dr hab. Stanisław Grzegórski, prof. PL
Politechnika Lubelska, Instytut Informatyki

Optymalny dobór parametru dla metody Gaussa-Seidela

Referat dotyczy prostych metod iteracyjnych dla układu równań liniowych $Ax = b$, gdzie A jest macierzą dodatnio określoną. Niech $q \in R$ i niech $A = A_1 + A_2$. Wtedy możemy zdefiniować klasę metod iteracyjnych postaci

$$\begin{cases} x_0 = 0 \\ x_{k+1} = (A_1 + qI)^{-1}(b - (A_2 - qI)x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots \end{cases}$$

Klasa ta zawiera jako szczególne przypadki: metodę Jacobiego, metodę minimalnych residuów oraz metodę Gaussa-Seidela. W analizie zbieżności metody główną rolę odgrywa macierz $Q = (A_1 + qI)^{-1}(A_2 - qI)$.

Twierdzenie 1. Jeśli A jest macierzą dodatnio określoną, wtedy istnieje q_0 takie, że dla $q > q_0$ spełnione są nierówności:

$$\rho(Q) < 1 \text{ i } \rho(Q) \geq \max\left\{\frac{\|r_{k+1}\|}{\|r_k\|}, \frac{\|x_{k+1} - x_k\|}{\|x_k - x_{k-1}\|}\right\} \text{ dla } k = 1, 2, \ldots,$$

gdzie $r_k = Ax_k - b$ i $\|x\|^2 = x^T x$.

Promień spektralny macierzy Q można zminimalizować, jeśli wybierzemy q spełniające następujące kryterium optymalności:

$$\min_{\|x\|=1} \frac{x^T A x}{x^T A_1 x + q} = 2 - \max_{\|x\|=1} \frac{x^T A x}{x^T A_1 x + q}.$$

Dla metody residualnej, tzn. $A_1 = 0$, otrzymujemy $q_{\text{opt}} = \frac{1}{2}(\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(A))$ oraz $\rho(Q) = \frac{\kappa(A)-1}{\kappa(A)+1}$.

Tutaj $\kappa(A)$ oznacza liczbę uwarunkowania macierzy A.

Metoda Gaussa-Seidela. Niech $m = \min_{1\leq i\leq n} A_{ii}$, $M = \max_{1\leq i\leq n} A_{ii}$, $\lambda_1 = \min \lambda(A)$, $\lambda_n = \max \lambda(A)$ oraz $t = \frac{M-m}{2\lambda_1}$. Wtedy

$$q_{\text{opt}} = \frac{1}{4}(-m - M + \sqrt{(M-m)^2 + 4\lambda_1\lambda_n}),$$

$$\rho(Q) = 1 - \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 + d + 2q_{\text{opt}}} = \frac{\sqrt{\kappa(A) + t^2} + t - 1}{\sqrt{\kappa(A) + t^2} + t + 1}.$$

Jeśli ponadto $A_{ii} = d$ dla $i = 1, 2, \ldots, n$, wtedy $q_{\text{opt}} = \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda_1\lambda_n} - d)$ oraz $\rho(Q) = \frac{\sqrt{\kappa(A)}-1}{\sqrt{\kappa(A)}+1}$.

Ponieważ istnieje ścisły związek między metodą Gaussa-Seidela z parametrem q a parametrem ω dla metody SOR, mianowicie $\frac{d}{\omega} = q + d$, więc dla metody SOR

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{d}{d + q_{\text{opt}}} = \frac{2d}{d + \sqrt{\lambda_1\lambda_n}} \text{ oraz } \rho(Q) = \frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1}.$$

Nowy wariant metody Gaussa-Seidela. Niech $A = L + D + L^T$, gdzie D jest symetryczną i nieosobliwą macierzą. Niech $A_1 = L + \frac{1}{2}D$ i niech $x_{k+1} = c - Qx_k$, gdzie $c = (A_1 + qI)^{-1}b$ oraz $Q = (A_1 + qI)^{-1}(A_1^T - qI)$. W tym przypadku

$$\lambda(q) = \frac{x^*Ax - 2q}{x^*Ax + 2q}, \quad x^*x = 1.$$

Z kryterium optymalności otrzymujemy $q_{\text{opt}} = \frac{1}{2}\sqrt{\lambda_1\lambda_n}$, $\rho(Q) = \frac{\sqrt{\kappa(A)}-1}{\sqrt{\kappa(A)}+1}$.

Uwaga 1. Jeśli D będzie macierzą diagonalną, to nawet w przypadku różnych elementów na przekątnej mamy zapewnioną zbieżność z minimalnym promieniem zbieżności. Z tego względu jest to optymalny wariant metody Gaussa-Seidela.

Uwaga 2. W praktyce na ogół nie znamy najmniejszej i największej wartości własnej macierzy A. W takiej sytuacji bezpieczniej jest wybrać $q > q_{\text{opt}}$ niż $q < q_{\text{opt}}$, a eksperymenty numeryczne wskazują, że dobrym wyborem jest wybór $\|A\|_\infty$ zamiast λ_n oraz m zamiast λ_1.