

19

MATEMÁTICA

FUNDAMENTOS DE ANÁLISE NUMÉRICA

COM PYTHON 3 E R

F. CORREIA DOS SANTOS • JORGE DUARTE • NUNO D. LOPES



2ª Edição
Revista e Ampliada



EDIÇÕES SÍLABO

Coleção
Matemática

COLEÇÃO MATEMÁTICA

19

COLEÇÃO MATEMÁTICA

- 1 – INTEGRAIS MÚLTIPLOS E EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
- 2 – CÁLCULO DIFERENCIAL EM \mathbb{R}^n
- 3 – PRIMITIVAS E INTEGRAIS
- 4 – FORMULÁRIO DE MATEMÁTICA
- 5 – ÁLGEBRA LINEAR Vol. 1 – Matrizes e Determinantes
- 6 – ÁLGEBRA LINEAR Vol. 2 – Espaços Vectoriais e Geometria Analítica
- 7 – PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA
- 8 – CÁLCULO INTEGRAL EM \mathbb{R} – PRIMITIVAS
- 9 – PRIMITIVAS E INTEGRAIS – EXERCÍCIOS
- 10 – SUCESSÕES E SÉRIES
- 11 – ÁLGEBRA LINEAR – Exercícios Vol. 1 – Matrizes e Determinantes
- 12 – CÁLCULO DIFERENCIAL EM \mathbb{R}
- 13 – CÁLCULO DIFERENCIAL EM \mathbb{R}^n – EXERCÍCIOS
- 14 – ÁLGEBRA LINEAR – Exercícios Vol. 2 – Espaços Vectoriais e Geometria Analítica
- 15 – SUCESSÕES E SÉRIES – EXERCÍCIOS
- 16 – EQUAÇÕES DIFERENCIAIS E SÉRIES
- 17 – INTEGRAIS MÚLTIPLOS E EQUAÇÕES DIFERENCIAIS – EXERCÍCIOS
- 18 – INTEGRAIS DUPLOS, TRIPLOS, DE LINHA E DE SUPERFÍCIE
- 19 – FUNDAMENTOS DE ANÁLISE NUMÉRICA – Com Python 3 e R
- 20 – MÉTODOS NUMÉRICOS – Introdução, Aplicação e Programação
- 21 – CÁLCULO INTEGRAL – Teoria e Aplicações
- 22 – PRIMITIVAS E INTEGRAIS – Exercícios Resolvidos
- 23 – TÓPICOS DE ANÁLISE MATEMÁTICA EM \mathbb{R}^n
- 24 – EXERCÍCIOS SOBRE PRIMITIVAS E INTEGRAIS
- 25 – PRIMITIVAS E INTEGRAIS – Com Aplicações às Ciências Empresariais
- 26 – ÁLGEBRA LINEAR – Teoria e Prática

Fundamentos de Análise Numérica

com Python 3 e R

F. CORREIA DOS SANTOS

JORGE DUARTE

NUNO D. LOPES

2ª Edição

Revista e Ampliada

EDIÇÕES SÍLABO

É expressamente proibido reproduzir, no todo ou em parte, sob qualquer forma ou meio gráfico, eletrónico ou mecânico, inclusive fotocópia, este livro.

As transgressões serão passíveis das penalizações previstas na legislação em vigor.

Não participe ou encoraje a pirataria eletrónica de materiais protegidos.

O seu apoio aos direitos dos autores será apreciado.

Visite a Sílabo na rede

www.silabo.pt

FICHA TÉCNICA

Título: Fundamentos de Análise Numérica – Com Python 3 e R

Autores: F. Correia dos Santos, Jorge Duarte, Nuno D. Lopes

© Edições Sílabo, Lda.

Capa: Pedro Mota

1ª Edição – Lisboa, outubro de 2002

2ª Edição – Lisboa, março de 2019

Impressão e acabamentos: VASP

Depósito Legal: 453638/19

ISBN: 978-989-561-003-7

 **EDIÇÕES SÍLABO, Lda.**
Publicamos conhecimento

Editor: Manuel Robalo

R. Cidade de Manchester, 2

1170-100 Lisboa

Telf.: 218130345

e-mail: silabo@silabo.pt

www.silabo.pt

Índice

1	Números	17
1.1	Introdução	17
1.2	Representação decimal de números reais	24
1.3	Representação de números reais em base não decimal	28
1.3.1	Conversão de um número inteiro, da base 10 para outra base	30
1.3.2	Conversão de um decimal puro, da base 10 para outra base	32
1.4	Arredondamentos	40
2	Erros	45
2.1	Introdução	45
2.2	Definições fundamentais	45
2.3	Algarismos significativos	51
2.3.1	Algarismos significativos de representações não decimais	55
2.3.2	Algarismos significativos e erro relativo	56
2.4	Erros de arredondamento	58
2.5	Sistemas de vírgula flutuante	61
2.5.1	Limitações do sistema de vírgula flutuante	63
2.5.2	Arredondamentos no sistema de vírgula flutuante	66
2.6	Erros de truncatura	73
2.7	Propagação dos erros	74
2.7.1	Adição: $r = x + y$	78
2.7.2	Subtração: $r = x - y$	78
2.7.3	Produto de uma constante por uma variável: $r = ax, a \in \mathbb{R}$	80
2.7.4	Multiplicação: $r = xy$	80
2.7.5	Divisão: $r = \frac{x}{y}, y \neq 0$	81
2.7.6	Potência: $r = x^k, k \in \mathbb{R}$ e $x > 0$	81
2.7.7	Funções elementares principais: $r = f(x)$	84
2.8	Número de condição de uma função	94
2.9	Condicionamento e estabilidade	96
2.10	Análise inversa de erros	97
2.11	Erros e incertezas	103

3	Análise Intervalar	105
3.1	Introdução	105
3.2	Definições fundamentais	106
3.3	Aritmética intervalar	109
3.3.1	Adição intervalar	110
3.3.2	Subtração intervalar	111
3.3.3	Multiplicação intervalar	113
3.3.4	Divisão intervalar	115
3.4	Funções intervalares	117
3.5	Avaliação intervalar	123
4	Séries. Polinômios e Séries de Taylor	131
4.1	Introdução	131
4.2	Soma de séries. Erros de truncatura e arredondamento	132
4.3	Polinômios de Taylor	140
4.4	Séries de Taylor	149
5	Vetores e Matrizes	153
5.1	Introdução	153
5.2	Propriedades métricas do espaço vetorial \mathbb{R}^n	153
5.3	Normas	158
5.3.1	Normas de vetores	158
5.3.2	Normas de matrizes	161
5.4	Matrizes equivalentes e condensação	169
5.5	Sistemas de equações lineares	178
5.5.1	Condicionamento de sistemas de equações lineares	179
5.5.2	Equilibragem de matrizes	184
5.5.3	Sistemas triangulares	186
5.5.4	Método de eliminação de Gauss	190
5.5.4.1	Método de Gauss com escolha parcial de pivô	194
5.5.4.2	Método de Gauss com equilibragem e escolha parcial de pivô	197
5.5.4.3	Método de Gauss com escolha total de pivô	199
5.5.4.4	Sistemas lineares tridiagonais	200
5.5.5	Métodos iterativos para a resolução de sistemas lineares	202
5.5.5.1	Convergência dos métodos iterativos	208
5.5.5.2	Métodos de Jacobi e Gauss–Seidel	210
5.6	Fatorização triangular de matrizes e aplicações	217
5.6.1	Fatorização LU por condensação	218
5.6.2	Fatorização LU por eliminação compacta	226
5.6.3	Fatorização LU e resolução de sistemas lineares	234
5.6.4	Fatorização LU e inversão de matrizes	235
5.6.5	Decomposição de Cholesky	238
5.7	Determinantes	243
5.8	Ortogonalidade	245
5.8.1	Projeção ortogonal sobre um subespaço	245
5.8.2	Método de Gram–Schmidt	249
5.8.2.1	Método de Gram–Schmidt modificado	254

5.8.3	Fatorização QR	258
5.8.4	Mínimos quadrados	266
5.8.4.1	Mínimos quadrados e fatorização QR	271
5.8.4.2	Mínimos quadrados e projeção ortogonal	273
5.8.4.3	Mínimos quadrados e aproximação de funções	275
5.9	Valores próprios e vetores próprios	276
5.9.1	Localização de valores próprios	278
5.9.2	Quociente de Rayleigh	282
5.9.3	Método das potências	283
5.9.3.1	Deflação e deslocamentos	292
5.9.4	Método das potências inverso	294
5.9.5	Método QR	300
5.9.5.1	Fatorização de matrizes e valores próprios	300
5.9.5.2	Método QR e eficiência	308
5.10	Valores singulares	308
5.10.1	Decomposição em valores singulares	308
5.10.2	Aplicação: Compressão de imagens	312
6	Equações e Sistemas de Equações Não-Lineares	315
6.1	Introdução	315
6.2	Multiplicidade de uma raiz	319
6.3	Polinómios	324
6.3.1	Propriedades dos polinómios	326
6.3.2	Matriz companheira e raízes de polinómios.	330
6.3.3	Resolubilidade algébrica	332
6.4	Resolução numérica de equações	334
6.4.1	Delimitação das raízes reais	334
6.4.2	Separação e contagem das raízes reais	338
6.4.3	Determinação de um valor aproximado de uma raiz	343
6.4.3.1	Método da bissecção	344
6.4.3.2	Método do ponto fixo	349
6.4.3.3	Método de Newton–Raphson	357
6.4.3.4	Método da tangente–secante	365
6.4.3.5	Método da secante	367
6.5	Ordem de convergência	371
6.5.1	Método do ponto fixo	371
6.5.2	Método de Newton–Raphson	372
6.5.3	Método da tangente–secante	373
6.5.4	Método da secante	374
6.6	Raízes múltiplas	374
6.7	Resolução numérica de sistemas não lineares	377
6.8	Outros métodos de resolução numérica de equações	385

7	Aproximação de Funções	387
7.1	Introdução	387
7.2	Método dos mínimos quadrados: caso discreto	389
7.2.1	Regressão linear	389
7.2.1.1	Troca de variáveis na regressão linear	398
7.2.1.2	Sistema normal e produto interno	399
7.2.2	Linearização de relações não lineares	400
7.2.2.1	Linearização da exponencial	400
7.2.2.2	Linearização da potência	402
7.2.3	Regressão linear múltipla	407
7.2.4	Regressão Polinomial	412
7.2.5	Regressão linear: caso geral	416
7.3	Método dos mínimos quadrados: caso contínuo	420
7.4	Método dos mínimos quadrados: caso geral	427
7.5	Funções e polinômios ortogonais	436
7.5.1	Aplicação do método de Gram–Schmidt	439
7.6	Outros métodos e critérios de ajustamento	447
8	Interpolação	449
8.1	Introdução	449
8.2	Interpolação polinomial	450
8.3	Polinômio interpolador na forma de Lagrange	457
8.4	Erro da interpolação	464
8.5	Diferenças divididas. Polinômio interpolador na forma de Newton	471
8.5.1	Diferenças divididas e derivadas	480
8.5.2	Polinômio interpolador na forma de Newton e erro da interpolação	483
8.6	Diferenças finitas	485
8.6.1	Diagrama de Fraser	492
8.6.2	Diferenças finitas e derivadas	500
8.7	Interpolação inversa	502
8.8	Aplicação da interpolação na resolução numérica de equações	505
8.9	Splines	509
8.9.1	Splines cúbicos	511
8.9.1.1	Spline cúbico natural	511
8.9.1.2	Spline cúbico completo	512
8.9.1.3	Erro na interpolação com splines cúbicos	519
8.10	Outros métodos de interpolação	519
9	Derivação Numérica	521
9.1	Introdução	521
9.2	Fórmulas de derivação numérica	522
9.2.1	Derivação numérica com interpolação em dois pontos	523
9.2.2	Derivação numérica com interpolação de três pontos	526
9.2.3	Derivação numérica com interpolação em quatro e cinco pontos	527
9.2.4	Outras alternativas de construção de fórmulas de derivação numérica	533
9.3	Extrapolação de Richardson	534
9.4	Alisamento de dados e derivação numérica	539

9.4.1	Alisamento com 3 pontos e polinómios de grau menor ou igual a 1	539
9.4.2	Alisamento com 5 pontos e polinómios de grau menor ou igual a 2	542
10	Integração Numérica	551
10.1	Introdução	551
10.2	Fórmulas de Newton–Cotes fechadas	553
10.2.1	Regra dos trapézios	554
10.2.2	Regra de Simpson	556
10.2.3	Regras de ordem superior	559
10.2.4	Erro de integração	561
10.2.5	Erro de arredondamento	564
10.2.6	Regras compostas	569
10.3	Grau de uma fórmula de integração numérica	577
10.4	Método dos coeficientes indeterminados	579
10.4.1	Dedução de fórmulas de integração numérica	580
10.4.2	Erro das fórmulas de integração numérica	583
10.4.3	Fórmulas retangulares	587
10.4.4	Fórmulas extrapoladoras	588
10.4.5	Fórmulas de Newton–Cotes abertas	589
10.4.6	Fórmula dos trapézios corrigida	592
10.4.7	Fórmula de Euler Mac–Laurin	598
10.5	Método de Romberg	603
10.6	Fórmulas de Gauss	613
10.7	Outros métodos de integração numérica	618
11	Equações Diferenciais	621
11.1	Introdução	621
11.2	Métodos numéricos de passo simples	631
11.2.1	Método de Euler	632
11.2.2	Métodos de Taylor	644
11.2.3	Métodos de Runge–Kutta	647
11.2.3.1	Métodos de Runge–Kutta de 2ª ordem	648
11.2.3.2	Métodos de Runge–Kutta de 3ª ordem	654
11.2.3.3	Métodos de Runge–Kutta de 4ª	655
11.2.4	Equação de diferenças e função incremental	658
11.2.5	Consistência, convergência e estabilidade	662
11.3	Métodos numéricos de passo múltiplo	663
11.3.1	Métodos de Adams–Bashforth	664
11.3.2	Métodos de Adams–Moulton	667
11.3.3	Métodos de preditor–corretor	673
11.3.3.1	Método de Milne	675
11.3.3.2	Método de Adams–Bashforth–Moulton	678
11.4	Sistemas de equações diferenciais	680
11.4.1	Equações diferenciais de ordem superior	686
11.5	Estabilidade absoluta	688
11.6	Rigidez (<i>stiffness</i>) em equações e sistemas diferenciais	698
11.7	Problemas de valor de fronteira	705

11.7.1	Método do artilheiro	705
11.7.2	Método de diferenças finitas	708
Anexos		717
A1	Funções contínuas	717
A2	Funções diferenciáveis	719
A3	Primitivação e integração	728
A4	Integração numérica. Erro de truncatura	730
A5	Séries de números reais	732
A6	Matrizes: um sobrevoos	739
A7	Determinantes: cálculo e aplicações	750
A8	Arredondamentos pela regra do par	752
A9	Generalização da fórmula fundamental do cálculo dos erros	753
A10	Considerações sobre o erro relativo do produto e quociente	755
A11	Demonstrações dos teoremas fundamentais da aritmética intervalar	756
A12	Sistema normal: demonstração da existência e unicidade de solução minimizante	759
A13	Demonstração do teorema do erro da interpolação	761
A14	Notação “O” Grande	763
Exercícios Propostos		765
	Capítulo 1.	765
	Capítulo 2.	767
	Capítulo 3.	770
	Capítulo 4.	772
	Capítulo 5.	774
	Capítulo 6.	776
	Capítulo 7.	780
	Capítulo 8.	785
	Capítulo 9.	790
	Capítulo 10.	792
	Capítulo 11.	799
Soluções dos Exercícios Propostos		801
Bibliografia		805
Índice Remissivo		809

Lista de Programas

1.1.1	Problema “inocente”	18
1.3.1	Mudança de base em números inteiros	36
1.3.2	Mudança de base em números menores do que 1	38
2.5.1	Epsilon da máquina	70
2.5.2	Aritmética no computador e aritmética exata	71
3.5.1	Avaliação intervalar	128
4.2.1	Soma de séries	139
5.3.1	Cálculo das normas usuais de vetores e matrizes	166
5.4.1	Operações elementares sobre matrizes	171
5.4.2	Soma toleranciada	173
5.4.3	Matriz escalonada	175
5.4.4	Caraterística de uma matriz	177
5.5.1	Número de condição de uma matriz	182
5.5.2	Equilibragem de uma matriz	184
5.5.3	Resolução de sistemas triangulares	187
5.5.4	Método de eliminação de Gauss	190
5.5.5	Função auxiliar pivô parcial	195
5.5.6	Função auxiliar para pivô parcial e equilibragem implícita	198
5.5.7	Método de Thomas	201
5.5.8	Resolução de sistemas pelos métodos de Jacobi e Gauss–Seidel	204
5.5.9	Implementação matricial dos métodos de Jacobi e Gauss–Seidel	211
5.6.1	Fatorização LU por condensação de Gauss	224
5.6.2	Fatorização LU pelo método de Doolittle	231
5.6.3	Resolução de sistemas lineares por LU	234
5.6.4	Inversão de matrizes a partir da decomposição LU	236
5.6.5	Fatorização de Cholesky	241
5.7.1	Cálculo de determinantes	243
5.8.1	Método de Gram–Schmidt (introdução)	250
5.8.2	Método de Gram–Schmidt (clássico)	252
5.8.3	Método de Gram–Schmidt (modificado)	255
5.8.4	Decomposição QR (LI)	261
5.8.5	Decomposição QR	264
5.8.6	Mínimos quadrados utilizando a decomposição LU	271
5.8.7	Mínimos quadrados utilizando a decomposição QR	272
5.8.8	Mínimos quadrados e projeção ortogonal	273
5.9.1	Método das potências	287

5.9.2	Método das potências inverso	296
5.9.3	Método das potências inverso com deslocamento	299
5.9.4	Método <i>QR</i> básico	303
5.9.5	Método <i>QR</i> básico com deslocamento	306
6.3.1	Avaliação de polinómios	324
6.4.1	Método da bissecção	348
6.4.2	Método do ponto fixo	356
6.4.3	Método de Newton–Raphson	364
6.4.4	Método da tangente–secante	366
6.4.5	Método da secante	370
6.7.1	Resolução de sistemas pelo método de Newton–Raphson	383
7.2.1	Método dos mínimos quadrados: regressões por retas	394
7.2.2	Método dos mínimos quadrados: linearizações especiais	406
7.2.3	Regressão linear múltipla	411
7.2.4	Regressão polinomial	414
7.4.1	Regressão geral	433
8.2.1	Polinómio interpolador	454
8.3.1	Polinómio interpolador na forma de Lagrange	460
8.5.1	Polinómio Interpolador de Newton	478
8.6.1	Polinómio interpolador na forma de Gregory–Newton	491
8.8.1	Método de Muller com interpolação inversa	507
8.9.1	Splines cúbicos	514
9.2.1	Derivação numérica	530
9.4.1	Derivação numérica com alisamento	545
10.2.1	Fórmulas de Newton–Cotes fechadas	560
10.2.2	Fórmulas compostas	574
10.4.1	Fórmulas de Newton–Cotes abertas	591
10.4.2	Fórmula dos trapézios corrigida	597
10.4.3	Fórmula de Euler Mac–Laurin	601
10.5.1	Método de Romberg	612
10.6.1	Fórmulas de Gauss	617
11.2.1	Método de Euler	634
11.2.2	Métodos de Runge–Kutta de 2 ^a ordem	652
11.2.3	Método de Runge–Kutta de 4 ^a ordem	657
11.3.1	Método de Adams–Bashforth	666
11.3.2	Método de Adams–Moulton	671
11.3.3	Método de Milne	677
11.3.4	Método de Adams–Bashforth–Moulton	679
11.4.1	Método de Euler em sistemas	683
11.4.2	Método de Euler em sistemas	685
11.5.1	Solução gráfica de um problema de valor inicial	688
11.5.2	Problema teste e método de Euler regressivo	693
11.5.3	Método de Euler regressivo com o método do ponto fixo	694
11.5.4	Método de Euler regressivo com o método de Newton–Raphson	696
11.6.1	Método de Crank–Nicolson para sistemas	702
11.7.1	Método das diferenças finitas	711

Prefácio da 1^a edição

Este texto resulta da experiência do autor como professor da cadeira de ANÁLISE NUMÉRICA do Curso de Engenharia Química do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa (ISEL), a par de actividade na Indústria com uma forte componente de aplicação de Métodos Numéricos e Estatísticos e sua implementação informática.

Este livro é dedicado aos alunos que irão contactar, pela primeira vez, com a disciplina de Análise Numérica (ou Métodos Numéricos), sacrificando-se, aqui e além, algum formalismo pela clareza e leveza de exposição, sempre que o rigor matemático não seja afectado.

Pretendeu-se um equilíbrio entre uma exaustiva sucessão de definições, teoremas e demonstrações, e uma listagem de algoritmos e exercícios resolvidos. Cada capítulo é iniciado com uma introdução, na qual se faz a sua apresentação, terminando com uma secção - “Um passo adiante...” - na qual se procura abrir horizontes para estudos posteriores.

No texto existem exemplos, exercícios resolvidos e exercícios propostos: os primeiros devem ser estudados como parte integrante do texto; os segundos são aplicações detalhadas que o leitor pode tratar como um exemplo ou tentar a sua resolução para comparação posterior da metodologia utilizada; relativamente aos terceiros, aconselha-se o leitor a responder ao desafio da sua resolução, no contexto em que são propostos.

Na parte final do livro, o leitor pode encontrar um conjunto adicional de 162 exercícios, com soluções, de nível igual ou superior aos resolvidos no texto; os exercícios propostos assinalados com um asterisco (*) dizem respeito às matérias sumariamente apresentadas nas secções “Um passo adiante...”.

Pretende-se que o aluno veja o interesse prático desta cadeira e faça um estudo bem apoiado nos conhecimentos matemáticos já adquiridos, pelo que são incluídos 14 anexos nos quais se pode encontrar:

- a) resumos de conceitos básicos de disciplinas afins, como Análise Matemática e Álgebra Linear, fundamentais para alicerçar os conhecimentos a adquirir no âmbito da Análise Numérica;
- b) demonstrações de alguns resultados, de estudo não indispensável, considerados interessantes para a formação do aluno.

Ao longo do texto, o leitor é encaminhado para obras referenciadas na bibliografia, para a demonstração de alguns resultados particulares ou desenvolvimentos propostos.

Agradecimentos da 1^a edição

A todos os alunos, os quais, seguramente, não tiveram tanto prazer em assistir às aulas como o autor em as proferir; espero, porém, que a “diferença”, embora positiva, seja pequena, e que a sucessão dessas diferenças não seja crescente.

Ao aluno, desconhecido, que acidentalmente fez a Sílabo saber que possuía e prezava uns apontamentos das aulas de Análise Numérica ministradas pelo autor.

À Prof. Olga Baptista que estabeleceu a ponte entre o editor e o autor deste texto, sendo a primeira pessoa a incentivar fortemente a sua realização.

A todos os colegas da secção de Matemática do Curso de Engenharia Química de quem recebi total apoio e sugestões. Uma justa menção para a Prof. Isabel Santinho, não só pelas sugestões dadas, mas também pelos muitos anos em que alternámos a responsabilidade da cadeira de Análise Numérica, estabelecendo e alterando o programa da cadeira, de modo a que este fosse bem fundamentado e útil a um profissional de engenharia; este texto é também o fruto desse trabalho.

À minha filha Susana um agradecimento muito especial e pleno de significado, pela crítica, discussão acalorada e excelentes sugestões referentes a diversos capítulos deste texto.

À Sílabo, nas pessoas do Dr. Manuel Robalo e Sr. Pedro Mota, pelo excelente relacionamento, colaboração e soluções gráficas apresentadas que, seguramente, serão uma forte mais-valia a acrescentar ao texto.

O autor assume-se como o único responsável por qualquer eventual erro, omissão, gralha, incorrecção e outras quaisquer doenças, mais ou menos graves, que este livro possa enfermar.

Lisboa, Outubro de 2002
Fernando Manuel Correia dos Santos

Prefácio da 2^a edição

Passados 17 anos sobre a 1^a edição deste livro, queremos apresentar um rejuvenescimento da obra, com mais autores, mais jovens, combinando eficazmente as experiências de docência da cadeira de ANÁLISE NUMÉRICA do Curso de Engenharia Química do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa com as aplicações práticas de Métodos Numéricos e Estatísticos e sua implementação informática. Esta 2^a edição é substancialmente diferente da 1^a edição em duas vertentes notórias:

- Alargamento significativo do conteúdo no que respeita à Álgebra Linear Numérica e Equações Diferenciais e, de forma mais pontual, na interpolação, derivação e integração numérica.
- Opção pela implementação dos métodos numéricos em Python 3 e R, já que estas linguagens de programação, bem actuais, possuem uma sintaxe amigável, praticamente tão clara como o pseudocódigo anteriormente usado, ficando os algoritmos perfeitamente acessíveis a qualquer leitor com formação, mesmo rudimentar, de programação.

Pretendeu-se conservar o espírito inicial desta obra: uma exposição da teoria de forma fundamentada e clara, intercalada com numerosos exemplos e exercícios resolvidos, dando suporte aos algoritmos dos 82 programas bilingues (Python 3 e R) apresentados e prontos a utilizar; salienta-se que o texto não pretende ser um curso de programação, pelo que algumas vezes se optou pela clareza do código com algum sacrifício na sua eficiência. Será que o duplo objectivo, fundamentação e clareza, foi conseguido? – o leitor será o juiz, já que esta obra lhe é dedicada.

Agradecimentos da 2^a edição

Mantendo os agradecimentos às personalidades e instituições referidas na 1^a edição, em outubro de 2002, recordamos, com saudade, a Prof. Isabel Santinho que seguramente gostaria de ver esta 2^a edição.

À Professora Cristina Januário e ao Professor Nuno Martins pela sua amizade e incentivo.

O presente trabalho é o fruto de largos meses de uma excelente colaboração entre os três autores, em que cada um de nós reconhece e agradece a dedicação, o entusiasmo e a generosidade manifestada pelo grupo.

*F. Correia dos Santos
Jorge Duarte
Nuno D. Lopes*

Lisboa, março de 2019

Capítulo 1

Números

1.1. Introdução

O que é a Análise Numérica?

Qual a utilidade da Análise Numérica?

Em 1947, nos EUA, a designação “Análise Numérica” foi apresentada à comunidade científica, com “Pompa e Circunstância”, quando da criação do “Institute of Numerical Analysis” associado à Universidade da Califórnia.

O objetivo fundamental da Análise Numérica é a resolução de problemas matemáticos, que pedem um resultado numérico, usando as operações aritméticas mais simples, podendo o resultado ser exato ou aproximado, devendo, neste último caso, haver indicação quantitativa sobre o erro cometido; por exemplo, é possível calcular, usando Métodos Numéricos, um valor aproximado de um integral definido sem calcular uma primitiva da função integranda e controlar a diferença entre o valor determinado e o valor real.

Tal como seria indesculpável o recorrer a uma máquina de calcular para achar a soma de 2 com 3, a Análise Numérica não pode servir para esconder a ignorância matemática, que se revelaria em usar métodos numéricos na resolução da equação

$$x^2 - 5x + 6 = 0,$$

ou no cálculo do integral

$$\int_0^1 x^2 dx,$$

ou, ainda, na determinação dos valores próprios da matriz

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}.$$

A designação Análise Numérica é hoje bastante abrangente, não estando contemplados apenas os Métodos Numéricos aplicados à Análise Matemática e Cálculo, mas também Álgebra Linear Numérica, Otimização Numérica, Computação Numérica, enfim, espalha-se por vastos domínios da Matemática.

O grande desenvolvimento deste ramo das Ciências Matemáticas, nos últimos 50 anos, está fortemente ligado à evolução e sobretudo à vulgarização dos computadores e máquinas de calcular, ferramentas base de trabalho para longos e fastidiosos cálculos com números, que “à mão” seriam virtualmente impossíveis de realizar.

Os processos de cálculo sequencial, que permitem passar dos dados aos resultados, são os Algoritmos da Análise Numérica; o ITEE, acrónimo de Institute of Electrical and Electronics Engineers, define o conceito de Algoritmo, numa tradução quase literal, como

“Um conjunto finito de regras bem definidas, que, num número finito de passos, levam à solução de um problema ou mostram a ausência dessa solução.”

Esta definição engloba, não só os métodos de cálculo manual, mas também aqueles que dão origem a um programa de computação numérica, isto é, um processo de cálculo implementado numa linguagem de programação, a qual tem aqui um papel bem subalterno.

Assim, perante um problema de cálculo numérico, o “analista” numérico deve proceder a

- a) Desenvolvimento de algoritmos: estabelecer métodos de cálculo que conduzam à solução do problema;
- b) Análise dos algoritmos: comparação dos algoritmos desenvolvidos, no que respeita a
 - Eficiência: facilidade de implementação e rapidez;
 - Exatidão: minimização dos erros, pois

Erros nos dados + Erros inerentes do algoritmo+

+ Erros inerentes dos instrumentos de cálculo = Erros no resultado;

- c) Implementação do algoritmo no computador: tradução do algoritmo numa linguagem de programação, devendo ser escolhida aquela que melhor se adapte ao algoritmo selecionado.

Ao longo do texto serão estabelecidos muitos algoritmos, os quais serão implementados em **Python 3** e **R**, linguagens de programação de alto nível com uma sintaxe amigável, em alternativa ao pseudo-código utilizado na 1^a edição deste livro.

Nota 1.1.1: Em concordância com a normalização portuguesa o separador decimal é a vírgula “,” , pelo que, em princípio, neste texto escreveremos 4,23 e não 4.23; porém, usaremos o separador “.” – por exemplo 4.23 – sempre que haja conflito visual com a vírgula ortográfica. Um intervalo real $[a, b]$ poderá ser representado, por exemplo, como $[4,23; 5,67]$ ou $[4.23, 5.67]$.

Programas 1.1.1. Problema “inocente”:

Vamos enunciar um problema “inocente” e propor algoritmos que levem à sua solução.

Um professor distribui frequentemente textos de apoio aos seus alunos e pretende estabelecer um algoritmo que lhe forneça o número de folhas consumidas em cada entrega; o algoritmo deve ser testado considerando 30 alunos e um texto de 5 folhas.

Nos programas seguintes comparam-se algoritmos (funções) para a resolução do problema específico apresentado.

- alu: número de alunos;
- fol: número de folhas em cada caderno;
- tot: número total de folhas consumidas.

Python: Multiplicativo

```
def fun01(alu, fol):
    tot=alu*fol
    return tot
```

R: Multiplicativo

```
fun01=function(alu, fol){
    tot=alu*fol
    return(tot)
}
```

Python: Aditivo 1

```
def fun02(alu, fol):
    tot=0
    for i in range(0, alu):
        tot=tot+fol
    return tot
```

R: Aditivo 1

```
fun02=function(alu, fol){
    tot=0
    for(i in 1:alu){
        tot=tot+fol #(a)
    }
    return(tot)
}
```

Python: Aditivo 2

```
def fun03(alu, fol):
    tot=0
    for i in range(0, fol):
        tot=tot+alu
    return tot
```

R: Aditivo 2

```
fun03=function(alu, fol){
    tot=0
    for(i in 1:fol){
        tot=tot+alu #(b)
    }
    return(tot)
}
```

Python: Aditivo 3

```
def fun04(alu, fol):
    tot=0
    contador=1
    while(contador<=alu):
        tot=tot+fol
        contador=contador+1
    return tot
```

R: Aditivo 3

```
fun04=function(alu, fol){
    tot=0
    contador=1
    while(contador<=alu){
        tot=tot+fol #(a)
        contador=contador+1
    }
    return(tot)
}
```

Python: Aditivo 4

```
def fun04alt(alu, fol):
    tot=0
    contador=0
    while(contador<alu):
        contador=contador+1
        tot=tot+fol
    return tot
```

R: Aditivo 4

```
fun04alt=function(alu, fol){
  tot=0
  contador=0
  while(contador<alu){
    contador=contador+1
    tot=tot+fol #(a)
  }
  return(tot)
}
```

Python: Aditivo 5

```
def fun05(alu, fol):
    tot=0
    contador=0
    while True:
        contador=contador+1
        if(contador>alu):
            break
        tot=tot+fol
    return tot
```

R: Aditivo 5

```
fun05=function(alu, fol){
  tot=0
  contador=0
  while(TRUE){
    contador=contador+1
    if(contador>alu){
      break
    }
    tot=tot+fol #(a)
  }
  return(tot)
}
```

- #(a): o professor constrói tantos cadernos quantos alunos e distribui, numa volta, um caderno a cada aluno;
- #(b): o professor faz uma volta distribuindo a primeira folha a cada aluno, depois outra volta para a segunda folha, e assim sucessivamente até completar o caderno a todos os alunos.

Todos os algoritmos (funções) apresentados são aditivos, exceto o fun01(), multiplicativo, que é o mais simples, natural e económico em esforço computacional.

Python: Multiplicativo

```
>>> fun01(30, 5)
150
```

R: Multiplicativo

```
> fun01(30, 5)
[1] 150
```

A função fun02() conduz a uma soma de 30 parcelas todas iguais a 5, enquanto fun03() resolve o problema com uma soma de 5 parcelas todas iguais a 30.

Os restantes algoritmos são semelhantes a fun02(), usando outras estruturas de repetição; os algoritmos aditivos, na resolução deste problema, representam aquilo a que podemos chamar “complicar o que é fácil”, tendência perigosa, que se pretende não ter lugar neste livro, tentando pelo contrário “tornar um pouco mais fácil o que na realidade seja um pouco mais complicado”.

Todos os algoritmos retornam um consumo total de 150 folhas, quando executado o teste solicitado: os dados do problema são exatos, os algoritmos são exatos, a aritmética é exata, logo o resultado é seguramente exato.

FERNANDO MANUEL CORREIA DOS SANTOS, é Licenciado em Engenharia Químico-Industrial pelo Instituto Superior Técnico e Professor Adjunto, equiparado, da Área de Matemática do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa. A par da atividade docente exerceu funções de direção em empresas do setor da Metalurgia, em áreas diversas como Produção, Controlo de Qualidade, Direção Fabril e Investigação e Desenvolvimento, e também de consultadoria nas áreas de Projeto, Gestão Industrial e implementação de Sistemas de Garantia da Qualidade (ISO 9000). As duas atividades, docente e industrial, sempre foram complementares, analisando na Escola os problemas interessantes surgidos na Indústria, e desenvolvendo aplicações para esta última, normalmente com suporte informático, usando os métodos matemáticos, numéricos e estatísticos, ensinados na primeira. Atualmente, na situação de aposentado, a Matemática e a Computação continuam a ser fiéis companheiras, com interesse na Análise Inteligente de Dados.

JORGE DAS NEVES DUARTE é Licenciado em Matemática pela Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Mestre em Matemática Aplicada pelo Instituto Superior Técnico, tendo concluído o seu doutoramento em Matemática em 2006. É Professor Adjunto na Área Departamental de Matemática do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa. No âmbito da sua investigação, tem como interesses científicos a Teoria das Equações Diferenciais e dos Sistemas Dinâmicos. Trabalhando num contexto verdadeiramente interdisciplinar, é Membro do Centro de Análise Matemática, Geometria e Sistemas Dinâmicos (Departamento de Matemática do Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa) e membro da *European Society of Mathematical and Theoretical Biology*, mantendo uma sólida colaboração com colegas investigadores de diferentes áreas disciplinares em diversas instituições internacionais.

NUNO DAVID DE JESUS LOPES é Licenciado e Mestre em Matemática pela Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa e é Doutor em Matemática, com especialização em Análise Numérica, pela Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa. É Professor Adjunto na Área Departamental de Matemática do ISEL (Instituto Superior de Engenharia de Lisboa). No âmbito da sua investigação, tem como interesses científicos métodos analíticos e numéricos do tipo Elementos Finitos para o estudo de modelos baseados em Equações Diferenciais com Derivadas Parciais. Desenvolve colaborações com membros de vários centros de investigação e, recentemente, tem desenvolvido o seu trabalho em temas da Matemática Industrial.

O objetivo deste livro, com uma forte preocupação pedagógica de clareza na exposição, é a apresentação de alguns conceitos fundamentais de Análise Numérica, numa vertente teórico-prática, em que o desenvolvimento da teoria é intercalado com numerosos exemplos e exercícios resolvidos de modo a bem consolidar os conhecimentos adquiridos, sendo estes aplicados de imediato no desenvolvimento de algoritmos e sua implementação nas linguagens de programação Python 3 e R.

Pretende-se que o leitor aborde a Análise Numérica de uma forma fortemente apoiada na Análise Matemática e Álgebra Linear, pelo que se englobam alguns anexos referentes a conhecimentos considerados indispensáveis, bem como uma vasta e rica bibliografia geral.

168

