บทที่ 2
เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

การศึกษาการแก้ปัญหาสมการค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ โดยใช้วิธีของเทย์เลอร์ในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นของระบบสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ (ไม่เชิงเส้น,อันดับสูง) และปรับค่าเริ่มต้นที่ไม่ทราบที่สอดคล้องกับค่าขอบด้วยวิธีของบรอยเดนนั้น ได้มีเอกสารบทความและงานวิจัย ซึ่งผู้วิจัยจะกล่าวรายละเอียดตามหัวข้อต่อไปนี้

1.การแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น (Solving Initial Value Problems)

2.ปัญหาค่าขอบ (Boundary Value Problems)

3.การแก้ระบบสมการ (Solving System of Equations)

4.เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

การแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น

ศิริพงษ์ ศรีพิพัฒน์ (2528) ปัญหาค่าเริ่มต้นซึ่งกำหนดโดยสมการเชิงอนุพันธ์และเงื่อนไขจุดเริ่มต้น

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

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

ทฤษฎีบท การมีผลเฉลยแน่นอนและมีเพียงผลเฉลยเดียว (The Existence and Uniqueness) ถ้า $f(t, y)$ เป็นฟังก์ชันที่ต่อเนื่องสำหรับ $a \le t \le b$ และทุกค่าของ y ถ้า $f(t, y)$ ทำให้เงื่อนไขของลิปชิตซ์ (Lipschitz Condition) เป็นจริง กล่าวคือ ถ้าสามารถหาค่าคงที่ $L > 0$ 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 $y \in R$

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

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

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

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

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 $y(t_i)$ โดยมีค่าความคลาดเคลื่อนเฉพาะที่เป็น $R = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!}y^{(k+1)}(\xi) = O(h^{k+1})$ และค่าความคลาดเคลื่อนทั้งหมดเป็น $O(h^k)$

กรณี $y \in R^n$

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

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

วิธีของรุงเง - คุตตา

ระเบียบวิธีของรุงเง - คุตตา จัดได้ว่าเป็นระเบียบวิธีที่ได้รับความนิยมและใช้กันอย่างกว้างขวางโดยเฉพาะในการคำนวณที่ต้องการผลลัพธ์ ที่มีความเที่ยงตรงสูง แนวความคิดที่ใช้ในระเบียบวิธีของรุงเง - คุตตา นี้คือ การหาค่าความชันที่มีความเที่ยงตรงสูงเพื่อก่อให้เกิดผลลัพธ์ที่มีความเที่ยงตรงสูงตามมา สมการหลักที่ใช้ในการคำนวณผลลัพธ์ในระเบียบวิธีของรุงเง - คุตตา คือ

$$y_{k+1} = y_k + \Phi(t_k, y_k, h) \cdot h \tag{2.1}$$

เมื่อ $\Phi(t_k, y_k, h)$ เรียกว่าฟังก์ชันส่วนเพิ่ม (Increment Function) คือความชันเฉลี่ยตลอดขนาดช่วงความกว้าง h ที่จะนำไปใช้ในการคำนวณหาส่วนที่เพิ่มขึ้นจากผลลัพธ์เดิม โดยที่ฟังก์ชันส่วนเพิ่มนี้สามารถเขียนให้อยู่ในรูปแบบโดยทั่วไปได้

$$\Phi = a_1k_1 + a_2k_2 + a_3k_3 + \ldots + a_nk_n \tag{2.2}$$

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

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_i, y_i) \\
k_2 &= f(t_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h) \\
k_3 &= f(t_i + p_2h, y_i + q_{21}k_1h + q_{22}k_2h) \\
&\vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \\
k_n &= f(t_i + p_{n-1}h, y_i + q_{n-1,1}k_1h + q_{n-2,2}k_2h + \ldots + q_{n-1,n-1}k_{n-1}h)
\end{aligned} \tag{2.3}$$

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

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

รูปแบบทั่วไปของสมการรุงเง – คุตตาอันดับสี่ คือ

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

เมื่อ

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_i, y_i) \\
k_2 &= f(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h) \\
k_3 &= f(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h) \\
k_4 &= f(t_i + h, y_i + k_3h)
\end{aligned}$$

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

ปัญหาค่าขอบ

เราจะกล่าวถึงปัญหาที่มีสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและเงื่อนไขที่จุดมากกว่าหนึ่งจุด อาจจะเป็นเงื่อนไขที่จุดเริ่มต้นและเงื่อนไขที่จุดปลายสุดท้ายซึ่งเรียกว่า ปัญหาค่าขอบสองจุด

ตัวอย่างเช่นปัญหาการเปลี่ยนวงโคจรของยานอวกาศ มีสมการเชิงอนุพันธ์สามัญเป็น

$$x_1'' = -kx_1 / r^3 \qquad , t \in [t_0, t_f]$$
$$x_2'' = -kx_2 / r^3$$

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

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

สำหรับปัญหาข้างบนนี้เราอาจแปลงเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งได้ โดยให้ $y_1 = x_1, y_2 = x_2, y_3 = x_1'$ และ $y_4 = x_2'$ จะได้สมการเชิงอนุพันธ์เป็น

$$y_1' = y_3$$
$$y_2' = y_4$$
$$y_3' = -ky_1 / r^3$$
$$y_4' = -ky_2 / r^3$$

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

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

ดังนั้นปัญหาค่าขอบสมการเชิงอนุพันธ์ที่มีตัวแปรเดียวจะต้องเป็นอันดับสองขึ้นไปหรือถ้าเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งก็ต้องมีตัวแปรตามอย่างน้อยสองตัว และสำหรับสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง จำนวนเงื่อนไขต้องมีเท่ากับจำนวนตัวแปรตาม มิฉะนั้นอาจไม่ได้ผลเฉลย ถ้าจำนวนเงื่อนไขมากเกินไปก็อาจจะไม่มีผลเฉลย และถ้าจำนวนเงื่อนไขน้อยเกินไปก็อาจจะหาผลเฉลยเฉพาะรายไม่ได้

เราแบ่งปัญหาค่าขอบเป็น 2 แบบ ดังนี้

แบบแรก เงื่อนไขค่าขอบอยู่ในแบบกำหนดค่าที่จุดปลาย สมมุติ $\mathbf{y} = [x\ y]^T$ เงื่อนไขค่าขอบจะเป็น $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \mathbf{y}(t_f) = \mathbf{y}_f$ ซึ่งในที่นี้จะเรียกว่า ปัญหาค่าขอบปรกติ

แบบสอง เงื่อนไขค่าขอบอยู่ในแบบสมการ $\mathbf{g}(\mathbf{y}(t_0), \mathbf{y}(t_f)) = \mathbf{0}$ ซึ่งเราเรียกว่า ปัญหาสมการค่าขอบ

วิธียิงเป้า

หลักการของวิธียิงเป้า เราสมมุติเงื่อนไขเริ่มต้นที่ขาดหายไปแล้วดำเนินการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น จะได้ค่าที่จุดปลายสุดท้าย ซึ่งอาจไม่ตรงกับเงื่อนไข เรามีวิธีการที่จะเปลี่ยนค่าจุดเริ่มต้นเพื่อให้ค่าที่จุดปลายสอดคล้องกับเงื่อนไขที่กำหนด วิธีที่จะปรับจุดเริ่มต้นเรากระทำได้หลายวิธี เราใช้วิธีเช่นเดียวกับการแก้สมการ โดยให้จุดเริ่มต้นเป็นเสมือนตัวไม่ทราบค่าซึ่งจะต้องหา และค่าของผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์ที่จุดปลายสุดท้ายจะเป็นฟังก์ชันของจุดเริ่มต้น เมื่อเรากำหนดเงื่อนไขก็จะได้สมการแต่จะไม่มีแบบของฟังก์ชันที่จะเขียนสมการให้เห็นชัดแจ้ง

สมมุติ $z = [x^T \ y^T]^T$ ปัญหาค่าขอบปรกติเป็น

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

$$y(t_0) = y_0, y(t_f) = y_f$$

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

$$y(t_f) = F(x(t_0))$$

จากเงื่อนไขที่จุดปลายสุดท้าย $y(t_f) = y_f$ เราได้สมการเป็น

$$F(x(t_0)) = y_f$$

โดย $x(t_0)$ เป็นตัวไม่ทราบค่า วิธีหาค่า $x(t_0)$ อาจกระทำโดยวิธีของนิวตัน หรือวิธีของบรอยเดน ขั้นตอนในการแก้ปัญหาเป็นดังนี้

1. สมมุติค่า $x(t_0) = a_0$ แล้วแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นข้างล่างด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขอันดับสูงเช่น วิธีของรุงเง - คุตตา หรือวิธีของเทย์เลอร์

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

$$y(t_0) = y_0 \ , \ x(t_0) = a_0$$

ได้ค่า $F(a_0) = y(t_f)$

2. ตรวจสอบว่า $y(t_f) = y_f$ ถ้าใช่ก็แสดงว่าผลที่ได้จากข้อ 1 เป็นผลเฉลยของปัญหาค่าขอบ ถ้าไม่สอดคล้องก็ต้องเปลี่ยนค่า $x(t_0)$ ใหม่

3. วิธีเปลี่ยนค่า $x(t_0)$ กระทำได้หลายวิธีเช่น วิธีของนิวตัน หรือวิธีของบรอยเดน เมื่อได้ค่า $x(t_0)$ แล้วก็หาค่า $F(x(t_0))$ ด้วยวิธีในข้อ 1 กระทำจนกว่าจะได้ผลลัพธ์

สำหรับปัญหาสมการค่าขอบ

เราให้ $G(x(t_0), y(t_0)) = f[x(t_0), F(y(t_0))]$

ปัญหาเป็นการแก้สมการ $G(x(t_0), y(t_0)) = \mathbf{0}$

การแก้ระบบสมการ

ระบบสมการที่เราจะหาค่ารากมีรูปแบบเป็นฟังก์ชันเวกเตอร์

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

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

สมมุติจุด z ที่มีสมบัติว่า $\boldsymbol{g}(z) = z$ เราเรียกว่าเป็น จุดตรึง (Fixed Point) ของฟังก์ชัน $\boldsymbol{g}$ ดังนั้นวิธีการที่จะหารากของสมการ $F(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ โดยการแปลงสมการในแบบ $\mathbf{x} = \boldsymbol{g}(x)$ แล้วหาจุดตรึงของ $\boldsymbol{g}$ เรียกว่าวิธีซ้ำเดิมโดยจุดตรึง (Fixed Point Iteration)

ทฤษฎีบท ถ้าฟังก์ชัน $\boldsymbol{g} : R^n \to R^n$ ส่งจุดในเซตปิด S ไปยังตัวมันเอง คือ ถ้า x เป็นสมาชิกของ S แล้ว $\boldsymbol{g}(x)$ จะเป็นสมาชิกของ S ด้วย และ $\boldsymbol{g}$ มีสมบัติ หดตัว (Contractive) บน S กล่าวคือ $\|\boldsymbol{g}(x) - \boldsymbol{g}(y)\| \le K\|x - y\|$ สำหรับทุก ๆ จุด $x, y \in S$ และ $K < 1$ แล้ว (1) ถ้าจุดเริ่มต้น x_0 อยู่ใน S แล้ว ลำดับ $\{x_i \mid x_i = \boldsymbol{g}(x_{i-1}), i = 1,2,3,...\}$ จะลู่เข้าหาจุด z ใน S และ (2) จุด z จะเป็นจุดตรึงของฟังก์ชัน $\boldsymbol{g}$ และมีเพียงจุดเดียว คือ มีจุด z จุดเดียวใน S ซึ่ง $\boldsymbol{g}(z) = z$

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

ทฤษฎีบท ให้ f เป็นฟังก์ชันสเกลาร์ของสองตัวแปร x และ y ฟังก์ชัน f มีอนุพันธ์ย่อยอันดับหนึ่งและอันดับสองเป็นฟังก์ชันต่อเนื่องในบริเวณ D สำหรับจุด (x, y) และ (a,b) ในบริเวณดังกล่าว จะได้

$$f(x,y) = f(a,b) + f_x(a,b)(x-a) + f_y(a,b)(y-b) + R_2 \tag{2.4}$$

เมื่อ $R_2 = \dfrac{1}{2!}\left(f_{xx}(\xi,\eta)(x-a)^2 + 2f_{xy}(\xi,\eta)(x-a)(y-b) + f_{yy}(\xi,\eta)(y-b)^2\right)$

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

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

กรณี f เป็นฟังก์ชันของหลายตัวแปรเราเขียน (2.4) ในรูปเวกเตอร์ ให้ $\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ \dots n]^T$ และ $\mathbf{y} = [y_1\ y_2\ \dots n]^T$ ได้ดังนี้

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

เมื่อ $\boldsymbol{O}(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2)$ เป็นพจน์ที่มีกำลังสูงกว่าหรือเท่ากับกำลังสอง ซึ่งมีสมบัติว่า $\boldsymbol{O}(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2) < K\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$ เมื่อ K เป็นจำนวนบวกค่าคงตัว

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

$$g(x) = g(y) + g^{'}(y)(x-y) + O(\|x-y\|^2) \tag{2.6}$$

ทฤษฎีบท ให้ g เป็นฟังก์ชันเวกเตอร์ที่ส่งจุดในบริเวณ D ไปอยู่ในบริเวณ D และมีอนุพันธ์ย่อยเป็นฟังก์ชันต่อเนื่องในบริเวณ D ถ้ามีจำนวนบวก M ซึ่ง $\|g^{'}(x)\| \leq M < 1$ ทุกค่าของ $x \in D$ แล้ว ลำดับ $\{x_i \mid x_i = g(x_{i-1}), i = 1,2,3,...; x \in D\}$ จะลู่เข้าหาจุดตรึงใน D

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

วิธีของนิวตัน

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

$$x_{i+1} = x_i + h$$

และโดยสูตร (2.6) จะได้

$$f(x_i + h) = f(x_i) + f^{'}(x_i)h + O(\|h\|^2)$$

ตัดพจน์กำลังสองออกและให้ $f(x_i + h) = 0$ ดังนั้น

$$0 = f(x_i) + f^{'}(x_i)h$$

ถ้า $f^{'}(x_i)$ มีตัวผกผัน จะได้

$$h = -[f^{'}(x_i)]^{-1} f(x_i)$$

สูตรการกระทำซ้ำในแบบของนิวตัน คือ

$$x_{i+1} = x_i - [f^{'}(x_i)]^{-1} f(x_i) \quad , \quad i = 0,1,2,...$$

วิธีของนิวตันจะต้องมีจุดเริ่มต้น x_0 ถ้าจุดเริ่มต้นอยู่ไม่ไกลจากรากมากเกินไป วิธีของนิวตัน จะลู่เข้าหาจุดที่เป็นรากของระบบสมการ $f(x) = 0$ มีอัตราการลู่เข้าเป็นอันดับสอง (อำพล ธรรมเจริญ, 2532) แต่วิธีของนิวตันต้องใช้แรงงานมากในการหารากของระบบสมการเชิงเส้นในทุก ๆ ครั้งของการกระทำซ้ำ

วิธีของบรอยเดน

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

$$x_{i+1} = x_i - [f^{'}(x_i)]^{-1} f(x_i) \tag{2.7}$$

เมื่อ $i = 0,1,2,...$

เนื่องจากการหา $f'(x_i)$ เป็นเมทริกซ์ที่หาค่าได้ยาก จึงมีแนวคิดที่จะหาเมทริกซ์เพื่อประมาณค่าของ $f'(x_i)$ เมทริกซ์ที่ใช้ประมาณค่าต้องหาได้มาโดยง่ายและประมาณค่า $f'(x_i)$ ได้ดี

พิจารณาโดยวิธีเส้นตัดโค้ง (Secant method) มีสูตรว่า

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

เมื่อ $i = 0,1,2,...$

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)

สำหรับฟังก์ชัน ค่าเวกเตอร์เป็น

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

ถ้าเราเขียนอีกขั้นหนึ่งจะได้

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

จาก (2.7) เมื่อให้ D_i แทน $\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_i)$

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

คูณด้วย D_i ได้

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

จาก (2.10) – (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 $D_{i+1} - D_i = \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^T$

เมื่อ $\boldsymbol{a}$ และ $\boldsymbol{b}$ เป็นเวกเตอร์และจาก (2.12) จะได้

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

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

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

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

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

ถ้าเลือกให้ $\boldsymbol{b} = D_i^T\boldsymbol{y}_i$ 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

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

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

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

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

ในการหาค่า $\boldsymbol{x}_{i+1}$ ตามสูตร

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

เราไม่ได้คำนวณตัวผกผัน D_i^{-1} เพราะยุ่งยากแต่เราปรับสมการเป็น

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

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

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

ได้ $\boldsymbol{b}$ แล้วจึงปรับค่า $\boldsymbol{x}_{i+1}$ โดย

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

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)

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

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

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

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

จาก (2.12) เป็น

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

จะได้

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

โดย (2.16) และ (2.15) จะได้

$$(D_i + \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^T)^{-1} = D_i^{-1} - \frac{1}{1 + \boldsymbol{b}^T D_i^{-1} \boldsymbol{a}} D_i^{-1} \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^T D_i^{-1}$$

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

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

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

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

จาก (2.17) และ (2.18) จะได้ สูตรปรับเปลี่ยนแบบผกผัน เป็น

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

และสูตรแบบตัวผกผันอีกสูตร โดยพิจารณาจากสูตร (2.10) เขียนในแบบตัวผกผันเป็น

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

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

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

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

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

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

สมการ (2.20) - (2.21) จะได้

$$\boldsymbol{0} = D_{i+1}^{-1}\boldsymbol{y}_i - D_i^{-1}\boldsymbol{y}_i + D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})$$
$$(D_{i+1}^{-1} - D_i^{-1})\boldsymbol{y}_i = -D_i^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1}) \qquad (2.22)$$

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

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

นั่นคือ (2.22) ได้

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

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

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

จาก (2.23) ได้ สูตรปรับเปลี่ยนตัวผกผันอีกแบบหนึ่งเป็น

$$D_{i+1}^{-1} = D_i^{-1} - \frac{1}{y_i^T y_i} D_i^{-1} f(x_{i+1}) y_i^T \ , \ i = 0,1,2,... \qquad (2.24)$$

ระเบียบวิธีของบรอยเดนมีอันดับการลู่เข้าเหนือเชิงเส้น (อำพล ธรรมเจริญ,2532) 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)

ในการใช้สูตรปรับเปลี่ยนตัวผกผันในการหา x_{i+1} หาได้โดยตรงจากสูตร (2.10) ไม่ต้องแก้สมการ

เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

อังคณา บุญดิเรก และอำพล ธรรมเจริญ (2542) แก้ปัญหาการเปลี่ยนวงโคจรของยานอวกาศ มีสมการเชิงอนุพันธ์สามัญเป็น

$$\begin{aligned} x_1'' &= -kx_1 / r^3 \\ x_2'' &= -kx_2 / r^3 \end{aligned} \quad , \ t \in [t_0, t_f] \qquad (2.25)$$

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

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

ปัญหาค่าขอบดังกล่าวสมการเชิงอนุพันธ์อยู่ในรูปแบบไม่เชิงเส้นและเงื่อนไขค่าขอบอยู่ในรูปแบบปัญหาค่าขอบปรกติ ผู้วิจัยแก้ปัญหาโดยวิธียิงเป้า ใช้วิธีรุงเง - คุตตาในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นของสมการเชิงอนุพันธ์และใช้ระเบียบวิธีของบรอยเดนในการปรับค่าเริ่มต้นของปัญหาค่าขอบปรกติ

อำพล ธรรมเจริญ (2530) การแก้ปัญหาค่าขอบ (2.25) ผู้วิจัยแก้ปัญหาโดยวิธียิงเป้าและวิธีกึ่งแบบเชิงเส้น (Quasi-Linearization) โดยวิธียิงเป้าใช้วิธีรุงเง - คุตตาในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นของสมการเชิงอนุพันธ์และใช้ระเบียบวิธีของนิวตันในการเปลี่ยนค่าเริ่มต้น ส่วนวิธีกึ่งแบบเชิงเส้นเป็นวิธีของนิวตันอีกลักษณะหนึ่ง โดยที่มองฟังก์ชันที่เป็นผลเฉลยของปัญหาค่าเริ่มต้นเป็นตัวไม่ทราบค่า