บทที่ 4
การแก้ระบบสมการขนาดใหญ่ด้วยวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์

การแก้ระบบสมการเชิงเส้นขนาดใหญ่ วิธีดั้งเดิมที่นิยมใช้กัน คือ วิธีแก้ระบบสมการโดยการกำจัดแบบเกาส์ (Gauss Elimination method) ซึ่งเป็นวิธีที่ยอมรับกันมาแต่ก่อนว่าสามารถให้คำตอบที่ถูกต้องแม่นยำ แต่ข้อเสียของระเบียบวิธีดังกล่าว คือ เมื่อนำมาใช้แก้ระบบสมการขนาดใหญ่ จะต้องใช้เวลาในการคำนวณและหน่วยความจำจำนวนมาก ระเบียบวิธีแก้ระบบสมการเชิงเส้นที่ดีและเหมาะสมกับการแก้ระบบสมการขนาดใหญ่จะต้องมีคุณสมบัติ คือ ให้คำตอบที่มีความถูกต้องแม่นยำ แต่ใช้เวลาในการคำนวณและหน่วยความจำไม่มากนัก ระเบียบวิธีการแก้ระบบสมการเชิงเส้นขนาดใหญ่แบบคอนจูเกตเกรเดียนท์นั้นมีคุณสมบัติดังกล่าว จึงเหมาะแก่การนำมาใช้แก้ระบบสมการเชิงเส้นขนาดใหญ่ดังกล่าว

ในการวิเคราะห์ปัญหาการไหลแบบหนืดแต่ไม่อัดตัวในครั้งนี้ จำเป็นต้องแก้ระบบสมการเชิงเส้นขนาดใหญ่ ดังนั้นจึงได้นำเอาระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์มาใช้แก้ระบบสมการดังกล่าว ในบทนี้จะกล่าวถึงหลักการของวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ โดยจะอธิบายอย่างเป็นขั้นเป็นตอน

ในการแก้ระบบสมการเชิงเส้น ที่อยู่ในรูป

$$Ax = b \tag{4.1}$$

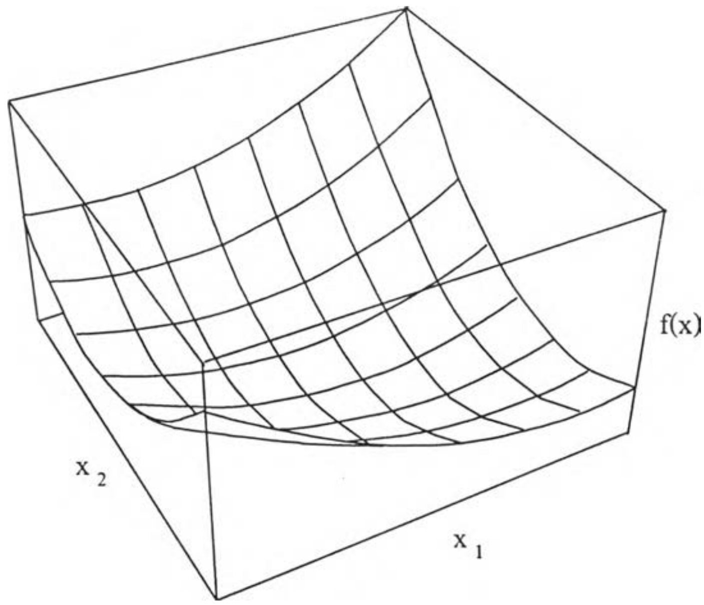
ด้วยวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ มีแนวความคิดมาจากการหาค่าต่ำสุดของฟังก์ชั่นควอดราติก (quadratic function) [9-12] ดังสมการ (4.2)

$$f(x) = \frac{1}{2}x^{T}Ax - b^{T}x + c \tag{4.2}$$

โดย A คือ เมตริกซ์ x , b คือ เวคเตอร์ c คือค่าคงที่ เมตริกซ์ A จะต้องเป็นเมตริกซ์สมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite* ซึ่งจะทำให้การหาค่าต่ำสุดของฟังก์ชัน $f(x)$ คือ การแก้ระบบสมการ $Ax = b$

---

* เมตริกซ์ A จะมีคุณสมบัติ poistive definite ก็ต่อเมื่อ $x^{T}Ax > 0$



รูปที่ 4.1 กราฟของฟังก์ชันควอดราติก $f(x)$

การหาค่าต่ำสุดของฟังก์ชัน $f(x)$ ทำโดยการหาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชัน $f(x)$ เทียบกับ x แล้วให้เท่ากับศูนย์

$$f'(x)=\frac{1}{2}A^{T}x+\frac{1}{2}Ax-b=0 \tag{4.3}$$

ถ้า A เป็นเมตริกซ์ที่สมมาตร จะทำให้สมการ (4.3) กลายมาเป็น

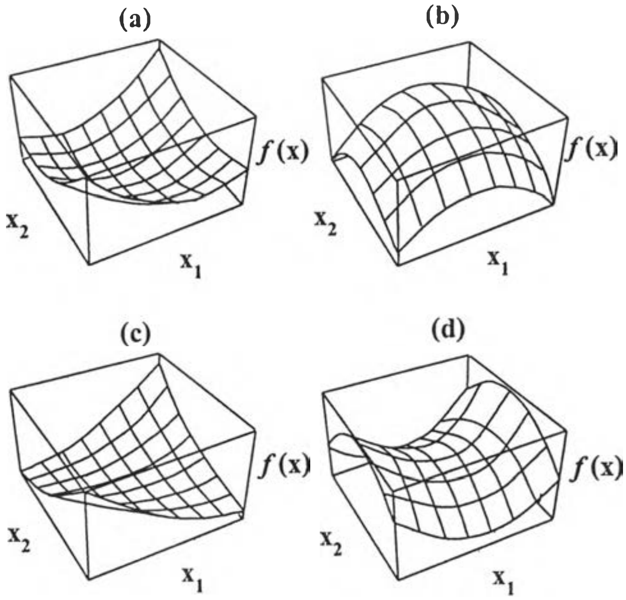
$$f'(x)=Ax-b=0 \tag{4.4}$$

นั่นคือ ถ้า A เป็นเมตริกซ์ที่สมมาตร การหาค่าต่ำสุดของฟังก์ชั่นควอดราติก จะเป็นการแก้ระบบสมการเชิงเส้นดังสมการที่ (4.1)

เหตุผลที่เมตริกซ์ A จะต้องมีคุณสมบัติ positive definite นั้นแสดงให้เห็นได้ดังนี้ คือ เมื่อพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างฟังก์ชั่น $f(x)$ ที่จุด p ใด ๆ และจุดต่ำสุดของฟังก์ชั่น $f(x)$ คือ $x = A^{T}b$ เมื่อเมตริกซ์ A เป็นเมตริกซ์ที่สมมาตร สมการ (4.2) จะได้เป็น

$$\begin{aligned} f(x+e) &= \frac{1}{2}(x+e)^{T}A(x+e)-b^{T}(x+e)+c \\ &= \frac{1}{2}x^{T}A\,x+e^{T}A\,x+\frac{1}{2}e^{T}A\,e-b^{T}x-b^{T}e+c \\ &= \frac{1}{2}x^{T}A\,x-b^{T}x+c+e^{T}b+\frac{1}{2}e^{T}Ae-b^{T}e \\ &= f(x)+\frac{1}{2}e^{T}Ae \end{aligned}$$

ดังนั้นถ้า A มีคุณสมบัติ positive definite แล้ว เทอม $\frac{1}{2}e^{T}Ae$ จะต้องมีค่าเป็นบวกสำหรับทุก ๆ ค่า ของ e ที่ไม่เท่ากับศูนย์ ดังนั้นค่า x จะเป็นค่า x ที่ทำให้ค่า f(x) มีค่าต่ำสุด



รูปที่ 4.2 กราฟของฟังก์ชันควอดราติก f(x)

a) เมื่อเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติ positive definite

b) เมื่อเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติ negative definite

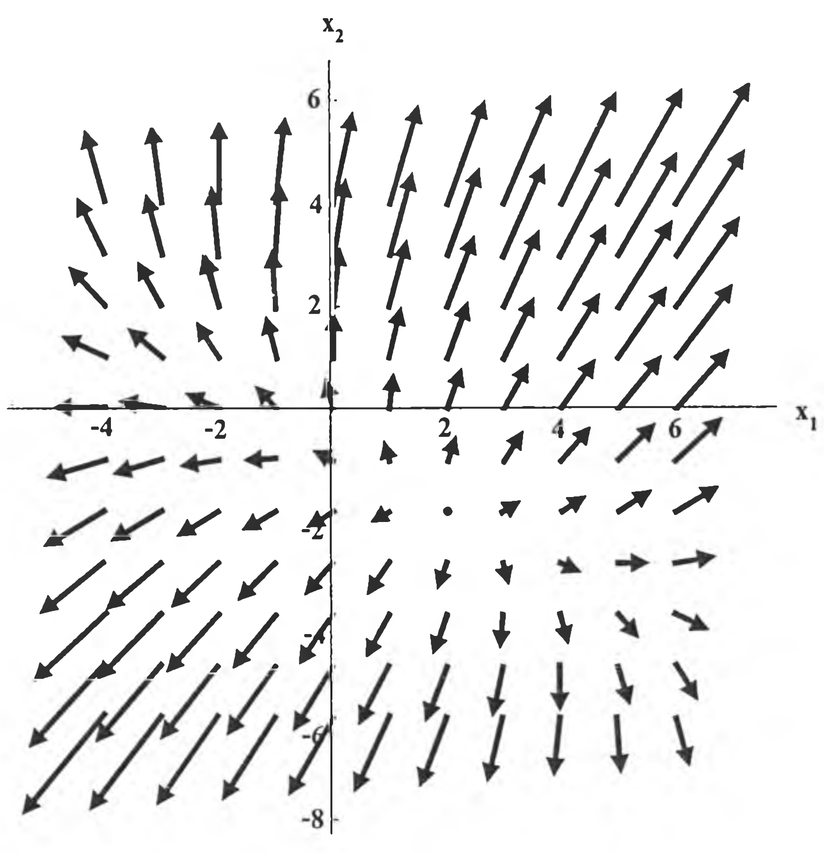
c) เมื่อเมตริกซ์ A เป็น singular และมีคุณสมบัติ positive indefinite

d) เมื่อเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติ indefinite

วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์เป็นวิธีการแก้ระบบสมการแบบการทำซ้ำ (iterative method) [12] ซึ่งแตกต่างจากการแก้ระบบสมการโดยการกำจัดแบบเกาส์ (Gauss elimination method) ซึ่งเป็นวิธีตรง วิธีการแก้ระบบสมการที่ใช้การทำซ้ำนี้จะเหมาะสำหรับระบบสมการที่มีเมตริกซ์เป็นแบบ sparse matrice ซึ่งเป็นข้อได้เปรียบข้อหนึ่งในการคำนวณ เพราะสามารถที่จะนำ sparse metrice มาเก็บเฉพาะค่าที่ไม่ใช่ศูนย์มาทำการคำนวณ ซึ่งทำให้ประหยัดหน่วยความจำและเวลาที่จำเป็นต้องใช้ในการคำนวณ เนื่องด้วยวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์เป็นวิธีหนึ่งของวิธีคอนจูเกตไดเร็คชั่น (Conjugate Direction Method) ซึ่งวิธีดังกล่าวได้พัฒนามาจากวิธีการลดลงมากที่สุด (Steepest Descent Method) ดังนั้นจะต้องมีความเข้าใจระเบียบวิธีทั้งสองดังกล่าวก่อนที่จะเข้าไปสู่วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์

4.1 วิธีการลดลงมากที่สุด (Steepest Descent Method) [10]

วิธีการลดลงมากที่สุดเป็นวิธีแก้ระบบสมการแบบการทำซ้ำ โดยเริ่มจากการกำหนดจุดเริ่มต้นใด ๆ $x_{(0)}$ และวิ่งลงไปสู่ก้นของพาราโบลอย (bottom of the paraboloid) โดยจะทำเป็นขั้น ๆ $x_{(1)}, x_{(2)}, \ldots$ จนกระทั่งเข้าใกล้คำตอบ x ในแต่ละขั้นจะเลือกทางที่จะทำให้วิ่งเข้าสู่คำตอบได้เร็วที่สุด ดังนั้นทิศทางที่ใช้ก็จะอยู่ในแนวของการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชั่นควอดดราติก $(f'(x))$ ที่มากที่สุดตามตำแหน่งต่าง ๆ แต่อยู่ในทิศทางตรงกันข้าม จากสมการที่ 4.4 จะได้ $-f'(x_{(i)}) = b - Ax_{(i)}$ โดยรูปที่ 4.3 แสดงให้เห็นถึงทิศทางของการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชั่น $f(x)$ ที่มากที่สุดตามตำแหน่งต่าง ๆ



รูปที่ 4.3 เวคเตอร์ที่บ่งถึงการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันควอดราติก ที่มากที่สุดตามตำแหน่งต่าง ๆ

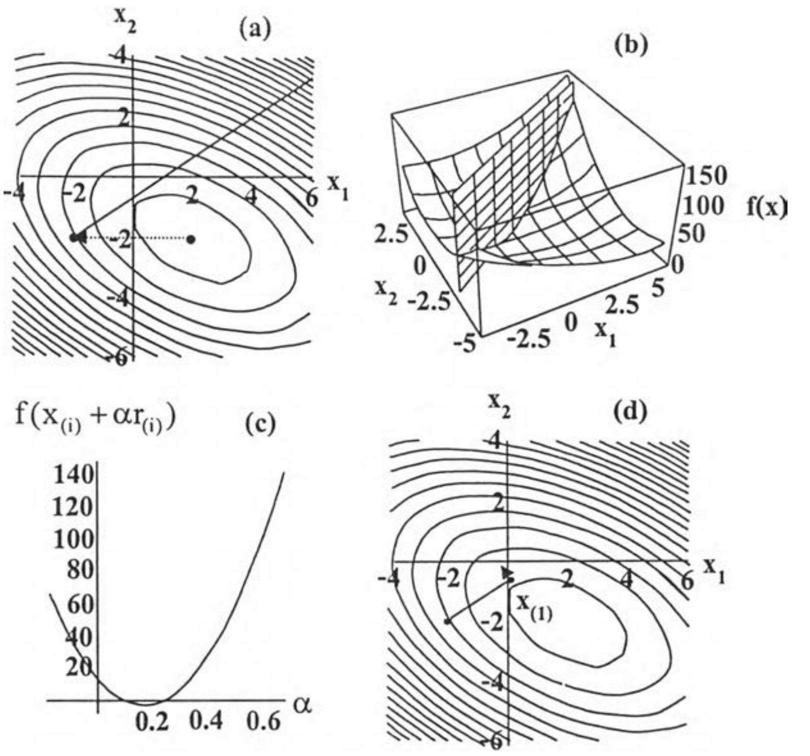
เนื่องด้วยค่าความผิดพลาด (error : $e_{(i)}$) โดย $e_{(i)} = x_{(i)} - x$ คือ ตัวบ่งชี้ว่าอยู่ไกลจากคำตอบแค่ไหนและค่าเศษตกค้าง (residual : $r_{(i)}$) โดย $r_{(i)} = b - Ax_{(i)}$ ก็คือค่าที่ใช้บอกว่าอยู่ไกลจากค่า b แค่ไหน ดังนั้นจึงเป็นการง่ายที่จะมองค่า $r_{(i)} = -Ae_{(i)}$ และที่สำคัญกว่านั้น คือ $r_{(i)} = -f'(x_{(i)})$ และควรคิดไว้เสมอว่าค่าเศษตกค้างจะอยู่ในทิศทางของการลดมากที่สุด (Steepest descent) ทีนี้ทำให้เราทราบว่าจะต้องเดินในทิศทางใดเพื่อให้ได้คำตอบที่ถูกต้องเร็วที่สุด แต่ในแต่ละขั้นนั้นจะวิ่งลงไปได้ไกลเท่าไร การที่จะหาว่าในแต่ละขั้นจะวิ่งลงไปได้ไกลแค่ไหน นั่นคือ จะต้องหาตำแหน่งที่ต่ำสุดในแนวทิศทางของการลดมากที่สุดของฟังก์ชั่น $f(x)$ ดังรูปที่ 4.4b โดยในแนวของการลดลงมากสุดของฟังก์ชั่นนี้จะสามารถเขียนให้อยู่ในรูปสมการเส้นตรง คือ

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha r_{(i)} \tag{4.5}$$

นั่นคือต้องหาค่า α ที่ทำให้ค่าฟังก์ชั่น $f(x)$ มีค่าต่ำสุดในแนวเส้นตรงในสมการ (4.5) จากพื้นฐานของแคลคูลัส ค่า α ที่ทำให้ค่า $f(x)$ มีค่าต่ำสุดในแนวเส้นตรงในสมการ (4.5) หาได้จากการหาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชั่น $f(x)$ เทียบกับค่า α แล้วให้เท่ากับศูนย์

$$\frac{d}{d\alpha} f(x_{(i+1)}) = f'(x_{(i+1)})^T \frac{d}{d\alpha} x_{(i+1)} = f'(x_{(i+1)})^T r_{(i)} = 0 \tag{4.6}$$

การหาค่า α ควรจะเลือกตำแหน่งที่ค่า $r_{(i)}$ และค่า $f'(x_{(i+1)})$ ตั้งฉากกัน ดังในรูปที่ 4.3d เหตุผลที่ $r_{(i)}$ จะต้องตั้งฉากกับ $f'(x_{(i+1)})$ ถึงจะได้ค่า $f(x)$ ต่ำสุดในแนวเส้นตรงนี้ สามารถแสดงให้เห็นได้ดังในรูปที่ 4.4 ซึ่งแสดงให้เห็นถึงค่าเวคเตอร์ของความชันที่ตำแหน่งต่าง ๆ บนเส้นตรงนี้ โดยจะเห็นว่าที่ตำแหน่งที่ $r_{(i)}$ ตั้งฉากกับ $f'(x_{(i+1)})$ จะไม่มีการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชั่น $f(x)$ นั่นคือตำแหน่งดังกล่าวเป็นตำแหน่งต่ำสุดของฟังก์ชั่น $f(x)$ บนเส้นตรงนี้



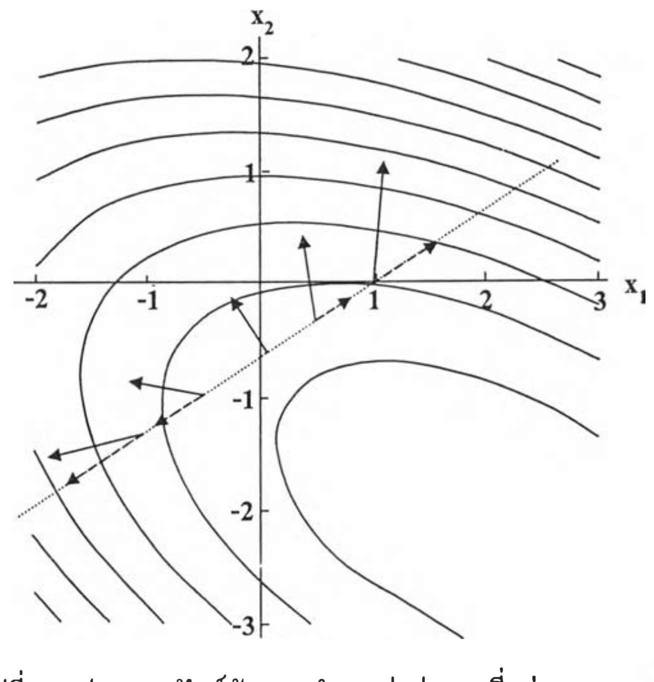
รูปที่ 4.4 ตัวอย่างวิธีการลดลงมากที่สุด

a) จากจุดเริ่มต้นวิ่งไปสู่จุดต่ำสุดในแนวการลดลงมากที่สุด

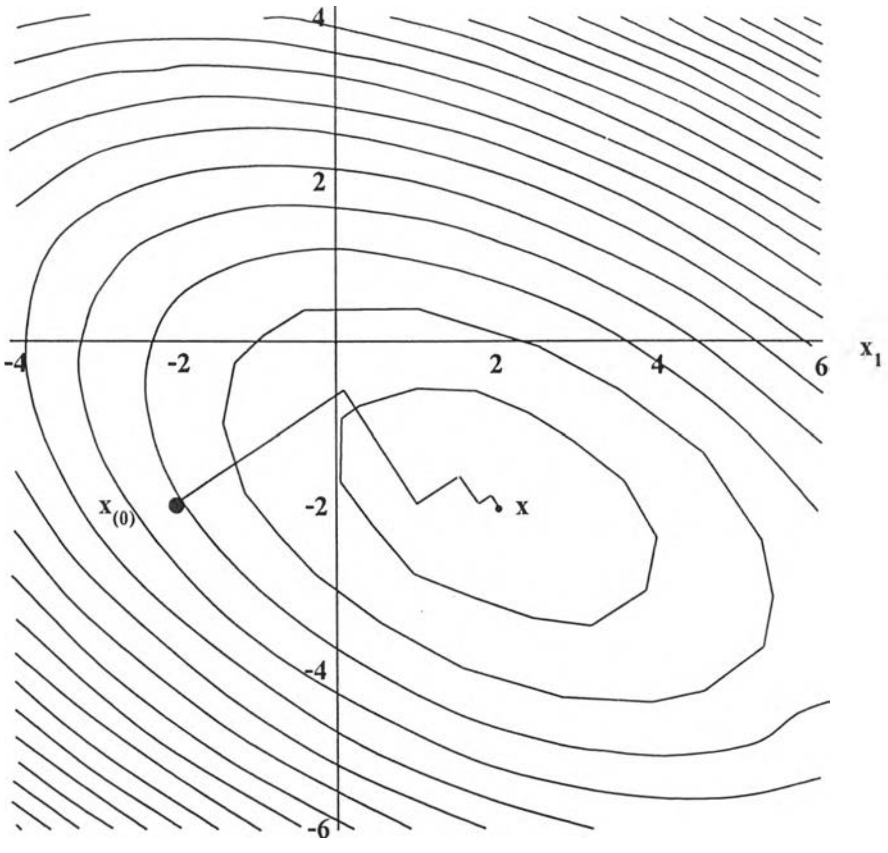
b) การหาจุดตัดระหว่างพื้นผิวสองผิว

c) พาราโบลาแสดงถึงแนวการตัดกันระหว่างพื้นผิวสองผิว

d) แสดงถึงเวคเตอร์การเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันควอดราติกครั้งที่ i+1 จะตั้งฉากกับครั้งที่ i



รูปที่ 4.5 การเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันตามตำแหน่งต่าง ๆ ที่อยู่บนแนวการวิ่งเข้าสู่คำตอบ



รูปที่ 4.6 ตัวอย่างการวิ่งเข้าสู่คำตอบของวิธีการลดลงมากที่สุด

นั่นคือ $$f'(x_{(i)})r_{(i)} = 0$$

แต่ $f'(x_{(i+1)}) = -r_{(i+1)}$ ดังนั้น

$$r_{(i+1)}^T r_{(i)} = 0$$

$$(b - Ax_{(i+1)})^T r_{(i)} = 0$$

$$(b - A(x_{(i)} + \alpha r_{(i)}))^T r_{(i)} = 0$$

$$(b - Ax_{(i)})^T r_{(i)} - \alpha(Ar_{(i)})^T r_{(i)} = 0$$

$$(b - Ax_{(i)})^T r_{(i)} = \alpha(Ar_{(i)})^T r_{(i)}$$

$$r_{(i)}^T r_{(i)} = \alpha r_{(i)}^T (Ar_{(i)})$$

$$\alpha = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{r_{(i)}^T A r_{(i)}} \tag{4.7}$$

กล่าวโดยสรุปของวิธีการลดลงมากที่สุด จะประกอบไปด้วย

$$r_{(i)} = b - Ax_{(i)} \tag{4.8a}$$

$$\alpha = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{r_{(i)}^T A r_{(i)}} \tag{4.8b}$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha r_{(i)} \tag{4.8c}$$

จากสมการ (4.8a-c) จะเห็นว่าจะต้องหาผลคูณระหว่างเมตริกซ์ A กับเวคเตอร์ $x_{(i)}$ และผลคูณระหว่างเมตริกซ์ A กับเวคเตอร์ $r_{(i)}$ ในแต่ละรอบของการคำนวณ ดังนั้นเวลาที่ใช้ส่วนใหญ่จะเสียให้กับการคูณเมตริกซ์กับเวคเตอร์ แต่วิธีการดังกล่าวจะสามารถทำให้ประหยัดเวลาในการคำนวณลงได้โดยจะไม่ใช้สมการ (4.8a) แต่จะหาสมการใหม่มาใช้เพื่อหาค่า $r_{(i)}$ ทำโดยนำสมการ (4.8c) มาคูณกับเมตริกซ์ – A และบวกด้วย b ทำให้ได้

$$b - Ax_{(i+1)} = b + (-Ax_{(i)} - \alpha_{(i)}Ar_{(i)})$$

$$r_{(i+1)} = b - Ax_{(i)} - \alpha_{(i)}Ar_{(i)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)}Ar_{(i)} \tag{4.9}$$

ดังนั้นวิธี การลดลงมากที่สุด จะต้องใช้สมการดังนี้

$$r_{(i+1)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)}Ar_{(i)} \tag{4.10a}$$

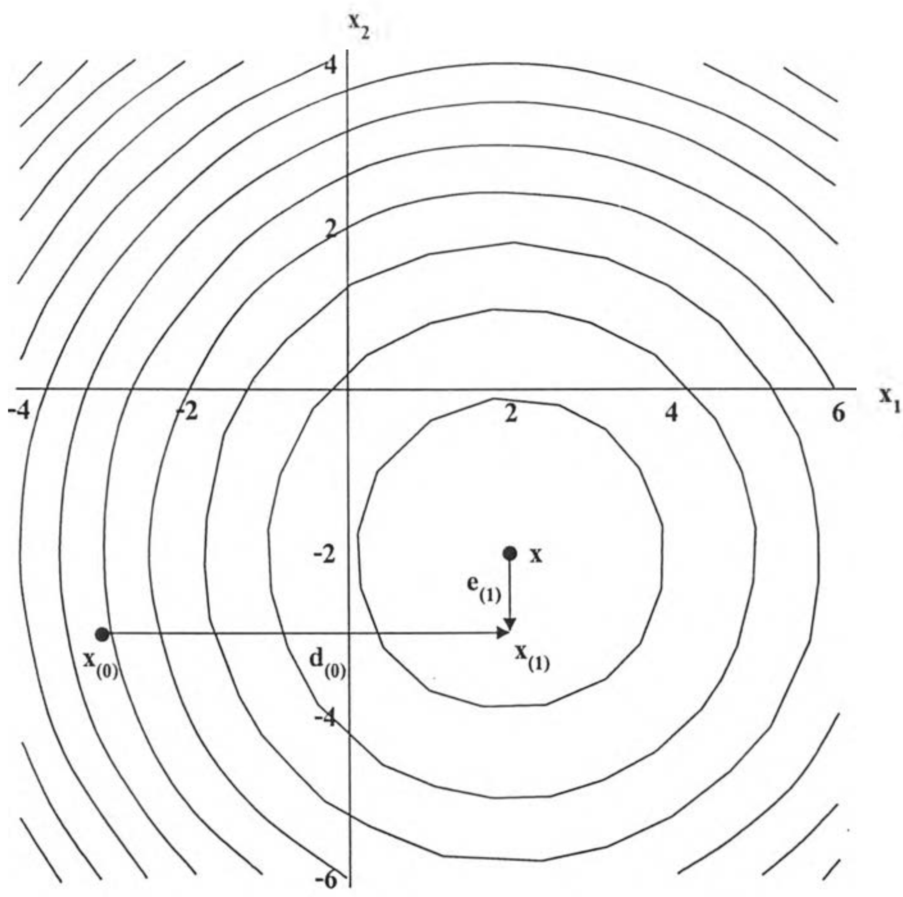
$$\alpha = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{r_{(i)}^T A r_{(i)}} \tag{4.10b}$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha r_{(i)} \tag{4.10c}$$

จะเห็นว่าสมการ (4.10a-c) ดังกล่าว การคูณระหว่างเมตริกซ์กับเวคเตอร์เหลือเพียงครั้งเดียวในแต่ละรอบการคำนวณ คือ เหลือเพียงการคูณระหว่างเมตริกซ์ A กับเวคเตอร์ $r_{(i)}$ เท่านั้นทำให้ประหยัดเวลาในการคำนวณมากขึ้น

4.2 วิธีคอนจูเกตไดเรคชั่น (Conjugate Direction Method) [10,12]

เนื่องจากวิธีการลดลงมากที่สุดนั้น ขั้นแต่ละขั้นของการวิ่งเข้าสู่คำตอบจะวิ่งเป็นขั้นบันได ซึ่งทิศทางการวิ่งจะอยู่ในแนวเดิมกับขั้นก่อน ๆ ดังรูปที่ 4.6 วิธีการวิ่งเข้าสู่คำตอบแบบนี้ถ้ามีการกำหนดจุดเริ่มต้นได้ไม่ดีจะทำให้การวิ่งเข้าสู่คำตอบไม่ดีเท่าที่ควร จากข้อเสียนี้จึงเกิดแนวคิดใหม่ คือ การสร้างชุดของเวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอกทิศทางการวิ่งเข้าสู่คำตอบ (set of search direction) $d_{(0)}, d_{(1)}, \ldots, d_{(n-1)}$ โดยเวคเตอร์หนึ่งตัวจะใช้สำหรับการวิ่งเข้าสู่คำตอบเพียงขั้นเดียวเท่านั้น และหลังจากการวิ่งเข้าสู่คำตอบ n ขั้นจะวิ่งเข้าสู่คำตอบที่ถูกต้อง



รูปที่ 4.7 แนวคิดเริ่มต้นของวิธีคอนจูเกตไดเร็คชัน

รูปที่ 4.7 ได้แสดงถึงแนวคิดดังกล่าว โดยใช้แกน x_1 และ x_2 เป็นทิศทางการวิ่งเข้าสู่คำตอบ ขั้นแรกเริ่มจากในแนวแกน x_1 โดยวิ่งไปที่ค่า x_1 ที่ถูกต้อง ขั้นต่อไปวิ่งไปในแนวแกน x_2 เข้าสู่คำตอบ จะสังเกตเห็นว่า ค่า $e_{(1)}$ จะตั้งฉากกับ $d_{(0)}$ ดังนั้นสำหรับแต่ละขั้น จะเลือกจุดจาก

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha d_{(i)} \tag{4.11}$$

และค่าความผิดพลาด

$$\begin{aligned} e_{(i+1)} &= x_{(i+1)} - x \\ &= x_{(i)} + \alpha_{(i)} d_{(i)} - x \\ &= (x_{(i)} - x) + \alpha_{(i)} d_{(i)} \\ &= e_{(i)} + \alpha_{(i)} d_{(i)} \end{aligned} \tag{4.12}$$

ในการหาค่า $\alpha_{(i)}$ จะใช้หลักความจริงที่ว่า $e_{(i+1)}$ ควรจะตั้งฉากกับ $d_{(i)}$ ดังนั้นจะได้

$$d_{(i)}^T e_{(i+1)} = 0$$

$$d_{(i)}^T (e_{(i)} + \alpha_{(i)} d_{(i)}) = 0$$

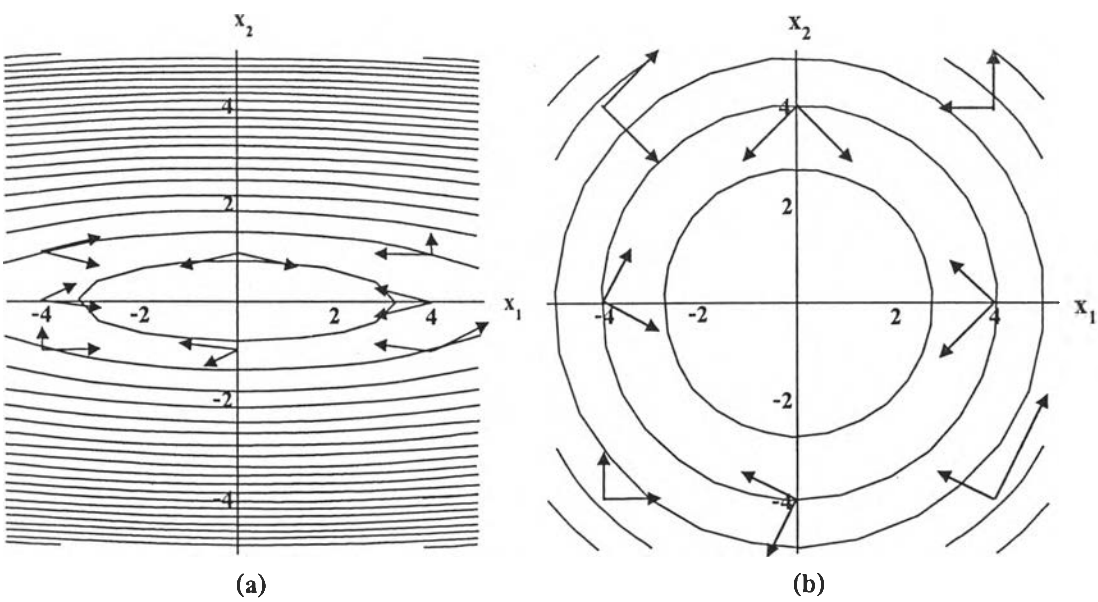
$$\alpha_{(i)} = -\frac{d_{(i)}^T e_{(i)}}{d_{(i)}^T d_{(i)}} \tag{4.13}$$

จากสมการ (4.13) จะเห็นว่าไม่สามารถที่จะคำนวณค่า $\alpha_{(i)}$ ได้เลย โดยปราศจากการรู้ค่า $e_{(i)}$ ถ้ารู้ค่า $e_{(i)}$ อยู่แล้ว แสดงว่ารู้คำตอบอยู่แล้ว

จากผลของสมการ (4.13) จะได้ว่าวิธีคอนจูเกตไดเร็คชั่นไม่เหมาะกับคุณสมบัติเชิงตั้งฉาก (orthogonal) เพราะแนวคิดใหม่นี้ไม่สามารถใช้ได้กับคุณสมบัติเชิงตั้งฉาก แต่จะใช้คุณสมบัติ A-orthogonal แทนโดยเวคเตอร์ $d_{(i)}$ และ $d_{(j)}$ จะมีคุณสมบัติ A-orthogonal ถ้า

$$d_{(i)}^T A d_{(j)} = 0 \qquad i \neq j \tag{4.14}$$

รูปที่ 4.8a แสดงลักษณะทางกายภาพของคุณสมบัติ A-orthogonal โดยมองว่าเวคเตอร์ดังกล่าวถูกเขียนอยู่บนพาราโบลอยด์ เมื่อทำการยืดปลายทั้งสองของพาราโบลอยด์ให้อยู่ในรูปวงกลมจะเห็นเวคเตอร์ $d_{(i)}$ และ $d_{(i+1)}$ ดังกล่าวจะตั้งฉากกันดังรูปที่ 4.8b



รูปที่ 4.8 คู่ของเวคเตอร์ที่มีคุณสมบัติ A- orthogonal

คุณสมบัติที่ต้องการของวิธีคอนจูเกตไดเร็คชั่น ก็คือ เวคเตอร์ $e_{(i+1)}$ จะต้องมีคุณสมบัติ A-orthogonal กับ $d_{(i)}$ ดังรูปที่ 4.9a สิ่งที่ต้องการต่อไป คือ จะต้องหาตำแหน่งต่ำสุดของฟังก์ชั่น $f(x)$ ตามแนวของการวิ่งเข้าสู่คำตอบ $d_{(i)}$ ซึ่งใช้หลักการเดียวกับที่ใช้ในวิธี steepest descent คือหาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชั่น $f(x)$ เทียบกับ α แล้วให้เท่ากับศูนย์

$$\frac{d}{d\alpha} f(x_{(i+1)}) = 0$$

$$f'(x_{(i+1)})^T \frac{d}{d\alpha} x_{(i+1)} = 0$$

$$-r^T_{(i+1)}d_{(i)} = 0$$

$$d_{(i)}Ae_{(i+1)} = 0$$

$$d^T_{(i)}A(e_{(i)} + \alpha d_{(i)}) = 0$$

$$\alpha = -\frac{d^T_{(i)}Ae_{(i)}}{d^T_{(i)}Ad_{(i)}} \tag{4.15}$$

$$\alpha = \frac{d^T_{(i)}r_{(i)}}{d^T_{(i)}Ad_{(i)}} \tag{4.16}$$

จากสมการ (4.16) จะเห็นว่าสามารถหาค่า α ได้โดยไม่ต้องรู้ค่า $e_{(i)}$ ซึ่งต่างจากสมการ (4.13)

ต่อไปจะแสดงให้เห็นว่าวิธีดังกล่าวสามารถนำไปสู่คำตอบที่ถูกต้องได้ใน n ขั้นของการคำนวณ โดยค่าความผิดพลาดสามารถเขียนอยู่ในรูปของผลบวกเชิงเส้น (linear combination)

$$e_{(0)} = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_{(j)}d_{(i)} \tag{4.17}$$

ซึ่งสอดคล้องกับรูปที่ 4.9 โดยค่าความผิดพลาดสามารถหาได้จากเทคนิคทางคณิตศาสตร์ดังนี้ คือ นำเอา $d^T_k A$ มาคูณกับสมการ (4.17) จะได้

$$d^T_{(k)}Ae_{(0)} = \sum_j \delta_{(j)}d^T_{(k)}Ad_{(j)}$$

$$d^T_{(k)}Ae_{(0)} = \delta_{(k)}d^T_{(k)}Ad_k$$

$$\delta_{(k)} = \frac{d^T_{(k)}Ae_{(0)}}{d^T_{(k)}Ad_{(k)}}$$

$$\delta_{(k)} = \frac{\left[d^T_{(k)}A(e_{(0)} + \sum_{i=0}^{k-1}\alpha_{(i)}d_{(i)})\right]}{d^T_{(k)}Ad_{(k)}}$$

$$\delta_{(k)} = \frac{d^T_{(k)}Ae_{(k)}}{d^T_{(k)}Ad_{(k)}} \tag{4.18}$$

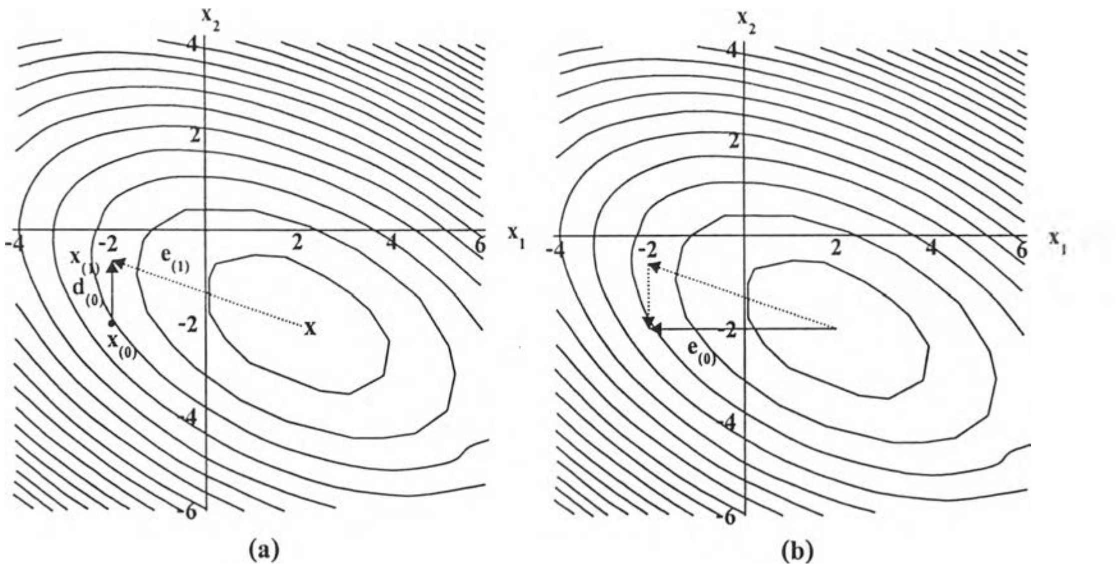
จากสมการ (4.15) และ (4.18) จะเห็นว่า $\alpha_{(i)} = -\delta_{(k)}$ จากสมการ (4.12) ค่าความผิดพลาดในขั้นที่ i ใด ๆ เราสามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$e_{(i)} = e_{(0)} + \sum_{j=0}^{i-1}\alpha_{(j)}d_{(j)}$$

$$= \sum_{j=0}^{n-1}\delta_{(j)}d_{(j)} - \sum_{j=0}^{i-1}\delta_{(j)}d_{(j)}$$

$$= \sum_{j=i}^{n-1}\delta_{(j)}d_{(j)} \tag{4.19}$$

จากสมการ (4.19) จะเห็นว่าหลังจากทำการคำนวณครบ n ขั้นแล้ว $e_{(n)} = 0$ ซึ่งแสดงให้เห็นว่าวิธีคอนจูเกตไดเร็คชั่นดังกล่าวสามารถให้คำตอบที่ถูกต้องได้โดยการคำนวณแบบทำซ้ำ n ขั้น



รูปที่ 4.9 วิธีคอนจูเกตไดเร็คชันที่ใช้จำนวนรอบการวิ่งเข้า n รอบ

ต่อไปจะมาดูว่าเวคเตอร์ $d_{(i)}$ ที่มีคุณสมบัติ A-orthogonal ดังที่ได้กล่าวไปแล้วนั้น สามารถหามาได้อย่างไร เวคเตอร์ $d_{(i)}$ สามารถหามาได้โดยการใช้ขบวนการที่เรียกว่า Gram-Schmidt process ขบวนการดังกล่าวทำโดยการสมมติว่ามีเวคเตอร์อยู่ชุดหนึ่ง คือ $u_0, u_{1,...,} u_{n-1}$ ซึ่งเป็นอิสระเชิงเส้นต่อกัน การสร้างเวคเตอร์ $d_{(i)}$ ทำโดยนำเอาเวคเตอร์ $u_{(i)}$ มาลบส่วนที่ไม่มีคุณสมบัติ A - orthogonal กับเวคเตอร์ d ตัวก่อนหน้า ดังแสดงในรูปที่ 4.10 อีกนัยหนึ่งก็คือ ถ้าเขียนเป็นรูปสมการทำโดยการกำหนดให้ $d_{(0)} = u_{(0)}$ และสำหรับ $i > 0$ กำหนดให้

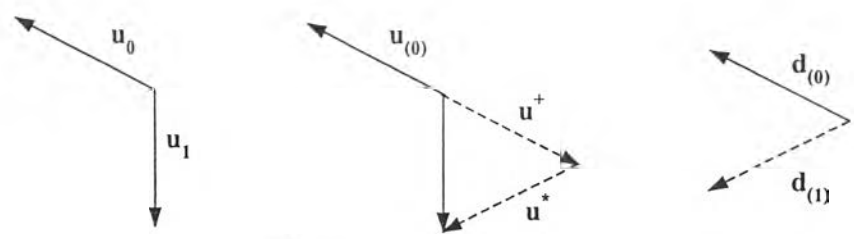
$$d_{(i)} = u_{(i)} + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_{(k)} \tag{4.20}$$

โดย ค่า $\beta_{ik}, i > k$ หาได้จากการใช้เทคนิคทางคณิตศาสตร์เหมือนที่ใช้ในการหาค่า δ_j ซึ่งทำได้ดังนี้

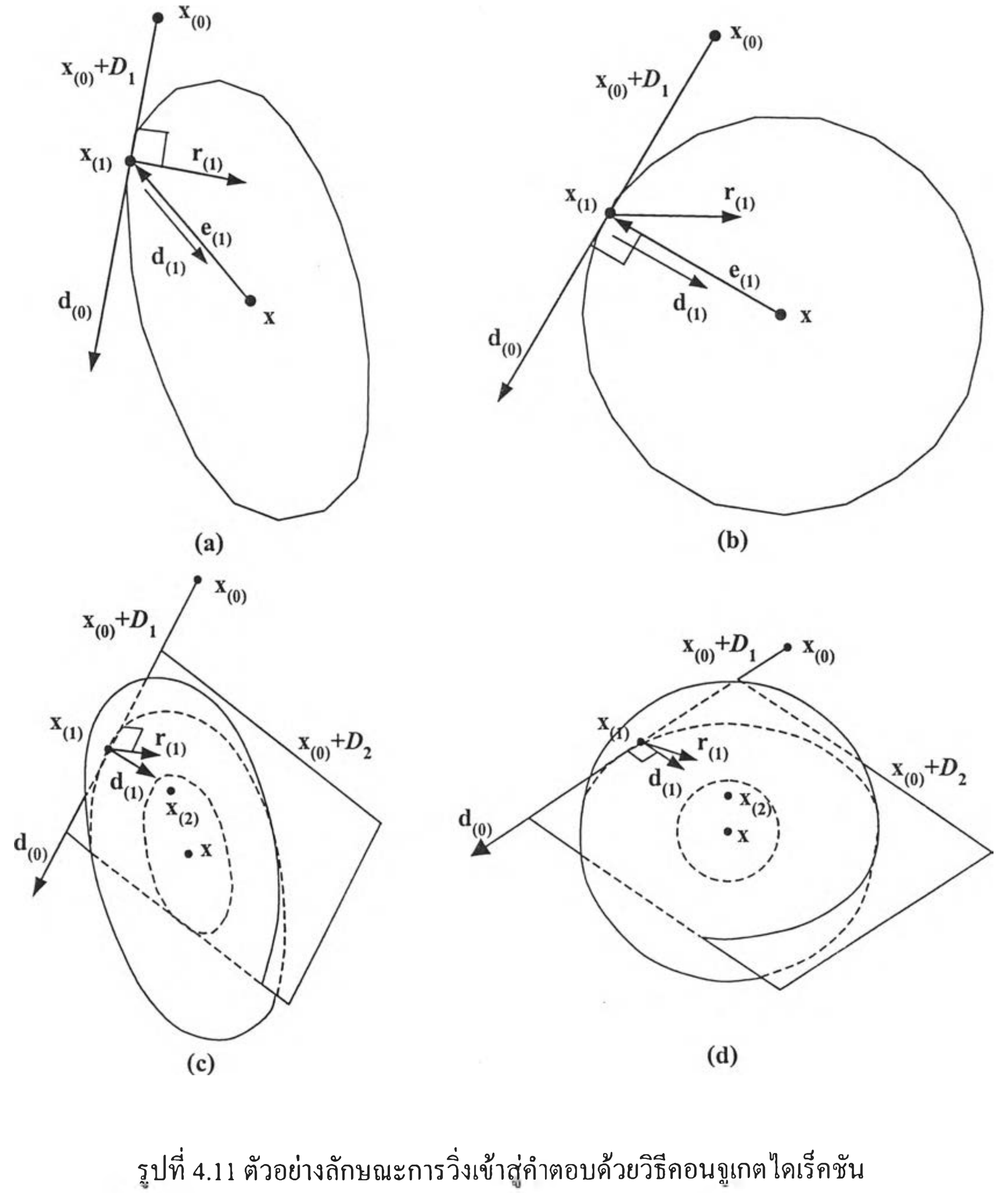
$$d_{(i)}^T A d_{(j)} = u_i^T A d_{(j)} + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_{(k)}^T A d_{(j)}$$

$$0 = u_i^T A d_{(j)} + \beta_{ij} d_{(j)}^T A d_{(j)} \qquad i > j \tag{4.21}$$

$$\beta_{ij} = -\frac{u_i^T A d_{(j)}}{d_{(j)}^T A d_{(j)}} \tag{4.22}$$



รูปที่ 4.10 Gram-Schmidt process



รูปที่ 4.11 ตัวอย่างลักษณะการวิ่งเข้าสู่คำตอบด้วยวิธีคอนจูเกตไดเร็คชัน

ค่าเศษตกค้างในวิธีคอนจูเกตไดเร็คชันจะกลายมาเป็น

$$
\begin{aligned}
r_{(i+1)} &= -Ae_{(i+1)} \\
&= -A(e_{(i)} + \alpha_{(i)}d_{(i)}) \\
&= r_{(i)} - \alpha_{(i)}Ad_{(i)} \qquad (4.23)
\end{aligned}
$$

คุณสมบัติสำคัญอีกอย่างที่สามารถเห็นได้ คือ จะเห็นว่าในแต่ละขั้นของการวิ่งเข้าสู่คำตอบระนาบ $x_{(0)} + D_i$ จะสัมผัสกับวงรีที่ $x_{(i)}$ อยู่ และจากหัวข้อ 4.1 ทราบว่าค่าเศษตกค้าง ($r_{(i)}$) ที่ตำแหน่งใด ๆ จะตั้งฉากกับผิววงรีที่ตำแหน่งนั้น ทำให้ $r_{(i)}$ ตั้งฉากกับ D_i ด้วย ซึ่งสามารถพิสูจน์ได้จากสมการ (4.19) ดังนี้ คือ คูณสมการ (4.19) ด้วย $-d_{(i)}^T A$

$$
\begin{aligned}
-d_{(i)}^T Ae_{(j)} &= \sum_{j=i}^{n-1} \delta_{(j)} d_{(i)}^T Ad_{(j)} \\
d_{(i)}^T r_{(j)} &= 0 \qquad (i < j) \qquad (4.24)
\end{aligned}
$$

จากคุณสมบัติในสมการ (4.24) และเพราะว่าเวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอกทิศทางการวิ่งเข้าสู่คำตอบ $d_{(i)}$ ถูกสร้างขึ้นมาจากชุดของเวคเตอร์ u และค่าเศษตกค้าง $r_{(i)}$ ตั้งฉากกับ D_i จากสมการ (4.20) จะได้

$$
\begin{aligned}
d_{(i)}^T r_{(j)} &= u_i^T r_{(j)} + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_{(k)}^T r_{(j)} \\
0 &= u_{(i)}^T r_{(j)} \qquad (i < j) \qquad (4.25)
\end{aligned}
$$

จากสมการ (4.24) และ (4.25) ทำให้ได้

$$
d_{(i)}^T r_{(j)} = u_{(i)}^T r_{(j)} \qquad (4.26)
$$

สมการ (4.22-4.26) จะนำไปใช้ในวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ต่อไป

4.3 วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ (Conjugate Gradient Method) [10,12]

วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์เป็นวิธีหนึ่งของวิธีคอนจูเกตไดเร็คชั่น โดยวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์นี้ จะกำหนดให้ $u_i = r_{(i)}$

เนื่องจากการเลือกใช้ $u_i = r_{(i)}$ นั่นหมายถึงเวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอกทิศทางการวิ่งเข้าสู่คำตอบ $d_{(i)}$ ในวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ถูกสร้างจากเวคเตอร์เศษตกค้าง $r_{(i)}$ และ เวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอกทิศทางอันก่อนหน้า จากรูปที่ 4.11 จะเห็นว่าเวคเตอร์เศษตกค้างจะตั้งฉากกับเวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอก

ทิศทางและอยู่ในทิศทางของการลดลงของฟังก์ชั่น $f(x)$ ดังนั้นจะทำให้เวคเตอร์เศษตกค้างแต่ละตัวจะตั้งฉากกับเวคเตอร์เศษตกค้างตัวก่อนหน้าทุก ๆ ตัวด้วย ทำให้ได้

$$r_{(i)}^T r_{(j)} = 0 \qquad i \neq j \tag{4.27}$$

จากสมการ (4.22) เมื่อนำมาใช้ในวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์จะได้เป็น

$$\beta_{ij} = -\frac{r_i^T A d_{(j)}}{d_{(j)}^T A d_{(j)}} \tag{4.28}$$

จากสมการ (4.23) จะได้

$$r_{(j+1)} = r_{(j)} - \alpha_{(j)} A d_{(j)} \tag{4.29}$$

เอา $r_{(i)}^T$ มาคูณสมการ (4.29) จะได้

$$\begin{aligned} r_{(i)}^T r_{(j+1)} &= r_{(i)}^T r_{(j)} - \alpha_{(j)} r_{(i)}^T A d_{(j)} \\ \alpha_{(j)} r_{(i)}^T A d_{(j)} &= r_{(i)}^T r_{(j)} - r_{(i)}^T r_{(j+1)} \\ r_{(i)}^T A d_{(j)} &= \frac{1}{\alpha_{(j)}} (r_{(i)}^T r_{(j)} - r_{(i)}^T r_{(j+1)}) \end{aligned}$$

จะได้

$$r_{(i)}^T A d_{(j)} = \begin{cases} \dfrac{1}{\alpha_{(j)}} r_{(i)}^T r_{(j)} & i = j \\ -\dfrac{1}{\alpha_{(j)}} r_{(i)}^T r_{(j+1)} & i = j+1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{4.30}$$

ดังนั้น

$$\beta_{ij} = \begin{cases} \dfrac{1}{\alpha_{(i-1)}} \dfrac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{d_{(i-1)}^T A d_{(i-1)}} & i = j+1 \\ 0 & i > j+1 \end{cases} \tag{4.31}$$

จากสมการ (4.31) ค่า β_{ij} จะเหลืออยู่กรณีเดียว คือ กรณี $i = j+1$ ดังนั้นเพื่อเป็นการง่าย ค่า $\beta_{i,i-1}$ จะเขียนใหม่ในรูป $\beta_{(i)}$ ดังนี้

$$\beta_{(i)} = \frac{1}{\alpha_{(i-1)}} \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{d_{(i-1)}^T A d_{(i-1)}} \tag{4.32}$$

จากสมการ (4.16) ทำให้ได้

$$\beta_{(i)} = \frac{d_{(i-1)}^T A d_{(i-1)}}{d_{(i-1)}^T r_{(i-1)}} \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{d_{(i-1)}^T A d_{(i-1)}}$$

$$\beta_{(i)} = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{d_{(i-1)}^T r_{(i-1)}} \tag{4.33}$$

และจากสมการ (4.26) ทำให้ได้

$$\beta_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T} r_{(i)}}{r_{(i-1)}^{T} r_{(i-1)}} \tag{4.34}$$

จากสมการ (4.16) และ (4.26) จะทำให้หาค่า $\alpha_{(i)}$ ได้ดังนี้

$$\alpha_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T} r_{(i)}}{d_{(i)}^{T} A d_{(i)}} \tag{4.35}$$

กล่าวโดยสรุปวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ จะมีสมการที่นำไปใช้งานดังนี้

$$d_{(0)} = r_{(0)} = b - Ax_{(0)} \tag{4.36a}$$

$$\alpha_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T} r_{(i)}}{d_{(i)}^{T} A d_{(i)}} \tag{4.36b}$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha_{(i)} d_{(i)} \tag{4.36c}$$

$$r_{(i+1)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)} A d_{(i)} \tag{4.36d}$$

$$\beta_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T} r_{(i)}}{r_{(i-1)}^{T} r_{(i-1)}} \tag{4.36e}$$

$$d_{(i+1)} = r_{(i+1)} + \beta_{(i+1)} d_{(i)} \tag{4.36f}$$

4.4 การปรับสภาพเพื่อเร่งเข้าสู่คำตอบ [10,13,14]

การปรับสภาพเพื่อเร่งเข้าสู่คำตอบ หรือที่เรียกกันโดยทั่วไปว่า Preconditioning เป็นเทคนิคสำหรับปรับปรุงการลู่เข้าสู่คำตอบของการแก้ระบบสมการที่ใช้วิธีการทำซ้ำ เทคนิคดังกล่าวทำโดยการแก้ระบบสมการเชิงเส้น $Ax = b$ ทางอ้อม โดยจะทำการแก้ระบบสมการ

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \tag{4.37}$$

โดย M เป็นเมตริกซ์ที่มีความสมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite ซึ่งระบบสมการ (4.37) จะสามารถแก้หาคำตอบได้โดยใช้จำนวนรอบของการคำนวณที่น้อยกว่าระบบสมการเชิงเส้นเดิม

เนื่องจากว่า $M^{-1}A$ โดยทั่วไปจะมีความไม่สมมาตร ถึงแม้ว่าเมตริกซ์ M และ A จะมีความสมมาตรก็ตาม ดังนั้นจะต้องหาระบบสมการเชิงเส้นในรูปแบบใหม่ที่ใช้แทนระบบสมการเชิงเส้นในสมการ (4.37) ระบบสมการเชิงเส้นในรูปแบบใหม่นี้สามารถหาได้โดยใช้หลักที่ว่า ทุก ๆ เมตริกซ์ M ที่มีความสมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite จะสามารถเขียนให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์ E ได้ โดย $EE^{T} = M$ โดยจะต้องหาชุดของเมตริกซ์ที่มีความสมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite ที่จะใช้แทน $M^{-1}A$ ที่ไม่มีความสมมาตรและไม่มีคุณสมบัติ positive definite เพื่อที่จะนำเอาวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์มาใช้แก้ระบบสมการดังกล่าวได้ เมตริกซ์ $E^{-1}AE^{-T}$ จะมีคุณ

สมบัติดังกล่าวซึ่งสามารถใช้แทนเมตริกซ์ $M^{-1}A$ ได้ โดย $M^{-1}A$ และ $E^{-1}AE^{-T}$ จะมีค่าเจาะจง (eigen value) ค่าเดียวกัน และเมื่อ v เป็นเวคเตอร์เจาะจง (eigen vector) ของ $M^{-1}A$ แล้ว $E^{T}v$ จะเป็นเวคเตอร์เจาะจงของ $E^{-1}AE^{-T}$ ซึ่งหลักความจริงดังกล่าวสามารถแสดงให้เห็นได้ดังนี้

$$M^{-1}A = \lambda$$
$$E^{-T}E^{-1}A = \lambda$$
$$E^{-1}A = E^{T}\lambda$$
$$E^{-1}AE^{-T} = E^{T}E^{-T}\lambda = \lambda \tag{4.38}$$

สมการ (4.38) แสดงให้เห็นว่า $M^{-1}A$ และ $E^{-1}AE^{-T}$ จะมีค่าเจาะจงค่าเดียวกัน

$$M^{-1}Ax = \lambda v$$
$$E^{-T}E^{-1}Ax = \lambda v$$

เมื่อกำหนดให้ $x = E^{-T}\hat{x}$ จะได้

$$E^{-1}AE^{-T}\hat{x} = \lambda E^{T}v \tag{4.39}$$

สมการ (4.39) แสดงให้เห็นว่า $E^{T}v$ จะเป็นเวคเตอร์เจาะจงของเมตริกซ์ $E^{-1}AE^{-T}$ เมื่อ v เป็นเวคเตอร์เจาะจงของ $M^{-1}A$

จากสมการ (4.39) ทำให้สามารถเปลี่ยนรูปสมการ (4.37) ได้เป็น

$$E^{-1}AE^{-T}\hat{x} = E^{-1}b \tag{4.40}$$

โดยที่ $\hat{x} = E^{T}x$ และในการหาค่าจะต้องหาค่า $\hat{x}$ เพื่อนำไปหาค่า x ต่อไป เนื่องจาก $E^{-1}AE^{-T}$ มีความสมมาตร และมีคุณสมบัติ positive definite ดังนั้นระบบสมการ (4.40) ดังกล่าวสามารถนำเอาวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์มาประยุกต์ใช้ได้ โดยจะทำให้ขบวนการของวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ดังในสมการ (4.36a-f) เปลี่ยนรูปเป็น

$$\hat{d}_{(0)} = \hat{r}_{(0)} = E^{-1}b - E^{-1}AE^{-T}\hat{x}_{(0)} \tag{4.41a}$$
$$\alpha_{(i)} = \frac{\hat{r}_{(i)}^{T}\hat{r}_{(i)}}{\hat{d}_{(i)}^{T}E^{-1}AE^{-T}\hat{d}_{(i)}} \tag{4.41b}$$
$$\hat{x}_{(i+1)} = \hat{x}_{(i)} + \alpha_{(i)}\hat{d}_{(i)} \tag{4.41c}$$
$$\hat{r}_{(i+1)} = \hat{r}_{(i)} - \alpha_{(i)}E^{-1}AE^{-T}\hat{d}_{(i)} \tag{4.41d}$$
$$\beta_{(i+1)} = \frac{\hat{r}_{(i+1)}^{T}\hat{r}_{(i+1)}}{\hat{r}_{(i)}^{T}\hat{r}_{(i)}} \tag{4.41e}$$
$$\hat{d}_{(i+1)} = \hat{r}_{(i+1)} - \beta_{(i+1)}\hat{d}_{(i)} \tag{4.41f}$$

จากสมการ (4.41a-f) จะเห็นว่าจะต้องหาค่าเมตริกซ์ E แต่อย่างไรก็ตามสามารถที่จะกำจัดเมตริกซ์ E ดังกล่าวได้ โดยการกำหนดให้ $\hat{r}_{(i)} = E^{-1}r_{(i)}$ และ $\hat{d}_{(i)} = E^{T}d_{(i)}$ และใช้ $\hat{x}_{(i)} = E^{T}x_{(i)}$ และ $EE^{T} = M$ ซึ่งจะทำให้สมการ (4.41a-f) เปลี่ยนรูปมาเป็น

$$r_{(0)} = b - Ax_{(0)} \tag{4.42a}$$

$$d_{(0)} = M^{-1}r_{(0)} \tag{4.42b}$$

$$\alpha_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T}M^{-1}r_{(i)}}{d_{(i)}^{T}Ad_{(i)}} \tag{4.42c}$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha_{(i)}d_{(i)} \tag{4.42d}$$

$$r_{(i+1)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)}Ad_{(i)} \tag{4.42e}$$

$$\beta_{(i+1)} = \frac{r_{(i+1)}^{T}M^{-1}r_{(i+1)}}{r_{(i)}^{T}M^{-1}r_{(i)}} \tag{4.42f}$$

$$d_{(i+1)} = M^{-1}r_{(i+1)} + \beta_{(i+1)}d_{(i)} \tag{4.42g}$$

วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ดังในสมการ (4.42a-g) จะมีชื่อเรียกกันทั่วไปว่า precondition conjugate gradient

4.5 วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์สำหรับสมการที่มีเมตริกซ์ A ไม่สมมาตร [10,13]

วิธีแก้ระบบสมการแบบคอนจูเกตเกรเดียนท์นั้นใช้สำหรับระบบสมการเชิงเส้นดังสมการ (4.1) ที่มีเมตริกซ์ A เป็นเมตริกซ์ที่สมมาตร แต่ในกรณีที่ระบบสมการเชิงเส้นนั้นมีเมตริกซ์ A ที่ไม่สมมาตรจะไม่สามารถใช้วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ได้โดยตรง จะต้องทำระบบสมการนั้นให้มีเมตริกซ์ที่มีความสมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite วิธีการทำให้เมตริกซ์ของระบบสมการมีคุณสมบัติดังกล่าว วิธีง่าย ๆ ก็คือ การนำเอาเมตริกซ์ A^T (transpose of A) มาคูณเข้ากับระบบสมการทั้งสองด้าน สมการ (4.1) จะกลายมาเป็น

$$A^TA \;\; x = A^Tb \tag{4.43}$$

เมตริกซ์ A^TA จะมีความสมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite ระบบสมการสมการ (4.43) นี้สามารถนำเอาวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์มาแก้ระบบสมการได้

ในปัญหาการไหลแบบหนืดแต่ไม่อัดตัว ระบบสมการขนาดใหญ่ที่ออกมามีเมตริกซ์ที่ไม่สมมาตร ดังนั้นจะต้องนำเอาเมตริกซ์ A^T มาคูณเข้ากับระบบสมการก่อน แล้วจึงใช้วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์มาแก้ระบบสมการดังกล่าว

4.6 ตัวอย่างการแก้ระบบสมการด้วยวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์

จากที่ได้กล่าวไปแล้วในตอนต้นว่าวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ เป็นการแก้ระบบสมการเชิงเส้นโดยวิธีการทำซ้ำ การคำนวณจะเสร็จสิ้นลงก็ต่อเมื่อ วิธีการดังกล่าววิ่งเข้าใกล้คำตอบที่ถูกต้อง

โดยค่าความผิดพลาดมีค่าไม่เกินค่าที่กำหนด ในหัวข้อนี้จะแสดงตัวอย่างการแก้ระบบสมการด้วยวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ โดยตัวอย่างดังกล่าวจะแสดงไว้ในระบบสมการที่ทั้งหมดสามสมการ

ระบบสมการประกอบไปด้วย

$$x_1 + \quad + 2x_3 = 1 \tag{4.44a}$$

$$x_1 + \quad + x_3 = 0 \tag{4.44b}$$

$$x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \tag{4.44c}$$

กำหนดให้ค่าความผิดพลาดที่ยอมให้ได้เท่ากับ 0.000001

สมการ (4. a-c) เขียนเป็นระบบสมการในรูปเมตริกซ์ Ax = b ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix} \tag{4.45}$$

จะเห็นว่าระบบสมการดังกล่าว มีเมตริกซ์ A ซึ่งไม่สมมาตร ดังนั้นจะต้องทำระบบสมการดังกล่าวให้มีเมตริกซ์ที่มีความสมมาตร ดังนั้นจะต้องนำเอาเมตริกซ์ A^T มาคูณกับระบบสมการ (4.45)

$$A^T A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 2 & 4 & 6 \\ 6 & 6 & 14 \end{bmatrix} \qquad A^T b = \begin{Bmatrix} 2 \\ 2 \\ 5 \end{Bmatrix} \qquad M = \begin{Bmatrix} 3 \\ 4 \\ 14 \end{Bmatrix}$$

$r^{(0)} = b - A\,x^{(0)}$ โดยกำหนดให้ $x^{(0)} = 0$ ทุกตัว

$$r^{(0)} = \begin{Bmatrix} r_1^{(0)} \\ r_2^{(0)} \\ r_3^{(0)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2 \\ 2 \\ 5 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2 \\ 2 \\ 5 \end{Bmatrix}$$

การทำซ้ำครั้งที่ 1 :

$$z^{(0)} = M^{-1} r^{(0)} = \begin{Bmatrix} 2/3 \\ 2/4 \\ 5/14 \end{Bmatrix}$$

$$\rho_{(0)} = r^{(0)^T} z^{(0)}$$

$$= (2)(\frac{2}{3}) + (2)(\frac{2}{4}) + (5)(\frac{5}{14})$$

$$= 4.119047619$$

$$d^{(1)} = z^{(0)} = \begin{Bmatrix} 2/3 \\ 2/4 \\ 5/14 \end{Bmatrix}$$

$$q^{(0)} = A^T A d^{(0)} = \begin{Bmatrix} 5.14286 \\ 5.47619 \\ 12 \end{Bmatrix}$$

$$\alpha_0 = \frac{\rho_0}{d^{(0)T} q^{(0)}}$$

โดย $d^{(0)T} q^{(0)} = (\frac{2}{3})(5.14286) + (0.5)(5.47619) + (\frac{5}{14})(12) = 10.45238262$

ดังนั้น $\alpha_0 = \dfrac{4.11904719}{10.45238262} = 0.3940773859$

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_1 d^{(0)}$$

$$= \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} + (0.3940773859) \begin{Bmatrix} 2/3 \\ 1/2 \\ 5/14 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.2627182573 \\ 0.197038693 \\ 0.1407419235 \end{Bmatrix}$$

$$r^{(1)} = r^{(0)} - \alpha_0 q^{(0)}$$

$$= \begin{Bmatrix} 2 \\ 2 \\ 5 \end{Bmatrix} - (0.3940773859) \begin{Bmatrix} 5.14286 \\ 5.47619 \\ 12 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -0.026684825 \\ -0.15804264 \\ 0.271071369 \end{Bmatrix}$$

ตรวจสอบผลการลู่เข้าสู่คำตอบ

ค่าความผิดพลาด (err) $= \dfrac{|r|}{|b|}$

$$|b|$$

$$= \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2} = \sqrt{(2)^2 + (2)^2 + (5)^2} = \sqrt{33} = 5.744562647$$

$$\left|r^{(0)}\right| = \sqrt{r_1^{(0)^2} + r_2^{(0)^2} + r_3^{(0)^2}} = 0.3149114844$$

$$err^{(1)} = 0.054819$$

การทำซ้ำครั้งที่ 2 :

$$z^{(1)} = M^{-1} r^{(1)} = \begin{Bmatrix} -0.026684825/3 \\ -0.15804264/4 \\ 0.271071369/14 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -0.008894941667 \\ -0.03951066 \\ 0.01936224064 \end{Bmatrix}$$

$$\rho_{(1)} = r^{(1)^T} z^{(1)} = 1.173027805 \times 10^{-2}$$

$$\beta_1 = \frac{\rho_{(1)}}{\rho_{(0)}} = 2.847813168 \times 10^{-3}$$

$$d^{(1)} = z^{(1)} + \beta_1 d^{(0)} = \begin{Bmatrix} -0.0069964 \\ -0.0380868 \\ 0.0203793 \end{Bmatrix}$$

$$q^{(1)} = A^T A d^{(1)} = \begin{Bmatrix} 0.025113 \\ -0.0440642 \\ 0.014811 \end{Bmatrix}$$

$$\alpha_1 = \frac{\rho_1}{p^{(1)^T} q^{(1)}}$$

โดย $p^{(1)^T} q^{(1)} = 1.804401592 \times 10^{-3}$

ดังนั้น $\alpha_1 = \dfrac{1.173027805 \times 10^{-2}}{1.804401592 \times 10^{-3}} = 6.500924241$

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \alpha_1 d^{(1)}$$

$$= \begin{Bmatrix} 0.2627182573 \\ 0.197038693 \\ 0.1407419235 \end{Bmatrix} + (6.500924241)\begin{Bmatrix} -0.0069964 \\ -0.0380868 \\ 0.0203793 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.217235 \\ -0.0505607 \\ 0.273226 \end{Bmatrix}$$

$$r^{(2)} = r^{(1)} - \alpha_1 q^{(1)}$$

$$= \begin{Bmatrix} -0.026684825 \\ -0.15804264 \\ 0.271071369 \end{Bmatrix} - (6.500924241)\begin{Bmatrix} 0.025113 \\ -0.0440642 \\ 0.014811 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.025113 \\ -0.0440642 \\ 0.014811 \end{Bmatrix}$$

ตรวจสอบผลการลู่เข้าสู่คำตอบ

$$err^{(2)} = \frac{\sqrt{(-0.189943)^2 + (0.128415)^2 + (0.174786)^2}}{\sqrt{33}} = 0.05018719541$$

การทำซ้ำครั้งที่ 3 :

$$z^{(2)} = M^{-1} r^{(2)} = \begin{Bmatrix} -6.331433333 \times 10^{-2} \\ 0.03210375 \\ 1.248471429 \times 10^{-2} \end{Bmatrix}$$

$$\rho_{(2)} = r^{(2)^T} z^{(2)} = 1.833087074 \times 10^{-2}$$

$$\beta_2 = \frac{\rho_{(2)}}{\rho_{(1)}} = 1.56269736$$

$$d^{(2)} = z^{(2)} + \beta_2 d^{(1)} = \begin{Bmatrix} -0.0742476 \\ -0.0274144 \\ 0.0443314 \end{Bmatrix}$$

$$q^{(2)} = A^T A d^{(2)} = \begin{Bmatrix} -0.0742476 \\ -0.0274144 \\ 0.0443314 \end{Bmatrix}$$

$$\alpha_2 = \frac{\rho_2}{d^{(2)^T} q^{(2)}}$$

โดย $d^{(2)^T} q^{(2)} = 1.11812617 \times 10^{-3}$

ดังนั้น $\alpha_2 = 16.39427753$

$$x^{(3)} = x^{(2)} + \alpha_2 d^{(2)}$$

$$= \begin{Bmatrix} 0.217235 \\ -0.0505607 \\ 0.273226 \end{Bmatrix} + (16.39427753)\begin{Bmatrix} -0.0742476 \\ -0.0274144 \\ 0.0443314 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -1 \\ -0.5 \\ 1.00001 \end{Bmatrix}$$

$$r^{(3)} = r^{(2)} - \alpha_2 q^{(2)}$$

$$= \begin{Bmatrix} -0.189943 \\ 0.128415 \\ 0.174786 \end{Bmatrix} - (16.39427753)\begin{Bmatrix} -0.0115832 \\ 0.0078356 \\ 0.0106676 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -0.0000448045 \\ -0.000044001 \\ -0.000101595 \end{Bmatrix}$$

ตรวจสอบผลการลู่เข้าสู่คำตอบ

$$err^{(3)} = \frac{\sqrt{(-0.0000448045)^2 + (-0.000044001)^2 + (-0.000101595)^2}}{\sqrt{33}} = 2.079122428 \text{ x } 10^{-5}$$

การทำซ้ำครั้งที่ 4 :

$$z^{(3)} = M^{-1} r^{(3)} = \begin{Bmatrix} -1.493483333 \text{ x } 10^{-5} \\ -1.100025 \text{ x } 10^{-5} \\ -7.256785714 \text{ x } 10^{-6} \end{Bmatrix}$$

$$\rho_{(3)} = r^{(3)^T} z^{(3)} = 1.890422885 \text{ x } 10^{-9}$$

$$\beta_3 = \frac{\rho_{(3)}}{\rho_{(2)}} = 1.03127828 \text{ x } 10^{-7}$$

$$d^{(3)} = z^{(3)} + \beta_3 d^{(2)} = \begin{Bmatrix} -1.49425 \text{ x } 10^{-5} \\ -1.10031 \text{ x } 10^{-5} \\ -7.25221 \text{ x } 10^{-6} \end{Bmatrix}$$

$$q^{(3)} = A^T A d^{(3)} = \begin{Bmatrix} -0.000110347 \\ -0.000117411 \\ 0.000257205 \end{Bmatrix}$$

$$\alpha_3 = \frac{\rho_3}{d^{(3)^T} q^{(3)}}$$

โดย $d^{(3)^T} q^{(3)} = 4.806049695 \text{ x } 10^{-9}$

ดังนั้น $\alpha_3 = 0.3933423508$

$$x^{(4)} = x^{(3)} + \alpha_3 d^{(3)}$$

$$= \begin{Bmatrix} -1 \\ -0.5 \\ 1.00001 \end{Bmatrix} + (0.3933423508)\begin{Bmatrix} -1.49425 \text{ x } 10^{-5} \\ --1.10031 \text{ x } 10^{-5} \\ -7.25221 \text{ x } 10^{-6} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -1.00001 \\ -0.500004 \\ 1.00001 \end{Bmatrix}$$

$$r^{(4)} = r^{(3)} - \alpha_3 q^{(3)}$$

$$= \begin{Bmatrix} -0.0000448045 \\ -0.000044001 \\ -0.00101595 \end{Bmatrix} - (0.3933423508)\begin{Bmatrix} -0.000110347 \\ -0.000117411 \\ -0.000257205 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -1.40035 \text{ x } 10^{-6} \\ 2.18172 \text{ x } 10^{-6} \\ -4.25381 \text{ x } 10^{-7} \end{Bmatrix}$$

ตรวจสอบผลการลู่เข้าสู่คำตอบ

$$err^{(4)} = \frac{\sqrt{(-1.40035 \text{ x } 10^{-6})^2 + (2.18172 \text{ x } 10^{-6})^2 + (-4.25381 \text{ x } 10^{-7})^2}}{\sqrt{33}} = 4.573252698 \text{ x } 10^{-7}$$

เนื่องจากค่าความผิดพลาด < ค่าความผิดพลาดที่ยอมให้ได้ ดังนั้นคำตอบ คือ $x^{(4)}$ คือ

$$\begin{Bmatrix} -1.00001 \\ -0.500004 \\ 1.00001 \end{Bmatrix}$$

ตรวจสอบคำตอบที่ได้กับคำตอบที่ได้จากระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์ โดยคำตอบที่ถูกต้องของระบบสมการดังกล่าว คือ

$$\begin{Bmatrix} -1.0 \\ -0.5 \\ 1.0 \end{Bmatrix}$$

ซึ่งจะเห็นว่าวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์สามารถให้คำตอบที่ถูกต้องได้ตามที่ต้องการ