11月29日作业　林子开　21307110161

1

1. Find an example of linear system such that the Jacobi method converges while the Gauss–Seidel method diverges. Justify your claim.

解: 取 $A=\begin{bmatrix}1 & 2 & -2\\ 1 & 1 & 1\\ 2 & 2 & 1\end{bmatrix}$

设 $A = D - L - U$

其中 $D=\begin{bmatrix}1 & & \\ & 1 & \\ & & 1\end{bmatrix}$　$L=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0\\ -2 & -2 & 0\end{bmatrix}$　$U=\begin{bmatrix}0 & -2 & 2\\ 0 & 0 & -1\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$

对于 Jacobi 方法

$$D x_{k+1} = (L+U)x_k + b$$

$$\Rightarrow x_{k+1} = D^{-1}(L+U)x_k + D^{-1}b$$

记 $M_J = D^{-1}(L+U)$

$$M_J = \begin{bmatrix}0 & -2 & 2\\ -1 & 0 & -1\\ -2 & -2 & 0\end{bmatrix}$$

$$\det(\lambda I - M_J) = \begin{vmatrix}\lambda & 2 & -2\\ 1 & \lambda & 1\\ 2 & 2 & \lambda\end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \lambda^3 = 0$$

$\therefore \rho(M_J) = 0$　Jacobi方法收敛

对于 Gauss-Seidel 方法：

$$(D-L)x_{k+1} = Ux_k + b$$

$$\Rightarrow \quad x_{k+1} = (D-L)^{-1}Ux_k + (D-L)^{-1}b$$

$$M_{GS} = (D-L)^{-1}U$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & & \\ -1 & 1 & \\ 0 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -2 & +2 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -2 & 2 \\ 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\det(\lambda I - M_{GS}) = \begin{vmatrix} \lambda & 2 & -2 \\ & \lambda-2 & 3 \\ & & \lambda-2 \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = 0, 2, 2$$

$$\Rightarrow \rho(M_{GS}) = 2 > 1$$

$\therefore$ Gauss-Seidel 方法发散

2

2. Find an example of positive definite linear system such that the Gauss–Seidel method converges while the Jacobi method diverges. Justify your claim.

解:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & \sqrt{2} \\ 1 & 2 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & 2 \end{bmatrix}$$

$|2| = 2 > 0 \qquad \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 4-1 > 0$

$$|A| = 2\cdot(4-2) - 1\cdot(2-2) + \sqrt{2}\cdot(\sqrt{2}-2\sqrt{2})$$
$$= 4-2$$
$$= 2 > 0$$

$\therefore$ A 是正定阵

$A = D - L - U$

$$D = \begin{bmatrix} 2 & & \\ & 2 & \\ & & 2 \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & \\ -1 & 0 & \\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -\sqrt{2} \\ & 0 & -\sqrt{2} \\ & & 0 \end{bmatrix}$$

对于 Jacobi 方法:

$$M_J = D^{-1}(L+U)$$
$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 & -\sqrt{2} \\ -1 & 0 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$|\lambda I - M_J| = 0$$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} \lambda & 1/2 & \sqrt{2}/2 \\ 1/2 & \lambda & \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\lambda\left(\lambda^2-\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\lambda-\frac{1}{2}\right)+\frac{\sqrt{2}}{2}\left(\frac{\sqrt{2}}{4}-\frac{\sqrt{2}}{2}\lambda\right)$$

$$=\lambda^3-\frac{1}{2}\lambda-\frac{1}{4}\lambda+\frac{1}{4}+\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\lambda$$

$$=\lambda^3-\frac{5}{4}\lambda+\frac{1}{2}=0$$

$$=\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)\left(\lambda^2+\frac{1}{2}\lambda-1\right)=0$$

$$\Rightarrow \lambda=\frac{1}{2},\ \frac{-1-\sqrt{17}}{4},\ \frac{-1+\sqrt{17}}{4}$$

$\rho(M_J)=\frac{1+\sqrt{17}}{4}>1$ 故 Jacobi 法不收敛

对于 Gauss-Seidel 方法：

$$M_{GS}=(D-L)^{-1}U$$

$$=\begin{pmatrix} 2 & & \\ 1 & 2 & \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 0 & -1 & -\sqrt{2} \\ & 0 & -\sqrt{2} \\ & & 0 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 1/2 & & \\ -1/4 & 1/2 & \\ -\sqrt{2}/8 & -\sqrt{2}/4 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & -1/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & 1/4 & -\sqrt{2}/4 \\ 0 & \sqrt{2}/8 & \frac{3}{4} \end{bmatrix}$$

$|\lambda I - M_{GS}|$

$$= \begin{vmatrix} \lambda & 1/2 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & \lambda - 1/4 & \sqrt{2}/4 \\ 0 & -\sqrt{2}/8 & \lambda - 3/4 \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \lambda \cdot \left[(\lambda - \tfrac{1}{4})(\lambda - \tfrac{3}{4}) + \tfrac{\sqrt{2}}{8} \cdot \tfrac{\sqrt{2}}{4} \right] = 0$$

$$\Rightarrow \lambda \cdot \left(\lambda^2 - \lambda + \tfrac{3}{16} + \tfrac{1}{16} \right) = 0$$

$$\Rightarrow \lambda \left(\lambda^2 - \lambda + \tfrac{1}{4} \right) = 0$$

$$\Rightarrow \lambda \cdot \left(\lambda - \tfrac{1}{2} \right)^2 = 0$$

$$\Rightarrow \rho(M_{GS}) = \tfrac{1}{2} < 1$$

$\therefore$ Gauss-Seidel方法收敛

3

3. What happens if GMRES breaks down (i.e., the bottom-right entry of H_k becomes zero)? Justify your claim.

解：$r = b - Ax_0$

要找 Δx 使得 $A(x_0 + \Delta x) = b$，即 $\Delta x = A^{-1} r$

注意到 $A^{-1} = a_0 I + a_1 A + \cdots + a_k \cdot A^k$

$(k \leq n-1)$

即 A 可以表示为不超过 $n-1$ 阶的 A 的多项式

若 $h_{k+1,k} = 0$，则说明：

$$A \cdot [q_1, \cdots, q_k] = [q_1, \cdots q_k, q_{k+1}] \begin{bmatrix} h_{11} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & \ddots & \vdots \\ & \ddots & h_{k,k} \\ & & 0 \end{bmatrix}$$

在 $K_k(A, r)$ 中找最小二乘解时

$$\min \| A Q_k c - r \|_2 = \min \| Q_{k+1} \cdot H_k c - r \|_2$$

$$= \min \| H_k c - Q_{k+1}^* r \|_2$$

$$= \min \| H_k c - \|r\|_2 \cdot e_1 \|_2$$

此时：

$$\begin{bmatrix} h_{11} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & \ddots & \vdots \\ & h_{k,k-1} & h_{kk} \\ & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|r\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

可直接化为：$\tilde{H}_k c = \|r\|_2 \cdot e_1$

其中 $\tilde{H}_k$ 为 $k\times k$ 方阵，可以得到精确的 c

（补充：$rank(\tilde{H}_k) = rank(H_k) = k$，证明详后）

此时 $\|\tilde{H}_k c - \|r\|_2 e_1\|_2 = \|H_k c - \|r\| e_1\| = 0$

得到的 $\Delta x = Q_k c$ 是 $A\Delta x = r$ 的精确解

即，$h_{k+1,k} = 0$ 时，说明已经找到了使 $A\Delta x = r$ 的解

可以结束迭代。

进一步的说明：

$A^{-1} = a_0 I + a_1 A + \cdots + a_{k-1} A^{k-1} \quad (k \le n-1)$

也即 $\Delta x = A^{-1} r = a_0 r + a_1 A r + \cdots + a_{k-1} A^{k-1} r$

需把 r 在 $1, 2, \cdots k-1$ 维 $K_k(A, r)$ 空间中的投影

依次找到

当然，算法中选取的基是 $q_1, \cdots q_k$，满足

$span\{q_1, \cdots, q_k\} = span\{r, \cdots A^{k-1} r\}$

若已经找到了最高阶数 $k-1$，那么必有：

① $r, Ar, \cdots A^{k-1} r$，线性无关

② $r, Ar, \cdots A^k r$，线性相关

则 $A^k r \in span\{r, \cdots A^{k-1} r\}$

又由于 $\mathrm{span}\{r, \cdots A^{k-1}r\} = \mathrm{span}\{g_1, \cdots g_k\}$

而 $\mathrm{span}\{A[g_1, \cdots g_k]\}$

$= \mathrm{span}\{A[r, \cdots A^{k-1}r]\}$

$= \mathrm{span}\{Ar, \cdots A^k r\}$

$\subset \mathrm{span}\{r, \cdots A^k r\} \subset \mathrm{span}\{r, \cdots A^{k-1} r\}$

$= \mathrm{span}\{g_1, \cdots g_k\}$

此时将不会有任何向量落在 $\mathrm{span}\{g_1, \cdots g_k\}$ 之外

也就是第一次出现 $h_{k+1,k} = 0$ 的时候

这时候的 k 也就是使

$A^{-1} = a_0 I + a_1 A + \cdots + a_{k-1} A^{k-1}$

成立的最小 k！

注意到此时 $r, Ar, \cdots A^{k-1}r$ 线性无关

即 $\mathrm{rank}(Q_{k+1} H_k) = k$

$\Rightarrow \tilde{H}_k = k$ （$\tilde{H}_k$ 为 $k \times k$ 方阵）

也即 $\tilde{H}_k c = \|r\| e_1$ 必有解，且是唯一解。

4

4. Implement the Arnoldi procedure. Test it with some matrices and starting vectors. Visualize the orthogonality of the Arnoldi vectors.

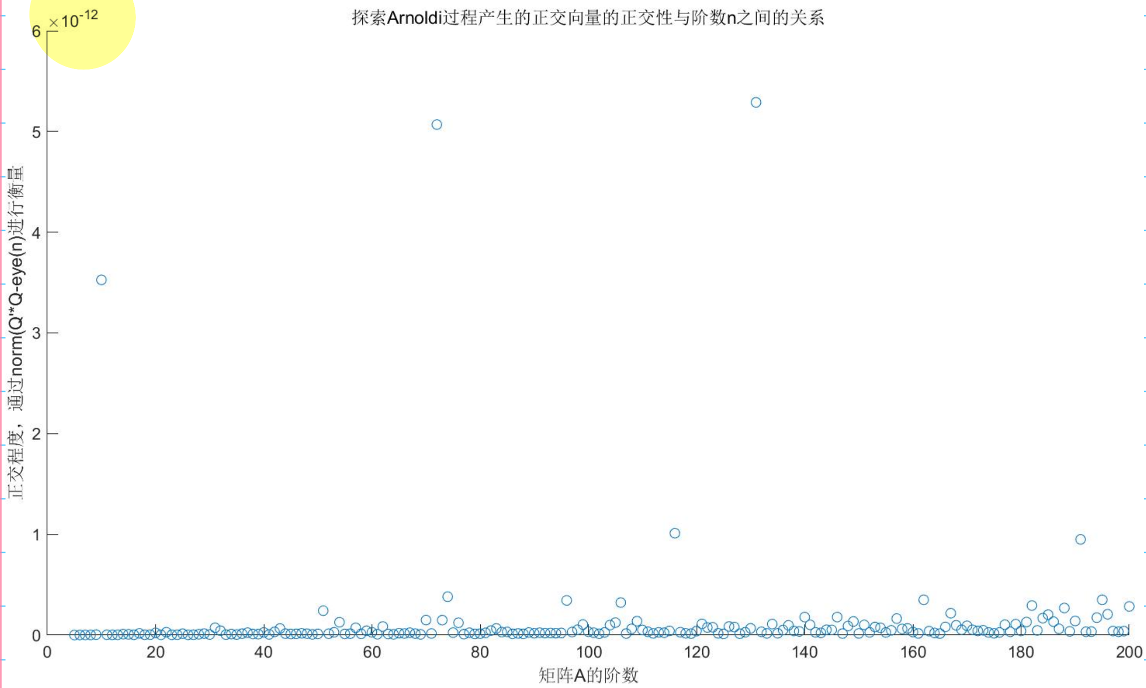
第四题

Matlab 代码

```
%% 探索不同阶数的 Arnodi procedure 产生的向量的正交性
begin = 5;
ending = 200;
depature = zeros((ending - begin + 1),1);
for n = begin:ending
    flg = 0; %用于标记是否因 H(i+1,i)足够小而提前终止
    A = rand(n);
    r = rand(n,1);
    Q = zeros(n,n); %用于存储 Krylov 子空间中的正交基向量
    H = zeros(n,n);
    Q(1:n,1) = r./norm(r);
    for i = 1:n-1
        y = A*Q(1:n,i); % y=A*q_i
        for j = 1:i
            H(j,i) = Q(1:n,j)'*y; % 向前 i 个正交基向量上投影
            y = y - H(j,i)*Q(1:n,j);
        end
        H(i+1,i) = norm(y);
        norm(y)
        if abs(H(i+1,i)) < 1e-16 %若 H(i,i+1)足够小
            flg = 1;
            disp("提前终止，因为 H(i,i+1)足够小，认为 r 已经完全落在 i 维 Krylov 子
空间中")
            break
        end
        Q(1:n,i+1) = y./H(i+1,i); %生成第 i+1 个正交基向量
    end
    if flg ==1 %如果是提前终止的
        depature(n-begin+1,1) = norm(Q(1:n,1:i)'*Q(1:n,1:i)-eye(i));
    else
        depature(n-begin+1,1) = norm(Q'*Q-eye(n));
    end
end
figure();
scatter([begin:ending],depature);
xlabel("矩阵 A 的阶数");
ylabel("正交程度，通过 norm(Q'*Q-eye(n))进行衡量");
```

```
title("探索 Arnoldi 过程产生的正交向量的正交性与阶数 n 之间的关系");
```

对 Arnoldi 过程产生的向量的正交程度随矩阵阶数的变化情况进行可视化，结果如下



5

第五题

5. Implement your own GMRES solver. Test it with at least two systems of linear equations (for symmetric and nonsymmetric coefficient matrices) with 1000+ unknowns and plot the residual history.

用于对非对称矩阵进行 GMRES 的 Matlab 代码如下

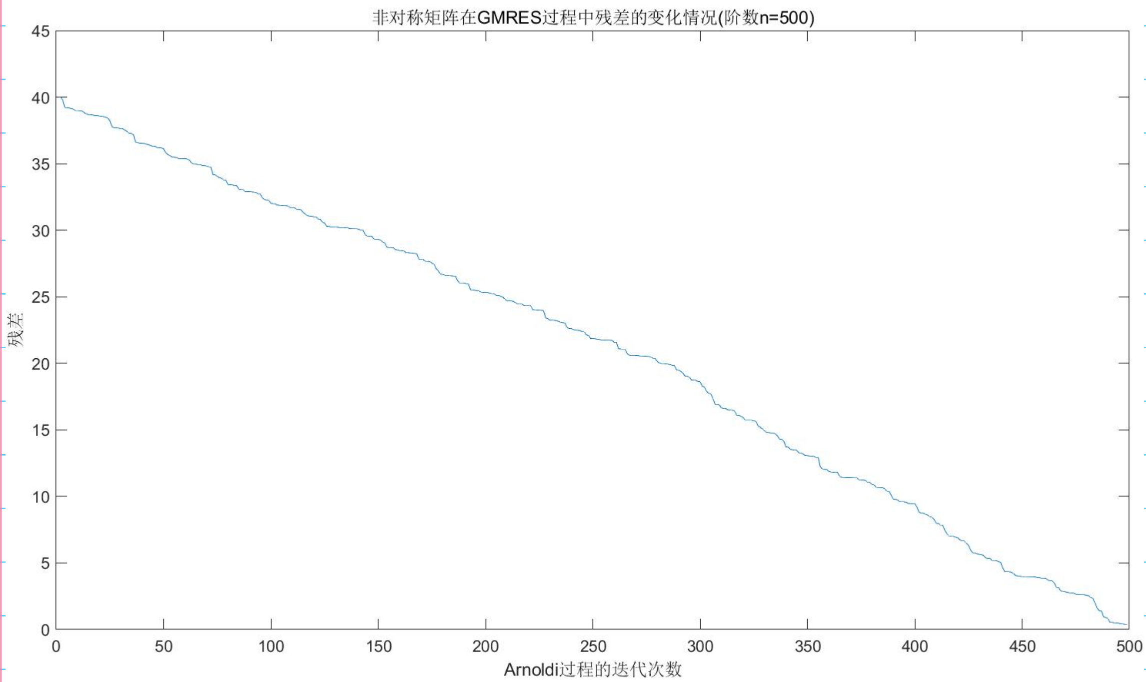
```
%% GMRES Solver for nonsymmetric coefficient matrix
n = 500;
residuals = zeros(n-1,1); %用于记录残差的变化情况
A = rand(n); %系数矩阵 A
b = rand(n,1);
x_real = A\b; %真实的解 x_real
x_ori = rand(n,1); %初始向量
r = b-A*x_ori;%初始残差
residuals(1,1) = norm(r);
Q = zeros(n,n); %用于存储 Krylov 子空间的正交基
H = zeros(n,n); %用于存储 A*q_k 的在 q_1 至 q_k+1 的投影
Q(1:n,1) = r./norm(r);
flg = 0; %用于标记是否因 H(i+1,i)足够小而提前终止
```

```
for i = 1:n-1 %由于用于表示A^-1的A的多项式次数不会超过n-1，故外循环次数最多n-
1次
    y = A*Q(1:n,i); %y=A*q_i
    for j = 1:i
        H(j,i) = Q(1:n,j)'*y; %向q_1至q_i进行投影
        y = y - H(j,i)*Q(1:n,j); %减去相应的分量
    end
    H(i+1,i) = norm(y);
    if abs(H(i+1,i)) < 1e-16 %若H(i+1,i)足够小
        flg = 1;
        disp("提前终止，因为H(i,i+1)足够小，认为A^-1*r已经完全落在i维Krylov
子空间中")
        break
    end
    Q(1:n,i+1) = y./H(i+1,i); %生成第i+1个正交基向量
    r_2 = zeros(i+1,1);
    r_2(1,1) = norm(r);
    [c,res] = least_square(H(1:i+1,1:i),r_2); %最小二乘问题的局部函数（详后）
    %注意：尽管此步骤已经把q_i+1生成出来，但此处的c是对q_1到q_i的线性组合
    %如果没有提前终止Arnoldi过程，对于最后一次循环，c是对q_1到q_n-1的线性组合，
即仍然不是精确解
    %精确解应该是x_ori加上q_1到q_n的某个线性组合
    residuals(i,1) = res; %res是残差
end
if flg ==0
    figure()
    plot([1:n-1],residuals);
    xlabel("Arnoldi过程的迭代次数");
    ylabel("残差");
    title("非对称矩阵在GMRES过程中残差的变化情况(阶数n=500)")
    %这里补充一个步骤，通过对Q的各列进行线性组合得到x，并与通过x=A\b得到的
x_real进行比较
    y= A*Q(1:n,n);
    for k = 1:n
    H(k,n) = Q(1:n,k)'*y; %向q_1至q_n进行投影
    end
    r_2 = zeros(n,1);
    r_2(1,1) = norm(r);
    c = H\r_2;
    x_add = Q*c;
    x = x_ori + x_add;
    er = norm(x-x_real)
end
if flg==1
```

```
    %如果提前结束，那么 q_1 至 q_i 的某个线性组合就能得到 x_add
    figure()
    plot([1:i-1],residuals(1:i-1,1));
    xlabel("迭代次数");
    ylabel("残差");
    title("非对称矩阵在 GMRES 过程中残差的变化情况(阶数 n=500)")
end

% 用于处理最小二乘问题并返回最优解与残差
function [x,res] = least_square(A,b)
[q,r] = qr(A,0);%精简 QR 分解
x = r\(q'*b); %条件数比较小的求解最小二乘问题的算法
res = norm(A*x-b);
end
```

非对称矩阵在 GMRES 过程中残差收敛情况可视化

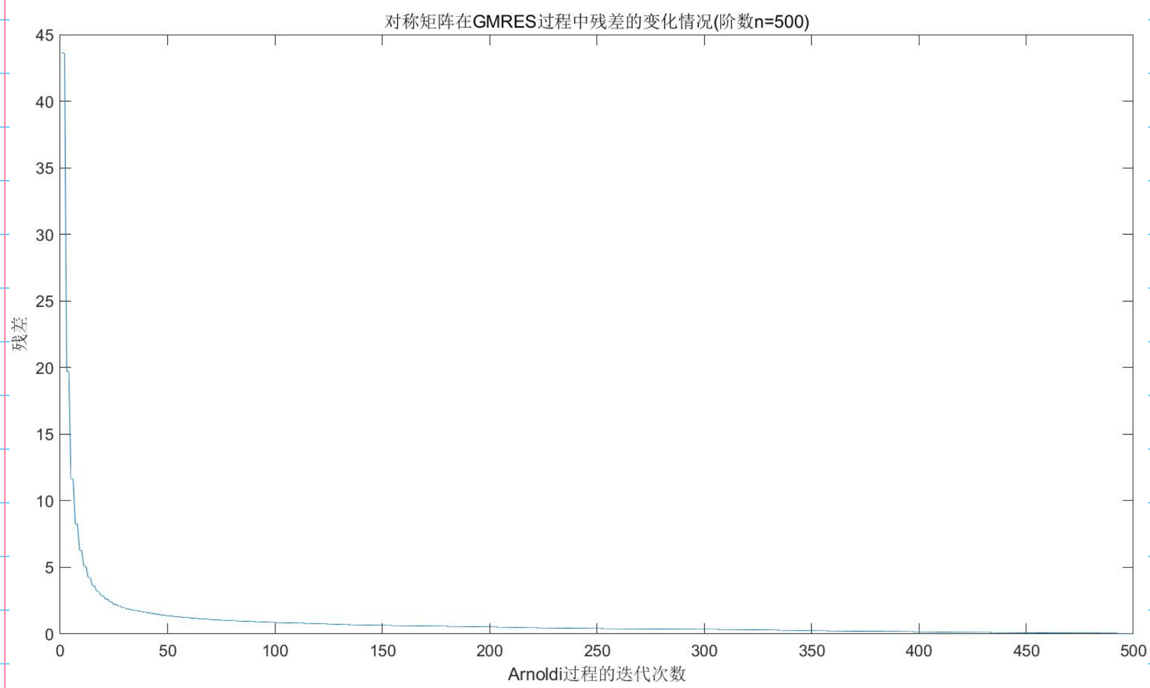


用于对称矩阵的 GMRES 的 Matlab 代码

说明：处理过程是一样的，只是生成系数矩阵 A 的过程不同，如下：

```
A = rand(n);
for i = 1:n
    for j = 1:i
        A(i,j)=A(j,i);
    end
end
```

对称矩阵在 GMRES 过程中残差收敛情况可视化



PS：GMRES 过程中，对称矩阵的残差收敛速度比非对称矩阵的残差收敛速度快。