บทความวิชาการ

วิธีทำซ้ำอย่างนิ่งและวิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์สำหรับหาผลเฉลยระบบเชิงเส้น

นันทกานต์ บุญเรืองกัณฑ์[1] อารีรักษ์ ชัยวร[2] วรรณพร สรรประเสริฐ[1] และ ภัทราวุธ จันทร์เสงี่ยม[1*]

ได้รับบทความ: 28 พฤศจิกายน 2561
ได้รับบทความแก้ไข: 19 เมษายน 2562
ยอมรับตีพิมพ์: 18 พฤษภาคม 2562

บทคัดย่อ

วิธีทำซ้ำสำหรับหาผลเฉลยระบบเชิงเส้นมีอยู่ด้วยกัน 2 แบบใหญ่ๆ คือ วิธีทำซ้ำอย่างนิ่งกับวิธีปริภูมิย่อยไครลอฟ บทความวิชาการนี้อภิปรายแนวคิดทั่วไปและเทคนิคพื้นฐานของวิธีทำซ้ำอย่างนิ่ง ได้แก่ วิธีจาโคบี วิธีเกาส์-ไซเดล และวิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง นอกจากนั้นยังพิจารณาวิธีทำซ้ำที่พัฒนาต่อยอดจากวิธีดังกล่าว ได้แก่ วิธีผ่อนปรนเกินแบบเร่ง วิธีทำซ้ำที่มีฐานจากเกรเดียนต์ และวิธีทำซ้ำกำลังสองน้อยสุด สำหรับวิธีปริภูมิย่อยไครลอฟนั้นมีต้นแบบมาจากวิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์ วิธีดังกล่าวจะสร้างฐานหลักเชิงตั้งฉากของปริภูมิแบบยุคลิดจากเมทริกซ์สัมประสิทธิ์โดยพิจารณาจากเกรเดียนต์ของฟังก์ชันกำลังสองที่สอดคล้อง ฐานหลักดังกล่าวประกอบด้วยเวกเตอร์ที่มีทิศทางที่ทำให้ผลเฉลยค่าประมาณเข้าใกล้ผลเฉลยจริงได้เร็วที่สุด กล่าวโดยสรุปได้ว่า วิธีทำซ้ำอย่างนิ่ง 4 วิธีแรกที่กล่าวมานั้นจะการันตีการลู่เข้าของลำดับของผลเฉลยโดยประมาณสู่ผลเฉลยจริงเมื่อใช้กับระบบที่มีเมทริกซ์สัมประสิทธิ์อยู่ในรูปแบบเฉพาะ เช่น เมทริกซ์แนวทแยงมุมข่มแท้ เมทริกซ์ลดทอนไม่ได้ และเมทริกซ์แบบแอล โดยต้องกำหนดตัวแปรเสริมที่เหมาะสม ส่วนวิธีทำซ้ำที่มีฐานจากเกรเดียนต์และวิธีทำซ้ำกำลังสองน้อยสุดใช้ได้กับระบบที่มีเมทริกซ์สัมประสิทธิ์มีค่าลำดับชั้นเต็ม สำหรับวิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์ใช้ได้กับระบบที่เมทริกซ์สัมประสิทธิ์เป็นเมทริกซ์สมมาตรที่เป็นบวกแน่นอน

คำสำคัญ: ระบบเชิงเส้น วิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง วิธีผ่อนปรนเกินแบบเร่ง วิธีทำซ้ำที่มีฐานจากเกรเดียนต์ วิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์

---

[1]ภาควิชาคณิตศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
[2]ภาควิชาคณิตศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยบูรพา
[*]ผู้นิพนธ์ประสานงาน, e-mail: pattrawut.ch@kmitl.ac.th

Stationary Iterative Methods and the Conjugate Gradient Method for Solving Linear Systems

Nunthakarn Boonruangkan[1], Areerak Chaiworn[2], Wannaporn Sanprasert[1] and Pattrawut Chansangiam[1*]

Received: 28 November 2018
Revised: 19 April 2019
Accepted: 18 May 2019

ABSTRACT

There are two major types of iterative methods for solving linear systems, namely, stationary iterative methods and Krylov subspace methods. This survey article discusses general ideas and elementary techniques for stationary iterative methods such as Jacobi method, Gauss-Seidel method, and the successive over-relaxation method. Moreover, we investigate further developed methods, namely, the accelerated over-relaxation method, the gradient based iterative method, and the least squares iterative method. On the other hand, Krylov subspace methods have prototypes from the conjugate gradient method. The latter method constructs an orthogonal basis for the Euclidean space from the gradient of the associated quadratic function. Such basis consists of vectors in directions so that the approximated solutions fastest approach to the exact solution. In conclusions, all 1^{st}-4^{th} mentioned stationary iterative methods guarantee the convergence of the sequence of approximated solutions to the exact solution when applying to the system with specific coefficient matrices such as strictly diagonally dominant matrices, irreducible matrices, and L-matrices. Here, the parameters in the methods must be appropriate. The gradient based iterative method and the least squares iterative method can be applied to systems with full-column rank coefficient matrices. The conjugate gradient method is applicable for the system whose coefficient matrix is a positive definite symmetric matrix.

Keywords: linear system, successive over-relaxation method, accelerated over-relaxation method, gradient based iterative method, conjugate gradient method

[1]Department of Mathematics, Faculty of Science, King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang.
[2]Department of Mathematics, Faculty of Science, Burapha University.
[*]Corresponding author, email: pattrawut.ch@kmitl.ac.th

1. บทนำ

ปัญหาพื้นฐานสำคัญในพีชคณิตเชิงเส้นคือการหาผลเฉลยของระบบเชิงเส้นในรูปแบบ $Ax = b$ เมื่อ A เป็นเมทริกซ์จัตุรัสขนาด $n \times n$ ที่แต่ละสมาชิกเป็นจำนวนจริงและ b เป็นเวกเตอร์ใน $\mathbb{R}^n$ เป็นที่ทราบกันดีว่าระบบเชิงเส้นข้างต้นมีผลเฉลยเดียวก็ต่อเมื่อเมทริกซ์สัมประสิทธิ์ A หาผกผันได้ โดยผลเฉลยดังกล่าวคือ $x = A^{-1}b$ อย่างไรก็ตามถ้า A เป็นเมทริกซ์ขนาดใหญ่แล้วการคำนวณ A^{-1} จะค่อนข้างยุ่งยากและสิ้นเปลืองหน่วยความจำ เพื่อเป็นการแก้ปัญหาดังกล่าวจึงมีการคิดค้นวิธีทำซ้ำสำหรับหาผลเฉลยระบบเชิงเส้น โดยจะสร้างลำดับของผลเฉลยค่าประมาณที่ลู่เข้าสู่ผลเฉลยจริง วิธีทำซ้ำมีข้อดีคือใช้ขั้นตอนการคำนวณจำนวนน้อยครั้งในการได้ผลเฉลยที่ใกล้เคียงกับผลเฉลยจริง ยิ่งกว่านั้นวิธีทำซ้ำบางวิธีสามารถกำหนดได้ว่าต้องคำนวณกี่รอบจึงจะได้ผลเฉลยที่มีความคลาดเคลื่อนตามต้องการ ดังนั้นในทางปฏิบัติเรามักใช้วิธีทำซ้ำในการหาผลเฉลยระบบเชิงเส้นที่มีขนาดใหญ่

วิธีทำซ้ำสำหรับหาผลเฉลยระบบเชิงเส้นมีอยู่ด้วยกัน 2 แบบใหญ่ๆ คือ วิธีทำซ้ำอย่างนิ่ง (stationary iterative methods) กับวิธีปริภูมิย่อยไครลอฟ (Krylov subspace methods) วิธีทำซ้ำอย่างนิ่งมีหลักการคือ จะสร้างลำดับของผลเฉลยค่าประมาณโดยพิจารณาความคลาดเคลื่อนในขั้นตอนก่อนหน้าเพื่อนำมาสร้างสมการทำซ้ำ วิธีทำซ้ำดังกล่าวง่ายต่อการวิเคราะห์การลู่เข้าและการนำไปใช้จริง อย่างไรก็ตามวิธีดังกล่าวจะการันตีการลู่เข้าสำหรับเมทริกซ์ที่มีรูปแบบค่อนข้างเฉพาะ เช่น วิธีจาโคบี (Jacobi method) จะการันตีการลู่เข้าถ้าใช้กับเมทริกซ์แนวทแยงมุมข่มแท้ (strictly diagonally dominant matrix) วิธีทำซ้ำอย่างนิ่งแบบอื่นที่สำคัญได้แก่ วิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง (successive over-relaxation method) วิธีผ่อนปรนเกินแบบเร่ง (accelerated over-relaxation method)

วิธีปริภูมิย่อยไครลอฟจะสร้างฐานหลัก (basis) ของลำดับของกำลังต่างๆ ของเมทริกซ์คูณกับเวกเตอร์ส่วนตกค้างเริ่มต้น (initial residual vector) เรียกลำดับดังกล่าวว่าลำดับไครลอฟ (Krylov sequence) จากนั้นจะหาค่าน้อยสุดของนอร์มของเวกเตอร์ส่วนตกค้างบนปริภูมิย่อยที่ถูกสร้างขึ้นมา วิธีต้นแบบสำคัญของวิธีปริภูมิย่อยไครลอฟ ได้แก่ วิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์ (conjugate gradient method) ซึ่งใช้กับระบบเชิงเส้นที่มีเมทริกซ์สัมประสิทธิ์เป็นเมทริกซ์สมมาตรที่เป็นบวกแน่นอน (positive definite symmetric matrix) วิธีปริภูมิย่อยไครลอฟอื่นๆ ที่สำคัญได้แก่

- วิธีส่วนตกค้างน้อยสุด (MINRES: minimal residual method) [1]
- วิธีส่วนตกค้างน้อยสุดที่มีนัยทั่วไป (GRES: generalized minimal residual method) [2]
- วิธีไบคอนจูเกตเกรเดียนต์ (BiCG: biconjugate gradient method) [3]

ในช่วงหลายปีที่ผ่านมา วิธีทำซ้ำต่างๆ มากมายได้ถูกพัฒนาขึ้นเพื่อหาผลเฉลยของระบบเชิงเส้น บทความวิชาการนี้จะอภิปรายวิธีทำซ้ำแบบนิ่งและวิธีปริภูมิย่อยไครลอฟที่น่าสนใจ เริ่มต้นจากการนำเสนอหลักการทั่วไปของวิธีทำซ้ำอย่างนิ่ง ระเบียบวิธีพื้นฐานของวิธีทำซ้ำอย่างนิ่งที่สำคัญที่จะพิจารณา ได้แก่ วิธีจาโคบี วิธีเกาส์-ไซเดล วิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง วิธีผ่อนปรนเกินแบบเร่ง วิธีทำซ้ำที่มีฐานจากเกรเดียนต์ วิธีทำซ้ำกำลังสองน้อยสุด และวิธีคอนจูเกต เกรเดียนต์ โดยกล่าวถึงแนวคิด ขั้นตอนวิธีในการทำซ้ำ และเงื่อนไขการลู่เข้า

ในหัวข้อที่ 2 จะกล่าวถึงความรู้พื้นฐานในการวิเคราะห์เมทริกซ์ หัวข้อที่ 3 จะกล่าวถึงแนวคิดทั่วไปและระเบียบวิธีพื้นฐานของวิธีทำซ้ำอย่างนิ่ง โดยอภิปรายวิธีจาโคบี วิธีเกาส์-ไซเดล และวิธีผ่อนปรน

เกินสืบเนื่อง สำหรับวิธีทำซ้ำอย่างนิ่งที่พัฒนาต่อยอดจากระเบียบวิธีดังกล่าว ได้แก่ วิธีผ่อนปรนแบบเร่ง วิธีทำซ้ำที่มีฐานจากเกรเดียนต์ และวิธีทำซ้ำกำลังสองน้อยสุด จะกล่าวถึงในหัวข้อที่ 4 และ 5 สำหรับหัวข้อที่ 6 จะกล่าวถึงวิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์

2. ความรู้พื้นฐาน

สำหรับแต่ละจำนวนนับ m และ n ให้ $M_{m,n}(\mathbb{R})$ แทนเซตของเมทริกซ์จริงขนาด $m \times n$ และแทน $M_{m,n}(\mathbb{R})$ ด้วย $M_n(\mathbb{R})$

บทนิยามที่ 2.1 เราเรียก $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{R})$ ว่า

- เมทริกซ์ที่เป็นบวกแน่นอน (positive definite matrix) ก็ต่อเมื่อ $x^T Ax > 0$ สำหรับทุก $x \in \mathbb{R}^n - \{0\}$
- เมทริกซ์ลดทอนไม่ได้ (irreducible matrix) ก็ต่อเมื่อ มีเมทริกซ์เรียงสับเปลี่ยน P ซึ่ง

$$P^T AP = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$$

โดย A_{11} และ A_{22} เป็นเมทริกซ์จัตุรัส

- เมทริกซ์แนวทแยงมุมข่มอย่างอ่อน (weak diagonal dominant matrix) ก็ต่อเมื่อ สำหรับทุก $i = 1,2,...,n$

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|$$

ถ้าเครื่องหมาย $\geq$ ในอสมการข้างต้นกลายเป็น $>$ เรียก A ว่าเมทริกซ์แนวทแยงมุมข่มแท้ (strictly diagonal dominant matrix)

- เมทริกซ์แบบแอล (L-matrix) ก็ต่อเมื่อ $a_{ii} > 0$ สำหรับทุก i และ $a_{ij} \leq 0$ สำหรับทุก $i \neq j$

ทฤษฎีบทที่ 2.1 ให้ $A \in M_n(\mathbb{R})$ เป็นเมทริกซ์สมมาตรที่เป็นบวกแน่นอน และ $b, c \in \mathbb{R}^n$ พิจารณาฟังก์ชัน

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R},\ f(x) = \tfrac{1}{2} x^T Ax - b^T x + c$$

จะได้ว่า f มีค่าต่ำสุดที่ $x = A^{-1}b$

บทนิยามที่ 2.2 เกรเดียนต์ของฟังก์ชัน $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R},\ f(x) = f(x_1, x_2, ..., x_n)$ นิยามโดย

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} f(x) & \frac{\partial}{\partial x_2} f(x) & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n} f(x) \end{bmatrix}^T$$

ทฤษฎีบทที่ 2.2
1. สำหรับ $f(x) = a^T x$ จะได้ $\nabla f(x) = a$
2. สำหรับ $f(x) = x^T Ax$ จะได้ $\nabla f(x) = 2Ax$
3. สำหรับ $f(x) = \frac{1}{2} x^T Ax - b^T x + c$ จะได้ $\nabla f(x) = Ax - b$

ในการพิจารณาการลู่เข้าของวิธีทำซ้ำต่างๆ เราใช้ผลคูณภายในแบบปรกติและนอร์มแบบปรกติ

บน $\mathbb{R}^n$ ซึ่งเขียนแทนด้วยสัญลักษณ์ $\langle \cdot,\cdot \rangle$ และ $\|\cdot\|$ ตามลำดับ

3. แนวคิดและระเบียบวิธีพื้นฐานของวิธีทำซ้ำอย่างนิ่ง

แนวคิดของวิธีทำซ้ำอย่างนิ่งเพื่อผลเฉลยของระบบเชิงเส้น $Ax=b$ เริ่มจากการกำหนดเวกเตอร์เริ่มต้น $x^{(0)}$ ต่อมาจะสร้างลำดับของผลเฉลยโดยประมาณ $\left\{x^{(k)}\right\}_{k=0}^{\infty}$ และจะแทนที่ระบบเชิงเส้น $Ax = b$ ด้วยระบบทำซ้ำ

$$x^{(k+1)} = Tx^{(k)} + c, \quad x^{(0)} = x_0 \tag{1}$$

สำหรับบางเมทริกซ์จัตุรัส T และสำหรับบางเวกเตอร์ c ให้ x^* เป็นผลเฉลยจริงของ $Ax=b$ สมมติว่า $x^{(k)} \to x^*$ เมื่อ $k \to \infty$ จะได้ว่า x^* เป็นจุดตรึงของระบบทำซ้ำ (1) นั่นคือ

$$x^* = Tx^* + c \tag{2}$$

ดังนั้นระเบียบวิธีต่างๆ ของวิธีทำซ้ำอย่างนิ่งจะเป็นการหาเมทริกซ์ T และเวกเตอร์ c ที่ทำให้ระบบทำซ้ำ (1) ลู่เข้าสู่ผลเฉลยจริง นั่นคือ ลำดับของผลเฉลยโดยประมาณ $\left\{x^{(k)}\right\}_{k=0}^{\infty}$ จะต้องลู่เข้าสู่จุดตรึง x^* สำหรับค่าเริ่มต้น $x^{(0)}$ ใดๆ

ทฤษฎีบทที่ 3.1 ([4]) ระบบทำซ้ำ (1) จะลู่เข้าสู่ผลเฉลยจริงซึ่งเป็นจุดตรึงดังสมการที่ (2) ก็ต่อเมื่อ T เป็นเมทริกซ์ลู่เข้า นั่นคือ $\rho(T)<1$

ระเบียบพื้นฐานที่สำคัญได้แก่ วิธีจาโคบี วิธีเกาส์-ไซเดล และวิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง

3.1 วิธีจาโคบี

วิธีจาโคบี [5] ใช้หาผลเฉลยระบบเชิงเส้น $Ax=b$ เมื่อแต่ละสมาชิกในแนวทแยงมุมหลักของ A ไม่เป็น 0 เริ่มจากการแยกเมทริกซ์ $A=L+D+U$ เมื่อ L เป็นเมทริกซ์แบบสามเหลี่ยมล่าง D เป็นเมทริกซ์ทแยงมุมที่หาผกผันได้ (นั่นคือแต่ละสมาชิกในแนวทแยงมุมหลักไม่เท่ากับศูนย์) และ U เป็นเมทริกซ์แบบสามเหลี่ยมบน ต่อมาจัดรูปสมการใหม่เป็น $Dx=-(L+U)x+b$ ดังนั้นสมการการทำซ้ำของวิธีจาโคบี คือ

$$\mathrm{x}^{(k+1)} = T_J \mathrm{x}^{(k)} + \mathrm{c}_J \text{ เมื่อ } T_J = -D^{-1}(L+U) \text{ และ } \mathrm{c}_J = D^{-1}b \tag{3}$$

รูปแบบที่ชัดแจ้งของวิธีจาโคบีสามารถพิจารณาได้ดังนี้ ในแต่ละสมการที่ i เราได้ว่า

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i$$

เนื่องจาก $a_{ii} \neq 0$ จะได้ว่า

$$x_i = -\frac{1}{a_{ii}}\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j + \frac{b_i}{a_{ii}} \tag{4}$$

ผลเฉลยที่ได้เป็นจุดตรึงที่สอดคล้องกับระบบทำซ้ำ $\mathrm{x}^{(k+1)} = T_J \mathrm{x}^{(k)} + \mathrm{c}_J$ ดังนั้นรูปแบบชัดแจ้งของวิธีจาโคบี คือ

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{ii}}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}} \quad (5)$$

ทฤษฎีบทที่ 3.2 ([6]) ถ้า A เป็นเมทริกซ์แนวทแยงมุมข่มแท้ แล้ววิธีจาโคบีที่สอดคล้องจะลู่เข้า

วิธีทำซ้ำที่แปรเปลี่ยนจากวิธีจาโคบี ได้แก่ วิธีจาโคบีแบบถ่วงน้ำหนัก (Weighted Jacobi Method) [7] ซึ่งใช้ตัวแปรเสริม $\omega \in (0,1]$ ในการคำนวณการทำซ้ำดังนี้

$$x^{(k+1)} = \omega D^{-1}\left\{b-(L+U)x^{(k)}\right\}+(1-\omega)x^{(k)}$$

เมื่อ $\omega = 1$ จะเป็นวิธีจาโคบีแบบดั้งเดิม ต่อมาในปีงานวิจัย [8] วิธีจาโคบีได้รับการปรับปรุงเป็นวิธีจาโคบีผ่อนปรนตามกำหนด (Scheduled Relaxation Jacobi Method) ซึ่งเป็นวิธีทำซ้ำที่ลู่เข้าเร็วกว่าวิธีจาโคบีดั้งเดิมอยู่มาก ยิ่งกว่านั้นในปี 2015 วิธีดังกล่าวได้รับการพัฒนาอีกครั้งในงานวิจัย [9]

3.2 วิธีเกาส์-ไซเดล

วิธีเกาส์-ไซเดลหรือวิธีเลียบมันน์ (Liebmann Method) หรือวิธีแทนที่สืบเนื่อง (Method of Successive Replacement) เป็นวิธีทำ กำฒZ่ปรับปรุงจากวิธีจาโคบี คิดค้นขึ้นครั้งแรกโดยคาร์ล เฟรดเดอริก เกาส์ [10] แต่ไม่ได้ตีพิมพ์เผยแพร่สู่สาธารณะ ต่อมาได้มีผู้คิดค้นและตีพิมพ์วิธีทำซ้ำนี้อีกครั้งโดยไม่ทราบว่ามีผู้คิดค้นได้ก่อนแล้วคือฟิลิปป์ ลุดวิก ฟอน ไซเดล (Phillip Ludvig von Siedel) ปี ค.ศ. 1874 และเลียบมันน์ (Liebmann) [11] ในปี ค.ศ. 1918

วิธีเกาส์-ไซเดลสำหรับหาผลเฉลยระบบเชิงเส้น $Ax=b$ เริ่มจากการแยกเมทริกซ์ $A=L+D+U$ เช่นเดียวกับวิธีจาโคบี แต่ใช้สมการการทำซ้ำเป็น

$$\mathrm{x}^{(k+1)} = T_G\mathrm{x}^{(k)} + \mathrm{c}_G \text{ เมื่อ } T_G = -(L+D)^{-1}U \text{ และ } \mathrm{C}_G = (L+D)^{-1}\mathrm{b} \quad (6)$$

รูปแบบชัดแจ้งของวิธีเกาส์-ไซเดลคือ

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}} \quad (7)$$

วิธีเกาส์-ไซเดลจะลู่เข้าถ้า A เป็นเมทริกซ์แนวทแยงมุมข่มแท้ โดยมีอัตราเร็วในการลู่เข้ามากกว่าวิธีจาโคบีเนื่องจากวิธีนี้จะใช้ค่า x_i ตัวใหม่ที่คำนวณได้แทนค่าในสมการต่อไปทันที

3.3 วิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง

วิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง (SOR) คิดค้นโดย David young ในปี ค.ศ. 1950 เป็นวิธีทำซ้ำที่ปรับปรุงจากวิธีจาโคบีและวิธีเกาส์-ไซเดลโดยเพิ่มอัตราการลู่เข้าของการทำซ้ำ เราใช้ความรู้ที่ว่าถ้ารัศมีสเปกตรัมของเมทริกซ์สัมประสิทธิ์มีขนาดเล็กๆ แล้วการลู่เข้าของการทำซ้ำจะเร็วขึ้น

จากระบบเชิงเส้น $Ax = b$ พิจารณาการแยกเมทริกซ์ $A = L + D + U$ เช่นเดียวกับวิธีจาโคบี ให้ α เป็นค่าคงที่ใดๆ ที่ไม่เป็นศูนย์ จะได้ว่า

$$A=\left(L+\alpha D\right)-\left[\left(\alpha-1\right)D-U\right]$$
$$\left(\frac{L}{\alpha}+D\right)x=\left[\left(1-\frac{1}{\alpha}\right)D-\frac{1}{\alpha}U\right]x+\frac{1}{\alpha}b$$

ให้ $\omega=1/\alpha$ เรียก ω ว่า**ตัวแปรเสริมการผ่อนปรน (relaxation parameter)** เราได้สมการการทำซ้ำเป็น

$$\left(\omega L+D\right)x^{(k+1)}=\left[\left(1-\omega\right)D-\omega U\right]x^{(k)}+\omega b$$

สังเกตว่า $\omega L+D$ เป็นเมทริกซ์แบบสามเหลี่ยมล่างที่หาผกผันได้ เราจึงสามารถใช้วิธีแทนค่าไปข้างหน้าเพื่อ หา $x^{(k+1)}$ ได้ โดยรูปชัดแจ้งสำหรับตำแหน่งที่ i ($i=1,2,...,n$) คือ

$$x_i^{(k+1)}=\omega t_{i1}x_1^{(k+1)}+\ldots+\omega t_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)}+(1-\omega)x_i^{(k)}+\omega t_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)}+\ldots+\omega t_{in}x_n^{(k)}+\omega c_i$$

พิจารณาการเลือก ω

- กรณี $\omega=1$ จะเป็นวิธีเกาส์-ไซเดล
- กรณี $\omega<1$ จะเรียกว่าวิธีผ่อนปรนต่ำ (under-relaxed method)
- กรณี $\omega>1$ จะเรียกว่าวิธีผ่อนปรนเกิน (over-relaxed method)

เราจะเขียนสมการในรูปจุดตรึง คือ $x^{(k+1)}=T_\omega x^{(k)}+c_\omega$ โดยที่ $T_\omega=(\omega L+D)^{-1}[(1-\omega)D-\omega U]$ และ $c_\omega=(\omega L+D)^{-1}\omega b$

เนื่องจากอัตราการลู่เข้าของระบบทำซ้ำขึ้นอยู่กับค่ารัศมีสเปกตรัมของเมทริกซ์ทำซ้ำ ดังนั้นเราต้องเลือก ω ที่ทำให้รัศมีสเปกตรัมของเมทริกซ์ทำซ้ำ T_ω มีค่าน้อยกว่า 1 และมีค่าน้อยที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้

ทฤษฎีบทที่ 3.3 ถ้า $a_{ii}\neq 0$ สำหรับแต่ละ $i=1,2,....,n$ แล้ว $\rho(T_\omega)\geq|\omega-1|$ นั่นคือ วิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง (SOR) จะลู่เข้าถ้า $0<\omega<2$

บทพิสูจน์ ศึกษาได้จาก [12]

ทฤษฎีบทที่ 3.4 ([13], [14]) ให้ A เป็นเมทริกซ์ที่เป็นบวกแน่นอนและเมทริกซ์สามแนวเฉียง จะได้ว่า $\rho(T_G)=\left[\rho(T_J)\right]^2<1$ และตัวเลือกเหมาะที่สุดของ ω สำหรับวิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง คือ

$$\omega=\frac{2}{1+\sqrt{1-\left[\rho(T_J)\right]^2}}$$

ในกรณีนี้จะได้ $\rho(T_\omega)=\omega-1$

ตัวอย่างที่ 3.1 พิจารณาระบบเชิงเส้น $Ax=b$ เมื่อ

$$A=\begin{bmatrix}5&2&0\\2&5&-4\\0&-4&5\end{bmatrix},\ b=\begin{bmatrix}-1\\4\\-3\end{bmatrix}$$

ระบบดังกล่าวมีผลเฉลยจริงคือ $x=\begin{bmatrix}-1 & 2 & 1\end{bmatrix}^T$ ต่อไปจะพิจารณาการหาผลเฉลยค่าประมาณโดยวิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง จะเห็นว่า A เป็นเมทริกซ์ที่เป็นบวกแน่นอนและเมทริกซ์สามแนวเฉียง จะได้ว่า

$$T_J=-D^{-1}\left(L+U\right)=\begin{bmatrix}0 & -0.4 & 0\\ -0.4 & 0 & 0.8\\ 0 & 0.8 & 0\end{bmatrix}$$

$$\rho(T_J)=\sqrt{0.8}\approx 0.8944,\quad \omega=\frac{2}{1+\sqrt{1-\rho(T_J)^2}}\approx 1.382$$

เลือกเวกเตอร์เริ่มต้น $x^{(0)}=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\end{bmatrix}^T$ จะได้ว่าสมการของการผ่อนปรนเกินสืบเนื่องที่ $\omega=1.382$ คือ

$$x_1^{(k+1)}=(1-\omega)x_1^{(k)}-0.4\omega x_2^{(k)}-0.2\omega=-0.382x_1^{(k)}-0.5528x_2^{(k)}-0.2764$$
$$x_2^{(k+1)}=-0.4\omega x_1^{(k+1)}+(1-\omega)x_2^{(k)}+0.8\omega x_3^{(k)}+0.8\omega=-0.5528x_1^{(k+1)}-0.382x_2^{(k)}+1.1056x_3^{(k)}+1.1056$$
$$x_3^{(k+1)}=0.8\omega x_2^{(k+1)}+(1-\omega)x_3^{(k)}-0.6\omega=1.1056x_2^{(k+1)}-0.382x_3^{(k)}-0.8292$$

ในการทำซ้ำรอบที่ k เราพิจารณาค่าคลาดเคลื่อนจากสูตร $\left\|x^{(k)}-x\right\|/\left\|x\right\|$ จากการคำนวณโดยใช้โปรแกรม MATLAB จะได้ตารางแสดงผลลัพธ์การทำซ้ำและค่าคลาดเคลื่อนดังนี้

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	ค่าคลาดเคลื่อน
0	0	1	0	0.7071067812
1	−0.8292	1.18198176	0.477599034	0.4023326257
2	−0.613045117	1.5210078	0.669983393	0.2852129526
3	−0.883029877	1.753447576	0.853477984	0.1264507867
4	−0.908388407	1.881545396	0.925008	0.0683715063
5	−0.969513924	1.945485801	0.968376045	0.028581093
6	−0.981510232	1.975639836	0.985147753	0.0138797115
7	−0.993596793	1.989345246	0.993893662	0.005654087
8	−0.996556077	1.995415148	0.997263609	0.002593881
9	−0.998781072	1.998052236	0.998891854	0.0010414379
10	−0.999388907	1.999181067	0.999517899	0.0000461249

จะเห็นว่าเมื่อทำซ้ำ 10 รอบ ผลเฉลยค่าประมาณที่ได้มีค่าใกล้เคียงกับผลเฉลยจริง

4. วิธีผ่อนปรนแบบเร่ง

วิธีผ่อนปรนแบบเร่ง หรือวิธี $M_{r,\omega}$ เป็นวิธีทำซ้ำเพื่อหาผลเฉลยของระบบเชิงเส้น $Ax=b$ ที่มีตัวแปรเสริม 2 ตัวแปรคือ r และ ω โดยประยุกต์จากวิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง เริ่มต้นจากการแยกเมทริกซ์ $A=L+D+U$ เช่นเดียวกับวิธีจาโคบี พิจารณาการทำซ้ำในรูปแบบต่อไปนี้

$$(\alpha_1 D+\alpha_2 L)x^{(k+1)}=(\alpha_3 D+\alpha_4 L+\alpha_5 U)x^{(k)}+\alpha_6 b,\ \ k=0,1,2,... \quad (8)$$

เมื่อ $\alpha_1,...,\alpha_6$ เป็นค่าคงที่ ซึ่ง $\alpha_1 \neq 0$ และ $x^{(0)}$ คือค่าประมาณเริ่มต้นของผลเฉลยของสมการ (8) โดยการหารด้วย α_1 จะได้

$$(D+\alpha_2' L)x^{(k+1)}=(\alpha_3' D+\alpha_4' L+\alpha_5' U)x^{(k)}+\alpha_6' b,\ n=0,1,2,...$$

เมื่อ $\alpha_i'=\alpha_i/\alpha_1',\ i=2,...,6$ เงื่อนไขเพียงพอเพื่อให้ $x^{(k)}$ ลู่เข้าสู่ผลเฉลยจริงของระบบเชิงเส้นคือ

$$(1-\alpha_3')D+(\alpha_2'-\alpha_4')L-\alpha_5' U=\alpha_6' A,\ \ \alpha_6'\neq 0 \quad (9)$$

โดยการเทียบสัมประสิทธิ์จะได้

$$1-\alpha_3'=\alpha_6'\ ,\ \alpha_2'-\alpha_4'=\alpha_6'\ , \text{ และ } -\alpha_5'=\alpha_6'$$

ให้ $\alpha_2'=r$ และ $\alpha_6'=\omega$ เมื่อ r และ $\omega\neq 0$ เป็นตัวแปรเสริม จะได้ว่า $\alpha_3'=1-\omega,\ \alpha_4'=r-\omega$ และ $\alpha_5'=-\omega$ จะได้

$$(D+rL)x^{(k+1)}=[(1-\omega)D-(\omega-r)L-\omega U]x^{(k)}+\omega b$$

ดังนั้นรูปแบบชัดแจ้งของวิธี AOR คือ

$$x^{(k+1)}=L_{r,\omega}x^{(k)}+c$$

เมื่อ $L_{r,\omega}=I-\omega(D+rL)^{-1}A$ และ $c=\omega(D+rL)^{-1}b$ เราเรียกพารามิเตอร์ r ว่าตัวแปรเสริมการเร่ง (acceleration parameter) และเรียก ω ว่าตัวแปรเสริมการผ่อนปรน กรณีเฉพาะที่สำคัญของวิธี $M_{r,\omega}$ ได้แก่

- $M_{0,1}$ คือ วิธีจาโคบี
- $M_{1,1}$ คือ วิธีเกาส์-ไซเดล
- $M_{0,\omega}$ คือ วิธีผ่อนปรนพร้อมกัน
- $M_{\omega,\omega}$ คือ วิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่อง

ทฤษฎีบทที่ 4.1 ([5]) ถ้า A เป็นเมทริกซ์ลดทอนไม่ได้ที่เป็นเมทริกซ์ทแยงมุมแนวข่มอย่างอ่อน แล้ววิธี $M_{r,\omega}$ จะลู่เข้า สำหรับทุก $0 \le r \le 1$ และ $0 < \omega \le 1$.

จากทฤษฎีบทนี้ ในกรณีที่เมทริกซ์สัมประสิทธิ์เป็นเมทริกซ์ที่ไม่สามารถลดรูปได้ที่เป็นเมทริกซ์ทแยงมุมข่มอย่างอ่อน เราได้ว่าวิธีจาโคบีและวิธีเกาส์-ไซเดลจะลู่เข้าเสมอ ส่วนวิธีผ่อนปรนพร้อมกันและวิธีผ่อนปรนเกินสืบเนื่องจะลู่เข้าถ้าเราเลือก $\omega \in (0,1]$

ทฤษฎีบทที่ 4.2 ([5]) ถ้า A เป็นเมทริกซ์แบบแอล แล้วสำหรับทุก $\omega \neq 0$ และ $0 \le r \le \omega \le 1$ จะได้ว่าวิธี $M_{r,\omega}$ ลู่เข้าก็ต่อเมื่อวิธีจาโคบีลู่เข้า

5. วิธีทำซ้ำที่มีฐานจากเกรเดียนต์และวิธีทำซ้ำกำลังสองน้อยสุด

บทความวิจัย [15] และ [16] ได้นำเสนอวิธีทำซ้ำในรูปทั่วไปสำหรับระบบเชิงเส้น $Ax = b$ ดังนี้

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \mu G[b - Ax^{(k-1)}]$$

เมื่อ G เป็นเมทริกซ์จัตุรัสที่เหมาะสมและ μ เป็นตัวประกอบการลู่เข้า (convergent factor) ที่มีค่ามากกว่า 0

วิธีทำซ้ำดังกล่าวครอบคลุมกรณีเฉพาะที่สำคัญ ดังนี้

- ถ้า $G = D^{-1}$ และ μ = 1 แล้ววิธีทำซ้ำดังกล่าวจะกลายเป็นวิธีจาโคบี
- ถ้า $G = (L + D)$ และ μ = 1 แล้ววิธีทำซ้ำดังกล่าวจะกลายเป็นวิธีเกาส์-ไซเดล

ในกรณีที่ $G = A^T$ เราได้วิธีทำซ้ำต่อไปนี้ซึ่งเรียกว่า **วิธีทำซ้ำที่มีฐานจากเกรเดียนต์ (gradient-based iterative method)**

ทฤษฎีบทที่ 5.1 ([17]) สมมติว่า $0 < \mu < \frac{2}{\lambda_{\max}(A^T A)}$ หรือ $0 < \mu < \frac{2}{\|A\|^2}$ เมื่อสัญลักษณ์ $\lambda_{\max}(\cdot)$ คือค่าลักษณะเฉพาะของเมทริกซ์ที่มีค่ามากที่สุด พิจารณาวิธีทำซ้ำซึ่งนิยามโดย

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \mu A^T[b - Ax^{(k-1)}]$$

จะได้ว่า $\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x$ สำหรับค่าเริ่มต้น $x^{(0)}$ ใดๆ

พิจารณาระบบเชิงเส้น $Ax = b$ เมื่อ A เป็นเมทริกซ์จริงขนาด $m \times n$ และ $b \in \mathbb{R}^m$ สมมติว่าระบบดังกล่าวมีผลเฉลย เราได้ว่าข้อความต่อไปนี้สมมูลกัน

(ก) ผลเฉลยดังกล่าวมีเพียงผลเฉลยเดียว

(ข) A มีค่าลำดับชั้นหลักเต็ม (full column rank) นั่นคือ rank $A = n$

(ค) $A^T A$ หาผกผันได้

จากข้อ (ค) จะได้ว่าผลเฉลยเดียวดังกล่าวคือ $x = (A^T A)^{-1} b$

ในกรณีที่ $G = (A^T A)^{-1} A^T$ เราได้วิธีทำซ้ำต่อไปนี้ซึ่งเรียกว่า **วิธีทำซ้ำกำลังสองน้อยสุด (least squares iterative method)**

ทฤษฎีบทที่ 5.2 ([17]) พิจารณาระบบเชิงเส้น $Ax = b$ เมื่อ A เป็นเมทริกซ์จริงขนาด $m \times n$ ที่มีค่าลำดับชั้นหลักเต็มและ $b \in \mathbb{R}^m$ ให้ $0 < \mu < 2$ พิจารณาวิธีทำซ้ำ

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \mu(A^T A)^{-1} A^T [b - Ax^{(k-1)}]$$

จะได้ว่า $\lim_{k \to \infty} x^{(k)} = x$ สำหรับค่าเริ่มต้น $x^{(0)}$ ใดๆ

6. วิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์

6.1 แนวคิดของวิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์

วิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์ถูกนำไปใช้แก้ปัญหาการหาค่าเหมาะที่สุดที่ไม่มีเงื่อนไขบังคับ เช่น การหาค่าพลังงานที่น้อยที่สุด โดยวิธีนี้คิดค้นโดย Magnus Hestenes และ Eduard Stiefel ในงานวิจัย [18]

พิจารณาระบบเชิงเส้น $Ax = b$ เมื่อ A เป็นเมทริกซ์สมมาตรที่เป็นบวกแน่นอน นิยามผลคูณภายในที่สอดคล้องกับ A โดย

$$\langle v, w \rangle_A = v^T A w, \qquad v, w \in \mathbb{R}^n \tag{10}$$

โดยบทนิยามที่ 2.1 จะได้ว่า $\langle \cdot, \cdot \rangle_A$ เป็นผลคูณภายในบน $\mathbb{R}$ และจะกล่าวว่าเวกเตอร์ v และ w ตั้งฉากกันก็ต่อเมื่อ $\langle v, w \rangle_A = 0$ เรานิยามนอร์มบน $\mathbb{R}$ ที่สอดคล้องกับ A โดย $\|v\|_A = \sqrt{\langle v, v \rangle_A}$ สำหรับแต่ละ $v \in \mathbb{R}^n$

ให้ x^* เป็นผลเฉลยจริงของระบบ $Ax = b$ โดยทฤษฎีบทที่ 2.1 จะได้ว่า x^* เป็นค่าต่ำสุดของฟังก์ชันกำลังสอง

$$p(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b$$

จากความรู้ในวิชาแคลคูลัสหลายตัวแปร จะได้ว่าเวกเตอร์เกรเดียนต์ $\nabla p(x)$ จะชี้ไปยังทิศทางที่ความชันของกราฟของฟังก์ชันมีค่ามากที่สุด ในขณะที่ $-\nabla p(x)$ จะชี้ไปยังทิศทางที่ความชันของกราฟมีค่าน้อยสุด โดยทฤษฎีบท 2.2 จะได้ว่า

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p(x)}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2} x^T A x - x^T b\right) \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x}(x^T A x) - \frac{\partial}{\partial x}(x^T b) \\
&= Ax - b
\end{aligned}$$

ดังนั้น $-\nabla p(x) = b - Ax = r$ เรียก r ว่าเป็นเวกเตอร์ส่วนตกค้าง จะเห็นว่า $r = 0$ ก็ต่อเมื่อ $x = x^*$ นั่นคือ x จะเป็นผลเฉลยจริงของระบบสมการ ดังนั้นเราจะประมาณค่า $x^{(k)}$ ในแต่ละรอบด้วยสมการ

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k)} r^{(k)}$$

เมื่อ $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ และ $t^{(k)}$ เป็นสเกลาร์ที่แสดงถึงระยะทางของการเคลื่อนที่ไปในทิศทางดังกล่าว รูปแบบทั่วไปของการทำซ้ำครั้งที่ k+1 จากผลลัพธ์ในการทำซ้ำครั้งที่ k สามารถเขียนได้เป็น

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k+1)}v^{(k+1)} \text{ เมื่อ } x^{(k)} = t^{(1)}v^{(1)} + t^{(2)}v^{(2)} + \ldots + t^{(k)}v^{(k)}$$

โดยที่ $v^{(1)},\ldots,v^{(n)}$ ตั้งฉากกันเทียบกับผลคูณภายในที่นิยามโดย (10)

เราจะสมมติให้ $x^{(0)}=0$ จะได้ว่าเวกเตอร์ส่วนตกค้าง $r^{(0)}=b-Ax^{(0)}=b$ ต่อมาเราจะปรับปรุงจุดเริ่มต้นโดยการย้ายทิศทางตามเวกเตอร์ $r^{(0)}$ จากนั้นให้ $v^{(1)}=r^{(0)}=b$ ขั้นตอนการทำซ้ำในลำดับต่อไปคือ $x^{(1)}=x^{(0)}+t^{(1)}v^{(1)}=t^{(1)}v^{(1)}$ ซึ่งเราจะเลือก $t^{(1)}$ ที่สอดคล้องกับเวกเตอร์ส่วนตกค้าง $r^{(1)}$ ซึ่งการหาค่า $t^{(1)}$ จะเกิดขึ้นเมื่อ $r^{(0)}$ ตั้งฉากกับ $r^{(1)}$ นั่นคือ

$$0=(r^{(0)})^T r^{(1)}=(r^{(0)})^T(r^{(0)}-t^{(1)}Av^{(1)})=\left\|r^{(0)}\right\|^2-t^{(1)}\left\langle v^{(1)},v^{(1)}\right\rangle$$

ดังนั้น $t^{(1)}=\left\|r^{(0)}\right\|^2/\left\langle v^{(1)},v^{(1)}\right\rangle_A$ และ $x^{(1)}=x^{(0)}+(\left\|r^{(0)}\right\|^2/\left\langle v^{(1)},v^{(1)}\right\rangle_A)v^{(1)}$ เป็นค่าประมาณของผลเฉลยใหม่

สมมติให้ $t^{(1)}\neq 0$ เพราะถ้า $t^{(1)}=0$ นั่นคือ $r^{(0)}=0$ จะทำให้ $x^{(0)}$ เป็นค่าผลเฉลยจริง ขั้นตอนต่อมาเราจะปรับปรุง $x^{(1)}$โดยการย้ายทิศทางตาม $r^{(1)}$ เราจะเลือก $v^{(2)}$ ที่คอนจูเกตกับ $v^{(1)}=r^{(0)}$ ดังนั้นเราจึงให้ $v^{(2)}=r^{(1)}+s^{(1)}v^{(1)}$ เมื่อ s_1 เป็นค่าคงตัวซึ่งสามารถหาได้จากการตั้งฉากกันของ $v^{(1)}$ และ $v^{(2)}$ นั่นคือ

$$0=\left\langle v^{(1)},v^{(2)}\right\rangle_A=\left\langle v^{(2)},r^{(1)}\right\rangle_A+s^{(1)}\left\langle v^{(1)},v^{(1)}\right\rangle_A$$

ดังนั้น $s^{(1)}=-\left\langle r^{(1)},v^{(1)}\right\rangle_A/\left\langle v^{(1)},v^{(1)}\right\rangle_A$ ต่อมาพิจารณา $\left\langle r^{(1)},v^{(1)}\right\rangle_A=(r^{(1)})^T Av^{(1)}=\dfrac{1}{t^{(1)}}\left\|r^{(1)}\right\|^2$ และ

$$\left\langle v^{(1)},v^{(1)}\right\rangle_A=(v^{(1)})^T Av^{(1)}=\frac{1}{t^{(1)}}((r^{(0)})^T r^{(0)}-(r^{(0)})^T r^{(1)})=\frac{1}{t^{(1)}}\left\|r^{(0)}\right\|^2$$

ดังนั้น $v^{(2)}=r^{(1)}+s^{(1)}v^{(1)}$ เมื่อ $s^{(1)}=-\left\|r^{(1)}\right\|^2/\left\|r^{(0)}\right\|^2$

ขั้นต่อมาเราจะปรับปรุง

$$x^{(2)}=x^{(1)}+t^{(2)}v^{(2)}=x^{(0)}+t^{(1)}v^{(1)}+t^{(2)}v^{(2)}=t^{(1)}v^{(1)}+t^{(2)}v^{(2)}$$

เราจะสร้างเวกเตอร์ส่วนตกค้างให้สอดคล้องกับสมการข้างต้นโดย $r^{(2)}=b-Ax^{(2)}=r^{(1)}-t^{(2)}Av^{(2)}$ จากนั้นหาค่า $t^{(2)}$โดยใช้สมบัติการตั้งฉากกันของ $r^{(1)}$ และ $r^{(2)}$

$$0=(r^{(1)})^T r^{(2)}=\left\|r^{(1)}\right\|^2-t^{(2)}(r^1)^T Av^{(2)}=\left\|r^{(1)}\right\|^2-t^{(2)}\left\langle v^{(2)},v^{(2)}\right\rangle_A$$

ดังนั้น $t^{(2)}=\left\|r^{(1)}\right\|^2/\left\langle v^{(2)},v^{(2)}\right\rangle_A$

สมมติให้ $t^{(2)}\neq 0$ เพราะถ้า $t^{(2)}=0$ นั่นคือ $r^{(1)}=0$ จะทำให้ $x^{(1)}$ เป็นค่าผลเฉลยจริง ทำเช่นนี้ต่อไปเรื่อยๆ จนตำแหน่งที่ k ซึ่งเราได้สร้างเวกเตอร์คอนจูเกต $v^{(1)},v^{(2)},\ldots,v^{(k)}$ และได้ประมาณค่าผลเฉลย $x^{(k)}$ แล้วจะได้สมการ $v^{(k+1)}=r^{(k)}+s^{(k)}v^{(k)}$ เมื่อ $s^{(k)}=\left\|r^{(k)}\right\|^2/\left\|r^{(k-1)}\right\|^2$ โดย $\left\langle v^{(i)},v^{(k)}\right\rangle_A=0$ สำหรับ $i<k$ และสามารถปรับปรุงผลเฉลยได้เป็น

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k+1)}v^{(k+1)}$$

เมื่อ $t^{(k+1)} = \left\|r^{(k)}\right\|^2 / \left\langle v^{(k+1)}, v^{(k+1)} \right\rangle_A$ และ $r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)} = r^{(k)} - t^{(k+1)}Av^{(k+1)}$ ขนาดของ $r^{(k+1)}$ ต้องมีค่าน้อยที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้และตั้งฉากกับ $r^{(k)}$ สำหรับทุก k

วิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์มีประสิทธิภาพการคำนวณสูงเมื่อเทียบกับวิธีอื่นๆ สามารถใช้ได้กับค่าเริ่มต้น $x^{(0)}$ ใดๆ การประมาณค่าผลเฉลย $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots$ ไปจนถึงค่าผลเฉลยที่ถูกต้อง และเข้าสู้ผลเฉลยที่ถูกต้องในการทำซ้ำเพียง n ครั้งหากระบบสมการนั้นประกอบด้วย n สมการ ซึ่งอัตราการลู่เข้าของวิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์ ขึ้นอยู่กับตัวเลขสภาวะ (condition number) ของเมทริกซ์ A นั้นคือ ถ้าค่าตัวเลขสภาวะของเมทริกซ์ A มีค่ามากจะทำให้อัตราการลู่เข้าสู่ค่าผลเฉลยจริงช้าลง และค่าผลเฉลยที่ได้จะเป็นผลเฉลยที่ถูกต้องเพราะ $r^{(n)} = b - Ax^{(n)}$ ตั้งฉากกับทุกเวกเตอร์ $v^{(1)}, v^{(2)}, \ldots, v^{(n)}$ ดังนั้น $r^{(n)} = 0$ นั่นคือ $x^{(n)} = x^*$

6.2 ขั้นตอนวิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์และตัวอย่างการคำนวณ

จากการพิจารณาในหัวข้อ 6.1 เราได้ขั้นตอนวิธีดังนี้

ขั้นตอนวิธีที่ 6.1 วิธีคอนจูเกตเกรเดียนต์

1. กำหนดเวกเตอร์เริ่มต้น $x^{(0)}$ แล้วคำนวณเวกเตอร์ส่วนตกค้าง $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ และเวกเตอร์เกรเดียนต์ $v^{(0)} = r^{(0)}$

2. สำหรับ $k = 0,1,\ldots$ จนกระทั่งเริ่มลู่เข้าสู้คำตอบเมื่อเวกเตอร์ส่วนตกค้าง $r^{(k+1)}$ มีค่าต่ำสุด จากนั้นเข้าสู่กระบวนการทำซ้ำ $t^{(k)} = \left\|r^{(k-1)}\right\|^2 / \left\langle v^{(k)}, v^{(k)} \right\rangle_A$ เมื่อ $t^{(k)}$ คือค่าสเกลาร์แสดงทิศทางการลู่เข้าสู่คำตอบโดยที่มีเงื่อนไขจำเป็นคือ $\left\langle r^{(k)}, r^{(k-1)} \right\rangle = 0$ สำหรับทุก k

3. คำนวณค่า $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k+1)}v^{(k+1)}$

4. หาเวกเตอร์ส่วนตกค้าง $r^{(k+1)} = r^{(k)} - t^{(k+1)}Av^{(k+1)}$ หากค่า $r^{(k+1)}$ ครบกำหนดตามเงื่อนไขแล้วให้จบการคำนวณ

5. หากยังไม่เป็นจริงให้คำนวณต่อไป $v^{(k+1)} = r^{(k)} + s_k v^{(k)}$, $s_k = \left\|r^{(k)}\right\|^2 / \left\|r^{(k-1)}\right\|^2$, จะ $k := k+1$ สิ้นสุดกระบวนการทำซ้ำโดยผลเฉลยที่ได้คือ $x^{(k+1)}$

ทฤษฎีบทที่ 6.1 ให้ $A \in M_n(\mathbb{R})$ และ $b \in \mathbb{R}^n$ สมมติว่า A เป็นเมทริกซ์สมมาตรที่เป็นบวกแน่นอน เมื่อเราใช้ขั้นตอนวิธีที่ 6.1 จะได้ว่า

1) $\{r^{(1)}, \ldots, r^{(n)}\}$ เป็นฐานหลักเชิงตั้งฉากเทียบกับผลคูณภายในแบบปรกติบน $\mathbb{R}^n$
2) $\{v^{(1)}, \ldots, v^{(n)}\}$ เป็นฐานหลักเชิงตั้งฉากเทียบกับผลคูณภายในบน $\mathbb{R}^n$ ที่นิยามโดย (10)
3) $\left\|x^* - x^{(k+1)}\right\|_A \le \left\|x^* - x^{(k)}\right\|_A$ สำหรับทุก $1 \le k \le n$
4) $x^{(n)} = x^*$

ตัวอย่างที่ 6.1 พิจารณาระบบสมการเชิงเส้น $Ax=b$ เมื่อ

$$A=\begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad b=\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

ระบบสมการนี้มีผลเฉลยจริงคือ $x^*=\begin{bmatrix}2 & 5 & -6\end{bmatrix}^T$ และกำหนดเวกเตอร์เริ่มต้น $x^{(0)}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\end{bmatrix}^T$ จะได้เวกเตอร์ส่วนตกค้าง $r^{(0)}=b-Ax^{(0)}=\begin{bmatrix}1 & 2 & -1\end{bmatrix}^T$ และเวกเตอร์คอนจูเกตบอกทิศทางตัวแรกคือ $v^{(1)}=r^{(0)}=\begin{bmatrix}1 & 2 & -1\end{bmatrix}^T$ ดังนั้น

$$x^{(1)}=x^{(0)}+\frac{\left\|r^{(0)}\right\|^2}{\left\langle v^{(1)},v^{(1)}\right\rangle_A}v^{(1)}=\tfrac{3}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

ในลำดับต่อไปเราจะคำนวณเวกเตอร์ส่วนตกค้าง $r^{(1)}$ ที่สอดคล้องกับ $x^{(1)}$ และเวกเตอร์คอน-จูเกตบอกทิศทาง $v^{(2)}$

$$r^{(1)}=b-Ax^{(1)}=-\tfrac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 5 \end{bmatrix} \text{ และ } v^{(2)}=r^{(1)}+\frac{\left\|r^{(1)}\right\|^2}{\left\|r^{(0)}\right\|^2}v^{(1)}=\tfrac{3}{4}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -5 \end{bmatrix}$$

เมื่อได้ค่า $v^{(2)}$ สังเกตว่า $\left\langle v^{(1)},v^{(2)}\right\rangle_A=(v^{(1)})^T Av^{(2)}=0$ จะได้ว่า

$$x^{(2)}=x^{(1)}+\frac{\left\|r^{(1)}\right\|^2}{\left\langle v^{(2)},v^{(2)}\right\rangle_A}v^{(2)}=\tfrac{1}{3}\begin{bmatrix} 7 \\ 14 \\ -17 \end{bmatrix}$$

เนื่องจากเราสนใจเมทริกซ์ขนาด 3×3 ขั้นตอนนี้จึงเป็นขั้นตอนสุดท้ายและเราจะได้ค่าผลเฉลยจริง เริ่มจากคำนวณค่า $r^{(2)}=b-Ax^{(2)}=\begin{bmatrix}\frac{-4}{3} & \frac{2}{3} & 0\end{bmatrix}^T$ เวกเตอร์คอนจูเกตบอกทิศทางตัวสุดท้ายสำหรับระบบสมการนี้คือ

$$v^{(3)}=r^{(2)}+\frac{\left\|r^{(2)}\right\|^2}{\left\|r^{(1)}\right\|^2}v^{(2)}=\tfrac{10}{9}\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

ดังนั้น ค่าผลเฉลยคือ $x^{(3)}=x^{(2)}+\frac{\left\|r^{(2)}\right\|^2}{\left\langle v^{(3)},v^{(3)}\right\rangle_A}v^{(3)}=\begin{bmatrix} 2 \\ 5 \\ -6 \end{bmatrix}$

เอกสารอ้างอิง

1. Paige, C., & Saunders, M. (1975). Solution of sparse indefinite systems of linear equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis,* 12: 617-629.
2. Fletcher, R., & Watson, G. A. (1976). Conjugate gradient methods for indefinite systems. Numerical Analysis. *Lecture Notes in Mathematics.* pp. 73-89. Springer Berlin Heidelberg.
3. Saad, Y., & Schultz, M. H. (1986). A Generalize minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear system. *Society for Industrial and Applied Mathematics, 7:* 856-869.
4. Olver, P. J., & Shakiban, C. (2006). *Applied Linear Algebra.* Upper Saddle River, USA: Pearson Education.
5. Hadjidimos, A. (1978). Accelerated overrelaxation method. *Math. Comp,* 32: 149-157.
6. Jacobi, C. G. J. (1845). Ueber eine neue Auflsungsart der bei der Methode der kleinsten Quadrate vorkommenden lineren Gleichungen, *Astronomische Nachrichten,* 22(20): 297-306.
7. Yousef, S. (2003). *Iterative Methods for Sparse Linear Systems,* 2nd ed. USA.
8. Xiang, Y., & Rajat, M. (2014). Acceleration of the Jacobi iterative method by factors exceeding 100 using scheduled relaxation, *Journal of Computational Physics,* 274: 695-708.
9. Adsuara, J. E., Cordero-Carrión, I., Cerdá-Durán, P., & Aloy, A. M. (2015). Scheduled Relaxation Jacobi method improvements and applications. *Journal of Computational Physics,* 321: 369-413.
10. Gauss, C. F. (1809). Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium, Perthes and Besser.
11. Liebmann, H. Die angen aherte Ermittlung harmonischer Funktionenund konformer Abbildungen, Sitzgsber, bayer, Akad, Wiss. (1918). *Mathematisch-Physikalische Klasse,* pp. 385-416.
12. Varga, R. S. (2000). *Matrix Iterative Analysis.* New York, USA: Springer.
13. Ostrowski, A. M. (1954). On the linear iteration procedures for symmetric matrices. *Rendiconti di Matematica e delle sue Applicazioni,* 14: 140-163.
14. Reich, E. (1949). On the convergence of the classical iterative procedures for symmetric matrices. *The Annual of Mathematical Statistics,* 20: 448-451.
15. Ding, F., & Chen, T. (2005). *Iterative least squares solutions of coupled Sylvester matrix equation. Systems & Control Letters,* 54(2): 95-107.

16. Ding, F., & Chen, T. (2006). On iterative solutions of general coupled matrix equation, *SIAM Journal on Control and Optimization,* 44(6): 2269-2284.
17. Ding, F., Peter, X., & Ding, L. J. (2008). Iterative solutions of the generalized Sylvester matrix equations by using the hierarchical identification principle, *Applied Mathematics and Computation,* 197: 41-50.
18. Hestenes, M. R., & Stiefel, E. (1952). Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards,* 49.