第六章 數學式推導和矩陣計算演算法

領域知識(Domain knowledge)是工程師、科學家必備的基本知識,而電腦程式語言是一種處理數值計算的基本工具,如何利用工具也是必須下的基本功夫。早期的數學家們僅能憑空想像,無法以電腦程式語言實作,複數的計算是一個難題,譬如程式語言以i或J表示虛數合理嗎? C#程式語言中,虛數無法輸入C#程式語言中。在動態系統中,複數的計算是不可避免的,也是令人感到困惑,譬如希爾伯特空間(Hilbert Space)是複數向量的內積(Inner Product),量子力學的Hermitian 矩陣等的處理。而 SMS(Sharp Matrix Solver)精銳矩陣計算器求解器,能有效處理複數矩陣和微分方程式的計算問題。

在真實的世界裡,輸入系統的數值或系統的響應值,都應該是實數(Real Number),數值的模擬計算中,可能暫時須要使用複數作計算,譬如計算不對稱矩陣的特徵值與特徵向量、或是求取多項式的根等都是複數,這些都是中間過程,但最後系統的響應值都應該是實數。

6.1 由微分方程式求得系統矩陣 A

矩陣常微分方程式(\underline{O} rdinary \underline{D} ifferential \underline{E} quations) ODE (m, r, t), 以 m、r 和 t 三個參數表示,m 表示空間維度 (Space Dimension) 共有 m 個節點或稱自由度,r 表示狀態維度 (States Dimension) 共有 r 個自由度或稱階度 (Order),兩者都是時間 t 的函數,時間永遠是存在,並且一直不斷的在進行中,此三個軸是獨立且互相垂直,空間維度和狀態維度都是離散 (Discrete) 的型式,時間是連續 (Continue) 的型式,若要畫成圖形,若以空間維度是水平軸 (Space DOF = 1, 2, …, m),狀態維度是垂直軸 (State DOF = 0, 1, …, r),共計有 m* (r+1) 個離散數值,時間 t 是垂直於此平面的連續數值。

作者將 ODE (m, r, t) 微分方程式分成兩類表示方式:

Type I ODE(m, r, t): 依照微分階的高低順序排列微分方程式

$$M * \ddot{y} + C * \dot{y} + K * y = \{f\}$$

Type II ODE(m, r, t): 依照最高階微分排在等號的左邊,且其係數為1,表示 Identity 矩陣。

$$\ddot{y} = B * \dot{y} + C * y + \{g\}$$

Type II ODE (m, r, t) 的表示方式,是為了要從 ODE (m, r, t) ,容易建構系統矩陣 A ,ODE (m, r, t) 若包含大掛號 $\{\}$,表示可有可無的外力,依實際狀況而定的特別解。

SMS 精銳矩陣計算求解器中,只有矩陣運算元(Matrix Operand)和矩陣運算子 (Matrix Operator),並無所謂於線性代數或是矩陣計算中的轉換矩陣 (Transorm Matrix),故 Ay 僅表示是一個矩陣變數名稱(Matrix Variable Name),而不是 A 乘 y,若 A 乘 y,以一般程式語言的寫法,應寫成 A * y。

(0) ODE (m, r=0, t)

是 0 階方程式不是微分方程式,常常在線性代數中使用 Ay = b 的方式求解向量變數 y,稱 A 為 y 向量的轉換矩陣。但在 SMS 精銳矩陣求解器中,以 A * y = b 的方式表示,即 A 是系統矩陣,y 是向量,b 是已知向量,無論是矩陣或是向量都是二維的陣列。故可求得 y = Ai * b。Ai 是矩陣變數的名稱,Ai 變數表示是 A 矩陣的逆矩陣,實際的程式碼是, $y = ^{\sim}A * b$;

若系統矩陣非正方形時,則 (At * A) * y = At * b,則

$$y = \left(A_t * A\right)_i * A_t * b$$

At 是矩陣變數的名稱,表示 A 矩陣的轉置,在精銳矩陣求解器中,提供矩陣計算的不同的運算子,和多個矩陣的類別(Class)。使用最小二乘法(Lease-Square Method), SMS 程式碼如下:

ReMatrix
$$y = (!A * A) * !A * b;$$

其條件是矩陣 A 已知,且列(Row)大於或是等於行(Column),上式中,"~"和

"!" 是矩陣運算子, "逆算"和"轉置", 而且運算子的優先順序(Operator Precedence)為 "!"大於"*", 故上式中 *! A 相連在一起是可以的, 即表示矩陣 A 先轉置後再相乘。此部分作者已測試過是 OK, 可能較複雜, 初學者可以忽視。SMS 程式碼如下:

```
□using System;
 2
       using Matrix_0;
     namespace ConsoleApp5
 30
       {
 5
           internal class Program
 6
           {
                 0 個參考
 7
                 static void Main(string[] args)
 8
       double[,] A0 = { { 1, 3 }, { 2, 4 } };
double[,] b = { { 7 }, { 10 } };
// 將C#陣列A0轉為SMS-2029實數資料類別ReMatrix。
 9
10
11
12
       ReMatrix A = new ReMatrix(A0);
       // y = (At * A)i * At * b
13
       ReMatrix y = ~(!A * A) * ! A * b;
// 輸出向量 y :
14
15
       Console.Write(" ** 向量 y : **\n{0}", new PR(y));
16
```

```
C:\WINDOWS\system32\cmd.exe
** 向量 y: **
1.00000
2.00000
```

SMS 精銳矩陣計算器,亦提供奇異值 **SVD**(Singular Value Decomposition)的求解,奇異值和兩個奇異向量都是實數值,程式碼如下:

```
SVD svd = new SVD( A );
ReMatrix D = svd.MatrixD;
ReMatrix Q = svd.MatrixQ;
ReMatrix P = svd.MatrixP;
ReMatrix Qi = ~Q;
A * Q = P * D ==> A = P * D * Qi
```

讀者可以自行測試計算結果,是否 A = P * D * Qi 成立?

(1) ODE (m, r=1, t)

r = 1 表示一階常微分方程式, 與上式相同, 微分方程式共計有兩種表示方式。

Type I ODE(m, r=1, t)的微分方程式寫成:

$$B * \dot{y} + C * y = \{f\}$$

式中 B 和 C 是實數 mxm 的矩陣, \dot{y} , y, 和 f 是 mx1 的向量。

Type II ODE(m, r=1, t)的微分方程式寫成:

$$\dot{y} = A * y + \{g\}$$

式中 A 是實數 mxm 的矩陣, \dot{y} , y, 和 g 是 mx1 的向量。

一般 ODE (m, r=1, t) 的常微分方程式,作者從 Wikipedia 或是相關的書籍,都稱為狀態空間方程式 (State Space Equation)。

(2) ODE (m, r=2, t)

r = 2表示二階矩陣常微分方程式,與上式相同,微分方程式共計有兩種表示方式。

Type I ODE(m, r=2, t)的微分方程式可寫成:

$$M * \ddot{y} + C * \dot{y} + K * y = \{f\}$$

式中M, C, 和K是實數 mxm 的矩陣, \ddot{y} , \dot{y} , y 和 f 是mx1 的向量。

Type II ODE(m, r=2, t)的微分方程式寫成:

$$\ddot{y} = -M_{i} * C * \dot{y} - M_{i} * K * y + \{M_{i} * f\}$$

另外再加入平衡方程式:

$$\dot{v} = I * \dot{v} + 0 * v + \{0\}$$

使用友矩陣(Companion Matrix)的表示方式,可將兩式合併寫成:

$$\begin{pmatrix} \ddot{y} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -M & * & C & -M & * & K \\ i & & & i & \\ & I & & & O \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \dot{y} \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g \\ 0 \end{pmatrix}$$

設系統矩陣 A 為:

$$A = \begin{pmatrix} -M & * & C & -M & * & K \\ i & & & i & \\ I & & & O \end{pmatrix}$$

則

$$\begin{pmatrix} \dot{y} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = A * \begin{pmatrix} \dot{y} \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g \\ 0 \end{pmatrix}$$

M, C, K和Mi, I, O分別是實數 mxm 的質量、阻尼、和勁度矩陣,Mi 是 M 的 逆矩陣,I 是 Iden 矩陣,O 是 Zero 矩陣,而 \ddot{y} , \dot{y} , y 是 mx1 的向量。 系統矩陣 A 是 (mxn) x (mxn) 的矩陣, $(\ddot{y} \mid \dot{y})$, $(\dot{y} \mid y)$, $(g \mid 0)$ 是 (mxn) x1 的向量。

ODE(m, r=2, t) 微分方程式, m表示是空間節點數, r=2 二階矩陣常微分方程式。

建構 I 和 0 矩陣, 在空間點 m 已知的條件下, 程式碼如下:

Iden iden = new Iden(m);
ReMatrix I = iden.Matrix;

Zero zero = new Zero(m); ReMatrix 0 = zero. Matrix;

(3) ODE (m, r=3, t)

r = 3表示三階矩陣常微分方程式,與上式相同,微分方程式也是共計有兩種表示方式。

Type II ODE(m, r=3, t)的微分方程式寫成:

$$\begin{pmatrix} \ddot{y} \\ \ddot{y} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = A * \begin{pmatrix} \ddot{y} \\ \dot{y} \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

其中 A 是系統矩陣,是(mx3)x(mx3)的矩陣,其餘是(mx3)x1的向量。

故我們知道 ODE(m, r, t),包含空間節點、階數、和時間,任何微分方程式,都是相同的 ODE(m, r, t) 的矩陣微分方式來表示,可從 Type II 的微分方程式,求得系統矩陣 A。

一般實際的求解,都是齊次解和特別解分開求解,兩者相加即通解(General Solution)。

6.2 由系統矩陣 A 求得特徵值 D 和特徵向量 Q

ODF(m, r=0, t)是零階矩陣方程式,表示的方式如下:

$$A * y = b$$

求 y 向量, 可由系統矩陣 A 的分解, 或是矩陣 A 的逆矩陣。

$$A = L * U$$
, $A = Q * R$

所謂 QR 是指 Givens Rotator, Householder Reflector, 和 Gram-Schmidt Process 等分解方法。精銳矩陣求解器亦提供各種不同的求解類別(class),包含直接求逆矩陣。

ODE (m, r, t),階數參數 r 可以是 0、1、2、...,系統矩陣 A 是 (mxr) X (mxr) 的正方形實數矩陣,將系統矩陣 A 對角線化,亦即求系統矩陣 A 的特徵值矩陣 D ,和特徵向量矩陣 Q ,其關係如下:

$$A * Q = Q * D$$

系統特徵向量應符合條件如下:

$$DET(Q) \neq 0$$

則系統矩陣符合以下條件如下:

$$A = Q * D * Q_{i}$$

系統矩陣 A 是 (mxr) X (mxr) 的正方形實數矩陣,Qi 是 Q 的逆矩陣,* 是矩陣相乘的運算子 (Matrix Operator),矩陣本身是運算元 (Matrix Operand)。在精銳矩陣求解器類別 (EIG class),輸入系統矩陣變數 A ,可求得系統特徵值 D 和系統特徵向量 Qi ,和逆系統特徵向量 Qi ,SMS 的程式碼如下:

EIG eig = new EIG(A);
CxMatrix D = eig.CxMatrixD;
CxMatrix Q = eig.CxMatrixQ;
CxMatrix Qi = eig.CxMatrixQi;

由多階矩陣微分方程式,求得系統矩陣 A,若 A 是實數不對稱的矩陣,其特徵值矩陣 D、特徵向量矩陣 Q、和逆系統特徵向量 Qi,其預設值(Default Value)都是複數矩陣(CxMatrix)的資料型態。但若 A 是實數對稱矩陣,則 D、Q、和 Qi矩陣一定是實數,系統響應就沒有動態的特性了。

6.3 由特徵值 D 和特徵向量 Q 求取狀態和空間響應。

從 Wikipedia 查看"State Space Representation",似乎無法解惑,其中 "state space"指的是狀態維度和空間維度有多個自由度,即系統矩陣微分方程式 ODE (m>=1, r>=0, t=-inf, ···, +inf),若系統矩陣 A = A(t)是(m x r)X(m x r)的矩陣個,即特徵值矩陣 D = D(t)、特徵向量 Q = Q(t),使用 SMS 求解器亦能求解啁啾系統響應(Chirp System Response)。

在數學的書籍裡,常常提到特徵與特徵向量,但如何利用特徵值與特徵向量,似乎並未談及,兩者是共軛的關係,不可單獨存在,也就是俗稱"Self-Adjoint"。而且兩者的預設值是複數,但是我們明明知道現實的世界是實數可量測,這些可能是使我們感到困惑的地方?利用 C#程式語言,對於特徵值與特徵向量,利用複數矩陣的計算,最後可以求得實數的響應資料(Data),這是一種新穎的演算法。

以下是數學的推導和精銳矩陣程式的實作。

ODE (m, r, t) 矩陣常微分程式,m 是空間節點數,r 是最高階,參數 t 是時間。即 m >= 1,r >= 0, t = -inf 至 + inf 都是相同的推導方法,但一般僅至二階,很少見到三階及三階以上的矩陣微分方程式。

(0) 當 ODE(m, r = 2, t) 矩 陣 常 微 分 程 式 響 應 公 式 :

$$\begin{pmatrix} \ddot{y} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = Q * D * Q _{i} * \begin{pmatrix} \dot{y} \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g \\ 0 \end{pmatrix}$$

可能稍繁複,但簡化可得下式:

$$\begin{pmatrix} \dot{y}(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = H_{exp}(D, Q, t) * d + \begin{pmatrix} \dot{y}_{p}(t) \\ y_{p}(t) \end{pmatrix}$$

或是

$$\left(\dot{y}(t) \mid y(t)\right) = H_{exp}(D, Q, t) * d + \left(\dot{y}_{p}(t) \mid y_{p}(t)\right)$$

"\"是矩陣或是向量的垂直合併運算子,上式數學式是響應公式,其齊次解是:

$$H_{exp}(D, Q, t) * d$$

d 是向量係數和以下數學式都是(m x 2) X 1 的向量。

$$(\dot{y} \mid y)$$
, $(\dot{y}_p \mid y_p)$, d

(1) 當 ODE(m, r=1, t)矩陣常微分程式的響應公式:

$$(y(t)) = H_{exp}(D, Q, t) * d + (y_p(t))$$

(2) 當 ODE (m, r=3, t) 矩陣常微分程式的響應公式:

$$\left(\ddot{y}(t)\mid\dot{y}(t)\mid y(t)\right)=H_{exp}(D,Q,t)*d+\left(\ddot{y}_{p}(t)\mid\dot{y}_{p}(t)\mid y_{p}(t)\right)$$

無論 r 是 1、2、3 階以上,輸出矩陣 $H_{exp}(D, Q, t)$ 乘係數向量 d 都是齊次解的固定表示方式。其中 D 是系統特徵值矩陣,Q 是系統特徵向量矩陣,兩者的預設值都是複數矩陣(Complex Matrix),其資料型態是 CxMatrix 的類別,其中 $H_{exp}(D, Q, t)$ 也是(mxr) X(mxr) 的複數矩陣。至於 r>=4 階也是相同齊次解的表示方式,故不再贅述了。

6.4 狀態和空間齊次解的響應參數為 D、Q、和 d

由系統矩陣 A,求得輸出矩陣 $H_{exp}(D, Q, t)$ 乘向量係數 d,得到齊次解,故稱系統特徵值 D,系統特徵向量 Q,和向量係數 d 為狀態與空間參數 (Parameter),只要知道 D,Q,和 d,即可求得系統響應。

如果初始條件已知,就可求得向量係數d,此為較普遍性的求解法。若以

ODE(m, r=2, t)為例加以說明。 設

$$B(ta) = (\dot{y}(ta) \mid y(ta)) - (\dot{y}_{p}(ta) \mid y_{p}(ta))$$

則向量係數 d:

$$d = [H_{exp}(D, Q, ta)]_i * B(ta)$$

或是

$$d = {^{\sim}} [H_{exp}(D, Q, ta)] * B(ta)$$

但如果是邊界條件已知,求向量係數 d 的方法稍複雜,即將輸出矩陣 $H_{exp}(D, Q, t)$ 分割與再合併。SMS 求解器提供 RowSplice 類別,將輸出矩陣,依階數 r 分割,每個分割共計有 m 列數據,最後再合併成新的輸出矩陣,由已知的邊界條件求得向量係數 d,此為新穎的求解法尚屬首見。如果是相同的系統,無論已知條件是初始值,或是邊界值,最後得到相同向量係數 d,亦即相同的狀態與空間參數,則有相同的狀態與空間響應,雖然使用文字說明較難,請參考第七章的程式碼和輸出計算資料,或是 https://github.com/myyeh2/App_6M 儲存庫。