

Obliczenia Naukowe

Dla studentów Bioinformatyki i Biologii Systemów

Wykład 11: Różniczkowanie i
całkowanie numeryczne

Bartek Wilczyński

13. maja 2019

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

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow a} (f(x) - f(a)) &= \lim_{x \rightarrow a} \left[\frac{f(x) - f(a)}{x - a} (x - a) \right] \\ &= \lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a} \lim_{x \rightarrow a} (x - a)\end{aligned}$$

- 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

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow a} (f(x) - f(a)) &= \lim_{x \rightarrow a} \left[\frac{f(x) - f(a)}{x - a} (x - a) \right] \\ &= \lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a} \lim_{x \rightarrow a} (x - a)\end{aligned}$$

- Niemniej trzeba zdawać sobie sprawę, że dla $(x-a) < \sqrt{\text{eps}}$, gdzie eps, to epsilon maszynowy, nie możemy liczyć na dokładność 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

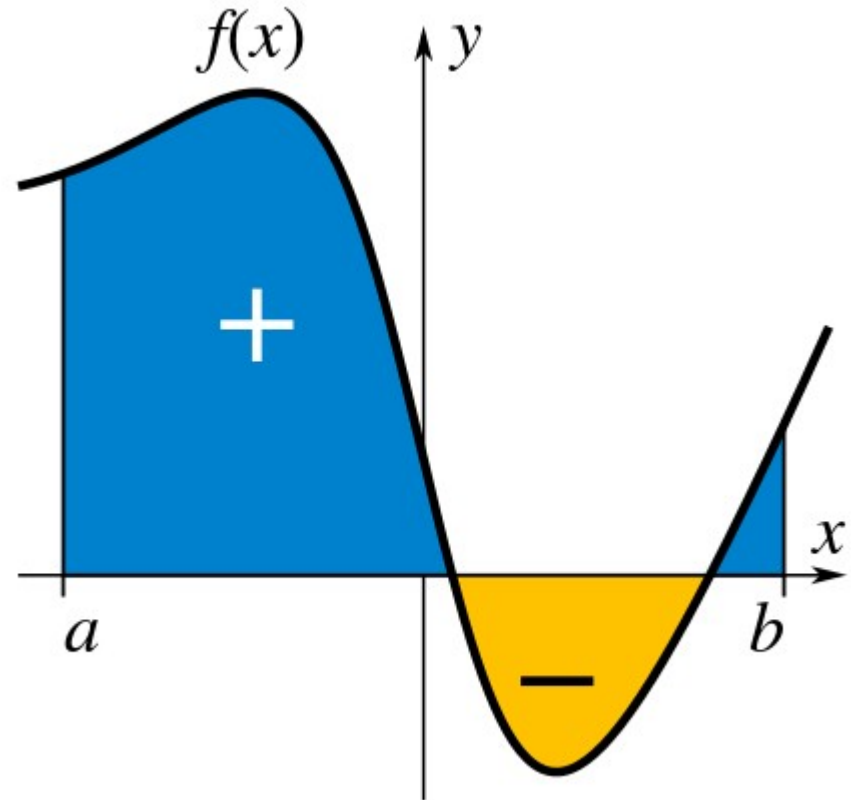
- Często w praktyce mamy problem odwrotny, znamy pochodną, a chcemy obliczać wartość funkcji
- Np. wiemy z jaką prędkością porusza się jakaś sonda kosmiczna w zależności od czasu, a chcemy obliczyć gdzie się znajduje w danym momencie.
- Jeszcze trudniejszy jest problem sterowania, gdy chcemy znaleźć 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

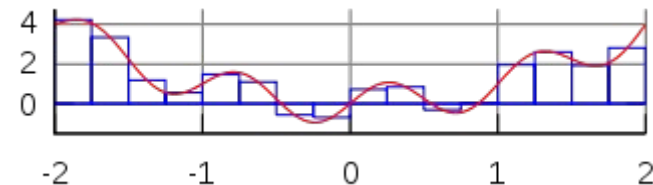
- Rozwiązaniem takiego równania jest całka funkcji
- Całka oznaczona funkcji ma też interpretację geometryczną – jest to pole powierzchni pod krzywą $f(x)$



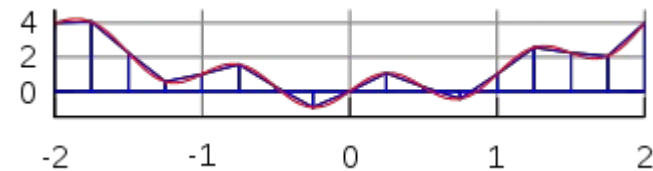
Kwadratury

- 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-Volterra

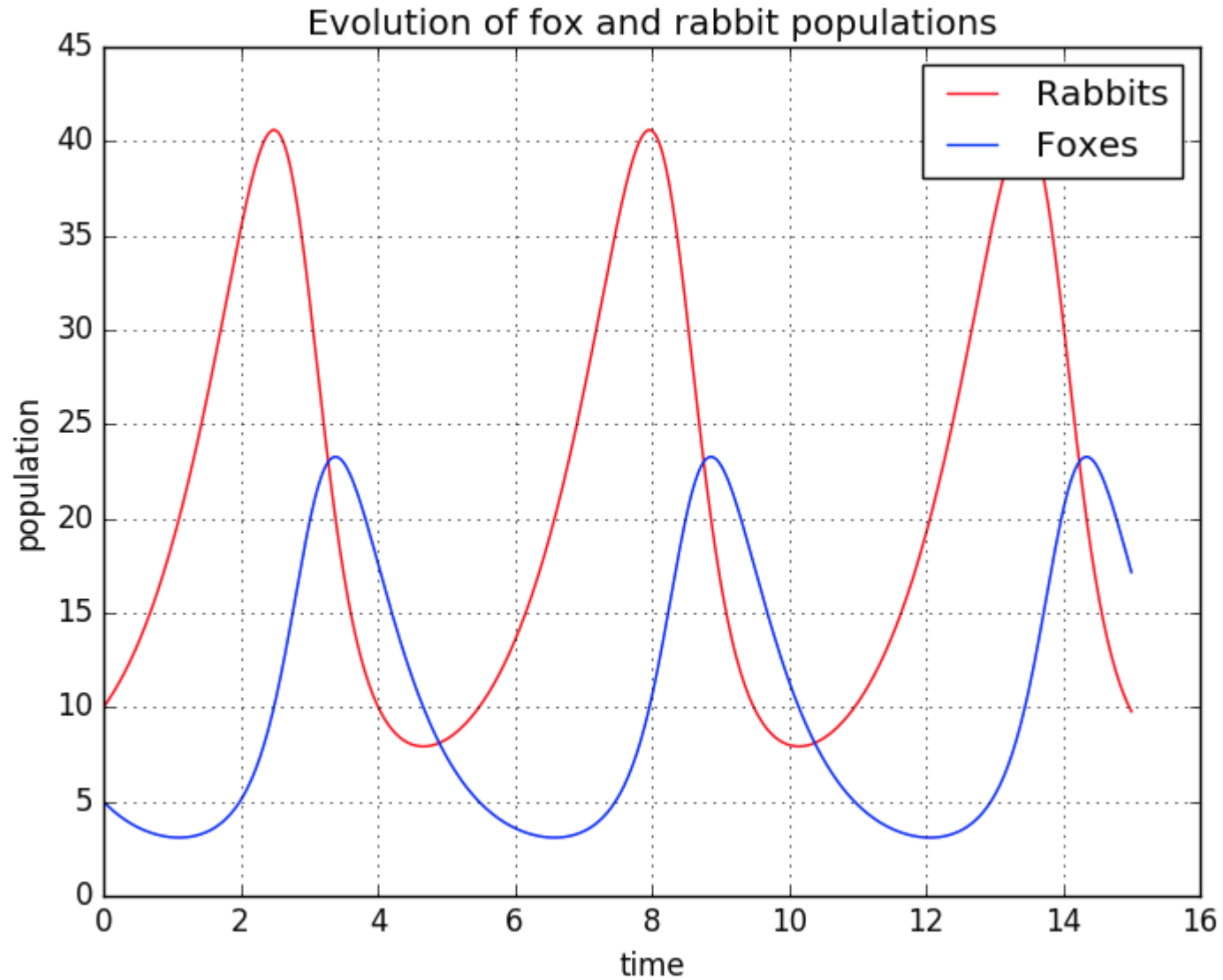
- Mamy roślinożerców (x) i drapieżniki (y), które zmieniają liczebności populacji w następujący sposób:

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

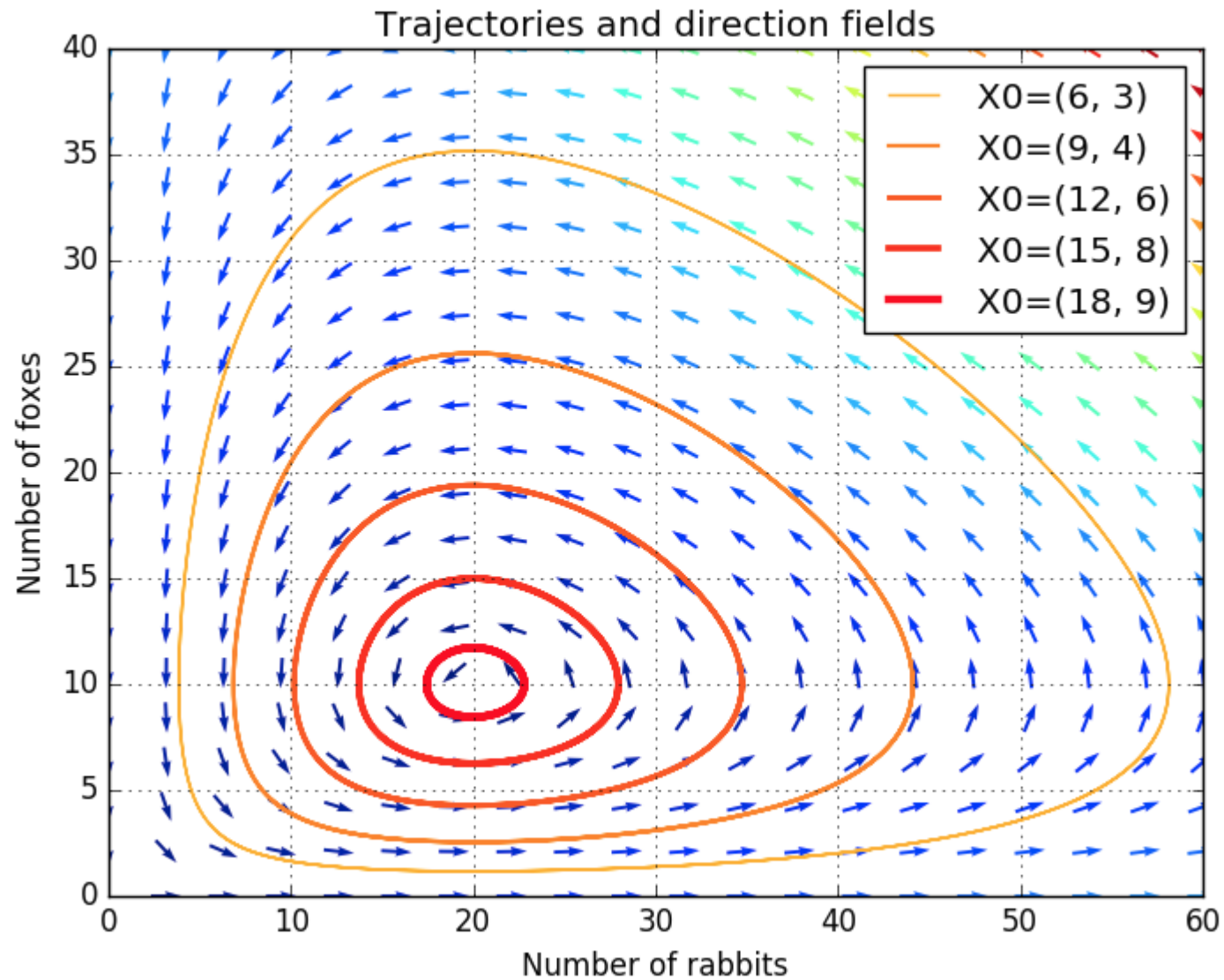
$$\frac{dy}{dt} = \delta xy - \gamma y$$

- 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

