

# Estudo sobre Métodos de Krylov e seus Aspectos Geométricos

Rafael Ferreira Lago<sup>1</sup>, Luiz Mariano Carvalho<sup>2</sup>, Michael de Souza<sup>1</sup>, Nelson Maculan<sup>1</sup>

<sup>1</sup>COPPE/PESC – Universidade Federal do Rio de Janeiro  
21941-972 – Rio de Janeiro – RJ – Brasil

<sup>2</sup>Departamento de Matemática Aplicada – IME – Universidade Estadual do Rio de Janeiro  
20559-900 – Rio de Janeiro – RJ – Brasil

rafael@cos.ufrj.br, luizmc@ime.uerj.br, {michaelfs, maculan}@cos.ufrj.br

**Abstract.** *Iterative methods for solving sparse linear systems have been widely applied in many kind of problems. This research field seems to be a promising development, incentivating us to study such methods.*

*We base this contribution on [1], where methods are classified into two families, some relations are estabilished as well as a geometric interpretation of them.*

**Resumo.** *Métodos iterativos para solução de sistemas lineares esparsos de grande porte tem sido largamente utilizados em diversos tipos de aplicações. Esta área ainda promete uma grande evolução, incentivando um estudo mais atento do assunto.*

*Nos basearemos em [1], onde os métodos são classificados entre duas famílias, são estabelecidas várias relações bem como uma interpretação geométrica.*

## 1. Representação Gráfica do GMRES e do FOM

O método GMRES [2] tem sido um dos métodos mais utilizados para solução iterativa de sistemas lineares não hermitianos do tipo  $Ax = b$ , com  $x, b \in \mathbb{C}^m$ ,  $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ .

Tomando um ponto inicial  $x_0$  e o seu respectivo resíduo  $r_0 = b - Ax_0$ , o GMRES busca na  $k$ -ésima iteração um vetor  $c_k \in \mathcal{K}_k$ , tal que  $x_k = x_0 + c_k$  minimize a norma do resíduo

$$r_k = b - Ax_k = b - Ax_0 - Ac_k = r_0 - Ac_k, \quad (1)$$

onde  $\mathcal{K}_k = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0\}$  é o espaço de Krylov de ordem  $k$ . Definindo  $\mathcal{W}_k := A\mathcal{K}_k$ , este problema pode ser visto como

$$\min_{w \in \mathcal{W}_k} \|r_0 - w\|_2. \quad (2)$$

Sabemos que a projeção ortogonal de  $r_0$  em  $\mathcal{W}_k$  resolve o problema acima, como é mostrado em [3], p.435. Portanto

$$r_k = r_0 - P_{\mathcal{W}_k}r_0 = (I - P_{\mathcal{W}_k})r_0 \quad (3)$$

que é a projeção ortogonal em  $\mathcal{W}_k^\perp$ . De posse destas informações, elaboramos uma representação gráfica do método GMRES na  $k$ -ésima iteração que é mostrada na figura 1.

Vamos introduzir agora um método semelhante em alguns aspectos ao GMRES, cujo nome é FOM [4]. Este método resolve

$$r_k = r_0 - w \perp \mathcal{K}_k, w \in \mathcal{W}_k \quad (4)$$

a cada iteração  $k$ . Um resultado conhecido cuja prova pode ser encontrada em [1] nos dá que  $w = P_{\mathcal{W}_k}^{\mathcal{K}_k} r_0$ , a projeção oblíqua de  $r_0$  em  $\mathcal{W}_k$  ortogonal a  $\mathcal{K}_k$  resolve o problema em (4). A figura 2 mostra uma representação gráfica deste método.

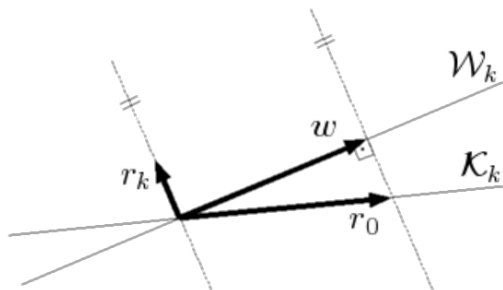


Figura 1. Representação gráfica do GMRES

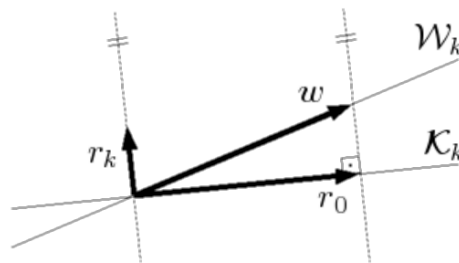


Figura 2. Representação gráfica do FOM

A seguir enunciamos um teorema que pode ser encontrado em [5]

**Teorema 1.** Se o polinômio mínimo da matriz não-singular  $A$  tem grau  $L$ , então a solução de  $Ax = b$  pertence ao espaço  $\mathcal{K}_L(A, b)$ .

Isto mostra que estes algoritmos convergem<sup>1</sup>, ao menos considerando precisão infinita, para a solução em no máximo  $L$  passos, onde  $L$  é o grau do polinômio mínimo de  $A$ . Como há garantia de convergência em um número finito de passos, tais métodos tornam-se interessantes. Daqui em diante, consideraremos  $L$  como sendo a iteração na qual o método teria convergido considerando precisão infinita.

Tanto o FOM quanto o GMRES utilizam o *processo de ortogonalização de Arnoldi*, que cria bases  $\{v_j\}_{j=1}^k$  ascendente aninhada ortonormal para  $\mathcal{K}_k$ , assim como uma base  $\{w_j\}_{j=1}^k$  ascendente aninhada ortonormal para  $\mathcal{W}_k$ . Lembrando que definimos  $\mathcal{W}_k = A\mathcal{K}_k$ , teremos uma decomposição relacionada a essa base que é

$$W_k = AV_k, \quad AV_k = V_{k+1}\tilde{H}_k = V_k H_k + U_k. \quad (5)$$

onde  $V_{k+1} = [v_1, v_2, \dots, v_{k+1}]$ ,  $W_k = [w_1, w_2, \dots, w_k]$ ,  $H_k$  é uma matriz de Hessenberg superior e

$$\tilde{H}_k = \begin{bmatrix} H_k \\ \eta(e_k^k)^T \end{bmatrix}, \quad U_k = [0 \dots 0 \eta v_{k+1}] \in \mathbb{C}^{k \times k}, \quad r_0 = V_{k+1}\beta e_1^k. \quad (6)$$

Substituindo em (2), e notando que  $V_{k+1}$  é uma matriz ortogonal, obtemos

$$\min_{y \in \mathbb{C}^k} \|V_{k+1}(\beta e_1^{k+1} - \tilde{H}_k y)\|_2 = \min_{y \in \mathbb{C}^k} \|\beta e_1^{k+1} - \tilde{H}_k y\|_2 \quad (7)$$

o que nos leva à solução do sistema  $\tilde{H}_k y = \beta e_1^{k+1}$ . De posse do  $y$  da iteração podemos então encontrar  $w_k = V_{k+1}\tilde{H}_k y = W_k y$  e  $c_k = V_k y$ . Similarmente, de (4)

$$V_{k+1}(\beta e_1^{k+1} - \tilde{H}_k y) \perp \mathcal{K}_k. \quad (8)$$

Se fizermos  $y = (H_k)^{-1}\beta e_1^k$ , as  $k$  primeiras colunas de  $V_{k+1}$  desaparecerão em (8), restando apenas algum múltiplo de  $v_{k+1}$ , que é ortogonal a  $\mathcal{K}_k$ . Repare que em (2) o problema envolve uma matriz retangular enquanto em (8) envolve uma matriz quadrada.

<sup>1</sup>métodos que utilizam a projeção oblíqua mencionada, com o FOM, podem ter rupturas

## 2. Diminuindo Recursos

O problema dos métodos apresentados na seção anterior é que se faz necessário o armazenamento de  $\{v_j\}_{j=1}^k$  para encontrar  $v_{k+1}$ . Entretanto, caso  $H_k$  possua apenas uma banda de largura  $p$  não nula, precisaremos apenas dos  $v_j, j = p..k$  para calcular  $v_{k+1}$ .

De (5) vemos que caso  $A^H = A$  então  $H_k^H = H_k$ , o que significa que  $H_k$  é tridiagonal pois é uma matriz de Hessenberg superior. Caso isto ocorra, só precisaremos de três vetores a cada iteração para calcular o próximo vetor. Dois métodos que utilizam essa estratégia são o método de Lanczos e o Gradientes Conjugados, sendo muito semelhantes ao FOM. O método dos Resíduos Conjugados, utiliza a simetria da matriz para resolver (7), assemelhando-se ao GMRES.

Caso a matriz  $A$  não seja hermitiana, uma das estratégias para diminuir a banda de  $H_k$  é utilizar uma base biortogonal, como no método de Lanczos não-hermitiano que gera vetores tais que  $\langle v_i, \bar{v}_j \rangle = 0, i \neq j$ , onde  $\{v_j\}_{j=1}^k$  e  $\{\bar{v}_j\}_{j=1}^k$  são bases para  $\mathcal{K}_k$  e  $\bar{\mathcal{K}}_k = \text{span}\{r_0, A^H r_0, \dots, (A^H)^{k-1} r_0\}$  respectivamente. Em [6] temos uma demonstração de que utilizando tais bases obteremos uma matriz  $\tilde{H}_k$  tridiagonal.

Entretanto, se  $V_{k+1}$  não é ortogonal não podemos tirá-lo da norma em (7). Considerando uma matriz  $V$  tal que  $V_L^H V V_L = I$  e  $v, w \in \mathcal{V}_L$ , teremos

$$\begin{aligned} \langle v, w \rangle_V &= \langle V_L x, V_L y \rangle_V = \langle x, y \rangle \\ \min_{y \in \mathbb{C}^k} \left\| V_{k+1} (\beta e_1^{k+1} - \tilde{H}_k y) \right\|_V &= \min_{y \in \mathbb{C}^k} \left\| \beta e_1^{k+1} - \tilde{H}_k y \right\|_2 \end{aligned} \quad (9)$$

Notemos que com isso todos os cálculos devem ser feitos em consideração a este produto interno, incluindo ortogonalizações. Logo, neste caso o resíduo  $r_k$  será  $V$ -ortogonal a  $\mathcal{W}_k$ . Dentre os métodos que utilizam este artifício citamos o QMR e o BCG, associados ao GMRES e FOM respectivamente.

## 3. RM e RO

Nesta seção iremos estabelecer uma relação mais sólida entre os métodos apresentados. Durante toda esta seção assumiremos que  $\{\mathcal{W}_j\}_{j=0}^L$  é uma sequência aninhada de espaços onde  $\dim(\mathcal{W}_j) = j$ , e  $\mathcal{V}_j = \{\text{span}\{r_0\} + \mathcal{W}_{j-1}\}^2$ . Começaremos citando de [1] o seguinte teorema:

**Teorema 1.** Seja  $\{h_j\}_{j=0}^L$  uma sequência de aproximações  $r_0 \in \mathcal{H}$ , tal que  $h_j \in \mathcal{W}_j$  e  $h_L = r_0$ . Então um produto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$  para  $V_L = W_L$  tal que

$$\|r_0 - h_j\|_V = \min_{w \in \mathcal{W}_j} \|r_0 - w\|_V \quad (10)$$

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

A prova deste teorema pode ser encontrada no referente artigo. Repare que caso encontremos tal  $h_L = r_0$  teremos  $r_k = 0$ , deixando claro em  $r_k = b - Ax_k$  que encontramos a solução procurada. Isto está intimamente ligado ao fato de  $\mathcal{V}_L = \mathcal{W}_L$ , pois com isso  $w_j \in \mathcal{V}_j$ ; o que nos leva, por exemplo no GMRES, a  $h_L = P_{\mathcal{W}_L} r_0 = P_{\mathcal{V}_L} r_0 = r_0$ .

<sup>2</sup>embora nos métodos mencionados até agora  $\mathcal{V}_j = \mathcal{K}_j$ , trataremos de forma mais genérica por hora

Podemos então definir *Resíduo Mínimo* como sendo a família de métodos que, de posse de uma base aninhada de subespaços  $\{\mathcal{W}_j\}_{j=0}^L$  tenta encontrar uma aproximação de  $r_0$  através de (10), para alguma norma  $\|\cdot\|_V$ , e que termina com  $h_L = r_0$ .

Isto engloba os métodos GMRES, QMR, CR e o GCR (uma versão do CR para matrizes não simétricas). Para os demais métodos, temos o seguinte teorema, bem semelhante ao anterior:

**Teorema 2.** Seja  $\{h_j\}_{j=0}^L$  uma sequência de aproximações  $r_0 \in \mathcal{H}$ , tal que  $h_j \in \mathcal{W}_j$  e  $h_L = r_0$ . Então um produto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\tilde{V}}$  para  $V_L = W_L$  tal que

$$r_0 - h_j \perp_{\tilde{V}} \mathcal{V}_j, \quad j = 1, 2, \dots, L-1 \quad (11)$$

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

Do mesmo modo, quando  $h_L = r_0$  teremos a solução ótima. Definimos então *Resíduo Ortogonal* como sendo a família de métodos que através dos espaços mencionados, busca uma solução para o problema (11) para algum produto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\tilde{V}}$ , e que termina com  $h_L = r_0$ , englobando os métodos FOM, CG, e BCG.

Os teoremas apresentados aqui garantem que, mediante ajustes no produto interno, qualquer método que possua subespaços conforme definidos aqui podem ser classificados como métodos RM ou RO, o que engloba a grande maioria dos métodos.

Mesmo com estas modificações, as representações gráficas dos métodos RM e RO são análogas às figuras 1 e 2 respectivamente, pois pelas equações (10) e (11), ainda podemos interpretar a aproximação  $h_j$  de  $r_0$  como uma projeção  $V$ -ortogonal a  $\mathcal{W}_j$  e como uma projeção oblíqua em  $\mathcal{K}_j$ ,  $V$ -ortogonal a  $\mathcal{W}_j$ , respectivamente.

#### 4. Relações Entre Subespaços e Ângulos

De posse das definições da seção anterior, também podemos estabelecer propriedades mais abrangentes como os seguintes teoremas, cujas provas podem ser encontradas em [1]:

**Teorema 1.** Sejam  $\mathcal{W}_j$  e  $\mathcal{V}_j$  dados conforme no início da seção §3. Então as aproximações RM e RO de  $r_0$  satisfazem

$$\|r_j^{RM}\|_V = s_j \|r_{j-1}^{RM}\|_V, \quad s_j = \sin \angle_V(r_{j-1}^{RM}, \mathcal{W}_j) \quad (12)$$

$$\|r_j^{RM}\|_V = c_j \|r_j^{RO}\|_V, \quad c_j = \cos \angle_V(r_{j-1}^{RM}, \mathcal{W}_j) \quad (13)$$

$$\|r_j^{RM}\|_V = s_1 s_2 \dots s_j \|r_0\|_V, \quad \|r_j^{RO}\|_V = s_1 s_2 \dots s_j \|r_0\|_V \quad (14)$$

$$(15)$$

**Teorema 2.** Sejam  $\mathcal{W}_j$  e  $\mathcal{V}_j$  dados conforme no início da seção 3. Então o maior ângulo canônico entre eles é dado por

$$\angle_V(\mathcal{V}_j, \mathcal{W}_j) = \angle_V(r_{j-1}^{RM}, \mathcal{W}_j) \quad (16)$$

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. Na equação (12) fica claro que quando  $s_j = 0$ , então a norma de  $r_j^{RM}$  será igual a zero, e portanto, teremos encontrado a nossa solução. Analisando esse resultado geometricamente, podemos finalmente compreender que os métodos RM simplesmente aproximam o subespaço  $\mathcal{W}_j$  de  $\mathcal{K}_j$  gradativamente, até que coincidam, concordando com  $\mathcal{W}_L = \mathcal{V}_L$ .

Na equação 3.2 de [1] ainda, temos

$$\|r_j^{RM}\|^2 = \|r_{j-1}^{RM}\|^2 - |\langle r_0, w_j \rangle|^2. \quad (17)$$

Adaptando para o caso de um produto interno genérico, caso  $\langle r_0, w_j \rangle_V = 0$ , não teremos uma melhora no resíduo do método *RM* na  $j$ -ésima iteração, o que vem a ser uma idéia natural, pois se estamos procurando uma aproximação de  $r_0$  construindo uma base  $\mathcal{W}_j$ , não faz sentido procurar tal base na direção ortogonal a  $r_0$ .

Utilizando esse resultado em (12), vemos que se  $\langle r_0, w_b \rangle_V = 0$  então  $s_b = 1$ , o que obriga  $c_b = 0$ , implicando numa divisão por zero em (13).

Quando isso acontece, a aproximação *RO* falha. Entretanto, métodos para evitar tal falha estão além do escopo deste trabalho, e não discutiremos tais métodos, nos limitando apenas a mostrar o significado geométrico deste fato; tal falha acontecerá apenas quando  $\angle_V(r_{j-1}^{RM}, \mathcal{W}_j) = \pi/2$ , ou equivalentemente, quando  $\angle_V(\mathcal{V}_j, \mathcal{W}_j) = \pi/2$ . Com esta observação torna-se óbvia a inexistência de uma projeção em  $\mathcal{W}_j$  que seja  $V$ -ortogonal a  $\mathcal{V}_j$ . Em [1] existe uma discussão mais profunda a esse respeito, e uma demonstração de que  $H_j^{-1}$  existe se e somente se  $c_j \neq 0$ .

Algo interessante a notar é que, caso o produto dos senos em (14) tenda a zero, então o algoritmo em questão terá convergência superlinear.

Consideremos construções especiais dos subespaços. Suponhamos que  $\mathcal{V}_j = \mathcal{C}_j$  e  $\mathcal{W}_j = A\mathcal{C}_j$ , com  $\mathcal{C}_j$  como *subespaço de correção*. A princípio poderíamos escolher qualquer subespaço de correção, mas conforme já foi mostrado pelo teorema 1, uma solução sempre poderá ser encontrada no subespaço de Krylov, desde que  $A$  seja não-singular, e portanto temos garantia de convergência caso nenhum outro problema ocorra. Entretanto, existem exemplos onde uma matriz de dimensão  $n$  não apresenta redução do resíduo até a  $(n - 1)$ -ésima iteração, pois  $\angle_V(r_{j-1}^{RM}, \mathcal{W}_j) = \pi/2$ , para  $j = 1, 2, \dots, n - 1$ , o que faz com que a escolha do espaço de correção como sendo o espaço de Krylov nem sempre seja a melhor opção, embora ainda seja a mais utilizada.

## 5. Conclusão

Neste trabalho, estudamos o funcionamento básico de alguns dos principais métodos iterativos para solução de sistemas lineares de grande porte, e estabelecemos relações entre eles, classificando-os como métodos semelhantes pertencentes a uma das duas famílias apresentadas. Dentre as relações estabelecidas, as que envolvem aspectos ajudam na compreensão do funcionamento do método.

## Referências

- [1] EIERMANN, M.; ERNST, O. G. Geometric aspects in the theory of krylov subspace methods. *Acta Numerica*, v. 10, n. 10, p. 251–312, 2001.

- [2] SAAD, Y.; SCHULTZ, M. H. Gmres: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, SIAM, v. 7, n. 3, p. 856–869, 1986.
- [3] MEYER, C. D. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. [S.l.]: SIAM, 2001.
- [4] SAAD, Y. Krylov subspace methods for solving large unsymmetric linear systems. *Mathematical Computing*, n. 37, p. 105–126, 1981.
- [5] IPSEN, I. C. F.; MEYER, C. D. The idea behind krylov methods. *American Mathematical Monthly*, v. 105, p. 889–899, 1998.
- [6] MEURANT, G. *Computer Solution of Large Linear Systems*. [S.l.]: Elsevier North Holland, 1999. (Studies in Mathematics and its Applications, v. 28).