Obliczenia Naukowe
Dla studentów Bioinformatyki i Biologii Systemów

Wykład 11: Różniczkowanie i całkowanie numeryczne

Bartek Wilczyński

23. maja 2022

Plan na dziś

- Pochodna, przypomnienie definicji, związek z metodą różnicową Newtona
- Numeryczne obliczanie pochodnej, dokładność
- Opis funkcji poprzez jej zmienność, równania różniczkowe
- Interpretacja geometryczna, kwadratury
- Przykład układu równań różniczkowych wraz z rozwiązaniem numerycznym

Pochodna funkcji

- Pochodna funkcji, to granica ciągu różnic dzielonych

$$\lim_{x\to a}\left(f(x)-f(a)\right)=\lim_{x\to a}\left[\frac{f(x)-f(a)}{x-a}(x-a)\right]$$
$$=\lim_{x\to a}\frac{f(x)-f(a)}{x-a}\;\lim_{x\to a}(x-a)$$

- Dla wielu funkcji znamy wzór pochodnej (np. dla wielomianów), ale niektóre funkcje są nieróżniczkowalne (granica nie istnieje), a w zastosowaniach często nie mamy dostępu do wzoru funkcji, a jedynie możemy wyliczać jej wartość

Numeryczne obliczanie pochodnej

- Wzór różnic dzielonych możemy często stosować bez zmian

$$\lim_{x\to a}\left(f(x)-f(a)\right)=\lim_{x\to a}\left[\frac{f(x)-f(a)}{x-a}(x-a)\right]$$
$$=\lim_{x\to a}\frac{f(x)-f(a)}{x-a}\ \lim_{x\to a}(x-a)$$

- Niemniej, trzeba zdawać sobie sprawę, że dla (x-a)<sqrt(eps), gdzie eps, to epsilon maszynowy, nie możemy liczyć na dobrą dokładność numeryczną wyniku
- Oczywiście, im większa druga pochodna tym gorsze przybliżenie
- Błąd możemy oszacować licząc różnicę między pochodnymi z lewej i prawej strony

Opis funkcji przez jej zmienność

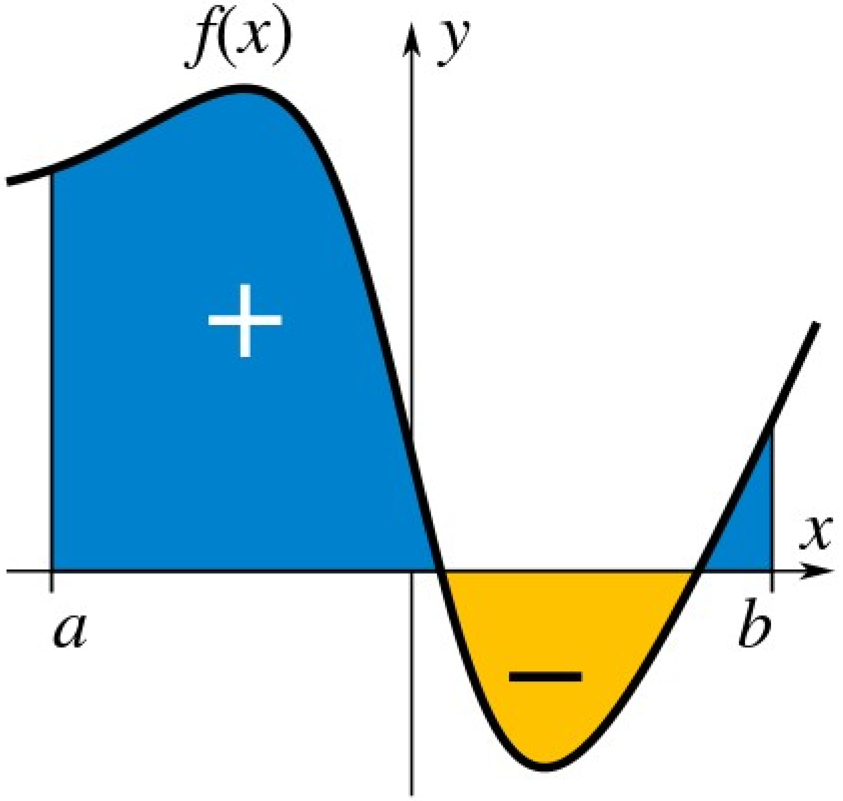
- Często w praktyce mamy problem odwrotny: znamy pochodną, a chcemy obliczać wartość funkcji
- Np. wiemy z jaką prędkością porusza się jakaś sonda kosmiczna w zależnośći od czasu, a chcemy obliczyć gdzie się znajduje w danym momencie.
- Jeszcze trudniejszy jest problem sterowania, gdy chcemy znaleźć optymalne sterowanie silników, aby statek kosmiczny znalazł się tam gdzie ma być w odpowiednim momencie
- Np. niedawno obserwowaliśmy lądowanie SpaceX http://www.theverge.com/2016/4/8/11392138/spacex-landing-success-falcon-9-rocket-barge-at-sea

Równanie różniczkowe

- Możemy zapisać tego typu równanie różniczkowe:
  - $dX/dt = V(t)$
- Często mamy do czynienia z układami takich równań:
  - $dX/dt = V(t)$
  - $dV/dt = a(t)$
- Ogólnie równanie różniczkowe zwyczajne opisuje zależność pochodnej (lewa strona) z funkcją od czasu i pozostałych zmiennych układu (prawa strona)

Interpretacja geometryczna całki

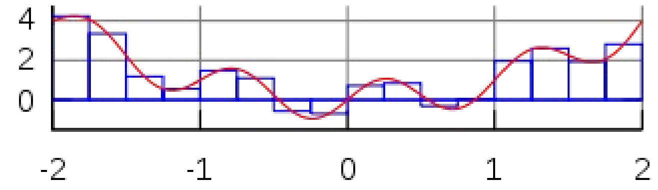
- Rozwiązaniem takiego równania jest całka funkcji
- Całka funkcji ma też interpretację geometryczną – jest to pole powierzchni pod krzywą f(x)



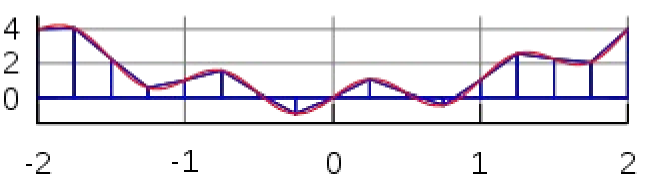
Kwadratury

- Numerycznie możemy rozwiązywać takie problemy przy pomocy kwadratur
- Obliczamy wartości funkcji w punktach i przybliżamy wykres prostszymi krzywymi
- Numeryczna dokładność rozwiązania jest taka sama jak w przypadku interpolacji

- Kwadratura prostokątna



- Kwadratura trapezoidalna



Model Lotki-Volterry

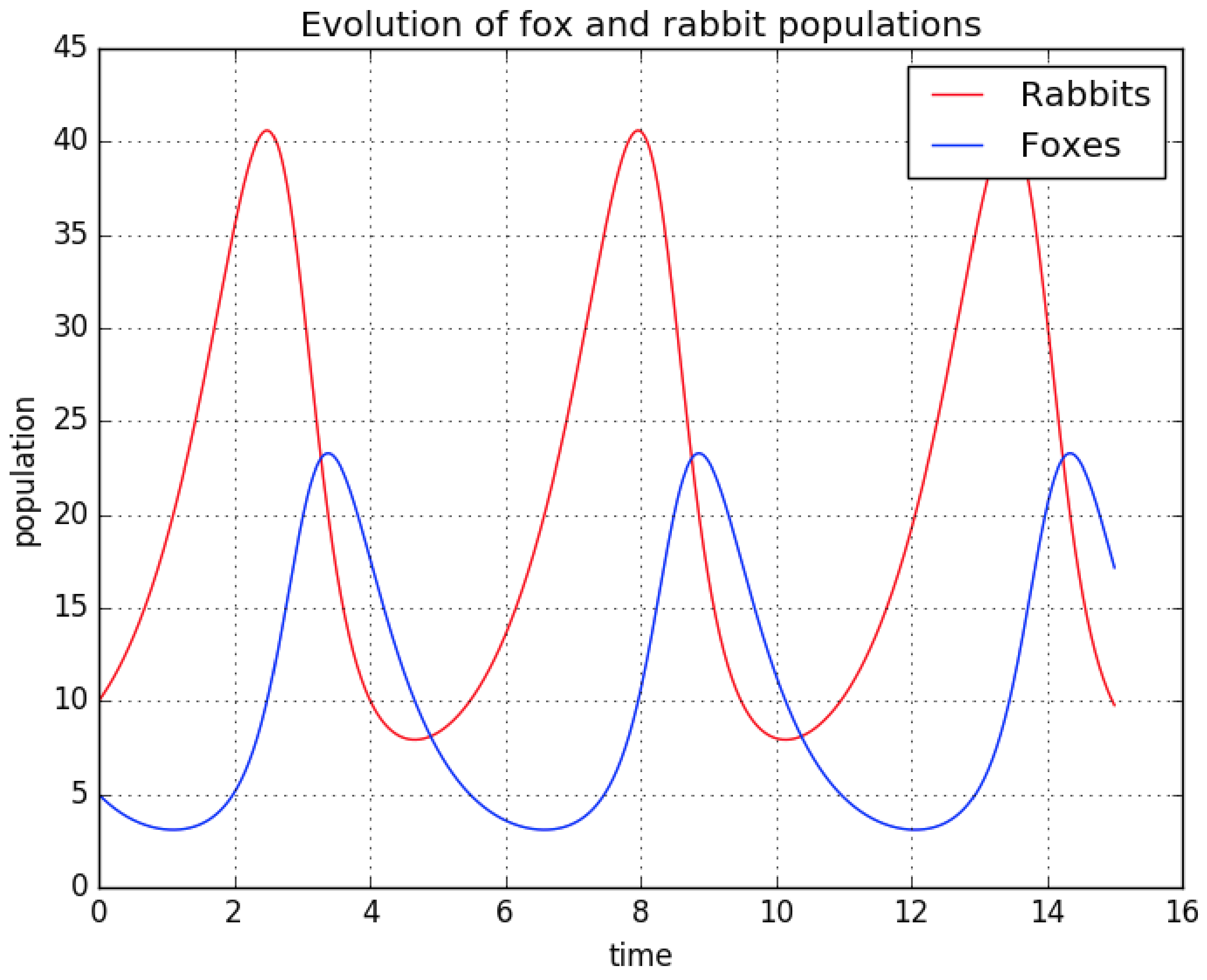
- Mamy roślinożerców (x) I drapieżniki (y), które zmieniają liczebności populacji w następujący sposób:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x - \beta xy$$

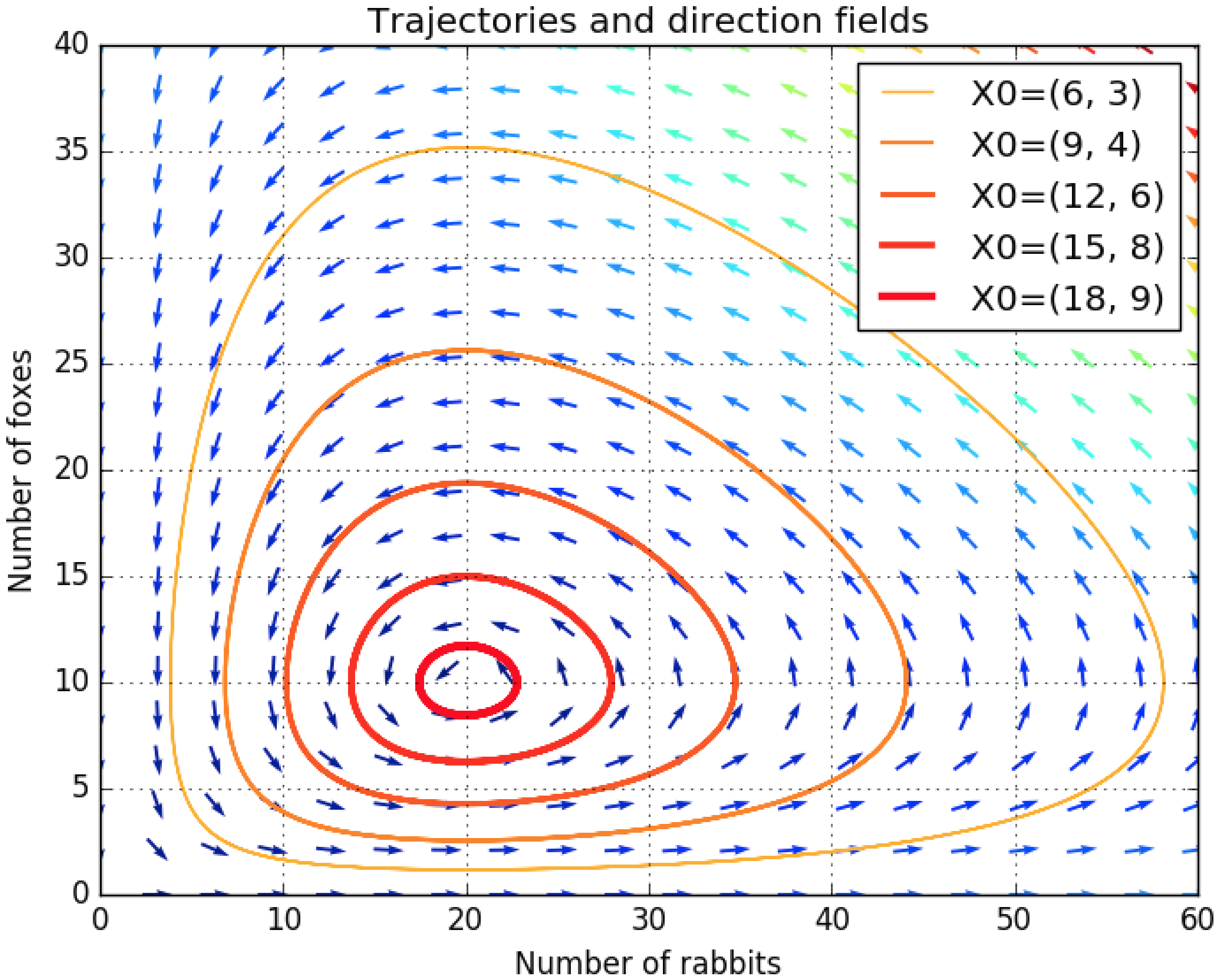
$$\frac{dy}{dt} = \delta xy - \gamma y$$

- Współczynniki opisują odpowiednio przyrost roślinożerców, ubytek roślinożerców zjadanych przez drapieżniki, przyrost drapieżników warunkowany obecnością roślinożerców, naturalną śmiertelność drapieżników

Ewolucja populacji w modelu L-V



Pole wektorowe rozwiązania



Isocline function contours