

Mock Qualifying Examination 01

参考解答与评分要点

Problems 1–5 共 80 分；Problems 6–7 二选一，计 20 分。以下解答中的评分拆分只用于阅卷，不构成题面对解法的提示。

Problem 1 [10 points]

记 $e_k = x_k - \alpha$ ，并写

$$\phi(\alpha + e) - \alpha = qe + ce^2 + O(e^3), \quad c = \frac{1}{2}\phi''(\alpha).$$

连续代入一次得

$$e_{k+1} = qe_k + ce_k^2 + O(e_k^3),$$

以及

$$e_{k+2} = q^2e_k + cq(1+q)e_k^2 + O(e_k^3).$$

因此

$$\begin{aligned} e_{k+1} - e_k &= (q-1)e_k + ce_k^2 + O(e_k^3), \\ e_{k+2} - 2e_{k+1} + e_k &= (q-1)^2e_k + c(q^2 + q - 2)e_k^2 + O(e_k^3). \end{aligned}$$

由题设 $e_k \neq 0$ 。由于 $q \neq 1$ ，最后一式与 $(q-1)^2e_k$ 渐近等价，故分母对充分大的 k 非零。

将上述展开代入 y_k ，或对商作二阶展开，得到

$$y_k - \alpha = \frac{cq}{q-1}e_k^2 + O(e_k^3).$$

所以

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{y_k - \alpha}{(x_k - \alpha)^2} = \frac{q\phi''(\alpha)}{2(q-1)}.$$

即使该常数为零，所求极限仍为零；此时实际消去阶可能更高。

评分要点（10 分） 误差的两次迭代展开 4 分；分母最终非零的论证 2 分；商展开及极限 4 分。

Problem 2 [20 points]

设

$$Q(z) = 1 + q_1z + q_2z^2, \quad P(z) = 1 + p_1z + p_2z^2.$$

将 $e^z = 1 + z + z^2/2 + z^3/6 + z^4/24 + O(z^5)$ 代入。三、四次项必须消失，因此

$$\frac{1}{6} + \frac{q_1}{2} + q_2 = 0, \quad \frac{1}{24} + \frac{q_1}{6} + \frac{q_2}{2} = 0.$$

解得

$$q_1 = -\frac{1}{2}, \quad q_2 = \frac{1}{12}.$$

一次、二次项再给出

$$p_1 = 1 + q_1 = \frac{1}{2}, \quad p_2 = \frac{1}{2} + q_1 + q_2 = \frac{1}{12}.$$

故满足条件的归一化解唯一，且

$$R(z) = \frac{1 + z/2 + z^2/12}{1 - z/2 + z^2/12}.$$

分母的两个零点为

$$z = 3 \pm i\sqrt{3},$$

均在开右半平面，因而闭左半平面无极点。

记 $D(z) = 1 - z/2 + z^2/12$ ，则分子为 $D(-z)$ 。直接展开模平方可得

$$|D(z)|^2 - |D(-z)|^2 = -2\operatorname{Re} z \left(1 + \frac{|z|^2}{12}\right).$$

当 $\operatorname{Re} z \leq 0$ 时右端非负，所以

$$|R(z)| = \frac{|D(-z)|}{|D(z)|} \leq 1.$$

因此该稳定函数覆盖整个闭左半平面，也就是 A-stable。

另一方面，沿负实轴令 $z \rightarrow -\infty$ ，分子分母最高次项相同，故

$$R(z) \rightarrow 1.$$

因此它不是 L-stable：解析解中衰减极快的 stiff modes，在一步离散中并不会随着 $|z| \rightarrow \infty$ 被强烈压到零，而会留下接近单位模的数值成分。

评分要点（20 分） 系数匹配与唯一性 7 分；极点位置 3 分；左半平面模估计 6 分；负实轴极限和 stiff-decay 解释 4 分。

Problem 3 [20 points]

GMRES 的残差多项式表述为

$$\|r_k\|_2 = \min_{p \in \mathcal{P}_k, p(0)=1} \|p(A)e_n\|_2.$$

把多项式在 $z = 1$ 展开：

$$p(z) = \sum_{j=0}^k c_j (z-1)^j.$$

约束 $p(0) = 1$ 等价于

$$\sum_{j=0}^k (-1)^j c_j = 1.$$

当 $k < n$ 时，向量 $e_n, e_{n-1}, \dots, e_{n-k}$ 正交，且

$$p(A)e_n = \sum_{j=0}^k c_j M^j e_{n-j}.$$

因此问题变成

$$\min \sum_{j=0}^k c_j^2 M^{2j} \quad \text{s.t.} \quad \sum_{j=0}^k (-1)^j c_j = 1.$$

令 $d_j = M^j c_j$ 。由 Cauchy-Schwarz,

$$1 = \left(\sum_{j=0}^k (-1)^j M^{-j} d_j \right)^2 \leq \left(\sum_{j=0}^k M^{-2j} \right) \left(\sum_{j=0}^k d_j^2 \right).$$

取 d_j 与 $(-1)^j M^{-j}$ 成比例可达等号。因 $\|r_0\|_2 = 1$, 故

$$\frac{\|r_k\|_2}{\|r_0\|_2} = \left(\sum_{j=0}^k M^{-2j} \right)^{-1/2}, \quad 0 \leq k < n.$$

又 $J_n^n = 0$, 所以取满足 $p(0) = 1$ 的

$$p(z) = (1 - z)^n$$

便有 $p(A)e_n = (-MJ_n)^n e_n = 0$ 。相对最小多项式次数正是 n , 故 GMRES 在第 n 步首次保证精确终止。

A 的全部特征值都等于 1, 但当 $M \gg 1$ 且 $k < n$ 时

$$\left(\sum_{j=0}^k M^{-2j} \right)^{-1/2} = 1 - O(M^{-2}),$$

残差几乎不下降。这里决定行为的是强 nonnormality 以及多项式作用于 Jordan 链的方式, 而不是特征值集合本身。

评分要点 (20 分) 残差多项式和正交链表示 7 分; 加权最小化与精确残差 7 分; 终止步数 3 分; 谱直觉失效的解释 3 分。

Problem 4 [15 points]

记 $A_h = D_{xx}$ 、 $B_h = D_{yy}$ 。它们作用在不同坐标方向, 因而可交换。展开格式得

$$\frac{U^{m+1} - U^m}{\tau} = \frac{1}{2}(A_h + B_h)(U^{m+1} + U^m) - \frac{\tau}{4}A_h B_h(U^{m+1} - U^m).$$

对光滑精确解, 最后一项为 $O(\tau^2)$; 中心二阶差分给 $A_h + B_h = \Delta + O(h_x^2 + h_y^2)$ 。因此归一化 local truncation error 为

$$O(\tau^2 + h_x^2 + h_y^2),$$

格式时间二阶、空间二阶。

对周期 Fourier mode, 写

$$A_h \mapsto -\alpha, B_h \mapsto -\beta, \quad \alpha, \beta \geq 0.$$

增长因子为

$$G(\alpha, \beta) = \frac{1 - \tau\alpha/2}{1 + \tau\alpha/2} \frac{1 - \tau\beta/2}{1 + \tau\beta/2}.$$

每个因子的模都不超过 1, 故 $|G| \leq 1$, 且该结论对任意正的 τ, h_x, h_y 成立。由 Parseval 恒等式,

$$\|U^{m+1}\|_2 \leq \|U^m\|_2;$$

这是无条件 ℓ^2 稳定性。应注意, 无条件稳定并不保证大时间步下仍有好的高频精度。

实现时先计算右端的两个一维算子, 然后依次解

$$\left(I - \frac{\tau}{2}A_h\right)V = \text{right-hand side}, \quad \left(I - \frac{\tau}{2}B_h\right)U^{m+1} = V.$$

每一步是一批相互独立的一维三对角 (周期时为 cyclic tridiagonal) 线性系统。采用标准线性复杂度算法, 总成本为 $O(N_x N_y)$, 存储量也为 $O(N_x N_y)$; 不需要形成或分解二维稠密矩阵。

评分要点 (15 分) 一致性展开及阶数 5 分; 增长因子和无条件稳定性 6 分; line solves 与复杂度 4 分。

Problem 5 [15 points]

取正交谱分解

$$A = Q\Lambda Q^T, \quad \Lambda = \text{diag}(a_1, \dots, a_s).$$

由题目中正半定平方根的定义,

$$|A| = Q|\Lambda|Q^T, \quad |\Lambda| = \text{diag}(|a_1|, \dots, |a_s|).$$

令 $W = Q^T U$ 。第 ℓ 个分量独立满足

$$\begin{aligned} w_{\ell,j}^{m+1} &= w_{\ell,j}^m - \frac{\nu a_\ell}{2}(w_{\ell,j+1}^m - w_{\ell,j-1}^m) \\ &\quad + \frac{\nu |a_\ell|}{2}(w_{\ell,j+1}^m - 2w_{\ell,j}^m + w_{\ell,j-1}^m). \end{aligned}$$

若 $a_\ell > 0$, 上式化为

$$w_{\ell,j}^{m+1} = (1 - \nu a_\ell)w_{\ell,j}^m + \nu a_\ell w_{\ell,j-1}^m;$$

若 $a_\ell < 0$, 则化为

$$w_{\ell,j}^{m+1} = (1 - \nu |a_\ell|)w_{\ell,j}^m + \nu |a_\ell|w_{\ell,j+1}^m.$$

因此每个 wave family 都从其上游方向取值; $a_\ell = 0$ 的分量保持不变。

令 $\rho_\ell = \nu |a_\ell|$ 。一个 Fourier mode 的增长因子 (正负速度只差复共轭) 为

$$G_\ell(\theta) = 1 - \rho_\ell(1 - e^{-i\theta}).$$

计算得

$$|G_\ell(\theta)|^2 = 1 - 2\rho_\ell(1 - \rho_\ell)(1 - \cos \theta).$$

故对所有 θ 有 $|G_\ell(\theta)| \leq 1$ 当且仅当 $0 \leq \rho_\ell \leq 1$ 。若 $\rho_\ell > 1$ ，取 $\theta = \pi$ 即得模大于 1。正交变换保持离散 ℓ^2 范数，所以整个系统的必要充分稳定条件是

$$\boxed{\nu \max_{\ell} |a_{\ell}| \leq 1}.$$

对标量迎风格式作 Taylor 展开，并用 $w_t = -a_{\ell} w_x$ 消去时间导数，得到 modified equation

$$w_{\ell,t} + a_{\ell} w_{\ell,x} = \frac{|a_{\ell}|h}{2}(1 - \nu|a_{\ell}|)w_{\ell,xx} + O(h^2),$$

这里取固定 Courant ratio ν 。因此 leading numerical diffusion 为

$$\frac{|a_{\ell}|h}{2}(1 - \nu|a_{\ell}|).$$

在稳定端点 $\nu \max_{\ell} |a_{\ell}| = 1$ ，每个满足 $|a_{\ell}| = \max_r |a_r|$ 的 wave family 扩散系数均为零，其更新恰好是每个时间步沿正确方向平移一个网格点；较慢的 families 通常仍有正的数值扩散。

评分要点 (15 分) 识别并解耦 wave families 4 分；必要充分稳定条件 5 分；迎风方向 2 分；leading diffusion 与端点精确平移 4 分。

Problem 6 [20 points]

记

$$\psi_a(x) = \frac{a}{2}x^2 - \frac{1}{4}x^4.$$

若 $a < 0$ ， $x = 0$ 是区间内唯一最大点， $\psi_a(0) = 0$ 且 $\psi_a''(0) = a < 0$ 。局部 Gaussian 尺度为 $x = O(\lambda^{-1/2})$ ，故

$$\boxed{I(\lambda; a) \sim \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|a|}}}, \quad a < 0.$$

若 $a > 0$ ， $x = 0$ 是局部最小点，两个全局最大点为 $x = \pm\sqrt{a}$ 。它们位于 $(-1, 1)$ ，并满足

$$\psi_a(\pm\sqrt{a}) = \frac{a^2}{4}, \quad \psi_a''(\pm\sqrt{a}) = -2a.$$

两点贡献相同，因此

$$\boxed{I(\lambda; a) \sim 2e^{\lambda a^2/4} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda a}}}, \quad a > 0.$$

端点的指数值比 $a^2/4$ 小 $(1-a)^2/4$ ，故对固定 $0 < a < 1$ 不贡献主项。

若 $a = 0$ ，二次项消失。令 $x = \lambda^{-1/4}t$ ，则

$$\begin{aligned} I(\lambda; 0) &= \lambda^{-1/4} \int_{-\lambda^{1/4}}^{\lambda^{1/4}} e^{-t^4/4} dt \\ &\sim \lambda^{-1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^4/4} dt = \frac{\Gamma(1/4)}{\sqrt{2}} \lambda^{-1/4}. \end{aligned}$$

即

$$\boxed{I(\lambda; 0) \sim \frac{\Gamma(1/4)}{\sqrt{2}} \lambda^{-1/4}}.$$

固定 $a \neq 0$ 的公式在 $a \rightarrow 0$ 时分别含 $|a|^{-1/2}$ 或发生主导点分裂, 所以不可能在 $a = 0$ 附近一致。用退化点尺度 $x = \lambda^{-1/4}t$ 代入指数:

$$\lambda\psi_a(x) = \frac{a\lambda^{1/2}}{2}t^2 - \frac{1}{4}t^4.$$

二次项和四次项同阶当且仅当 $a\lambda^{1/2} = O(1)$ 。因此 transition scale 为

$$\boxed{a = O(\lambda^{-1/2})}.$$

评分要点 (20 分) $a < 0$ 的主项 4 分; $a > 0$ 的两点贡献及常数 6 分; $a = 0$ 的四次退化尺度与常数 6 分; 非一致性和 transition scale 4 分。

Problem 7 [20 points]

$H \succ 0$ 保证原约束问题在非空 affine set 上有唯一解; A 满行秩保证乘子唯一。罚函数的 Hessian 为

$$K_\mu = H + \mu A^T A \succ 0,$$

所以 x_μ 也唯一, 并满足

$$Hx_\mu - c + A^T \lambda_\mu = 0, \quad \lambda_\mu = \mu(Ax_\mu - b).$$

定义

$$S = AH^{-1}A^T.$$

由于 A 满行秩且 $H \succ 0$, $S \succ 0$ 。从两组 stationarity equations 相减可得

$$x_\mu - x^* = -H^{-1}A^T(\lambda_\mu - \lambda^*).$$

再作用 A , 并用 $Ax^* = b$ 以及 $Ax_\mu - b = \lambda_\mu/\mu$, 得到

$$(S + \mu^{-1}I)\lambda_\mu = S\lambda^*.$$

于是

$$\lambda_\mu - \lambda^* = -\mu^{-1}(S + \mu^{-1}I)^{-1}S\lambda^*.$$

特别地,

$$\begin{aligned} \|\lambda_\mu - \lambda^*\|_2 &\leq \frac{\|\lambda^*\|_2}{\mu\lambda_{\min}(S)}, \\ \|x_\mu - x^*\|_2 &\leq \frac{\|H^{-1}A^T\|_2 \|\lambda^*\|_2}{\mu\lambda_{\min}(S)}, \\ \|Ax_\mu - b\|_2 &= \frac{\|\lambda_\mu\|_2}{\mu} \leq \frac{\|\lambda^*\|_2}{\mu}. \end{aligned}$$

最后一个不等式利用了 $S(S + \mu^{-1}I)^{-1}$ 的特征值都在 $(0, 1)$ 。这证明 primal variable、multiplier 和 feasibility residual 都至少以 $O(\mu^{-1})$ 收敛; 若相应首项非零, 这也是实际的一阶渐近量级。

下面估计 K_μ 的 condition number。上界为

$$\kappa_2(K_\mu) \leq \frac{\lambda_{\max}(H) + \mu\sigma_{\max}(A)^2}{\lambda_{\min}(H)} = O(\mu).$$

因为 $m < n$, 存在单位向量 $z \in \ker A$, 从而

$$\lambda_{\min}(K_\mu) \leq z^T H z \leq \lambda_{\max}(H).$$

另一方面, 在 A 的最大右奇异向量方向上,

$$\lambda_{\max}(K_\mu) \geq \mu \sigma_{\max}(A)^2.$$

所以

$$\kappa_2(K_\mu) \geq \frac{\mu \sigma_{\max}(A)^2}{\lambda_{\max}(H)}.$$

综上,

$$\boxed{\kappa_2(H + \mu A^T A) = \Theta(\mu)}.$$

增大 μ 使罚函数解以 $O(\mu^{-1})$ 逼近精确约束解, 却同时使线性系统以 $\Theta(\mu)$ 变坏; 这正是 quadratic penalty 的精度-条件数权衡。

评分要点 (20 分) 唯一性和最优性方程 3 分; S 的消元表示 6 分; 定量收敛界 5 分; 条件数上下界 4 分; trade-off 解释 2 分。