

## Aspectos Geométricos de Métodos em Subespaços de Krylov

Rafael F. Lago ,

Nelson Maculan ,

Michael de Souza

PESC, COPPE-UFRJ

21941-972, Rio de Janeiro, RJ

E-mail: maculan@cos.ufrj.br, rafael@cos.ufrj.br, michaelfs@cos.ufrj.br

**Luiz M. Carvalho**

Departamento de Matemática Aplicada, IME-UERJ

20559-900, Rio de Janeiro, RJ

E-mail: luizmc@ime.uerj.br

Estamos desenvolvendo o estudo e a implementação em paralelo de métodos iterativos para solução de sistemas lineares baseados em projeções em subespaços de Krylov. A principal ferramenta teórica desse estudo é o artigo [3], e, seguindo as idéias ali apresentadas, fazemos a descrição detalhada de alguns métodos que não são descritos no artigo: GCR [4] e GCRO [2]. Além disso estamos fazendo a implantação de ambos os métodos, em paralelo, no conjunto de rotinas PETSc [1].

Seja o sistema  $Ax = b$  onde  $A$  é não-singular, o resíduo  $r_k = b - Ax_k$ , com  $x_0$  dado. Disponemos de uma sequência  $\{\mathcal{W}_j\}_{j=0}^L$  de espaços aninhados, onde  $\dim(\mathcal{W}_j) = j$  e  $\mathcal{V}_j = \{span\{r_0\} + \mathcal{W}_{j-1}\}$ .

De [3] temos o seguinte teorema:

**Teorema 1.** Seja  $\{w_j\}_{j=0}^L$  uma sequência de aproximações  $r_0 \in \mathcal{H}$ , tal que  $w_j \in \mathcal{W}_j$  e  $w_L = r_0$ . Então existe um produto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$  em  $\mathcal{V}_L = \mathcal{W}_L$  tal que

$$\|r_0 - w_j\|_V = \min_{w \in \mathcal{W}_j} \|r_0 - w\|_V \quad j = 1, 2, \dots, L-1 \quad (1)$$

se e somente se  $w_j \in \mathcal{W}_{j-1}$  implica em  $w_j = w_{j-1}$ , para  $j = 1, 2, \dots, L-1$ .

Definimos então *Minimal Residual* como sendo a família de métodos para solução de sistemas lineares que, de posse de uma base aninhada de subespaços  $\{\mathcal{W}_j\}_{j=0}^L$  tenta encontrar uma aproximação de  $r_0$  através de (1), para alguma norma  $\|\cdot\|_V$ , e que termina com  $w_L = r_0$ .

Exemplos de métodos pertencentes a esta família são GMRES, CR, MINRES, GCR, que também estão associados ao produto interno Euclidiano. O método QMR também pertence a esta família, entretanto faz necessário o uso de um produto interno especial. A figura 1 mostra um esboço gráfico dos métodos pertencentes à família MR utilizando o produto interno Euclidiano.

**Teorema 2.** Seja  $\{w_j\}_{j=0}^L$  uma sequência de aproximações  $r_0 \in \mathcal{H}$ , tal que  $w_j \in \mathcal{W}_j$  e  $w_L = r_0$ . Então existe um produto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\tilde{V}}$  em  $\mathcal{V}_L = \mathcal{W}_L$  tal que

$$r_0 - h_j \perp_{\tilde{V}} \mathcal{V}_j, \quad j = 1, 2, \dots, L-1 \quad (2)$$

se e somente se  $w_j \in \mathcal{W}_{j-1} \setminus \mathcal{W}_j$ , ou seja,  $w_j \in \mathcal{W}_{j-1}$  e  $w_j \notin \mathcal{W}_{j-1}$ , para  $j = 1, 2, \dots, L-1$ .

Definimos então *Orthogonal Residual* como a família de métodos que através dos espaços mencionados, busca uma solução para o problema (2) para algum produto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\tilde{V}}$ , e que termina com  $w_L = r_0$ , englobando os métodos FOM e CG com produto interno euclidiano, e BCG com um produto interno particular. Um esboço gráfico desta família de métodos utilizando o produto interno Euclidiano pode ser encontrada na figura 2.

Podemos estabelecer relações mais abrangentes como os seguintes teoremas, cujas provas podem ser encontradas em [3]:

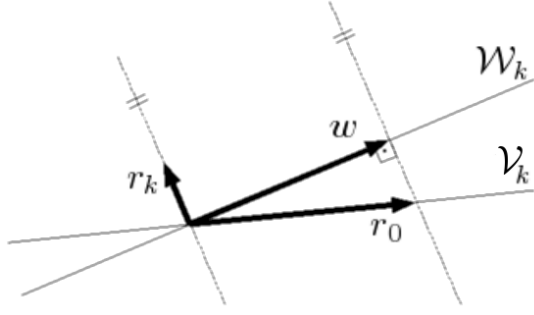


Figura 1: Representação gráfica da família MR

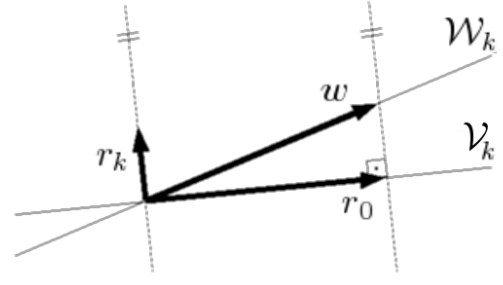


Figura 2: Representação gráfica da família OR

**Teorema 3.** Sejam  $\mathcal{W}_j$  e  $\mathcal{V}_j$  dados conforme no início deste resumo. Então as aproximações MR e OR de  $r_0$  satisfazem

$$\|r_j^{MR}\|_V = s_j \|r_{j-1}^{MR}\|_V, \quad s_j = \sin \angle_V(r_{j-1}^{MR}, \mathcal{W}_j) \quad (3)$$

$$\|r_j^{MR}\|_V = c_j \|r_j^{OR}\|_V, \quad c_j = \cos \angle_V(r_{j-1}^{MR}, \mathcal{W}_j) \quad (4)$$

$$\|r_j^{MR}\|_V = s_1 s_2 \dots s_j \|r_0\|_V, \quad \|r_j^{OR}\|_V = s_1 s_2 \dots s_j \|r_0\|_V \quad (5)$$

$$(6)$$

**Teorema 4.** Sejam  $\mathcal{W}_j$  e  $\mathcal{V}_j$  dados conforme no início deste resumo. Então o maior ângulo canônico entre eles é dado por

$$\angle_V(\mathcal{V}_j, \mathcal{W}_j) = \angle_V(r_{j-1}^{MR}, \mathcal{W}_j) \quad (7)$$

Além disso, os outros  $m - 1$  ângulos canônicos entre  $\mathcal{V}_j$  e  $\mathcal{W}_j$  são zero.

Isto nos mostra uma relação entre a evolução do algoritmo e o ângulo entre os subespaços a cada iteração. Analisando esse resultado geometricamente, podemos finalmente compreender que os métodos MR aproximam o subespaço  $\mathcal{W}_j$  de  $\mathcal{V}_j$  gradativamente, até que coincidam.

Desenvolvemos a análise aqui apresentada e a aplicamos para os métodos GCRO e GCR que não estavam explicitamente feitas no artigo [3]. Além disso, estamos fazendo a implementação desses e, no futuro, de outros métodos de Krylov, que não se encontram disponíveis no PETSc [1]. O objetivo dessa implementação é aproveitar a vasta diversidade de preconditionadores para comparar métodos de Krylov e preconditionadores específicos e aplicá-los em problemas oriundos da simulação de reservatórios de água de hidrelétricas e para problemas inversos ligados à simulação de reservatórios de petróleo.

## Referências

- [1] S. Balay, K. Buschelman, W. D. Gropp, D. Kaushik, M. G. Knepley, L. C. McInnes, B. F. Smith, and H. Zhang. PETSc Web page, 2009. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- [2] E. de Sturler. Nested krylov methods based on gcr. *J. Comput. Appl. Math.*, 67(1):15–41, 1996.
- [3] M. Eiermann and O. G. Ernst. Geometric aspects in the theory of krylov subspace methods. *Acta Numerica*, 10(10):251–312, 2001.
- [4] S. C. Eisenstat, H. C. Elman, and M. H. Schultz. Variational iterative methods for nonsymmetric system of linear equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 20(2), April 1983.