數字分析法在物理學上之應用

丁 秀 華

一、導 論

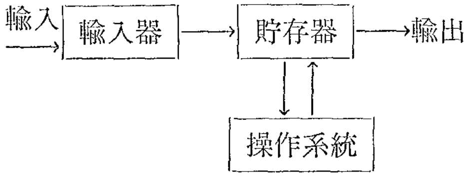
近年來，本省各機關學校，紛紛有電子計算機之裝置，這實在是一件令人感到興奮的事。我們從事科學研究的人，若能善加利用電子計算機，則對我國科學之進步，會有無可限量的貢獻。因爲，當我們做科學研究時，常需以數學運算爲研究之工具，像物理上的各種擴散過程，都可以用抛物形的偏微分方程式來描述，可是實際上，數學家對這種偏微分方程式求不出解的，遠比求得出來的，要多得多。並且有些數學家求出的結果，在實際用數字代入時並不能適用，因爲要耗費極長的時間及極多的精力。可是這種困難，現在可以解決了，計算機不但有計算，分析比較能力，而且運算的速率快得驚人，我們以前以爲不能解的問題，可以利用它來求得近似解，以前需用很長時間，方可求得的答案，它可以在幾秒鐘內得到。因此，電子計算機，在科學研究中，是很好利用的一種工具。本文首先要討論，電子計算機，在今日物理學界之應用情形，以及電子計算機本身之邏輯，數字分析法的意義。

1. 電子計算機之物理應用

在今日物理學研究之範疇中，利用計算機當工具，而得到最大收穫的，當推挪威的 Stormer，他用數字積分法 (Numerical Integration)，找出高能質點在地球重力場中的路徑。這項工作一直繼續在推行中，不久將會有系統性的結果出來，對今後人類的宇宙探秘，當有輝煌之貢獻。另有一科學家 Hartree，也是借用計算機，首先解 Schrödinger Eq. 而得到原子波動函數的計算；後來又用到高速度電子，考慮相對論效應的 Dirac Equations 上。其他在物理學上的應用，還相當廣。像核子物理學中，用 Monte Carlo techniques 得到的粉末照相，也可利用計算機來決定該未知晶體之結構。又加速器中，高能質點的軌跡也可利用電子計算機來計算。

2. 電子計算機之邏輯

電子計算機是依各種電子儀器之特性，功用，將它們組成能計算，分析的線路，然後由人來控制。雖然所需人力很少，但是出發點還是在人，常聽人家說，電子計算機可以代替人腦，那簡直無稽之談。我們先來看看電子計算機的構造：電子計算機的組成，可分爲三個主要部分，即輸入，輸出器 (input-output devices)，貯存器 (storage devices) 以及操作系統 (Central processing units)。今以簡圖說明其相互間的關係：



輸出輸入系統，是將計算機的語言和外界人類所用的語言，互相翻譯傳達的部門。貯存器在計算機中，是很重要的一個部分，貯存器包含數千個記憶單位 (Memory units)，每一個記憶單位，可貯存一個命令或數據。(貯存器所含記憶單位之多寡，爲決定計算機價格之最主要因素)。當一個信號 (命令或數據) 輸入計算機後，則在貯存器中各佔一個位置，計算機可將其中之任一信號提出計算，而該信號可以仍舊留在原來的地方，所以說計算機有記憶的能力。當信號一輸入貯存器時，操作系統馬上執行命令。通常計算機，除了可作加減、乘除、乘方、開方、三角函數等數學運算外，尙有分析的能力，如比較兩數値之大小等。

其次，我們再看看如何來運用電子計算機。假如我們有一則問題需要解決時，首先將它用數學式子表示出來，其次觀察分析該問題，尋找適當之數字分析方法，然後按照計算機設計者所定的語言，格式描述此數字分析的步驟 (通常所用者爲 FORTRAN, ALGOL 等)。寫操作程序 (Program) 本來是需受相當時間的訓練，才可學會，但近年來，計算機設計者已不斷的改進，使其更趨簡化，使一般人可以在很短時間內卽可學會。當操作程序寫好後，卽可打在紙帶，或卡片上輸入機器運算。今亦以簡表說明之：欲演算之問題——→數字分析 (Reduce the Mathematical Problem to a Numerical Procedure)——→寫出操作程序 (Programming)——→輸入機器。

上面，在寫出操作程序前的數字分析，是用電子計算機時很重要的一環。數字分析法，是應用數學的一支，是利用數學的觀念，找出的一套適用於電子計算機的解題方法。我們一般常用的數字分析法，有下面一章所敍述的幾種，而其詳細的運算步驟，我們在第三章中，將以具體的問題加以說明。

二　電子計算機常用到的數字分析法

我們做數學題目時，常依題目的形式及性質，而用不同的解法。同理，我們用在電子計算機上的數字分析法，也因題目之不同，而有不同之分析法。現在分別說明之：

1. 多項式及超越函數方程式，我們可以用 Half-Interval Search 或是 Newton-Raphson Method 這兩種方法，都是先寫出一操作程式 (一個 loop)，然後反覆很多次，利用計算機快的特點，使其一次一次更趨近於正確解。其實，所有的數字分析法，都可以說是依這種原則去發展的。

2. 有初條件之常微分方程式：我們常用 Runge-Kutta Method 這種方法，我們下章有詳細之討論。

3. 矩陣代數與聯立方程式：我們可以用 Gauss-Jordan Elimination Method 或是 Gauss-Seidel Iterative Method。

4. 實數對稱矩陣固有値及固有向量：我們可以用 Jacobi's Method。

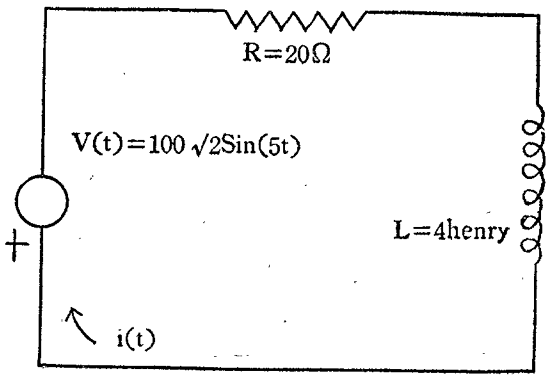
5. 關於定積分及微分，則可用 Numerical Integration 及 Numerical Difference

這些方法，我們都需詳細研究，以期能運用自如，但本文不想一一解釋，只就其中之三則方法，就進一步之討論，其餘的，我們可以在其他的數字分析法書上找到，雖然這類書，目前在本省翻印的並不多，但是，相信不久的將來，就會普遍的推廣，以應一般的需要。並且，數字分析法的研究，也是目前應用數學中，很重要的一門，新的方法，不斷的找出來，就數字分析法本身來講，也可以是我們創造發明的範圍，而其應用在科學上，更是科學界的福音。

三　數則物理問題之數字分析

1. 在電磁學中，我們常碰到 RL 交流線路，理論上，我們可以求出線路上的電流，其爲一種超越函數。如右邊線路圖上，其電流可由下式表示:

$i(t)=5e^{-5t}\sin(\frac{\pi}{4})+5\sin(5t-\frac{\pi}{4})$ 可是電流和時間變化的關係，我們很難從這個式子，直接得到明顯的印象。所以我們往往想用實際的時間間隔代入該式，來看何時電流會最大，何時會是零。可是要做這種工作，實在太浪費時間了，也太沒趣了，如果我們有數字分析的知識，那麼借用計算機，解這種問題，實在是太輕而易舉了。



$i(t=0)=0$

現在我們用 half-interval search 的方法，來看這個圖中之電流，在第 0.5 秒至第 1.4 秒間，何時電流會是零。

令　$t_1=0.5\ \text{sec}$,　　$t_2=1.4\text{sec}$

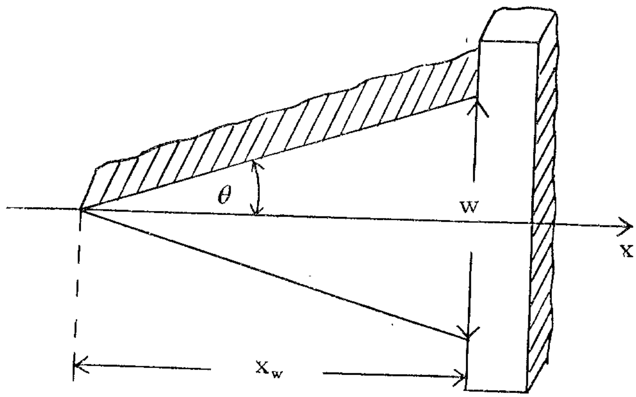
$$t_3=\frac{t_1+t_2}{2}$$

代入 $i(t)$ 中，得 $i(t_1)$，$i(t_2)$，$i(t_3)$

計算 $i(t_1)\times i(t_3)$ 以及 $i(t_2)\times i(t_3)$

若 $i(t_1)\times i(t_3)<0$，則電流爲零之時間在 t_1 及 t_3 之間。反之，$i(t_2)\times i(t_3)>0$，則所求之 t 在 t_3 與 t_2 之間，於是尋找 t 根的範圍縮小到原來的一半，依此步驟，再來一次，t根不定的範圍，便在原來$\frac{1}{4}$區間內，依此反復尋求，直至 $|i(t_n)|\leq\in$ 註一時，t_n 即爲相當精確之值。

2. 在物理上，也常常遇到高階的微分方程式，一般來講，除了一些特殊的形式較容易解外，大體都相當困難，我們現在想用 Runge-Kutta Method 來解這類方程式。



像右面圖上，是一個三角形加熱

器，裏面所含容氣溫度之分布情形，可 由下列 Bessel Eq. 表示之。

$$x\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{dy}{dx}-(2\ hx_w\frac{\sec\theta}{KW})y=0$$

$y=T-T_a=$溫度

$h=2.5\ \mathrm{Btu/ft^2\cdot}\ hr°F=$加熱器與空氣間之熱傳播係數。

$K=212\ \mathrm{Btu/ft.}\ hr\cdot °F=$加熱之熱傳導。

x，T，$\frac{dy}{dx}$之最初狀況 (Initial Condition) 爲已知，其解法如下：

令最初狀況 $y\ (x_0)=T_0-T_a=y_0$

$y^1(x_0)=\frac{dy}{dx}\ |x_0=y^1$ 註二

將原式改寫一下，令

$$y_1(x)=y(x)$$

$$y_2(x)=y'(x)$$

因此原方程式，成爲聯立一次微分方程式

$$\begin{cases}y_1'(x)=y_2(x)\\ y_2'(x)=-\frac{1}{x}y_2+(2\ hx_w\frac{\sec\theta}{KW})\frac{1}{x}\cdot y_1\end{cases}\qquad\qquad \begin{cases}y_1(x_0)=y_0\\ y_2(x_0)=y_0'\end{cases}$$

這種問題分析到這裏，要解並不困難，可是如果聯立的式子多起來了，實在是件頭痛的事。我們現在就把上面簡單的問題，放下來，就一般一次聯立微分方程式的解法說明之。

若有一系方程式如下：

$y_1'(x)=f(x,\ y_1,\ y_2,\cdots\cdots y_n)$

$y_2'(x)=f_2(x,\ y_1,\ y_2,\cdots\cdots y_n)$

……………………………………

……………………………………

$y_n'(x)=f_n(x,\ y_1,\ y_2,\cdots\cdots y_n)$

最初條件爲 $x=x_0$，$y_1=y_{10}$，$y_2=y_{20}$，$\cdots\cdots y_n=y_{n0}$

y_1，y_2，$\cdots\cdots y_n$ 爲 x 之函數，且 f_1，f_2，$\cdots\cdots f_n$ 爲連續單値的函數。

令向量 $\boldsymbol{Y}(x)=(y_1(x),\ y_2(x),\ y_3(x),\cdots\cdots y_n(x))$ 註三

$|\boldsymbol{Y}|=\sqrt{y_1^2+y_2^2+\cdots\cdots+y_n^2}$

$\boldsymbol{Y}$ 爲連續且可微分的向量，則

$$\frac{d\boldsymbol{Y}}{dx}=(y_1'(x),\ y_2'(x),\cdots\cdots y_n'(x))$$

若有另一向量 $\boldsymbol{F}(x,\boldsymbol{Y})=(f_1,\ f_2,\cdots\cdots f_n)$

則$\frac{d\boldsymbol{Y}}{dx}=\boldsymbol{F}(x,\ \boldsymbol{Y}(x))$，由這個式子和原來的聯立方程式對照一下，便能明瞭本式所表示的。

因爲 $\boldsymbol{F}$ 是連續的，故可用 Euler-Cauchy Method 求出上式的解。

$$\boldsymbol{Y}_{i+1}=\boldsymbol{Y}_i+h\boldsymbol{F}(x_i,\ \boldsymbol{Y}_i)\qquad\qquad h=x_{i+1}-x_i$$

因 $\boldsymbol{Y}_o=(y_{1o},\ y_{2o},\ y_{3o},\cdots\cdots y_{no})$ 及

$\boldsymbol{F}_0=(f_1(x_0,\ y_{10},\ y_{20},\cdots\cdots y_{n0}),\ f_2(x_0,\ y_{10},\ y_{20},\cdots\cdots y_{n0}),$

$\cdots\cdots,f_n(x_0,\ y_{10},\ y,\cdots\cdots y_{n0}))$

皆爲已知，適當的選取 h，卽可得原一次聯立微分方程式之數字解。

下面擧一個較簡單的例子來說明這種解法：

求 $y''+(y')^2+y=0$ 之數字解，已知 $y(0)=-1, y'(0)=1$

〔解〕

令 $y_1(x)=y(x)$

$y_2(x)=y'(x)$

則原方程式可改寫爲 $\begin{cases} y_1'(x)=y_2 \\ y_2'(x)=-y_1(x)-(y_2(x))^2 \end{cases}$

已知條件 $\begin{cases} y_1(0)=-1 \\ y_2(0)=1 \end{cases}$

令 $Y(x)=(y_1(x),\ y_2(x))$ 　則 $\boldsymbol{Y}(0)=(-1,\ 1)$

$$\boldsymbol{F}(x,\ \boldsymbol{Y})=\frac{d\boldsymbol{Y}}{dx}=(y_1'(x),\ y_2'(x))$$

$$=(y_2(x),\ -y_1(x)-(y_2(x)^2)$$

$\boldsymbol{F}(0)=(1,\ 0)$

取 $h=0.1$

於是 $\boldsymbol{Y}_0=\boldsymbol{Y}(0)=(-1,\ 1)$

$\boldsymbol{Y}_1=\boldsymbol{Y}(0.1)=\boldsymbol{Y}_0+h\boldsymbol{F}_0=(-0.9,\ 1)$

$\boldsymbol{Y}_2=\boldsymbol{Y}(0,\ 2)=\boldsymbol{Y}_1+h\boldsymbol{F}_1$

$=(-.09,\ 1)+0.1(1.\ -0,\ 1)$

$=(-0.8,\ 0.99)$

$\boldsymbol{Y}_3=\boldsymbol{Y}(0,3)=\boldsymbol{Y}_2+h\boldsymbol{F}_2$

$=(-0.8,\ 0.99)+0,1(0.99,-0.18)$

$=(-0.701,\ 0.972)$

……………………………………………

……………………………………………

以此類推，則我們可得該方程式之數字解如下：

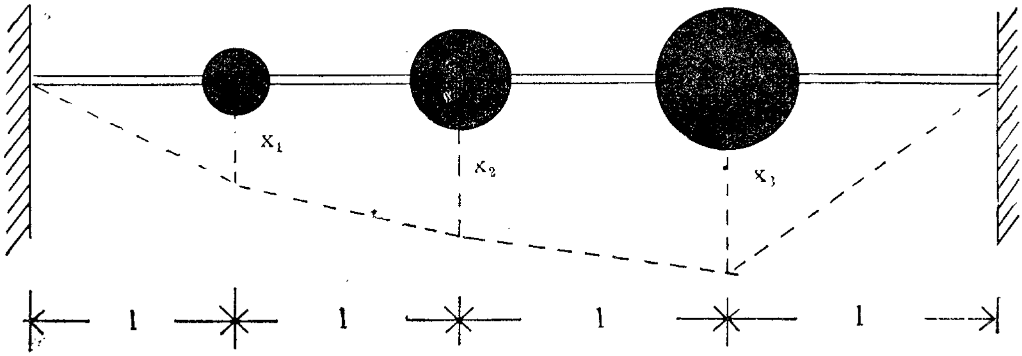
x	y
0	-1
0.1	-0.9
0.2	-0.8
0.3	-0.701
…………	…………
…………	…………

顯然的，我們要將這種計算方法，應用在計算機上，需先寫成計算機能接收的程式，而

其實際之數字運算是由計算機來實行。

3. 多元一次聯立方程式，我們可以寫成矩陣的型式，首先用 Gaussian Elimination Method, 其次用 Jacobi's Method, 則這類問題可以解決。

如下圖所示，三個質量不等的物體，構成一振動系統。



其運動方程式為

$$\begin{bmatrix} 2k-m\omega^2 & -k & 0 \\ -k & 2k-2m\omega^2 & -k \\ 0 & -k & 2k-3m\omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0$$

ω 為振動頻率

$k=\frac{s}{l}$ （S 為繩之張力）

令 $\lambda=\frac{m\omega^2}{k}$ 則上式可改寫成

$$\begin{bmatrix} 2-\lambda & -1 & 0 \\ -1 & 2-2\lambda & -1 \\ 0 & -1 & 2-3\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0$$

若 x_1，x_2，x_3 不全為零，則

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & -1 & 0 \\ -1 & 2-2\lambda & -1 \\ 0 & -1 & 2-3\lambda \end{vmatrix} = 0$$

由此式可解出其固有值 (eigenvalue)。但當振動物體加多時，則非借助於機器，是很難求出其解的。

下面以一般之 Eigenvalue Problem 討論之:

$[B][x]=\lambda[C][x]$

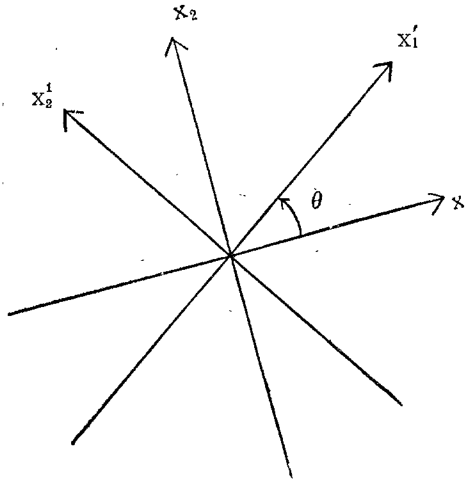
$[x]$ 為一向量，λ 是純量，$[B]$，$[C]$ 為 $n\times n$ 矩陣 (matrix) 若 $[C]$ 為 Nonsingular，則 $[C]^{-1}[B][x]=\lambda[x]$ 註四

計算 $[C]^{-1}$ 可用 Gaussian Elimination Method（請參閱 Nathanical Macon: Numerical Analysis 第五章，說明其方法，甚佔篇幅，故略去。）欲得 $[C]^{-1}$ 需做多於 $n^3/3$ 次的乘法及除法，而 $[C]^{-1}[B]$ 則需 n^3 次之乘法，可見計算之麻煩，但若寫成計算機之操作程序，並不複雜，同一過程，一遍一遍的運算，很快就可得到結果。

令 $[A]=[C]^{-1}[B]$，若 $[A]$ 為對稱矩陣，我們想求 $[A][x]=\lambda[x]$ 的固有值 λ 及

固有向量 (Eigen Vector) $[x]$，則可用 Jacobi's Method 解之，討論如下：

我們將座標軸，由 x 轉 θ 角度至 x，則有 $[x]=[T][x]$ 的關係存在。因 $[T]$ 為正交矩陣 (Orthogonal Matrix)



$\therefore\ [T]'=[T]^{-1}$ 註四

i,e.$[T]'[T]=1$

則 $[A][x]=\lambda[x]$ 轉移到 x 座標，變為 $[A][T][x]=\lambda[T][x]$，各項前面各乘以 $[T]'$，則成為 $[T]'[A][T][x]=\lambda[x]$ 當 $n=2$ 時，我們只需選取適當的 θ 值，即可得一 Diagonal Matrix，$[B]=[T]'[A][T]$，b_{11} 及 b_{22} 即為所求的固有值。

若 n>2 時，則需做多次的平面轉移

$[T_m]'[T_{m-1}]'\cdots\cdots[T_2]'[T_1]'[A][T_1][T_2]\cdots\cdots[T_m]=[\lambda]$

方可得一矩陣，除了對角線外，別的元素皆為零，或幾乎近於零。下面再討論固有向量之求法：

$\because [A][x]=\lambda[x]$，對一已知矩陣 $[A]$，恆有一行矩陣 $[x]$ 對應於一固有值 λ。因 $n\times n$ 矩陣有 n 個固有值 λ_1，$\lambda_2,\cdots\cdots\lambda_n$，於是可將對應之 n 個行矩陣寫成一個 $n\times n$ 之矩陣 $[V]$。

即

$$[V]=\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13}\cdots\cdots x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots\cdots x_{2n} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots\cdots x_{nn} \end{pmatrix}$$

且令

$$[\lambda]=\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \vdots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \vdots \\ 0 & \vdots & \lambda_3 & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

則 $[A][V]=[V][\lambda]$ 兩邊各以 $[V]^{-1}$ 乘之，則

$[V]^{-1}[A][V]=[V]^{-1}[V][\lambda]$

$\therefore\ [V]^{-1}[A][V]=[\lambda]$

由此式與 $[T_m]'[T_{m-1}]'\cdots\cdots[T_2]'[T_1]'[A][T_1][T_2]\cdots\cdots[T_m]=[\lambda]$ 比較得 $[V]=[T_1][T_2]\cdots\cdots[T_m]$，顯然地，我們知道固有向量是什麼了。

上面的敘述顯得有點零亂，讀者不太容易了解，所以我想就這種求固有值的步驟，列出表來，如果讀者一步一步的看下去，就能理解得很清楚。

現在就

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

這則簡單的問題來求固有值。

令

$$[A_0]=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

而 $[A_m]=[T_m]'[A_{m-1}][T_m]$

$m=1,2,3,4,5$

m	$[A_m]$			$\sin\theta$	$\cos\theta$	$[T_{m+1}]$		
	2	−1	0			$\cos\theta$	$-\sin\theta$	0
0	−1	2	−1	−0.7071	0.7071	$\sin\theta$	$\cos\theta$	0
	0	−1	2			0	$\cos\theta$	1
	3	0	0.7071			$\sin\theta$	0	$-\sin\theta$
1	0	1	−0.7071	0.4597	0.8880	0	1	0
	0.7071	−0.7071	2			$\sin\theta$	0	$\cos\theta$
	3.3660	−0.3250	0			1	0	0
2	−0.3250	1	−0.6279	0.5241	0.8516	0	$\cos\theta$	$-\sin\theta$
	0	−0.6279	1.6339			0	$\sin\theta$	$\cos\theta$
	3.3660	−0.1703	−0.2768			$\cos\theta$	0	$-\sin\theta$
3	−0.1703	2.0204	0	−0.0990	0.9950	0	1	0
	−0.2768	0	0.6135			$\sin\theta$	0	$\cos\theta$
	3.3935	−0.1695	0			$\cos\theta$	$-\sin\theta$	0
4	−0.1695	2.0204	−0.0168	−0.1207	0.9926	$\sin\theta$	$\cos\theta$	0
	0	−0.0168	0.5859			0	0	1
	3.4142	0	0.0020					
5	0	1.9998	−0.0167					
	0.0020	−0.0167	0.5859					

由表上得之，我們經過五次平面轉移後，即可求得其固有值之很近的近似值。

$\lambda_1=3.4142$，$\lambda_2=1.9998$，$\lambda_3=0.5859$

四、結　　論

綜合前面所討論的，我們知道，數字分析是運用電子計算機，所不可或缺的知識，而其分析法又因問題之類別而有所不同。所以，我們如果有興趣的話，可以深入研討，找出新的分析法，做爲個人研究的路線。另外，在今日的物理學研究中，不管是做核子物理或是高能，低能固態，或是做電子學的研究，總是離不開電子計算機，它除了是一種很好的計算，分析的工具外，更能因它本身的特點，做些以前認爲不可能的研究。可以說是由於電子計算機之出現，使科學發展開了一個新的紀元。

附　　註

註一、$\in$表被允許的最大誤差。

註二、y'，y'' 各表 y 對 x 之一次及二次導數。

註三、本文粗體字皆表 n 度空間之向量，$n \geqq 2$

註四、〔A〕表一 matrix

〔A〕$^{-1}$ 是〔A〕之 inverse matrix

〔A〕$'$ 是〔A〕之 transpose matrix

參考書籍

Leeson and Dimitry; "Basic Programming Concepts and the IBM 1620 Computer". 1962

Shan, S. Kuo;"Numeuial Methods and Computers" 1965 Addison-Wesley

Nathaniel Macon; "Numerical Analysis,„ 1963. Wiley Huskey and Korn; "Computer Handbook" 1962.

數字分析法在物理學上之應用

分數字析法是運用電子計算機時，很重要的一門知識，而其分析的方法又因問題之類別而有所不同。最近，新的方法不斷的出現，所以對這方面若深入研討，是一條很有希望的研究路徑。並且，在做物理學的研究時，不論是研究核子物理，或是高能，低能固態，或是電子學，總是要用到電子計算機，它除了一種很好的計算，分析的工具外，更能因它本身的特點，而做出以前認爲不可能的科學成果，由於電子計算機的發明展開了一個新的紀元。

Numerical Analysis in the Application of Physical Problems

As you know very well that the numerical analysis is a new branch of applied mathematics. In the application to many tedious physical problems, we usually utilize this technique, which is employing in electronic computer as a tool for advanced research.

In this paper, we describe many kinds of methods in the problem-solving on modern physis. For instant, the projectile of missile, the weather forecast and the frequency of vibration, etc, Since the technique we deal with is quite a general one, so that it would be able for us to use it to many other research fields.