Iterative 3

王胤雅

25114020018

yinyawang25@m.fudan.edu.cn

2025 年 10 月 22 日

PROBLEM I In the Householder implementation of the Arnoldi algorithm, show the following points of detail:

(a) Q_{j+1} is unitary and its inverse is Q_{j+1}^T.

(b) $Q_{j+1}^T = P_1 P_2 \cdots P_{j+1}$.

(c) $Q_{j+1}^T e_i = v_i$ for $i < j$.

(d) $Q_{j+1} A V_m = V_{m+1}[e_1, e_2, \ldots, e_{j+1}]\bar{H}_m$, where e_i is the i-th column of the $n \times n$ identity matrix.

(e) The vectors $v_1, v_2, \ldots, v_j$ are orthonormal.

(f) The vectors $v_1, \ldots, v_j$ are equal to the Arnoldi vectors produced by the Gram-Schmidt version, except possibly for a scaling factor.

SOLUTION. 1. 因为每个 P_k 都是 Householder 反射矩阵，满足

$$P_k^T P_k = I,$$

即 P_k 是正交矩阵。正交矩阵的乘积仍为正交矩阵，因此

$$Q_{j+1} = P_{j+1} P_j \cdots P_1$$

也是正交矩阵。对于实矩阵而言，$\overline{H} = H$，故

$$Q_{j+1}^{-1} = Q_{j+1}^T.$$

2. 每个 P_k 都满足 $P_k^T = P_k$，因此

$$Q_{j+1}^T = (P_{j+1} \cdots P_1)^T = P_1 P_2 \cdots P_{j+1}.$$

3. 由于 $P_k e_i = e_i, \forall k > i$。那么 $j > i$ 时有

$$Q_{j+1}^T e_i = P_1 P_2 \cdots P_{j+1} e_i = P_1 \cdots P_i e_i = v_i.$$

因此命题对所有 $i < j$ 成立。

4. 标准 Arnoldi 关系为

$$AV_m = V_{m+1}\bar{H}_m,$$

其中 $V_m \in \mathbb{R}^{n\times m}$ 为 Arnoldi 正交基，$V_{m+1} \in \mathbb{R}^{n\times(m+1)}$，而 $\bar{H}_m$ 为 $(m+1)\times m$ 上 Hessenberg 矩阵。由于在 (c) 中已知 $v_i = Q_{j+1}^T e_i$，可得

$$V_{m+1} = Q_{j+1}^T[e_1, e_2, \dots, e_{m+1}].$$

两边左乘 Q_{j+1}，得到

$$Q_{j+1}AV_m = [e_1, e_2, \dots, e_{m+1}]\bar{H}_m.$$

5. 由 (c) 有 $v_i = Q_{j+1}^T e_i$。由于 Q_{j+1}^T 是正交矩阵，它保持内积不变，因此

$$\langle v_i, v_\ell\rangle = \langle Q_{j+1}^T e_i, Q_{j+1}^T e_\ell\rangle = \langle e_i, e_\ell\rangle = \delta_{i\ell}.$$

于是 $\{v_1, \dots, v_j\}$ 构成一组正交归一向量。

6. Gram–Schmidt 版和 Householder 版 Arnoldi 都在同一 Krylov 子空间

$$\mathcal{K}_m(A, b) = \mathrm{span}\{b, Ab, \dots, A^{m-1}b\}$$

中构造正交基，且都满足 Arnoldi 关系 $AV_m = V_{m+1}\bar{H}_m$。由于在 (e) 中已证明 Householder 构造的 $\{v_i\}$ 也是单位正交的，所以两者在数值上最多相差 ± 1 的符号因子。故结论成立。

□

PROBLEM II To derive the basic version of GMRES, we use the standard formula

$$\tilde{x} = x_0 + V\left(W^T AV\right)^{-1} W^T r_0, \tag{1}$$

where $V = V_m$ and $W = AV_m$.

SOLUTION. GMRES 要求选择 y 使得残差的二范数最小，即求解

$$y = \arg_{z\in\mathbb{R}^m} \min\|r_0 - AVz\|_2,$$

其中 $W \equiv AV$。

$$\min_{z\in\mathbb{R}^m}\|r_0 - Wz\|_2.$$

对平方范数对 z 求导并令梯度为零，

$$W^TW\,y = W^Tr_0,$$

即

$$(AV)^T(AV)\,y = (AV)^Tr_0.$$

由于 A 为非奇异矩阵，则 W^TW 可逆，则正规方程的解为

$$y = (W^TW)^{-1}W^Tr_0 = \big((AV)^T(AV)\big)^{-1}(AV)^Tr_0.$$

将 y 代回近似解的表达式 $\tilde{x} = x_0 + Vy$，得到

$$\tilde{x} = x_0 + V(W^TW)^{-1}W^Tr_0 = x_0 + V\big((AV)^T(AV)\big)^{-1}(AV)^Tr_0$$

□

PROBLEM III Let a matrix A have the form

$$A = \begin{pmatrix} I & Y \\ 0 & I \end{pmatrix}.$$

Assume that (full) GMRES is used to solve a linear system with the coefficient matrix A. What is the maximum number of steps that GMRES would require to converge?

SOLUTION.

Lemma 1. 设 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，初始猜测为 x_0，初始残量 $r_0 = b - Ax_0$, 假设 $r_0 \neq 0$。令

$$\mathcal{K}_k(A, r_0) = \operatorname{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0\}, \qquad \mathcal{P}_k = \{p \in \mathbb{C}[t] : \deg p \le k\}.$$

则 GMRES 在第 k 步的残量满足

$$\|r_k\| = \min_{x\in x_0+\mathcal{K}_k} \|b - Ax\| = \min_{p\in\mathcal{P}_k,\, p(0)=1} \|p(A)r_0\|.$$

证明. 任意 $x \in x_0 + \mathcal{K}_k$ 可表示为

$$x = x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^j r_0 = x_0 + q(A)r_0,$$

其中 $q(t) = \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j t^j$ 且 $\deg q \le k-1$。此时残量为

$$r = b - Ax = r_0 - Aq(A)r_0.$$

令

$$p(t) := 1 - tq(t),$$

则显然 $p(0) = 1$、$\deg p \le k$，且

$$r = p(A)r_0.$$

因此每个 $x \in x_0 + \mathcal{K}_k$ 都产生某个满足 $p(0) = 1$、$\deg p \le k$ 的多项式 p，使得残量等于 $p(A)r_0$。反之，任取 $p \in \mathcal{P}_k$，P_k 为次数小于 k 的所有多项式，且 $p(0) = 1$，那么

$$p(t) = \sum_{j=0}^{k} a_j t^j, \qquad a_0 = p(0) = 1.$$

则

$$p(t) = 1 + \sum_{j=1}^{k} a_j t^j = 1 - t\Big(- \sum_{j=1}^{k} a_j t^{j-1}\Big).$$

令 $q(t) := -\sum_{j=1}^{k} a_j t^{j-1}$, 则 $\deg q \le k-1$ 且 $p(t) = 1 - tq(t)$。那么 $q(A)r_0 = -\sum_{j=1}^{k} a_j A^j r_0 \in \mathcal{K}_k$ 故

$$x = x_0 + q(A)r_0 \in x_0 + \mathcal{K}_k,$$

可得对应的残量

$$b - Ax = p(A)r_0.$$

这说明集合 $\{x \in x_0 + \mathcal{K}_k\}$ 与集合 $\{p \in \mathcal{P}_k : p(0) = 1\}$ 通过残量映射一一对应，且对应残量范数相等。从而，

$$\min_{x \in x_0 + \mathcal{K}_k} \|b - Ax\| = \min_{\substack{p \in \mathcal{P}_k \\ p(0)=1}} \|p(A) r_0\|.$$

GMRES 第 k 步定义为在 $x_0 + \mathcal{K}_k$ 中选择使残量范数最小的 x_k，因此

$$\|r_k\| = \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}_k} \|b - Ax\| = \min_{p \in \mathcal{P}_k,\, p(0)=1} \|p(A) r_0\|.$$

□

由 GMRES 的定义及 lemma 1，在第 k 步我们在 $x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)$ 中寻找使残量范数最小的 x_k，即

$$\|r_k\| = \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}_k} \|b - Ax\| = \min_{\substack{p \in \mathcal{P}_k \\ p(0)=1}} \|p(A) r_0\|.$$

设 $\mu_{A,r_0}(t)$ 为关于向量 r_0 的 A 最小多项式，且 $\deg(\mu_{A,r_0}) = d$。则

$$\mu_{A,r_0}(A) r_0 = 0.$$

若 $\mu_{A,r_0}(0) \neq 1$，考虑

$$\mu_{A,r_0}(t) = c\big(1 + \beta_1 t + \beta_2 t^2 + \cdots + \beta_d t^d\big)$$

其中 $c \neq 0$。令

$$\tilde{\mu}(t) := 1 + \beta_1 t + \beta_2 t^2 + \cdots + \beta_d t^d,$$

则 $\tilde{\mu}(0) = 1$ 且

$$\tilde{\mu}(A) r_0 = c^{-1} \mu_{A,r_0}(A) r_0 = 0.$$

故存在次数不超过 d 且常数项为 1 的多项式, 即 $\tilde{\mu}$ 使 $\tilde{\mu}(A) r_0 = 0$。若 $\mu_{A,r_0}(0) = 0$，设 $\mu_{A,r_0}(t) = \sum_{k=1}^{d} \alpha_k t^k$，那么 $A(\sum_{k=m}^{d-m} \alpha_k A^k) r_0 = 0$，$m = \min\{k : 0 \leq k \leq d, a_k \neq 0\}$ 由于 A 非奇异，那么 $\tilde{\mu}(A) r_0 = (\sum_{k=m}^{d-m} \alpha_k A^k) r_0$。故存在次数不超过 d 且常数项为 1 的多项式, 即 $\tilde{\mu}$ 使 $\tilde{\mu}(A) r_0 = 0$。总之，$\exists p \in \mathcal{P}_d$ 满足 $p(0) = 1$ 且 $p(A) r_0 = 0$。将该多项式代入第 k 步的变分表示，取 $k = d$ 可得

$$\min_{\substack{p \in \mathcal{P}_d \\ p(0)=1}} \|p(A) r_0\| \leq \|p(A) r_0\| = 0.$$

因此 GMRES 在第 d 步或之前可得到零残量，即 $\|r_d\| = 0$。换言之，full GMRES 在至多 d 步内精确收敛。而 $(A - I)^2 = 0$，那么 μ_{A,r_0} 的次数小于等于 2。若 $Y \neq 0$，则最大迭代次数为 2。 □

PROBLEM IV Consider a matrix of the form

$$A = I + \alpha B \tag{2}$$

where B is skew-symmetric (real), i.e., such that $B^T = -B$.

1. Show that $\dfrac{(Ax, x)}{(x, x)} = 1$ for all nonzero x.

2. Consider the Arnoldi process for A. Show that the resulting Hessenberg matrix will have the following tridiagonal form

$$H_m = \begin{pmatrix} 1 & -\eta_2 & & & \\ \eta_2 & 1 & -\eta_3 & & \\ & \eta_3 & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -\eta_m \\ & & & \eta_m & 1 \end{pmatrix}.$$

3. Using the result of the previous question, explain why the CG algorithm applied as is to a linear system with the matrix A, which is nonsymmetric, will still yield residual vectors that are orthogonal to each other.

SOLUTION. 1. 对任意非零向量 x，

$$(Ax, x) = x^T(I + \alpha B)x = x^T x + \alpha\, x^T Bx.$$

由于 B 为实反对称矩阵，得

$$x^T Bx = (x^T Bx)^T = x^T B^T x = x^T(-B)x = -x^T Bx,$$

因此 $x^T Bx = 0$。于是 $(Ax, x) = x^T x$，故

$$\frac{(Ax, x)}{(x, x)} = \frac{x^T x}{x^T x} = 1.$$

2. 设 $v_1, \ldots, v_m$ 为标准 Arnoldi 得到的正交标准基，则对每个 j 有

$$Av_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j}\, v_i, \qquad h_{i,j} = (Av_j, v_i) = v_i^T Av_j,$$

并且 $h_{j+1,j} = \|w\|$。

又 $A = I + \alpha B$ 故

$$h_{i,j} = v_i^T Av_j = v_i^T(I + \alpha B)v_j = v_i^T v_j + \alpha\, v_i^T Bv_j.$$

由于 v_i 与 v_j 正交，当 $i \neq j$ 时 $v_i^T v_j = 0$，于是对 $i \neq j$ 有

$$h_{i,j} = \alpha\, v_i^T Bv_j.$$

利用 $B^T = -B$，得到

$$h_{j,i} = \alpha\, v_j^T Bv_i = \alpha\,(v_i^T Bv_j)^T = -\alpha\, v_i^T Bv_j = -h_{i,j}.$$

即任意一对非对角元互为相反数。

又由于 Arnoldi 构造出的矩阵 H_m 满足 $i > j + 1$ 时 $h_{i,j} = 0$，故考虑任意 $i \leq j - 2$ 的情形。由于 $j > i + 1$，$h_{j,i} = 0$，而又 $h_{i,j} = -h_{j,i}$，从而得 $h_{i,j} = 0$。故 H_m 为三对角矩阵。令对于 $j \geq 2$，

$$\eta_j := h_{j,j-1},$$

由上面的反号关系可得对应的上超对角元 $h_{j-1,j} = -\eta_j$。另外第 1 问知

$$h_{j,j} = (v_j, Av_j) = 1.$$

综上得到，

$$H_m = \begin{pmatrix} 1 & -\eta_2 & & & \\ \eta_2 & 1 & -\eta_3 & & \\ & \eta_3 & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -\eta_m \\ & & & \eta_m & 1 \end{pmatrix},$$

3. 由于每一步的残量 r_k 都属于 Krylov 子空间 $\mathcal{K}_{k+1}(A, r_0) = \mathrm{span}\{v_1, \ldots, v_{k+1}\}$，存在坐标向量 $z_k \in \mathbb{R}^{k+1}$ 使得

$$r_k = V_{k+1}\, z_k.$$

同理，每个搜索方向 p_k 也写成坐标 y_k：

$$p_k = V_{k+1}\, y_k.$$

CG 的残量更新为

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k.$$

将两边左乘 V_{k+1}^T 并利用 Arnoldi 投影 $V_{k+1}^T A V_{k+1} = \begin{pmatrix} H_{k+1} & * \\ 0 & * \end{pmatrix}$ 的前 $k+1$ 块, 简写为 H_{k+1}，得坐标关系

$$z_{k+1} = z_k - \alpha_k\, H_{k+1}\, y_k.$$

此外由 p_k 的定义和正交性的性质，易得

$$y_k = z_k + \beta_{k-1} y_{k-1}. \tag{2}$$

我们要证明对任意 $i \neq j$ 有 $z_i^T z_j = 0$。用归纳法：

- z_0 自然成立。

- 假设对所有 $\ell \leq k$, $\exists k \geq 0$ 都成立 $z_i^T z_j = 0$,$i \neq j$, $i, j \leq k$, 并且 $y_i^T H_{i+1} y_j = 0$ 对 $i \neq j$ 下面证明 z_{k+1} 与任意 z_j,$j \leq k$ 正交。

$$z_{k+1}^T z_j = \big(z_k - \alpha_k H_{k+1} y_k\big)^T z_j = z_k^T z_j - \alpha_k\, y_k^T H_{k+1}^T z_j.$$

由归纳假设第一部分 $z_k^T z_j = 0$, $j \leq k-1$，所以只需看第二项。

$$y_k^T H_{k+1}^T z_j = y_k^T (2I - H_{k+1}) z_j = 2\, y_k^T z_j - y_k^T H_{k+1} z_j.$$

由归纳假设中的“搜索方向互 A-共轭”在坐标下表现为 $y_k^T H_{k+1} y_j = 0$, $j \leq k-1$, 并且 $y_k^T z_j = y_k^T (V_{j+1}^T V_{k+1}) z_j$

$$y_k^T H_{k+1}^T z_j = 0,$$

即 $z_{k+1}^T z_j = 0$ 对所有 $j \leq k-1$ 成立。

剩下的 $j=k$ 情形:

$$z_{k+1}^T z_k = z_k^T z_k - \alpha_k y_k^T H_{k+1}^T z_k.$$

但类似地利用 $H_{k+1}^T = 2I - H_{k+1}$ 并利用 $\alpha_k = \dfrac{z_k^T z_k}{y_k^T H_{k+1} y_k}$

$$\begin{aligned} z_{k+1}^T z_k &= z_k^T z_k - \alpha_k \big(2 y_k^T z_k - y_k^T H_{k+1} z_k\big) \\ &= z_k^T z_k - 2\alpha_k y_k^T z_k + \alpha_k y_k^T H_{k+1} z_k. \end{aligned}$$

但 $y_k^T z_k = z_k^T z_k$ 代入并用 $\alpha_k = \dfrac{z_k^T z_k}{y_k^T H_{k+1} y_k}$ 得

$$z_{k+1}^T z_k = z_k^T z_k - 2\frac{z_k^T z_k}{y_k^T H_{k+1} y_k} z_k^T z_k + \frac{z_k^T z_k}{y_k^T H_{k+1} y_k} y_k^T H_{k+1} z_k = 0.$$

因此 z_{k+1} 与 $z_j, j \le k$ 正交。

由归纳得到对任意 $i \neq j$ 都有坐标向量 $z_i^T z_j = 0$。因为 V_{m+1} 正交归一，原残量的内积等于坐标内积，即

$$r_i^T r_j = z_i^T z_j = 0, \qquad i \neq j.$$

因此标准 CG 在 $A = I + \alpha B, B^T = -B$ 上产生的残量序列两两正交。

□