Curs 10

Derivarea Numerică

Calculul aproximativ al Derivatelor cu Aplicații în Ingineria Electrică

Ș.l. Dr. ing. Levente CZUMBIL

Laboratorul de Cercetare în Metode Numerice

Departamentul de Electrotehnică, Inginerie Electrică

E-mail: Levente.Czumbil@ethm.utcluj.ro Site: http://users.utcluj.ro/~czumbil

UNIVERSITATEA TEHNICĂ DIN CLUJ-NAPOCA

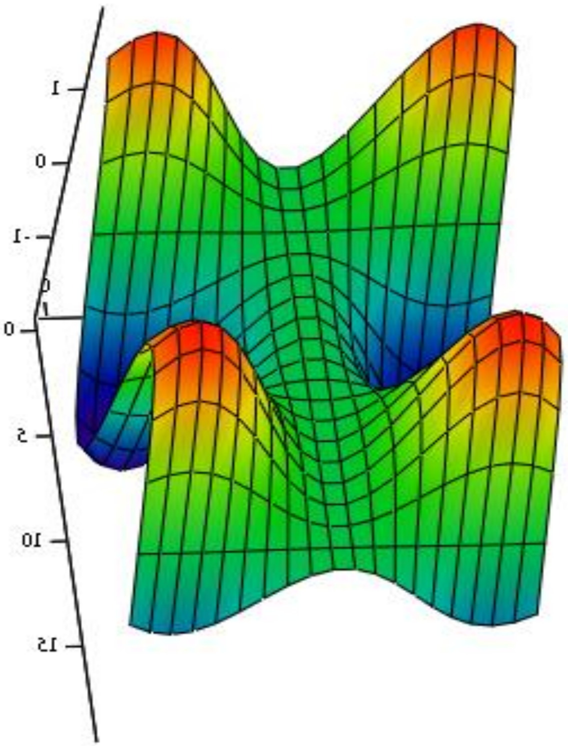
- În domeniul ingineriei electrice există situaţii practice când este necesară **evaluarea numerică** a valorilor **derivatelor** unor funcţii pentru care **derivarea analitică este complicată** sau chiar **imposibilă**

- Trebuie ţinut cont că în aplicațiile practice de obicei nu se cunoaşte expresia analitică a funcţiei care trebuie derivată, ci doar valorile ei în anumite puncte (**determinate experimental** sau prin calcule).

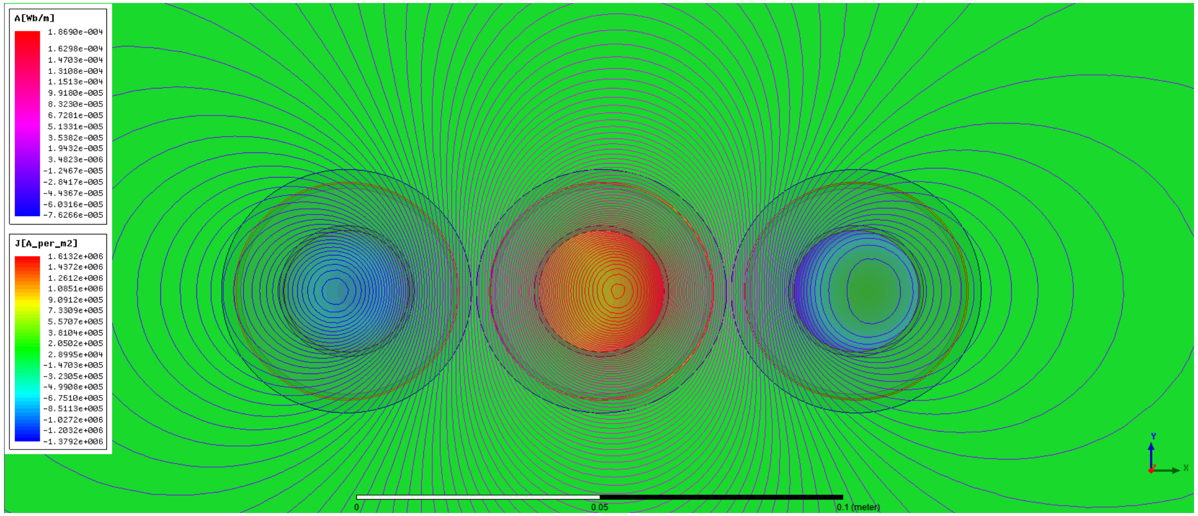
- Se doreşte **determinarea aproximativă a derivatei** în punctele unde se cunoaşte valoarea funcţiei, cât şi în alte puncte.

Aplicaţii

- ➢ Determinarea distribuţiei de sarcină electrică



- ➢ Calculul intensităţii câmpurilor electromagnetice



I. Derivarea Numerică bazată pe Polinoame de Interpolare

- Pentru simplitate vom considera doar derivata de ordinul I. Se pot aplica tehnici analoage şi pentru derivatele de ordin superior.

- Vom rezolvă problema prin interpolare: funcția dată tabelar o determinăm prin interpolare şi vom deriva polinomul de interpolare obținut!!!

- De regulă se aproximează derivatele în punctele x_0, $x_1,\ldots,x_n$ (noduri) în care valoarea funcţiei este cunoscută, dar se pot utiliza şi pentru alte puncte din intervalul *[a,b]*!!!

x	x_0	x_1	x_2	$\ldots$	x_n
$f(x)$	y_0	y_1	y_2	$\ldots$	y_n

Derivarea Polinoamului de Interpolare Lagrange

- Interpolarea lui *f(x)* s-a făcut prin polinomul de interpolare Lagrange (funcţia este cunoscută experimental în nodurile x_0 şi x_1):

Demonstratia 1 – **pe tablă**

- Derivata funcției:

$$f'(x) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} \qquad f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi)$$

- Pentru valori mici a lui *h* formula pentru calculul aproximativ al derivatei *f'(x)* poate fi utilizată cu o eroare:

$$Er \le \frac{|h|}{2}M, \quad |f''(x)| \le M \qquad x \in [a,b]$$

Această formulă este cunoscută sub numele de:

- formula diferenţelor progresive h>0;
- formula diferenţelor regresive h<0;

❖ Să se calculeze valoarea derivatei funcției ***f(x)*** pe intervalul **[5, 10]**:

$$f(x) := e^{x} + \sin(x) - x^{6} - 5x^{3} + 2x - 8$$

Pasul 1. Se definesc capetele domeniului de derivare și numărul puntelor intermediare în care se dorește determinarea valorii numerice a derivatelor funcției ***f(x)***:

$$a := 5 \qquad b := 10 \qquad N := 10$$

Pasul 2. Se determină pasul de discretizare ***h*** (distanța dintre două puncte intermediare de calcul consecutive):

$$h := \frac{b - a}{N} \qquad h = 0.5$$

Pasul 3. Se definesc punctele de discretizare x_i (punctele de calcul ale valorii derivatelor):

$$i := 0 .. N \qquad x_i := a + h \cdot i$$

$x^T =$

	0	1	2	3	4	5	6	7
0	5	5.5	6	6.5	7	7.5	8	...

Derivarea Numerică pe baza Polinomului de Interpolare de Ordinul I

Pasul 4. Se definește setul de puncte pentru care se poate aplica formula de calcul a derivatelor obținută pe baza polinomului de interpolare de ordinul I:

$$j := 1..N$$

Pasul 5. Se calculează valoarea derivatei funcției ***f(x)*** pentru fiecare punct intermediar x_j:

$$D1_j := \frac{f(x_j) - f(x_{j-1})}{h}$$

Pasul 6. Pentru a calcula valoarea derivatei și în punctul x_0 (punct în care nu se poate aplica direct formula de calcul) se consideră un pas de discretizare negativ, ***h = -h***:

$$D1_0 := \frac{f(x_0) - f(x_1)}{-h}$$

Pasul 7. Se vizualizează rezultatele numerice obținute în urma aplicării formulei de calcul a valorii derivatei rezultată pe baza polinomului de interpolare de ordinul I:

$D1^T =$

	0	1	2	3	4
0	$-2.433\cdot10^4$	$-2.433\cdot10^4$	$-3.813\cdot10^4$	$-5.759\cdot10^4$	...

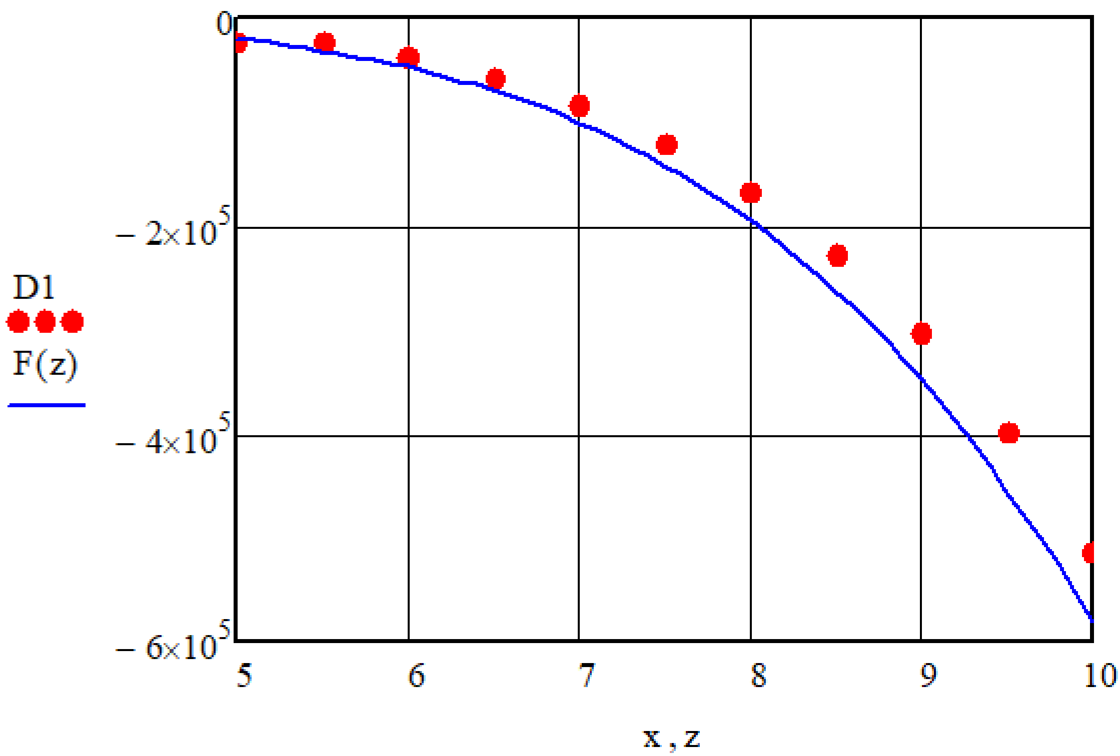
UNIVERSITATEA TEHNICĂ DIN CLUJ-NAPOCA

Pasul 8. Se definește derivata funcției ***f(x)*** prin intermediul operatorului de derivare:

$$F(x) := \frac{d}{dx} f(x) \qquad F(z) \rightarrow \cos(z) + e^{z} - 15 \cdot z^{2} - 6 \cdot z^{5} + 2$$

Pasul 9. Se realizează o comparați grafică între valorile derivatei evaluate numeric și funcția ***F(x)*** obținută prin derivarea analitică a funcției ***f(x)***:

$$z := 5, 5.1 .. 10$$



Pasul 10. Se calculează valoarea medie procentuală a erorii cu care s-a realiza evaluarea valorii derivatei funcției ***f(x)*** pe intervalul **[5,10]** studiat:

$$\mathrm{Err1} := \frac{1}{N+1} \cdot \left(\sum_i \left| \frac{F(x_i) - D1_i}{F(x_i)} \right| \right) \qquad \mathrm{Err1} = 16.259 \cdot \%$$

!!Eroare mult prea mare!!

Pasul 11. Pentru a micșora eroarea de calul ar trebui redus pasul ***h*** dintre două puncte consecutive x_i și x_{i+1} în care se face evaluarea numerică a derivatei, adică trebui mărit numărul ***N*** de puncte intermediare de calcul:

- dacă la începutul fișierului se schimbă valoarea lui ***N*** în 50
- eroarea de calcul se va reduce la: $\mathrm{Err1} = 3.365 \cdot \%$

Exemplu Numeric

Fie funcţia: $f(x) = \ln(x); \quad x_0 = 1.8$

Formula diferenţelor progresive pentru aproximarea derivatei în punctul x_0 este:

$$f'(1.8) = \frac{f(1.8+h) - f(1.8)}{h}$$

cu o eroare: $Er = \frac{|h \cdot f''(\xi)|}{2} = \frac{|h|}{2\xi^2} \le \frac{|h|}{2(1.8)^2}, \qquad 1.8 < \xi < 1.8 + h$

h	$f(1.8+h)$	$\frac{f(1.8+h)-f(1.8)}{h}$	$\frac{\lvert h \rvert}{2(1.8)^2}$
0.1	0.641853	0.54067	0.01543
0.01	0.593326	0.55401	0.00154
0.001	0.588342	0.55540	0.00015

Valoarea exactă a derivatei $f'(x) = \frac{1}{x}$ în punctul x_0 este $f'(1.8) = 0.555$

iar limitele erorii sunt destul de apropiate de eroarea de aproximare.

Pentru a obţine **formule de derivare generale** aproximative se presupun $n+1$ noduri distincte: $x_0, x_1, \ldots, x_n$ într-un interval I şi funcţia:

$$f \in C^{n+1}(I)$$

conform formulei de interpolare Lagrange de ordin n se obține formula de aproximare a derivatei pentru $n+1$ puncte de evaluare

Demonstratia 2 **– pe tablă**

Observaţie: Formula de aproximare a derivatei pentru trei puncte de evaluare: $n=2$

Formulele pentru cele trei noduri devine foarte utilă dacă ele sunt echidistante!

$x_j = x_0;\ x_1 = x_0 + h;\ x_2 = x_0 + 2h \quad f'(x_0) = \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2}f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_0)$

Analog pentru $x_j = x_1$ $\quad f'(x_1) = \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_2)\right] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi_1)$

şi pentru $x_j = x_2$ $\quad f'(x_2) = \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2}f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_2)$

Ţinând cont că $\quad x_1 = x_0 + h;\quad x_2 = x_0 + 2h,\quad h \neq 0$ formulele se pot exprima astfel:

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_0 + h) - \frac{1}{2}f(x_0 + 2h)\right] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_0)$$

$$f'(x_0 + h) = \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_0 + 2h)\right] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi_1)$$

$$f'(x_0 + 2h) = \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_0 + h) + \frac{3}{2}f(x_0 + 2h)\right] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_2)$$

Pentru a obţine trei formule pentru aproximarea derivatei în punctul x_0 se fac schimbarile de variabile: $x_0+h=x_0$ în a doua relaţie respectiv $x_0+2h=x_0$ în a treia relaţie:

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}\left[-3f(x_0)+4f(x_0+h)-f(x_0+2h)\right]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi_0)$$

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}\left[-f(x_0-h)+f(x_0+h)\right]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi_1)$$

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

Observând că relaţia trei se deduce din prima relaţie punând în loc de *h*, *(-h)* vom avea de fapt doar două formule de aproximare a derivatei:

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}\left[-3f(x_0)+4f(x_0+h)-f(x_0+2h)\right]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi_0) \qquad x_0<\xi_0<x_0+2h$$

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}\left[f(x_0+h)-f(x_0-h)\right]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi_1) \qquad x_0-h<\xi_1<x_0+h$$

❖Să se calculeze valoarea derivatei funcției ***f(x)***

$$f(x) := e^{x} + \sin(x) - x^{6} - 5x^{3} + 2x - 8$$

Pasul 1 Se definesc capetele domeniului de derivare și numărul puntelor intermediare în care se dorește determinarea valorii numerice a derivatelor funcției ***f(x)***:

$$a := 5 \qquad b := 10 \qquad N := 10$$

Pasul 2 Se definește pasul de discretizare :

$$h := \frac{b - a}{N} \qquad h = 0.5$$

Pasul 3 Se definesc punctele de discretizare xi :

$$i := 0..\,N \qquad x_i := a + h \cdot i$$

Pasul 4 Se calculeaza valoarea derivatei pentru fiecare punct intermediar

$$D2_j := \frac{1}{2 \cdot h} \cdot \left(-3 f\left(x_j\right) + 4 \cdot f\left(x_{j+1}\right) - f\left(x_{j+2}\right)\right)$$

Pasul 5 Pentru ultimele doua puncte pentru care nu se poate aplica formula se face acelasi artificiu de calcul :

$$j2 := N .. N - 1$$

$$D2_{j2} := \frac{1}{2 \cdot h} \cdot \left(-3 f\left(x_{j2}\right) + 4 \cdot f\left(x_{j2-1}\right) - f\left(x_{j2-2}\right)\right)$$

Pasul 6 Calculam eraorea metodei. Se compra Err1 cu Err2

$$Err2 := \frac{1}{N + 1} \cdot \left(\sum_i \left|\frac{F\left(x_i\right) - D2_i}{F\left(x_i\right)}\right|\right)$$

$$Err1 = 16.259 \cdot \%$$

$$Err2 = 3.828 \cdot \%$$

Pasul 6 Evaluarea derivatei in cazul in care se folosesc valorile functiei intre doi vecini vecin-valoare-vecin :

$$k := 1 .. N - 1 \qquad D3_k := \frac{1}{2 \cdot h} \cdot \left(f\left(x_{k+1}\right) - f\left(x_{k-1}\right) \right)$$

Pasul 7 Se calculeaza eroare metodei :

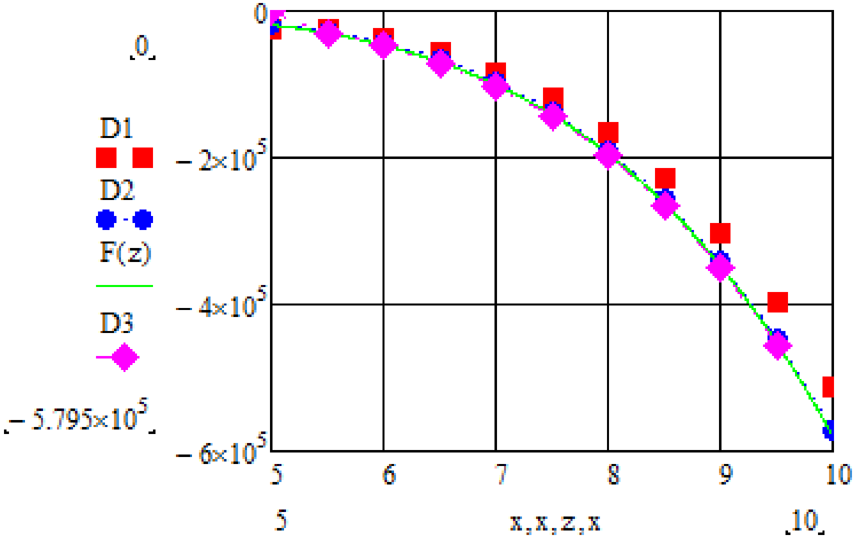
$$Err3 := \frac{1}{N - 1} \cdot \left(\sum_k \left| \frac{F\left(x_k\right) - D3_k}{F\left(x_k\right)} \right| \right)$$

Pasul 8 Se compara erorilor celor trei metode prezentate anterior si se reprezinta grafic D1j , D2j, D3k pe acelasi grafic cu F(z) . Concluzii

$Err3 = 0.016 \qquad Err3 = 1.573 \cdot \%$

$Err2 = 0.038 \qquad Err2 = 3.828 \cdot \%$

$Err1 = 0.163 \qquad Err1 = 16.259 \cdot \%$



Concluzii

- Deşi erorile în ambele formule sunt de ordinul $O(h^2)$ totuşi eroarea în relaţia a două este aproximativ jumătate din eroarea introdusă de prima relaţie. Asta pentru că relaţia a doua utilizează date din ambele părţi a lui x_0 iar prima relaţie numai dintr-o parte.

- Funcţia f trebuie evaluată numai în două puncte dacă se utilizează relaţia a doua, şi dacă se utilizează prima relaţie funcţia trebuie evaluată în trei puncte.

- Prima formulă de derivare se utilizează în apropierea capetelor intervalului pentru că informaţiile referitoare la funcţia f în afara intervalului nu sunt cunoscute.

UNIVERSITATEA TEHNICĂ DIN CLUJ-NAPOCA

II. Derivarea Numerică bazată pe Dezvoltarea în serie Taylor

Metoda permite aproximarea valorilor derivatelor funcţiei în punctele

$$x_i \in [a, b],\ i = \overline{1, n}$$

în care valoarea funcţiei *f* este cunoscută. Se consideră cele *n+1* puncte echidistante,

$$x_{i+1} = x_i + h$$

adică pasul de discretizare este $h = x_{i+1} - x_i$

Pornind de la dezvoltarea în serie Taylor a funcţiei *f* (x) în jurul punctului x_i şi neglijând termenii care urmează după cel care conţine derivata de ordin II (*f* admite derivate cel puţin până la ordinul III)

Demonstratia 3 **– pe tablă**

Observaţii

1. Eroarea se micşorează odată cu reducerea pasului *h* adică a diferenţei dintre abscisele a două noduri consecutive, dar totuşi prin micşorarea distanţei *h* poate duce şi la reducerea diferenţei

$$f\left(x_{i+1}\right)-f\left(x_{i-1}\right)$$

ceea ce ar putea duce la creşterea erorii de rotunjire.

2. Dacă nodurile **nu sunt echidistante** adică: $x_{i+1}=x_i+\alpha h,\ \alpha\neq 1$

$$f'(x_i)\cong\frac{1}{(\alpha+1)h}\left[f(x_{i+1})-f(x_{i-1})\right]$$

$$f''(x_i)\cong\frac{1}{h^2}\frac{2}{\alpha(\alpha+1)}\left[\alpha f(x_{i-1})-(1+\alpha)f(x_i)+f(x_{i+1})\right]$$

3. Pentru derivatele de ordin mai mare decât 2 se procedează asemănător, calculele fiind mai complicate. De exemplu pentru ordinul III se reţine în dezvoltarea Taylor încă un termen şi se obţine:

$$f'''(x_i)\cong\frac{f(x_{i+2})-2f(x_{i+1})+2f(x_{i-1})-f(x_{i-2})}{2h^3}$$

Concluzii

➢Se observă că toate relaţiile conţin puncte aflate de ambele părţi ale lui x_i, fiind **relații centrale**. Se pot deduce şi **relaţii unilaterale** care utilizează puncte aflate numai de o parte sau alta a lui x_i dar sunt **mai puţin precise** decât cele centrale.

➢Derivarea numerică poate genera **erori destul de mari** datorită imposibilităţii reducerii pasului de discretizare h sub o anumită valoare limită, determinată bineînţeles şi de erorile de rotunjire.

➢Dar cu toate acestea formulele de derivare numerică sunt **foarte utile pentru deducerea unor metode numerice de rezolvare** a ecuaţiilor diferenţiale ordinare şi ecuaţiilor cu derivate parţiale.

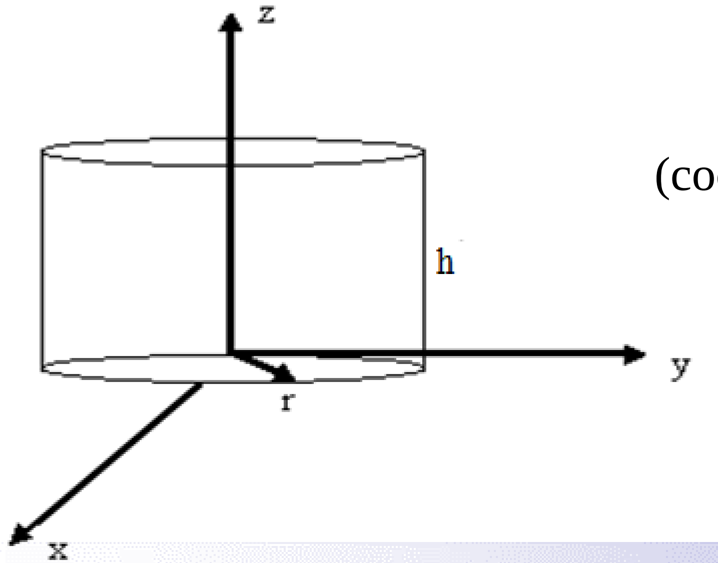
➢Se pot folosi şi alte procedee de aproximare: Hermite, spline, metoda celor mai mici pătrate (Master – Complemente de Matematici)

Aplicație Practică

Să se determine numeric câmpul electric pe suprafața unui cilindru, după o direcție în situația în care se cunoaște expresia analitică a fluxului electric care străbate suprafața și coordonatele cilindrice care o definesc.

Date numerice:

- raza cilindrului $r := 5$ cm $\theta := 2\pi$
- înălțimea cilindrului $h := 6$ cm
- câmpul scalar flux electric $\Psi(x,y,z) := 10^{12}\cdot\left(x^2\cdot z - 3x\right)\cdot y\cdot 3^z$ Wb



(coordonatele cilindrice cunoscute: *r*, *θ*, *z*=*h*)

Având dată o formă analitică pentru fluxul electric, se poate determina câmpul electric care produce acel flux prin derivare numerică după direcția *z*, când valorile *x* și *y* ale suprafeței și, implicit, ale câmpului de flux sunt impuse de raza cilindrului, *r*, și unghiul θ din coordonatele cilindrice.

Ψ_{el} -- fluxul electric E_V -- câmpul electric (câmp vectorial)

$dS = r \cdot \theta \cdot dz$ -- elementul de suprafață scris în coordonate cilinfrice

Formula matematică care sta la baza rezolvării problemei se exprimă prin teorema lui Gauss:

$$\Psi_{el} = \int E_V \, dS \quad \text{(se aplică operatorul de derivare)}$$

$$E_V = \frac{d}{dS}\Psi_{el} \quad \text{(care devine)} \quad E_V = \frac{1}{r \cdot \theta} \cdot \frac{d}{dz}\Psi_{el}$$

↓ dependența variabilelor *x* și *y* de coordonatele cilindrice ↓

$$x = r \cdot \cos(\theta) \qquad y = r \cdot \sin(\theta)$$

UNIVERSITATEA TEHNICĂ DIN CLUJ-NAPOCA

Pentru rezolvarea problemei se alege o metodă numerică de derivare utilizând dezvoltarea în serie Taylor. Aceasta metodă aproximează valorile derivatelor funcției într-un șir de puncte în care valoarea funcției este cunoscută.

- Șirul de puncte în care se evaluează derivata se definește în felul următor:

$N := 50$ (numărul de elemente din șir) $i := 0..N-1$ (numărul de iterații)

$a := 0$ $b := 6$ (limitele intervalului din care face parte șirul)

$h := \frac{b-a}{N}$ $h = 0.12$ (pasul șirului, distanța dintre două valori consecutive)

$z_0 := a$ $z_N := b$ (valorile inițiale și finale ale șirului)

$z_{i+1} := z_i + h$ (relația generală între elementele șirului)

Observație: Derivarea numerică prin metoda abordată poate conduce la erori semnificative, în anumite condiții, datorită imposibilității reducerii pasului *h* sub o anumită valoare limită.

- Funcția matematică de derivat, după modelul completat este următoarea:

$$f(z) := \frac{\Psi(x,y,z)}{r\cdot\theta}$$

iar derivarea numerică are loc în cadrul formulei deduse din seria Taylor:

$$f'(z) := \frac{f(z_{i+1}) - f\left(z_{i-1}\right)}{2\cdot h}$$

- Versorul direcției câmpului electric după axa *z*: $r_z := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

- Expresia câmpului electric scrisă vectorial după direcția *z*:

$$E_Z\left(z,i\right) := f'\left(z,i\right)\cdot r_Z$$

- Punctele șirului considerat în care se dorește aflarea câmpului electric (derivata numerică):

$$z_i = (z, i) \quad \text{(echivalentă)} \qquad z_{18} = 2.16 \;\; mm$$

$$E_Z(z,18) := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -0.0034223 \end{pmatrix} \frac{V}{m} \qquad \text{(valoarea câmpului electric)}$$

Observație: Metoda numerică expusă, pentru problema de față se dovedește eficace la un număr restrâns de argumente ale funcției, adică pentru o valoare limitată de coordonate *z* pentru care se dorește cunoașterea mărimii câmpului electric.

În continuare, se va apela operatorul predefinit de derivare din utilitarul Mathcad. După aplicarea acestuia funcției, la valorile câmpului electric se ajunge prin înlocuirea coordonatei *z* cu punctele de interes.

$$z := 2.16 \;\; mm \qquad f'(z) := \frac{d}{dz} f(z) \qquad f'(z) := -0.028$$

- Valoare câmpului electric calculată în acest fel: $E_Z(z) := f'(z)\cdot r_z$

$$E_Z(z) := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -0.002838 \end{pmatrix} \frac{V}{m}$$

Raportarea celor două valori obținute, prin metoda numerică, respectiv prin funcția definită în toolbox-ul Mathcad, evidențiază acuratețea metodei numerice.

Problema, prin referirea metodei numerice, face posibilă exprimarea valorilor câmpului electric la suprafața de separateție a două medii, după direcția tangențială.

Prin alegerea corespunzătoare a valorilor *r*, și *z* se poate acoperi întreg domeniul suprafeței cilindrului, ceea ce înseamnă determinarea valorilor câmpului electric pe toată suprafața considerată.

Reprezentarea Grafică a Gradientului

Se introduce funcția f(x,y): $f(x,y) := 2\cdot[\sin(x)]^2 \cdot \cos(y-2)$

Se introduc valorile de capăt (punctele finale) pentru *x* și *y*:

$$x_{\min} := -2 \qquad x_{\max} := 2 \qquad y_{\min} := -4 \qquad y_{\max} := 4$$

Se introduc numărul valorilor lui *x* și *y* în șir: $N_x := 20 \quad N_y := 20$

$$i := 0..N_x - 1 \qquad j := 0..N_y - 1$$

$$xind_i := x_{\min} + i\cdot\frac{x_{\max} - x_{\min}}{N_x - 1} \qquad yind_i := y_{\min} + i\cdot\frac{y_{\max} - y_{\min}}{N_y - 1}$$

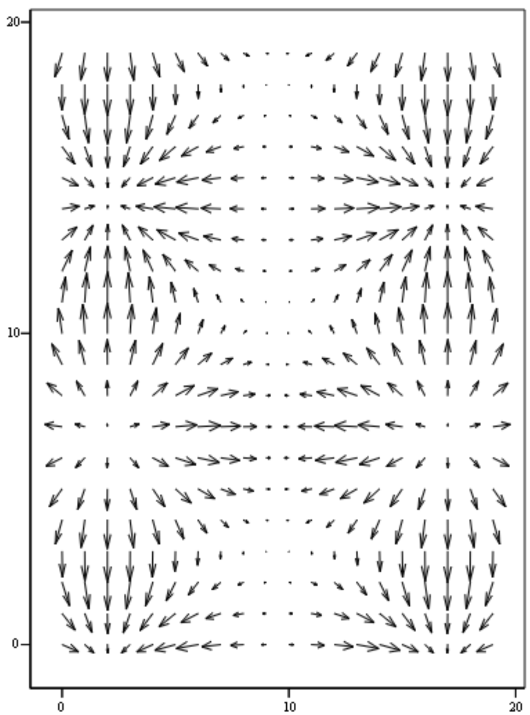
Gradientul funcției va fi:

$$grad(x,y) := \begin{pmatrix} \dfrac{d}{dx} f(x,y) \\ \dfrac{d}{dy} f(x,y) \end{pmatrix}$$

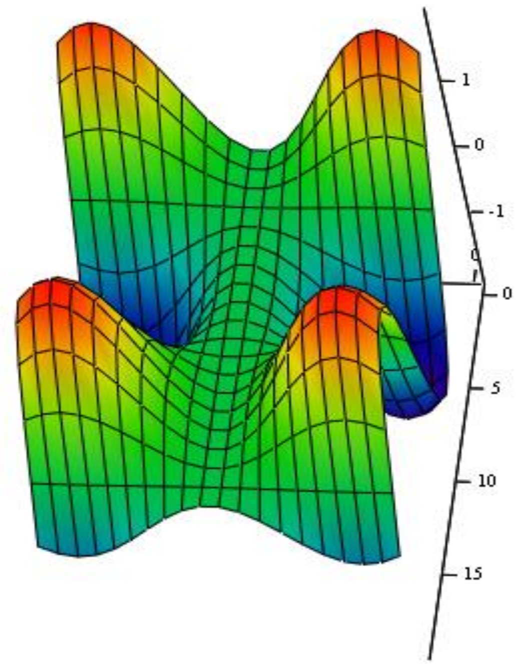
Se stochează într-o matrice valorile gradientului în punctele de calcul ale funcției:

$$V_{i,j} := grad(xind_i, yind_j) \qquad M_{i,j} := (V_{i,j})_0 \qquad N_{i,j} := (V_{i,j})_1$$

$$F_{i,j} := f(xind_i, yind_j)$$



(M,N) (câmpul vectorial)



F (reprezentarea grafică pe suprafață)

Evaluarea Numerică a Derivatelor unei Funcții într-un Punct

Introducem funcția pe care dorim să o derivăm:

$$f(x) := x^3 \cdot \ln(x) + 3 \cdot x^2 + [\cos(x)]^2$$

Evaluarea simbolică a derivatei din paleta **Evaluation**:

$$\frac{d}{dx} f(x) \rightarrow 6 \cdot x + 3 \cdot x^2 \cdot \ln(x) + 2 \cdot \cos(x) \cdot \sin(x)$$

$$n := 3 \qquad \frac{d^n}{dx^n} f(x) \rightarrow 6 \cdot \ln(x) + 8 \cdot \cos(x) \cdot \sin(x) + 11$$

Punctul în care calculăm derivata: $x := 4$

$$\frac{d}{dx} f(x) = 105.553 \qquad \frac{d^n}{dx^n} f(x) = 23.275$$

(prima derivată) (derivata de ordin n)