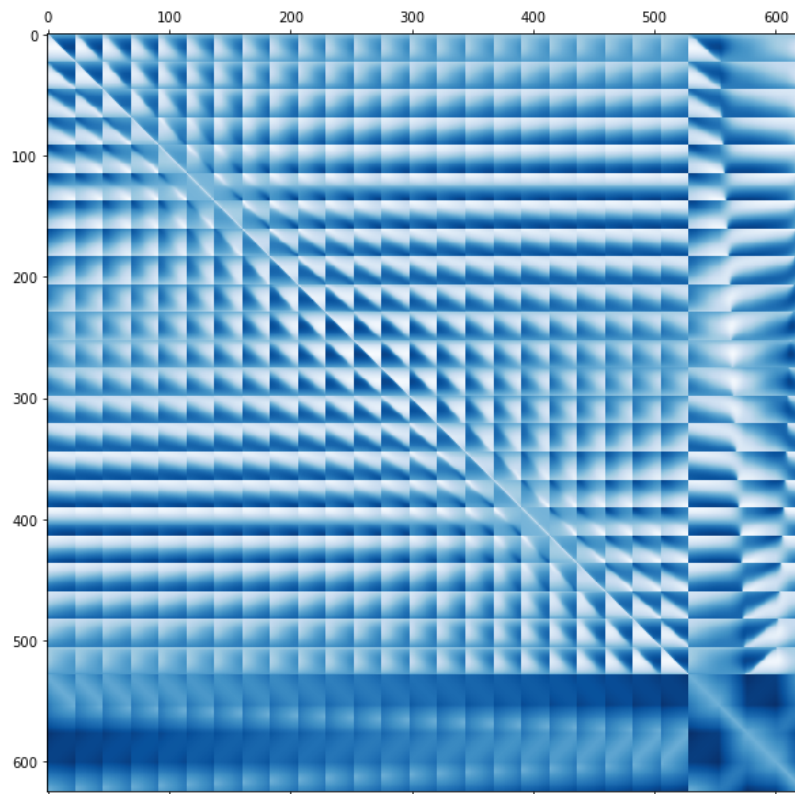


Figura 18: Forma de la matriz planteada para el problema de Advección-Difusión en 2D usando RBF.

Como se puede apreciar, ésta matriz es aún más densa que la matriz generada para resolver el Laplaciano en 2D usando funciones de base radial.

Para esta prueba se usaron los mismos parámetros (tamaño de malla, tolerancia, iteraciones, etc.) que la prueba anterior.

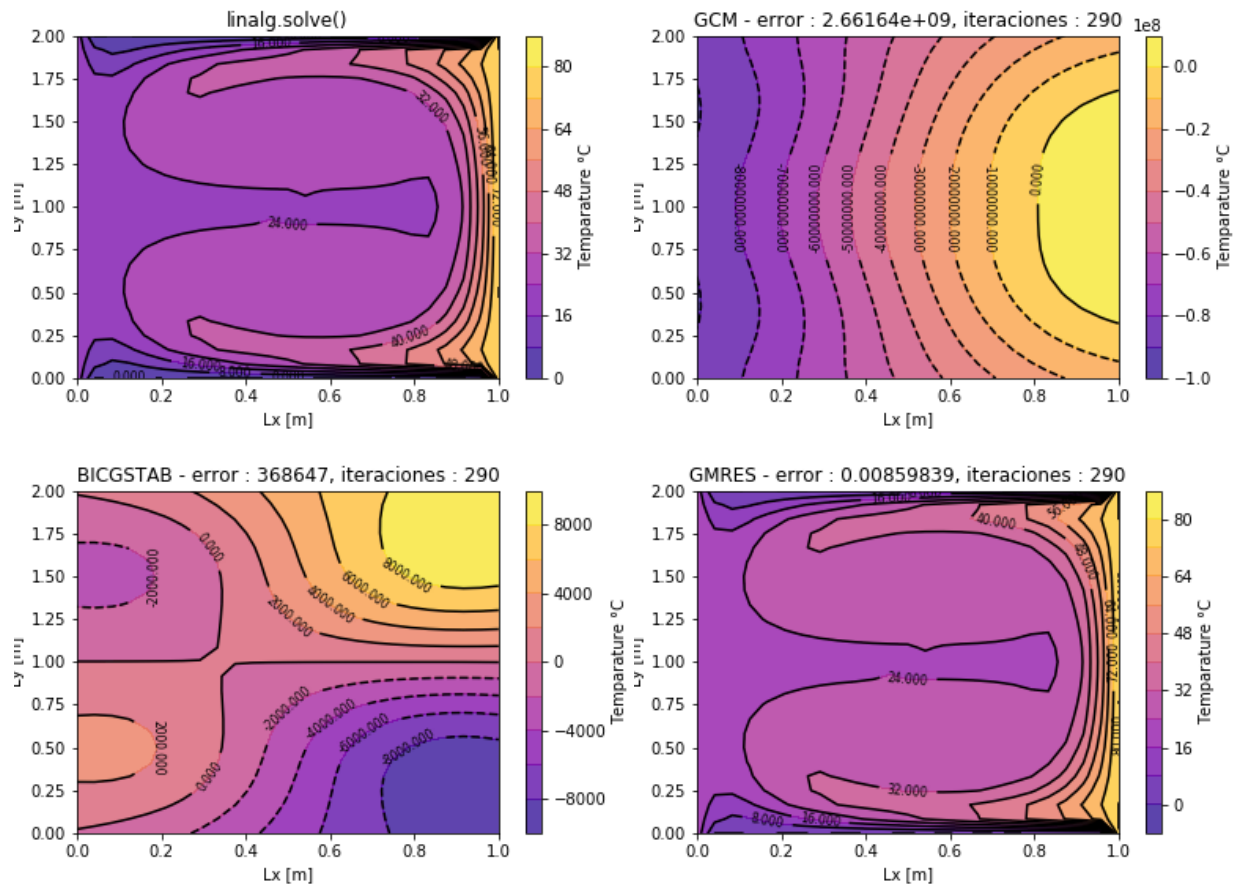


Figura 19: Comparación de soluciones obtenidas.

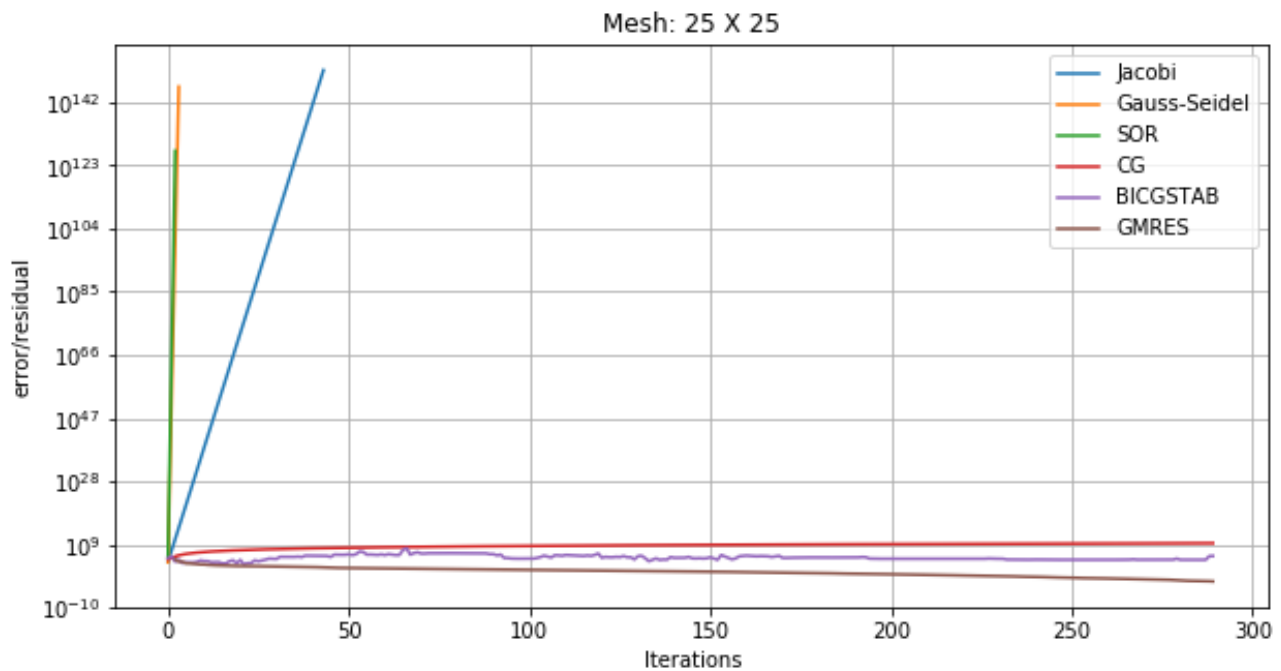


Figura 20: Comparación de la convergencia de todos los métodos.

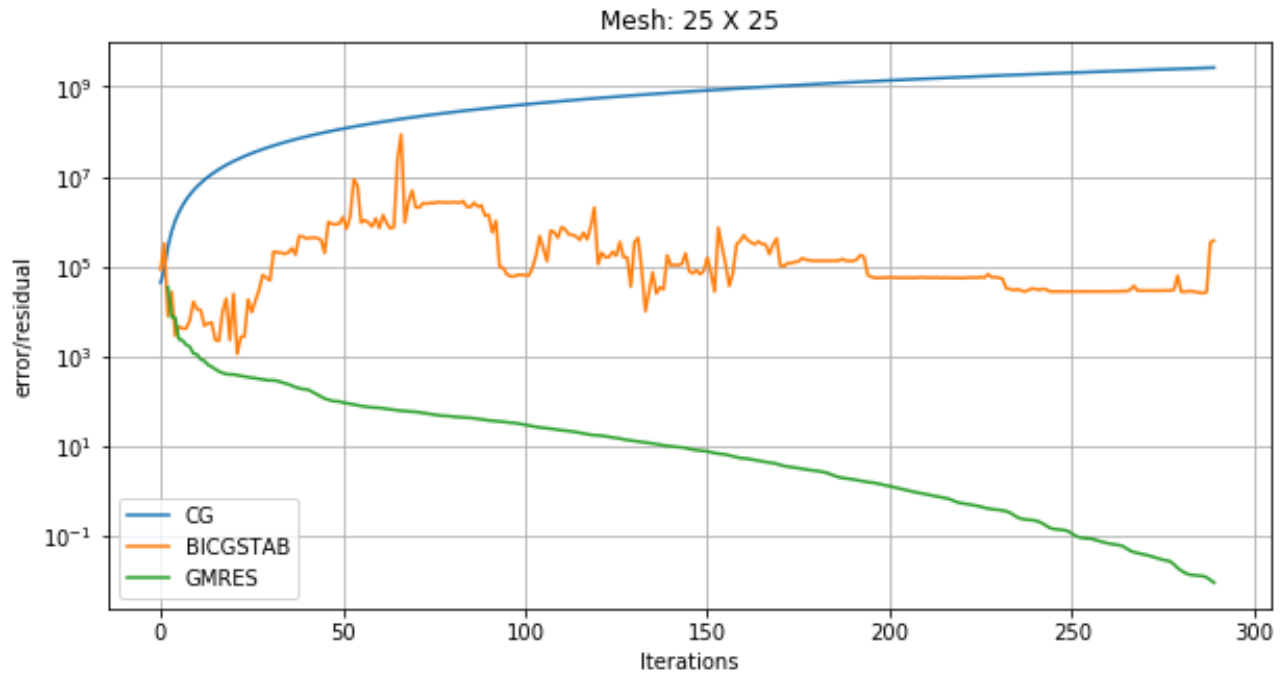


Figura 21: Comparación de la convergencia de los métodos del subespacio de Krylov.

En esta prueba se observaron resultados similares a la prueba anterior, salvo que GMRES convergió más rápido para una matriz más densa.

Bibliografía

Yousef Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, Second edition, 2000.

De la Cruz Salas, Luis Miguel *Presentación correspondiente al tema de algoritmos iterativos para solución de sistemas lineales del curso de Cómputo Científico con Alto Valor Agregado*, UNAM, 2018.

Nieto Buitrón, Mario Arturo *Presentación correspondiente al tema del algoritmo bicgstab para solución de sistemas lineales del curso de Cómputo Científico con Alto Valor Agregado*, UNAM, 2018.