บทที่ 5
การแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์

วิธีดั้งเดิมที่นิยมใช้กันในการแก้ระบบสมการเชิงเส้นขนาดใหญ่ คือ ระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์ (Gauss elimination method) ซึ่งเป็นระเบียบวิธีโดยตรง (direct method) และเป็นที่ยอมรับกันโดยทั่วไปว่าสามารถให้ผลลัพธ์ที่ถูกต้องแม่นยำ แต่เมื่อนำมาใช้ในการแก้ระบบสมการขนาดใหญ่ จะทำให้ต้องใช้เวลาในการคำนวณและหน่วยความจำเป็นจำนวนมาก ดังนั้นทางเลือกที่เป็นที่นิยมเพิ่มมากขึ้นในการแก้ระบบสมการเชิงเส้นขนาดใหญ่ คือ ระเบียบวิธีแบบทำซ้ำ (iterative method) ระเบียบวิธีดังกล่าวสามารถให้ผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องแม่นยำ อีกทั้งยังใช้เวลาในการคำนวณและหน่วยความจำไม่มากนัก จึงเหมาะแก่การนำมาใช้แก้ระบบสมการเชิงเส้นขนาดใหญ่

ในการวิเคราะห์ปัญหาการไหลแบบหนืดและไม่อัดตัวในครั้งนี้ จำเป็นต้องแก้ระบบสมการเชิงเส้นขนาดใหญ่ ดังนั้นจึงได้นำเอาระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ ซึ่งเป็นระเบียบวิธีแบบทำซ้ำ มาใช้แก้ระบบสมการดังกล่าว โดยในบทนี้จะกล่าวถึงหลักการของระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ โดยจะอธิบายเพื่อให้เกิดความเข้าใจอย่างเป็นขั้นเป็นตอน

ระบบสมการเชิงเส้นที่จะทำการแก้นั้นอยู่ในรูป

$$Ax = b \tag{5.1}$$

โดยที่ x เป็นเวคเตอร์ที่ไม่ทราบค่า, b เป็นเวคเตอร์ที่ทราบค่า, และ A เป็นเมตริกซ์สมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite*

5.1 ฟังก์ชันควอดราติก (quadratic function) [40,41]

ฟังก์ชันควอดราติกจะมีลักษณะดังสมการ (5.2)

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c \tag{5.2}$$

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

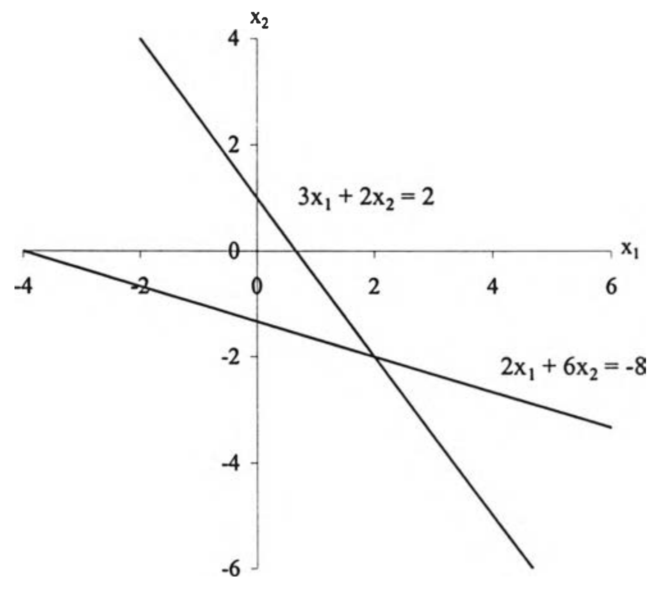
---

* เมตริกซ์ A จะมีคุณสมบัติ positive definite ก็ต่อเมื่อ $x^T Ax > 0$

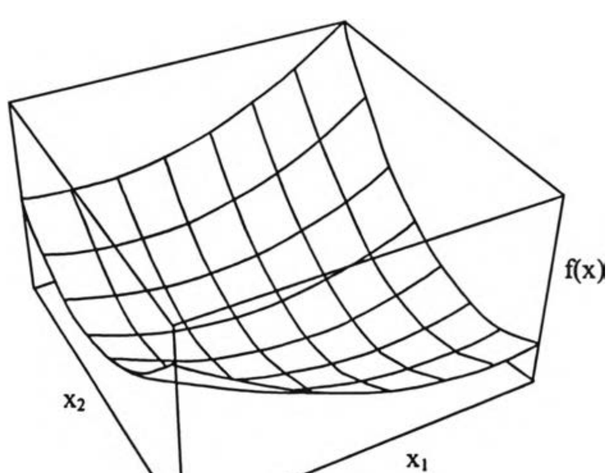
เพื่อให้ง่ายต่อการทำความเข้าใจ จะได้ยกตัวอย่างของปัญหาอย่างง่ายดังนี้

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{Bmatrix} 2 \\ -8 \end{Bmatrix}, \qquad c = 0.$$

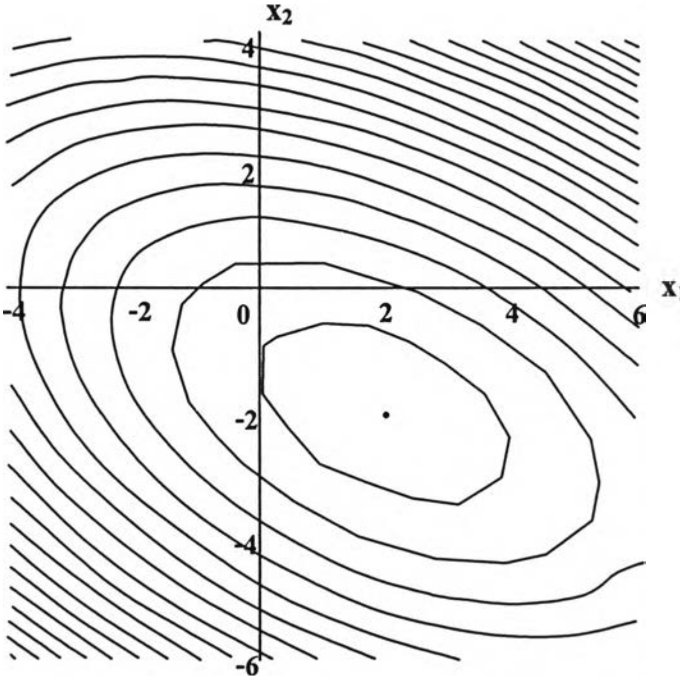
ระบบสมการ $Ax = b$ นี้สามารถแสดงได้ดังรูปที่ 5.1 และจุดคำตอบของระบบสมการดังกล่าว คือ $x = [2, -2]^T$ เนื่องจากเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติ positive definite กราฟของฟังก์ชันควอดราติกจะมีลักษณะเป็นรูปพาราโบลอยด์ดังแสดงในรูปที่ 5.2 ส่วนรูปที่ 5.3 แสดงกราฟเส้นโครงร่าง (contour plot) ของฟังก์ชัน f(x) โดยเส้นแต่ละเส้นแสดงถึงระดับของค่า f(x) ที่มีค่าเท่ากัน



รูปที่ 5.1 ตัวอย่างปัญหาที่เป็นระบบสมการสองตัวแปร



รูปที่ 5.2 กราฟของฟังก์ชันควอดราติก f(x)



รูปที่ 5.3 กราฟเส้นโครงร่างของฟังก์ชัน f(x)

การหาค่าต่ำสุดของฟังก์ชัน f(x) ทำได้โดยการหาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชัน f(x) เทียบกับ x แล้วกำหนดให้เท่ากับศูนย์

$$f'(x) = \frac{1}{2}A^T x + \frac{1}{2}Ax - b = 0 \tag{5.3}$$

เมื่อ A เป็นเมตริกซ์ที่สมมาตร จะทำให้สมการ (5.3) กลายมาเป็น

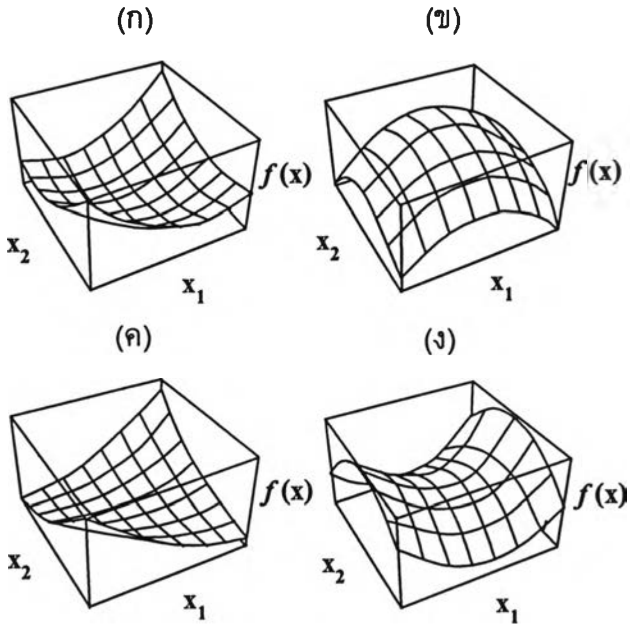
$$f'(x) = Ax - b = 0 \tag{5.4}$$

นั่นคือ การหาค่าต่ำสุดของฟังก์ชันควอดราติก จะเปรียบเสมือนเป็นการแก้ระบบสมการเชิงเส้นดังสมการที่ (5.1)

เหตุผลที่เมื่อเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติ positive definite แล้ว สามารถให้ผลลัพธ์ที่น่าสนใจเช่นนี้ได้นั้น สามารถแสดงได้ดังนี้ เมื่อพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างฟังก์ชัน f(x) ที่จุด p ใดๆ กับจุดที่เป็นคำตอบของฟังก์ชันซึ่งคือจุด $x = A^{-1}b$ โดยกำหนดให้ความสัมพันธ์ของจุด p กับจุด x เป็นดังนี้ $p - x = e$ โดย e คือค่าความผิดพลาด และเมื่อเมตริกซ์ A เป็นเมตริกซ์ที่สมมาตร สมการ (5.2) สำหรับจุด p จะได้เป็น

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

ดังนั้นถ้า A มีคุณสมบัติ positive definite แล้ว เทอม $\frac{1}{2}e^T Ae$ จะมีค่าเป็นบวก สำหรับทุกๆ ค่าของ e ที่ไม่เท่ากับศูนย์ ดังนั้นค่า x ซึ่งเป็นจุดคำตอบของฟังก์ชัน f(x) จะเป็นจุดที่ทำให้ค่า f(x) มีค่าต่ำสุด



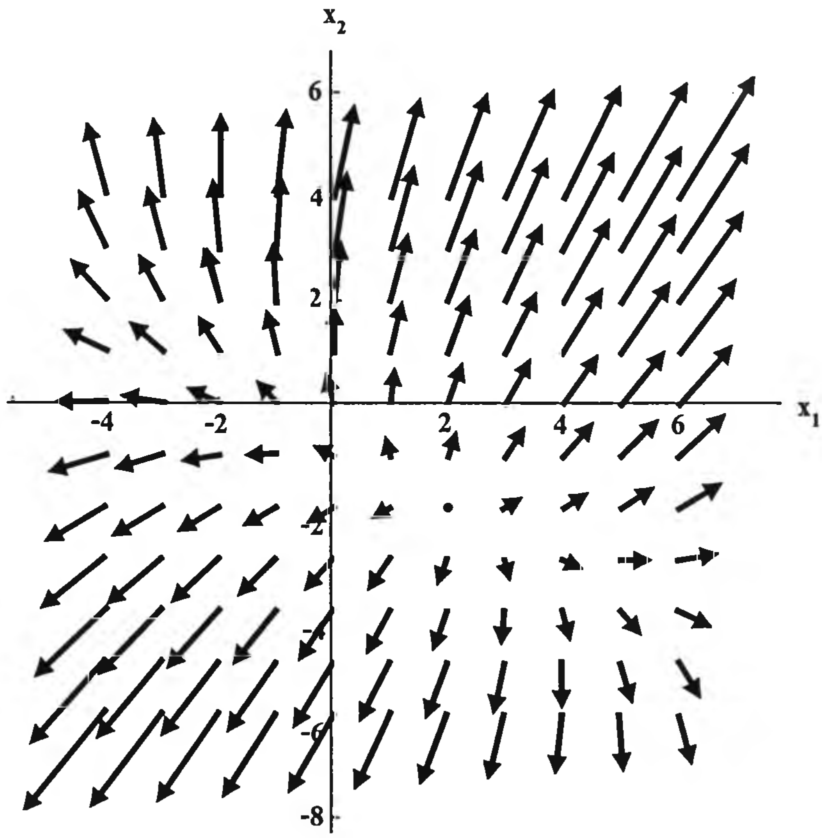
รูปที่ 5.4 กราฟของฟังก์ชันควอดราติก f(x) เมื่อเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติต่างๆ
(ก) เมื่อเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติ positive definite
(ข) เมื่อเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติ negative definite
(ค) เมื่อเมตริกซ์ A เป็น singular และมีคุณสมบัติ positive definite
(ง) เมื่อเมตริกซ์ A มีคุณสมบัติ indefinite

เนื่องด้วยระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์เป็นวิธีหนึ่งของระเบียบวิธีคอนจูเกตไดเร็คชั่น (conjugate direction method) ซึ่งวิธีดังกล่าวได้พัฒนามาจากระเบียบวิธีการลดลงมากที่สุด (steepest descent method) ดังนั้นจำเป็นต้องมีความเข้าใจระเบียบวิธีทั้งสองดังกล่าวก่อนที่จะศึกษาระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์

5.2 ระเบียบวิธีการลดลงมากที่สุด (steepest descent method) [40,42]

ระเบียบวิธีการลดลงมากที่สุดเป็นวิธีแก้ระบบสมการแบบทำซ้ำ โดยเริ่มจากการกำหนดจุดเริ่มต้นใดๆ $x_{(0)}$ แล้วเลื่อนจุดดังกล่าวลงไปสู่ก้นของพาราโบลอยด์ (bottom of the paraboloid) โดยจะทำเป็นขั้นๆ $x_{(1)}, x_{(2)}, \ldots$ จนกระทั่งจุดนั้นเข้าใกล้คำตอบ x ซึ่งในแต่ละขั้นจะเลือกทิศทางที่ทำให้จุดดังกล่าววิ่งเข้าสู่คำตอบได้เร็วที่สุด ดังนั้นทิศทางที่ใช้ก็จะอยู่ในแนวที่มีอัตราการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันควอดดราติก $(f'(x))$ มีค่ามากที่สุดตามตำแหน่งนั้นๆ

แต่อยู่ในทิศทางตรงกันข้าม จากสมการที่ 5.4 จะได้ $-f'(x_{(i)}) = b - Ax_{(i)}$ โดยรูปที่ 5.5 แสดงให้เห็นถึงทิศทางของการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชัน $f(x)$ ตามตำแหน่งต่างๆ



รูปที่ 5.5 แสดงเวคเตอร์ที่บอกถึงการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันควอดราติกที่มากที่สุดตามตำแหน่งต่างๆ

กำหนดให้ค่าความผิดพลาด (error) $e_{(i)} = x_{(i)} - x$ เป็นตัวบ่งชี้ว่าจุดที่กำลังพิจารณาอยู่นั้นไกลจากจุดคำตอบแค่ไหน และค่าเศษตกค้าง (residual) $r_{(i)} = b - Ax_{(i)}$ เป็นค่าที่ใช้บอกว่าอยู่ไกลจากค่า b แค่ไหน ดังนั้นจึงเป็นการง่ายที่จะมองค่า $r_{(i)} = -Ae_{(i)}$ และที่สำคัญกว่านั้น คือ $r_{(i)} = -f'(x_{(i)})$ ซึ่งให้ความหมายว่าค่าเศษตกค้างจะอยู่ในทิศทางของการลดลงมากที่สุด (steepest descent)

สมมติว่ากำหนดจุดเริ่มต้นที่จุด $x_{(0)} = [-2, 2]^T$ การเลือกตำแหน่งของจุดถัดไปจะต้องวางตัวอยู่ในแนวทิศทางที่มีการลดลงมากที่สุด ซึ่งแสดงได้ดังเส้นตรงในรูป 5.5ก หรืออธิบายได้ว่าจุดที่เลือกจุดต่อไปคือ

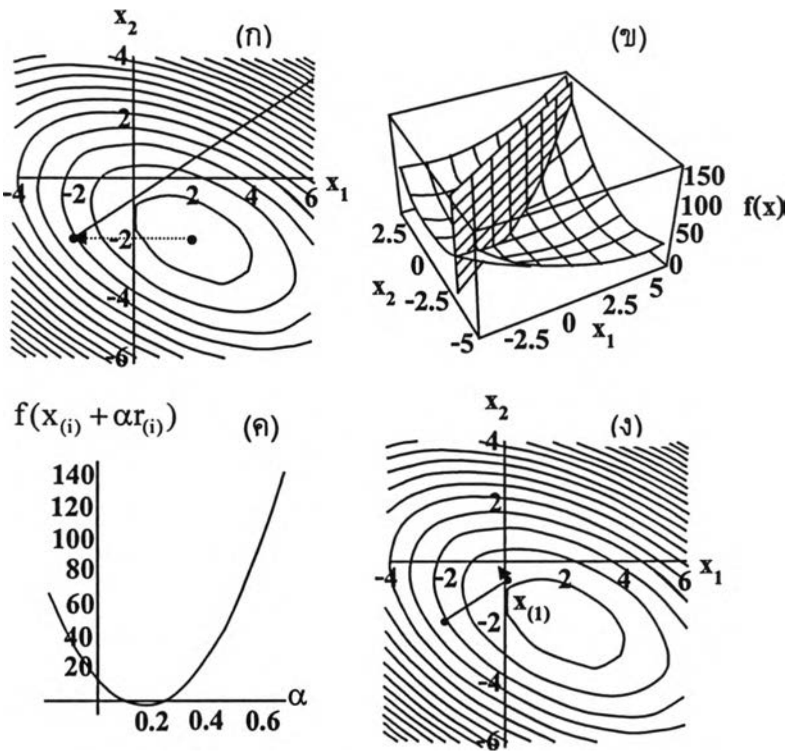
$$x_{(1)} = x_{(0)} + \alpha r_{(0)} \tag{5.5}$$

คราวนี้จุดใหม่ที่เกิดขึ้นควรจะอยู่ห่างจากจุดเดิมเท่าไร รูปที่ 5.6ข จะอธิบายถึงการหาจุดใหม่นี้ โดยกำหนดว่าจะต้องเลือกจุดใหม่ให้อยู่ในแนวการตัดกันของระนาบในแนวดิ่ง ซึ่งมีทิศทางเดียวกับเส้นตรงในรูป 5.5ก กับพาลาโบลอยด์ ส่วนรูปที่ 5.6ค แสดงถึงรูปพาลาโบลาที่เป็นแนวการ

ตัดกันของพื้นผิวทั้งสอง จะเห็นได้ว่าจุดใหม่นี้ควรจะอยู่ในตำแหน่งที่ต่ำสุดของพาลาโบล่านี้เอง นั่นคือต้องหาค่า α ที่ทำให้ค่าฟังก์ชัน $f(x)$ มีค่าต่ำที่สุดในแนวเส้นตรงในสมการ (5.5) จากพื้นฐานของแคลคูลัส ค่า α ที่ทำให้ค่า $f(x)$ มีค่าต่ำที่สุดสามารถหาได้จากการหาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชัน $f(x)$ เทียบกับค่า α แล้วให้เท่ากับศูนย์

$$\frac{d}{d\alpha} f(x_{(i+1)}) = f'(x_{(i+1)})^T \frac{d}{d\alpha} x_{(i+1)} = f'(x_{(i+1)})^T r_{(i)} = 0 \tag{5.6}$$

การหาค่า α ควรจะเลือกตำแหน่งที่ค่า $r_{(i)}$ และค่า $f'(x_{(i+1)})$ ตั้งฉากกัน ดังในรูปที่ 5.6ง เหตุผลที่ $r_{(i)}$ จะต้องตั้งฉากกับ $f'(x_{(i+1)})$ ถึงจะได้ค่า $f(x)$ ต่ำสุดในแนวเส้นตรงนี้ สามารถแสดงให้เห็นได้ดังในรูปที่ 5.7 ซึ่งแสดงให้เห็นถึงค่าเวคเตอร์ของความชันที่ตำแหน่งต่างๆ บนเส้นตรงนี้ โดยจะเห็นว่าที่ตำแหน่งที่ $r_{(i)}$ ตั้งฉากกับ $f'(x_{(i+1)})$ จะไม่มีการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชัน $f(x)$ หรือกล่าวอีกนัยหนึ่งว่าตำแหน่งดังกล่าวเป็นตำแหน่งต่ำสุดของฟังก์ชัน $f(x)$ บนเส้นตรงนี้



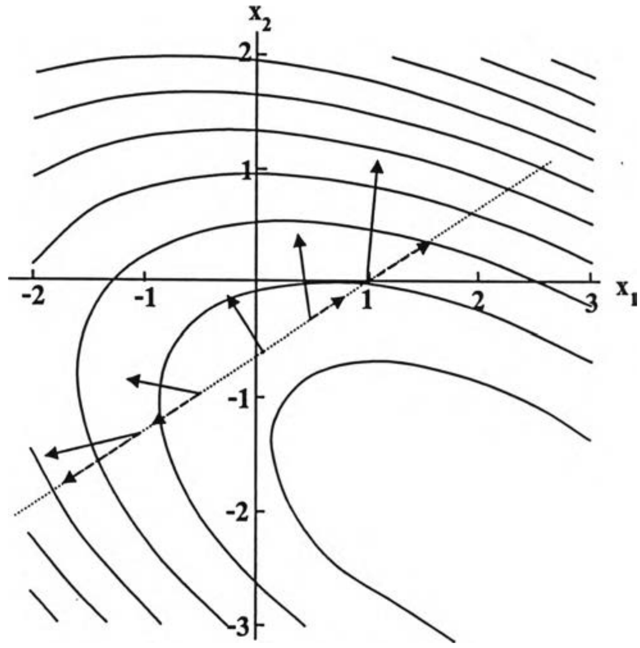
รูปที่ 5.6 แสดงถึงระเบียบวิธีการลดลงมากที่สุด

(ก) จากจุดเริ่มต้น $[-2, 2]^T$ หาตำแหน่งของจุดต่อไปซึ่งอยู่ในแนวทิศทางที่มีการลดลงมากที่สุด

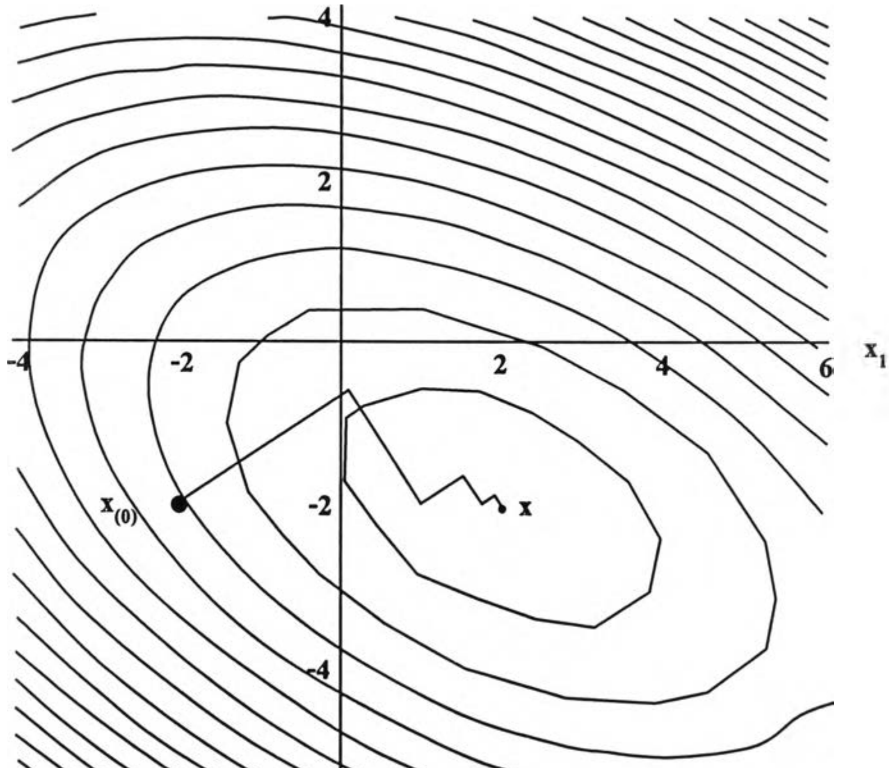
(ข) การหาจุดที่อยู่บนแนวการตัดกันระหว่างพื้นผิวสองผิว

(ค) พาลาโบลาแสดงถึงแนวการตัดกันระหว่างพื้นผิวทั้งสอง

(ง) แสดงถึงเวคเตอร์การเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันควอดราติกครั้งที่ i+1 จะมีทิศทางตั้งฉากกับกับครั้งที่ i



รูปที่ 5.7 การเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันตามตำแหน่งต่าง ๆ ที่อยู่บนแนวการวิ่งเข้าสู่คำตอบ



รูปที่ 5.8 ลักษณะการวิ่งเข้าสู่คำตอบของระเบียบวิธีการลดลงมากที่สุด

ดังนั้นการหาค่า α สามารถแสดงได้ดังนี้

จาก $f'(x_{(i)})r_{(i)} = 0$

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

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

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

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

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

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

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

$$\alpha = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{r_{(i)}^T A r_{(i)}} \tag{5.7}$$

กล่าวโดยสรุปของวิธีการลดลงมากที่สุด จะประกอบไปด้วย

$$r_{(i)} = b - Ax_{(i)} \quad (5.8ก)$$

$$\alpha = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{r_{(i)}^T A r_{(i)}} \quad (5.8ข)$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha r_{(i)} \quad (5.8ค)$$

จากสมการ (5.8ก-ค) จะเห็นว่าจะต้องหาผลคูณระหว่างเมตริกซ์ A กับเวคเตอร์ $x_{(i)}$ และผลคูณระหว่างเมตริกซ์ A กับเวคเตอร์ $r_{(i)}$ ในแต่ละรอบของการคำนวณ ดังนั้นเวลาที่ใช้ส่วนใหญ่จะเสียให้กับการคูณเมตริกซ์กับเวคเตอร์ แต่วิธีการดังกล่าวจะสามารถทำให้ประหยัดเวลาในการคำนวณลงได้โดยจะไม่ใช้สมการ (5.8ก) แต่จะหาสมการใหม่มาใช้เพื่อหาค่า $r_{(i)}$ ทำโดยนำสมการ (5.8ค) มาคูณกับเมตริกซ์ $-A$ และบวกด้วย b ทำให้ได้

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

$$r_{(i+1)} = b - Ax_{(i)} - \alpha_{(i)} A r_{(i)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)} A r_{(i)} \tag{5.9}$$

ดังนั้นระเบียบวิธีการลดลงมากที่สุด จะใช้สมการดังนี้

$$r_{(i+1)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)} A r_{(i)} \quad (5.10ก)$$

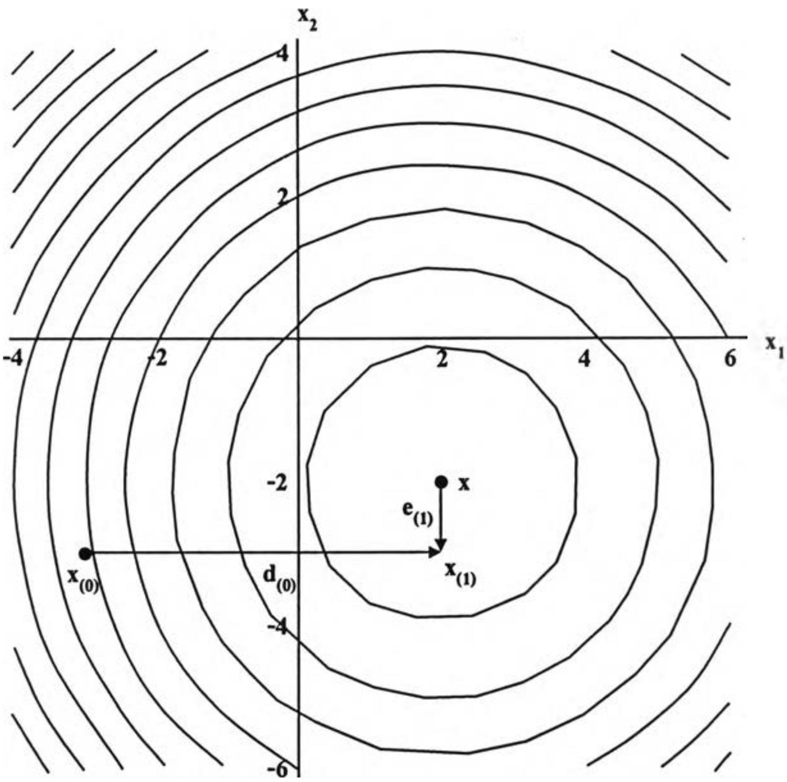
$$\alpha = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{r_{(i)}^T A r_{(i)}} \quad (5.10ข)$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha r_{(i)} \quad (5.10ค)$$

จะเห็นว่าสมการ (5.10ก-ค) ดังกล่าว การคูณระหว่างเมตริกซ์กับเวคเตอร์เหลือเพียงครั้งเดียวในแต่ละรอบการคำนวณ คือ เหลือเพียงการคูณระหว่างเมตริกซ์ A กับเวคเตอร์ $r_{(i)}$ เท่านั้นทำให้ประหยัดเวลาในการคำนวณมากขึ้น

5.3 ระเบียบวิธีคอนจูเกตไดเรคชัน (conjugate direction method) [40,43]

เนื่องจากระเบียบวิธีการลดลงมากที่สุดนั้น แต่ละขั้นตอนของการวิ่งเข้าสู่คำตอบจะวิ่งเป็นขั้นบันได ซึ่งทิศทางการวิ่งจะซ้ำอยู่กับแนวเดิมในขั้นก่อนๆ ดังรูปที่ 5.8 จากข้อสังเกตนี้จึงทำให้เกิดแนวความคิดใหม่ คือ การสร้างชุดของเวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอกทิศทางของการวิ่งเข้าสู่คำตอบ (set of search direction) $d_{(0)}, d_{(1)}, \ldots, d_{(n-1)}$ โดยเวคเตอร์หนึ่งตัวจะใช้สำหรับการวิ่งเข้าสู่คำตอบเพียงครั้งเดียวเท่านั้น ซึ่งจะสามารถวิ่งเข้าสู่คำตอบได้ภายใน n ขั้น



รูปที่ 5.9 แนวคิดเริ่มต้นของวิธีคอนจูเกตไดเรคชัน

รูปที่ 5.9 ได้แสดงถึงแนวคิดดังกล่าว โดยใช้แกน x_1 และ x_2 เป็นทิศทางการวิ่งเข้าสู่คำตอบ ขั้นแรกเริ่มจากในแนวแกน x_1 โดยวิ่งไปที่ค่า x_1 ที่ถูกต้อง ขั้นต่อไปวิ่งไปในแนวแกน x_2 เข้าสู่คำตอบ จะสังเกตเห็นว่า ค่า $e_{(1)}$ จะตั้งฉากกับ $d_{(0)}$ ดังนั้นสำหรับแต่ละขั้นจะเลือกจุดจาก

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha d_{(i)} \tag{5.11}$$

และค่าความผิดพลาด

$$\begin{aligned} e_{(i+1)} &= x_{(i+1)} - x \\ &= x_{(i)} + \alpha_{(i)} d_{(i)} - x \\ &= (x_{(i)} - x) + \alpha_{(i)} d_{(i)} \\ &= e_{(i)} + \alpha_{(i)} d_{(i)} \end{aligned} \tag{5.12}$$

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

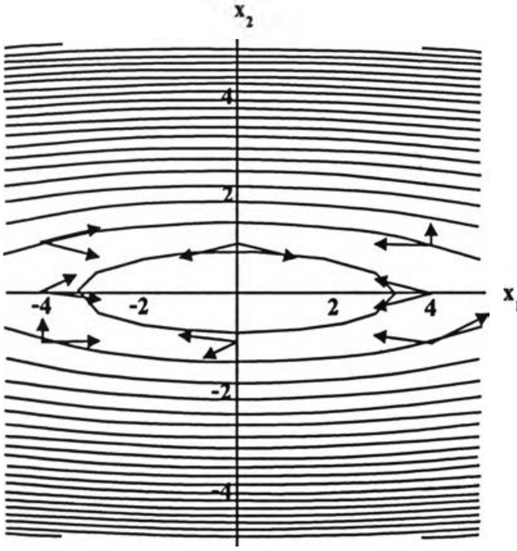
$$d_{(i)}^T e_{(i+1)} = 0$$
$$d_{(i)}^T (e_{(i)} + \alpha_{(i)} d_{(i)}) = 0$$
$$\alpha_{(i)} = -\frac{d_{(i)}^T e_{(i)}}{d_{(i)}^T d_{(i)}} \tag{5.13}$$

จากสมการ (5.13) จะเห็นว่าไม่สามารถที่จะคำนวณค่า $\alpha_{(i)}$ ได้เลย เพราะต้องทราบค่า $e_{(i)}$ ก่อน แต่การหาค่า $e_{(i)}$ นั้นจะทำได้ก็ต่อเมื่อรู้ค่าคำตอบของระบบสมการอยู่แล้ว

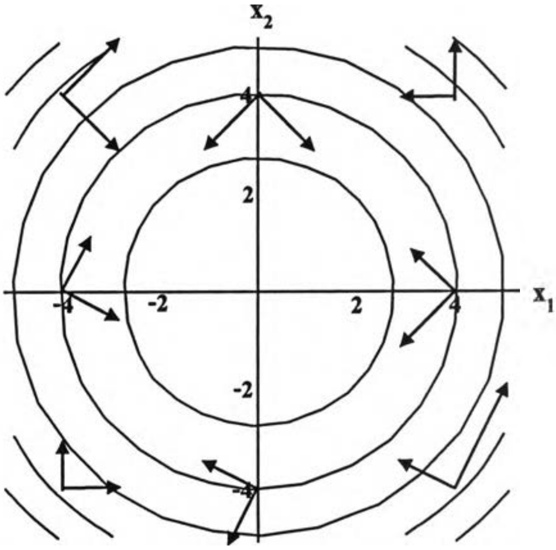
ดังนั้นจึงเลือกใช้ทิศทางที่วิ่งเข้าสู่คำตอบมีคุณสมบัติ A-orthogonal แทนที่จะใช้คุณสมบัติเชิงตั้งฉาก (orthogonal) โดยเวคเตอร์ $d_{(i)}$ และ $d_{(j)}$ จะมีคุณสมบัติ A-orthogonal หรือเรียกว่ามีคุณสมบัติคอนจูเกต (conjugate) ถ้า

$$d_{(i)}^T A d_{(j)} = 0 \qquad i \neq j \tag{5.14}$$

รูปที่ 5.10ก แสดงลักษณะทางกายภาพของคุณสมบัติ A-orthogonal โดยให้ลองสมมติว่าเวคเตอร์ดังกล่าวถูกเขียนอยู่บนแผ่นยาง เมื่อทำการยืดปลายทั้งสองของแผ่นยางออกจนกระทั่งรูปวงรีที่เห็นอยู่กลายเป็นรูปวงกลม จะเห็นเวคเตอร์ดังกล่าวตั้งฉากกันดังแสดงในรูปที่ 5.10ข



(ก)



(ข)

รูปที่ 5.10 คู่ของเวคเตอร์ที่มีคุณสมบัติ A-orthogonal

ดังนั้นคุณสมบัติที่ต้องการของระเบียบวิธีคอนจูเกตไดเรคชันก็คือ เวคเตอร์ $e_{(i+1)}$ จะต้องมีคุณสมบัติ A-orthogonal กับเวคเตอร์ $d_{(i)}$ ดังรูปที่ 5.11ก สิ่งที่ต้องการต่อไปคือ จะต้องหาตำแหน่งต่ำสุดของฟังก์ชัน $f(x)$ ตามแนวของการวิ่งเข้าสู่คำตอบ $d_{(i)}$ ซึ่งใช้หลักการเดียวกันกับที่ใช้ในระเบียบวิธี steepest descent คือ หาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชัน $f(x)$ เทียบกับ α แล้วให้เท่ากับศูนย์

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

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

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

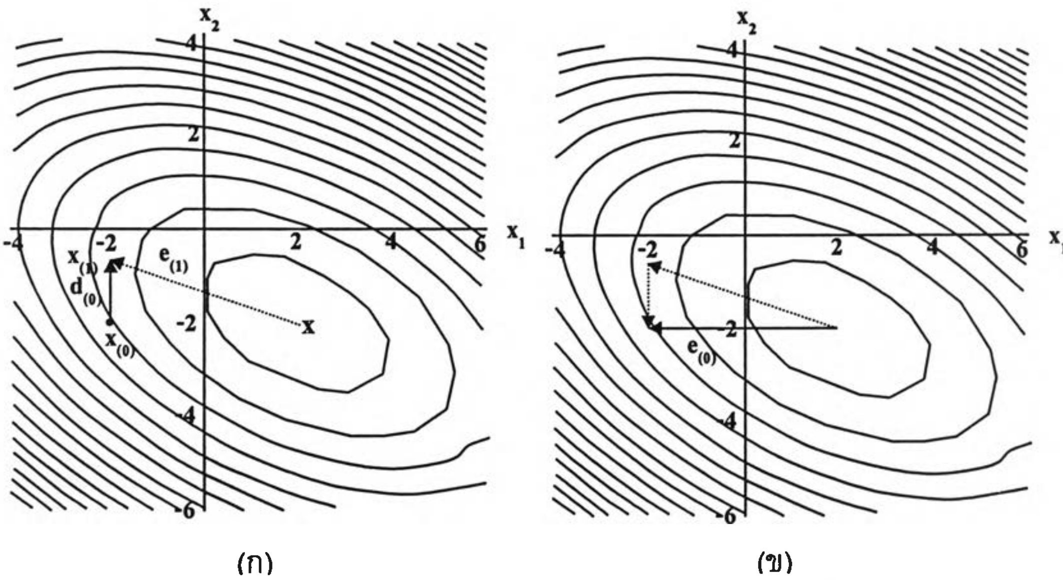
$$d_{(i)} A e_{(i+1)} = 0$$

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

$$\alpha = -\frac{d_{(i)}^T A e_{(i)}}{d_{(i)}^T A d_{(i)}} \tag{5.15}$$

$$\alpha = \frac{d_{(i)}^T r_{(i)}}{d_{(i)}^T A d_{(i)}} \tag{5.16}$$

จากสมการ (5.16) จะเห็นว่าสามารถหาค่า α ได้โดยไม่ต้องรู้ค่า $e_{(i)}$ ซึ่งต่างจากสมการ (5.13)



รูปที่ 5.11 ระเบียบวิธีคอนจูเกตไดเรคชันที่ใช้จำนวนรอบการวิ่งเข้า n รอบ

(ก) แสดงขั้นตอนแรกของระเบียบวิธีคอนจูเกตไดเรคชันโดยมีจุดเริ่มต้นที่จุด $x_{(0)}$ แล้วเลื่อนจุดดังกล่าวไปในทิศทางของเวคเตอร์ $d_{(0)}$ จนกระทั่งถึงจุดต่ำสุดคือจุด $x_{(1)}$ ซึ่งมีข้อกำหนดว่า ตำแหน่งของจุด $x_{(1)}$ จะต้องทำให้เวคเตอร์ $e_{(1)}$ มีคุณสมบัติ A-orthogonal กับเวคเตอร์ $d_{(0)}$

(ข) เวคเตอร์ค่าความคลาดเคลื่อน $e_{(0)}$ เกิดจากการรวมกันของเวคเตอร์ที่มีคุณสมบัติ A-orthogonal กัน (เวคเตอร์ที่เป็นเส้นประ)

ต่อไปจะแสดงให้เห็นว่าวิธีดังกล่าวสามารถนำไปสู่คำตอบที่ถูกต้องได้ใน n ขั้นของการคำนวณ โดยค่าความผิดพลาดสามารถเขียนอยู่ในรูปของผลบวกเชิงเส้น (linear combination)

$$e_{(0)} = \sum_{j=0}^{n-1} \delta_{(j)} d_{(i)} \tag{5.17}$$

การหาค่า δ_i สามารถหาได้จากเทคนิคทางคณิตศาสตร์ดังนี้ คือ นำเอา $d_k^T A$ มาคูณกับสมการ (5.17) จะได้

$$\begin{aligned}
d_{(k)}^T A e_{(0)} &= \sum_j \delta_{(j)} d_{(k)}^T A d_{(j)} \\
d_{(k)}^T A e_{(0)} &= \delta_{(k)} d_{(k)}^T A d_k \\
\delta_{(k)} &= \frac{d_{(k)}^T A e_{(0)}}{d_{(k)}^T A d_{(k)}} \\
\delta_{(k)} &= \frac{\left[d_{(k)}^T A (e_{(0)} + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_{(i)} d_{(i)}) \right]}{d_{(k)}^T A d_{(k)}} \\
\delta_{(k)} &= \frac{d_{(k)}^T A e_{(k)}}{d_{(k)}^T A d_{(k)}}
\end{aligned} \tag{5.18}$$

จากสมการ (5.15) และ (5.18) จะเห็นว่า $\alpha_{(i)} = -\delta_{(k)}$ จากสมการ (5.12) ค่าความผิดพลาดในขั้นที่ i ใด ๆ เราสามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$\begin{aligned}
e_{(i)} &= e_{(0)} + \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_{(j)} d_{(j)} \\
&= \sum_{j=0}^{n-1} \delta_{(j)} d_{(j)} - \sum_{j=0}^{i-1} \delta_{(j)} d_{(j)} \\
&= \sum_{j=i}^{n-1} \delta_{(j)} d_{(j)}
\end{aligned} \tag{5.19}$$

จากสมการ (5.19) จะเห็นว่าหลังจากทำการคำนวณครบ n ขั้นแล้ว $e_{(n)} = 0$ ซึ่งแสดงให้เห็นว่าวิธีคอนจูเกตไดเรคชันสามารถให้คำตอบที่ถูกต้องได้โดยการคำนวณแบบทำซ้ำ n ขั้น

ต่อไปจะมาดูว่าเวคเตอร์ $d_{(i)}$ ที่มีคุณสมบัติ A-orthogonal ดังที่ได้กล่าวไปแล้วนั้นสามารถหามาได้อย่างไร เวคเตอร์ $d_{(i)}$ สามารถหามาได้โดยการใช้ขบวนการที่เรียกว่า Gram-Schmidt process ขบวนการดังกล่าวทำโดยการสมมติว่ามีเวคเตอร์อยู่ชุดหนึ่ง คือ $u_0, u_1, \ldots, u_{n-1}$ ซึ่งเป็นอิสระเชิงเส้นต่อกัน การสร้างเวคเตอร์ $d_{(i)}$ ทำโดยนำเอาเวคเตอร์ $u_{(i)}$ มาลบส่วนที่ไม่มีคุณสมบัติ A-orthogonal กับเวคเตอร์ d ตัวก่อนหน้า ดังแสดงในรูปที่ 5.12 หรืออีกนัยหนึ่ง ถ้าเขียนให้อยู่ในรูปสมการสามารถทำได้โดยการกำหนดให้ $d_{(0)} = u_{(0)}$ และสำหรับ $i > 0$ กำหนดให้

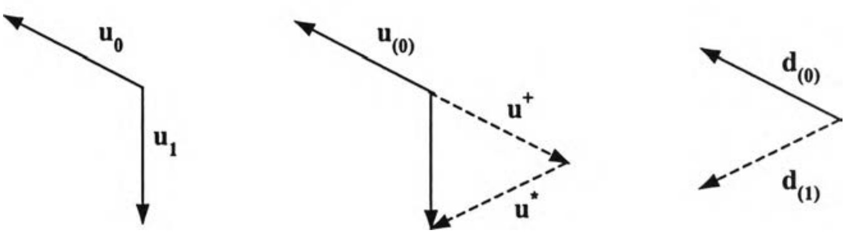
$$d_{(i)} = u_{(i)} + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} d_{(k)} \qquad (5.20)$$

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

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

$$0 = u_i^T A d_{(j)} + \beta_{ij} d_{(j)}^T A d_{(j)} \qquad i > j \qquad (5.21)$$

$$\beta_{ij} = -\frac{u_i^T A d_{(j)}}{d_{(j)}^T A d_{(j)}} \qquad (5.22)$$



รูปที่ 5.12 Gram-Schmidt process

คุณสมบัติสำคัญอีกอย่างที่สามารถเห็นได้ คือ จะเห็นว่าในแต่ละขั้นของการวิ่งเข้าสู่คำตอบระนาบ $x_{(0)} + D_i$ จะสัมผัสกับวงรีที่ $x_{(i)}$ อยู่ และจากหัวข้อ 5.2 ทราบว่าค่าเศษตกค้าง ($r_{(i)}$) ที่ตำแหน่งใด ๆ จะตั้งฉากกับผิววงรีที่ตำแหน่งนั้น ทำให้ $r_{(i)}$ ตั้งฉากกับ D_i ด้วย ซึ่งสามารถพิสูจน์ได้จากสมการ (5.19) ดังนี้ คือ คูณสมการ (5.19) ด้วย $-d_{(i)}^T A$

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

$$d_{(i)}^T r_{(j)} = 0 \qquad (i < j) \qquad (5.23)$$

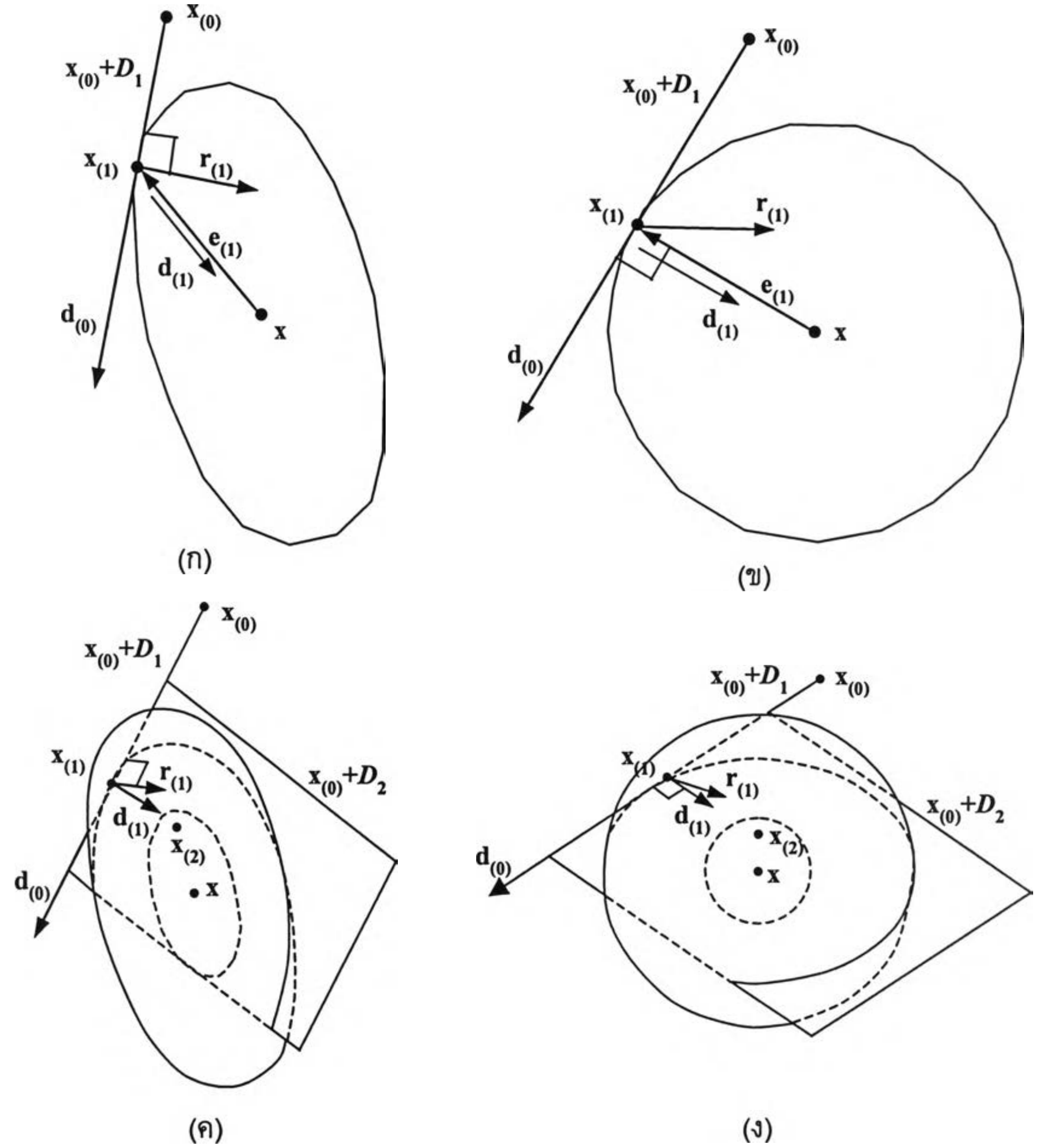
จากคุณสมบัติในสมการ (5.23) และเพราะว่าเวคเตอร์ที่ใช้ปงบอกทิศทางการวิ่งเข้าสู่คำตอบ $d_{(i)}$ ถูกสร้างขึ้นมาจากชุดของเวคเตอร์ u และค่าเศษตกค้าง $r_{(i)}$ ตั้งฉากกับ D_i จากสมการ (5.20) จะได้

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

$$0 = u_{(i)}^T r_{(j)} \qquad (i < j) \qquad (5.24)$$

จากสมการ (5.23) และ (5.24) ทำให้ได้

$$d_{(i)}^T r_{(j)} = u_{(i)}^T r_{(j)} \qquad (5.25)$$



รูปที่ 5.13 ตัวอย่างลักษณะการวิ่งเข้าสู่คำตอบด้วยวิธีคอนจูเกตไดเรคชัน

5.4 ระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ (conjugate gradient method) [40,43]

ระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์เป็นวิธีหนึ่งของระเบียบวิธีคอนจูเกตไดเรคชัน โดยระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์นี้ จะกำหนดให้ $u_i = r_{(i)}$

เนื่องจากการเลือกใช้ $u_i = r_{(i)}$ มีความหมายว่าเวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอกทิศทางการวิ่งเข้าสู่คำตอบ $d_{(i)}$ ในวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ถูกสร้างจากเวคเตอร์เศษตกค้าง $r_{(i)}$ และเวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอกทิศทางอันก่อนหน้า จากรูปที่ 5.13 จะเห็นว่าเวคเตอร์เศษตกค้างจะตั้งฉาก

กับเวคเตอร์ที่ใช้บ่งบอกทิศทางและอยู่ในทิศทางของการลดลงของฟังก์ชัน $f(x)$ ดังนั้นจะทำให้เวคเตอร์เศษตกค้างแต่ละตัวตั้งฉากกับเวคเตอร์เศษตกค้างตัวก่อนหน้าทุกๆ ตัวด้วย ทำให้ได้

$$r_{(i)}^T r_{(j)} = 0 \qquad i \neq j \tag{5.26}$$

จากสมการ (5.22) เมื่อนำมาใช้ในวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์จะได้เป็น

$$\beta_{ij} = -\frac{r_i^T A d_{(j)}}{d_{(j)}^T A d_{(j)}} \tag{5.27}$$

จากสมการ (5.23) จะได้

$$r_{(j+1)} = r_{(j)} - \alpha_{(j)} A d_{(j)} \tag{5.28}$$

เอา $r_{(i)}^T$ มาคูณสมการ (5.28) 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

$$r_{(i)}^T A d_{(j)} = \begin{cases} \dfrac{1}{\alpha_{(j)}} r_{(i)}^T r_{(j)} & i = j \\ -\dfrac{1}{\alpha_{(j)}} r_{(i)}^T r_{(j+1)} & i = j+1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{5.29}$$

ดังนั้น

$$\beta_{ij} = \begin{cases} \dfrac{1}{\alpha_{(i-1)}} \dfrac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{d_{(i-1)}^T A d_{(i-1)}} & i = j+1 \\ 0 & i > j+1 \end{cases} \tag{5.30}$$

จากสมการ (5.30) ค่า β_{ij} จะเหลืออยู่กรณีเดียว คือ กรณี $i = j+1$ ดังนั้นเพื่อเป็นการง่าย ค่า $\beta_{i,i-1}$ จะเขียนใหม่ในรูป $\beta_{(i)}$ ดังนี้

$$\beta_{(i)} = \frac{1}{\alpha_{(i-1)}} \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{d_{(i-1)}^T A d_{(i-1)}} \tag{5.31}$$

จากสมการ (5.16) ทำให้ได้

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

$$\beta_{(i)} = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{d_{(i-1)}^T r_{(i-1)}} \tag{5.32}$$

และจากสมการ (5.25) ทำให้ได้

$$\beta_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T} r_{(i)}}{r_{(i-1)}^{T} r_{(i-1)}} \tag{5.33}$$

จากสมการ (5.16) และ (5.25) จะทำให้หาค่า $\alpha_{(i)}$ ได้ดังนี้

$$\alpha_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T} r_{(i)}}{d_{(i)}^{T} A d_{(i)}} \tag{5.34}$$

กล่าวโดยสรุปวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ จะมีสมการที่นำไปใช้งานดังนี้

$$d_{(0)} = r_{(0)} = b - Ax_{(0)} \tag{5.35ก}$$

$$\alpha_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T} r_{(i)}}{d_{(i)}^{T} A d_{(i)}} \tag{5.35ข}$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha_{(i)} d_{(i)} \tag{5.35ค}$$

$$r_{(i+1)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)} A d_{(i)} \tag{5.35ง}$$

$$\beta_{(i)} = \frac{r_{(i)}^{T} r_{(i)}}{r_{(i-1)}^{T} r_{(i-1)}} \tag{5.35จ}$$

$$d_{(i+1)} = r_{(i+1)} + \beta_{(i+1)} d_{(i)} \tag{5.35ฉ}$$

5.5 การปรับสภาพเพื่อเร่งเข้าสู่คำตอบ (preconditioning) [40]

การปรับสภาพเพื่อเร่งเข้าสู่คำตอบของระบบสมการที่จะทำการแก้ หรือที่เรียกกันโดยทั่วไปว่า preconditioning เป็นเทคนิคสำหรับปรับปรุงการลู่เข้าสู่คำตอบของการแก้ระบบสมการที่ใช้วิธีการทำซ้ำ เทคนิคดังกล่าวทำโดยการแก้ระบบสมการเชิงเส้น $Ax = b$ ทางอ้อม โดยจะทำการแก้ระบบสมการ

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \tag{5.36}$$

โดย M เป็นเมตริกซ์ที่มีความสมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite ซึ่งระบบสมการ (5.36) จะสามารถแก้หาคำตอบได้โดยใช้จำนวนรอบของการคำนวณที่น้อยกว่าระบบสมการเชิงเส้นเดิม

เนื่องจากว่า $M^{-1}A$ โดยทั่วไปจะมีความไม่สมมาตร ถึงแม้ว่าเมตริกซ์ M และ A จะมีความสมมาตรก็ตาม ดังนั้นจะต้องหาระบบสมการเชิงเส้นในรูปแบบใหม่ที่ใช้แทนระบบสมการเชิงเส้นในสมการ (5.36) ระบบสมการเชิงเส้นในรูปแบบใหม่นี้สามารถหาได้โดยใช้หลักที่ว่า ทุก ๆ เมตริกซ์ M ที่มีความสมมาตรและมีคุณสมบัติ positive definite จะสามารถเขียนให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์ E ได้ โดย $EE^{T} = M$ โดยจะต้องหาชุดของเมตริกซ์ที่มีความสมมาตร

และมีคุณสมบัติ positive definite ที่จะใช้แทน $M^{-1}A$ ที่ไม่มีความสมมาตรและไม่มีคุณสมบัติ positive definite เพื่อที่จะนำเอาวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์มาใช้แก้ระบบสมการดังกล่าวได้ เมตริกซ์ $E^{-1}AE^{-T}$ จะมีคุณสมบัติดังกล่าวซึ่งสามารถใช้แทนเมตริกซ์ $M^{-1}A$ 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

$$
\begin{aligned}
M^{-1}A &= \lambda \\
E^{-T}E^{-1}A &= \lambda \\
E^{-1}A &= E^{T}\lambda \\
E^{-1}AE^{-T} &= E^{T}E^{-T}\lambda = \lambda
\end{aligned} \tag{5.37}
$$

สมการ (5.37) แสดงให้เห็นว่า $M^{-1}A$ และ $E^{-1}AE^{-T}$ จะมีค่าเจาะจงค่าเดียวกัน

$$
\begin{aligned}
M^{-1}Ax &= \lambda v \\
E^{-T}E^{-1}Ax &= \lambda v
\end{aligned}
$$

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

$$E^{-1}AE^{-T}\hat{x} = \lambda E^{T}v \tag{5.38}$$

สมการ (5.38) แสดงให้เห็นว่า $E^{T}v$ จะเป็นเวคเตอร์เจาะจงของเมตริกซ์ $E^{-1}AE^{-T}$ เมื่อ v เป็นเวคเตอร์เจาะจงของ $M^{-1}A$

จากสมการ (5.38) ทำให้สามารถเปลี่ยนรูปสมการ (5.36) ได้เป็น

$$E^{-1}AE^{-T}\hat{x} = E^{-1}b \tag{5.39}$$

โดยที่ $\hat{x} = E^{T}x$ และในการหาค่าจะต้องหาค่า $\hat{x}$ เพื่อนำไปหาค่า x ต่อไป เนื่องจาก $E^{-1}AE^{-T}$ มีความสมมาตร และมีคุณสมบัติ positive definite ดังนั้นระบบสมการ (5.39) ดังกล่าวสามารถนำเอาวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์มาประยุกต์ใช้ได้ โดยจะทำให้ขบวนการของวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ดังในสมการ (5.35ก-ฉ) เปลี่ยนรูปเป็น

$$\hat{d}_{(0)} = \hat{r}_{(0)} = E^{-1}b - E^{-1}AE^{-T}\hat{x}_{(0)} \tag{5.40ก}$$

$$\alpha_{(i)} = \frac{\hat{r}_{(i)}^{T}\hat{r}_{(i)}}{\hat{d}_{(i)}^{T}E^{-1}AE^{-T}\hat{d}_{(i)}} \tag{5.40ข}$$

$$\hat{x}_{(i+1)} = \hat{x}_{(i)} + \alpha_{(i)}\hat{d}_{(i)} \tag{5.40ค}$$

$$\hat{r}_{(i+1)} = \hat{r}_{(i)} - \alpha_{(i)}E^{-1}AE^{-T}\hat{d}_{(i)} \tag{5.40ง}$$

$$\beta_{(i+1)} = \frac{\hat{r}^T_{(i+1)}\hat{r}_{(i+1)}}{\hat{r}^T_{(i)}\hat{r}_{(i)}} \quad (5.40จ)$$

$$\hat{d}_{(i+1)} = \hat{r}_{(i+1)} - \beta_{(i+1)}\hat{d}_{(i)} \quad (5.40ฉ)$$

จากสมการ (5.40ก-ฉ) 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 (5.40ก-ฉ) เปลี่ยนรูปมาเป็น

$$r_{(0)} = b - Ax_{(0)} \quad (5.41ก)$$

$$d_{(0)} = M^{-1}r_{(0)} \quad (5.41ข)$$

$$\alpha_{(i)} = \frac{r^T_{(i)}M^{-1}r_{(i)}}{d^T_{(i)}Ad_{(i)}} \quad (5.41ค)$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha_{(i)}d_{(i)} \quad (5.41ง)$$

$$r_{(i+1)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)}Ad_{(i)} \quad (5.41จ)$$

$$\beta_{(i+1)} = \frac{r^T_{(i+1)}M^{-1}r_{(i+1)}}{r^T_{(i)}M^{-1}r_{(i)}} \quad (5.41ฉ)$$

$$d_{(i+1)} = M^{-1}r_{(i+1)} + \beta_{(i+1)}d_{(i)} \quad (5.41ช)$$

วิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ดังในสมการ (5.41ก-ช) จะมีชื่อเรียกกันทั่วไปว่า precondition conjugate gradient

5.6 ตัวอย่างการแก้ระบบสมการด้วยวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์

ในหัวข้อนี้จะแสดงตัวอย่างการแก้ระบบสมการด้วยระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ โดยจะยกระบบสมการที่ได้ใช้เป็นตัวอย่างในการอธิบายในบทนี้ซึ่งมีทั้งหมดสองสมการด้วยกัน และเนื่องจากระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์เป็นระเบียบวิธีแบบทำซ้ำ ดังนั้นการคำนวณจะเสร็จสิ้นลงก็ต่อเมื่อวิธีการดังกล่าววิ่งเข้าใกล้คำตอบที่ถูกต้อง โดยมีค่าความผิดพลาดไม่เกินค่าที่กำหนด

ระบบสมการประกอบไปด้วย

$$3x_1 + 2x_2 = 2 \quad (5.42ก)$$

$$2x_1 + 6x_2 = -8 \quad (5.42ข)$$

ซึ่งระบบสมการดังกล่าวมีคำตอบอยู่ที่จุด $x = [2, -2]^T$ โดยกำหนดให้ค่าความผิดพลาดที่ยอมให้ได้เท่ากับ 0.000001 และเนื่องจากค่า $r_{(i)}$ ในระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์เป็นตัวบ่งบอกค่า

เศษตกค้างและถ้าค่าเศษตกค้างดังกล่าวมีค่าใกล้ศูนย์มากเท่าไรก็หมายความว่าค่าของคำตอบที่คำนวณได้มีค่าเข้าใกล้คำตอบที่ถูกต้องมากยิ่งขึ้นเท่านั้น

เริ่มการแก้ระบบสมการ

สมการ (5.42ก-ข) สามารถเขียนเป็นระบบสมการในรูปเมตริกซ์ Ax = b ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2 \\ -8 \end{Bmatrix} \tag{5.43}$$

สมมติให้จุดเริ่มต้นที่ใช้ในการแก้ระบบสมการคือจุด (-2,-2) หรือคือให้ $x_0 = [-2, -2]^T$ และเนื่องจาก $r_0 = b - A\,x_0$

ดังนั้น $r_0 = \begin{Bmatrix} 2 \\ -8 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} -2 \\ -2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 12 \\ 8 \end{Bmatrix}$, $\quad M = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix}$

หมายเหตุ : เมตริกซ์ M ที่ง่ายที่สุดคือเมตริกซ์ที่มีค่าสัมประสิทธิ์ในแนวแกนเฉียงมีค่าเท่ากับค่าสัมประสิทธิ์ในแนวแกนเฉียงของเมตริกซ์ A ส่วนค่าสัมประสิทธิ์ดลอดแถบบนขวาและแถบล่างซ้ายเป็นศูนย์ทั้งหมด

$$d_0 = M^{-1} r_0 = \begin{Bmatrix} \frac{12}{3} \\ \frac{8}{6} \end{Bmatrix}$$

จากการสมมติจุดที่เริ่มต้นใช้ในการคำนวณจะได้ว่าค่าเศษตกค้างมีค่าเท่ากับ

$$|r_0| = \sqrt{(12^2 + 8^2)} = 14.4222051$$

เริ่มการทำซ้ำครั้งที่ 1

$$\rho_0 = r_0^T \cdot M^{-1} \cdot r_0 = r_0^T \cdot d_0$$

$$= 12\left(\frac{12}{3}\right) + 8\left(\frac{8}{6}\right) = 58.66667$$

$$q_0 = d_0^T \cdot A \cdot d_0$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{12}{3} & \frac{8}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{12}{3} \\ \frac{8}{6} \end{Bmatrix}$$

$$\alpha_0 = \frac{r_0^T \cdot M^{-1} \cdot r_0}{d_0^T \cdot A \cdot d_0} = \frac{\rho_0}{q_0}$$

ดังนั้น $\alpha_0 = \dfrac{58.66667}{80} = 0.73333$

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0$$

$$= \begin{Bmatrix}-2\\-2\end{Bmatrix} + (0.73333)\begin{Bmatrix}\frac{12}{3}\\ \frac{8}{6}\end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix}0.93333\\-1.02222\end{Bmatrix}$$

$$r_1 = r_0 - \alpha_0 A d_0$$

$$= \begin{Bmatrix}12\\8\end{Bmatrix} - (0.73333)\begin{bmatrix}3 & 2\\2 & 6\end{bmatrix}\cdot\begin{Bmatrix}\frac{12}{3}\\ \frac{8}{6}\end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix}1.24444\\-3.73333\end{Bmatrix}$$

$$\beta_1 = \frac{r_1^T \cdot M^{-1} \cdot r_1}{r_0^T \cdot M^{-1} \cdot r_0}$$

$$= \frac{\begin{bmatrix}1.24444 & -3.73333\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\frac{1}{3} & 0\\ 0 & \frac{1}{3}\end{bmatrix}\cdot\begin{Bmatrix}1.24444\\-3.73333\end{Bmatrix}}{58.66667}$$

$$= 0.04839506$$

$$d_1 = M^{-1} r_1 + \beta_1 d_0$$

$$= \begin{bmatrix}\frac{1}{3} & 0\\ 0 & \frac{1}{6}\end{bmatrix}\cdot\begin{Bmatrix}1.24444\\-3.73333\end{Bmatrix} + (0.04839506)\begin{Bmatrix}\frac{12}{3}\\ \frac{8}{6}\end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix}0.60839506\\-0.55769547\end{Bmatrix}$$

จากการทำซ้ำครั้งที่ 1 สามารถคำนวณค่าเศษตกค้างได้ดังนี้

$$|r_1| = \sqrt{(1.24444^2 + (-3.73333^2))} = 3.935274298$$

เริ่มการทำซ้ำครั้งที่ 2

$$\rho_1 = r_1^T \cdot M^{-1} \cdot r_1 = r_1^T \cdot d_1$$

$$= 0.60839506(1.24444) + (-0.55769547)(-3.73333)$$

$$= 2.83917695$$

$$q_1 = d_1^T \cdot A \cdot d_1$$

$$= \lfloor 0.60839506 \quad -0.55769547 \rfloor \cdot \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} 0.60839506 \\ -0.55769547 \end{Bmatrix}$$

$$= 1.61938241$$

$$\alpha_1 = \frac{r_1^T \cdot M^{-1} \cdot r_1}{d_1^T \cdot A \cdot d_1} = \frac{\rho_1}{q_1}$$

ดังนั้น $$\alpha_1 = \frac{2.83917695}{1.61938241} = 1.7532467532$$

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1$$

$$= \begin{Bmatrix} 0.93333 \\ -1.02222 \end{Bmatrix} + (1.7532467532) \begin{Bmatrix} 0.60839506 \\ -0.55769547 \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} 2.00000 \\ -2.00000 \end{Bmatrix}$$

$$r_2 = r_1 - \alpha_1 A d_1$$

$$= \begin{Bmatrix} 1.24444 \\ -3.73333 \end{Bmatrix} - (1.7532467532) \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 0.60839506 \\ -0.55769547 \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

จากการทำซ้ำครั้งที่ 2 สามารถคำนวณค่าเศษตกค้างได้ดังนี้

$$|r_2| = \sqrt{(0^2 + 0^2)} = 0.00$$

เนื่องจากการคำนวณค่าเศษตกค้างในครั้งนี้ได้ค่าน้อยกว่าค่าความผิดพลาดที่ยอมให้ได้ ดังนั้น คำตอบของระบบสมการที่คำนวณได้คือ

$$x_2 = \begin{Bmatrix} 2.00 \\ -2.00 \end{Bmatrix}$$

ซึ่งมีค่าเท่ากับคำตอบที่ถูกต้องของระบบสมการนี้

สำหรับระเบียบวิธีคอนจูเกตเกรเดียนท์ที่ได้นำเสนอในบทนี้ถูกนำไปประดิษฐ์เป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ซึ่งมีชื่อเรียกว่า PCG และสำหรับรายละเอียดของโปรแกรมดังกล่าวพร้อมวิธีการใช้โปรแกรมได้แสดงไว้ในภาคผนวก ค.