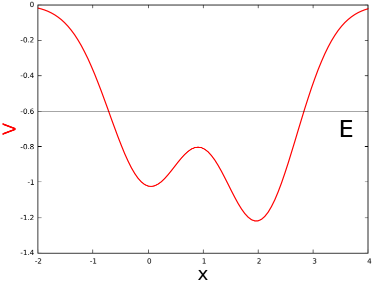
dynamika Newtona w metodzie różnic skończonych

7 marca 2023

case study: wnęka potencjału

- 

- cząstka o energii $E = -0.6$ [J]. Energia potencjalna zależna od położenia $x[m]$ $V(x) = -\exp(-x^2) - 1.2\exp(-(x-2)^2)[J]$
- obszar dostępny dla cząstki: $V(x) \leqslant E$
- równania na punkty zwrotne $V(x) = E$

równania dynamiki Newtona

- cząstka o energii $E = -0.6$ [J]. Energia potencjalna $V(x) = -\exp(-x^2) - 1.2\exp(-(x-2)^2)[J]$
- zobaczmy: rozwiązanie równania Newtona
- $m = 1$ kg
- $\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{F}{m} = -\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}$
- równanie zwyczajne rzędu N można sprowadzić do układu N równań pierwszego rzędu:
- $\frac{dx}{dt} \equiv v$ (*)
- $\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}$ (**)
- warunki początkowe:
- $x(t=0) = 2.83288$ [m], $v(t=0) = 0$ (***)
- (*,**,***) tworzą zagadnienie początkowe (zagadnienie Cauchy)
- schemat różnicowy: pochodne zastępujemy przez ilorazy różnicowe
- z twierdzenia Taylora:
- $\frac{dy}{dt} = \frac{y(t+dt)-y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$

jawny schemat Eulera

- równanie różniczkowe: $\frac{dy}{dt}|_t = f(t, y)$
- $\frac{dy}{dt}|_t = \frac{y(t+\Delta t)-y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$
- $\frac{y(t+\Delta t)-y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t) = f(t, y)$
- $y(t + \Delta t) = y(t) + f(t, y)\Delta t + O(\Delta t^2)$
- w rachunkach numerycznych $t_n = n\Delta t$, rozwiązanie w chwili t_n oznaczamy y_n
- $y_{n+1} = y_n + f(t_n, y_n)\Delta t$

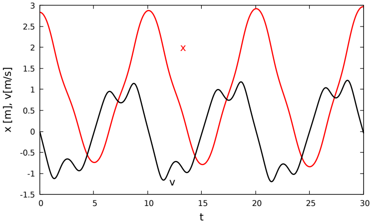
błąd lokalny i zbieżność schematu

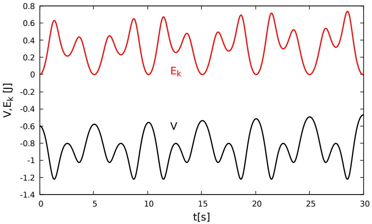
- równanie różniczkowe: $\frac{dy}{dt}|_t = f(t, y)$
- $\frac{dy}{dt}|_t = \frac{y(t+\Delta t)-y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$
- $\frac{y(t+\Delta t)-y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t) = f(t, y)$
- $y(t + \Delta t) = y(t) + f(t, y)\Delta t + O(\Delta t^2)$
- tutaj: błąd lokalny - błąd popełniany w jednym kroku jest $O(\Delta t^2)$.
- drugi rząd błędu lokalnego
- minimalny rząd błędu, który nie uniemożliwia zbieżności rozwiązania $y(t)$ w skończonym zakresie czasu $t \in (0, T)$ do rozwiązania dokładnego w granicy $\Delta t \to 0$
- liczba kroków do czasu T: $k = \frac{T}{\Delta t}$. Błąd lokalny rzędu $O(\Delta t^2)$ sumowany k razy daje błąd $O(\Delta t)$.

jawny schemat Eulera do równania Newtona

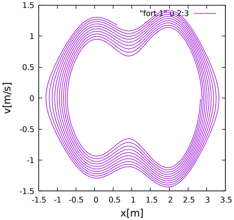
- równanie różniczkowe: $\frac{dy}{dt}|_t = f(t, y)$
- $y_{n+1} = y_n + f(t_n, y_n)\Delta t$
- równania:
- $\frac{dx}{dt} \equiv v$
- $\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}$
- $x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t$
- $v_{n+1} = v_n - \frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n}\Delta t$

jawny schemat Eulera do równania Newtona

- $x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t$
- $v_{n+1} = v_n - \frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n} \Delta t$
- $\Delta t = 0.01$ s
- 

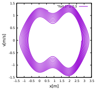
- 

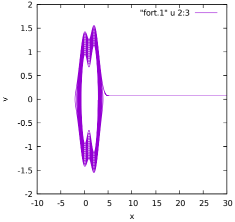
jawny schemat Eulera do równania Newtona

- $x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t$
- $v_{n+1} = v_n - \frac{1}{m} \frac{dV}{dx}|_{x_n} \Delta t$
- $\Delta t = 0.01$ s, wynik do 100 sekund
- 

- wykres (x, v) tzw. portret fazowy
- jawny schemat Eulera - nie zachowuje ściśle energii, ona jest generowana w programie. Tempo generacji, lub zaniku energii zależy od schematu róznicowego.

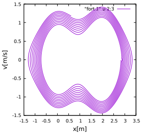
jawny schemat Eulera do równania Newtona

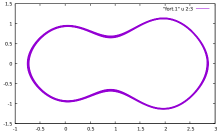
- $\Delta t = 0.01$s wynik do 100 sekund
- 

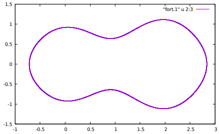
-
- zobaczmy co dalej sie stanie: wynik do 1000 sekund
- 

- ciało opuściło zasięg potencjału i oddala się ze stałą prędkością w prawo
- $V(x) = -e^{-x^2} - 1.2\, e^{-(x-2)^2}$

jawny schemat Eulera do równania Newtona

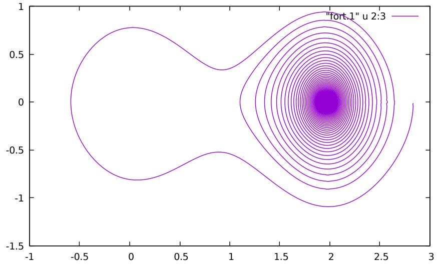
- $T = 100$ s, $\Delta t = .01$
- 

- $\Delta t = .001$
- 

$\Delta t = .0001$
- 

- dla lepszych schematów wystepują podobne problemy
- gdy mniejszyć krok Δt wystąpią, ale później:
- co zrobić - ustalić jaki zakres czasu nas interesuje, do niego dobrać krok czasowy
- dobra metoda : o błędzie lokalnym rzędu wyższego niż 2 pozwoli wykonać mniej kroków (pracować z większym Δt

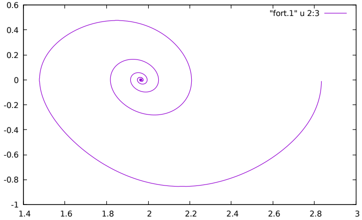
jawny schemat Eulera do równania Newtona

- wprowadźmy opory ruchu:
- $\frac{dx}{dt} = v$
- $\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{dV}{dx} - \alpha v$
- $\alpha = 0.05$, $\Delta t = 0.01$
- 

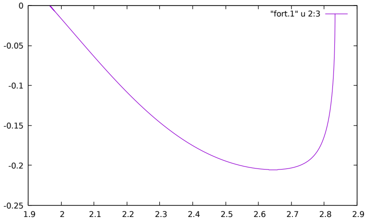
- wykres (x, v) - układ znajduje jedno z minimów potencjału

jawny schemat Eulera do równania Newtona

- $\alpha = 0.5$, $v(x)$, $\Delta t = 0.01$

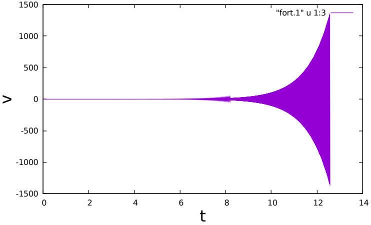


- $\alpha = 5$, $v(x)$, $\Delta t = 0.01$



jawny schemat Eulera do równania Newtona

- duży współczynnik tłumienia $\alpha = 201$,
- $v(t)$, $\Delta t = 0.01$

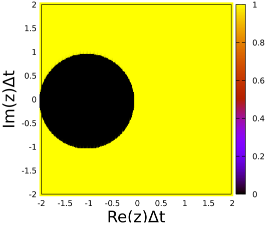


-
- gdy $\alpha \Delta t > 2$ rachunek eksploduje
- ciało wykonuje skoki o rosnącej z czasem amplitudzie
- prędkość zmienia znak i rośnie z kroku na krok
- problem: bezwzględnej niestabilności jawnego schematu Eulera

bezwzględna stabilność schematu Eulera

- DF: schemat dla danego równania i dla danego Δtjest **bezwzględnie stabilny** jeśli generowane wartości pozostają skończone przy $n \rightarrow \infty$
- z układu równań, problematyczny jest czynnik z α
- $\frac{dx}{dt} = v$
- $\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{dV}{dx} - \alpha v$
- zajmiemy się więc równaniem
- $\frac{dv}{dt} = -\alpha v$, rozwiązanie analityczne $v(t) = v(0)\exp(-\alpha t)$
- $v_{n+1} = v_n - \Delta t \alpha v_n$
- $v_{n+1} = v_n(1 - \Delta t \alpha)$
- jeśli $|1 - \Delta t \alpha| > 1$, v_{n+1} dąży do nieskończoności z n
- warunek bezwzględnej stabilności $|1 - \Delta t \alpha| \leqslant 1$, albo
- warunek bezwzględnej stabilności $-1 \leqslant \Delta t \alpha - 1 \leqslant 1$
- dla $\alpha > 0$ schemat bezwzględnie stabilny jeśli $\Delta t \alpha \leqslant 2$, czyli $\Delta t \leqslant \frac{2}{\alpha}$

region bezwzględnej stabilności jawnego schematu Eulera

- problem modelowy:
- $\frac{dv}{dt} = zv$, z zespolona
- $v_{n+1} = v_n + \Delta t z v_n$
- $v_{n+1} = v_n(1 + \Delta t z)$
- bezwzględnie stabilny dla
- $|1 + \Delta t z| < 1$: czarny obszar na rysunku (region bezwzględnej stabilności jawnego schematu Eulera)
- 

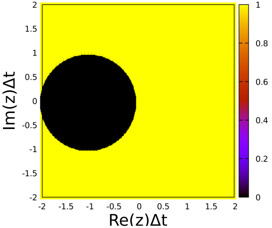
- dla dużych "współczynników tłumienia" $\Re(z) < 0$ rozwiązanie dokładne $C \exp(zt)$ gaśnie, a numeryczne eksploduje

niejawny schemat Eulera

- $\frac{dv}{dt} = zv$, z liczba zespolona

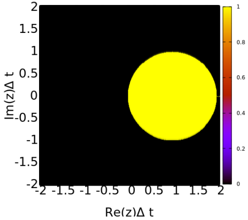
jawny:

- $\frac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t} = zv_n$
- $v_{n+1} = v_n + \Delta t z v_n$
- $v_{n+1} = v_n(1 + \Delta t z)$
- bezwzględna stabilność: $|1 + \Delta t z| < 1$.



niejawny:

- $\frac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t} = zv_{n+1}$
- $v_{n+1} = v_n + \Delta t z v_{n+1}$
- $v_{n+1} = \frac{v_n}{1 - \Delta t z}$
- bezwzględna stabilność: $|1 - \Delta t z| > 1$.



- region bezwzględnej stabilności: czarny. Jeśli $Re(z) < 0$ niejawny Euler pozostaje bezwzględnie stabilny niezależnie od kroku czasowego

niejawny schemat Eulera

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v)$
  - jawny:
  - $v_{n+1} = v_n + f(t_n, v_n)\Delta t$
  - działa jak podstawienie

- niejawny:
- $v_{n+1} = v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1})\Delta t$
- działa jak równanie na v_{n+1} – nieliniowe jeśli f – nieliniowe

niejawny schemat Eulera

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v)$
- $v_{n+1} = v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1})\Delta t$
- rozwiązanie dla leniwych programistów:
- iteracja: $v_{n+1}^{\mu+1} = v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t$
- na starcie np. $v_{n+1}^{1} = v_n$
- jeśli $v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu}$, w praktyce $|v_{n+1}^{\mu+1} - v_{n+1}^{\mu}| < \epsilon \longrightarrow v_{n+1} = v_{n+1}^{\mu+1}$
- pomysł podobny do relaksacji dla równania Poissona: ze związku, który spełnia rozwiązanie dokładne budujemy przepis iteracyjny. Dla Poissona: zadziałało ... co teraz?

iteracja czasowa w niejawnym Eulerze

- $\frac{dv}{dt} = -\alpha v$
- $\Delta t = 0.01$, $\alpha = 20$
- $v_{n+1}^{\mu+1} = v_n - \alpha v_{n+1}^{\mu}$
- $v_1 = 1$
- $v_2^1 = 1$
- $v_2^{\mu+1} = 1 - \alpha v_{n+1}^{\mu}$
-

μ	v_2^{μ}
2	0.8
3	0.84
4	0.8336
5	0.833344
6	0.833331

- zbiega się, lecz wymagane kilka iteracji

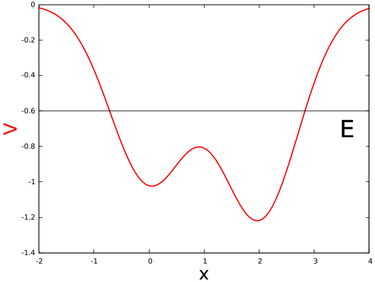
iteracja czasowa w niejawnym Eulerze

- $\frac{dv}{dt} = -\alpha v$
- $\Delta t = 0.01$, $\alpha = 200$
- $v_{n+1}^{\mu+1} = v_n - \alpha v_{n+1}^{\mu}$
- $v_1 = 1$
- $v_2^1 = 1$
- $v_2^{\mu+1} = 1 - \alpha v_{n+1}^{\mu}$
-

μ	v_2^{μ}
2	-1
3	3
4	-5
5	11
6	-21

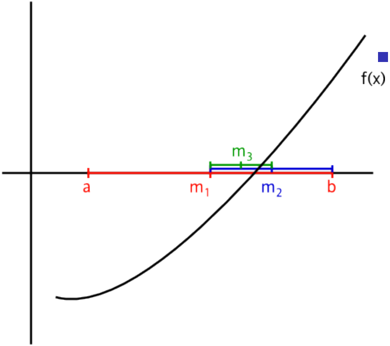
- tam gdzie jest problem dla jawnego Eulera ze stabilnością bezwzględna, tam niejawny Euler rozwiązywany przez prostą iterację się nie sprawdza
- potrzebny inny sposób wykonywania kroku w niejawnym Eulerze
- Przepis niejawnego Eulera: $v_{n+1} = v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1})\Delta t$, jest równaniem nieliniowym. Potrzebne metody dedykowane do rozwiązywania równania nieliniowego.

Rozwiązywanie równań nieliniowych. Case study: przestrzeń dostępna dla ciała o danej energii

- 

- cząstka o energii $E = -0.6$ [J]. Energia potencjalna zależna od położenia $x[m]$ $V(x) = -\exp(-x^2) - 1.2\exp(-(x-2)^2)[J]$
- wyznaczyć obszar dostępny dla cząstki: $V(x) \leqslant E$
- równania na punkty zwrotne $V(x) = E$
- równanie - zazwyczaj nieliniowe - do rozwiązania $f(x) \equiv V(x) - E = 0$

równania nieliniowe: metoda bisekcji



- rozwiązanie równania nieliniowego: najprostsza z metod – bisekcja
  0. osaczyć zero : $f(b) > 0$ oraz $f(a) < 0$, $i := 1$
  1. $m_i = \frac{a+b}{2}$
  2. albo $f(a)f(m) < 0$ wtedy $b := m$
  3. albo $f(b)f(m) < 0$ wtedy $a := m$
  4. $i := i + 1$
  5. jeśli $|a - b| >$ zadanej precyzji wyznaczenia zera, wracamy do 1)

- z każdym krokiem przedział, w którym poszukujemy zera (dokładność jego oszacowania) skraca się o połowę

metoda bisekcji

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

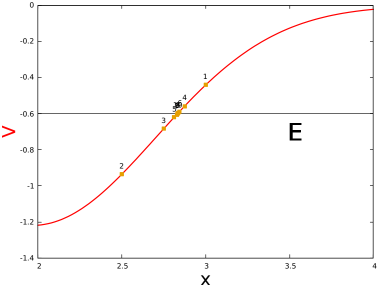
metoda Newtona

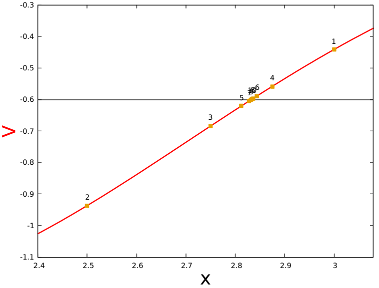
fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

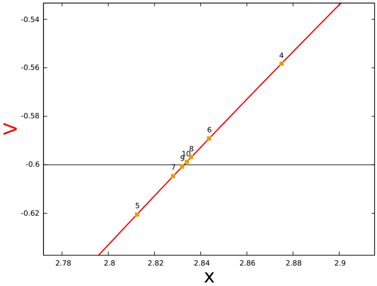
układy równań nieliniowych

schemat trapezów

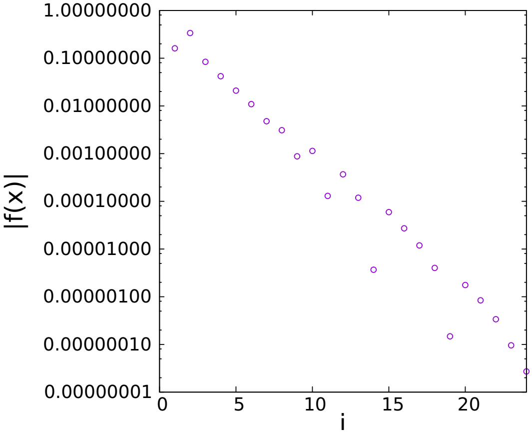




- $f(x) \equiv V(x) - E = 0$, na rysunkach $V(x)$

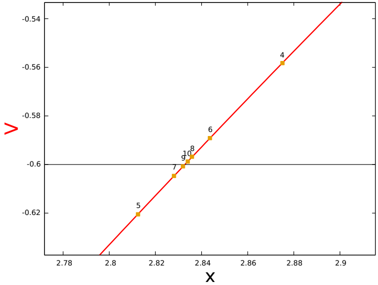


- metoda bisekcji: reaguje tylko na znak funkcji, ignoruje wartość oraz kształt krzywej
- dokładność wyznaczenia zera ściśle określona przez liczbe wywołań funkcji



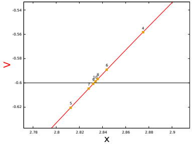
- zbieżność $f(x) \equiv V(x) - E = 0$, dla kolejnych iteracji i

potrzeba linearyzacji



- Wolna zbieżność. Problem, jeśli wyliczenie $f(x)$ trwa np. 48h.
- Trzeba przyspieszyć.
- Każda funkcja gładka w małym przedziale (w dużym zoomie) zachowuje się jak funkcja liniowa.
- Możliwość przyspieszenia rachunków z wykorzystaniem linearyzacji funkcji nieliniowej w okolicach zera
- Metoda: nazywana metodą stycznych, metodą Newtona albo metodą Newtona-Raphsona

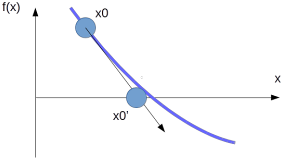
metoda Newtona-Raphsona (stycznych, Newtona)

- 

  - rozwinięcie w szereg Taylora
    $f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x)|_{x0} + (x - x_0)^2 f''(x)|_{x0} + \dots$
  - szukamy $f(x) = 0$, x_0 to okolice zera $f(x)$, jesli jesteśmy blisko $(x - x_0)^2$ - zaniedbywalne w porównaniu z wyrazem liniowym $(x - x_0)$

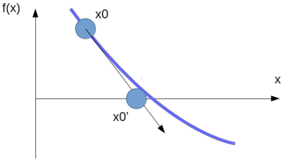
- rozwinięcie w szereg Taylora $0 = f(x) \simeq f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$
- liczymy $0 = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) \to x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$
- procedura iteracyjnej poprawy oszacowania zera $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
- w porównaniu do metody bisekcji wykorzystuje nie tylko znak funkcji, lecz jej (1) wartość oraz (2) pochodną (wysokość nad osią i nachylenie wykresu)

metoda Newtona-Raphsona

- 

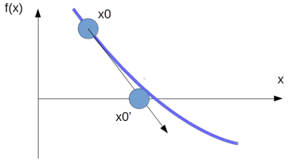
- metoda N-R sprowadza się do linearyzacji funkcji i przewidzenia, gdzie liniowa funkcja przetnie oś x
- jesteśmy w punkcie x_0 - prowadzimy prostą, która przechodzi przez punkt $(x_0, f(x_0))$ oraz ma nachylenie dane przez $f'(x_0)$
- równanie prostej : $F(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$.
- szukamy jej zera: dostajemy przepis jak poprzednio:
- procedura iteracyjnej poprawy oszacowania zera $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
- uwaga: dla funkcji liniowej procedura uzyskuje dokładny wynik w jednej iteracji (tempo zbieżności bisekcji w ogóle nie zależy od zachowania $f(x)$ w okolicach zera).

metoda Newtona-Raphsona

- 

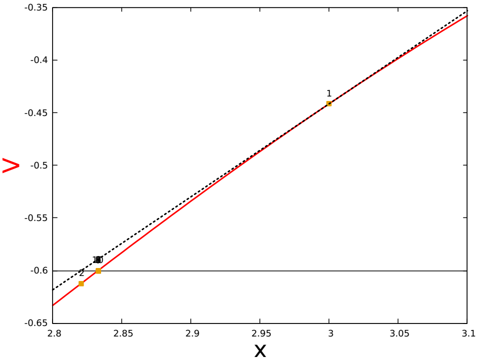
- procedura iteracyjnej poprawy oszacowania zera $x_{n+1} := x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

metoda Newtona-Raphsona

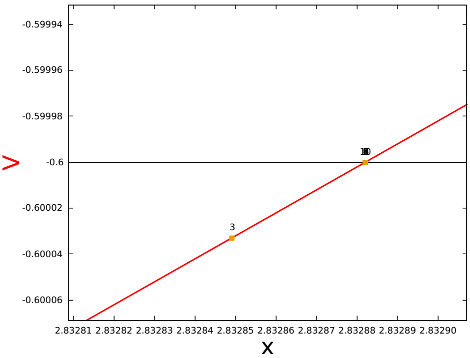
- 

- $V(x) - E = 0$, $E = -0.6$
- $f(x) = -e^{-x^2} - 1.2\, e^{-(x-2)^2} + 0.6$
- $f'(x) = 2\, x e^{-x^2} - 1.2\, (-2\, x + 4)\, e^{-(x-2)^2}$
- procedura iteracyjnej poprawy oszacowania zera $x_{n+1} := x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

metoda Newtona-Raphsona wyniki

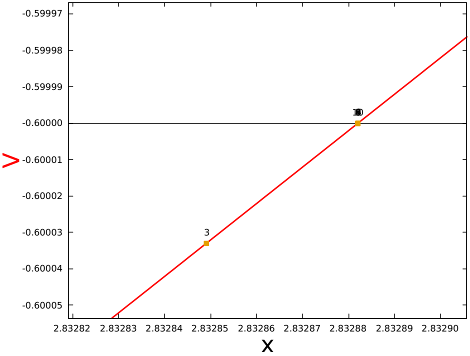
- $f(x) = V(x) - E$
- $f(x) = -e^{-x^2} - 1.2\, e^{-(x-2)^2} + 0.6$
- $f'(x) = 2\,xe^{-x^2} - 1.2\,(-2\,x+4)\,e^{-(x-2)^2}$
- 

metoda Newtona-Raphsona wyniki

- $f(x) = V(x) - E$
- $f(x) = -e^{-x^2} - 1.2\, e^{-(x-2)^2} + 0.6$
- $f'(x) = 2\, x e^{-x^2} - 1.2\, (-2\, x + 4)\, e^{-(x-2)^2}$
- 

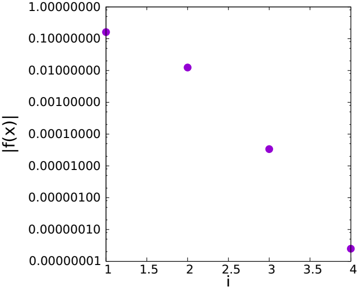
metoda Newtona-Raphsona wyniki

- $f(x) = V(x) - E$
- $f(x) = -e^{-x^2} - 1.2\,e^{-(x-2)^2} + 0.6$
- $f'(x) = 2\,xe^{-x^2} - 1.2\,(-2\,x+4)\,e^{-(x-2)^2}$

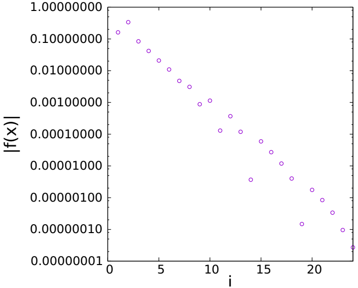


-

metoda Newtona-Raphsona a bisekcji - porównanie tempa zbieżności



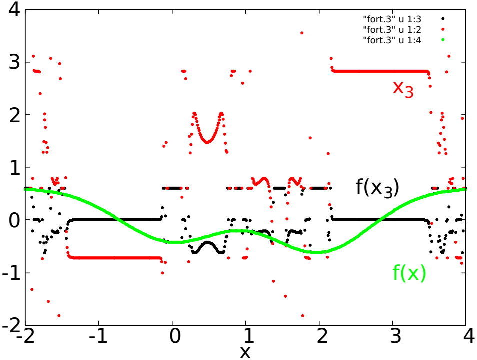
-
- metoda Newtona



-
- metoda bisekcji

metoda Newtona-Raphsona

- zbieżność procedury, x - punkt startowy, x_3 - punkt osiągnięty w trzeciej iteracji
- $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$



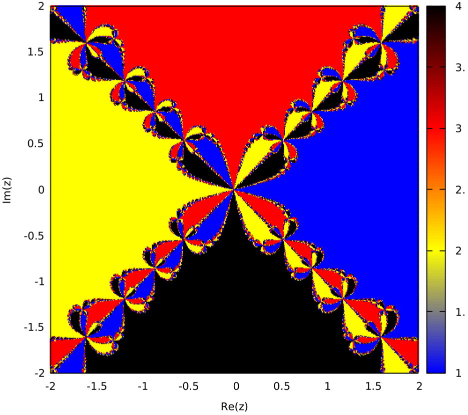
- zbieżność ograniczona do okolicy zera - styczna może wyprowadzić iterację do $\pm\infty$
- powodzenie metody zależy od punktu startowego. bisekcja nie może się nie powieść.
- rekomendowana metoda: zbliżyć się do okolic zera metodą bisekcji. dokładne położenie określić metodą Newtona.

procedura iteracyjne

- $x_{n+1} = W(x_n, x_{n-1}, \ldots)$
- iteracja Markowa $x_{n+1} = W(x_n)$
- punkt stały iteracji $x_{n+1} = W(x_{n+1})$
- baseny przyciągania punktów stałych

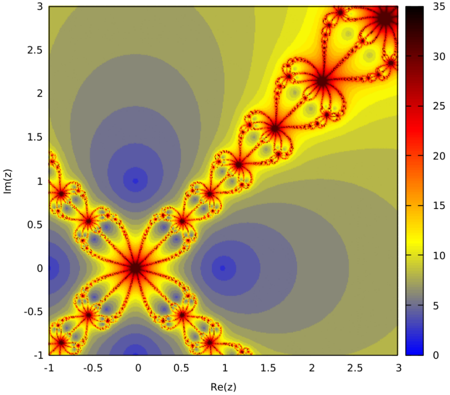
Fraktal Newtona

- $z_{n+1} = z_n - f(z_n)/f'(z_n)$
- $f(z) = z^4 - 1$
- punkty stałe: 1, i, -1, -i



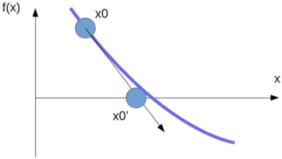
- kolory - numer punktu stałego, do którego zbiega iteracja startowana z punktu z (fraktal - obiekt o ułamkowym wymiarze – granica między obszarami przyciągania)
- film fractz4m1.gif

Fraktal Newtona

- $z_{n+1} = z_n - f(z_n)/f'(z_n)$
- $f(z) = z^4 - 1$
- 

- liczba iteracji, po której $|f(z)|$ spada poniżej 1/10000
- film $\mathrm{franctal_newtona_liczba_iteracji.gif}$

metoda Newtona-Raphsona

- wracamy
- $f(x) = -e^{-x^2} - 1.2\, e^{-(x-2)^2} + 0.6$
- 

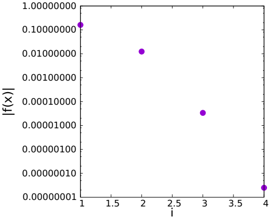
- $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$
- jeśli pochodna nie jest dana w formie analitycznej (sama funkcja nie musi być) możemy zastosować przybliżenie pochodnej.
- punkt zbieżności iteracji nie może ulec zmianie
- pochodna $f'(x) \simeq \frac{f(x+dx)-f(x-dx)}{2dx}$

metoda Newtona-Raphsona

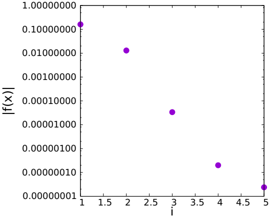
dynamika punktu materialnego
schematy Eulera
równania nieliniowe
metoda bisekcji
metoda Newtona
fraktal N.
krok w schemacie niejawnym
układy równań nieliniowych
schemat trapezów

- zbieżność - wartości w kolejnych iteracjach, z ilorazem różnicowym zamiast pochodnej, start od $x = 3$

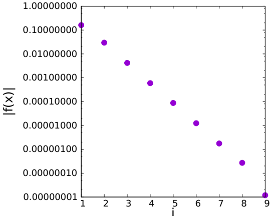
- dokładna pochodna



- $dx = 0.1$



- $dx = 0.5$



metoda Newtona dla wykonania kroku w niejawnym schemacie Eulera

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v)$
- $v_{n+1} = v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1})\Delta t$
- $F(v_{n+1}) \equiv v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1})\Delta t - v_{n+1}$
- $F(v_{n+1}) = 0$
- $$\boxed{v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{F(v_{n+1}^{\mu})}{F'(v_{n+1}^{\mu})}}$$
- Metoda Newtona dla niejawnego Eulera:
- $$\boxed{v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - v_{n+1}^{\mu}}{f'_v(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - 1}}$$

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v) = -\alpha v$
- $v_1 = 1$, $\alpha = 200$, $dt = 0.01$
- $\boxed{v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - v_{n+1}^{\mu}}{f_v'(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - 1}}$
- pochodna w mianowniku z ilorazu różnicowego
-

μ	v_2^{μ}
2	0.33333333
3	0.33333333
4	0.33333333

- zbieżność w jednej iteracji, bo prawa strona jest liniową funkcją v

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v) = -\alpha v$
- $v_1 = 1$, $\boxed{\alpha = 2000}$, $dt = 0.01$
- $$\boxed{v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - v_{n+1}^{\mu}}{f'_v(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - 1}}$$
- pochodna w mianowniku z ilorazu różnicowego
-

μ	v_2^μ
2	0.047619
3	0.047619
4	0.047619

- zbieżność w jednej iteracji, bo prawa strona jest liniową funkcją v, *niezależnie od* α

niejawny Euler dla problemu nieliniowego

- $\frac{dv}{dt} = -\alpha v^2$
- $v_1 = 1$, $\boxed{\alpha = 2000}$, $dt = 0.01$
- $$\boxed{v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - v_{n+1}^{\mu}}{f'_v(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - 1}}$$
- pochodna w mianowniku z ilorazu różnicowego

μ	v_2^{μ}
2	0.5121
3	0.2907
4	0.2130
5	0.2003
6	0.2000

- dla problemu nieliniowego kilka iteracji potrzebne zbieżność wymaga kilku iteracji

niejawny Euler dla układu równań

- układ równań różniczkowych
- $\frac{dx}{dt} = v$
- $\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}$
- przepis metody
- $x_{n+1} = x_n + \Delta t v_{n+1}$
- $v_{n+1} = v_n + \Delta t \left(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$
- układ równań nieliniowych:
- $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \Delta t v_{n+1}$
- $F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) = v_{n+1} - v_n - \Delta t \left(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$
- jak rozwiązać ?

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

- $f_1(x,y) = 0$
- $f_2(x,y) = 0$
- linearyzacja wokół (x_0, y_0) - przybliżonego rozwiązania.
- chcemy znaleźć poprawione rozwiązanie:
- $f_1(x,y) \simeq f_1(x_0,y_0) + (x - x_0)\frac{\partial f_1}{\partial x}|_{x_0,y_0} + (y - y_0)\frac{\partial f_1}{\partial y}|_{x_0,y_0} = 0$
- $f_2(x,y) \simeq f_2(x_0,y_0) + (x - x_0)\frac{\partial f_2}{\partial x}|_{x_0,y_0} + (y - y_0)\frac{\partial f_2}{\partial y}|_{x_0,y_0} = 0$
- albo
- $\Delta x \frac{\partial f_1}{\partial x}|_{x_0,y_0} + \Delta y \frac{\partial f_1}{\partial y}|_{x_0,y_0} = -f_1(x_0,y_0)$
- $\Delta x \frac{\partial f_2}{\partial x}|_{x_0,y_0} + \Delta y \frac{\partial f_2}{\partial y}|_{x_0,y_0} = -f_2(x_0,y_0)$
- mamy więc układ równań liniowych

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

- $\Delta x \frac{\partial f_1}{\partial x}|_{x_0, y_0} + \Delta y \frac{\partial f_1}{\partial y}|_{x_0, y_0} = -f_1(x_0, y_0)$
- $\Delta x \frac{\partial f_2}{\partial x}|_{x_0, y_0} + \Delta y \frac{\partial f_2}{\partial y}|_{x_0, y_0} = -f_2(x_0, y_0)$
- wersja macierzowa
-
$$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{array} \right)_{|x_0, y_0} \left(\begin{array}{c} \Delta x \\ \Delta y \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{array} \right) \tag{1}$$
- dla większej liczby równań podobnie
- po rozwiązaniu: $x := x + \Delta x$, $y := y + \Delta y$, iteracja aż do zbieżności (aż 0 po prawej stronie URL)
- macierz w układzie (1) - macierz Jakobiego
- dla porównania metoda Newtona w wersji skalarnej
-
$$\frac{df}{dx}|_{x_0} \Delta x = -f(x_0) \tag{2}$$

- przykład, szukamy minimum przez zera pochodnych cząstkowych
- $W(x,y) = \left[(x-2)^2 + 5(y-2)^2\right]^m$
- $f_1(x,y) = \frac{\partial W}{\partial x}$, $f_2(x,y) = \frac{\partial W}{\partial y}$
- $x_0 = -1$, $y_0 = 5$
- $$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{array} \right)_{|x_0,y_0} \left(\begin{array}{c} \Delta x \\ \Delta y \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} f_1(x_0,y_0) \\ f_2(x_0,y_0) \end{array} \right) \tag{3}$$

- $x_0 := x_0 + \Delta x$
- $y_0 := y_0 + \Delta y$
- A(1,1)=(f1(x0+dx,y0)-f1(x0-dx,y0))/2/dx
- A(1,2)=(f1(x0,y0+dx)-f1(x0,y0-dx))/2/dx
- A(2,1)=(f2(x0+dx,y0)-f2(x0-dx,y0))/2/dx
- A(2,2)=(f2(x0,y0+dx)-f2(x0,y0-dx))/2/dx
- b(1,1)=-f1(x0,y0)
- b(2,1)=-f2(x0,y0)
- CALL DGESV(2,1,A,2,IPIV,B,2,INFO)
- x0=x0+b(1,1)
- y0=y0+b(2,1)

- zapis w fortranie
- DGESV -procedura biblioteki Lapack do rozwiązywania URL metodą eliminacji Gaussa (D - dla podwójnej precyzji)
- DGESV(N, NRHS, A, LDA, IPIV, B, LDB, INFO)

- przykład, szukamy minimum przez zera pochodnych cząstkowych
- $W(x,y) = \left[(x-2)^2 + 5(y-2)^2\right]^m$
-
$$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{array} \right)_{|x_0,y_0} \left(\begin{array}{c} \Delta x \\ \Delta y \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} f_1(x_0,y_0) \\ f_2(x_0,y_0) \end{array} \right) \tag{4}$$
- $m = 1$
- $x_0 = -1$, $y_0 = 5$
- iteracja 1: $x_0 = 2$, $y_0 = 2$
- prawa strona 0
- rozwiązanie na $\Delta x = \Delta y = 0$
- dla $m = 1$ problem jest liniowy i rozwiązanie znajdywane jest w jednej iteracji

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

- przykład, szukamy minimum przez zera pochodnych cząstkowych
- $W(x, y) = \left[(x-2)^2 + 5(y-2)^2\right]^m$
-

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix}_{|x_0, y_0} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix} \tag{5}$$

- $m = 1.1$
- $x_0 = -1$, $y_0 = 5$
- kolejne iteracje
- 1.500000394866 2.499998129975 1
- 1.916669647455 2.083321215826 2
- 1.986129145712 2.013815760162 3
- 1.997783537491 2.001838719405 4
- 1.999927331282 2.000008482681 5
- 1.999999999350 2.000000000052 6
- 2.000000000000 2.000000000000 7

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

- przykład, szukamy minimum przez zera pochodnych cząstkowych
- $W(x, y) = \left[(x-2)^2 + 5(y-2)^2\right]^m$
- $$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{array} \right)_{|x_0, y_0} \left(\begin{array}{c} \Delta x \\ \Delta y \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{array} \right) \tag{6}$$
- $m = 2$
- $x_0 = -1$, $y_0 = 5$
- kolejne iteracje
- -0.000006994044 3.999992181766 1
- 0.666651510561 3.333316393392 2
- 1.111085267360 2.888860004025 3
- 1.407366569194 2.592546948859 4
- 1.604875633793 2.394991719098 5
- 1.736530641875 2.263268444557 6
- 1.824274105496 2.175423250990 7
- 1.882729971647 2.116815289242 8
- 1.921641008955 2.077676621811 9
- 1.947492820829 2.051484331730 10
- 1.964595579855 2.033873729959 11
- 1.975805570047 2.021912335928 12
- 1.983015500820 2.013617574155 13
- 1.987541799822 2.007659911907 14
- 1.990672912459 2.003316707631 15
- 1.994209620579 2.000776327964 16
- 1.997936857455 2.000070449518 17
- 1.999843222727 2.000001112630 18
- 1.999999907312 2.000000000221 19

niejawny Euler dla problemu oscylatora anharmonicznego

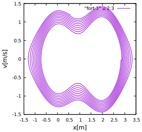
- $x_{n+1} = x_n + \Delta t v_{n+1}$
- $v_{n+1} = v_n + \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$
- układ równań nieliniowych:
- $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \Delta t v_{n+1}$
- $F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) = v_{n+1} - v_n - \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$
- $$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial F_1}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_1}{\partial v_{n+1}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_2}{\partial v_{n+1}} \end{array} \right)_{|x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}} \left(\begin{array}{c} x^{\mu+1}_{n+1} - x^{\mu}_{n+1} \\ v^{\mu+1}_{n+1} - v^{\mu}_{n+1} \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} F_1(x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}) \\ F_2(x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}) \end{array} \right) \quad (7)$$

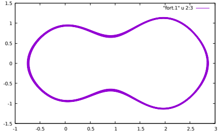
niejawny Euler dla problemu oscylatora anharmonicznego

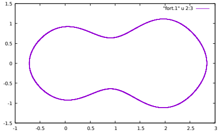
- $x_{n+1} = x_n + \Delta t v_{n+1}$
- $v_{n+1} = v_n + \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$
- układ równań nieliniowych:
- $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \Delta t v_{n+1}$
- $F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) = v_{n+1} - v_n - \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$
- $$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial F_1}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_1}{\partial v_{n+1}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_2}{\partial v_{n+1}} \end{array} \right)_{|x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}} \left(\begin{array}{c} x^{\mu+1}_{n+1} - x^\mu_{n+1} \\ v^{\mu+1}_{n+1} - v^\mu_{n+1} \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} F_1(x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}) \\ F_2(x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}) \end{array} \right) \tag{8}$$

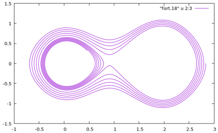
$$\left(\begin{array}{cc} 1 & -\Delta t \\ \frac{\Delta t}{m} \frac{d^2 V}{dx^2}_{|x^\mu_{n+1}} & 1 + \Delta t \alpha \end{array} \right)_{|x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}} \left(\begin{array}{c} x^{\mu+1}_{n+1} - x^\mu_{n+1} \\ v^{\mu+1}_{n+1} - v^\mu_{n+1} \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} F_1(x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}) \\ F_2(x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}) \end{array} \right) \tag{9}$$

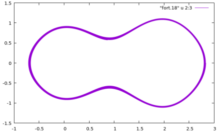
jawny schemat Eulera do równania Newtona

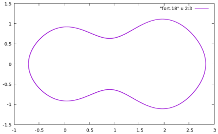
- jawny ($\alpha = 0$)
- $T = 100$ s, $\Delta t = .01$
- 

- $\Delta t = .001$
- 

  $\Delta t = .0001$
- 

- niejawny ($\alpha = 0$) - numeryczna dysypacja
- $T = 100$ s, $\Delta t = .01$
- 

- $\Delta t = .001$
- 

  $\Delta t = .0001$
- 

niejawny Euler iteracja pierwszego kroku

- $\alpha = 0$
- dt=0.01
- 2.832880020142 0.000000000000
- 2.832779943898 -0.010007624574
- 2.832779943900 -0.010007624349
-
- dt=0.1
- 2.832880020142 0.000000000000
- 2.822825171371 -0.100548486206
- 2.822826802654 -0.100532173375
- 2.822826802653 -0.100532173385

- $\alpha = 201$
- dt=.1
- 2.832880020142 0.000000000000
- 2.832405640967 -0.004743791674
- 2.832405641151 -0.004743789832
- jawny Euler eksplodował nawet przy dt=0.01
- bariera bezwzględnej stabilności pokonana

```
do 15 iter=1,100 00
11 continue
A(1,1)=1
A(1,2)=-dt
A(2,1)=dt/xm*(fu(x+dx)+fu(x-dx)-
2*fu(x))/dx**2
A(2,2)=1+dt*alpha
b(1,1)=-F1(x,v)
b(2,1)=-F2(x,v)
write(17,13) x,v,f1(x,v),f2(x,v)
CALL DGESV(2,1,A,2,IPIV,B,2,INFO)
x=x+b(1,1)
v=v+b(2,1)
li=li+1
if(li.lt.5) goto11
xo=x
vo=v
write(18,13) iter*dt,x,v,fu(x)+xm*v**2/2
15 continue
12 format (2f20.12,1i,1f20.12)
13 format (100f20.12)
end
```

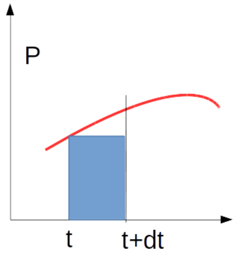
```
function fu(x)
implicit double precision(a-h,o-z)
fu=-exp(-x*x)-1.2*exp(-(x-2)*(x-2))
end
```

```
function f1(x,v)
implicit double precision(a-h,o-z)
common/xovo/xo,vo,dt,xm,alpha,dx
f1=x-xo-dt*v
end
```

```
function f2(x,v)
implicit double precision(a-h,o-z)
common/xovo/xo,vo,dt,xm,alpha,dx
f2=v-vo-dt*(-1/xm*(fu(x+dx)-fu(x-dx))/2/dx-
alpha*v)
end
```

Schemat Eulera jako wzór prostokątów

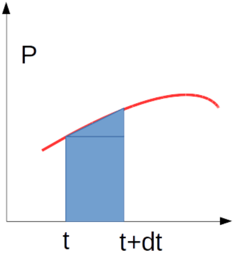
- równanie różniczkowe 1 rzędu w t: $\frac{df(t)}{dt} = P(t, f)$
- $\frac{f(t+dt)-f(x,t)}{dt} = P(t, f)$ - jawny schemat Eulera
- $\frac{f(t+dt)-f(x,t)}{dt} = P(t + dt, f)$ - niejawny schemat Eulera
- przypadek trywialny: $\frac{df(x,t)}{dt} = P(t)$
- $f(x, t + dt) = f(x, t) + \int_t^{t+dt} P(t')dt'$
- przepis jawnego Eulera jeśli funkcję podcałkową przybliżymy przez $P(t)$
- $f(x, t + dt) \simeq f(x, t) + P(t)dt$
- wzór dokładnie całkuje funkcję stałą, w funkcji liniowej się myli (pomija ją), tak że błąd jest rzędu całki z funkcji liniowej, czyli $O(dt^2)$:
- $f(x, t + dt) = f(x, t) + P(t)dt + O(dt^2)$

- 

inin

Wzór trapezów

- dokładniejsza formuła: wzór trapezów
- $f(x,t+dt) = f(x,t) + \int_t^{t+dt} P(t')dt'$
- całka pod krzywą na podstawie wzoru na pole trapezu:
- $f(x,t+dt) \simeq f(x,t) + dt\,\frac{P(t)+P(t+dt)}{2}$
- wzór dokładnie całkuje funkcję liniową, w funkcji kwadratowej się myli
- $f(x,t+dt) = f(x,t) + \frac{P(t)+P(t+dt)}{2}dt + O(dt^3)$



-
- dokładniejszy w czasie o jeden rząd.
- implementacja dla równań Newtona...

schemat trapezów dla układu równań

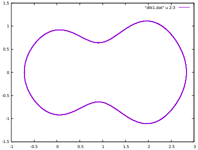
- $x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{2}\left(v_{n+1} + v_n\right)$
- $v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} - \frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n} - \alpha v_n\right)$
- układ równań nieliniowych:
- $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \frac{\Delta t}{2} v_{n+1} - \frac{\Delta t}{2} v_n$
- $F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) = v_{n+1} - v_n - \frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1}\right) - \frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n} - \alpha v_n\right)$
-

$$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial F_1}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_1}{\partial v_{n+1}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_2}{\partial v_{n+1}} \end{array}\right)_{|x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}} \left(\begin{array}{c} x^{\mu+1}_{n+1} - x^{\mu}_{n+1} \\ v^{\mu+1}_{n+1} - v^{\mu}_{n+1} \end{array}\right) = -\left(\begin{array}{c} F_1(x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}) \\ F_2(x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}) \end{array}\right) \tag{10}$$

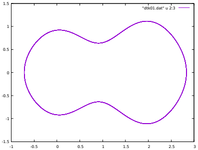
$$\left(\begin{array}{cc} 1 & -\frac{\Delta t}{2} \\ \frac{\Delta t}{2m}\frac{d^2 V}{dx^2}_{|x^{\mu}_{n+1}} & 1 + \frac{\Delta t}{2}\alpha \end{array}\right)_{|x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}} \left(\begin{array}{c} x^{\mu+1}_{n+1} - x^{\mu}_{n+1} \\ v^{\mu+1}_{n+1} - v^{\mu}_{n+1} \end{array}\right) = -\left(\begin{array}{c} F_1(x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}) \\ F_2(x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}) \end{array}\right) \tag{11}$$

schemat trapezów

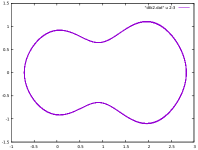
- wzór trapezów ($\alpha = 0$)
- $T = 100$ s, $\Delta t = .01$



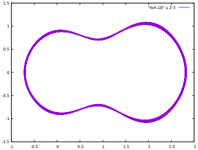
- $\Delta t = .1$



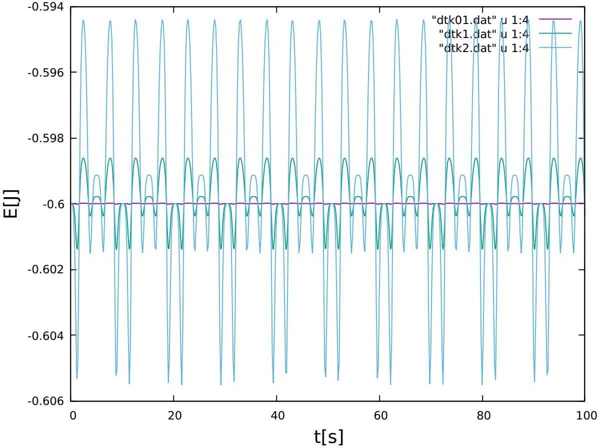
- $\Delta t = .2$



- $T = 100$ s, $\Delta t = .5$



- wzór trapezów (dt=0.2, 0.1, .01)



-

- schemat trapezów – energia ulega lokalnym zmianom, ale jest zachowana co do wartości średniej

Źrodło dla wzoru trapezów


```
do 15 iter=1,10000
11 continue
A(1,1)=1
A(1,2)=-dt/2
A(2,1)=dt/xm*(fu(x+dx)+fu(x-dx)-
2*fu(x))/dx**2/2
A(2,2)=1+dt*alpha/2
b(1,1)=-F1(x,v)
b(2,1)=-F2(x,v)
CALL DGESV(2,1,A,2,IPIV,B,2,INFO)
x=x+b(1,1)
v=v+b(2,1)
li=li+1
if(li.lt.5) goto11
li=1
xo=x
vo=v
write(18,13) iter*dt,x,v,fu(x)+xm*v**2/2
15 continue
12 format (2f20.12,1i,1f20.12)
13 format (100f20.12)
end
```

```
function fu(x)
implicit double precision(a-h,o-z)
fu=-exp(-x*x)-1.2*exp(-(x-2)*(x-2))
end

function f1(x,v)
implicit double precision(a-h,o-z)
common/xovo/xo,vo,dt,xm,alpha,dx
f1=x-xo-dt*v/2-dt*vo/2
end

function f2(x,v)
implicit double precision(a-h,o-z)
common/xovo/xo,vo,dt,xm,alpha,dx
f2=v-vo-dt*(-1/xm*(fu(x+dx)-fu(x-dx))/2/dx-
alpha*v)/2
>-dt*(-1/xm*(fu(xo+dx)-fu(xo-dx))/2/dx-
alpha*vo)/2
end
```