

dynamika Newtona w metodzie różnic skończonych

24 lutego 2022

- 1 różniczkowanie numeryczne
- 2 interpolacja wielomianowa
- 3 dynamika punktu materialnego
- 4 schematy Eulera
- 5 równania nieliniowe
- 6 metoda bisekcji
- 7 metoda Newtona
- 8 fraktal N.
- 9 krok w schemacie niejawnym
- 10 układy równań nieliniowych
- 11 schemat trapezów

ilorazy różnicowe

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomianowa

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

- rachunek różniczkowy i pochodna funkcji $f(x)$
- $f'(x) \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$
- najprostsze metody numeryczne rozwiązywania równań różniczkowych – przed przejściem granicznym
- pracujemy na ilorazach różnicowych oraz równaniach algebraicznych, które powstają z dyskretyzacji przestrzeni / czasu do punktów / chwil czasowych
- dyskretyzacja czasu / przestrzeni, ilorazy różnicowe zamiast pochodnych – metoda różnic skończonych (*finite difference method*)

twierdzenie Taylora

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielini-
owych

schemat
trapezów

■ szereg Taylora

$$\blacksquare y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_t + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^N y}{dt^N} \Big|_t + \dots$$

■ twierdzenie Taylora

$$\blacksquare y(t + \Delta t) = y(t) + \sum_{n=1}^N \left[\frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^n y}{dt^n} \Big|_t \right] + \frac{\Delta t^{N+1}}{(N+1)!} \frac{d^{N+1} y}{dt^{N+1}} \Big|_\tau, \text{ gdzie } \tau \in (t, t + \Delta t)$$

■ reszta znika w granicy małego kroku czasowego

$$\blacksquare \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta t^{N+1}}{N!} \frac{d^{N+1} y}{dt^{N+1}} \Big|_\tau \right) = O(\Delta t^{N+1})$$

■ tempo zbieżności przybliżonego przepisu

$$\blacksquare y(t + \Delta t) = y(t) + \sum_{n=1}^N \left[\frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^n y}{dt^n} \Big|_t \right] + O(\Delta t^{N+1}), \text{ do dokładnego jest rzędu } N + 1,$$

różniczkowanie numeryczne: dwupunktowy iloraz różnicowy pierwszej pochodnej

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

■ szereg Taylora:

$$\blacksquare y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_t + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^N y}{dt^N} \Big|_t + \dots$$

$$\blacksquare y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + O(\Delta t^2)$$

$$\blacksquare \Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t = y(t + \Delta t) - y(t) + O(\Delta t^2)$$

$$\blacksquare \frac{dy}{dt} \Big|_t = \frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

różniczkowanie numeryczne: schemat centralny trójpunktowy

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

■ szereg Taylora:

$$\blacksquare y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_t + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + \frac{\Delta t^4}{4!} \frac{d^4 y}{dt^4} \Big|_t + \dots$$

$$\blacksquare y(t - \Delta t) = y(t) - \Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_t - \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + \frac{\Delta t^4}{4!} \frac{d^4 y}{dt^4} \Big|_t + \dots$$

$$\blacksquare y(t + \Delta t) - y(t - \Delta t) = 2\Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + 2 \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + \dots$$

$$\blacksquare y(t + \Delta t) - y(t - \Delta t) = 2\Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + O(\Delta t^3)$$

$$\blacksquare \frac{dy}{dt} \Big|_t = \frac{y(t+\Delta t) - y(t-\Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2)$$

■ zamiast

$$\blacksquare \frac{dy}{dt} \Big|_t = \frac{y(t+\Delta t) - y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

różniczkowanie numeryczne: schemat centralny pięciopunktowy

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

■ szereg Taylora:

$$\blacksquare y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_t + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + \frac{\Delta t^4}{4!} \frac{d^4 y}{dt^4} \Big|_t + \dots$$

$$\blacksquare y(t - \Delta t) = y(t) - \Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_t - \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + \frac{\Delta t^4}{4!} \frac{d^4 y}{dt^4} \Big|_t + \dots$$

$$\blacksquare y(t + \Delta t) - y(t - \Delta t) = 2\Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + 2 \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + O(\Delta t^5) \quad (1)$$

$$\blacksquare y(t + 2\Delta t) = y(t) + 2\Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + 4 \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_t + 8 \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + 16 \frac{\Delta t^4}{4!} \frac{d^4 y}{dt^4} \Big|_t + \dots$$

$$\blacksquare y(t - 2\Delta t) = y(t) - 2\Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + 4 \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_t - 8 \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + 16 \frac{\Delta t^4}{4!} \frac{d^4 y}{dt^4} \Big|_t + \dots$$

$$\blacksquare y(t + 2\Delta t) - y(t - 2\Delta t) = 4\Delta t \frac{dy}{dt} \Big|_t + 2 \cdot 8 \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_t + O(\Delta t^5) \quad (2)$$

$$\blacksquare 8 \cdot (1) - (2) \rightarrow$$

$$\blacksquare \frac{dy}{dt} \Big|_t = \frac{1}{12\Delta t} [y(t - 2\Delta t) - 8y(t - \Delta t) + 8y(t + \Delta t) - y(t + 2\Delta t)] + O(\Delta t^4)$$

■ etc.

Interpolacja wielomianowa

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

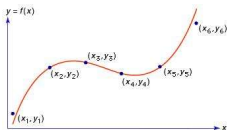
fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

- wzory na pochodne: zamiast rozwinięcia w szereg Taylora - można wykorzystać interpolację wielomianową (potrzebna do: całkowania Gaussa, metody elementów skończonych, etc.)



© 2008 Encyclopædia Britannica, Inc.

na obrazku punkty

interpolacji: 2,3,4,5

- wielomian węzłowy Lagrange'a: $l_i(x) = \prod_{j=1, j \neq i}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$
- podstawowa własność: $l_i(x_j) = \delta_{ij}$
- wielomian interpolacyjny $P(x) = \sum_{i=1}^N y_i l_i(x)$
- jeśli wartości x_i, y_i to wynik próbkowania dowolnej funkcji $f(x) \in C^{n+1}$ w przedziale $[a, b]$, to $f(x) = P(x) + \frac{f^{(N)}(\xi(x))}{(N)!} \prod_{j=1}^N (x - x_j)$, gdzie $\xi \in [a, b]$

pochodne z interpolacji wielomianowej

■ 3 punkty

$$\blacksquare P(x) = f(x_1)l_1(x) + f(x_2)l_2(x) + f(x_3)l_3(x) + \frac{f^3(\xi)}{3!}(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)$$

$$\blacksquare l_1(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}$$

$$\blacksquare l_1'(x) = \frac{2x-x_2-x_3}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}$$

$$\blacksquare l_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$$

$$\blacksquare l_2'(x) = \frac{2x-x_1-x_3}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$$

$$\blacksquare l_3(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

$$\blacksquare l_3'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

■ weźmy równoodległe punkty $x_1 = x_0$, $x_2 = x_0 + h$, $x_3 = x_0 + 2h$

$$\blacksquare f(x) = f(x_1)l_1(x) + f(x_2)l_2(x) + f(x_3)l_3(x) + \frac{f^3(\xi)}{3!}(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)$$

$$\blacksquare l_1'(x) = \frac{2x-2x_0-3h}{2h^2}$$

$$\blacksquare l_2'(x) = \frac{-2x+2x_0+2h}{h^2}$$

$$\blacksquare l_3'(x) = \frac{2x-2x_0-h}{2h^2}$$

■ możemy przybliżyć pochodną w każdym z trzech punktów:

$$\blacksquare f'(x_0 + h) = \frac{1}{2h} (f(x_0 + 2h) - f(x_0)) - \frac{h^2}{6} f^3(\xi_0)$$

$$\blacksquare f'(x_0) = \frac{1}{2h} (-f(x_0 + 2h) + 4f(x_0 + h) - 3f(x_0)) + \frac{h^2}{3} f^3(\xi_1)$$

$$\blacksquare f'(x_0 + 2h) = \frac{1}{2h} (3f(x_0 + 2h) - 4f(x_0 + h) + f(x_0)) + \frac{h^2}{3} f^3(\xi_2)$$

pochodne z interpolacji wielomianowej

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

■ 5 punktów: $x_0 - 2h, x_0 - h, x_0, x_0 + h, x_0 + 2h$

■ $f'(x_0) = \frac{1}{12h} (\mp f(x_0 \pm 2h) \pm f(x_0 \pm h)) + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi)$

■ $f'(x_0 - 2h) =$

$$\frac{1}{12h} (-25f(x_0 - 2h) + 48f(x_0 - h) - 36f(x_0) + 16f(x_0 + h) - 3f(x_0 + 2h)) + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi)$$

■ druga pochodna dla 3 punktów:

■ $l_1''(x) = \frac{2}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}$

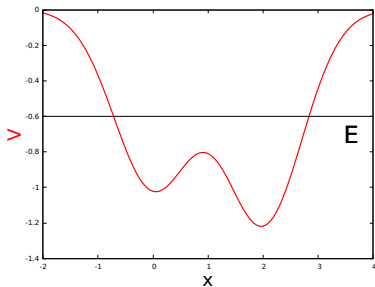
■ $l_2''(x) = \frac{2}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}$

■ $l_3''(x) = \frac{2}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)}$

■ weźmy równoodległe punkty $x_1 = x_0 - h, x_2 = x_0, x_3 = x_0 + h$

■ $f''(x_0) = \frac{1}{h^2} (f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h)) - \frac{h^2}{12} f^{(iv)}(\xi)$

case study: wnętrza 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: $V(x) \leq E$
- równania na punkty zwrotne $V(x) = E$

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomianowa

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

równania dynamiki Newtona

- cząstka o energii $E = -0.6$ [J]. Energia potencjalna $V(x) = -\exp(-x^2) - 1.2 \exp(-(x-2)^2)$ [J]
- zobaczymy: 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

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomiana

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

- 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

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

- równanie różniczkowe: $\frac{dy}{dt} \Big|_t = f(t, y)$
- $\frac{dy}{dt} \Big|_t = \frac{y(t+\Delta t) - y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$
- $\frac{y(t+\Delta t) - y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t) = f(t, y)$
- $y(t + \Delta t) = y(t) + f(t, y)\Delta t + O(\Delta t^2)$
- 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 $\Delta t \rightarrow 0$
- 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

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomiana

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

- równanie różniczkowe: $\frac{dy}{dt}|_t = f(t, y)$

- $y_{n+1} = y_n + f(t_n, y_n)\Delta t$

- równania:

- $\frac{dx}{dt} \equiv v$

- $\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{dV}{dx}$

- $x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t$

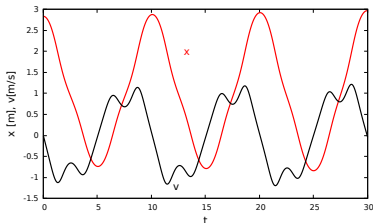
- $v_{n+1} = v_n - \frac{1}{m} \frac{dV}{dx}|_{x_n} \Delta t$

jawny schemat Eulera do równania Newtona

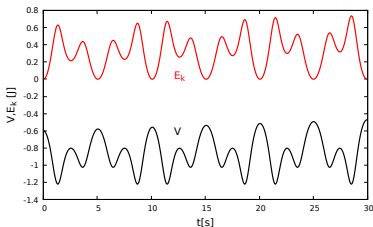
■ $x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t$

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

■ $\Delta t = 0.01$ s



■



■

jawny schemat Eulera do równania Newtona

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

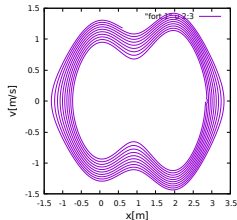
fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

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



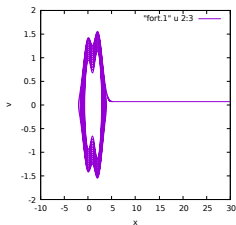
- wykres (x, v) tzw. portret fazowy
- jawny schemat Eulera - nie zachowuje ściśle energii, ona jest generowana w programie. Tempo generacji, lub zaniku energii zależy od schematu różnicowego.

jawny schemat Eulera do równania Newtona

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



-
-
- zobaczymy co dalej się 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

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

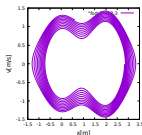
fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

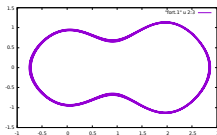
układy równań nieliniowych

schemat trapezów

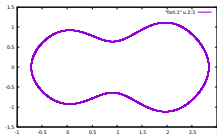
■ $T = 100 \text{ s}, \Delta t = .01$



■ $\Delta t = .001$



■ $\Delta t = .0001$



- dla lepszych schematów występują podobne problemy
- gdy mniejszy 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)

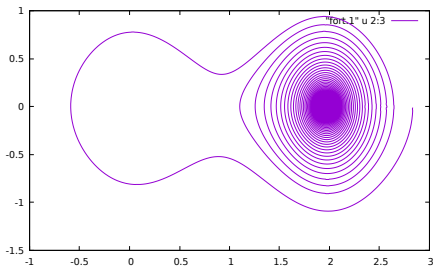
jawny schemat Eulera do równania Newtona

- 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 minimumów potencjału

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

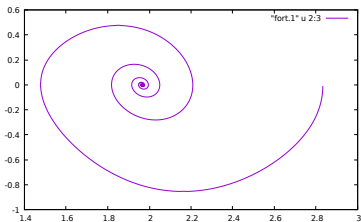
krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

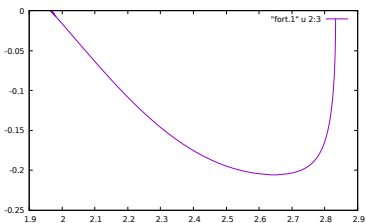
schemat
trapezów

jawny schemat Eulera do równania Newtona

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



■ $\alpha = 5, v(x), \Delta t = 0.01$



różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

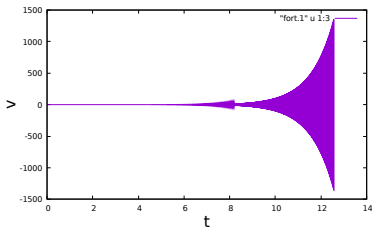
krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

jawny schemat Eulera do równania Newtona

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



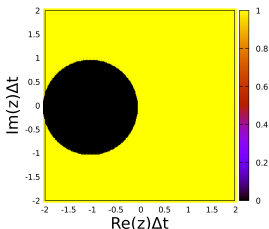
-
- gdy $\alpha \Delta t > 2$ rachunek eksploduje
- ciało wykonuje skoki o rosnącej z czasem amplitudzie
- prędkość zmienia znak i rośnie z kroku na krok
- problem: bezwzględnej niestabilności jawnego schematu Eulera

bezwzględna stabilność schematu Eulera

- DF: schemat dla danego równania i dla danego Δt jest **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 $|1 - \Delta t \alpha| \leq 1$, albo
- warunek bezwzględnej stabilności $-1 \leq \Delta t \alpha - 1 \leq 1$
- dla $\alpha > 0$ schemat bezwzględnie stabilny jeśli $\Delta t \alpha \leq 2$, czyli $\Delta t \leq \frac{2}{\alpha}$

region bezwzględnej stabilności jawnego schematu Eulera

- problem modelowy:
- $\frac{dy}{dt} = zV$, 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 $C \exp(z t)$ gaśnie, a numeryczne eksploduje

niejawny schemat Eulera

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

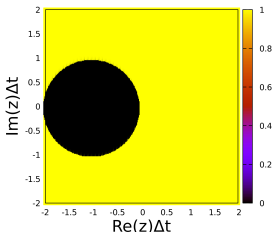
- jawny:

- $\frac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t} = zv_n$

- $v_{n+1} = v_n + \Delta tzv_n$

- $v_{n+1} = v_n(1 + \Delta tz)$

- bezwzględna stabilność: $|1 + \Delta tz| < 1$.



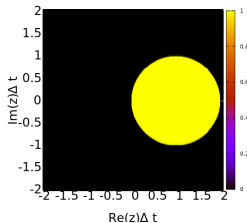
- niejawny:

- $\frac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t} = zv_{n+1}$

- $v_{n+1} = v_n + \Delta tzv_{n+1}$

- $v_{n+1} = \frac{v_n}{1 - \Delta tz}$

- bezwzględna stabilność: $|1 - \Delta tz| > 1$.



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

niejawny schemat Eulera

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v)$

- 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

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomianowa

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v)$
- $v_{n+1} = v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1})\Delta t$
- 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 $|v_{n+1}^{\mu+1} - v_{n+1}^{\mu}| < \epsilon \longrightarrow v_{n+1} = v_{n+1}^{\mu+1}$

iteracja czasowa w niejawnym Eulerze

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomiana

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

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

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

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomianowa

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

- $\frac{dv}{dt} = -\alpha v$

- $\Delta t = 0.01, \alpha = 200$

- $v_{n+1}^{\mu+1} = v_n - \alpha v_{n+1}^{\mu}$

- $v_1 = 1$

- $v_2^1 = 1$

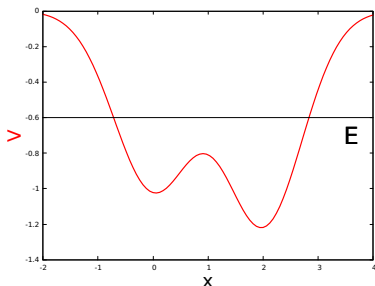
- $v_2^{\mu+1} = 1 - \alpha v_{n+1}^{\mu}$

■

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 niejawnym 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: $V(x) \leq E$
- równania na punkty zwrotne $V(x) = E$
- równanie - zazwyczaj nieliniowe - do rozwiązania $f(x) \equiv V(x) - E = 0$

równania nieliniowe: metoda bisekcji

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomianowa

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

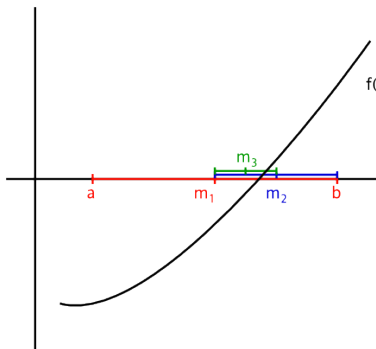
metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów



■ 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

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

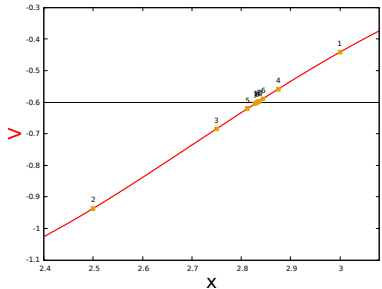
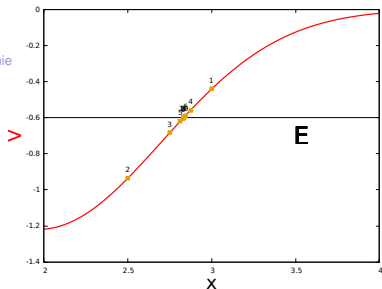
metoda Newtona

fraktal N.

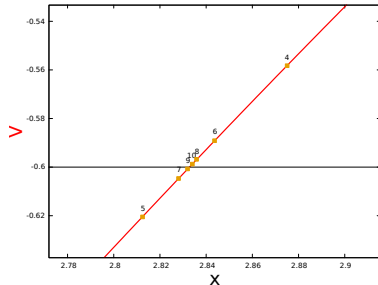
krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

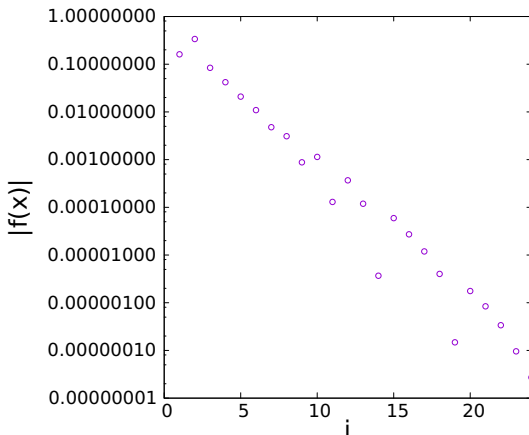


■ $f(x) \equiv V(x) - E = 0$, na rysunkach $V(x)$



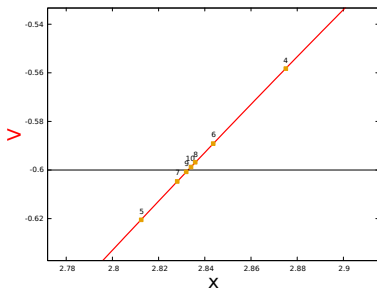
- metoda bisekcji: reaguje tylko na znak funkcji, ignoruje wartość oraz kształt krzywej
- dokładność wyznaczenia zera ściśle określona przez liczbę wywołań funkcji

metoda bisekcji



-
- 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)

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

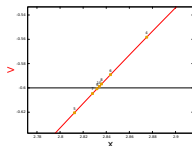
metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów



- rozwinięcie w szereg Taylora

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x)|_{x_0} + (x - x_0)^2 f''(x)|_{x_0} + \dots$$

- szukamy $f(x) = 0$, x_0 to okolice zera $f(x)$, jeśli jesteśmy blisko $(x - x_0)^2$ - zaniedbywalne w porównaniu z wyrazem liniowym $(x - x_0)$

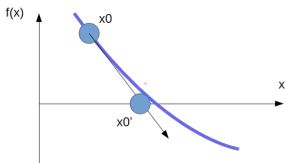
- rozwinięcie w szereg Taylora $0 = f(x) \simeq f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$

- liczymy $0 = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) \rightarrow x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

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

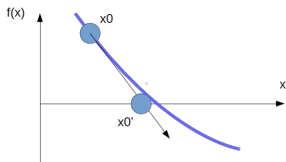
- w porównaniu do metody bisekcji wykorzystuje nie tylko znak funkcji, lecz jej (1) wartość oraz (2) pochodną (wysokość nad osią i nachylenie wykresu)

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 $x_{n+1} := x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomianowa

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

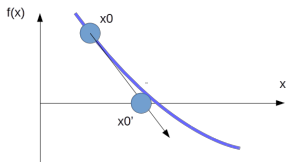
fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

metoda Newtona-Raphsona



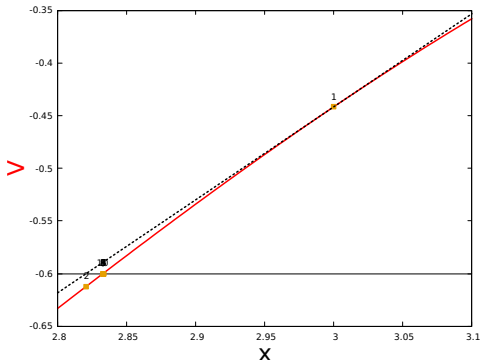
-
- $V(x) - E = 0, E = -0.6$
- $f(x) = -e^{-x^2} - 1.2 e^{-(x-2)^2} + 0.6$
- $f'(x) = 2 x e^{-x^2} - 1.2 (-2 x + 4) e^{-(x-2)^2}$
- procedura iteracyjnej poprawy oszacowania zera $x_{n+1} := x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

metoda Newtona-Raphsona wyniki

- $f(x) = V(x) - E$

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

- $f'(x) = 2xe^{-x^2} - 1.2(-2x+4)e^{-(x-2)^2}$



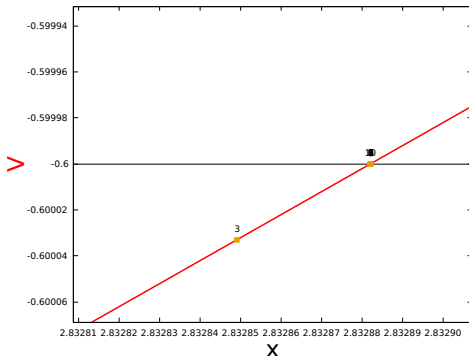
■

metoda Newtona-Raphsona wyniki

- $f(x) = V(x) - E$

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

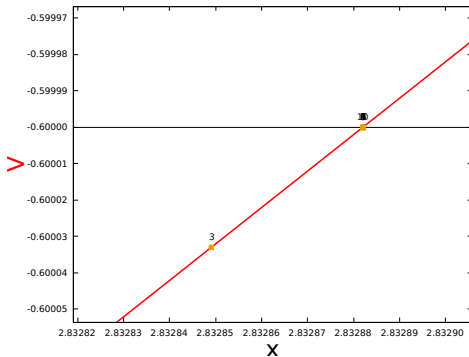
- $f'(x) = 2 x e^{-x^2} - 1.2 (-2 x + 4) e^{-(x-2)^2}$



■

metoda Newtona-Raphsona wyniki

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



■

metoda Newtona-Raphsona a bisekcji - porównanie tempa zbieżności

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

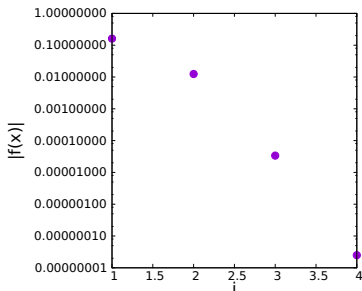
metoda Newtona

fraktal N.

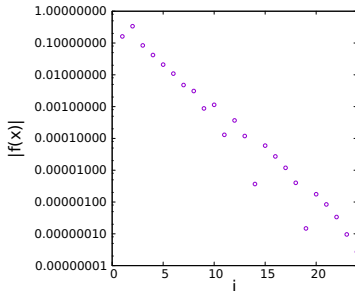
krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów



■ metoda Newtona

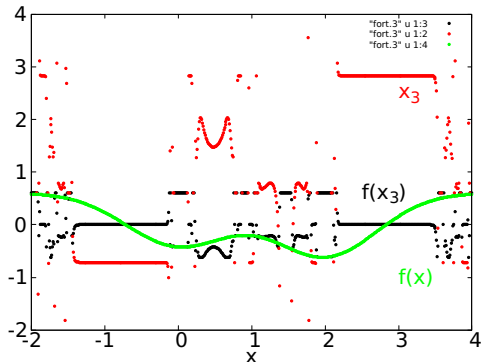


■ metoda bisekcji

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

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

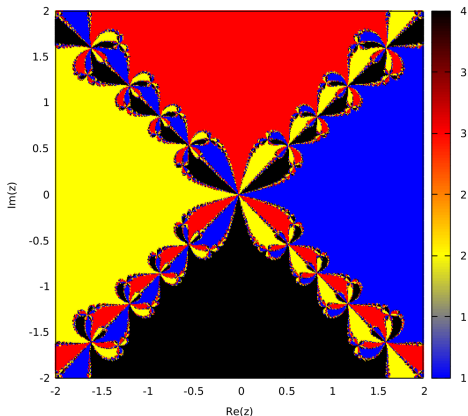
układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

- $x_{n+1} = W(x_n, x_{n-1}, \dots)$
- 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

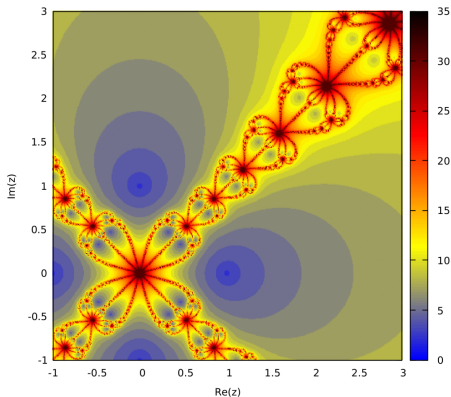


- kolory - numer punktu stałego, do którego zbiega iteracja startowana z punktu z (fraktal - obiekt o ułamkowym wymiarze – granica między obszarami przyciągania)
- film fractz4m1.gif

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 [fractal_newtona_izba_iteracji.gif](#)

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

metoda Newtona-Raphsona

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

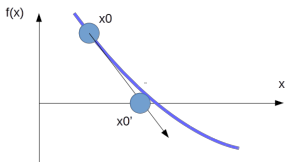
krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

- 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.

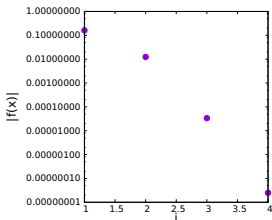
- punkt zbieżności iteracji nie może ulec zmianie

- pochodna $f'(x) \simeq \frac{f(x+dx) - f(x-dx)}{2dx}$

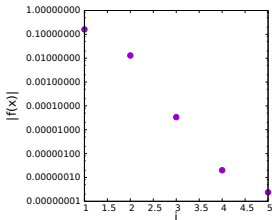
metoda Newtona-Raphsona

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

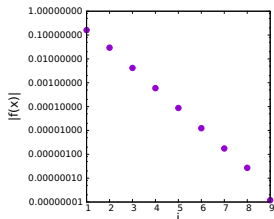
- dokładna pochodna



- $dx = 0.1$



- $dx = 0.5$



różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

metoda Newtona dla wykonania kroku w niejawnym schemacie Eulera

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v)$
- $v_{n+1} = v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1})\Delta t$
- $F(v_{n+1}) \equiv v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1})\Delta t - v_{n+1}$
- $F(v_{n+1}) = 0$

$$\blacksquare \quad v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{F(v_{n+1}^{\mu})}{F'(v_{n+1}^{\mu})}$$

- Metoda Newtona dla niejawnego Eulera:

$$\blacksquare \quad v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - v_{n+1}^{\mu}}{f'_v(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - 1}$$

metoda Newtona dla wykonania kroku w niejawnym schemacie Eulera

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v) = -\alpha v$
- $v_1 = 1, \alpha = 200, dt = 0.01$

$$v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - v_{n+1}^{\mu}}{f'_v(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - 1}$$

- 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

- $\frac{dv}{dt} = f(t, v) = -\alpha v$

- $v_1 = 1, \alpha = 2000, dt = 0.01$

- $$v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - v_{n+1}^{\mu}}{f'_v(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - 1}$$

- 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

- $\frac{dv}{dt} = -\alpha v^2$

- $v_1 = 1, \alpha = 2000, dt = 0.01$

- $$v_{n+1}^{\mu+1} = v_{n+1}^{\mu} - \frac{v_n + f(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - v_{n+1}^{\mu}}{f'_v(t_{n+1}, v_{n+1}^{\mu})\Delta t - 1}$$

- 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

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomiana

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

niejawny Euler dla układu równań

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

■ układ równań różniczkowych

■ $\frac{dx}{dt} = v$

■ $\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{dV}{dx}$

■ przepis metody

■ $x_{n+1} = x_n + \Delta t v_{n+1}$

■ $v_{n+1} = v_n + \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx} \Big|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$

■ układ równań nieliniowych:

■ $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \Delta t v_{n+1}$

■ $F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) = v_{n+1} - v_n - \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx} \Big|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$

■ jak rozwiązać ?

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

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

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

- $\Delta x \frac{\partial f_1}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} + \Delta y \frac{\partial f_1}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} = -f_1(x_0, y_0)$

- $\Delta x \frac{\partial f_2}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} + \Delta y \frac{\partial f_2}{\partial y} \Big|_{x_0, y_0} = -f_2(x_0, y_0)$

- wersja macierzowa

- $$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix} \Big|_{x_0, y_0} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix} \quad (1)$$

- 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

- $$\frac{df}{dx} \Big|_{x_0} \Delta x = -f(x_0) \quad (2)$$

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

- przykład, szukamy minimum przez zera pochodnych cząstkowych

- $W(x, y) = [(x - 2)^2 + 5(y - 2)^2]^m$

- $f_1(x, y) = \frac{\partial W}{\partial x}, f_2(x, y) = \frac{\partial W}{\partial y}$

- $x_0 = -1, y_0 = 5$

-

$$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{array} \right) \Big|_{x_0, y_0} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix} \quad (3)$$

- $x_0 := x_0 + \Delta x$

- $y_0 := y_0 + \Delta y$

- $A(1,1) = (f_1(x_0+dx, y_0) - f_1(x_0-dx, y_0)) / 2/dx$

- $A(1,2) = (f_1(x_0, y_0+dx) - f_1(x_0, y_0-dx)) / 2/dx$

- $A(2,1) = (f_2(x_0+dx, y_0) - f_2(x_0-dx, y_0)) / 2/dx$

- $A(2,2) = (f_2(x_0, y_0+dx) - f_2(x_0, y_0-dx)) / 2/dx$

- $b(1,1) = -f_1(x_0, y_0)$

- $b(2,1) = -f_2(x_0, y_0)$

- `CALL DGESV(2,1,A,2,IPIV,B,2,INFO)`

- $x_0 = x_0 + b(1,1)$

- $y_0 = y_0 + b(2,1)$

- 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)`

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

- przykład, szukamy minimum przez zera pochodnych cząstkowych

- $W(x, y) = [(x - 2)^2 + 5(y - 2)^2]^m$

-

$$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{array} \right) \Big|_{x_0, y_0} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix} \quad (4)$$

- $m = 1$

- $x_0 = -1, y_0 = 5$

- 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 znajduwane jest w jednej iteracji

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

- przykład, szukamy minimum przez zera pochodnych cząstkowych

- $W(x, y) = [(x - 2)^2 + 5(y - 2)^2]^m$

-

$$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{array} \right) \Big|_{x_0, y_0} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix} \quad (5)$$

- $m = 1.1$

- $x_0 = -1, y_0 = 5$

- 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

- $W(x, y) = [(x - 2)^2 + 5(y - 2)^2]^m$

-

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix} \Big|_{x_0, y_0} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix} \quad (6)$$

- $m = 1.1$

- $x_0 = -1, y_0 = 5$

- kolejne iteracje

- 1.499999356312 2.500000155948 1

- 1.916666542404 2.083333374075 2

- 1.986111087431 2.013888887976 3

- 1.997685179557 2.002314752344 4

- 1.999614189268 2.000385415209 5

- 1.999935673622 2.000061922966 6

- 1.999993872899 2.000005019027 7

- 1.999999731925 2.000000215575 8

- 1.999999988634 2.000000009139 9

- 1.999999999518 2.000000000387 10

- 1.999999999980 2.000000000016 11

- 1.999999999999 2.000000000001 12

- 2.000000000000 2.000000000000 13

układy równań nieliniowych: metoda Newtona

- przykład, szukamy minimum przez zera pochodnych cząstkowych

- $W(x, y) = [(x - 2)^2 + 5(y - 2)^2]^m$

-

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix} \Big|_{x_0, y_0} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix} \quad (7)$$

- $m = 2$

- $x_0 = -1, y_0 = 5$

- 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 2.0000704449518 17
- 1.999843222727 2.000001112630 18
- 1.999999907312 2.000000000221 19

niejawny Euler dla problemu oscylatora anharmonicznego

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

- $x_{n+1} = x_n + \Delta t v_{n+1}$
- $v_{n+1} = v_n + \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx} |_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$

■ układ równań nieliniowych:

- $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \Delta t v_{n+1}$

- $F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) = v_{n+1} - v_n - \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx} |_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$

■

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_1}{\partial v_{n+1}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_2}{\partial v_{n+1}} \end{pmatrix} \Big|_{x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu} \begin{pmatrix} x_{n+1}^{\mu+1} - x_{n+1}^\mu \\ v_{n+1}^{\mu+1} - v_{n+1}^\mu \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} F_1(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \\ F_2(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \end{pmatrix} \quad (8)$$

niejawny Euler dla problemu oscylatora anharmonicznego

- $x_{n+1} = x_n + \Delta t v_{n+1}$

- $v_{n+1} = v_n + \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx} \Big|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$

- układ równań nieliniowych:

- $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \Delta t v_{n+1}$

- $F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) = v_{n+1} - v_n - \Delta t \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx} \Big|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} \right)$

-

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_1}{\partial v_{n+1}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_2}{\partial v_{n+1}} \end{pmatrix} \Big|_{x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu} \begin{pmatrix} x_{n+1}^{\mu+1} - x_{n+1}^\mu \\ v_{n+1}^{\mu+1} - v_{n+1}^\mu \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} F_1(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \\ F_2(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -\Delta t \\ \frac{\Delta t}{m} \frac{d^2 V}{dx^2} \Big|_{x_{n+1}^\mu} & 1 + \Delta t \alpha \end{pmatrix} \Big|_{x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu} \begin{pmatrix} x_{n+1}^{\mu+1} - x_{n+1}^\mu \\ v_{n+1}^{\mu+1} - v_{n+1}^\mu \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} F_1(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \\ F_2(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \end{pmatrix} \quad (10)$$

różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

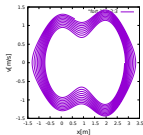
układy równań nieliniowych

schemat trapezów

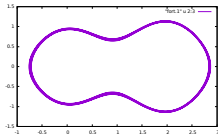
jawny schemat Eulera do równania Newtona

■ jawny ($\alpha = 0$)

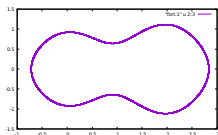
■ $T = 100$ s, $\Delta t = .01$



■ $\Delta t = .001$

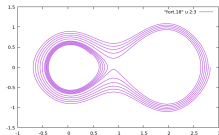


$\Delta t = .0001$

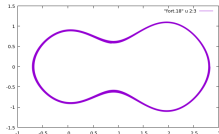


■ niejawny ($\alpha = 0$) - numeryczna dysypacja

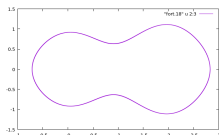
■ $T = 100$ s, $\Delta t = .01$



■ $\Delta t = .001$



$\Delta t = .0001$



różniczkowanie numeryczne

interpolacja wielomianowa

dynamika punktu materialnego

schematy Eulera

równania nieliniowe

metoda bisekcji

metoda Newtona

fraktal N.

krok w schemacie niejawnym

układy równań nieliniowych

schemat trapezów

niejawny Euler iteracja pierwszego kroku

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomianowa

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

- $\alpha = 0$
- $dt=0.01$
- 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

różniczkowanie
numerycz-
neinterpolacja
wielomia-
nowadynamika
punktu
material-
negoschematy
Eulerarównania
nieliniowemetoda
bisekcjimetoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnymukłady
równań
nielinio-
wychschemat
trapezów

```

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

różniczkowanie
numeryczne

interpolacja
wielomianowa

dynamika
punktu
materialnego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newтона

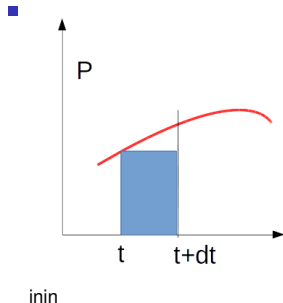
fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nieliniowych

schemat
trapezów

- 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
- $\frac{f(t+dt) - f(x, t)}{dt} = P(t + dt, f)$ - niejawnym 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 $O(dt^2)$:
- $f(x, t + dt) = f(x, t) + P(t)dt + O(dt^2)$



Wzór trapezów

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

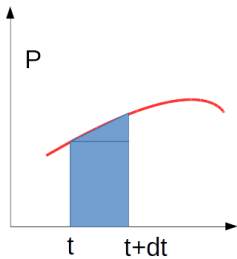
fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
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

- $x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{2} (v_{n+1} + v_n)$

- $v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{2} \left(-\frac{1}{m} \frac{dV}{dx} |_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} - \frac{1}{m} \frac{dV}{dx} |_{x_n} - \alpha v_n \right)$

- układ równań nieliniowych:

- $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \frac{\Delta t}{2} v_{n+1} - \frac{\Delta t}{2} v_n$

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

-

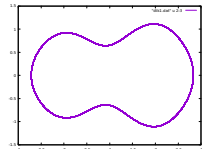
$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_1}{\partial v_{n+1}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_2}{\partial v_{n+1}} \end{pmatrix} \Big|_{x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu} \begin{pmatrix} x_{n+1}^{\mu+1} - x_{n+1}^\mu \\ v_{n+1}^{\mu+1} - v_{n+1}^\mu \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} F_1(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \\ F_2(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta t}{2} \\ \frac{\Delta t}{2m} \frac{d^2V}{dx^2} \Big|_{x_{n+1}^\mu} & 1 + \frac{\Delta t}{2} \alpha \end{pmatrix} \Big|_{x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu} \begin{pmatrix} x_{n+1}^{\mu+1} - x_{n+1}^\mu \\ v_{n+1}^{\mu+1} - v_{n+1}^\mu \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} F_1(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \\ F_2(x_{n+1}^\mu, v_{n+1}^\mu) \end{pmatrix} \quad (12)$$

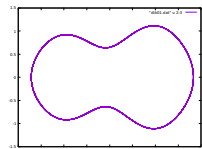
schemat trapezów

■ wzór trapezów ($\alpha = 0$)

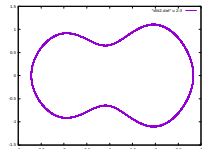
■ $T = 100$ s, $\Delta t = .01$



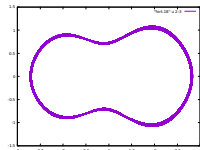
■ $\Delta t = .1$



■ $\Delta t = .2$



■ $T = 100$ s, $\Delta t = .5$



różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

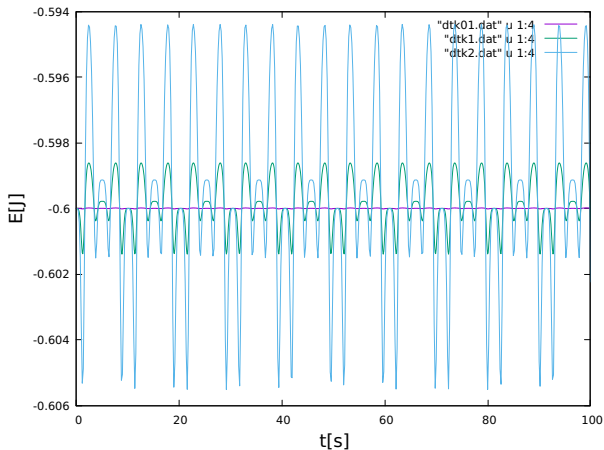
krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów

schemat trapezów i Eulera

- wzór trapezów ($dt=0.2, 0.1, .01$)



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

Źródło 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
```

różniczkowanie
numerycz-
ne

interpolacja
wielomia-
nowa

dynamika
punktu
material-
nego

schematy
Eulera

równania
nieliniowe

metoda
bisekcji

metoda
Newtona

fraktal N.

krok w
schemacie
niejawnym

układy
równań
nielinio-
wych

schemat
trapezów