Lucrarea 5

DERIVAREA NUMERICĂ

1. SCOPUL LUCRĂRII

Prezentarea unor algoritmi de derivare numerică, implementarea acestora în limbaje de nivel înalt (în particular, ANSI C*) şi folosirea lor în rezolvarea diferitelor probleme ce apar în electronică.*

2. PREZENTARE TEORETICĂ

Se poate vorbi despre metodele de derivare din două puncte de vedere:

- *matematic*,
- *geometric*.

Din punct de vedere *matematic*, derivata este definită ca o limită a unui raport, ce conține atât la numărător cât şi la numitor o diferență a două valori. Dacă diferența de la numitor este foarte mică, atunci acest raport este interpretat ca derivata unei funcții într-un punct de pe abscisă (fie acesta x_0). Se va nota distanța între elementele de la numitor drept *h*. Conform teoriei din analiza matematică, dacă acest *h* tinde la 0, atunci avem de-a face cu derivata unei funcții într-un punct. Numeric vorbind, această valoare foarte mică a lui *h*, la limită zero, nu este acceptată algoritmic, deoarece aceasta ar însemna o *nedeterminare*: împărțirea la zero. Rămâne să vedem cum se modelează în limbaj o astfel de valoare.

Din punct de vedere *geometric*, derivata este panta tangentei la graficul funcţiei în punctul x_0. Analitic, această pantă a tangentei cere două perechi de puncte (x_i, y_i), cu i=1,2 pentru a putea fi calculată. Aşadar avem de-a face cu *panta dreptei* construite prin cele două perechi de puncte.

Există şi geometric o problemă, pentru că printr-un punct trec o infinitate de drepte, deci teoretic putem avea o infinitate de pante posibile. Întrebarea esențială este: ce dreaptă trebuie aleasă din această infinitate, pentru ca rezultatul să poată fi interpretat ca derivata funcției în acel punct? Răspunsul este dat, după cum ne aşteptam, tot de o *distanță*. Este vorba despre distanța ce reprezintă depărtarea pe axa *Ox* a celor două valori ce construiesc numitorul fracției asociate pantei unei drepte oarecare. Pentru un rezultat cât mai apropiat de cel real, va trebui ca acest numitor să fie cât mai mic, deci distanța între punctele alese pe abscisă să fie cât mai mică. Unul dintre punctele de pe abscisă este x_0 (punctul de derivare), iar cel de-al doilea se va situa la distanța *h* de x_0 (denumită *vecinătate* a punctului de calcul).

Aşadar, cele două abordări converg din punct de vedere al rezultatului. Mărimea comună între cele două abordări este o distanță, calculată pe axa absciselor, între x_0 şi un alt punct, convenabil ales. Această distanță, denumită generic *h*, trebuie să fie subunitară, şi preferabil cât mai apropiată de 0, conform principiilor analizei matematice. Empiric, ordinul de mărime al lui *h* este în gama [1e-2, 1e-3], pentru a se putea încadra şi a putea respecta condițiile matematice de *vecinătate*.

Nu trebuie să pierdem din vedere funcția pe care o derivăm. În alegerea mărimii lui *h* intervine, deci, şi viteza de variație a funcției, în mod special în zona în care facem alegerea lui x_0.

Observând poziționarea pe axa absciselor a distanței pe care utilizatorul va trebui să o aleagă, metodele de derivare se pot clasifica în două clase:

- *cu simetrie* (simetrice) față de punctul x_0;
- *fără simetrie* (*asimetrice*) față de punctul x_0.

Pentru metodele cu simetrie vecinătățile punctului central x_0 se aleg egal depărtate, de o parte şi de alta a acestuia. Pentru metodele asimetrice acest lucru nu se întâmplă, vecinătățile putând fi alese oarecare, de o parte şi de alta a lui x_0, dar cu respectarea condiției matematice de principiu.

În concluzie, trei sunt elementele de care trebuie să se țină seama atunci când se are în vedere un algoritm numeric:

- neliniaritatea funcției ce se doreşte derivată, pentru intervalul în care se alege punctul de derivare x_0;
- metoda de derivare aleasă;
- ordinul de mărime al vecinătății punctului de derivare dorit (distanța *h*).

2.1. DERIVATA NUMERICĂ PRIN DOUĂ PUNCTE

Prin definiție derivata funcției $f(x)$ în punctul x_0, dacă există, este:

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} \tag{5.1}$$

Derivata numerică este:

$$f'(x_0) \approx \frac{f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) - f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{h} \tag{5.2}$$

Deoarece în formula de calcul a derivatei numerice intervin două puncte $x_0 - h/2$ şi $x_0 + h/2$, numim această formulă derivata prin *două puncte* a funcției $f(x)$.

Precizia de calcul a metodei este una scăzută. Se demonstrează că erorile metodei sunt minime sau nule pentru funcții constante sau cel mult de grad 1 (fie polinoame de grad maxim 1, fie funcții neliniare modelate polinomial, plecând de la dezvoltarea în serie de puteri, sau de la seria Taylor).

Se observă că această metodă este *simetrică* din punctul de vedere al alegerii vecinătății lui x_0.

2.1.1 Algoritmul 4.1. Derivata prin două puncte

```
real Der_2
(
  Adr_functie, // Adresa funcției reale de o variabilă
               // reală ce trebuie derivată
  real x0,     // punctul în care se calculează derivata
  real h,      // distanta, ca vecinătate a punctului x0
)

{
   returnează (*Adr_functie)(x0 + 0.5*h) - (*Adr_functie)(x0 - 0.5*h)
              ---------------------------------------------------- ;
                                   h
}
```

$$\frac{(*Adr\_functie)(x_0 + 0.5 * h) - (*Adr\_functie)(x_0 - 0.5 * h)}{h}$$

Obs.: Notațiile '*Adr_functie*' şi '*(*Adr_functie)*' sunt simbolice. Ele reprezintă, respectiv, adresa unei funcții (deci un pointer la o funcție) şi apelul indirect al unei funcții, prin intermediul pointerului către acea funcție. Vedeți *Anexa B* - "*Noțiuni de C necesare desfăşurării lucrărilor de laborator*" pentru lămuriri.

2.2. DERIVATA NUMERICĂ PRIN TREI PUNCTE

Deoarece în calculul acestei derivate numerice intervin trei puncte o denumim derivata numerică *prin trei puncte*.

Formula derivatei numerice a funcției $f(x)$ prin trei puncte este:

$$f'(x_0) \approx \frac{h_1^2 f(x_0 + h_2) + (h_2^2 - h_1^2) f(x_0) - h_2^2 f(x_0 - h_1)}{h_1 h_2 (h_1 + h_2)} \tag{5.3}$$

Pentru $h_1 = h_2 = h/2$ se obține formula derivatei numerice *prin două puncte*.

Această metodă este una *asimetrică*. Se observă că vecinătățile la stânga, respectiv la dreapta punctului central x_0, sunt *inegale*. Din acest motiv se pretează la calculul derivatei unei funcții cunoscute sub formă de tabel (pentru care nu se ştie forma sa explicită). Dacă distanțele între abscise nu sunt egale, atunci este mult mai probabil să putem alege aceste vecinătăți (h_1 şi h_2) astfel încât să respectăm condițiile impuse de relația de calcul a metodei.

Ca precizie, această metodă oferă erori de trunchiere nule pentru funcțiile constante, liniare şi pătratice, deci pentru funcții polinomiale de până în gradul 2 inclusiv. Nu acelaşi lucru se poate spune şi pentru funcții oarecare, altele decât polinoamele, pentru că acestea vor fi modelate doar prin primii trei termeni ai seriei infinite de puteri, sau Taylor asociată (de la termenul constant până la termenul de grad 3, inclusiv).

Eroarea de trunchiere a derivatei prin două puncte este:

$$e_T = \frac{h^2}{24} \cdot f'''(\xi) \tag{5.4}$$

unde $x_0 - \frac{h}{2} \le \xi \le x_0 + \frac{h}{2}$

Dacă $\left|f'''(\xi)\right| < M$, cu $M \in R$ rezultă:

$$e_T \le \frac{h^2}{24} \cdot M \tag{5.5}$$

2.2.1. Algoritmul 4.2. Derivata prin trei puncte

```
real Der_3
(
  Adr_functie, // Adresa unei funcții reale de o
               // variabilă reală (pointer la funcție)
  real x0,     // punctul în care se calculează derivata
  real h1,     // distanța vecinătății stânga a lui x0
  real h2,     // distanța vecinătății dreapta a lui x0
)
{ // corpul funcţiei
   returnează
```

$$\frac{h_1^2(*Adr\_functie)(x_0+h_2)+\left(h_2^2-h_1^2\right)\cdot(*Adr\_functie)(x_0)-h_2^2\cdot(*Adr\_functie)(x_0-h_1)}{h_1h_2(h_1+h_2)};$$

```
}
```

Obs.: Notațiile '*Adr_functie*' şi '*(*Adr_functie)*' sunt simbolice. Ele reprezintă, respectiv, adresa unei funcții (deci un pointer la o funcție) şi apelul indirect al unei funcții, prin intermediul pointerului către acea funcție. Vedeți *Anexa B* - "*Noțiuni de C necesare desfăşurării lucrărilor de laborator*" pentru lămuriri.

Eroarea de trunchiere este:

$$e_T = \frac{h_1 \cdot h_2}{6 \cdot (h_1 + h_2)}\left[h_1 \cdot f'''(\xi_1) + h_2 \cdot f'''(\xi_2)\right] \tag{5.6}$$

unde ξ_1 şi ξ_2 aparțin intervalului [x_0-h_1, x_0+h_2].

Dacă $\left|f'''(\xi)\right| < M$, cu $M \in R$, rezultă:

$$e_T \le \frac{h_1 \cdot h_2}{6} \cdot M \tag{5.7}$$

Din relațiile (5.6) şi (5.7) se poate observa că termenul următor celui prezentat din dezvoltarea în serie sau Taylor a funcției ce urmează să fie derivată îl va conține h^3, deci formula de calcul este exactă până la funcții de derivat de până în gradul 2 inclusiv, dacă discutăm despre funcții polinomiale. Pentru situația în care funcția de intrare este oarecare, în urma dezvoltării sale în serie Taylor, eroarea de trunchiere fiind nulă până la termenul de ordin 2 inclusiv, va rezulta o limitarea de reprezentare, care justifică într-o anumită măsură erorile de metodă (acestea nu se datorează exclusiv erorii de trunchiere).

2.3. DERIVATA NUMERICĂ PRIN CINCI PUNCTE

Pentru formula acestei derivate se utilizează cinci puncte, două câte două egal distanțate de punctul central, în care se calculează derivata:

$$x_0 - 2h, x_0 - h, x_0, x_0 + h, x_0 + 2h \tag{5.8}$$

Formula derivatei numerice prin cinci puncte a funcției $f(x)$ este:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}\left[f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)\right] \tag{5.9}$$

Se demonstrează că formula (5.9) are eroarea de trunchiere zero *până la funcții polinomiale de gradul patru*. Aceasta înseamnă că dacă funcția pe care dorim să o derivăm este un polinom, atunci oricare ar fi acel polinom, cu condiția ca gradul său maxim să nu depăşească valoarea 4, formula derivatei prin 5 puncte oferă erori nule.

În schimb, dacă funcția care se doreşte a se deriva nu este polinom, atunci evident vor exista erori de calcul, pentru că o astfel de funcție prezintă o *dezvoltare infinită* în serie de puteri, sau serie Taylor, fiind limitată în calcule la doar o parte dintre termeni.

Eroarea de trunchiere pentru derivata prin cinci puncte este:

$$e_T = \frac{24}{5} \cdot h^4 \cdot f^V(\xi)\text{, unde } \xi \in \left[x_0 - 2h,\ x_0 + 2h\right] \tag{5.10}$$

Dacă $\left|f^V(\xi)\right| < M$, cu $M \in R$ rezultă:

$$e_T \le \frac{24}{5} \cdot h^4 \cdot M \tag{5.11}$$

Din relațiile (5.10) şi (5.11) se poate observa că termenul următor celui prezentata în dezvoltarea în serie sau Taylor a funcției date îl va conține pe h^5, deci formula de calcul este exactă până la funcții de derivat de până în gradul 4 inclusiv.

2.3.1. Algoritmul 4.3. Derivata prin cinci puncte

```
real Der_5
(
 Adr_functie,  // Adresa unei funcţii reale de variabilă
               // reală (pointer la funcţie)
```

```
    real x0,        // punctul în care se calculează derivata
    real h          // pasul (vecinătatea faţă de x0)
)
{
    return
    ((*Adr_functie)(x0 - 2h) - 8(*Adr_functie)(x0 - h) + 8(*Adr_functie)(x0 + h) - (*Adr_functie)(x0 + 2h) )
    /
    (12*h);
}
```

Obs.: Notaţiile '*Adr_functie*' şi '*(*Adr_functie)*' sunt simbolice. Ele reprezintă, respectiv, adresa unei funcţii (deci un pointer la o funcţie) şi apelul indirect al unei funcţii, prin intermediul pointerului către acea funcţie. Vedeţi Anexa B - "*Noţiuni de C necesare desfăşurării lucrărilor de laborator*" pentru lămuriri.

2.4. DERIVATE DE ORDIN SUPERIOR

Pentru calculul unor derivate de ordin superior (de ordin 2, 3 sau mai mare), se pot considera ambele abordări posibile ale problemei:

- *recursivă;*
- *nerecursivă.*

Indiferent de varianta aleasă se pleacă de la observaţia că derivata de un ordin mai mare ca doi se poate scrie în funcţie de cea de ordin 2, care se defineşte inevitabil pe baza celei de ordin 1.

Astfel, de exemplu pentru o derivată de ordinul 3 putem scrie:

$$f'''(x_0) = f'(f''(x_0)) = f'(f'(f'(x_0))) \tag{5.12}$$

şi deci problema se reduce la a calcula de fapt derivata de ordinul 1, de un număr dat de ori, impus de ordinul dorit al derivatei ce urmează să fie calculat.

Pentru derivata de ordinul 1 se poate alege una dintre metodele prezentate anterior.

2.4.1. VARIANTA NERECURSIVĂ

Pentru calculul derivatelor de ordin superior se poate aplica formula de mai jos pentru funcţia $f''(x)$. Pentru o mai bună înţelegere se face un calcul complet al derivatei de ordinul doi şi trei a metodei de calcul a derivatelor de ordin superior, pornind de la formula derivatei prin două puncte.

$$f''(x_0) \approx \frac{f'\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) - f'\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{h} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0) - f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} =$$

$$= \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} \tag{5.13}$$

Pentru derivata de ordin 3, avem:

$$f'''(x_0) \approx \frac{f''\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) - f''\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{h} =$$

$$= \frac{f\left(x_0 + \frac{3}{2}h\right) - 2f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) + f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right) + f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) + 2f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right) - f\left(x_0 - \frac{3}{2}h\right)}{h^3}$$

$$= \frac{f\left(x_0 + \frac{3}{2}h\right) - 3f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) + 3f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right) - f\left(x_0 - \frac{3}{2}h\right)}{h^3} \tag{5.14}$$

În acest mod se poate obține orice derivată de ordin superior.

Prezentăm în continuare pseudocodul asociat celor două rutine de calcul a derivatei de ordin superior, plecând de la cele două formule prezentate anterior (formulele 5.13 şi 5.14).

// Varianta derivatei de ordin 2, folosind derivata prin două puncte

```
float derOrdin2
(
   Adr_functie,
   real x0,
   real h
)
{
// Corpul funcției

   return (pF(x0+h) - 2*pF(x0) + pF(x0-h))/(h*h);
}
```

// Varianta derivatei de ordin 3, folosind derivata prin două puncte

```
float derOrdin2
(
   Adr_functie,
   real x0,
   real h
)
{
// Corpul funcției

   return (pF(x0+h) - 2*pF(x0) + pF(x0-h))/(h*h);

}
```

2.4.2. VARIANTA RECURSIVĂ

Prezentăm în continuare algoritmii derivatei de ordin 2 şi 3. Am ales pentru calculul derivatei de ordin 2 formula derivatei prin 2 puncte, iar pentru derivata de ordin 3 am ales formula derivatei prin 5 puncte.

// Derivata de ordin 2 - varianta folosind formula derivatei prin 2 puncte

```
real derOrdSup
(
   Adr_functie pF,
   intreg ord,
   float x0,
   float h
)
{
// Corpul funcţiei

// Orice funcţie recursivă trebuie să aibă o condiţie de
// oprire a apelurilor
if(ord == 1)
   return ((*Adr_functie)(x0+h/2)-(*Adr_functie)(x0-h/2))/h;

// Formula recursivă
return
   (      derOrdSup(ord-1, (*Adr_functie), x0+h/2, h)
        - derOrdSup(ord-1, (*Adr_functie), x0-h/2, h)
   )/h;
}
```

// Derivata de ordin 3 - varianta folosind formula derivatei prin 5 puncte

```
real derOrdSup
(
   Adr_functie,
   intreg ord,
   real x0,
   real h
)
{
// Corpul funcţiei
// Orice funcţie recursivă trebuie să aibă o condiţie de
// oprire a apelurilor
if(ord == 1)
   return
   (pF(x0-2*h) - 8*pF(x0-h) + 8*pF(x0+h) - pF(x0+2*h))/(12*h);

// Formula recursiva
return
(  derOrdSup(ord-1,pF,x0-2*h,h) - 8*derOrdSup(ord-1,pF,x0-h,h)
    + 8*derOrdSup(ord-1,pF,x0+h,h) - derOrdSup(ord-1,pF,x0+2*h,h)
)/(12*h);
}
```

Obs.:

Notaţiile '*Adr_functie*' şi '*(*Adr_functie)*' sunt simbolice. Ele reprezintă, respectiv, adresa unei funcţii (deci un pointer la o funcţie) şi apelul indirect al unei funcţii, prin intermediul pointerului către acea funcție. Vedeți Anexa B - "*Noțiuni de C necesare desfășurării lucrărilor de laborator*" pentru lămuriri.

3. DESFĂŞURAREA LUCRĂRII

3.1. ÎNTREBĂRI

1. Pentru ce tip de funcții considerați că sunt mai utile metodele de derivare numerică? Explicați.
2. Se pot găsi algoritmi de determinare a derivatei unei funcții într-un punct folosind 6, 9 sau 10 puncte? Cum?
3. În cazul funcției de mai jos:

x	0.1	0.2	0.3	0.5
y	3.14	1.618	6.28	0.618

   Se pot determina valorile derivatei funcției în punctele:
   X_1=0.1, X_2=0.2, X_3=0.4?

4. Ce limitări de calcul apar, indiferent de metoda de derivare utilizată?
5. Care este ordinul de mărime recomandat al vecinătăților h (din derivata prin două şi cinci puncte), respectiv h_1 şi h_2 (pentru cazul derivatei prin 3 puncte)?
6. Se pot crea şi derivate bazându-se pe acelaşi principiu (vedeți cursul asociat laboratorului) folosind un număr mai mare de puncte?
7. Cum rezolvați problema derivării numerice pentru *funcții rapid-variabile*?
8. Care dintre cele trei metode se adaptează mai bine situației în care funcția de derivat este tabelată? Valorile care definesc funcția sunt date ca perechi (x_i, y_i).

3.2. PROBLEME LABORATOR

1. Să se implementeze algoritmii 4.1-4.3 în limbajul ANSI C.

2. Se dă caracteristica *I-U* a unei diode tunel în figura 4.1. Se cere rezistența dinamică a diodei în punctele A,B,C,D,E,F,G,H,I,J,K,L.

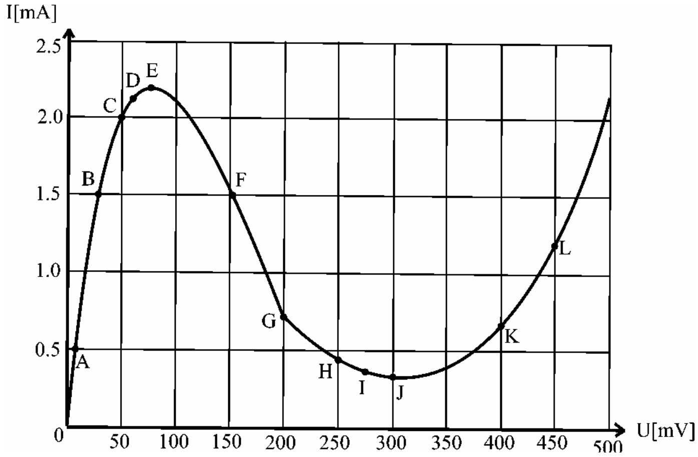

Fig.4.1. Caracteristica I-U a diodei tunel

3. Se consideră funcţia:

$$f(x) = 2 \cdot x^2 \cdot \exp(x) + \sin(3 \cdot x - 1.2)$$

pentru se cere valoarea derivatei în punctul $x = 1$. Se vor folosi toate variantele de derivare studiate. Analizaţi comparativ rezultatele obţinute.

3.3. TEME DE CASĂ

1. Pentru problema 3) din secţiunea ***3.1. Întrebări*** găsiţi `F'(0.2)` prin metoda de derivare în 3 puncte. Calculaţi apoi `F'(0.4)` şi `F'(0.3)` prin metode la alegere.

2. Să se determine conductanţa şi rezistenţa canalului (dI_D/dU_{DS}, respectiv dU_{DS}/dI_D) pentru un tranzistor cu efect de câmp ştiind: U_{GS}= -1V, $U_{DS,sat}$ = 3V. Interpretaţi rezultatele.
Indicaţie:
TECJ funcţionează după relaţia:
$I_D=I_{DSS}(1-U_{GS}/U_T)^2$
unde I_{DSS} este curentul de saturaţie şi are valoarea 9mA, iar $U_T=U_{GS}-U_{DS,sat}$

3. Calculaţi derivatele de ordin 2 şi 3 ale funcţiei:
`f(x) = sin(x)`
în punctul `pi/6`. În funcţie de varianta aleasă pentru calculul derivatei de ordin 1, valorile vecinătăţilor sunt:
- pentru derivata prin 2 puncte, `h = 5*1e-3`;
- pentru derivate prin 3 puncte, h_1 `= 2e-2`, h_2 `= 5e-2`.

Cum comentați rezultatele pe care le obțineți dacă schimbați valoarea vecinătăților?

4. Pe baza caracteristicii din problema 2, subparagraful ***3.2. Probleme de calculator***, calculați derivata de ordin 2 în punctele de abscisă 150, 260 şi 440.

5. Să presupunem că se cunoaşte funcția dată prin tabelul următor:

x	1	1.6	2.1	2.14	3	3.2
y(x)	0	0.4700	0.7419	0.7608	1.0986	1.1632

Se cer:
- derivata de ordin 1 a funcției în punctul 2.3;
- derivata de ordin 2 a funcției în punctul 2.1;
- derivata de ordin 3 a funcției în punctul 3.1.

Pentru fiecare calcul metoda de derivare de ordinul 1 este la alegere.

Indicație: Puteți folosi rezultatele derivatelor deja calculate.

BIBLIOGRAFIE

1. I. Rusu - “*Metode numerice în electronică. Aplicații în limbaj C*”, Editura Tehnică, Bucureşti, 1997.
2. W.S. Dorn, D.D. McCracken - "*Metode numerice cu programe în FortranIV*", Editura Tehnică, Bucureşti, 1976.