

Bases Computacionais da Ciência

Ronaldo Cristiano Prati

Bloco A - Sala 513-2 - Santo André

ronaldo.prati@ufabc.edu.br

Computação

Cada vez mais, diversas áreas do conhecimento utilizam-se dos **conceitos de Computação**.

De fato, atualmente é praticamente impensável fazer pesquisa científica sem o uso da Computação:

- Presença de instrumentos computadorizados o tempo todo em todo lugar.
- Geração de dados científicos em volumes que não podem mais ser entendidos apenas com cálculos simples.

Computação em todo lugar

Dispositivos computacionais são usados em vários aspectos de nosso cotidiano:

- Dentro de nossas casas
- Controles eletrônicos
- Comunicação
- Etc..

Computação em todo lugar

Técnicas e ferramentas de simulação têm sido usadas em diversas áreas:

- Pesquisadores da área médica usam ambientes simulados para treinar técnicas de cirurgia, antes de testar em pacientes reais.
- Na indústria projetos de máquinas, processos e produtos são inicialmente desenvolvidos em ambientes controlados de simulação.

Computação em todo lugar

Diversas áreas de pesquisa estão se tornando cada vez mais dependentes da Computação

Segundo George Johnson no artigo "All Science is Computer Science", publicado no New York Times em 2001

- Toda Ciência, ao que parece, está se envolvendo com Ciência da Computação
- Física é quase inteiramente computacional
- Quinze anos atrás, os biólogos desconsideravam a necessidade de Computação

Ciência e Tecnologia

Cada vez mais os computadores estão presentes nas diferentes áreas da Ciência e Tecnologia.

- Qual a diferença entre Ciência e Tecnologia?

Ciência

A palavra Ciência está relacionada com a compreensão das coisas (entendimento de comportamentos)

Perguntas de quem está fazendo Ciência:

- O que acontece se ... ?
- Quais as diferenças e as semelhanças entre ... ?
- Qual a relação entre... ?
- Existe relação... ?

Tecnologia

A Tecnologia está relacionada com encontrar soluções práticas para problemas, especialmente criar algo que vá de encontro às necessidades humanas.

Perguntas de quem está fazendo tecnologia:

- Como podemos fazer isto?
- Como identificar focos de doenças?

Em Tecnologia há a **aplicação de ideias científicas**, combinadas com ideias criativas para produzir modelos que funcionam

Por que estudar computação?

Ter um bom domínio sobre os computadores é uma competência importante para:

- Um Bacharel em Ciência e Tecnologia (BC&T) ou
- Um Bacharel em Ciências e Humanidades (BC&H):

Auxilia a resolver vários problemas durante a vida acadêmica e profissional.

Bases Computacionais da Ciência

A disciplina “**Bases Computacionais da Ciência**” lança as bases para uma formação (básica) computacional dos alunos.

- Apresenta como a Computação pode ser usada como apoio para o tratamento de conteúdos presentes em todas as profissões: funções, gráficos, estatística, programação, ...
- Sugere formas de emprego da Computação para a aplicação nos meios científico e tecnológico.

Semana 1 - Atividade 1

Leia e faça um resumo das seções 1.1, 1.2 e 1.3 (~11 páginas) do Capítulo 1 do livro texto.

- O resumo deve conter não mais do que 500 palavras.
- Pode submeter um arquivo PDF.

O resumo deve ser enviado pelo Tidia-ae até as 23h50 do dia **11/Junho**.

O computador

Um sistema de computação é:

- uma coleção de componentes que realizam operações lógicas e aritméticas (transformação) sobre um conjunto de dados (entrada) e fornecem uma saída (os dados transformados)
- Um computador é uma máquina capaz de executar automaticamente alguma transformação no conjunto de dados de entrada

Computação além do computador

Um dos objetivos da Computação é entender os limites da computação.

- A idéia de um dispositivo de computação universal foi descrita, pela primeira vez, por Alan Turing, em 1937
- Turing propôs que toda a computação poderia ser realizada por um tipo especial de máquina, denominada Máquina de Turing
- Um pouco da história de Alan Turing foi contada no filme "O Jogo da Imitação"

Programa

Programa é uma sequência de ordens (comandos, instruções) dadas a um computador que, a partir de dados inseridos, obtêm um resultado que será disponibilizado por algum dispositivo de saída

Representação gráfica de funções

Em diferentes áreas da Ciência busca-se modelar fenômenos por meio de funções matemáticas a fim de reproduzir os comportamentos observados na natureza.

Dado um modelo, muitas vezes, temos a necessidade de visualizar o comportamento seu comportamento.

Gráficos de funções auxiliam o entendimento desses fenômenos.

Funções

O estudo de funções decorre da necessidade de:

- Analisar fenômenos, visualizando o comportamento de um sistema.
- Interpretar interdependências, entendendo como uma variável comporta-se com relação à outra.
- Encontrar soluções de problemas.
- Descrever regularidades.
- Generalizar.
-

Funções

Uma função é uma regra segundo a qual, para cada elemento x em um conjunto A corresponde um único elemento y em um conjunto B .

O conjunto A é chamado domínio da função e o conjunto B é o contra-domínio, ou imagem.

$$y = f(x)$$

A variação de y é o conjunto de todos os valores possíveis de $f(x)$ quando x varia em todo o domínio.

Representação de funções

Uma função pode ser representada das seguintes formas:

- Verbalmente (descrevendo-a com palavras)
- Numericamente (através de tabela de valores)
- Visualmente (através de gráficos)
- Algebricamente (utilizando-se uma fórmula explícita)

Ferramentas de visualização

Existem diversas ferramentas para utilizadas em calculos matemáticos avançados:

- Matlab
- Maple
- Octave
- **Scilab**
- R (r-project)
- SciPy (python)
- Fortran

Geralmente contam com bibliotecas de funções matemáticas prontas e recursos avançados.

Scilab

É um software utilizado para resolução de problemas numéricos.

- É gratuito e distribuído com código fonte.
- Permite trabalhar com diversos objetos matemáticos (matrizes, polinômios, equações, etc.)
- Ambiente de programação que permite a criação de novas funções/bibliotecas do usuário
- www.scilab.org

Scilab

A interação do usuário com o Scilab pode ocorrer de duas formas distintas:

Na primeira forma, os comando são digitados diretamente no prompt do Scilab.

- Ao ser pressionada a tecla Enter, os comandos digitados são interpretados e imediatamente executados
- O Scilab funciona como uma sofisticada calculadora

Na segunda forma, um conjunto de comandos é digitado em um arquivo texto:

- Este arquivo, em seguida, é levado para o ambiente Scilab e executado
- Neste modo, o Scilab funciona como um ambiente de programação

Scilab

Digitando o comando

```
x = 2;
```

estaremos criando uma variável real chamada `x` cujo valor é igual a 2.

O ponto-e-vírgula ao final da instrução **não é obrigatório.**

Caso ele não seja colocado, o valor da variável será **apresentada na tela.**

Scilab - Exemplos

Definir `y` como sendo uma variável com valor de `x` mais 5, ou seja, `y` terá um valor igual a 7

```
y = x+5;
```

Definir `z` como a multiplicação dos de `x` e `y`, ou seja, `z` será igual a 14

```
z = x*y;
```

Definir `w` como sendo a divisão de `z` e `x`, ou seja, `w` será igual a 7

```
w = z/x;
```

Definir `l` como sendo uma lista com os números de 1 a 5, ou seja, `l` contém os valores 1, 2, 3, 4 e 5 armazenados como uma lista de números

```
l = [1,2,3,4,5];
```

Scilab

Além dos operadores acima, o Scilab possui várias funções matemáticas que podem ser facilmente utilizadas, como por exemplo:

```
log(16);  
log10(16);  
exp(-2);  
sqrt(4);  
sin(x);  
cos(x);
```


Criando gráficos com o Scilab

Vamos considerar a função: $y = x^2$

Vamos criar seu gráfico nos pontos 1, 2, 3, 4 e 5

```
x = [1,2,3,4,5,6];  
y = x.^2;  
plot (x,y);
```

Como `x` é uma lista, devemos usar o operador `.^` para calcular o quadrado de cada elemento de `x`

Criando gráficos com o Scilab

Vamos alterar algumas propriedades do gráfico:

```
clf()  
  
x = [1,2,3,4,5,6];  
  
y = x.^2;  
  
plot (x,y, 'ro-')
```

`clf()` limpa a tela gráfica, evitando que o próximo gráfico sobreponha-se ao anterior

Criando gráficos com o Scilab

Vamos alterar algumas propriedades do gráfico, e ampliar a faixa dos valores de `x` :

```
clf()  
  
x = [-6,-5,-4,-3,-2,-1,0,1,2,3,4,5,6];  
  
y = x.^2  
  
plot (x,y, 'bx-')
```

Criando gráficos com o Scilab

Vamos alterar algumas propriedades do gráfico, e ampliar a faixa dos valores de `x`:

```
x = -100:0.1:100;  
-->y = x.^2  
-->plot (x,y, 'gs-')
```

`length(x)` e `length(y)` retornam o tamanho (número de elementos) das listas `x` e `y`

Exemplo 1

Vamos considerar a função $y = \sin(x)$ no intervalo $x \in [0; 2\pi]$

Existem duas formas para se definir os valores do domínio:

- Definindo diretamente os pontos x nos quais queremos plotar a função.
- Definindo um intervalo de valores de x no qual queremos plotar a função.

Exemplo 1

```
x = primeiro valor : passo: último valor
```

Tal instrução criará um vetor `x` cujo primeiro valor será igual ao `primeiro valor` do intervalo.

O segundo valor será dado pelo valor anterior somado ao valor do `passo`.

Isto irá se repetir até que o valor da soma seja igual ou menor do que o `último valor` do intervalo.

Exemplo 1

Vamos considerar a função $y = \sin(x)$ no intervalo $x \in [0; 2\pi]$

Veja o exemplo com passo 1

```
x = 0:1:2*%pi  
y = sin(x)  
plot (x,y, 'gs-')
```

Exemplo 1

Vamos considerar a função $y = \sin(x)$ no intervalo $x \in [0; 2\pi]$

Agora com passo 0.1:

```
x = 0:0.1:2*%pi  
y = sin(x)  
plot (x,y, 'gs-')
```


Nomes nos eixos e título

Para colocar **nomes nos eixos** dos gráficos podemos usar:

```
xlabel('nome do eixo x');  
ylabel('nome do eixo y');  
title('Título do gráfico');
```

Exemplo 2

Destacar as raízes da função

$$y = x^2 - 5x + 6$$

cujas raízes são $x = 2$ e $x = 3$

```
x = 1:0.01:4;  
y = x.^2 - 5.*x + 6;  
plot(x,y)
```

```
plot(2,0,'r*')  
plot(3,0,'g*')
```

Exemplo 3

Desenhe o gráfico da função

$$y = \frac{x}{1 + x^2}$$

no intervalo $x \in [0; 40]$

```
x=0:0.1:40;  
y = x./(1+x.^2);  
plot(x,y);
```

Exemplo 4

Desenhe o gráfico da função

$$y = e^{\frac{-x^2}{200}} \sin(x)$$

no intervalo $x \in [0; 100]$

```
x = 0:0.01:100;  
y = exp(-x.^2/200).*sin(x);  
plot (x,y);
```

Exemplo 5 - Gráfico 3D

Desenho o gráfico da função

$$z = 9 - (x^2 + y^2)$$

```
d = [-3:0.1:3];  
[x,y] = meshgrid (d);  
z = sin(x) .* cos(y);  
plot3d(d,d,z)
```

Atividade 2

Faça gráficos de x versus y para as funções:

a) $y = x^3 - 20x^2 + 10x - 1$, para x na faixa de -20 até 30 , com passo 1

b) $y = \sin(x^2) + \cos(x^2)$, para x na faixa de -2π até 2π , com passo de $\frac{\pi}{100}$

c) $y = e^{\cos(\frac{1}{x})}$, para x na faixa de $-\pi$ até π , com passo de $\frac{\pi}{100}$;

d) $x = 16 \sin^3(t)$, e

$y = 13 \cos(t) - 5 \cos(2t) - 2 \cos(3t) - \cos(4t)$, para t na faixa de -2π até 2π , com passo 0.1 (observe que x e y são definidos em função de t).

Semana 1 - Atividade 2

Deve submeter ao Tidia-ae um documento PDF (mini-relatório) contendo:

- Nome completo, RA e turma.
- A sequência de instruções em Scilab para desenhar cada função
- Um screenshot da figura (cópia da tela) que mostre a correta visualização da figura.

A atividade deve ser enviado pelo Tidia-ae até as 23h50 do dia **11/Junho**.