Introducción a python para computación numérica I

Utilizando unos ejemplos, vamos a repasar varios conceptos python e introducir módulos específicos de computación numérica:

- Módulos python para computación numérica: numpy y matplotlib
- Vectorización
 - <u>Funciones matemáticas elementales</u> numpy
 - Funciones lambda
 - <u>Ejemplos de construción de arrays numpy unidimensionales:</u> linspace, zeros_like, ones like
- Gráfica de una función de una variable
 - Funciones python usando def
- Series de Taylor
 - Bucles for
 - Bucles while
 - <u>Los operadores</u> +=, *=, -= y /=
 - Operadores lógicos and, or, not
 - Animación
 - <u>Ejercicio 1</u>
 - Ejercicio 2
- <u>Ejercicios propuestos</u>

Importamos los módulos matplotlib.pyplot , numpy y time

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import time
```

Vectorización

Definimos la función $f(x)=e^x$ como función lambda

```
f = lambda x: np.exp(x)
```

Y un vector que contiene 300000 de elementos equiespaciados en el intervalo [-10, 10]

```
x = np.linspace(-10,10,300000)
```

Vamos a ver tres formas de construir un vector que contenga los valores de la función f en los puntos de x.

Recordemos la sintaxis de un bucle for

```
for i in range(4):
    print(i)

0
1
2
3
```

Empezamos con un vector de dimensión cero y vamos a ir añadiéndole términos con np.append . Medimos el tiempo que tarda en rellenar el vector usando la diferencia entre el tiempo de máquina al principio y al final del bucle y lo almacenamos en t1

```
y = np.array([])

t = time.time()
for i in range(len(x)):
    y = np.append(y,f(x[i]))
t1 = time.time() - t
```

Ahora vamos a reservar espacio de memoria creando un vector de ceros de la misma forma y dimensión que \mathbf{x} y rellenamos los elementos uno a uno

```
y = np.zeros_like(x)

t = time.time()
for i in range(len(x)):
    y[i] = f(x[i])
t2 = time.time() - t
```

Y, finalmente, usamos la capacidad de **vectorización** del numpy : sus funciones (y la función lambda lo es) pueden trabajar en bloque para arrays numpy.

```
t = time.time()
y = f(x)
t3 = time.time() - t
```

Comparamos los tiempos de ejecución

```
print('Vector creciendo dentro del bucle: ', t1,' segundos')
print('Sin vectorización: ', t2,' segundos')
print('Con vectorización: ', t3,' segundos')
print('t1/t2 = ', int(t1/t2))
print('t2/t3 = ', int(t2/t3))
print('t1/t3 = ', int(t1/t3))
```

```
Vector creciendo dentro del bucle: 36.80423879623413 segundos Sin vectorización: 0.48811888694763184 segundos Con vectorización: 0.002482891082763672 segundos t1/t2 = 75 t2/t3 = 196 t1/t3 = 14823
```

Vemos que hemos hemos ejecutado las opciones de peor a mejor. Por lo tanto, evitaremos, en la medida de lo posible, hacer crecer un vector dentro de un bucle y usaremos vectorización.

Gráfica de una función de una variable

La función plot del módulo matplotlib.pyplot dibuja la función aproximada. Sustituye el dibujo de la función por el dibujo de una poligonal de puntos de la función. Veamos un ejemplo:

Definimos la función a dibujar $f(x)=e^x$

```
f = lambda x: np.exp(x)
```

Decidimos el intervalo $\left[a,b\right]$ en el que vamos a crear la función

```
a = -1.; b = 1.
```

Creamos una malla de 5 puntos equiespaciados en el intervalo $\left[a,b\right]$ que se almacena en un array numpy

```
x = np.linspace(a,b,5)
print(x)
```

```
[-1. -0.5 0. 0.5 1.]
```

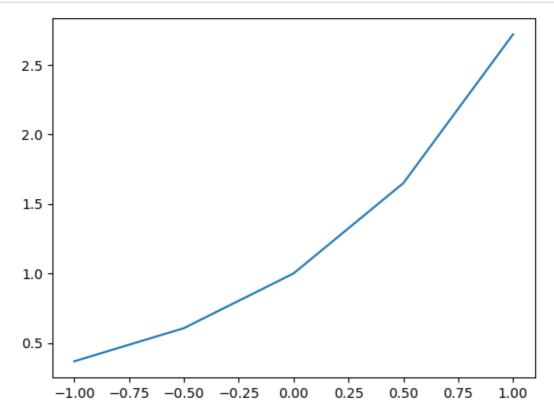
Obtenemos el array numpy correspondiente a las ys

```
y = f(x)
print(y)
```

[0.36787944 0.60653066 1. 1.64872127 2.71828183]

Dibujamos la función

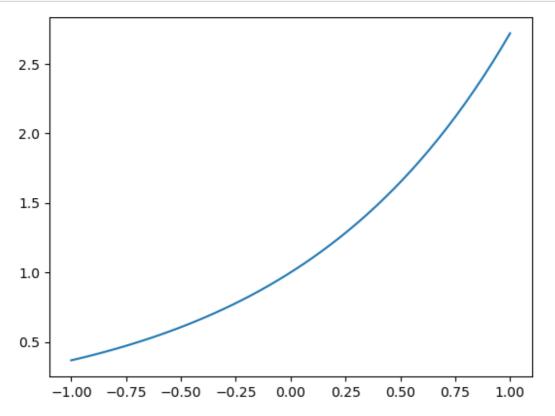
```
plt.figure()
plt.plot(x,y)
plt.show()
```



Con solo 5 puntos la aproximación es muy basta. Por defecto, linspace crea una malla de 50 puntos. Repitamos el proceso con 50 puntos.

```
x = np.linspace(a,b)
y = f(x)

plt.figure()
plt.plot(x,y)
plt.show()
```



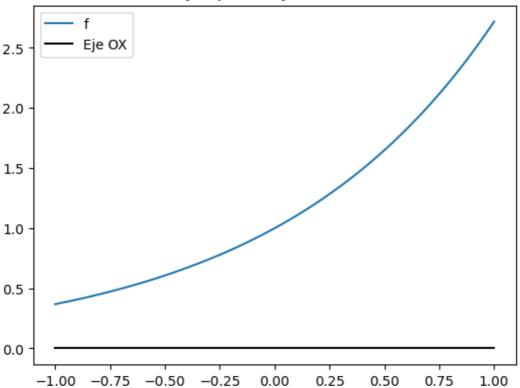
Sigue siendo una poligonal, pero ahora el mallado es lo suficiente fino para que dé la impresión de ser una curva suave.

Añadamos algunos detalles al dibujo:

```
OX = 0*x
eje OX

plt.figure()
plt.plot(x,y, label = 'f')
plt.plot(x,OX,'k', label = 'Eje OX') # k, de "black" para que nos dibuje el eje O
X en negro
plt.title('Ejemplo dibujo función f') # usando los "label", añade una leyenda
plt.legend()
plt.show()
```





Polinomio de Taylor

Si desarrollamos en serie de McLaurin (polinomio de Taylor centrado en $x_0=0$) la función $f(x)=e^x$ tenemos

$$e^x = 1 + rac{x^1}{1!} + rac{x^2}{2!} + rac{x^3}{3!} + rac{x^4}{4!} + rac{x^5}{5!} + \cdots$$

y, teóricamente, añadiendo suficientes términos podemos aproximar la función tanto como gueramos. De hecho cada uno de los polinomios

$$egin{array}{lll} P_0(x) &=& 1 \ P_1(x) &=& 1+rac{x^1}{1!} \ P_2(x) &=& 1+rac{x^1}{1!}+rac{x^2}{2!} \ P_3(x) &=& 1+rac{x^1}{1!}+rac{x^2}{2!}+rac{x^3}{3!} \ P_4(x) &=& 1+rac{x^1}{1!}+rac{x^2}{2!}+rac{x^3}{3!}+rac{x^4}{4!} \end{array}$$

aproxima mejor la función que el anterior. Calculemos el valor del polinomio de grado 3 en $x_0=0.5$. Para ello recordemos que $x_0^0=1$ y que 0!=1

```
x0 = 0.5
polinomio = 0.
factorial = 1.

for i in range(4):
    sumando = x0**i/factorial
    polinomio += sumando
    factorial *= i+1

print('P3(0.5) = ', polinomio)
print('np.exp(0.5) = ', np.exp(x0))
```

Si convertimos el programa en función y probamos un polinomio de grado mayor

```
def P(x0,grado):
    polinomio = 0.
    factorial = 1.

for i in range(grado+1):
        sumando = x0**i/factorial
        polinomio += sumando
        factorial *= i+1

return polinomio
```

```
print('P(0.5, 10) = ', P(0.5, 10))
print('np.exp(0.5) = ', np.exp(0.5))
```

```
P(0.5, 10) = 1.6487212706873655

np.exp(0.5) = 1.6487212707001282
```

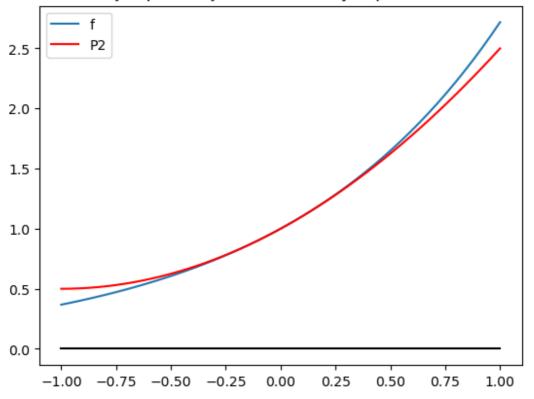
Si ahora introducimos un array numpy, la salida es también un array numpy

Si en lugar de 5 puntos, hacemos esto con 50 puntos, podremos dibujar el polinomio. Dibujemos el polinomio de grado 2 con línea roja, junto con la función.

```
a = -1.; b = 1.
f = lambda x: np.exp(x)
x = np.linspace(a,b)
OX = 0*x

plt.figure()
plt.plot(x,f(x), label = 'f')
plt.plot(x,OX,'k')
plt.plot(x,P(x,2),'r', label = 'P2')
plt.title('Ejemplo dibujo de la función y el polinomio')
plt.legend()
plt.show()
```

Ejemplo dibujo de la función y el polinomio



Y ahora, cambiemos el intervalo a $\left[-3,3\right]$ y dibujemos, usando un bucle, varios polinomios

```
a = -3.; b = 3.
f = lambda x: np.exp(x)
x = np.linspace(a,b)
y = f(x)

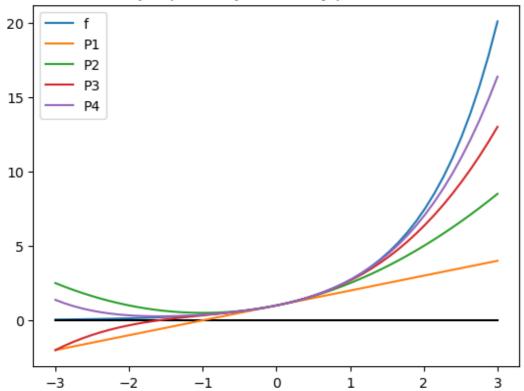
OX = 0*x

plt.figure()
plt.plot(x,y, label = 'f')
plt.plot(x,OX,'k')

for grado in range(1,5):
    plt.plot(x,P(x,grado), label = 'P'+str(grado))

plt.title('Ejemplo dibujo función y polinomios')
plt.legend()
plt.show()
```

Ejemplo dibujo función y polinomios



Añadiendo una línea (plt.pause(1)) podemos hacer una pequeña animación por pantalla usando spyder. Para ello:

- Abrir spyder.
- En el menú:
 - *Español:* Herramientas \rightarrow Preferencias \rightarrow Terminal IPython \rightarrow Gráficas \rightarrow Salida Gráfica \rightarrow Salida: \rightarrow Automática.
 - *Inglés:* Tools \rightarrow Preferences \rightarrow IPython Console \rightarrow Graphics \rightarrow Graphics backend \rightarrow Backend: \rightarrow Automatic.
- Reiniciamos spyder.
- Copiamos y ejecutamos el código de debajo.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
#%-----
def P(x0,grado):
   polinomio = 0.
   factorial = 1.
   for i in range(grado+1):
       sumando = x0**i/factorial
       polinomio += sumando
       factorial *= i+1
   return polinomio
#%-----
f = lambda x: np.exp(x)
a = -3.; b = 3.
x = np.linspace(a,b)
y = f(x)
0X = 0*x
plt.figure()
plt.plot(x,y, label = 'f')
plt.plot(x,0X,'k')
for grado in range(1,7):
   plt.plot(x,P(x,grado), label = 'P'+str(grado))
   plt.title('Ejemplo dibujo de la función y los polinomios')
   plt.legend()
   plt.pause(1)
plt.show()
```

Otra estructura de control es while

```
i = 0
while i < 5:
    print(i)
    i += 1</pre>
0
1
2
3
4
```

Ejercicio 1

Utilizando un bucle while, escribir un programa, que utilizando el desarrollo de McLaurin para la función $f(x)=e^x$, calcule su valor aproximado en el punto $\mathbf{x0}=\mathbf{-0.4}$. El criterio de parada será que el valor del último sumando añadido **en valor absoluto** es menor que una tolerancia $\mathbf{tol=1.e-8}$ y que el número máximo de sumandos es 100, es decir $\mathbf{maxNumSum=100}$. Comparar su valor con el valor de la función \mathbf{lambda} f. Dar el número de sumandos utilizados.

Nota:

- Usar algún operador lógico and, or, not, para la condición del while.
- El valor absoluto de un número real a puede obtenerse con np.abs(a)
- Recordamos que el desarrollo de McLaurin para la función $f(x)=e^x$ es

$$e^x = 1 + rac{x^1}{1!} + rac{x^2}{2!} + rac{x^3}{3!} + rac{x^4}{4!} + rac{x^5}{5!} + \cdots$$

```
%run Ejercicio1.py
```

```
Valor de la función en -0.4 = 0.6703200460356393
Valor de la aproximación en -0.4 = 0.67032004600776
Número de iteraciones = 10
```

Ejercicio 2

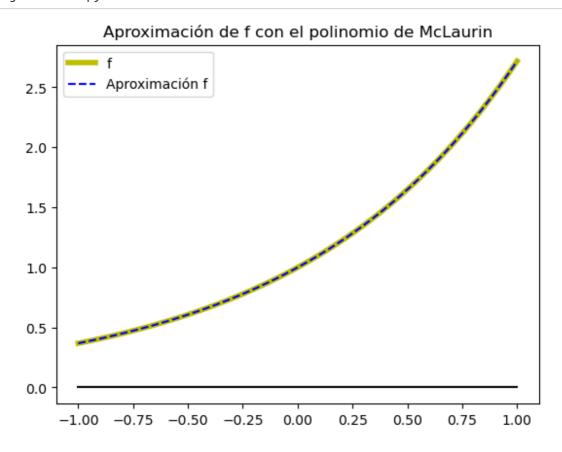
Modificar el programa de forma que calcule simultáneamente la aproximación de la función de los 50 valores contenidos en $\mathbf{x} = \mathbf{np.linspace(-1,1)}$. El criterio de parada será ahora que, el máximo del último sumando en valor absoluto (ahora tenemos 50 x_0 distintas y 50 últimos sumandos distintos), sea menor que que una tolerancia $\mathbf{tol=1.e-8}$ y que el número máximo de sumandos es 100, $\mathbf{maxNumSum=100}$.

Convertir este programa en una función funExp(x, tol, maxNumSum) cuyos argumentos de entrada sean el array numpy x que contiene los 50 valores, tol y maxNumSum y cuyo argumento de salida sea un array numpy y que contenga los valores aproximados de la función obtenidos con el polinomio de McLaurin. Utilizar esta función para dibujar la función. Dibujar también la función utilizando la función lambda f definida a partir de np.exp(x)

Notas:

- np.max(np.abs(sumando)) nos da el valor máximo de los valores absolutos de los valores contenidos en un array numpy llamado sumando.
- Para dibujar una línea gruesa amarilla plt.plot(x,y,'y', linewidth = 4)
- Para dibujar una línea azul discontinua plt.plot(x,y,'b--')

%run Ejercicio2.py



Ejercicios propuestos

Ejercicio 3

Utilizando un bucle while, escribir un programa, que utilizando el desarrollo de McLaurin para la función $f(x) = \sin(x)$, calcule su valor aproximado en el punto x0 = np.pi/4. El criterio de parada será que el valor del último sumando añadido en valor absoluto es menor que una tolerancia tol=1.e-8 y que el número máximo de sumandos es 100, es decir $\max \text{NumSum} = 100$. Comparar su valor con el valor de la función lambda f. Dar el número de sumandos utilizados.

Nota:

- Usar algún operador lógico and, or, not, para la condición del while.
- Recordamos que el desarrollo de McLaurin para la función $f(x) = \operatorname{sen}(x)$ es

$$\operatorname{sen}(x) = \frac{x^1}{1!} - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots$$

%run Ejercicio3.py

Valor aprox = 0.7071067811796194 Valor exacto = 0.7071067811865475

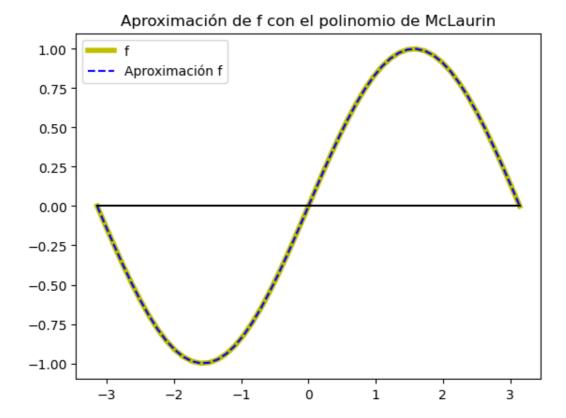
Número de iteraciones = 6

Ejercicio 4

Modificar el programa del ejercicio anterior de forma que calcule simultáneamente la aproximación de la función de los 50 valores contenidos en $\mathbf{x} = \mathbf{np.linspace}(-\mathbf{np.pi,np.pi})$. El criterio de parada será ahora que, el máximo del último sumando en valor absoluto (ahora tenemos 50 x_0 distintas y 50 últimos sumandos distintos), sea menor que que una tolerancia $\mathbf{tol=1.e-8}$ y que el número máximo de sumandos es 100, $\mathbf{maxNumSum=100}$.

Convertir este programa en una función funSin(x, tol, maxNumSum) cuyos argumentos de entrada sean el array numpy x que contiene los 50 valores, tol y maxNumSum y cuyo argumento de salida sea un array numpy y que contenga los valores aproximados de la función obtenidos con el polinomio de McLaurin. Utilizar esta función para dibujar la función. Dibujar también la función utilizando la función lambda f definida a partir de np.sin(x)

%run Ejercicio4.py



Ejercicio 5

Teniendo en cuenta que el desarrollo de McLaurin de la función seno hiperbólico es la serie

$$\sinh x = \frac{x^1}{1!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} + \cdots$$

el coseno hiperbólico

$$\cosh x = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} + \cdots$$

y que la tangente hiperbólica es

$$\tanh = \frac{\sinh x}{\cosh x}$$

calcular la tangente hiperbólica de $x_0=0.5$ a partir de los desarrollos del senh y el cosh, usando el mismo número de términos (sumandos en el numerador y en el denominador). En el paso uno, usa un término para cada desarrollo, en el paso dos, dos sumandos y así sucesivamente. Parar cuando la diferencia en valor absoluto entre dos aproximaciones sucesivas de la tangente hiperbólica sea menor que 10^{-4} .

%run Ejercicio5.py

Valor aprox = 0.4621171922898218 Valor exacto = 0.46211715726000974

Ejercicio 6

Modificar el programa del ejercicio anterior de forma que calcule simultáneamente la aproximación de la función de los 50 valores contenidos en x = np.linspace(-3,3). El criterio de parada será ahora que, la máxima diferencia entre dos iteraciones consecutivas para todos los puntos (ahora tenemos 50 puntos distintos), sea menor que que una tolerancia tol=1.e-8.

Convertir este programa en una función funTanh(x, tol) cuyos argumentos de entrada sean el array numpy x que contiene los 50 valores, tol y cuyo argumento de salida sea un array numpy y que contenga los valores aproximados de la función obtenidos con el polinomio de McLaurin. Utilizar esta función para dibujar la función. Dibujar también la función utilizando la función lambda f definida a partir de np.tanh(x)



