Curso: Métodos Iterativos para la Solución de Grandes Sistemas de Ecuaciones Lineales y No Lineales

Guía Nro 2. Métodos Iterativos No Estacionarios Clásicos – Métodos basados en iterar sobre Espacios de Krylov

Rodrigo Paz, Mario Storti
Centro Internacional de métodos Computacionales en Ingeniería

10 de mayo de 2007

Método GMRes (Generalized Minimum Residuals).

Fecha entrega: 24/MAY/2007.

1. Usando el algoritmos de Arnoldi, encontrar una matriz ortogonal $\mathbf{Q}$ tal que $\mathbf{Q^T A Q} = \mathbf{H}$ es Hessemberg superior y $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 2 \\ -4 & 0 & -2 \\ -4 & -1 & -1 \end{pmatrix}$

2. Demostrar los Teoremas T3.1.4 y T3.1.5 del apunte.

3. Consideremos la ec. de *advección-difusión* lineal escalar

$$k\phi'' - a\phi' = 0 \tag{1}$$
$$\phi(0) = 0 \tag{2}$$
$$\phi(1) = 1 \tag{3}$$

donde

- ϕ = temperatura del fluido
- k = conductividad térmica del fluido
- a = velocidad del fluido (puede ser positiva o negativa)

La solución exacta es

$$\phi(x) = \frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{Pe}x} - 1}{\mathrm{e}^{2\mathrm{Pe}} - 1} \tag{4}$$

donde

$$\mathrm{Pe} = \frac{aL}{2k} \tag{5}$$

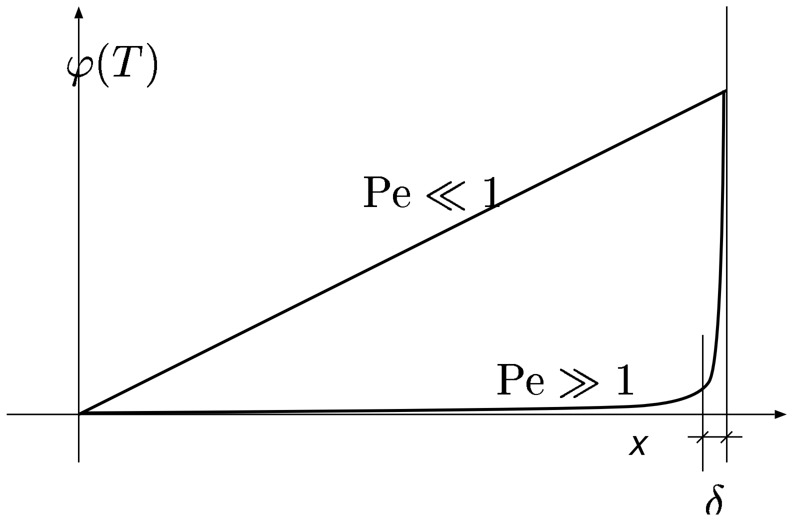

Figura 1: Solución para el problema de advección difusión, en los límites dominado por difusión y por advección

siendo $L = 1$. En la figura 1 vemos Para $a \to 0$ el problema se acerca a la ec. de Laplace y la solución tiende a ser una recta que une los valores de contorno, mientras que para Pe grandes y positivos el fluido va en la dirección $+x$ y arrastra el valor de la condición *aguas arriba* una cierta longitud hasta que a una distancia pequeña δ sube rápidamente para tomar el valor dado por la condición en $x = 1$.

La discretización numérica pasa por reemplazar las derivadas por diferencias numéricas

$$\phi_j'' \approx (\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1})/h^2 \tag{6}$$

y

$$\phi_j' \approx= (\phi_{j+1} - \phi_{j-1})/(2h) \tag{7}$$

Lamentablemente, esta discretización falla cuando el $\mathrm{Pe} \gg 1$, en el sentido de que produce fuertes oscilaciones numéricas. La solución usual es agregar una cierta cantidad de *difusión numérica*, es decir que se modifica la ecuación original a

$$(k + k_{\mathrm{num}})\,\phi'' - a\phi' = 0 \tag{8}$$

donde

$$k_{\mathrm{num}} = |a|h/2 = \mathrm{Pe}_h k, \qquad \text{siendo} \tag{9}$$

$$\mathrm{Pe}_h = \frac{ah}{2k} \tag{10}$$

Realizar las siguientes tareas:

a) Calcular la matriz para $\mathrm{Pe}_h = 0{,}01$, 1 y 100 *b*) Calcular los autovalores. Ver la distribución en el plano complejo.

c) Verificar que la matriz no es simétrica. Ver que la parte correspondiente a ϕ'' es simétrica mientras que la que corresponde a ϕ' es antisimétrica.

d) Ver a que tiende la matriz para $k \to 0$. Es diagonalizable?

e) Resolver con los métodos de GMRes y CGNE modificando las rutinas utilizadas para la GTP de CG (se provee un script de octave con la implementación de GMRes). Realizar los cambios necesarios en `gmres.m` para utilizar precondicionamiento point Jacobi. Tener en cuenta que en PETSc se reportan los residuos del problema precondicionado (si es que se usó).

f) Al igual que para el algoritmo CG, estudiar la escalabilidad de GMRes usando una malla de $2000 \cdot n_{\rm proc}$.

g) Pensar y explicar como se podría hacer para calcular $A^T x$ sin construir A.