Minicurso 1 – Matemática Computacional em Python.

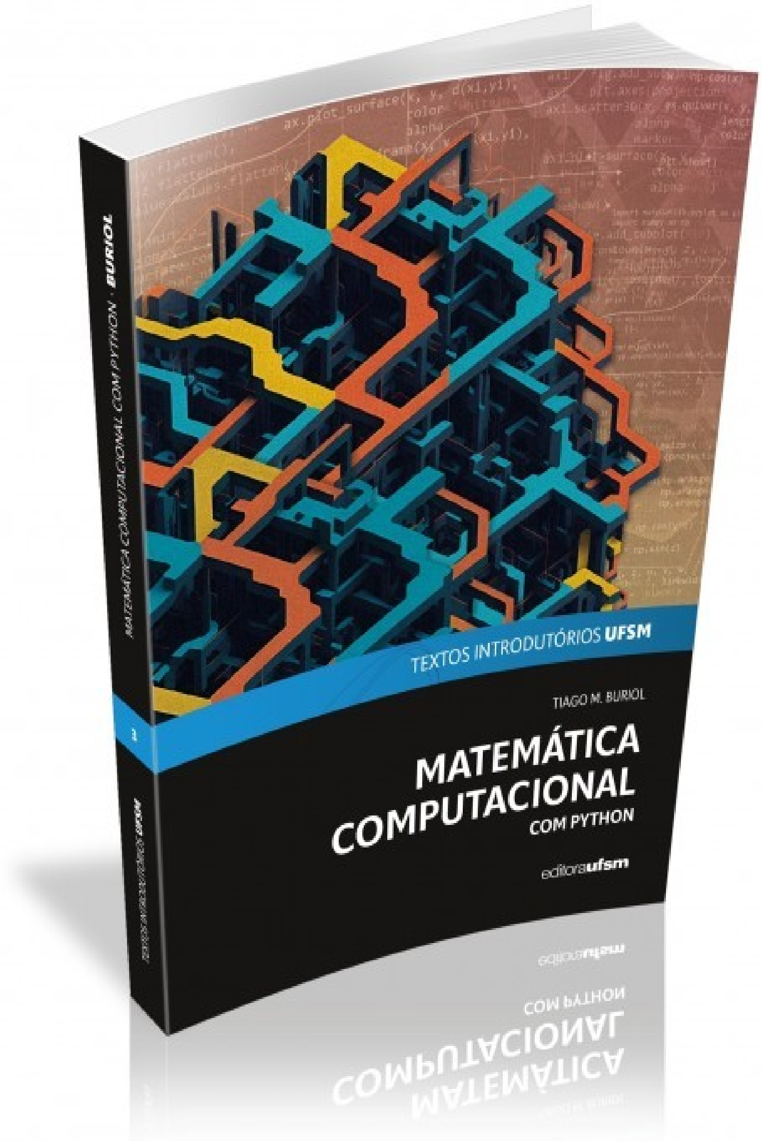
Prof. Dr. Tiago Buriol (UFSM)

MATEMÁTICA COMPUTACIONAL

COM PYTHON

editoraufsm

UFSM
Pró-Reitoria de Graduação


MATEMÁTICA COMPUTACIONAL COM PYTHON · BURIOL
TEXTOS INTRODUTÓRIOS UFSM
TIAGO M. BURIOL
MATEMÁTICA COMPUTACIONAL
COM PYTHON
editoraufsm

Sumário

Interpolação polinomial

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$$

$$P_n(x) = a_0 + x\Big(a_1 + x\Big(a_2 + x\Big(\ldots a_{n-2} + x\left(a_{n-1} + x a_n\right)\ldots\Big)\Big)\Big)$$

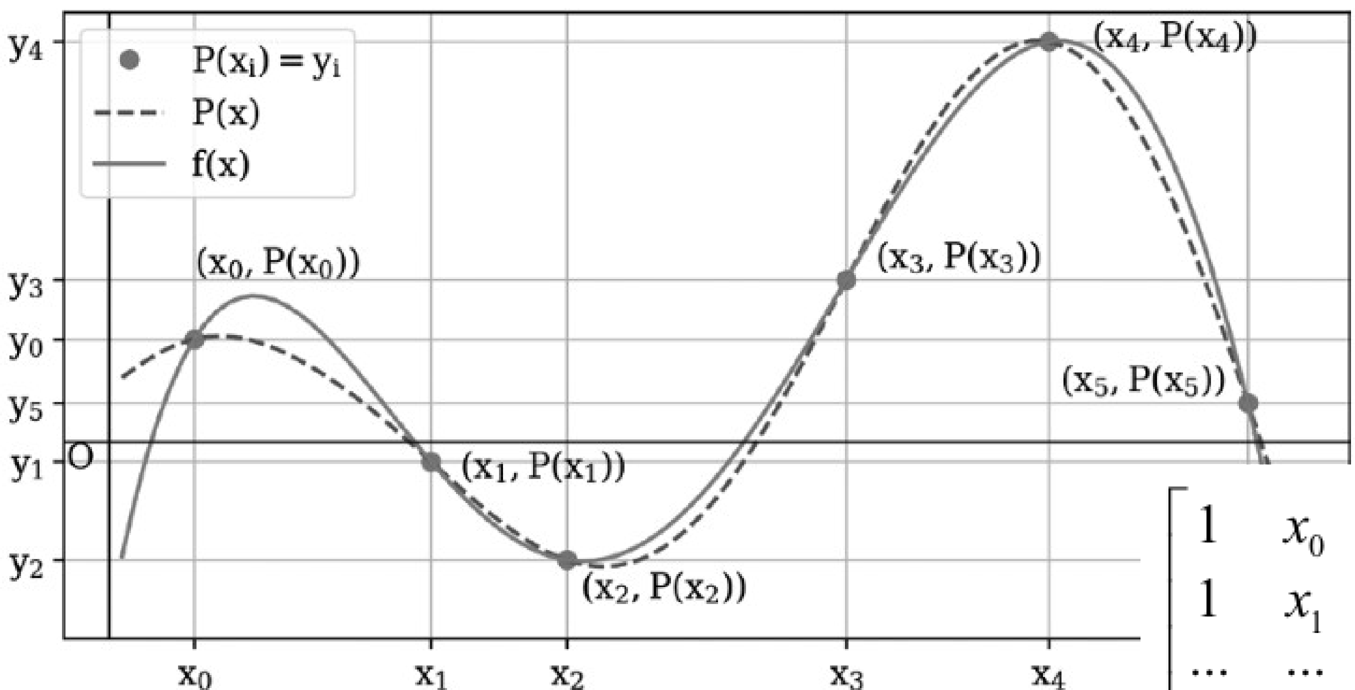
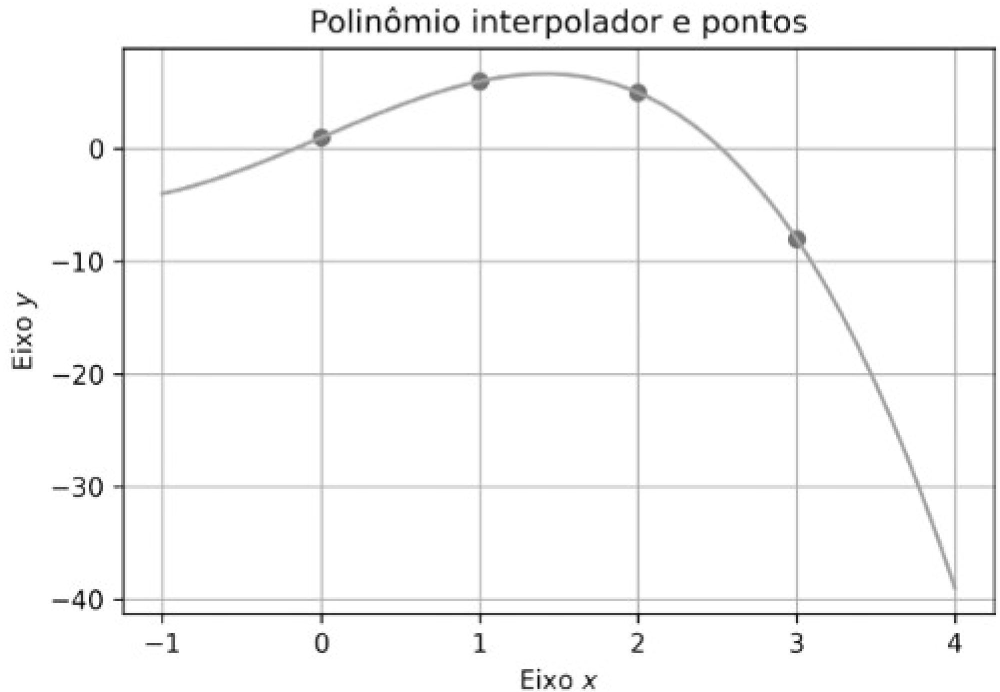


Figura 3.1: Polinômio interpolador

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \ldots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \ldots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Exemplo 3.2: Considere o problema de encontrar um polinômio interpolador para o conjunto de pontos $\{(0,1), (1,6), (2,5), (3,-8)\}$. Como o conjunto tem quatro pontos, o polinômio interpolador deve ser da forma $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$, o que nos leva ao sistema linear

$$\begin{cases} a_0 = 1 \\ a_0 + a_1 + a_2 + a_3 = 6 \\ a_0 + 2a_1 + 4a_2 + 8a_3 = 5 \\ a_0 + 3a_1 + 9a_2 + 27a_3 = -8 \end{cases} \longrightarrow \quad a_0 = 1,\ a_1 = 6,\ a_2 = 0 \text{ e } a_3 = -1$$



Fórmula interpolatória de Lagrange

$f(x)$ definida em $x_0, x_1, \ldots, x_n$, $(n+1)$ pontos distintos

$$\boxed{P(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k L_k(x) \quad \text{com} \quad L_k(x) = \prod_{j=0,\, j\neq k}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}}$$

se $x_{i+1} - x_i = h$ é possível fazer uma mudança de variável $u = (x - x_0)/h$

a fórmula de Lagrange fica

$$\boxed{P(u) = \sum_{k=0}^{n} y_k L_k(u) \ \text{com} \ L_k(u) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{(u - j)}{(k - j)}}$$

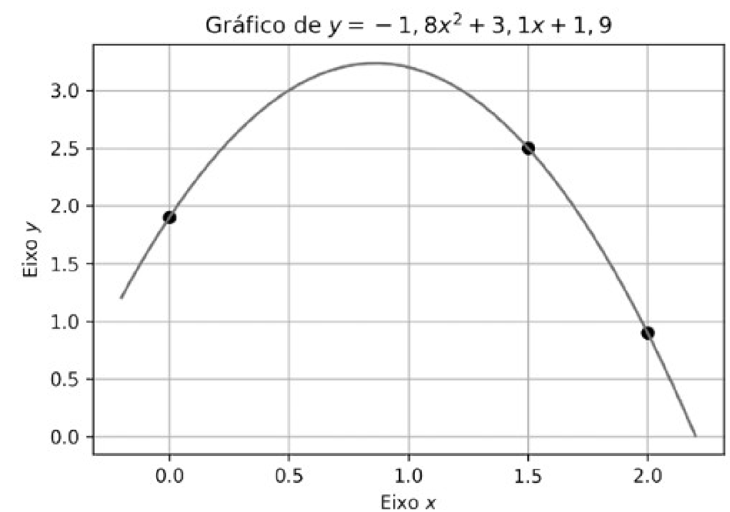
Exemplo 3.3: Considere a função $f(x)$ definida nos pontos tabelados. Determine o polinômio interpolador, usando a fórmula de Lagrange, e estime $f(0{,}9)$.

x	0,0	1,5	2,0
$y=f(x)$	1,9	2,5	0,9

$$L_0=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}=\frac{(x-1{,}5)(x-2{,}0)}{(0{,}0-1{,}5)(0{,}0-2{,}0)}=\frac{x^2-3{,}5x+3{,}0}{3{,}0}$$

$$L_1=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}=\frac{(x-0{,}0)(x-2{,}0)}{(1{,}5-0{,}0)(1{,}5-2{,}0)}=\frac{x^2-2x}{-0{,}75}$$

$$L_2=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}=\frac{(x-0{,}0)(x-1{,}5)}{(2{,}0-0{,}0)(2{,}0-1{,}5)}=\frac{x^2-1{,}5x}{1{,}0}$$

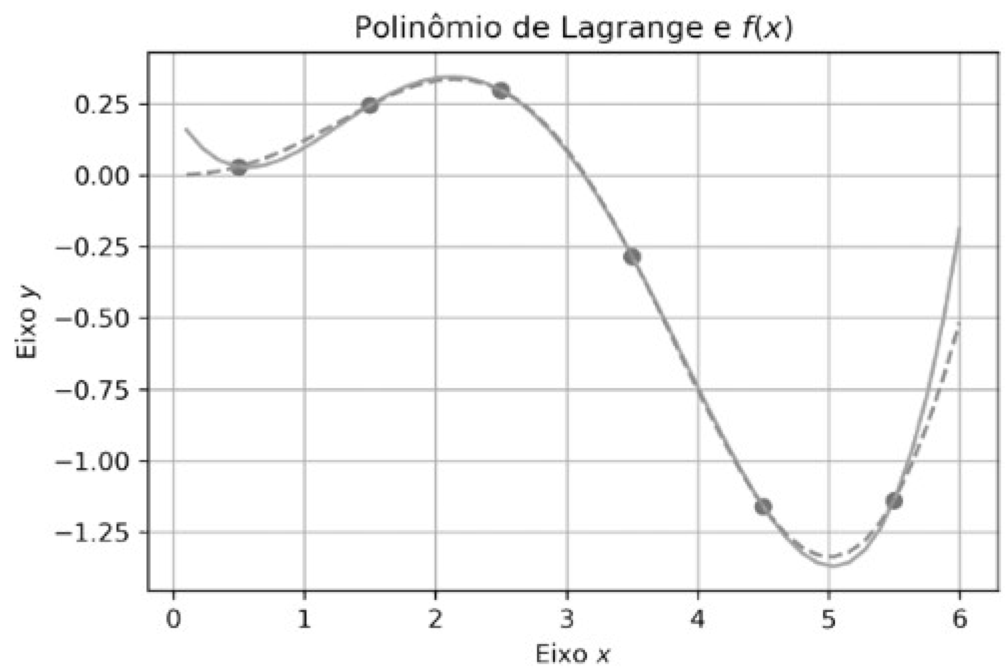


Assim,

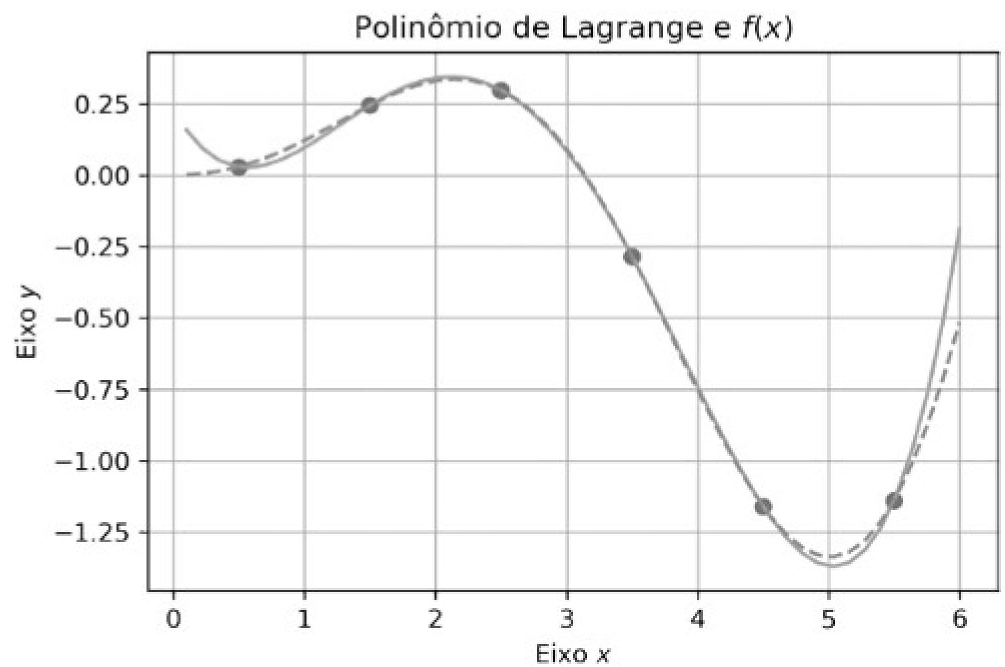
$$P(x)=1{,}9\left(\frac{x^2-3{,}5x+3{,}0}{3{,}0}\right)+2{,}5\left(\frac{x^2-2x}{-0{,}75}\right)+0{,}9\left(\frac{x^2-1{,}5x}{1{,}0}\right)$$

$$=-1{,}8x^2+3{,}1x+1{,}9.$$

Exemplo 3.4: Considere a função $f(x)=\dfrac{0,2x^2 sen(x)}{ln\left[(1+x)^2\right]}$ definida em seis pontos igualmente espaçados, tais que $x_0=0,5$ e $x_5=5,5$. Vamos usar a função `calculaP` do exemplo 3.3 para obter os pontos e plotar o gráfico do polinômio interpolador de Lagrange, juntamente com o gráfico da função e os pontos utilizados.

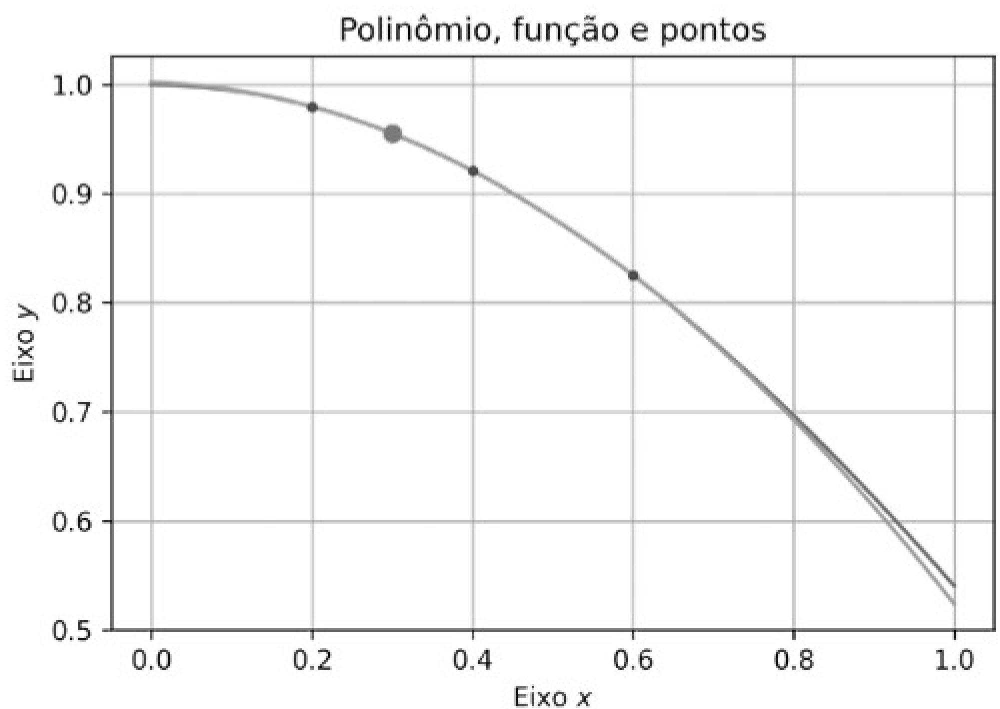


Exemplo 3.4: Considere a função $f(x)=\dfrac{0,2x^2 sen(x)}{ln\left[(1+x)^2\right]}$ definida em seis pontos igualmente espaçados, tais que $x_0 = 0,5$ e $x_5 = 5,5$. Vamos usar a função `calculaP` do exemplo 3.3 para obter os pontos e plotar o gráfico do polinômio interpolador de Lagrange, juntamente com o gráfico da função e os pontos utilizados.



Exemplo 3.5: Considere a função $f(x)=\cos(x)$. Obtenha uma aproximação para $f(0,3)$ usando um polinômio de grau 2 com $x_0=0,2$ e $h=0,2$. Plote o gráfico.

```
0.9551537603289194
```



Fórmula de Newton

$$P(x) = f[x_0] + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2] + \ldots$$
$$\ldots + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1}) f[x_0, \ldots, x_n]$$

em que $f[x_0]$, $f[x_0, x_1]$,..., $f[x_0, \ldots, x_n]$ são as **diferenças divididas**, definidas conforme é mostrado a seguir.

Diferença dividida de ordem 0:

$$f[x_i] = f(x_i), i = 0, 1, \ldots, n$$

Diferença dividida de ordem 1:

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}, i = 0, 1, \ldots, n-1$$

Diferença dividida de ordem n:

$$f[x_0, \ldots, x_n] = \frac{f[x_1, \ldots, x_n] - f[x_0, \ldots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

Exemplo

xi	1	2	4	5	8
f(xi)	1,00	0,50	0,25	0,20	0,125

x_i	$f[x_i]$	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_i, \ldots, x_{i+2}]$	$f[x_i, \ldots, x_{i+3}]$	$f[x_i, \ldots, x_{i+}$
1	1	- 0,5	0,0125	- 0,025	0,003125
2	0,5	- 0,0125	0,025	- 0,003125	
4	0,25	- 0,05	0,00625		
5	0,2	- 0,025			
8	0,125				

Uma vez calculadas as diferenças divididas, usa-se o seguinte método recursivo para avaliar o polinômio em um determinado valor de x:

$$P_0(x) = f[x_0,\ldots,x_n]$$

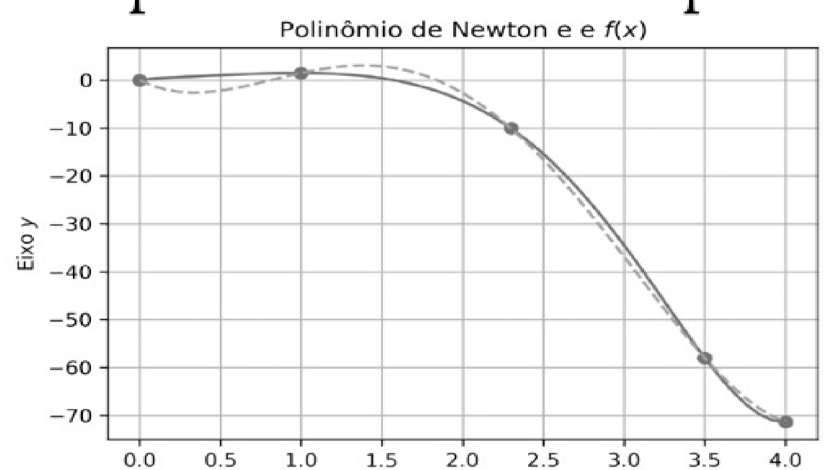
$$P_1(x) = f[x_0,\ldots,x_{n-1}] + (x - x_{n-1})P_0(x)$$

$$P_2(x) = f[x_0,\ldots,x_{n-2}] + (x - x_{n-2})P_1(x)$$

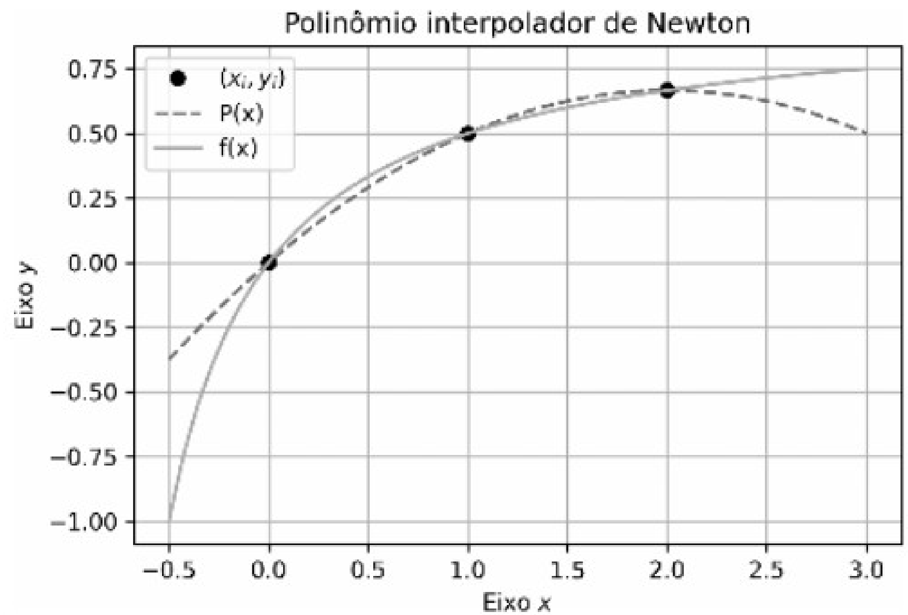
$$\vdots$$

$$P_n(x) = f[x_0] + (x - x_0)P_n(x)$$

Exemplo 3.7: Seja a função $f(x) = e^x cos(x)\sqrt{x}$ tabelada nos pontos $x_0 = 0{,}0$, $x_1 = 1{,}0$, $x_2 = 2{,}3$, $x_3 = 2{,}5$ e $x_4 = 4{,}0$. Vamos usar a fórmula interpolatória de Newton para obter o gráfico



Exemplo 3.8: Considere a função $f(x)=\dfrac{x}{(x+1)}$ tabelada nos pontos $x_0=0,0$, $x_1=1,0$ e $x_2=2,0$. Plote o polinômio interpolador obtido usando a fórmula de Newton e aproxime $f(1,3)$.



A biblioteca SciPy para computação científica em Python possui diversos algoritmos para interpolação uni e multidimensional, incluindo *splines*, métodos de Lagrange e métodos baseados em série de Taylor.

Exercícios

1) Encontre polinômios interpoladores para as funções (a) $ln(x+1)$, (b)$\sqrt{1+x}$ e (c)$e^{2x}cos(3x)$ no intervalo de $x_0 = 1$ até $x_n = 3$ com três, quatro e cinco pontos escolhidos arbitrariamente no intervalo.

2) Considere a função

$$f(x) = \frac{3,21}{0,73 + 9,81x^2}$$

a) Aproxime o valor de $f(1,78)$ usando um polinômio interpolador de grau 3 no intervalo [1,2] e compare com o valor da função. Mostre o gráfico do polinômio e da função nesse intervalo.

b) Repita o item anterior, mas desta vez utilize um polinômio de grau 10 no intervalo [-2,2] e comente o que você observou.

c) Pesquise e responda: o que é fenômeno de Runge?

Soluções de equações em uma variável

$$A_S = \frac{1}{2} r^2 \left(\theta - sen\theta\right)$$

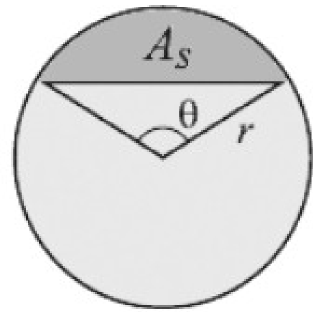


Figura 4.1: Área do segmento A_S de um círculo de raio r

$$\boxed{f\left(x\right) = 0}$$

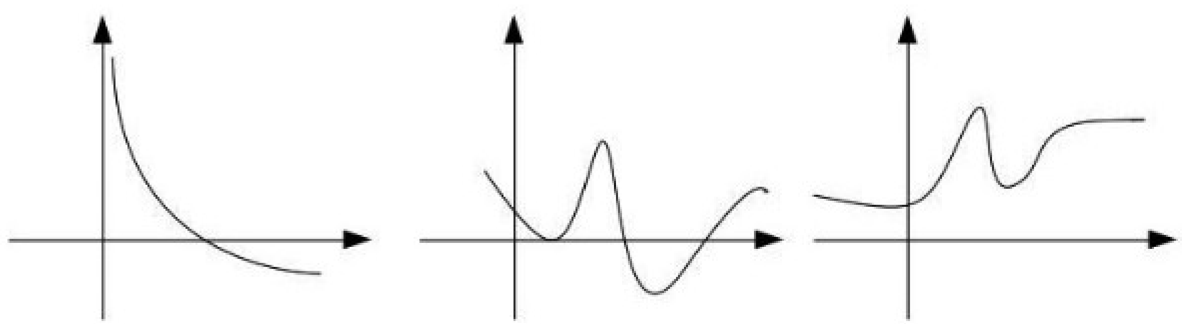


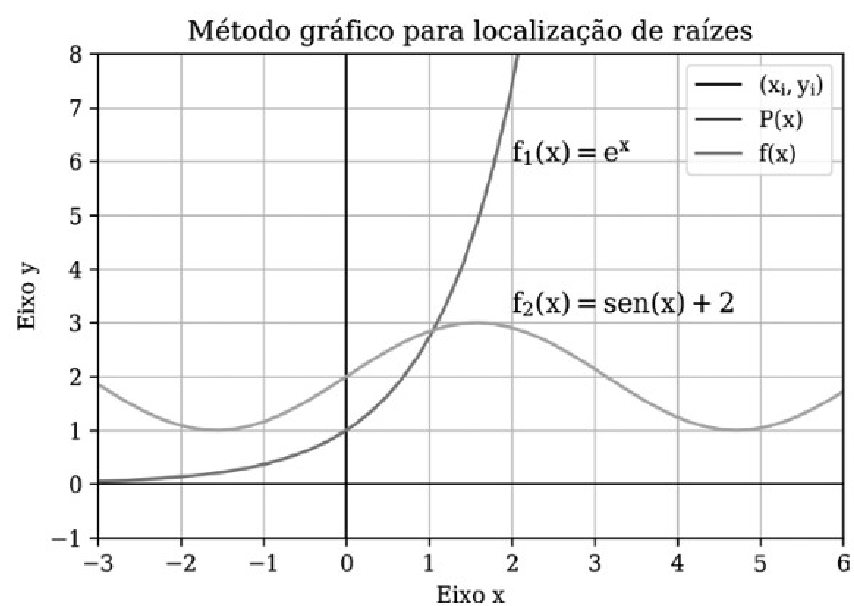
Figura 4.2: Exemplo de gráficos de funções com uma única raiz, várias e nenhuma

Em geral, a aplicação de um método numérico para encontrar a raiz de uma equação requer duas etapas básicas:

1) isolar a raiz, ou seja, encontrar um intervalo $[a,b]$ contendo uma única raiz da equação;

2) a partir de uma aproximação inicial, refinar a solução até atingir a precisão desejada.

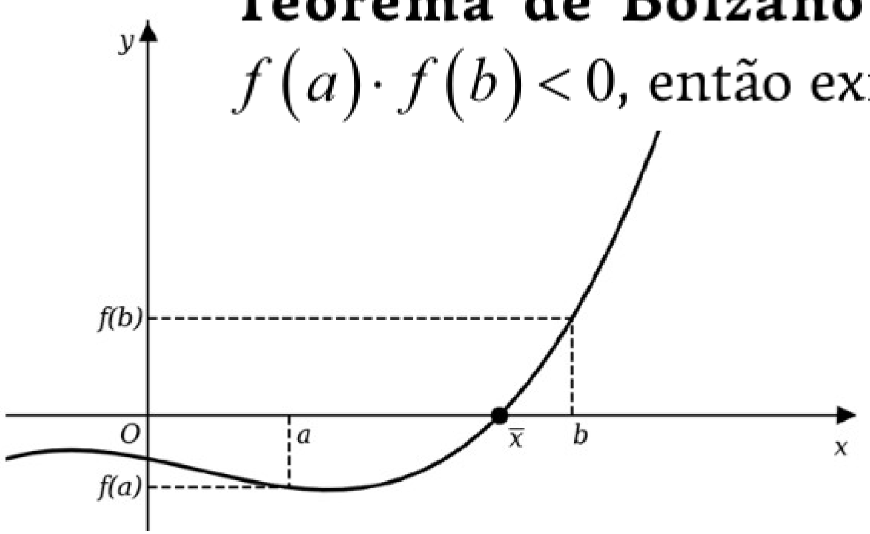
Exemplo 4.1: A equação $f(x) = e^x - sen(x) - 2 = 0$ pode ser escrita como $e^x = senx + 2$. Então, esboçando os gráficos de $f_1(x) = e^x$ e $f_2(x) = senx + 2$, observamos que existe uma única raiz entre 0,5 e 1,5.



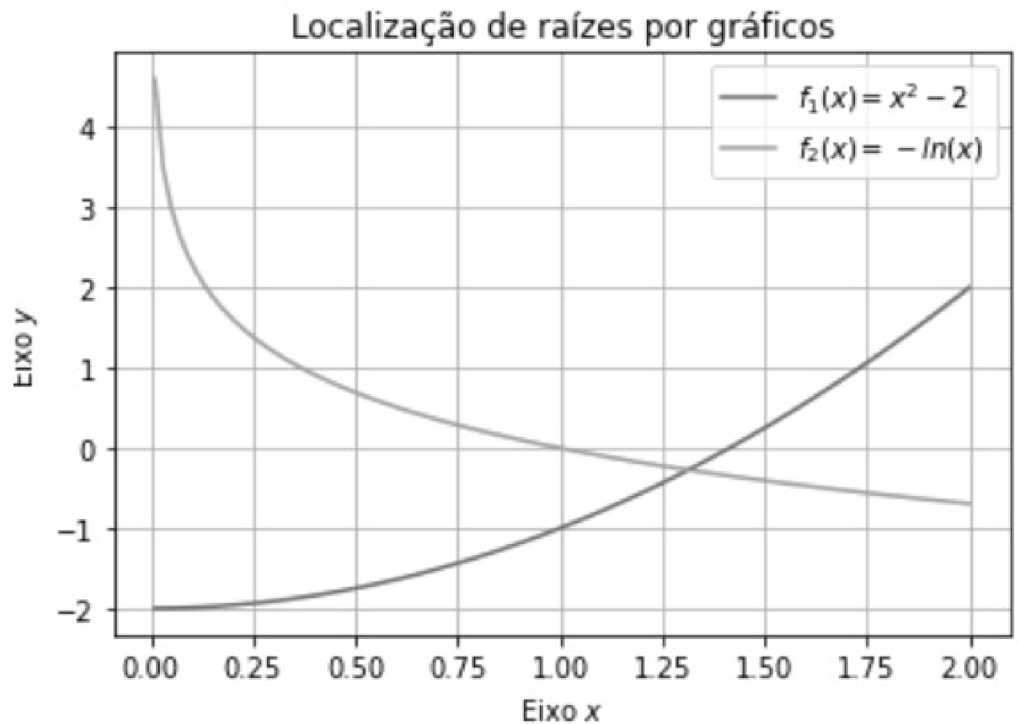
Método da bisseção

1) determinar um intervalo inicial $\left[a,b\right]$ contendo uma única raiz de f;
2) calcular o ponto médio $x_m = \frac{b+a}{2}$;
3) se $b-a<\epsilon$ ou $\frac{|x_i - x_{i-1}|}{|x_i|}<\epsilon$, seguir; senão, assumir $\overline{x} \approx x_m$ e parar;
4) se $f\left(x_m\right)=0$, então a raiz $\overline{x}$ é o próprio x_m;
5) se $f\left(a\right)\cdot f\left(x_m\right)<0$, fazemos $b=x_m$; senão, fazemos $a=x_m$ e voltamos ao passo 2.

Teorema de Bolzano: Se $f\left(x\right)$ é contínua em $\left[a,b\right]$ e $f\left(a\right)\cdot f\left(b\right)<0$, então existe $\overline{x}$, tal que $a<\overline{x}<b$ e $f\left(\overline{x}\right)=0$.



Exemplo 4.2: Vamos usar o método da bisseção para encontrar a raiz da equação $x^2 + ln(x) - 2 = 0$ com precisão de $\epsilon = 10^{-3}$.

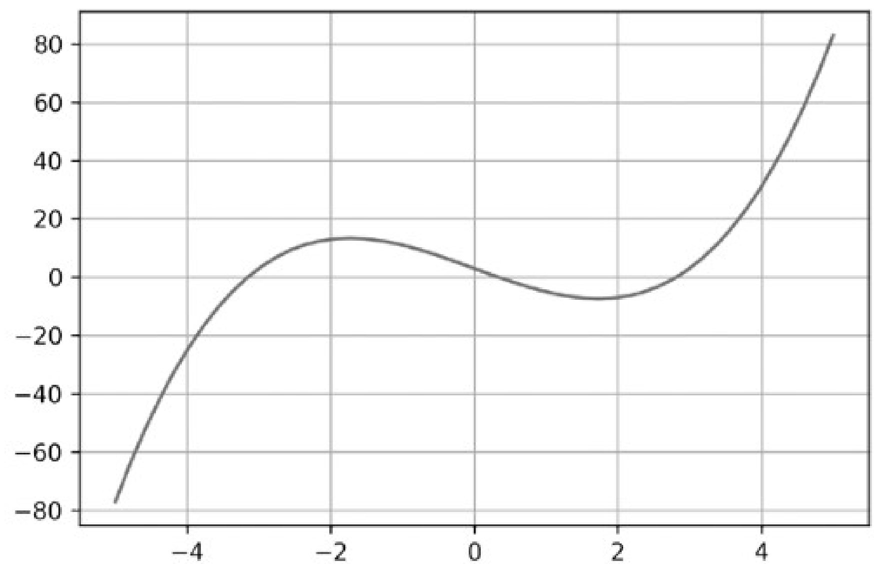


existe uma raiz no intervalo $[1{,}25;1{,}50]$

Método da bisseção

```
x = 1.3750 E = 0.0909
x = 1.3125 E = 0.0476
x = 1.3438 E = 0.0233
x = 1.3281 E = 0.0118
x = 1.3203 E = 0.0059
x = 1.3164 E = 0.0030
x = 1.3145 E = 0.0015
x = 1.3135 E = 0.0007
```

Exemplo 4.3: Vamos localizar as raízes e usar a função `bissec` do exemplo 4.2 para refinar as aproximações e encontrar as raízes reais de $f(x) = x^3 - 9x + 3$ com precisão $\epsilon = 10^{-2}$.




```
bissec(f, -3.5, -3, 0.01)

x = -3.2500 E = 0.0769
x = -3.1250 E = 0.0400
x = -3.1875 E = 0.0196
x = -3.1562 E = 0.0099
x1= -3.15625
```

```
bissec(f, 0, 0.5, 0.01)

x = 0.2500 E = 1.0000
x = 0.3750 E = 0.3333
x = 0.3125 E = 0.2000
x = 0.3438 E = 0.0909
x = 0.3281 E = 0.0476
x = 0.3359 E = 0.0233
x = 0.3398 E = 0.0115
x = 0.3379 E = 0.0058
x2= 0.337890625
```

```
bissec(f, 2.5, 3, 0.01)

x = 2.7500 E = 0.0909
x = 2.8750 E = 0.0435
x = 2.8125 E = 0.0222
x = 2.8438 E = 0.0110
x = 2.8281 E = 0.0055
x3= 2.828125
```

Método do ponto fixo

$$\boxed{f(x)=0} \longrightarrow \boxed{x_{i+1}=\phi(x_i), i=0,1,2,\ldots}$$

$$f(x)=x^2-5x=0$$

$$x_{i+1}=\phi(x_i)=\sqrt{5x_i}$$

$$x_{i+1}=\phi(x_i)=\frac{x_i^2}{5}$$

$$x_{i+1}=\phi(x_i)=x_i^2-4x_i$$

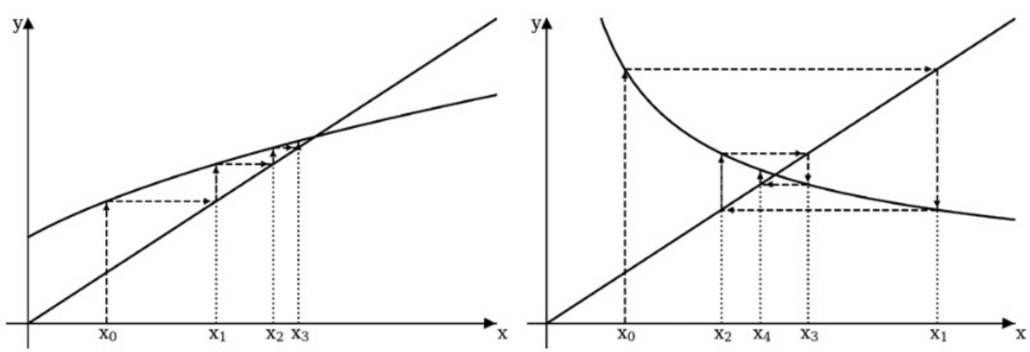


Figura 4.5: Método do ponto fixo convergindo para a raiz

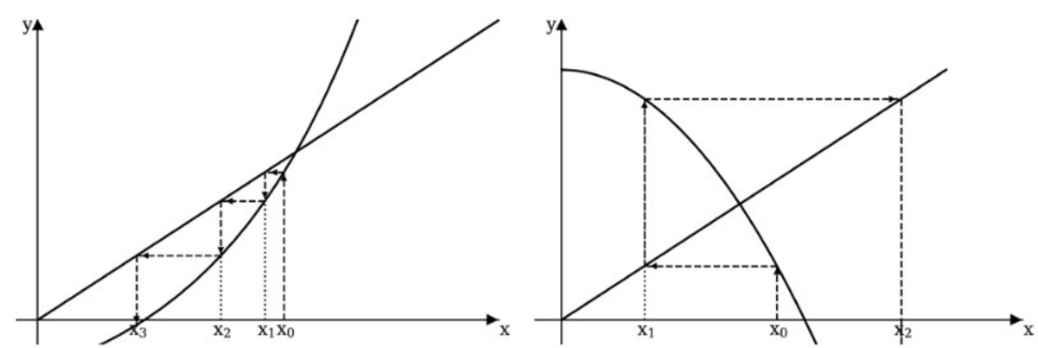
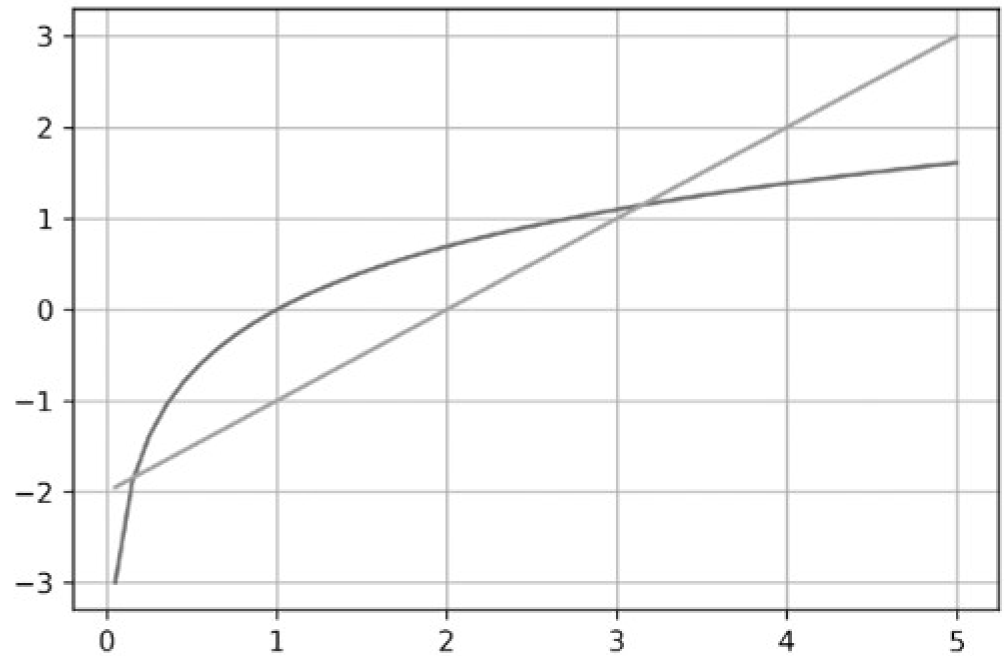


Figura 4.6: Método do ponto fixo divergindo da raiz

Exemplo 4.8: Agora vamos calcular todas as raízes de $f(x) = lnx - x + 2 = 0$ pelo método do ponto fixo, até que o erro relativo seja inferior a 0,0001.



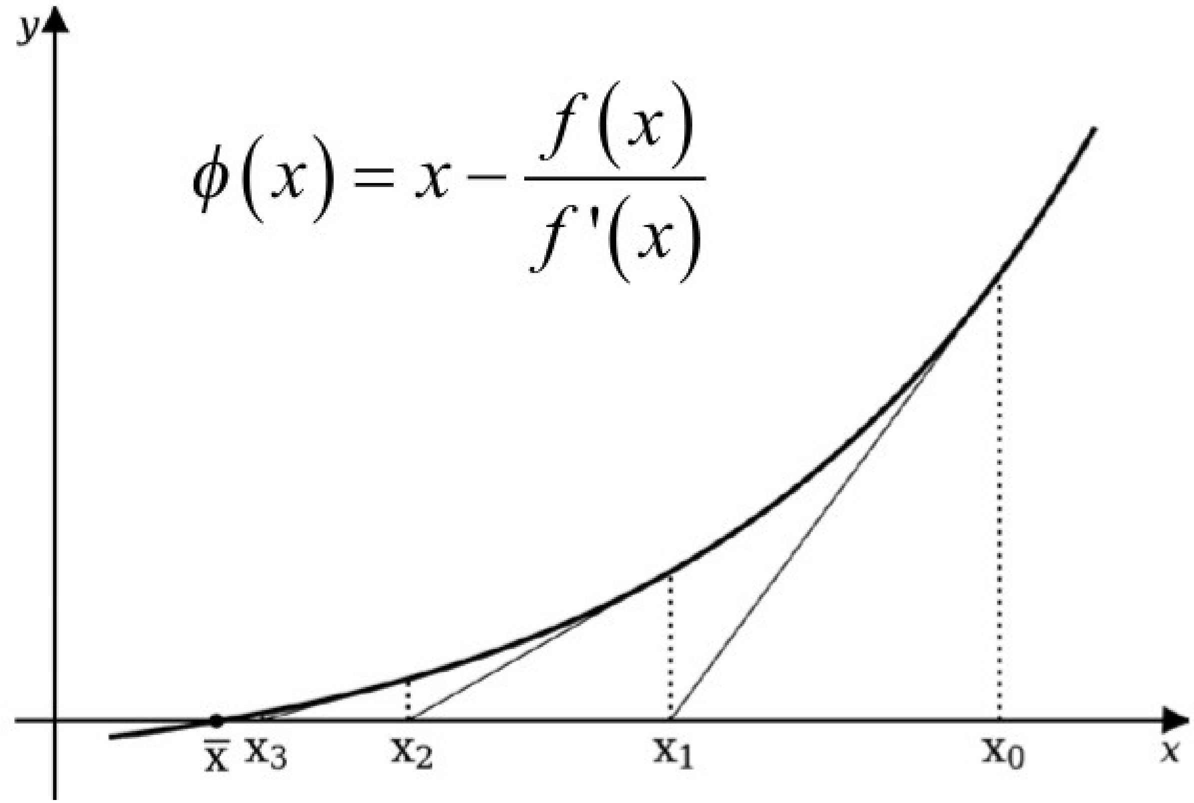
$$\phi_1(x) = ln(x) + 2$$

```
| x=3.098612289 | err=0.031824662
| x=3.130954362 | err=0.010329781
| x=3.141337866 | err=0.003305440
| x=3.144648781 | err=0.001052873
| x=3.145702209 | err=0.000334878
| x=3.146037143 | err=0.000106462
| x=3.146143611 | err=0.000033841
3.1461436109912895
```

$$\phi_2(x) = e^{x-2}$$

```
| x=0.223130160 | err=1.240844535
| x=0.169166839 | err=0.318994679
| x=0.160279973 | err=0.055445889
| x=0.158861897 | err=0.008926471
| x=0.158636778 | err=0.001419082
| x=0.158601070 | err=0.000225144
| x=0.158595407 | err=0.000035709
0.15859540701599245
```

Método de Newton



Exemplo 4.10: Vamos encontrar a raiz de $f(x) = ln(x) + x - 4$ usando o método de Newton.

```
| x=2.871235 | err=0.303436
| x=2.926137 | err=0.018762
| x=2.926271 | err=0.000046
```

Em Python, podemos combinar computação simbólica com numérica, de modo a obtermos uma expressão para a derivada de uma função $f(x)$ de forma automática.

Para converter a expressão de uma `sympy` em uma função `lambda` do `numpy`, utilizamos `sympy.lambdify`, conforme é mostrado a seguir.

```
import sympy
x = sympy.symbols('x')
expr = sympy.log(x)+x-4.0
sympy.diff(expr)
```

$$1 + \frac{1}{x}$$

```
f = sympy.lambdify(x, expr)
df = sympy.lambdify(x, expr.diff(x))
```

Exercício

1) Calcule, se possível, as raízes das seguintes funções com, pelo menos, três casas de precisão:

a) $f(x) = \sqrt{x} - 5^{-x}$

b) $f(x) = e^{x} + x$

c) $f(x) = xln(x) - 1$

d) $f(x) = sen(x) - 1/2$

e) $x^3 - 7x^2 + 14x - 6 = 0$

f) $2xcos(2x) - (x+1)^2 = 0$

g) $x - 2^{-x} = 0$

h) $2 + cos(e^{x} - 2) - e^{x} = 0$

i) $f(x) = -0.5x^2 + 2.5x + 4.5$

j) $f(x) = 5x^2 - 5x^2 + 6x - 2$

k) $f(x) = -25 + 82x - 90x^2 + 44x^3 - 8x^4 + 0.7x^5$

l) $f(x) = -12 - 21x + 18x^2 - 2.75x^3$