บทที่ 2
เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

การศึกษาการแก้ปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญที่มีเงื่อนไขค่าขอบแบบแยกไม่ได้โดยใช้วิธีของเทย์เลอร์อันดับสี่ในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นของระบบสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและปรับค่าเริ่มต้นที่ไม่ทราบที่สอดคล้องกับค่าขอบด้วยวิธีนิวตัน-บรอยเดนนั้น ได้มีเอกสารบทความและงานวิจัยซึ่งผู้วิจัยจะกล่าวรายละเอียดตามหัวข้อต่อไปนี้

1. การแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น
2. ปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ
3. การแก้ระบบสมการ
4. วิธียิงเป้าของนิวตัน
5. เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

การแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น

ศิริพงษ์ ศรีพิพัฒน์ (2528) ปัญหาค่าเริ่มต้นซึ่งกำหนดโดยสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและเงื่อนไขจุดเริ่มต้น

$$y' = f(t,y)$$
$$y(t_0) = y_0,\ y \in \mathbb{R}^n \text{ และ } t \in \mathbb{R}$$

เราจะหาผลเฉลย $y(t)$ ที่สอดคล้องกับสมการเชิงอนุพันธ์และเงื่อนไข โดยสมมุติว่าปัญหามีผลเฉลยและกำหนดจุด $t_1, t_2, t_3, \ldots$ และหาค่าของ $y(t_i)$, $i = 1,2,3,\ldots$ เป็นผลเฉลย นั่นคือผลเฉลยเป็นจำนวนซึ่งเป็นค่าฟังก์ชัน ฟังก์ชัน $y(t)$ เป็นผลเฉลยที่แม่นตรงของปัญหา แต่เราไม่สามารถหาผลเฉลยนี้ได้ เราจะได้เพียงค่าประมาณเท่านั้น

ทฤษฎีบท การมีผลเฉลยแน่นอนและมีเพียงผลเฉลยเดียว (The Existence and Uniqueness) ให้ $f(t,y)$ เป็นฟังก์ชันที่ต่อเนื่องสำหรับ $a \le t \le b$ และทุกค่าของ y ถ้า $f(t,y)$ สอดคล้องเงื่อนไขของลิปชิตซ์ (Lipschitz Condition) กล่าวคือ สามารถหาค่าคงที่ $L > 0$ ที่ทำให้ $\| f(t,y_1) - f(t,y_2)\| \le L \|y_1 - y_2\|$ สำหรับ $a \le t \le b$ และทุกค่า y_1, y_2 แล้วปัญหาค่าเริ่มต้น $y' = f(t,y)$ ที่มี $y = y_0$ เมื่อ $t = t_0$ จะมีผลเฉลยแน่นอน และมีเพียงผลเฉลยเดียว

ให้ y_i เป็นค่าประมาณของ $y(t_i)$ เมื่อ $i = 1,2,3,\ldots$ จากที่กำหนดให้ เราได้ว่า $y_0 = y(t_0)$ เราจะหาสูตรที่จะให้ค่าของ $y_1, y_2, y_3, \ldots$

วิธีของเทย์เลอร์

กรณี $y \in \mathbb{R}$

ถ้า f เป็นฟังก์ชันที่หาอนุพันธ์ได้หลาย ๆ ครั้ง ในบริเวณหนึ่งที่ครอบคลุมจุด (t_0, y_0) และ $\frac{\partial f}{\partial y}$ เป็นฟังก์ชันต่อเนื่องในบริเวณนี้ ถ้าฟังก์ชัน $y(t)$ เป็นผลเฉลยที่แม่นตรงของปัญหาค่าเริ่มต้น เรากระจายฟังก์ชัน $y(t)$ รอบจุด t_0 โดยอนุกรมเทย์เลอร์ถึง k พจน์ ได้

$$y(t) = y(t_0) + (t-t_0)y'(t_0) + \frac{y''(t_0)}{2!}(t-t_0)^2 + \ldots + \frac{y^{(k)}(t_0)}{k!}(t-t_0)^k + \boldsymbol{R}$$

เมื่อ $\boldsymbol{R} = \frac{y^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}(t-t_0)^{k+1}$, $t_0 < \xi < t$ หรือ $t < \xi < t_0$

ถ้าให้ $t - t_0 = h$ เราจะได้ค่า $y(t_0+h)$ เป็น

$$y(t_0+h) \approx y(t_0) + hy'(t_0) + \frac{y''(t_0)}{2!}h^2 + \ldots + \frac{y^{(k)}(t_0)}{k!}h^k$$

โดยมีความคลาดเคลื่อนที่เรียกว่าความคลาดเคลื่อนจากการตัด (Truncation Error)

$$\boldsymbol{R} = \frac{y^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}h^{k+1}$$

ความคลาดเคลื่อนนี้เป็น ความคลาดเคลื่อนเฉพาะที่ (Local Error) เฉพาะช่วงหนึ่งเท่านั้น จะเห็นว่าเราได้ค่าประมาณของ y ที่จุด $t_1 = t_0 + h$ โดยใช้จุดนี้สามารถประมาณค่าของ $y(t_1+h)$ ได้อีกกับสูตรดังกล่าว ระเบียบวิธีดังกล่าวเรียกว่า วิธีของเทย์เลอร์อันดับ k สูตรเป็นดังนี้

$$y_{i+1} = y_i + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2!}y''(t_i) + \ldots + \frac{h^k}{k!}y^{(k)}(t_i)\ ,\ i = 0,1,2,3,\ldots$$

เมื่อ y_i เป็นค่าประมาณของ $y(t_i)$ โดยมีความคลาดเคลื่อนเฉพาะที่เป็น $\boldsymbol{R} = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!}y^{(k+1)}(\xi) = \boldsymbol{O}(h^{k+1})$ และค่าความคลาดเคลื่อนทั้งหมดเป็น $\boldsymbol{O}(h^k)$

กรณี $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$

เราได้สูตร $\quad \boldsymbol{y}_{i+1} = \boldsymbol{y}_i + h\boldsymbol{y}'(t_i) + \frac{h^2}{2!}\boldsymbol{y}''(t_i) + \ldots + \frac{h^k}{k!}\boldsymbol{y}^{(k)}(t_i)\ ,\ i = 0,1,2,3,\ldots$ เช่นเดียวกัน

เมื่อ $\boldsymbol{y}^{(k)}(t_i)$ เป็นอนุพันธ์อันดับ k ของส่วนประกอบของ $\boldsymbol{y}$ เทียบกับตัวแปร t_i

วิธีของรุงเง-คุตตา

ระเบียบวิธีของรุงเง-คุตตา จัดได้ว่าเป็นระเบียบวิธีที่ได้รับความนิยมและใช้กันอย่างกว้างขวางโดยเฉพาะในการคำนวณที่ต้องการผลลัพธ์ ที่มีความเที่ยงตรงสูง แนวความคิดที่ใช้ในระเบียบวิธีของรุงเง-คุตตา นี้คือ การหาค่าความชันที่มีความเที่ยงตรงสูงเพื่อก่อให้เกิดผลลัพธ์ที่มี

ความเที่ยงตรงสูงตามมา สมการหลักที่ใช้ในการคำนวณผลลัพธ์ในระเบียบวิธีของรุงเง-คุตตา คือ

$$y_{i+1} = y_i + \Phi(t_i, y_i, h).h \tag{2.1}$$

เมื่อ $\Phi(t_i, y_i, h)$ เรียกว่าฟังก์ชันส่วนเพิ่ม (Increment Function) คือความชันเฉลี่ยตลอดขนาดช่วงความกว้าง h ที่จะนำไปใช้ในการคำนวณหาส่วนที่เพิ่มขึ้นจากผลลัพธ์เดิม โดยที่ฟังก์ชันส่วนเพิ่มนี้สามารถเขียนให้อยู่ในรูปแบบโดยทั่วไปได้

$$\Phi = a_1 k_1 + a_2 k_2 + a_3 k_3 + \ldots + a_n k_n \tag{2.2}$$

เมื่อ $a_i, i = 1, 2, 3, \ldots, n$ เป็นค่าคงที่ และ

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_i, y_i) \\
k_2 &= f(t_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h) \\
k_3 &= f(t_i + p_2 h, y_i + q_{21} k_1 h + q_{22} k_2 h) \\
&\vdots \\
k_n &= f(t_i + p_{n-1} h, y_i + q_{n-1,1} k_1 h + q_{n-2,2} k_2 h + \ldots + q_{n-1,n-1} k_{n-1} h)
\end{aligned} \tag{2.3}$$

เมื่อ n คืออันดับที่ของระเบียบวิธีรุงเง-คุตตา ที่เลือกใช้ สำหรับค่า $k_i, i = 1, 2, 3, \ldots, n$ ขึ้นอยู่กับฟังก์ชันของสมการเชิงอนุพันธ์ที่กำหนดให้ ส่วนค่า p และ q ต่าง ๆ เป็นค่าคงที่

ระเบียบวิธีของรุงเง-คุตตาอันดับสี่ (Fourth-Order Runge-Kutta Method) ถูกจัดว่าเป็นระเบียบวิธีที่ได้รับความนิยมใช้กันโดยแพร่หลายโดยการดัดแปลงสมการ (2.1) ถึง (2.3) ที่อยู่ในรูปทั่วไปโดยใช้ $n = 4$ ก่อให้เกิดสมการรุงเง-คุตตาอันดับสี่ ซึ่งให้ค่าผิดพลาดในรูปแบบของความกว้างช่วงอันดับสี่ $O(h^4)$

รูปแบบทั่วไปของสมการรุงเง-คุตตาอันดับสี่ คือ

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\right].h$$

เมื่อ

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_i, y_i) \\
k_2 &= f(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1 h) \\
k_3 &= f(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2 h) \\
k_4 &= f(t_i + h, y_i + k_3 h)
\end{aligned}$$

โดยมีค่าความคลาดเคลื่อนเฉพาะที่เป็น $O(h^5)$ และค่าความคลาดเคลื่อนทั้งหมดจะเป็น $O(h^4)$

ปัญหาค่าขอบ

เราจะกล่าวถึงปัญหาที่มีสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและเงื่อนไขที่จุดมากกว่าหนึ่งจุด อาจจะเป็นเงื่อนไขที่จุดเริ่มต้นและเงื่อนไขที่จุดปลายสุดท้ายซึ่งเรียกว่า ปัญหาค่าขอบสองจุด ตัวอย่างเช่น ปัญหาการเปลี่ยนวงโคจรของยานอวกาศ มีสมการเชิงอนุพันธ์สามัญเป็น

$$\begin{aligned} x_1'' &= -kx_1/r^3 \\ x_2'' &= -kx_2/r^3 \end{aligned} \quad , \; t \in [t_0, t_f]$$

เมื่อ $r = (x_1^2 + x_2^2)^{1/2}$ และเงื่อนไขเป็น

$$x_1(t_0) = a_1, x_1(t_f) = b_1, x_2(t_0) = a_2, x_2(t_f) = b_2$$

สำหรับปัญหาข้างต้นนี้เราอาจแปลงเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งได้ โดยให้ $y_1 = x_1, y_2 = x_2, y_3 = x_1'$ และ $y_4 = x_2'$ จะได้ระบบสมการเชิงอนุพันธ์เป็น

$$\begin{aligned} y_1' &= y_3 \\ y_2' &= y_4 \\ y_3' &= -ky_1/r^3 \\ y_4' &= -ky_2/r^3 \end{aligned}$$

เมื่อ $r = (y_1^2 + y_2^2)^{1/2}$ และเงื่อนไขเป็น

$$y_1(t_0) = a_1, y_1(t_f) = b_1, y_2(t_0) = a_2, y_2(t_f) = b_2$$

สำหรับปัญหาค่าขอบ สมการเชิงอนุพันธ์ที่มีตัวแปรเดียวจะต้องเป็นอันดับสองขึ้นไป หรือถ้าเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งก็ต้องมีตัวแปรตามอย่างน้อยสองตัว และสำหรับสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง จำนวนเงื่อนไขต้องมีเท่ากับจำนวนตัวแปรตาม มิฉะนั้นอาจไม่ได้ผลเฉลย ถ้าจำนวนเงื่อนไขมากเกินไปก็อาจจะไม่มีผลเฉลย และถ้าจำนวนเงื่อนไขน้อยเกินไปก็อาจจะหาผลเฉลยเฉพาะรายไม่ได้

เราแบ่งปัญหาค่าขอบเป็น 2 แบบ ดังนี้

แบบแรก ถ้าเงื่อนไขค่าขอบ (1.2) สามารถเขียนอยู่ในรูปแบบ $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{Y}'(t_0)) = 0$, $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{Y}'(t_f)) = 0$ เราจะเรียกว่า เงื่อนไขค่าขอบแบบแยกได้

แบบสอง ถ้าเงื่อนไขค่าขอบ (1.2) ไม่สามารถเขียนเงื่อนไขค่าขอบให้อยู่ในรูปแบบข้างต้นได้ เราเรียกเงื่อนไขค่าขอบแบบแยกไม่ได้

อำพล ธรรมเจริญ (2532) กล่าวว่าระเบียบวิธีเชิงตัวเลขที่ใช้แก้ปัญหาค่าขอบมีหลายวิธี แต่ละวิธีมีข้อดีข้อเสียแตกต่างกัน เช่น วิธีผลต่างจำกัด วิธีฟังก์ชันประมาณค่า และวิธียิงเป้า

วิธีผลต่างจำกัด มีวิธีการและแนวคิดดังนี้ คือ แบ่งช่วงที่จะหาผลเฉลยเป็น n ช่วงเท่า ๆ กัน ด้วยจุด $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ (แต่ละช่วงมีความกว้างเท่ากับ h) แล้วแทนค่าอนุพันธ์ที่จุดต่าง ๆ ด้วยค่าประมาณในรูปสมการผลต่าง ผลที่ได้คือ สมการผลต่างซึ่งจะเป็นระบบสมการพีชคณิต เมื่อหาผลเฉลยของระบบสมการนี้ได้ ก็จะได้ผลเฉลยโดยประมาณของปัญหาค่าขอบตามต้องการ ในการประมาณค่าอนุพันธ์เรามักใช้สูตรผลต่างส่วนกลาง

สำหรับวิธีผลต่างจำกัดสามารถใช้ได้กับปัญหาที่มีสมการเชิงอนุพันธ์เป็นแบบเชิงเส้น แม้จะสามารถใช้กับปัญหาที่มีสมการเชิงอนุพันธ์ที่ไม่เป็นเชิงเส้นได้ แต่ก็มีความยุ่งยากในการแก้สมการพีชคณิตขนาดใหญ่ที่ไม่เป็นแบบเชิงเส้น และสำหรับสมการเชิงอนุพันธ์ที่มีอันดับสูง หรือระบบสมการเชิงอนุพันธ์ขนาดใหญ่ ความยุ่งยากในการแก้ระบบสมการพีชคณิตก็เพิ่มขึ้นหลายเท่า ค่าคลาดเคลื่อนจากวิธีนี้โดยปกติมีค่าสูง

วิธีฟังก์ชันประมาณค่า มีแนวคิด คือ เราจะประมาณค่าของผลเฉลยด้วยฟังก์ชันที่เหมาะสมตลอดช่วงที่จะหาผลเฉลย ฟังก์ชันที่ประมาณค่าผลเฉลยต้องสอดคล้องกับสมการเชิงเส้นที่บางจุดและสอดคล้องกับเงื่อนไขค่าขอบด้วย

สำหรับวิธีฟังก์ชันประมาณค่า มักจะใช้กับปัญหาที่มีสมการเชิงอนุพันธ์เป็นแบบเชิงเส้น ค่าความคลาดเคลื่อนมักจะมีสูงเพราะมีข้อจำกัดเกี่ยวกับฟังก์ชันประมาณค่าที่ใช้

วิธียิงเป้า มีหลักการง่าย ๆ คือ เราสมมุติเงื่อนไขเริ่มต้นที่ขาดหายไป แล้วดำเนินการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น จะได้ค่าที่จุดปลายสุดซึ่งอาจไม่ตรงกับเงื่อนไข เรามีวิธีการที่จะเปลี่ยนค่าจุดเริ่มต้นเพื่อให้ค่าที่จุดปลายสอดคล้องกับเงื่อนไขที่กำหนด วิธีที่จะปรับจุดเริ่มต้นเรากระทำได้หลายวิธี เราใช้วิธีเช่นเดียวกับการแก้สมการ โดยให้จุดเริ่มต้นเป็นเสมือนตัวไม่ทราบค่าซึ่งจะต้องหา และค่าของผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์ที่จุดปลายสุดท้ายจะเป็นฟังก์ชันของจุดเริ่มต้น เมื่อเรากำหนดเงื่อนไขก็จะได้สมการแต่จะไม่มีแบบของฟังก์ชันที่จะเขียนสมการให้เห็นชัดแจ้ง หลักการดังกล่าวเหมือนกับการยิงเป้า คือ เราปรับทิศทางที่จุดเริ่มต้นโดยเล็งไปที่เป้า เมื่อยิงไปแล้วถ้าไม่ถูกเป้าก็ต้องปรับทิศทางใหม่จนกว่าจะยิงถูกเป้า

สำหรับวิธีการยิงเป้ามีข้อดีหลายข้อ ข้อหนึ่งคือใช้ได้ดีกับระบบสมการเชิงอนุพันธ์ที่เป็นแบบเชิงเส้นและไม่เป็นแบบเชิงเส้น และกับระบบสมการเชิงอนุพันธ์ที่มีขนาดใหญ่ โดยที่ไม่ยุ่งยากมากนัก และอีกข้อหนึ่งคือมีค่าคลาดเคลื่อนน้อย เพราะว่าสามารถใช้ระเบียบวิธีแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นที่มีประสิทธิภาพได้ (เช่น วิธีของรุงเง-คุตตาอันดับสี่ วิธีของเทย์เลอร์อันดับสี่ หรือวิธีตัวทำนาย-ตัวแก้) ข้อเสีย คือ อาจไม่ลู่เข้าและไม่สามารถบอกได้แน่นอนว่าจะลู่เข้าหรือไม่ วิธีการของวิธียิงเป้าโดยละเอียดเป็นดังนี้

สมมุติ $\boldsymbol{z} = [\boldsymbol{x}^T\, \boldsymbol{y}^T]^T$ ปัญหาค่าขอบที่มีเงื่อนไขค่าขอบแบบแยกได้เป็น

$$\boldsymbol{z}' = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{z}) \ , \ t_0 \le t \le t_f$$

$$\boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0 \ , \ \boldsymbol{y}(t_f) = \boldsymbol{y}_f$$

เมื่อ $\boldsymbol{f}$ เป็นฟังก์ชันเวกเตอร์ โดยที่ $\boldsymbol{f}$ ไม่ต้องเป็นเชิงเส้นก็ได้ สังเกตว่าค่า $\boldsymbol{y}(t_f)$ ขึ้นอยู่กับค่าเริ่มต้น $\boldsymbol{x}(t_0)$ ถ้าเรากำหนดค่าเริ่มต้น $z(t_0) = [x(t_0)\ y(t_0)]^T$ แล้วหาผลเฉลยของปัญหาค่าเริ่มต้นจะได้ $\boldsymbol{y}(t_f)$ ซึ่งอาจเขียนได้เป็น

$$\boldsymbol{y}(t_f) = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}(t_0))$$

จากเงื่อนไขที่จุดปลายสุดท้าย $\boldsymbol{y}(t_f) = \boldsymbol{y}_f$ เราได้สมการเป็น

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}(t_0)) = \boldsymbol{y}_f$$

โดย $\boldsymbol{x}(t_0)$ เป็นตัวไม่ทราบค่า วิธีหาค่า $\boldsymbol{x}(t_0)$ อาจกระทำโดยวิธีของนิวตัน หรือวิธีของบรอยเดน ขั้นตอนในการแก้ปัญหาเป็นดังนี้

1. สมมุติค่า $\boldsymbol{x}(t_0) = \boldsymbol{a}_0$ แล้วแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นต่อไปนี้ ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขอันดับสูงเช่น วิธีของรุงเง-คุตตา หรือวิธีของเทย์เลอร์

$$\boldsymbol{z}' = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{z}) \ , \ t_0 \le t \le t_f$$

$$\boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0 \ , \ \boldsymbol{x}(t_0) = \boldsymbol{a}_0$$

ได้ค่า $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{a}_0) = \boldsymbol{y}(t_f)$

2. ตรวจสอบว่า $\boldsymbol{y}(t_f) = \boldsymbol{y}_f$ หรือไม่ ถ้าใช่ก็แสดงว่าผลที่ได้จากข้อ 1 เป็นผลเฉลยของปัญหาค่าขอบ ถ้าไม่สอดคล้องก็ต้องเปลี่ยนค่า $\boldsymbol{x}(t_0)$ ใหม่

3. วิธีเปลี่ยนค่า $\boldsymbol{x}(t_0)$ กระทำได้หลายวิธีเช่น วิธีของนิวตัน หรือวิธีของบรอยเดน เมื่อได้ค่า $\boldsymbol{x}(t_0)$ แล้วก็หาค่า $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}(t_0))$ ด้วยวิธีในข้อ 1 กระทำจนกว่าจะได้ผลลัพธ์

สำหรับปัญหาค่าขอบที่มีเงื่อนไขค่าขอบแบบแยกไม่ได้

เราให้ $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{z}(t_0)) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}(t_0), \boldsymbol{S}(\boldsymbol{z}(t_0)))$

ปัญหาค่าขอบจะเป็นการแก้ระบบสมการ $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{z}(t_0)) = \boldsymbol{0}$

การแก้ระบบสมการ

ระบบสมการที่เราจะหาผลเฉลยมีรูปแบบเป็นฟังก์ชันเวกเตอร์

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$$

เมื่อ $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{F} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$ และ $\boldsymbol{0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$

จุด $\boldsymbol{z}$ ที่มีสมบัติว่า $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{z}$ เราเรียกว่าเป็น จุดตรึง (Fixed Point) ของฟังก์ชัน $\boldsymbol{g}$ ดังนั้น วิธีการที่จะหาผลเฉลยของสมการ $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ โดยการแปลงสมการเป็น $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$ แล้วหาจุดตรึงของ $\boldsymbol{g}$ เรียกว่าวิธีซ้ำเดิมโดยจุดตรึง (Fixed Point Iteration)

ทฤษฎีบท (Dennis & Schnabel, 1996) ถ้าฟังก์ชัน $\boldsymbol{g} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ ส่งจุดในเซตปิด S ไปยัง S กล่าวคือ ถ้า $\boldsymbol{x}$ เป็นสมาชิกของ S แล้ว $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$ จะเป็นสมาชิกของ S ด้วย และ $\boldsymbol{g}$ มีสมบัติหดตัว (Contractive) บน S กล่าวคือ $\|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y})\| \leq K\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|$ สำหรับทุก ๆ จุด $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in S$ และ $K < 1$ แล้ว (1) ถ้าจุดเริ่มต้น $\boldsymbol{x}_0$ อยู่ใน S แล้ว ลำดับ $\{\boldsymbol{x}_i | \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{i-1}), i = 1, 2, 3, \ldots\}$ จะลู่เข้าหาจุด $\boldsymbol{z}$ ใน S และ (2) จุด $\boldsymbol{z}$ จะเป็นจุดตรึงของฟังก์ชัน $\boldsymbol{g}$ และมีเพียงจุดเดียว คือ มีจุด $\boldsymbol{z}$ จุดเดียวใน S ซึ่ง $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{z}$

ถ้า f เป็นฟังก์ชันสเกลาร์ (Scalar Function) ของหลายตัวแปร $x_i, i = 1, 2, \ldots, n$ อนุพันธ์ของฟังก์ชัน f เทียบกับ x_i โดยคิดตัวแปรอื่นเป็นค่าตรึง เรียกว่า อนุพันธ์ย่อย (Partial Derivative) ของ f ใช้สัญลักษณ์ f_{x_i} เวกเตอร์ $[f_{x_1}\, f_{x_2} \ldots f_{x_n}]^T$ เรียกว่า เกรเดียนต์ (Gradient) ของ f ใช้สัญลักษณ์ ∇f

ทฤษฎีบท (อำพล ธรรมเจริญ, 2532) ให้ f เป็นฟังก์ชันสเกลาร์ของสองตัวแปร x และ y ฟังก์ชัน f มีอนุพันธ์ย่อยอันดับหนึ่งและอันดับสองเป็นฟังก์ชันต่อเนื่องในบริเวณ $D \subseteq \mathbb{R}^2$ สำหรับจุด (x,y) และ (a,b) ในบริเวณดังกล่าว จะได้

$$f(x,y) = f(a,b) + f_x(a,b)(x-a) + f_y(a,b)(y-b) + \boldsymbol{R} \tag{2.4}$$

เมื่อ $\boldsymbol{R} = \frac{1}{2!}\left(f_{xx}(\xi,\eta)(x-a)^2 + 2f_{xy}(\xi,\eta)(x-a)(y-b) + f_{yy}(\xi,\eta)(y-b)^2\right)$

โดยที่ (ξ,η) เป็นจุดบนเส้นตรงระหว่าง (a,b) และ (x,y) คือ

$(\xi,\eta) = (a,b) + t(x-a, y-b), 0 < t < 1$

กรณี $\boldsymbol{f}$ เป็นฟังก์ชันของหลายตัวแปรเราเขียน (2.4) ในรูปเวกเตอร์ ให้ $\boldsymbol{x} = [x_1\, x_2 \ldots x_n]^T$ และ $\boldsymbol{y} = [y_1\, y_2 \ldots y_n]^T$ ได้ดังนี้

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) + \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})^T(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) + \boldsymbol{R}\left(\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|^2\right) \tag{2.5}$$

เมื่อ $\boldsymbol{R}\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2\right)$ เป็นพจน์ที่มีกำลังสูงกว่าหรือเท่ากับกำลังสอง ซึ่งมีสมบัติว่า $\boldsymbol{R}\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2\right) < K\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2$ เมื่อ K เป็นจำนวนบวกค่าคงตัว

สำหรับฟังก์ชันเวกเตอร์เราไม่สามารถเขียนสูตรในแบบ (2.4) ได้ ถ้า $\boldsymbol{g}$ เป็นฟังก์ชันเวกเตอร์ของ $\boldsymbol{x}$ เราได้สูตรในแบบ (2.5) คือ

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{y})(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{R}\left(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2\right) \tag{2.6}$$

เมื่อ $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{y})$ เป็นเมทริกซ์จาโคเบียน และ $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ เป็นเวกเตอร์

ทฤษฎีบท (Conte, 1981) ให้ $\boldsymbol{g}$ เป็นฟังก์ชันเวกเตอร์ที่ส่งจุดในบริเวณ D ไปอยู่ในบริเวณ D และมีอนุพันธ์ย่อยเป็นฟังก์ชันต่อเนื่องในบริเวณ D ถ้ามีจำนวนบวก M ซึ่ง $\|\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})\| \le M < 1$ ทุกค่าของ $\boldsymbol{x} \in D$ แล้ว ลำดับ $\{\boldsymbol{x}_i | \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{i-1}), i = 1,2,3,\ldots; \boldsymbol{x}_0 \in D\}$ จะลู่เข้าหาจุดตรึงใน D

ทฤษฎีบท (Conte, 1981) สมมุติ $\boldsymbol{z}$ เป็นจุดตรึงของฟังก์ชัน $\boldsymbol{g}$ ถ้า $\boldsymbol{g}$ มีอนุพันธ์เป็นฟังก์ชันต่อเนื่องที่จุด $\boldsymbol{z}$ และ $\|\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{z})\| < 1$ แล้ว จะมีจำนวนบวก δ และ M ซึ่ง $\|\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})\| \le M < 1$ ทุก ๆ จุด $\boldsymbol{x}$ ในเมื่อ $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}\| \le \delta$

วิธีของนิวตัน

สำหรับการหาค่ารากของระบบสมการ $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ ที่มี n สมการและมี n ตัวแปร และเมื่อฟังก์ชัน $\boldsymbol{f}$ ไม่เป็นแบบเชิงเส้น สูตรของระเบียบวิธีหาได้ดังนี้ เราให้

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{h}$$

และโดยสูตร (2.6) จะได้

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{h}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i) + \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{h} + \boldsymbol{R}(\|\boldsymbol{h}\|^2)$$

ตัดพจน์กำลังสองออก และให้ $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{h}) = \boldsymbol{0}$ ดังนั้น

$$\boldsymbol{0} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i) + \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{h}$$

ถ้า $\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_i)$ มีตัวผกผัน จะได้

$$\boldsymbol{h} = -[\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_i)]^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$$

สูตรการทำซ้ำในแบบของนิวตัน คือ

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - [\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_i)]^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)\ ,\ i = 0,1,2,\ldots \tag{2.7}$$

วิธีของนิวตันจะต้องมีจุดเริ่มต้น x_0 ถ้าจุดเริ่มต้นอยู่ไม่ไกลจากรากมากเกินไป วิธีของนิวตัน จะลู่เข้าหาจุดที่เป็นรากของระบบสมการ $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ มีอัตราการลู่เข้าเป็นอันดับสอง (อำพล ธรรมเจริญ, 2532) แต่วิธีของนิวตันต้องใช้แรงงานมากในการหารากของระบบสมการเชิงเส้นในทุก ๆ ครั้งของการทำซ้ำ

วิธีของบรอยเดน

ในการหารากของระบบสมการ $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ ที่มี n สมการและมีตัวไม่ทราบค่า n ตัว และเมื่อฟังก์ชัน f เป็นแบบไม่เชิงเส้น โดยวิธีของนิวตันเรากำหนดจุดเริ่มต้น x_i แล้วหา x_{i+1} จากสูตรการทำซ้ำ

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - [\boldsymbol{f}\,'(\boldsymbol{x}_i)]^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$$

เมื่อ $i = 0, 1, 2, \ldots$

เนื่องจากการหา $\boldsymbol{f}\,'(\boldsymbol{x}_i)$ เป็นเมทริกซ์ที่หาค่าได้ยาก จึงมีแนวคิดที่จะหาเมทริกซ์เพื่อประมาณค่าของ $\boldsymbol{f}\,'(\boldsymbol{x}_i)$ เมทริกซ์ที่ใช้ประมาณค่าต้องหาได้มาโดยง่ายและประมาณค่า $\boldsymbol{f}\,'(\boldsymbol{x}_i)$ ได้ดี

พิจารณาวิธีเส้นตัดโค้ง (Secant method) สำหรับสมการที่มีตัวไม่ทราบค่าเพียงตัวเดียว ซึ่งมีสูตรเป็น

$$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})} . f(x_i) \qquad (2.8)$$

เมื่อ $i = 0, 1, 2, \ldots$

กำหนดให้ $d_i = \dfrac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$ จะได้

$$d_i(x_i - x_{i-1}) = f(x_i) - f(x_{i-1})$$

เงื่อนไขนี้เรียกว่า เงื่อนไขเส้นตัดโค้ง (Secant Condition)

ในกรณีที่เป็นฟังก์ชันของหลายตัวแปร เราหาเมทริกซ์ D_i ที่สอดคล้องกับเงื่อนไข

$$D_i(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i-1}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i-1})$$

ถ้าเราเขียนอีกขั้นหนึ่ง จะได้

$$D_{i+1}(\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i) \qquad (2.9)$$

จาก (2.7) เมื่อให้เมทริกซ์ D_i แทน $\boldsymbol{f}\,'(\boldsymbol{x}_i)$ จะได้

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i) \qquad (2.10)$$

คูณด้วยเมทริกซ์ D_i จะได้

$$D_i(\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i) = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i) \tag{2.11}$$

สมการ (2.9) – (2.11) จะได้

$$(D_{i+1} - D_i)(\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}) \tag{2.12}$$

กำหนดให้ $D_{i+1} - D_i = \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{b}_i^T$

เมื่อ $\boldsymbol{a}_i$ และ $\boldsymbol{b}_i$ เป็นเวกเตอร์ และจาก (2.12) จะได้

$$\boldsymbol{a}_i \boldsymbol{b}_i^T (\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$

ถ้าเลือกให้ $\boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i$

$$\boldsymbol{a}_i \boldsymbol{b}_i^T \boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$

$$\boldsymbol{a}_i = \frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})}{\boldsymbol{b}_i^T \boldsymbol{b}_i}$$

จะได้ $$D_{i+1} = D_i + \frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})}{\boldsymbol{b}_i^T \boldsymbol{b}_i} . \boldsymbol{b}_i^T , \ i = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.13}$$

ถ้าเลือกให้ $\boldsymbol{b}_i = D_i^T \boldsymbol{y}_i$ เมื่อ $\boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$ และ $\boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i$ จะได้

$$\boldsymbol{a}_i (D_i^T \boldsymbol{y}_i)^T \boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$

$$\boldsymbol{a}_i \boldsymbol{y}_i^T D_i \boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$

$$\boldsymbol{a}_i = \frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})}{\boldsymbol{y}_i^T D_i \boldsymbol{s}_i}$$

ดังนั้น $$D_{i+1} = D_i + \frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})}{\boldsymbol{y}_i^T D_i \boldsymbol{s}_i} . \boldsymbol{y}_i^T D_i , \ i = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.14}$$

ในการหาค่า x_{i+1} ตามสูตร

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - D_i^{-1} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$$

เราไม่คำนวณตัวผกผัน D_i^{-1} เพราะยุ่งยาก แต่เราปรับสมการเป็น

$$D_i(\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i) = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$$

ให้ $\boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i$ แล้วแก้สมการ

$$D_i \boldsymbol{b}_i = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$$

ได้ $\boldsymbol{b}_i$ แล้วจึงปรับค่า x_{i+1} โดย

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b}_i$$

วิธีของบรอยเดนแบบตัวผกผัน

ในวิธีของบรอยเดนระบบสมการ (2.11) เราสามารถที่จะใช้สูตรผกผันในการแก้ระบบสมการได้เป็น

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$$

และปรับเปลี่ยนเมทริกซ์ผกผันโดยสูตรของเชอร์แมน-มอร์ริสัน-วู้ดเบอรี่ (Sherman-Morrison-Woodbury) (Dennis & Schnabel, 1996)

$$k = 1 + \boldsymbol{b}_i^T B^{-1}\boldsymbol{a}_i \tag{2.15}$$

$$(B + \boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}_i^T)^{-1} = B^{-1} - \frac{1}{k}B^{-1}\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}_i^T B^{-1} \tag{2.16}$$

เมื่อ B เป็นเมทริกซ์ที่มีตัวผกผัน และ $\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_i \in R^n$

กำหนดให้ $\boldsymbol{a}_i = \dfrac{1}{\boldsymbol{b}_i^T\boldsymbol{b}_i}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$, $\boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i$ และ $\boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$ จาก (2.12) เป็น

$$D_{i+1} = D_i + \boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}_i^T$$

จะได้

$$D_{i+1}^{-1} = (D_i + \boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}_i^T)^{-1} \tag{2.17}$$

โดย (2.16) และ (2.15) จะได้

$$\begin{aligned}
(D_i + \boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}_i^T)^{-1} &= D_i^{-1} - \frac{1}{1 + \boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1}\boldsymbol{a}_i}D_i^{-1}\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1} \\
&= D_i^{-1} - \frac{1}{\boldsymbol{b}_i^T(\boldsymbol{b}_i + D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}))}D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1} \\
&= D_i^{-1} - \frac{1}{\boldsymbol{b}_i^T(-D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i) + D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}))}D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1} \\
&= D_i^{-1} - \frac{1}{\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1}(-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i) + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}))}D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1}
\end{aligned}$$

นั่นคือ

$$= D_i^{-1} - \frac{1}{\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1}\boldsymbol{y}_i}D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1}, \; i = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.18}$$

จาก (2.17) และ (2.18) จะได้ สูตรปรับเปลี่ยนแบบผกผัน เป็น

$$D_{i+1}^{-1} = D_i^{-1} - \frac{1}{\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1}\boldsymbol{y}_i}D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})\boldsymbol{b}_i^T D_i^{-1}, \; i = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.19}$$

และสูตรแบบตัวผกผันอีกสูตร โดยพิจารณาจากสูตร (2.9) เขียนในแบบตัวผกผันเป็น

$$\boldsymbol{x}_{i+1}-\boldsymbol{x}_i=D_{i+1}^{-1}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)]$$

และ $\quad \boldsymbol{x}_{i+1}-\boldsymbol{x}_i=-D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$

กำหนดให้ $\boldsymbol{y}_i=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$ สมการข้างต้นเป็น

$$\boldsymbol{x}_{i+1}-\boldsymbol{x}_i=D_{i+1}^{-1}\boldsymbol{y}_i \tag{2.20}$$

และ
$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_{i+1}-\boldsymbol{x}_i&=-D_i^{-1}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)+\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})]\\&=D_i^{-1}[\boldsymbol{y}_i-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})]\end{aligned}$$

นั่นคือ
$$\boldsymbol{x}_{i+1}-\boldsymbol{x}_i=D_i^{-1}\boldsymbol{y}_i-D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}) \tag{2.21}$$

สมการ (2.20) – (2.21) จะได้

$$\mathbf{0}=D_{i+1}^{-1}\boldsymbol{y}_i-D_i^{-1}\boldsymbol{y}_i+D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$

$$(D_{i+1}^{-1}-D_i^{-1})\boldsymbol{y}_i=-D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}) \tag{2.22}$$

กำหนดให้
$$(D_{i+1}^{-1}-D_i^{-1})=\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^T \tag{2.23}$$

เมื่อ $\boldsymbol{u}$ และ $\boldsymbol{v}$ เป็นเวกเตอร์สดมภ์ (column vector)

จาก (2.22) และ (2.23) จะได้

$$\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{y}_i=-D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$

โดยการเลือกให้ $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{y}_i$ จะได้

$$\boldsymbol{u}\boldsymbol{y}_i^T\boldsymbol{y}_i=-D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$

$$\boldsymbol{u}=-\frac{1}{\boldsymbol{y}_i^T\boldsymbol{y}_i}D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$

จาก (2.23) ได้ สูตรปรับเปลี่ยนตัวผกผันอีกแบบหนึ่งเป็น

$$D_{i+1}^{-1}=D_i^{-1}-\frac{1}{\boldsymbol{y}_i^T\boldsymbol{y}_i}D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})\boldsymbol{y}_i^T\ ,\ i=0,1,2,\ldots \tag{2.24}$$

ในการใช้สูตรปรับเปลี่ยนตัวผกผันในการหา $\boldsymbol{x}_{i+1}$ หาได้โดยตรงจากสูตร (2.10) โดยไม่ต้องแก้สมการ

ระเบียบวิธีของบรอยเดนมีอันดับการลู่เข้าเหนือเชิงเส้น และในการคำนวณใช้แรงงานน้อยกว่าวิธีของนิวตันเนื่องจากไม่ต้องคำนวณหาค่าเมทริกซ์อนุพันธ์ย่อย (Jacobian Matrix) ในสูตร (2.13) และ (2.19) เรียกว่า สูตรการปรับเปลี่ยนที่ดีของบรอยเดน (Broyden's Good Update) และเรียกสูตร (2.14) และ (2.24) เรียกว่า สูตรการปรับเปลี่ยนที่ไม่ดีของบรอยเดน (Broyden's Bad Update) (Dennis & Schnabel, 1996)

วิธียิงเป้าของนิวตัน

พิจารณาปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ

สมการเชิงอนุพันธ์สามัญ :

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}'(t),t)=\boldsymbol{0} \tag{2.25}$$

เงื่อนไขค่าขอบ :

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{Y}'(t_0),\boldsymbol{Y}'(t_f))=\boldsymbol{0} \tag{2.26}$$

ในการใช้สูตร (2.7) เราให้ $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{Y}'(t_0)$ เป็นจุดเริ่มต้น และสมมุติว่า $\boldsymbol{S}$ เป็นฟังก์ชันที่ส่ง $\boldsymbol{z}$ ไปยัง $\boldsymbol{Y}'(t)$ โดยกฎ (2.25) คือ

$$\boldsymbol{S}(t,\boldsymbol{z})=\boldsymbol{Y}'(t)$$

เมื่อ $\boldsymbol{Y}'(t)$ เป็นผลเฉลยของ (2.25) ที่มี $\boldsymbol{z}$ เป็นจุดเริ่มต้น กำหนดฟังก์ชัน $\boldsymbol{F}$ ของ $\boldsymbol{z}$ โดยให้

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{z})=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{S}(t_f,\boldsymbol{z}))=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{Y}'(t_f))$$

ปัญหากลายมาเป็นปัญหาการหารากของสมการ $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{z})=\boldsymbol{0}$ เราจะหารากโดยใช้สูตร (2.7) ซึ่งเขียนสูตรการทำซ้ำเป็น

$$\boldsymbol{z}_{i+1}=\boldsymbol{z}_i-[\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{z}_i)]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{z}_i),\qquad i=1,2,3,\ldots$$

ให้ $\Delta\boldsymbol{z}_i=\boldsymbol{z}_{i+1}-\boldsymbol{z}_i$ จะได้ว่าสมการข้างต้นเป็น

$$[\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{z}_i)]\Delta\boldsymbol{z}_i=-\boldsymbol{F}(\boldsymbol{z}_i) \tag{2.27}$$

เมื่อ $\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{z}_i)$ เป็นเมทริกซ์จาโคเบียนของ $\boldsymbol{F}$ ถ้าเราทราบ $\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{z}_i)$ แล้วหาผลเฉลย $\Delta\boldsymbol{z}_i$ ของระบบสมการเชิงเส้น (2.27) แล้วให้ $\boldsymbol{z}_{i+1}=\boldsymbol{z}_i+\Delta\boldsymbol{z}_i$ ก็จะได้ลำดับ $\{\boldsymbol{z}_i : i=0,1,2,\ldots\}$ เราหวังว่าลำดับนี้จะลู่เข้าหาจุดที่เป็นผลเฉลยของสมการ $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{z})=\boldsymbol{0}$

ในแง่ของการคำนวณ งานที่ยากที่สุดคือการหาเมทริกซ์ $\boldsymbol{F}'(z)$ เพราะว่าเราไม่มีสูตรที่แสดงฟังก์ชัน $\boldsymbol{F}$ ในรูปชัดแจ้ง การหา $\boldsymbol{F}'(z)$ กระทำดังนี้ สมมุติว่าฟังก์ชัน $\boldsymbol{g}$ มีอนุพันธ์ย่อยเป็นฟังก์ชันต่อเนื่องในบริเวณเปิดซึ่งมีจุด $(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{S}(t_f, \boldsymbol{z}))$ อยู่ภายใน และ $\boldsymbol{S}$ เป็นฟังก์ชันต่อเนื่องที่มีอนุพันธ์ย่อยเทียบกับ $\boldsymbol{z}$ โดยกฎลูกโซ่ จะได้

$$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{z}) = \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{z}} + \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{S}} \frac{\partial \boldsymbol{S}_f}{\partial \boldsymbol{z}} \tag{2.28}$$

เมื่อ $\dfrac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{z}}, \dfrac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{S}}$ และ $\dfrac{\partial \boldsymbol{S}_f}{\partial \boldsymbol{z}}$ เป็นเมทริกซ์จาโคเบียน โดยปกติแล้วฟังก์ชัน $\boldsymbol{g}$ จะมีแบบที่ง่ายต่อการหาอนุพันธ์ย่อย แต่การหา $\dfrac{\partial \boldsymbol{S}_f}{\partial \boldsymbol{z}}$ กระทำได้ยาก

ในการหา $\dfrac{\partial \boldsymbol{S}_f}{\partial \boldsymbol{z}}$ เราหาได้จาก $\dfrac{\partial \boldsymbol{S}_f}{\partial \boldsymbol{z}} = \left.\dfrac{\partial \boldsymbol{S}}{\partial \boldsymbol{z}}\right|_{t=t_f}$ พิจารณาฟังก์ชัน $\boldsymbol{S}(t, \boldsymbol{z}) = \boldsymbol{Y}'(t)$ ดังนั้น สำหรับ $t \in [t_0, t_f]$ เราได้

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}'(t), t) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{S}(t, \boldsymbol{z}), t)$$

หาอนุพันธ์เทียบกับ $\boldsymbol{z}$ ทั้งสองข้างได้

$$\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}'(t), t)/\partial \boldsymbol{z} = (\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}'(t), t)/\partial \boldsymbol{S})(\partial \boldsymbol{S}/\partial \boldsymbol{z}) = \boldsymbol{0}$$

เมื่อ $\boldsymbol{p}(t) = \dfrac{\partial \boldsymbol{S}}{\partial \boldsymbol{z}}$ จะได้

$$\left[\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{S}} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}'(t), t)\right] \boldsymbol{p}(t) = \boldsymbol{0} \tag{2.29}$$

ผลเฉลยของระบบสมการเชิงอนุพันธ์ (2.29) จะเป็น $\dfrac{\partial \boldsymbol{S}}{\partial \boldsymbol{z}}$ ตามต้องการ

เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

อังคณา บุญดิเรก และอำพล ธรรมเจริญ (2542) ได้ศึกษาการแก้ปัญหาการเปลี่ยนวงโคจรของยานอวกาศ ซึ่งมีสมการเชิงอนุพันธ์สามัญเป็น

$$\begin{aligned} x_1'' &= -kx_1/r^3 \\ x_2'' &= -kx_2/r^3 \end{aligned} \quad , \; t \in [t_0, t_f] \tag{2.30}$$

เมื่อ $r = (x_1^2 + x_2^2)^{1/2}$ และเงื่อนไขเป็น

$$x_1(t_0) = a_1, x_1(t_f) = b_1, x_2(t_0) = a_2, x_2(t_f) = b_2$$

ปัญหาค่าขอบดังกล่าว มีสมการเชิงอนุพันธ์อยู่ในรูปแบบไม่เชิงเส้นและเงื่อนไขค่าขอบอยู่ในรูปแบบปัญหาค่าขอบแบบแยกได้ โดยแก้ปัญหาด้วยวิธียิงเป้าซึ่งใช้วิธีของรุงเง-คุตตาในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นของสมการเชิงอนุพันธ์และใช้ระเบียบวิธีของบรอยเดนในการปรับค่าเริ่มต้น

อำพล ธรรมเจริญ (2530) ได้ศึกษาการแก้ปัญหาค่าขอบ (2.30) โดยวิธียิงเป้าและวิธีกึ่งแบบเชิงเส้น (Quasi-Linearization) โดยวิธียิงเป้าได้ใช้วิธีของรุงเง-คุตตาในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและใช้ระเบียบวิธีของนิวตันในการปรับค่าเริ่มต้น ส่วนวิธีกึ่งแบบเชิงเส้นเป็นวิธีของนิวตันอีกลักษณะหนึ่ง โดยที่มองฟังก์ชันที่เป็นผลเฉลยของปัญหาค่าเริ่มต้นเป็นตัวไม่ทราบค่า

อรรฒพร ประชานุรักษ์ (2550) ได้ศึกษาการแก้ปัญหาสมการค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยวิธียิงเป้าโดยใช้วิธีของเทย์เลอร์อันดับสี่ ในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นและใช้วิธีของบรอยเดนในการปรับค่าเริ่มต้นให้สอดคล้องกับเงื่อนไขค่าขอบ ผลปรากฏว่าวิธีของบรอยเดนใช้ได้ดีกับปัญหาค่าขอบที่มีเงื่อนไขค่าขอบแบบแยกได้ สำหรับปัญหาค่าขอบที่มีเงื่อนไขค่าขอบแบบแยกไม่ได้วิธีของบรอยเดนไม่สามารถแก้ปัญหาได้

อำพล ธรรมเจริญ (2553) ได้ศึกษาการแก้ระบบสมการที่มีรูปแบบเป็น

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$$

เมื่อ $\boldsymbol{F},\boldsymbol{x} \in R^n$ และ $\boldsymbol{u} \in R^m$ โดยสูตรวิธีของนิวตัน (2.7) จะได้

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - \left[\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i),\boldsymbol{x}_i)\right]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i),\boldsymbol{x}_i), \qquad i = 0,1,2,\ldots$$

เมื่อ $\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i),\boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{F_u}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i),\boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x}_i) + \boldsymbol{F_x}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i),\boldsymbol{x}_i)$

โดยการประมาณค่าเมทริกซ์จาโคเบียน $\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x}_i)$ ด้วย D_i จะได้

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - \left[\boldsymbol{F_u}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i),\boldsymbol{x}_i)D_i + \boldsymbol{F_x}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i),\boldsymbol{x}_i)\right]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i),\boldsymbol{x}_i), \qquad i = 0,1,2,\ldots \tag{2.31}$$

และใช้สูตรปรับเปลี่ยนเมทริกซ์

$$D_{i+1} = D_i + \frac{1}{\boldsymbol{b}_i^T\boldsymbol{b}_i}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_{i+1}) - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i) - D_i\boldsymbol{b}_i)\boldsymbol{b}_i^T \tag{2.32}$$

เมื่อ $\boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i$ วิธีการนี้ยังคงส่วนที่ดีของวิธีนิวตันไว้และแทนที่ส่วนที่ยุ่งยากในการคำนวณของวิธีนิวตันโดยใช้วิธีของบรอยเดน โดยผู้วิจัยเรียกระเบียบวิธีนี้ว่า วิธีนิวตัน-บรอยเดน ในกรณีที่ลู่เข้า วิธีนิวตัน-บรอยเดน จะลู่เข้าในอันดับเหนือเชิงเส้น และคาดว่าจะดีกว่าวิธีของบรอยเดน

David (2002) ได้ศึกษาเรื่องการนับ Floating-Point Operations (FLOP) ซึ่งเป็นการคำนวณความสิ้นเปลืองของการใช้แรงงานในการกระทำทางคณิตศาสตร์ (เช่น การบวก, การคูณ เป็นต้น) ตัวอย่างการนับ flop เช่น

การคูณเมทริกซ์กับเวกเตอร์

กำหนดเมทริกซ์ A มีมิติ $n \times m$ และ เวกเตอร์ x มีมิติ $m \times 1$ คูณเมทริกซ์ A ด้วยเวกเตอร์ x จะได้ผลลัพธ์เป็น $b = Ax$ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ คือ

$$
\begin{array}{l}
b \leftarrow 0 \\
for\, i = 1,\dots,n \\
\left[\begin{array}{l} for\, j = 1,\dots,m \\ \quad [b_i \leftarrow b_i + a_{ij}x_j \end{array}\right.
\end{array}
$$

การคำนวณข้างต้นใช้แรงงานในการกระทำ $2nm$ flop

การคูณเมทริกซ์กับเมทริกซ์

กำหนดเมทริกซ์ A มีมิติ $n \times m$ และ เมทริกซ์ X มีมิติ $m \times p$ คูณเมทริกซ์ A ด้วยเมทริกซ์ X จะได้ผลลัพธ์เป็น $B = AX$ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ คือ

$$
\begin{array}{l}
b \leftarrow 0 \\
for\, i = 1,\dots,n \\
\left[\begin{array}{l} for\, j = 1,\dots,p \\ \left[\begin{array}{l} for\, k = 1,\dots,m \\ \quad [b_{ij} \leftarrow b_{ij} + a_{ik}x_{kj} \end{array}\right. \end{array}\right.
\end{array}
$$

การคำนวณใช้แรงงานในการกระทำ $2nmp$ flop