Iterative 4

王胤雅

25114020018

yinyawang25@m.fudan.edu.cn

2025 年 10 月 30 日

PROBLEM I

1. Using the notation of Section 7.1.2, prove that
$$q_{j+k}(t) = t^k p_j(t)$$
is orthogonal to the polynomials
$$p_1, p_2, \dots, p_{j-k},$$
assuming that $k \leq j$.

2. Show that if q_{j+k} is orthogonalized against $p_1, p_2, \dots, p_{j-k}$, the result would be orthogonal to all polynomials of degree $< j + k$.

3. Derive a general **Look-Ahead non-Hermitian Lanczos procedure** based on this observation.

SOLUTION. 1. 先证明 q_{j+k} 与 $p_1, \cdots, p_{j-k}, k \leq j$ 正交。对任意固定的 m，$1 \leq m \leq j-k$，
$$\langle q_{j+k}, p_m \rangle = \langle t^k p_j, p_m \rangle.$$
利用内积对称性，
$$\langle t^k p_j, p_m \rangle = \langle p_j, t^k p_m \rangle.$$
由于 $\deg p_m = m - 1$，因此
$$\deg\left(t^k p_m\right) = (m-1) + k \leq (j-k-1) + k = j - 1 = \deg p_j.$$
根据正交多项式的构造，p_j 与所有次数 $\leq j-2$ 的多项式正交；若 $\deg(t^k p_m) \leq j-2$ 则内积为零，即 $\langle q_{j+k}, p_m \rangle = 0$. 若 $\deg(t^k p_m) = j-1$，即 $m = j-k$ 也可分解并用标准 Gram-Schmidt 的线性代数事实论证：p_j 在构造满足 $\forall f\ \deg f < j-1\ \langle f, p_j \rangle = 0$。由此得 $\langle p_j, t^k p_m \rangle = 0$，从而
$$\langle q_{j+k}, p_m \rangle = 0,$$
对所有 $m = 1, \dots, j-k$ 成立，证毕。

2. 把 $q_{j+k} = t^k p_j$ 对 $\{p_1, \ldots, p_{j-k}\}$ 做 Gram-Schmidt 正交化，设正交化后的多项式为 $\widetilde{q}_{j+k}$。任取任意多项式 $r(t)$，若 $\deg r < j+k$，则可以把 r 分解为

$$r = r_{\text{low}} + r_{\text{rem}},$$

其中 $r_{\text{low}} \in \text{span}\{p_1, \ldots, p_{j-k}\}$（包含所有足够低次成分），故 $\deg(r_{\text{low}}) \leq j-k$，令 $r_{\text{rem}} := s(t)$，其中 $\deg s < k$。

$$\langle \widetilde{q}_{j+k}, r \rangle = \langle \widetilde{q}_{j+k}, r_{\text{low}} \rangle + \langle \widetilde{q}_{j+k}, t^k s \rangle.$$

由正交化定义故 $\langle \widetilde{q}_{j+k}, r_{\text{low}} \rangle = 0$。设 g 为 q_{j+k} 在 $span\{p_1, \ldots, p_{j-k}\}$ 的投影，故 $g + \widetilde{q}_{j+k} = q_{j+k}$，且 $\langle g, t^k s \rangle = 0$.

而且 $\langle \widetilde{q}_{j+k}, s \rangle = \langle q_{j+k}, s \rangle - \langle g, s \rangle = \langle t^k p_j, s \rangle$。而由于 $\deg s < j$，上式也为 0。因此 $\widetilde{q}_{j+k}$ 与任意 $\deg r < j+k$ 的多项式正交。

3. 设在第 j 步我们按常规范处得到向量 $u = Av_j - \sum_{i=1}^{j} \alpha_i v_i$。若 $u \neq 0$，则可归一化为 v_{j+1} 并类似地得到 w_{j+1}。若 $u \approx 0$（breakdown），设常规方法不能继续，此时执行 Look-Ahead：

   (a) 尝试 $u^{(1)} = A^1 v_j$，对其对 $\{w_1, \ldots, w_{j-1}\}$ 做双正交化；若得到非零向量则用之继续；

   (b) 否则尝试 $u^{(2)} = A^2 v_j$，逐步增加幂数 k，直至找到非零向量 $u^{(k)}$，然后把该 $u^{(k)}$ 对 $w_1, \ldots, w_{j-k}$ 正交化，归一化并作为新的 v_{j+k}。

   对偶方向即 w 基，需对称地执行 look-ahead。

   结果：生成的 V 与 W 基仍然是双正交的，但投影矩阵在 V 基下变为宽带，而不是纯三对角。

□

PROBLEM II Consider the matrices

$$V_m = [v_1, v_2, \ldots, v_m], \qquad W_m = [w_1, w_2, \ldots, w_m],$$

obtained from the Lanczos biorthogonalization algorithm.

1. What are the matrix representations of the (oblique) projector onto $\mathcal{K}_m(A, v_1)$ orthogonal to the subspace $\mathcal{K}_m(A^T, w_1)$, and the projector onto $\mathcal{K}_m(A^T, w_1)$ orthogonal to the subspace $\mathcal{K}_m(A, v_1)$?

2. Express a general condition for the existence of an oblique projector onto a subspace K, orthogonal to another subspace L.

3. How can this condition be interpreted using the Lanczos vectors and the Lanczos algorithm?

SOLUTION. 设

$$K = \mathcal{K}_m(A, v_1), \qquad L = \mathcal{K}_m(A^T, w_1)$$

那么

$$K = \mathcal{K}_m(A, v_1) = \text{range}(V_m), \qquad L = \mathcal{K}_m(A^T, w_1) = \text{range}(W_m)$$

1. 设 y 投影到 K 投影向量为 $x \in K$，写作 $x = V_m z$，则斜投影存在则
$$W_m^T(y - V_m z) = 0.$$
从而，
$$W_m^T V_m \, z = W_m^T y.$$
若矩阵 $W_m^T V_m$ 可逆，则唯一解为
$$z = (W_m^T V_m)^{-1} W_m^T y,$$
对应的斜投影矩阵为
$$P_{K,L} = V_m (W_m^T V_m)^{-1} W_m^T$$
同理，将向量投影到 L 且误差与 K 正交的投影矩阵为
$$P_{L,K} = W_m (V_m^T W_m)^{-1} V_m^T$$
Lanczos 双正交规范化，满足 $w_i^T v_j = \delta_{ij}$，则矩阵 $W_m^T V_m = I$，从而
$$P_{K,L} = V_m W_m^T, \qquad P_{L,K} = W_m V_m^T$$

2. 给定两个列满秩矩阵 V 和 W，分别生成子空间 K 和 L，要求斜投影 P 存在，即对任意 y 存在唯一 $x \in K$ 使得 $y - x \perp L$，充要条件是
$$W^T V \text{ 可逆}$$
设要对任意给定的 $y \in \mathbb{R}^n$ 寻找投影 $x \in K$ 满足 $y - x \perp L$，即
$$x = Vz, \qquad z \in \mathbb{R}^m.$$
正交条件 $y - x \perp L$ 等价于
$$W^T(y - Vz) = 0.$$
因此，
$$W^T V \, z = W^T y$$
若 $W^T V$ 可逆，则方程有唯一解
$$z = (W^T V)^{-1} W^T y,$$
从而唯一确定 $x = Vz$。
反之，若对任意 y 方程 $\exists x = Vz \in K$，使得 $y - x \perp L$，即 $W^T V z = W^T y$ 都有唯一解。由于 W 列满秩，故 W^T 可逆。考虑线性映射 $\phi : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$，$z \to W^T V z$ 为满射。又由 z 的唯一性，可知 ϕ 为单射。则取 y 使得 $W^T y$ 遍历整个 $\mathbb{R}^m$，可得线性映射 ϕ 是双射，因而 $W^T V$ 可逆。

3. 在 Lanczos 双正交化过程中，生成的向量序列满足
$$w_i^T v_j = 0 \ (i \neq j), \qquad w_i^T v_i = \gamma_i$$
因此
$$W_m^T V_m = \mathrm{diag}(\gamma_1, \ldots, \gamma_m)$$
若所有 $\gamma_i \neq 0$，矩阵 $W_m^T V_m$ 可逆，斜投影存在。若某个 $w_i^T v_i = 0$，则 $W_m^T V_m$ 奇异，无法定义斜投影。

□

PROBLEM III

1. Show a three-term recurrence satisfied by the residual vectors r_j of the BCG algorithm. Include the first two iterates to start the recurrence.
2. Similarly, establish a three-term recurrence for the conjugate direction vectors p_j in BCG.

SOLUTION. 残量向量 r_j 和共轭方向向量 p_j 的三项递推关系。算法的基本更新为:

$$x_{j+1} = x_j + \alpha_j p_j,$$
$$r_{j+1} = r_j - \alpha_j A p_j,$$
$$p_{j+1} = r_{j+1} + \beta_j p_j,$$

其中 α_j, β_j 为算法计算得到的标量系数，$p_0 = r_0$。

1.
$$r_{j+1} = r_j - \alpha_j A p_j, \quad p_j = r_j + \beta_{j-1} p_{j-1}. \tag{1}$$

   将 p_j 代入 r_{j+1}:

$$r_{j+1} = r_j - \alpha_j A(r_j + \beta_{j-1} p_{j-1}) = r_j - \alpha_j A r_j - \alpha_j \beta_{j-1} A p_{j-1}.$$

   又由上一轮残量更新:

$$A p_{j-1} = \frac{r_{j-1} - r_j}{\alpha_{j-1}},$$

   代入上式得到

$$r_{j+1} = r_j - \alpha_j A r_j - \alpha_j \beta_{j-1} \frac{r_{j-1} - r_j}{\alpha_{j-1}} = \left(1 + \frac{\alpha_j \beta_{j-1}}{\alpha_{j-1}}\right) r_j - \alpha_j A r_j - \frac{\alpha_j \beta_{j-1}}{\alpha_{j-1}} r_{j-1}.$$

   于是残量向量的三项递推为:

$$r_{j+1} = -\alpha_j A r_j + \left(1 + \frac{\alpha_j \beta_{j-1}}{\alpha_{j-1}}\right) r_j - \frac{\alpha_j \beta_{j-1}}{\alpha_{j-1}} r_{j-1}. \tag{2}$$

   起始两步迭代:

$$r_1 = r_0 - \alpha_0 A p_0, \qquad r_2 = r_1 - \alpha_1 A p_1.$$

2. 根据基本公式:

$$p_{j+1} = r_{j+1} + \beta_j p_j.$$

   利用 $r_j = p_j - \beta_{j-1} p_{j-1}$ 代入:

$$p_{j+1} = (r_j - \alpha_j A p_j) + \beta_j p_j = (p_j - \beta_{j-1} p_{j-1} - \alpha_j A p_j) + \beta_j p_j = -\alpha_j A p_j + (1 + \beta_j) p_j - \beta_{j-1} p_{j-1}.$$

   因此得到共轭方向向量的三项递推:

$$p_{j+1} = -\alpha_j A p_j + (1 + \beta_j) p_j - \beta_{j-1} p_{j-1}. \tag{3}$$

   起始两步迭代:

$$p_0 \text{ 已知}, \qquad p_1 = r_1 + \beta_0 p_0 = r_0 - \alpha_0 A p_0 + \beta_0 p_0.$$

□