Mathtrace – manual

VII. Aplicações: ciências, economia e otimização

Índice

VII. Aplicações: ciências, economia e otimização

47. Química
48. Eletrotecnia
49. Biologia e medicina
50. Economia, finanças e seguros
51. Programação linear, transporte, afetação e jogos matriciais
52. Grafos, redes e logística
53. Psicometria

47. Química

Os cálculos de química estão na secção «Aplicações» do ecrã inicial, área Química: acerto de uma equação química, pH de um ácido, uma base, um sal ou um ácido poliprótico, solução tampão, titulação com a sua curva, equação de Arrhenius e lei de Lambert–Beer. No formulário escolhe o problema e a grandeza procurada e preenche os valores com as unidades; o ícone «?» explica de onde vem a fórmula. As constantes pequenas podem escrever-se como 1.8e-5 ou 1,8·10^-5, os valores medidos (uma tabela de temperaturas, uma calibração) como números separados por espaços.

Uma equação química basta escrevê-la na introdução manual, p. ex. Fe + O2 -> Fe2O3 (seta -> ou =, equilíbrio <=>), também com iões MnO4^- e Fe^3+, parênteses Ca(OH)2, hidratos CuSO4·5H2O e estados (aq). Os coeficientes são o núcleo da matriz do balanço dos elementos (e da carga): a resolução escreve as equações de balanço, a matriz, a sua forma reduzida pelo método de Gauss, o coeficiente livre como parâmetro e os menores inteiros e, no fim, a verificação. Reconhece também uma equação que não se pode acertar (um elemento só num lado, uma substância no lado errado) ou cujo acerto não é único.

O pH é calculado exatamente (para um ácido fraco por uma equação do segundo grau), com a simplificação escolar e o grau de dissociação; para um ácido poliprótico o balanço de carga é resolvido numericamente e o gráfico mostra as proporções das formas do ácido em função do pH. Num tampão a que se junta um ácido ou uma base forte calcula o novo equilíbrio e a variação do pH. Uma titulação obtém o pH conforme a zona da curva (início, zona tampão, ponto de equivalência, excesso de titulante) e o gráfico mostra toda a curva de titulação. A equação de Arrhenius a partir de duas medições ou de uma tabela por regressão de ln k em função de 1/T; a lei de Lambert–Beer a partir de ε conhecido, de um padrão ou de uma reta de calibração.

Exemplos

Acerto da oxidação do ácido clorídrico pelo permanganato.

Enunciado: `KMnO4 + HCl -> KCl + MnCl2 + H2O + Cl2`

Resultado

$$2\,\mathrm{KMnO_4} + 16\,\mathrm{HCl} \rightarrow 2\,\mathrm{KCl} + 2\,\mathrm{Mn(}$$

Passos

- Designamos os coeficientes desconhecidos por letras
  $a\,\mathrm{KMnO_4} + b\,\mathrm{HCl} \rightarrow c\,\mathrm{KCl} + d\,\mathrm{MnCl_2} + f\,\mathrm{H_2O} + g\,\mathrm{C}$
- Os átomos não se criam nem se destroem – cada elemento tem tantos átomos à esquerda como à direita

$$\begin{aligned} \mathrm{K}: &\quad a = c \\ \mathrm{Mn}: &\quad a = d \\ \mathrm{O}: &\quad 4a = f \\ \mathrm{H}: &\quad b = 2f \\ \mathrm{Cl}: &\quad b = c + 2d + 2g \end{aligned}$$

- O sistema homogéneo na forma matricial – uma coluna por substância, os produtos com sinal menos

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -2 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

- O método de Gauss leva a matriz à forma escalonada reduzida

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -\frac{16}{5} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -\frac{2}{5} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -\frac{2}{5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -\frac{8}{5} \end{pmatrix}$$

- Um coeficiente fica livre, $g = t$; os outros exprimem-se através dele

$$a = \frac{2}{5}t, \quad b = \frac{16}{5}t, \quad c = \frac{2}{5}t, \quad d = \frac{2}{5}t, \quad f = \frac{8}{5}t$$

- Escolhemos $t = 5$ para que todos os coeficientes sejam os menores inteiros:
  $a = 2, \quad b = 16, \quad c = 2, \quad d = 2, \quad f = 8, \quad g = 5$
- Verificação – átomos à esquerda e à direita

$$\begin{aligned} \mathrm{K}: &\quad 2 = 2 \\ \mathrm{Mn}: &\quad 2 = 2 \\ \mathrm{O}: &\quad 8 = 8 \\ \mathrm{H}: &\quad 16 = 16 \\ \mathrm{Cl}: &\quad 16 = 16 \end{aligned}$$

Uma equação redox iónica com balanço de carga.

Enunciado: `MnO4^- + Fe^2+ + H^+ -> Mn^2+ + Fe^3+ + H2O`

Resultado

$$\mathrm{MnO_4^-} + 5\,\mathrm{Fe^{2+}} + 8\,\mathrm{H^+} \rightarrow \mathrm{Mn^{2+}} + 5$$

Passos

- Designamos os coeficientes desconhecidos por letras
  $a\,\mathrm{MnO_4^-} + b\,\mathrm{Fe^{2+}} + c\,\mathrm{H^+} \rightarrow d\,\mathrm{Mn^{2+}} + f\,\mathrm{Fe^{3+}} + g\,\mathrm{H_2O}$
- Os átomos não se criam nem se destroem e a carga conserva-se (linha q) – para cada elemento e para a carga

$$\begin{aligned} \mathrm{Mn}: &\quad a = d \\ \mathrm{O}: &\quad 4a = g \\ \mathrm{Fe}: &\quad b = f \\ \mathrm{H}: &\quad c = 2g \\ q: &\quad -a + 2b + c = 2d + 3f \end{aligned}$$

- O sistema homogéneo na forma matricial – uma coluna por substância, os produtos com sinal menos

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -2 \\ -1 & 2 & 1 & -2 & -3 & 0 \end{pmatrix}$$

- O método de Gauss leva a matriz à forma escalonada reduzida

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -\frac{5}{4} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -\frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -\frac{5}{4} \end{pmatrix}$$

- Um coeficiente fica livre, $g = t$; os outros exprimem-se através dele

$$a = \frac{1}{4}t, \quad b = \frac{5}{4}t, \quad c = 2t, \quad d = \frac{1}{4}t, \quad f = \frac{5}{4}t$$

- Escolhemos $t = 4$ para que todos os coeficientes sejam os menores inteiros:
  $a = 1, \quad b = 5, \quad c = 8, \quad d = 1, \quad f = 5, \quad g = 4$
- Verificação – átomos e carga à esquerda e à direita

$$\begin{aligned} \mathrm{Mn}: &\quad 1 = 1 \\ \mathrm{O}: &\quad 4 = 4 \\ \mathrm{Fe}: &\quad 5 = 5 \\ \mathrm{H}: &\quad 8 = 8 \\ q: &\quad 17 = 17 \end{aligned}$$

pH do ácido acético 0,1 M (K_a = 1,8·10⁻⁵).

Enunciado: `model(ph; find=pH[one]; c=0.1[mol_l]; K=1.8e-5[one]; kind=weakAcid; constant=K)`

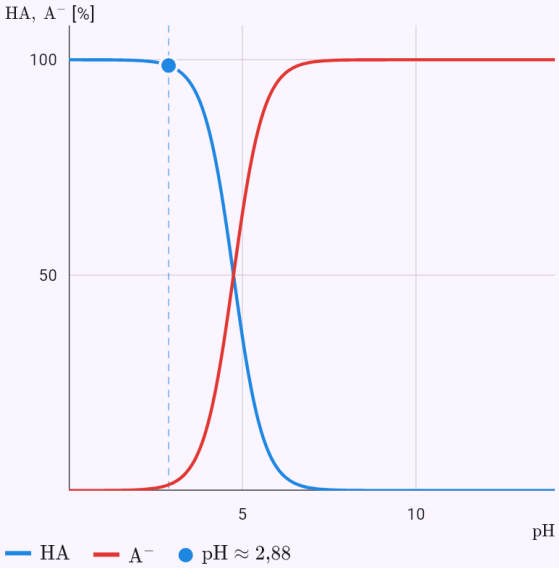
Resultado

$$\mathrm{pH} \approx 2{,}88$$

Passos

- Procuramos pH; dados:
  $c = 0{,}1\,\mathrm{mol/l}, \quad K_a = 1{,}8 \cdot 10^{-5}$
- O pH é o logaritmo decimal negativo da concentração de iões hidrogénio (oxónio): pH = −log[H⁺]. Um ácido forte (HCl) dissocia-se completamente, logo [H⁺] = c; uma base forte dá [OH⁻] = c e pH = 14 − pOH. Um ácido fraco HA ⇌ H⁺ + A⁻ dissocia-se só em parte segundo a sua constante de acidez Ka = [H⁺][A⁻]/[HA]; daí resulta a equação do segundo grau x² + Ka·x − Ka·c = 0. Um sal de um ácido fraco e de uma base forte (acetato de sódio) reage com a água como base com Kb = Kw/Ka, um sal de uma base fraca (NH_4Cl) como ácido. Para um ácido poliprótico (H_2SO_4, H_3PO_4) o balanço de carga é resolvido numericamente. A 25 °C, Kw = 10⁻¹⁴. Equação do modelo
  $$\mathrm{HA} \rightleftharpoons \mathrm{H^+} + \mathrm{A^-}, \quad K_a = \frac{[\mathrm{H^+}][\mathrm{A^-}]}{[\mathrm{HA}]}$$
- Isolamos a grandeza procurada
  $$K_a = \frac{x^2}{c - x} \Rightarrow x^2 + K_a x - K_a c = 0 \Rightarrow x = [\mathrm{H^+}] = -$$
- Substituímos
  $$[\mathrm{H^+}] = \frac{-1{,}8 \cdot 10^{-5} + \sqrt{\left(1{,}8 \cdot 10^{-5}\right)^2 + 4 \cdot 1{,}8 \cdot 10^{-5} \cdot}}{2}$$
- Grau de dissociação: $\alpha = \frac{x}{c} = \frac{0{,}001333}{0{,}1} \approx 1{,}33\,\%$
- O grau de dissociação é inferior a 5 %, por isso também bastaria a simplificação c − x ≈ c:
  $x \approx \sqrt{K_a c} = 0{,}001342, \quad \mathrm{pH} \approx 2{,}87$
- O pH é o logaritmo negativo da concentração de H⁺:
  $\mathrm{pH} = -\log[\mathrm{H^+}] = -\log 0{,}001333 \approx 2{,}88$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

pH do ácido fosfórico 0,1 M e as proporções das suas formas.

Enunciado: `model(ph; find=pH[one]; c=0.1[mol_l]; K1=7.5e-3[one]; K2=6.2e-8[one]; K3=4.8e-`

`13[one]; kind=polyprotic; constant=K)`

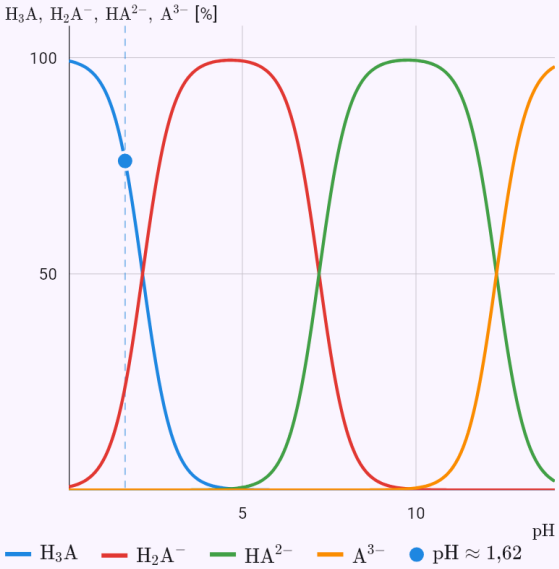
Resultado

$\mathrm{pH} \approx 1{,}62$

Passos

- Procuramos pH; dados
  $c = 0{,}1\,\mathrm{mol/l}, \quad K_{a1} = 0{,}0075, \quad K_{a2} = 6{,}2 \cdot 10^{-8}, \quad I$
- O pH é o logaritmo decimal negativo da concentração de iões hidrogénio (oxónio): pH = −log[H⁺]. Um ácido forte (HCl) dissocia-se completamente, logo [H⁺] = c; uma base forte dá [OH⁻] = c e pH = 14 − pOH. Um ácido fraco HA ⇌ H⁺ + A⁻ dissocia-se só em parte segundo a sua constante de acidez Ka = [H⁺][A⁻]/[HA]; daí resulta a equação do segundo grau x² + Ka·x − Ka·c = 0. Um sal de um ácido fraco e de uma base forte (acetato de sódio) reage com a água como base com Kb = Kw/Ka, um sal de uma base fraca (NH_4Cl) como ácido. Para um ácido poliprótico (H_2SO_4, H_3PO_4) o balanço de carga é resolvido numericamente. A 25 °C, Kw = 10^{-14}. Equação do modelo
  $\mathrm{H_3A} \rightleftharpoons \mathrm{H^+} + \mathrm{H_2A^-} \rightleftharpoons 2\,\mathrm{H^+} + \mathrm{HA^{2-}} \rightleftharpoons 3\,\mathrm{H^+} + \mathrm{A^{3-}}$
- A solução é eletricamente neutra − balanço de carga
  $[\mathrm{H^+}] = [\mathrm{OH^-}] + [\mathrm{H_2A^-}] + 2[\mathrm{HA^{2-}}] + 3[\mathrm{A^{3-}}]$
- Concentrações das formas do ácido a partir das constantes de dissociação
  $[\mathrm{H_{3-i}A^{i-}}] = c\,\alpha_i, \quad \alpha_i = \frac{K_{a1}\cdots K_{ai}\,h^{3-i}}{h^3 + K_{a1}h^2 + K_{a1}K_{a2}h + K_{a}}$
- Resolvemos a equação numericamente (bisseção):
  $[\mathrm{H^+}] \approx 0{,}02389\,\mathrm{mol/l}$
- › O método: bissecção, 14 iterações
- O pH é o logaritmo negativo da concentração de H⁺:
  $\mathrm{pH} = -\log[\mathrm{H^+}] \approx 1{,}62$
- A segunda constante é muito menor do que a primeira, por isso o pH é fixado sobretudo pela primeira etapa, como num ácido monoprótico fraco
  $x = \frac{-K_{a1} + \sqrt{K_{a1}^2 + 4K_{a1}c}}{2} \approx 0{,}02389, \quad \mathrm{pH} \approx 1{,}62$
- Proporções das formas do ácido a este pH
  $\mathrm{H_3A}: 76{,}1\,\%, \quad \mathrm{H_2A^-}: 23{,}9\,\%, \quad \mathrm{HA^{2-}}: 6{,}2 \cdot 10^{-5}\,\%$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Um tampão acetato após juntar 1 mmol de ácido forte.

Enunciado: `model(buffer; find=pH[one]; pK=4.74[one]; ca=0.1[mol_l]; cs=0.1[mol_l];`

`V=100[ml]; n=1[mmol]; kind=acidic; constant=pK; add=acid)`

Resultado

$\mathrm{pH} \approx 4{,}65$

Passos

- Procuramos pH; dados
  $\mathrm{p}K_a = 4{,}74, \quad c_{\mathrm{HA}} = 0{,}1\,\mathrm{mol/l}, \quad c_{\mathrm{A^-}} = 0{,}1\,\mathrm{mol/l}, \quad V$
- Convertemos as unidades
  $V = 100\,\mathrm{ml} = 0{,}1\,\mathrm{l}, \quad n = 1\,\mathrm{mmol} = 0{,}001\,\mathrm{mol}$
- Constante a partir de pK:
  $K_a = 10^{-\mathrm{p}K_a} = 10^{-4{,}74} \approx 1{,}82 \cdot 10^{-5}$
- Uma solução tampão é uma mistura de um ácido fraco e do seu sal (CH_3COOH + CH_3COONa) ou de uma base fraca e do seu sal (NH_3 + NH_4Cl). Da constante de acidez resulta a equação de Henderson–Hasselbalch pH = pKa + log([A^-]/[HA]). Um ácido forte adicionado converte o componente básico no ácido (A^- + H^+ → HA), uma base ao contrário – a razão dos componentes muda pouco e por isso o pH quase não muda. Um tampão funciona melhor para uma razão de 0,1 a 10, ou seja pH = pKa ± 1.
  Equação do modelo
  $\mathrm{pH} = \mathrm{p}K_a + \log \dfrac{[\mathrm{A^-}]}{[\mathrm{HA}]}$

- Quantidades dos componentes do tampão
  $n_{\mathrm{HA}} = c_{\mathrm{HA}} V = 0{,}01\,\mathrm{mol}, \quad n_{\mathrm{A^-}} = c_{\mathrm{A^-}} V = 0{,}01\,\mathrm{mol}$
- A substância adicionada reage com um componente do tampão
  $\mathrm{A^-} + \mathrm{H^+} \to \mathrm{HA}: \quad n'_{\mathrm{HA}} = 0{,}011\,\mathrm{mol}, \quad n'_{\mathrm{A^-}} = 0{,}009\,\mathrm{m}$
- Isolamos a grandeza procurada: $\mathrm{pH} = \mathrm{p}K_a + \log \dfrac{n'_{\mathrm{A^-}}}{n'_{\mathrm{HA}}}$
- Substituímos: $\mathrm{pH} = 4{,}74 + \log \dfrac{0{,}009}{0{,}011} \approx 4{,}653$
- pH antes da adição e a sua variação:
  $\mathrm{pH}_0 = 4{,}74, \quad \Delta\mathrm{pH} = -0{,}087$

Titulação do ácido acético com hidróxido de sódio – o ponto de equivalência.

Enunciado: `model(titration; find=pH[one]; ca=0.1[mol_l]; Va=25[ml]; ct=0.1[mol_l]; K=1.8e-`

`5[one]; Vt=25[ml]; kind=weakAcid; constant=K)`

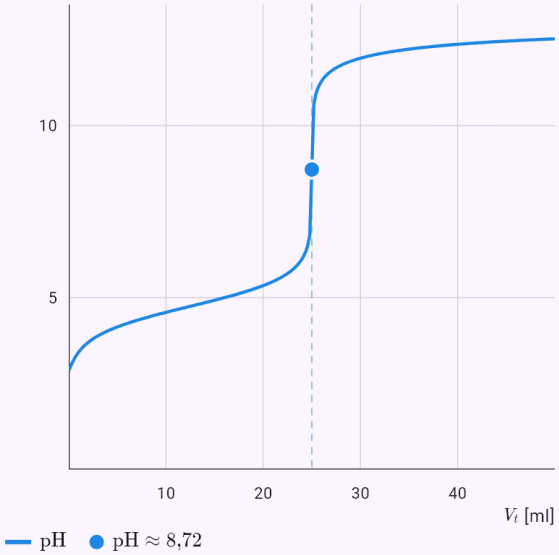
Resultado

$\mathrm{pH} \approx 8{,}72$

Passos

- Procuramos pH; dados
  $c_a = 0{,}1\,\mathrm{mol/l}, \quad V_a = 25\,\mathrm{ml}, \quad c_t = 0{,}1\,\mathrm{mol/l}, \quad K_a =$
- Numa titulação adiciona-se da bureta um titulante de concentração conhecida até reagir todo o titulado. O ponto de equivalência é atingido quando a quantidade de titulante $c_t \cdot V_t$ iguala a do titulado: $V_e = c_a \cdot V_a / c_t$. Antes dele o pH é fixado pelo titulado que não reagiu (com um ácido fraco forma-se um tampão), nele pela reação com a água do sal formado, depois pelo excesso de titulante. A curva de titulação do gráfico é calculada exatamente a partir do balanço de carga. Equação do modelo:
  $\mathrm{HA} + \mathrm{OH^-} \rightarrow \mathrm{A^-} + \mathrm{H_2O}$
- Ponto de equivalência – tanto titulante como titulado
  $n_a = c_a V_a = 2{,}5\,\mathrm{mmol}, \quad V_e = \frac{c_a V_a}{c_t} = \frac{2{,}5}{0{,}1} \approx 25\,\mathrm{ml}$
- Titulante adicionado e volume total:
  $n_t = c_t V_t = 2{,}5\,\mathrm{mmol}, \quad V = V_a + V_t = 50\,\mathrm{ml}$
- Ponto de equivalência – todo o titulado reagiu.
- No ponto de equivalência resta só o sal formado – a sua reação com a água
  $c_{\mathrm{A^-}} = \frac{n_a}{V_a + V_e} = 0{,}05\,\mathrm{mol/l}, \quad K_b = \frac{K_w}{K_a} \approx 5{,}556 \cdot 10$
- pOH e pH (pH + pOH = 14)
  $\mathrm{pOH} = -\log\left[\mathrm{OH^-}\right] = -\log 5{,}27 \cdot 10^{-6} \approx 5{,}28, \quad \mathrm{pH}$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Energia de ativação a partir de uma tabela de constantes de velocidade.

Enunciado: `model(arrhenius; find=Ea[kJ_mol]; TT=25 35 45 55[degC]; kk=0.001 0.0021 0.0042`

`0.0079[per_s]; input=table)`

Resultado

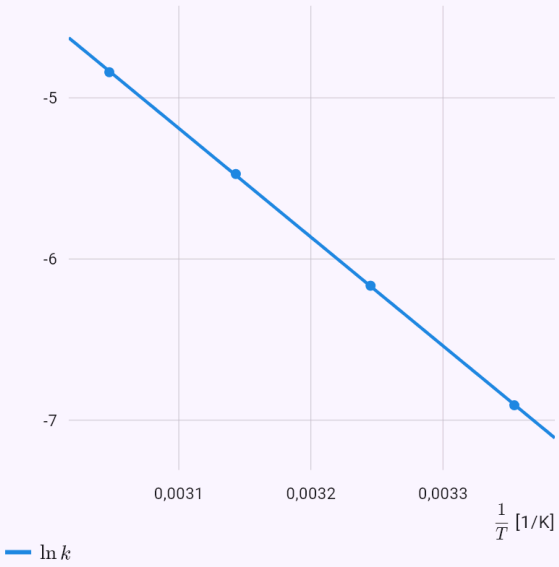
$$E_a \approx 56{,}1\,\mathrm{kJ/mol}$$

Passos

- Procuramos E_a; dados
  $T_i = (25;\ 35;\ 45;\ 55)\,^\circ\mathrm{C}, \quad k_i = (0{,}001;\ 0{,}0021;\ 0{,}004$
- Convertemos as unidades:
  $T_i = (298{,}1;\ 308{,}1;\ 318{,}1;\ 328{,}1)\,\mathrm{K}$
- A constante de velocidade de uma reação cresce com a temperatura segundo a equação de Arrhenius k = A·e^(−Ea/RT), onde Ea é a energia de ativação – a barreira energética que as moléculas que colidem têm de vencer – e A o fator pré-exponencial. De duas medições resulta $\ln(k_2/k_1) = (Ea/R)(1/T_1 - 1/T_2)$. Com mais medições Ea obtém-se de uma reta de regressão: ln k = ln A − (Ea/R)·(1/T) é uma reta em 1/T (gráfico de Arrhenius) de declive −Ea/R. Equação do modelo:
  $k = A\,e^{-\frac{E_a}{RT}}, \quad R = 8{,}314\,\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$
- Aplicando logaritmos obtém-se uma reta
  $$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{R}\cdot\frac{1}{T} \quad (y = a + bx,\ x = \tfrac{1}{T},\ y = \ln k)$$
- Valores para a reta de regressão
  $x_i = (0{,}003354;\ 0{,}003245;\ 0{,}003143;\ 0{,}003047)\,\mathrm{K^{-1}},$
- Reta de regressão pelos mínimos quadrados
  $$b = \frac{n\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n\sum x_i^2 - \left(\sum x_i\right)^2} \approx -6747, \quad a = \bar{y} - b\bar{x} \approx 1$$
- Isolamos a grandeza procurada: $E_a = -bR$
- Substituímos:
  $E_a = -(-6747)\cdot 8{,}314\cdot 10^{-3} \approx 56{,}1\,\mathrm{kJ/mol}$

- Fator pré-exponencial: $A = e^a \approx 6\,768\,000\,\mathrm{s^{-1}}$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Concentração de uma amostra a partir de uma reta de calibração.

Enunciado: `model(beer; find=c[mmol_l]; cc=0 0.1 0.2 0.3 0.4[mmol_l]; AA=0.002 0.151 0.299`

`0.452 0.598[one]; A=0.25[one]; input=calibration; measure=absorbance)`

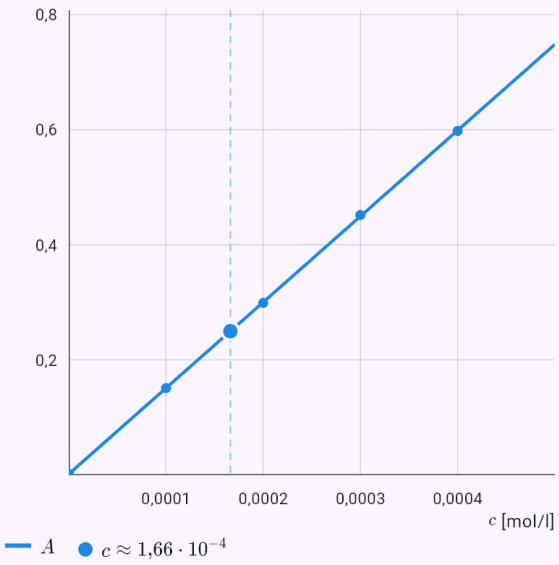
Resultado

$$c \approx 0{,}166\ \text{mmol/l}$$

Passos

- Procuramos c; dados
  $c_i = (0;\ 0{,}1;\ 0{,}2;\ 0{,}3;\ 0{,}4)\ \text{mmol/l},\quad A_i = (0{,}002;\ 0{,}1$
- Convertemos as unidades
  $c_i = \left(0;\ 10^{-4};\ 2\cdot 10^{-4};\ 3\cdot 10^{-4};\ 4\cdot 10^{-4}\right)\ \text{mol/l}$
- Uma solução absorve luz proporcionalmente à concentração da substância absorvente e à espessura da camada: a absorvância A = ε·l·c (lei de Lambert–Beer), onde ε é o coeficiente de absorção molar e l o comprimento da célula. Um espetrofotómetro mede a transmitância T – a fração de luz que passa – e A = −log T. Uma concentração desconhecida obtém-se de ε conhecido, por comparação com um padrão de concentração conhecida ou de uma reta de calibração medida com vários padrões (mínimos quadrados). A lei vale para soluções diluídas. Equação do modelo:
  $A = \varepsilon\, l\, c$
- Reta de calibração pelos mínimos quadrados
  $A = a + b\,c:\quad b = \dfrac{n\sum c_i A_i - \sum c_i \sum A_i}{n\sum c_i^2 - \left(\sum c_i\right)^2} \approx 1493\,\text{l/m}$
- Isolamos a grandeza procurada: $c = \dfrac{A-a}{b}$
- Substituímos: $c = \dfrac{0{,}25 - 0{,}0018}{1493} \approx 1{,}662\cdot 10^{-4}\ \text{mol/l}$
- Convertemos as unidades:
  $c \approx 1{,}662\cdot 10^{-4}\ \text{mol/l} = 0{,}1662\ \text{mmol/l}$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Cementação do aço – tempo até 0,8 % de carbono a 0,5 mm de profundidade.

Enunciado: `model(diffusion; find=t[h]; D=1.6e-11[m2_s]; cs=1.2[pct]; c0=0.25[pct];`

`cx=0.8[pct]; x=0.5[mm]; process=carburizing)`

Resultado

$$t \approx 7{,}047\,\text{h}$$

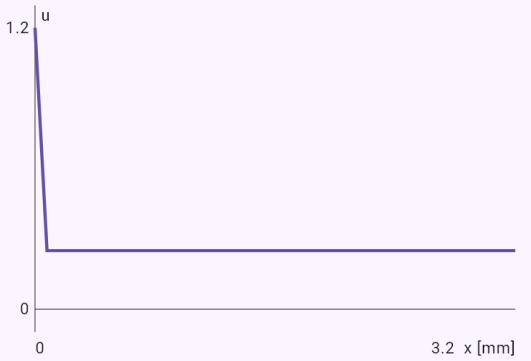
Passos

- Procuramos t; dados
  $D = 1{,}6 \cdot 10^{-11}\,\text{m}^2/\text{s}, \quad c_s = 1{,}2\,\%, \quad c_0 = 0{,}25\,\%, \quad c$
- Convertemos as unidades
  $c_s = 1{,}2\,\% = 0{,}012, \quad c_0 = 0{,}25\,\% = 0{,}0025, \quad c = 0{,}8$
- Uma substância difunde-se a partir de uma superfície com concentração fixa c_s para um corpo com concentração inicial c_0 – por exemplo, carbono no aço na cementação. Vale a equação de difusão c_t = D·c_xx; para um corpo infinitamente espesso face à profundidade de penetração resolve-a a transformada de Laplace no tempo: c = c_0 + (c_s − c_0)·erfc(x/(2√(Dt))), com a função de erro complementar. Dela saem a concentração a uma profundidade, a profundidade de uma concentração pretendida ou o tempo necessário.
  Equação do modelo
  $\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad c(0,t) = c_s, \quad c(x,0) = c_0$
- Solução pela transformada de Laplace (corpo semi-infinito): $c(x,t) = c_0 + (c_s - c_0)\operatorname{erfc}\frac{x}{2\sqrt{Dt}}$
- Função de erro complementar inversa
  $\operatorname{erfc} z = \frac{c - c_0}{c_s - c_0} = \frac{0{,}008 - 0{,}0025}{0{,}012 - 0{,}0025} \approx 0{,}5789 \Rightarrow z \approx 0,$
- Isolamos a grandeza procurada: $t = \frac{x^2}{4Dz^2}$
- Substituímos
  $t = \frac{(5 \cdot 10^{-4})^2}{4 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-11} \cdot 0{,}3924^2} \approx 25\,370\,\text{s}$

- A profundidade típica de penetração é √(Dt): $\sqrt{Dt} \approx 6{,}371 \cdot 10^{-4}\,\text{m}$. O dobro da profundidade exige quatro vezes o tempo.
- Convertemos as unidades: $t \approx 25\,370\,\text{s} = 7{,}047\,\text{h}$

Gráfico

No tempo | Superfície 3D



t = 0 h

A solução u no tempo t escolhido com o controle deslizante; o botão a reproduz.

Concentração de carbono a 0,5 mm de profundidade após 7 horas.

Enunciado: `model(diffusion; find=c[pct]; D=1.6e-11[m2_s]; cs=1.2[pct]; c0=0.25[pct];`

```
x=0.5[mm]; t=7[h]; process=carburizing)
```

Resultado

$$c \approx 0{,}7988\,\%$$

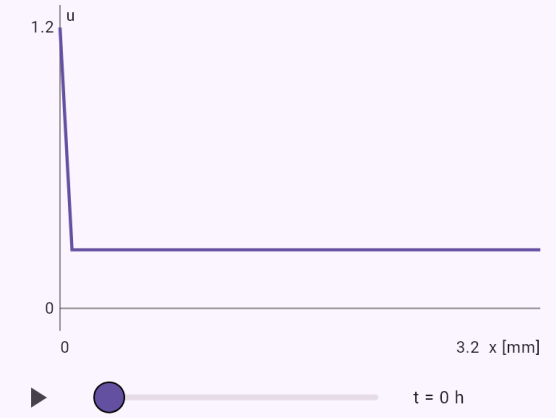
Passos

- Procuramos c; dados
  $D = 1{,}6 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{m^2/s}, \quad c_s = 1{,}2\,\%, \quad c_0 = 0{,}25\,\%, \quad x$
- Convertemos as unidades
  $c_s = 1{,}2\,\% = 0{,}012, \quad c_0 = 0{,}25\,\% = 0{,}0025, \quad x = 0{,}5$
- Uma substância difunde-se a partir de uma superfície com concentração fixa c_s para um corpo com concentração inicial c_0 – por exemplo, carbono no aço na cementação. Vale a equação de difusão c_t = D·c_xx; para um corpo infinitamente espesso face à profundidade de penetração resolve-a a transformada de Laplace no tempo: c = c_0 + (c_s − c_0)·erfc(x/(2√(Dt))), com a função de erro complementar. Dela saem a concentração a uma profundidade, a profundidade de uma concentração pretendida ou o tempo necessário.
  Equação do modelo
  $$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad c(0,t) = c_s, \quad c(x,0) = c_0$$
- Solução pela transformada de Laplace (corpo semi-infinito): $c(x,t) = c_0 + (c_s - c_0)\operatorname{erfc}\dfrac{x}{2\sqrt{Dt}}$
- Argumento da função de erro
  $$z = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} = \frac{5 \cdot 10^{-4}}{2\sqrt{1{,}6 \cdot 10^{-11} \cdot 25\,200}} \approx 0{,}3937, \quad \operatorname{erfc}$$
- Substituímos:
  $c = 0{,}0025 + (0{,}012 - 0{,}0025) \cdot 0{,}5777 \approx 0{,}007988$

- A profundidade típica de penetração é √(Dt):
  $\sqrt{Dt} \approx 6{,}35 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{m}$. O dobro da profundidade exige quatro vezes o tempo.
- Convertemos as unidades: $c \approx 0{,}007988 = 0{,}7988\,\%$

Gráfico

No tempo | Superfície 3D



t = 0 h

A solução u no tempo t escolhido com o controle deslizante; o botão a reproduz.

Limitações conhecidas

- O pH e as titulações pressupõem 25 °C (Kw = 10^{-14}) e soluções diluídas – não se calculam coeficientes de atividade.
- Só titulações de um ácido ou de uma base monopróticos com um titulante forte; os ácidos polipróticos por enquanto só como pH de uma solução.
- Uma equação química ainda não é reconhecida numa fotografia – escreva-a na introdução manual ou no formulário.

48. Eletrotecnia

Os cálculos de eletrotecnia estão no ecrã inicial, na secção «Aplicações», área Eletrotecnia: circuito RLC em série e em paralelo com corrente alternada, filtros RC e RL, circuito ressonante, divisor de tensão, ponte de Wheatstone e correção do fator de potência. No formulário escolhe-se a ligação e a grandeza procurada e preenchem-se os valores com unidades; o ícone «?» explica de onde vêm as fórmulas. Tensões e correntes são valores eficazes; os números complexos escrevem-se com j, como em eletrotecnia.

Para cada circuito a app desenha o seu esquema com os valores dos componentes e, em alternada, a resposta em frequência num eixo logarítmico – a impedância e a fase; nos filtros, o ganho em decibéis (diagrama de Bode). Os passos mostram as reatâncias, a impedância na forma algébrica e polar (50∠53,13° Ω), o desfasamento, as correntes, as tensões nos componentes e a potência, e explicam porque é que as tensões dos componentes se somam como fasores.

Um circuito série-paralelo pode ser escrito como expressão, p. ex. R1 + (L1 || (R2 + C1)) com os valores R1=100 L1=10m C1=1u (prefixos m, u, n, k, M). Os passos simplificam o circuito grupo a grupo e depois calculam a tensão e a corrente de cada componente. Qualquer circuito (também com pontes e várias fontes) introduz-se como netlist, como no SPICE – um componente por linha com os seus nós; o nó 0 é a terra. Os passos escrevem a lei das correntes de Kirchhoff nos nós e a matriz do sistema, e resolvem-no por eliminação de Gauss. Sem frequência calcula-se em corrente contínua.

Exemplos

Circuito RLC em série: potência ativa e reativa, fator de potência.

Enunciado: `model(acseries; find=P[W]; U=100[V]; R=30[ohm]; L=254.6[mH]; C=79.58[uF];`

```
f=50[Hz]; parts=rlc)
```

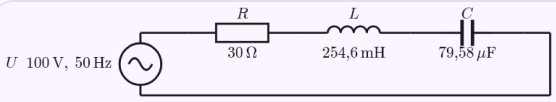
Resultado

$P \approx 120{,}1\ \mathrm{W}$
$Q \approx 160\ \mathrm{var}$
$S \approx 200\ \mathrm{VA}$
$\cos\varphi \approx 0{,}6$

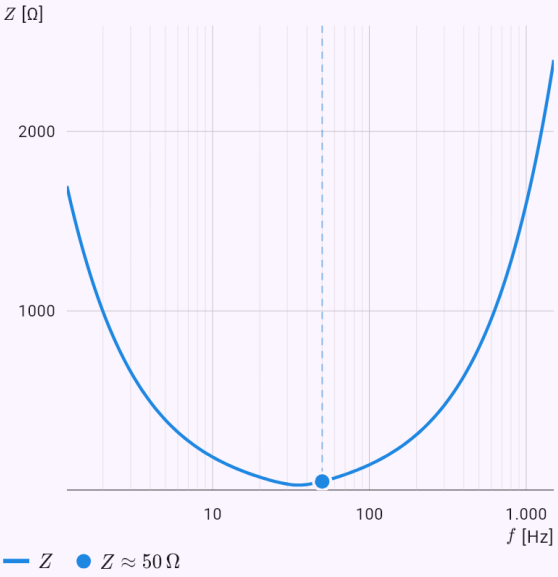
Passos

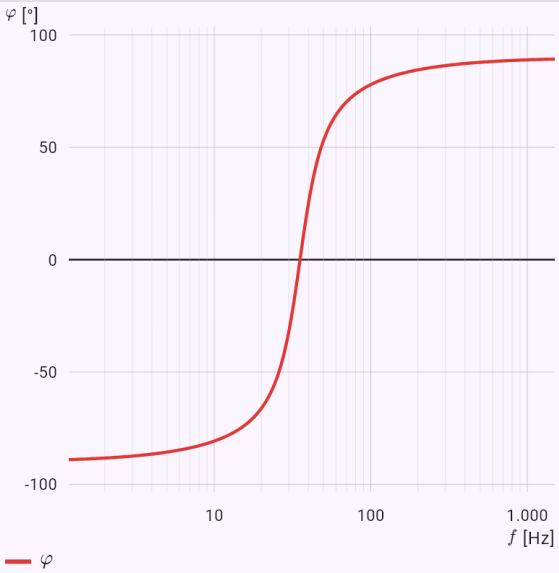
- Procuramos P; dados
  $U = 100\ \mathrm{V},\quad R = 30\ \Omega,\quad L = 254{,}6\ \mathrm{mH},\quad C = 79{,}5$
- Convertemos as unidades
  $L = 254{,}6\ \mathrm{mH} = 0{,}2546\ \mathrm{H},\quad C = 79{,}58\ \mu\mathrm{F} = 7{,}958 \cdot 1$
- Num circuito de corrente alternada, a bobina e o condensador opõem-se à corrente com uma resistência que depende da frequência – a reatância: a indutiva X_L = ωL cresce com a frequência e a capacitiva X_C = 1/(ωC) diminui (ω = 2πf). A tensão da bobina está adiantada 90° em relação à corrente e a do condensador atrasada 90°, por isso não se somam aritmeticamente, mas como fasores – números complexos com a unidade imaginária j: a impedância Z = R + j(X_L − X_C), o seu módulo Z = √(R² + (X_L − X_C)²) e o desfasamento φ = arctan((X_L − X_C)/R). A corrente I = U/Z e a potência ativa P = UI·cos φ. Tensões e correntes são valores eficazes. Equação do modelo: $\hat{Z} = R + \mathrm{j}(X_L - X_C)$
- Frequência angular: $\omega = 2\pi f = 2\pi \cdot 50 \approx 314{,}2\ \mathrm{rad/s}$
- Reatância indutiva da bobina:
  $X_L = \omega L = 314{,}2 \cdot 0{,}2546 \approx 79{,}98\ \Omega$
- Reatância capacitiva do condensador
  $X_C = \dfrac{1}{\omega C} = \dfrac{1}{314{,}2 \cdot 7{,}958 \cdot 10^{-5}} \approx 40\ \Omega$
- Módulo da impedância – a reatância e a resistência são fasores perpendiculares
  $Z = \sqrt{R^2 + (X_L - X_C)^2} = \sqrt{30^2 + (79{,}98 - 40)^2} \approx 4$
- A impedância como número complexo (forma algébrica e polar)
  $\hat{Z} \approx 30 + \mathrm{j}\,39{,}99\ \Omega = 49{,}99\angle 53{,}12^\circ\ \Omega$
- Desfasamento da corrente em relação à tensão:
  $\varphi = \arctan\dfrac{X_L - X_C}{R} \approx 53{,}12^\circ$
- O circuito é indutivo – a corrente está atrasada em relação à tensão.
- Frequência de ressonância: $f_0 = \dfrac{1}{2\pi\sqrt{LC}} \approx 35{,}36\ \mathrm{Hz}$
- A corrente pela lei de Ohm: $I = \dfrac{U}{Z} = \dfrac{100}{49{,}99} \approx 2\ \mathrm{A}$
- Potência ativa, reativa e aparente
  $P = UI\cos\varphi \approx 120{,}1\ \mathrm{W}$
  $Q = UI\sin\varphi \approx 160\ \mathrm{var}$
  $S = UI \approx 200\ \mathrm{VA}$
- Fator de potência: $\cos\varphi = \dfrac{P}{S} \approx 0{,}6$

Esquema do circuito



Resposta em frequência





O eixo horizontal é logarítmico – cada divisão é dez vezes a frequência. Os pontos são a frequência dada e pontos notáveis.

Circuito RLC em paralelo: correntes dos ramos e corrente total.

Enunciado: `model(acparallel; find=parts[mA]; U=10[V]; R=100[ohm]; L=159.2[mH]; C=31.83[uF]; f=50[Hz]; parts=rlc)`

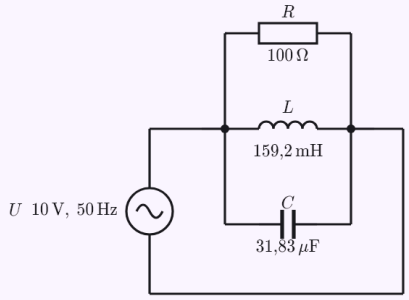
Resultado

$$I_R \approx 100\,\text{mA}$$
$$I_L \approx 199{,}9\,\text{mA}$$
$$I_C \approx 100\,\text{mA}$$
$$I \approx 141{,}4\,\text{mA}$$

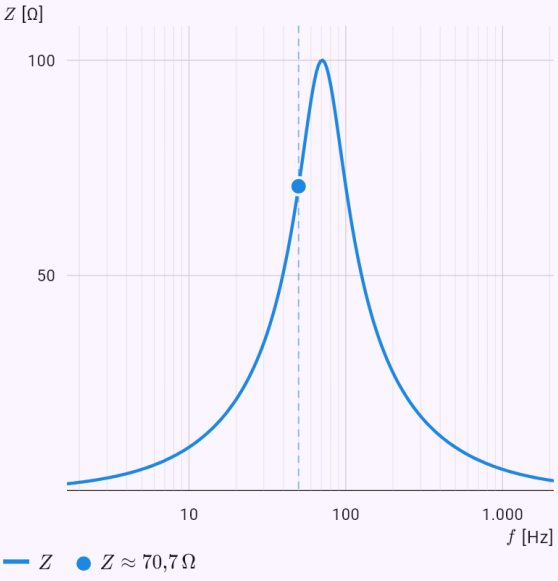
Passos

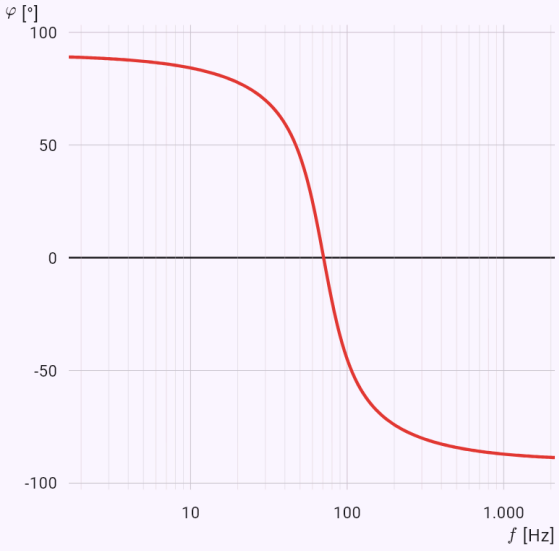
- Procuramos I; dados
  $U = 10\,\text{V}, \quad R = 100\,\Omega, \quad L = 159{,}2\,\text{mH}, \quad C = 31{,}8$
- Convertemos as unidades
  $L = 159{,}2\,\text{mH} = 0{,}1592\,\text{H}, \quad C = 31{,}83\,\mu\text{F} = 3{,}183 \cdot 1$
- Num circuito em paralelo todos os ramos têm a mesma tensão e as correntes dos ramos somam-se como fasores. Por isso, em vez das impedâncias, somam-se os seus inversos – as admitâncias: Y = 1/R + j(ωC − 1/(ωL)). A corrente da resistência está em fase com a tensão, a da bobina atrasada 90° e a do condensador adiantada 90°. A corrente total I = √(I_R² + (I_C − I_L)²) pode ser menor do que as correntes dos ramos – na ressonância as correntes da bobina e do condensador anulam-se. Equação do modelo
  $$\hat{Y} = \frac{1}{\hat{Z}} = \frac{1}{R} + \text{j}\left(\frac{1}{X_C} - \frac{1}{X_L}\right)$$
- Frequência angular: $\omega = 2\pi f = 2\pi \cdot 50 \approx 314{,}2\,\text{rad/s}$
- Reatância indutiva da bobina:
  $X_L = \omega L = 314{,}2 \cdot 0{,}1592 \approx 50{,}01\,\Omega$
- Reatância capacitiva do condensador
  $$X_C = \frac{1}{\omega C} = \frac{1}{314{,}2 \cdot 3{,}183 \cdot 10^{-5}} \approx 100\,\Omega$$
- Admitância – os inversos das impedâncias dos ramos somam-se como fasores
  $$Y = \sqrt{\left(\frac{1}{100}\right)^2 + \left(\frac{1}{100} - \frac{1}{50{,}01}\right)^2} \approx 0{,}01414\,\text{S}, \quad \hat{Y}$$
- Impedância do circuito: $Z = \frac{1}{Y} \approx 70{,}73\,\Omega$
- A impedância como número complexo (forma algébrica e polar)
  $\hat{Z} \approx 50{,}03 + \text{j}\,50\,\Omega = 70{,}73\angle 44{,}98^\circ\,\Omega$
- Desfasamento da corrente em relação à tensão
  $$\varphi = \arctan\left(R\left(\frac{1}{X_L} - \frac{1}{X_C}\right)\right) \approx 44{,}98^\circ$$
- O circuito é indutivo – a corrente está atrasada em relação à tensão.
- Frequência de ressonância: $f_0 = \frac{1}{2\pi\sqrt{LC}} \approx 70{,}7\,\text{Hz}$
- Correntes dos ramos – todos têm a mesma tensão
  $$I_R = \frac{U}{R} = \frac{10}{100} \approx 0{,}1\,\text{A}$$
  $$I_L = \frac{U}{X_L} = \frac{10}{50{,}01} \approx 0{,}1999\,\text{A}$$
  $$I_C = \frac{U}{X_C} = \frac{10}{100} \approx 0{,}1\,\text{A}$$
- Corrente total – a soma fasorial das correntes dos ramos: $I = \sqrt{I_R^2 + (I_C - I_L)^2} \approx 0{,}1414\,\text{A}$
- As correntes dos ramos somam-se como fasores, não aritmeticamente – as correntes da bobina e do condensador estão em oposição de fase.

Esquema do circuito



Resposta em frequência





O eixo horizontal é logarítmico – cada divisão é dez vezes a frequência. Os pontos são a frequência dada e pontos notáveis.

Passa-baixa RC: ganho em decibéis e diagrama de Bode.

Enunciado: `model(filter; find=gain[one]; R=1[kohm]; C=100[nF]; f=1[kHz]; U1=5[V];`

kind=rcLow)

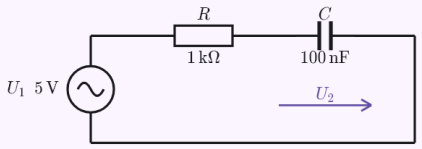
Resultado

$$|\hat{H}| \approx 0{,}8467$$
$$A \approx -1{,}45\,\text{dB}$$
$$\varphi \approx -32{,}14^\circ$$
$$U_2 \approx 4{,}234\,\text{V}$$

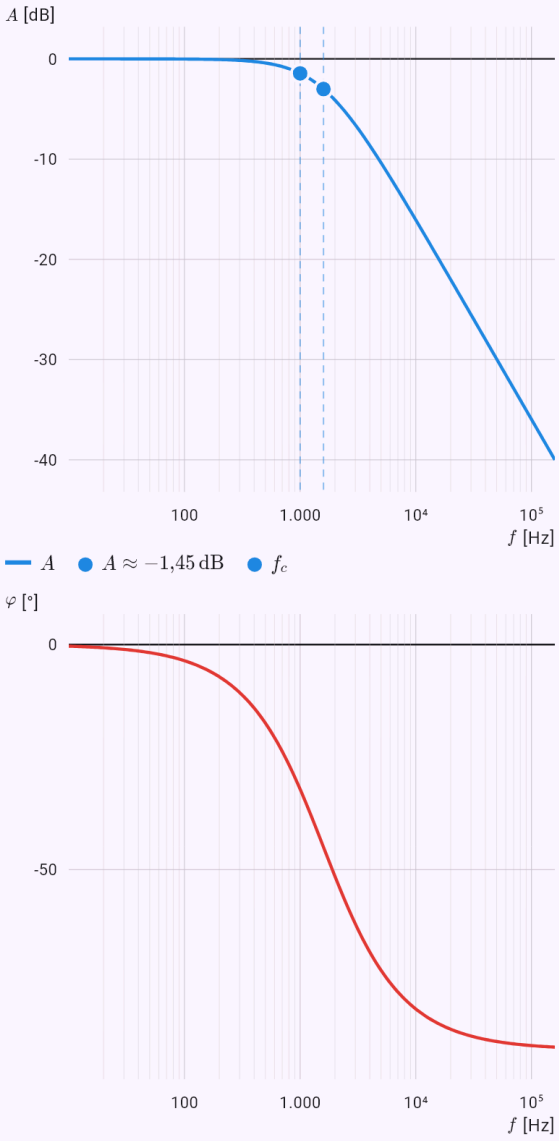
Passos

- Dados
  $R = 1\,\text{k}\Omega, \quad C = 100\,\text{nF}, \quad f = 1\,\text{kHz}, \quad U_1 = 5\,\text{V}$
- Convertemos as unidades
  $R = 1\,\text{k}\Omega = 1000\,\Omega, \quad C = 100\,\text{nF} = 10^{-7}\,\text{F}, \quad f = 1$
- Um filtro de primeira ordem é um divisor de tensão formado por uma resistência e um condensador (ou uma bobina). O passa-baixa (RC com a saída no condensador) deixa passar as frequências baixas e atenua as altas; o passa-alta faz o contrário. A frequência de corte f_c = 1/(2πRC), em RL f_c = R/(2πL): nela a tensão de saída cai para 1/√2 ≈ 70,7 % (3 dB) e o desfasamento é de 45°. A função de transferência H = U_2/U_1 é um número complexo; o seu módulo em decibéis A = 20·log|H| e a sua fase formam o diagrama de Bode – acima do corte, um passa-baixa cai 20 dB por década. Equação do modelo
  $$f_c = \frac{1}{2\pi RC}, \quad \hat{H} = \frac{\hat{U}_2}{\hat{U}_1} = \frac{1}{1 + \text{j}\frac{f}{f_c}}$$
- Passa-baixa: as frequências baixas passam e as altas são atenuadas.
- Frequência de corte:
  $$f_c = \frac{1}{2\pi RC} = \frac{1}{2\pi \cdot 1000 \cdot 10^{-7}} \approx 1592\,\text{Hz}$$
- Na frequência de corte o ganho é 1/√2 ≈ 0,707 (−3 dB) e o desfasamento 45°.
- A frequência em relação à de corte:
  $$\frac{f}{f_c} = \frac{1000}{1592} \approx 0{,}6283$$
- Módulo do ganho: $|\hat{H}| = \dfrac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{f}{f_c}\right)^2}} \approx 0{,}8467$
- Ganho em decibéis: $A = 20 \log |\hat{H}| \approx -1{,}45\,\text{dB}$
- Desfasamento da saída em relação à entrada:
  $$\varphi = -\arctan \frac{f}{f_c} \approx -32{,}14^\circ$$
- Tensão de saída: $U_2 = |\hat{H}|\, U_1 \approx 0{,}8467 \cdot 5 \approx 4{,}234\,\text{V}$

Esquema do circuito



Resposta em frequência



O eixo horizontal é logarítmico – cada divisão é dez vezes a frequência. Os pontos são a frequência dada e pontos notáveis.

Circuito ressonante em série: fator de qualidade e largura de banda.

Enunciado: `model(resonance; find=Q[one]; L=10[mH]; C=100[nF]; R=10[ohm]; kind=series)`

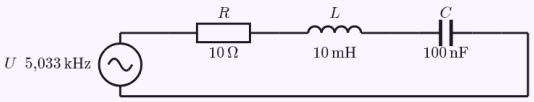
Resultado

$$Q \approx 31{,}62$$
$$B \approx 159{,}2\,\text{Hz}$$
$$f_1 \approx 4954\,\text{Hz}$$
$$f_2 \approx 5113\,\text{Hz}$$

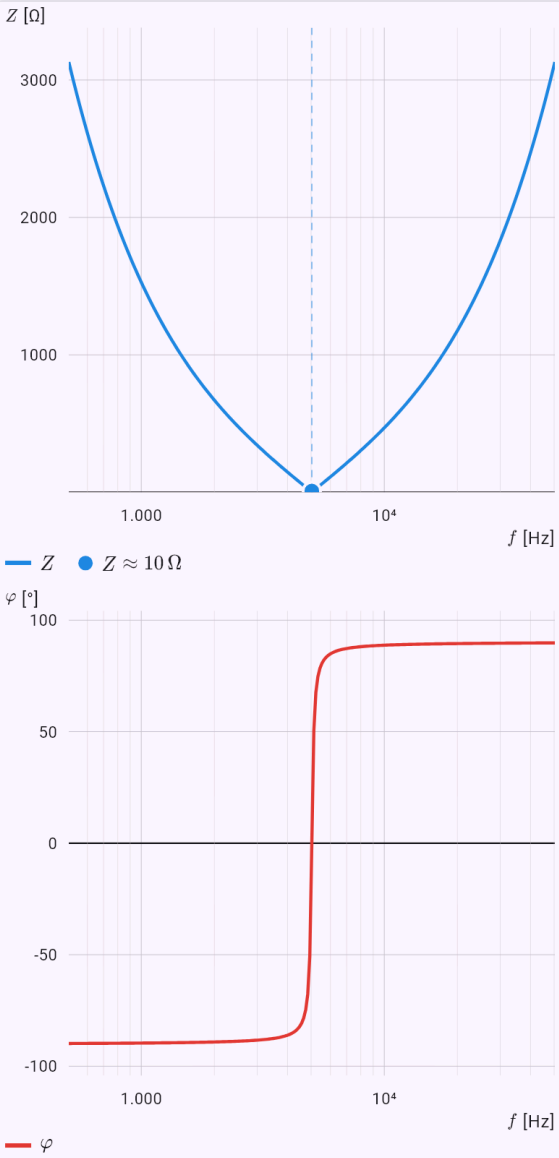
Passos

- Dados: $L = 10\,\text{mH}, \quad C = 100\,\text{nF}, \quad R = 10\,\Omega$
- Convertemos as unidades:
  $L = 10\,\text{mH} = 0{,}01\,\text{H}, \quad C = 100\,\text{nF} = 10^{-7}\,\text{F}$
- À frequência de ressonância $f_0 = 1/(2\pi\sqrt{LC})$ as reatâncias da bobina e do condensador são iguais e anulam-se. Um circuito em série tem então a impedância mínima (só R) e a corrente máxima; um em paralelo, a impedância máxima. A agudeza da ressonância é dada pelo fator de qualidade Q – em série $Q = (1/R)\sqrt{(L/C)}$ – e pela largura de banda $B = f_0/Q$ entre as frequências em que a corrente cai para $1/\sqrt{2}$ do máximo. Sintonia: a capacidade para uma frequência dada $C = 1/(4\pi^2 f_0^2 L)$.
  Equação do modelo: $f_0 = \dfrac{1}{2\pi\sqrt{LC}}, \quad Q = \dfrac{1}{R}\sqrt{\dfrac{L}{C}}$
- Substituímos: $f_0 = \dfrac{1}{2\pi\sqrt{0{,}01 \cdot 10^{-7}}} \approx 5033\,\text{Hz}$
- Na ressonância as reatâncias da bobina e do condensador anulam-se – o circuito em série tem a impedância mínima e a corrente máxima.
- Fator de qualidade
  $$Q = \frac{1}{R}\sqrt{\frac{L}{C}} = \frac{1}{10}\sqrt{\frac{0{,}01}{10^{-7}}} \approx 31{,}62$$
- Largura de banda: $B = \dfrac{f_0}{Q} = \dfrac{5033}{31{,}62} \approx 159{,}2\,\text{Hz}$
- Limites da banda (queda para $1/\sqrt{2}$)
  $$f_{1,2} = f_0\left(\sqrt{1 + \frac{1}{4Q^2}} \mp \frac{1}{2Q}\right): \quad f_1 \approx 4954\,\text{Hz}, \quad f_2 \approx$$

Esquema do circuito



Resposta em frequência



O eixo horizontal é logarítmico – cada divisão é dez vezes a frequência. Os pontos são a frequência dada e pontos notáveis.

Divisor de tensão com carga.

Enunciado: `model(divider; find=U2[V]; U=12[V]; R1=1[kohm]; R2=2[kohm]; RL=2[kohm];`

`load=load)`

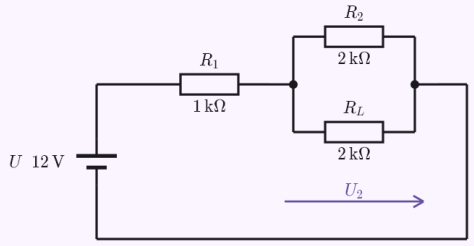
Resultado

$$U_2 \approx 6\,\text{V}$$

Passos

- Procuramos U_2; dados
  $U = 12\,\text{V}, \quad R_1 = 1\,\text{k}\Omega, \quad R_2 = 2\,\text{k}\Omega, \quad R_L = 2\,\text{k}\Omega$
- Convertemos as unidades
  $R_1 = 1\,\text{k}\Omega = 1000\,\Omega, \quad R_2 = 2\,\text{k}\Omega = 2000\,\Omega, \quad R_L = 2$
- Duas resistências em série dividem a tensão na proporção das suas resistências: por ambas passa a mesma corrente I = U/(R₁ + R₂), logo U₂ = U·R₂/(R₁ + R₂). Uma carga R_L fica em paralelo com R₂ e reduz a resistência inferior para R₂R_L/(R₂ + R_L) – a tensão de saída do divisor com carga é menor do que em vazio. Equação do modelo:
  $U_2 = U\dfrac{R_{2L}}{R_1 + R_{2L}}, \quad R_{2L} = \dfrac{R_2 R_L}{R_2 + R_L}$
- A carga está em paralelo com R₂
  $R_{2L} = \dfrac{R_2 R_L}{R_2 + R_L} = \dfrac{2000 \cdot 2000}{2000 + 2000} \approx 1000\,\Omega$
- Substituímos: $U_2 = 12 \cdot \dfrac{1000}{1000 + 1000} \approx 6\,\text{V}$
- Em vazio seria $U_{2,0} = U\dfrac{R_2}{R_1 + R_2} \approx 8\,\text{V}$ – a carga baixa a tensão de saída.

Esquema do circuito



Equilíbrio de uma ponte de Wheatstone.

Enunciado: `model(bridge; find=R4[ohm]; R1=100[ohm]; R2=200[ohm]; R3=150[ohm])`

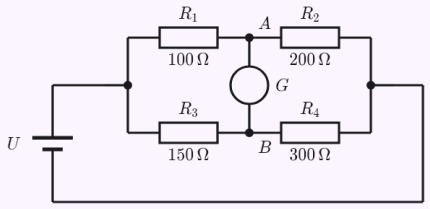
Resultado

$$R_4 \approx 300\,\Omega$$

Passos

- Procuramos R_4; dados:
  $R_1 = 100\,\Omega, \quad R_2 = 200\,\Omega, \quad R_3 = 150\,\Omega$
- A ponte de Wheatstone são dois divisores de tensão em paralelo com um medidor entre os seus pontos médios (A e B). A ponte está equilibrada – não passa corrente no medidor – quando ambos os divisores dividem a tensão na mesma proporção: R₁/R₂ = R₃/R₄. Assim se mede com precisão uma resistência desconhecida. Uma ponte desequilibrada dá a tensão U_AB = U(R₂/(R₁ + R₂) − R₄/(R₃ + R₄)) – é assim que funcionam, por exemplo, os extensómetros. Equação do modelo: $\dfrac{R_1}{R_2} = \dfrac{R_3}{R_4}$
- A ponte está equilibrada – A e B têm a mesma tensão e não passa corrente no medidor.
- Isolamos a grandeza procurada: $R_4 = \dfrac{R_2 R_3}{R_1}$
- Substituímos: $R_4 = \dfrac{200 \cdot 150}{100} \approx 300\,\Omega$

Esquema do circuito



O condensador para corrigir o fator de potência de 0,7 para 0,95.

Enunciado: `model(compensation; find=C[uF]; P=10[kW]; U=230[V]; f=50[Hz]; cos1=0.7[one]; cos2=0.95[one])`

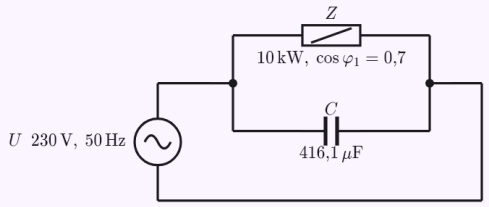
Resultado

$$C \approx 416{,}1\,\mu\mathrm{F}$$

Passos

- Procuramos C; dados
  $P = 10\,\mathrm{kW}, \quad U = 230\,\mathrm{V}, \quad f = 50\,\mathrm{Hz}, \quad \cos\varphi_1 = 0{,}7$
- Convertemos as unidades: $P = 10\,\mathrm{kW} = 10\,000\,\mathrm{W}$
- As cargas com bobinas (motores, transformadores) consomem, além da potência ativa P, uma potência reativa Q = P·tan φ que carrega a linha desnecessariamente com mais corrente. Um condensador em paralelo fornece potência reativa de sinal contrário Q_C = Q₁ − Q₂ e eleva o fator de potência de cos φ₁ para cos φ₂. A capacidade necessária é C = Q_C/(ωU²), com ω = 2πf. A potência ativa não muda e a corrente da rede diminui. Equação do modelo:
  $Q_C = P(\tan\varphi_1 - \tan\varphi_2), \quad C = \dfrac{Q_C}{\omega U^2}$
- Desfasamentos antes e depois da correção
  $\varphi_1 = \arccos 0{,}7 \approx 45{,}57^\circ, \quad \varphi_2 = \arccos 0{,}95 \approx 18{,}19^\circ$
- Potências reativas – o condensador fornece a diferença
  $Q_1 = P\tan\varphi_1 \approx 10\,200\,\mathrm{var}$
  $Q_2 = P\tan\varphi_2 \approx 3287\,\mathrm{var}$
  $Q_C = Q_1 - Q_2 \approx 6915\,\mathrm{var}$
- Frequência angular: $\omega = 2\pi f \approx 314{,}2\,\mathrm{rad/s}$
- Isolamos a grandeza procurada: $C = \dfrac{Q_C}{\omega U^2}$
- Substituímos: $C = \dfrac{6915}{314{,}2 \cdot 230^2} \approx 4{,}161 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{F}$
- Corrente da rede antes e depois da correção
  $I_1 = \dfrac{P}{U\cos\varphi_1} \approx 62{,}11\,\mathrm{A}, \quad I_2 = \dfrac{P}{U\cos\varphi_2} \approx 45{,}77\,\mathrm{A}$
- Convertemos as unidades:
  $C \approx 4{,}161 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{F} = 416{,}1\,\mu\mathrm{F}$

Esquema do circuito



Circuito como expressão – simplificação e corrente de cada componente.

Enunciado: `circuit(R1 + (L1 || C1); R1=10; L1=10m; C1=100u; U=10V; f=50Hz)`

Resultado

$$Z \approx 10{,}59\angle 19{,}22^\circ\ \Omega$$
$$I \approx 0{,}9443\ \mathrm{A}$$
$$\varphi \approx 19{,}22^\circ$$
$$P \approx 8{,}917\ \mathrm{W}$$

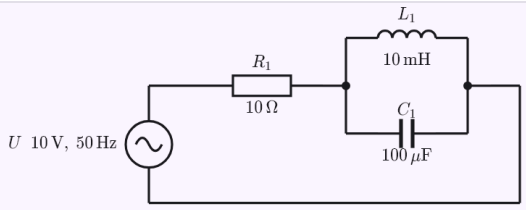
Passos

- A ligação (+ em série, ‖ em paralelo): $R_1 + (L_1 \parallel C_1)$; os valores dados
  $R_1 = 10\,\Omega, \quad L_1 = 10\,\mathrm{mH}, \quad C_1 = 100\,\mu\mathrm{F}, \quad U = 10\,\mathrm{V}$
- Frequência angular: $\omega = 2\pi f = 2\pi \cdot 50 \approx 314{,}2\,\mathrm{rad/s}$
- As impedâncias das bobinas e dos condensadores como números complexos (j é a unidade imaginária)
  $\hat{Z}_{L_1} = \mathrm{j}\omega L_1 = \mathrm{j} \cdot 314{,}2 \cdot 0{,}01 \approx \mathrm{j}\,3{,}142\,\Omega$
  $\hat{Z}_{C_1} = \dfrac{1}{\mathrm{j}\omega C_1} = -\mathrm{j}\dfrac{1}{314{,}2 \cdot 10^{-4}} \approx -\mathrm{j}\,31{,}83\,\Omega$
- Um grupo em paralelo – somam-se os inversos das impedâncias
  $\hat{Z}_a = \dfrac{\hat{Z}_{L_1} \cdot \hat{Z}_{C_1}}{\hat{Z}_{L_1} + \hat{Z}_{C_1}} \approx \mathrm{j}\,3{,}486\,\Omega$
- Um grupo em série – as impedâncias somam-se:
  $\hat{Z} = R_1 + \hat{Z}_a$
- Impedância total do circuito:
  $\hat{Z} = 10 + \mathrm{j}\,3{,}486\,\Omega = 10{,}59\angle 19{,}22^\circ\ \Omega$
- A corrente da fonte pela lei de Ohm (a tensão da fonte tem fase 0°)
  $\hat{I} = \dfrac{\hat{U}}{\hat{Z}} = \dfrac{10}{10{,}59\angle 19{,}22^\circ} \approx 0{,}9443\angle -19{,}22^\circ\ \mathrm{A}$
- Por todas as partes do grupo $\hat{Z}$ passa a mesma corrente – as suas tensões
  $\hat{U}_{R_1} = \hat{I} R_1 \approx 9{,}443\angle -19{,}22^\circ\ \mathrm{V}$
  $\hat{U}_a = \hat{I}\hat{Z}_a \approx 3{,}291\angle 70{,}78^\circ\ \mathrm{V}$
- Todos os ramos do grupo $\hat{Z}_a$ têm a mesma tensão – as correntes dos ramos
  $\hat{I}_{L_1} = \dfrac{\hat{U}_a}{\hat{Z}_{L_1}} \approx 1{,}048\angle -19{,}22^\circ\ \mathrm{A}$
  $\hat{I}_{C_1} = \dfrac{\hat{U}_a}{\hat{Z}_{C_1}} \approx 0{,}1034\angle 160{,}8^\circ\ \mathrm{A}$
- Os componentes – impedância, tensão e corrente (módulo ∠ fase)

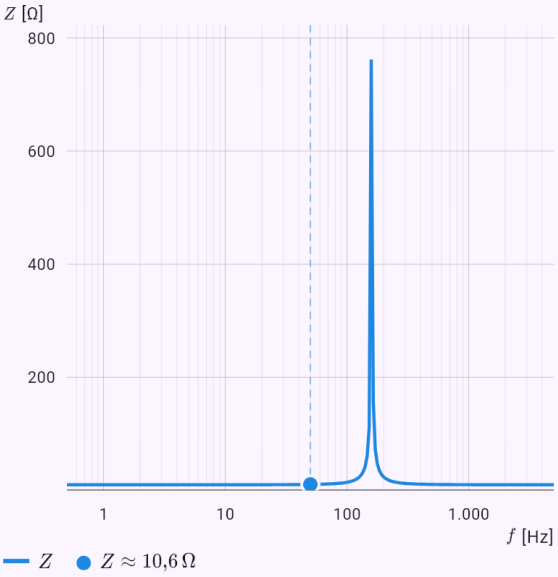
	$\hat{Z}\,[\Omega]$	$\hat{U}\,[\mathrm{V}]$	$\hat{I}\,[\mathrm{A}]$
R_1	10	$9{,}443\angle -19{,}22^\circ$	$0{,}9443\angle -19{,}22^\circ$
L_1	$\mathrm{j}\,3{,}142$	$3{,}291\angle 70{,}78^\circ$	$1{,}048\angle -19{,}22^\circ$
C_1	$-\mathrm{j}\,31{,}83$	$3{,}291\angle 70{,}78^\circ$	$0{,}1034\angle 160{,}8^\circ$

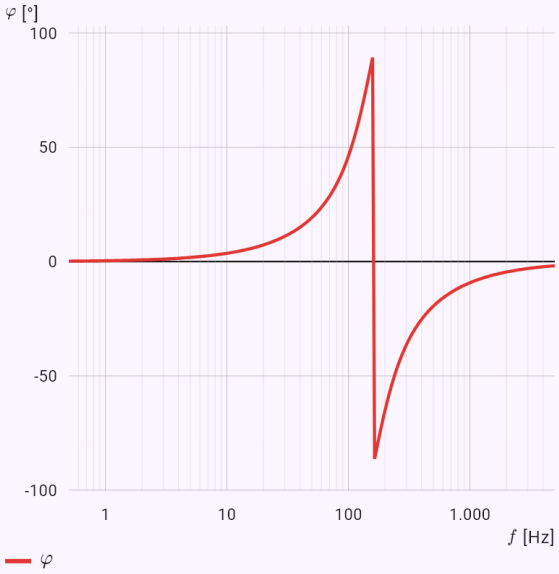
- A potência fornecida pela fonte
  $\hat{S} = \hat{U}\hat{I}^* \approx 8{,}917 + \mathrm{j}\,3{,}108, \quad P \approx 8{,}917\,\mathrm{W}, \quad Q \approx 3{,}1$

Esquema do circuito



Resposta em frequência





O eixo horizontal é logarítmico – cada divisão é dez vezes a frequência. Os pontos são a frequência dada e pontos notáveis.

Ponte desequilibrada como netlist – análise nodal.

Enunciado: `netlist(V1 1 0 12; R1 1 2 100; R2 2 0 200; R3 1 3 150; R4 3 0 250; R5 2 3 50)`

Resultado

$U_1 \approx 12\,\mathrm{V}$
$U_2 \approx 7{,}842\,\mathrm{V}$
$U_3 \approx 7{,}723\,\mathrm{V}$

Passos

- Os componentes, os nós que ligam e os seus valores

	+	−	
V_1	1	0	$12\,\mathrm{V}$
R_1	1	2	$100\,\Omega$
R_2	2	0	$200\,\Omega$
R_3	1	3	$150\,\Omega$
R_4	3	0	$250\,\Omega$
R_5	2	3	$50\,\Omega$

- As incógnitas são as tensões dos nós em relação à terra e as correntes das fontes de tensão: $U_1,\ U_2,\ U_3,\ I_{V_1}$
- Lei das correntes de Kirchhoff – a soma das correntes que saem de cada nó é zero

$$1\text{: } I_{V_1} + \frac{U_1 - U_2}{R_1} + \frac{U_1 - U_3}{R_3} = 0$$
$$2\text{: } \frac{U_2 - U_1}{R_1} + \frac{U_2}{R_2} + \frac{U_2 - U_3}{R_5} = 0$$
$$3\text{: } \frac{U_3 - U_1}{R_3} + \frac{U_3}{R_4} + \frac{U_3 - U_2}{R_5} = 0$$

- As fontes de tensão impõem a tensão entre os seus nós: $U_1 = 12$
- O sistema de equações lineares em forma matricial para as incógnitas $(U_1,\ U_2,\ U_3,\ I_{V_1})$

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 0{,}01667 & -0{,}01 & -0{,}006667 & 1 & 0 \\ -0{,}01 & 0{,}035 & -0{,}02 & 0 & 0 \\ -0{,}006667 & -0{,}02 & 0{,}03067 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{array}\right)$$

- A eliminação de Gauss dá as tensões dos nós

  $U_1 \approx 12\,\mathrm{V}$
  $U_2 \approx 7{,}842\,\mathrm{V}$
  $U_3 \approx 7{,}723\,\mathrm{V}$

- Tensão e corrente de cada componente (do nó + ao nó −)

	$U\,[\mathrm{V}]$	$I\,[\mathrm{A}]$
V_1	12	0,0701
R_1	4,158	0,04158
R_2	7,842	0,03921
R_3	4,277	0,02851
R_4	7,723	0,03089
R_5	0,1188	0,002376

Limitações conhecidas

- Os circuitos são lineares e em regime permanente – os transitórios de RC, RL e RLC estão nas aplicações de física; ainda não há díodos, transístores nem amplificadores operacionais.
- O esquema desenha-se nos formulários e no circuito escrito como expressão; a netlist tem uma tabela de componentes e nós. Um circuito não é reconhecido a partir da fotografia do seu esquema.
- Uma netlist resolve-se em contínua ou numa única frequência – ainda não há fontes de frequências diferentes nem sobreposição.

49. Biologia e medicina

Os cálculos de biologia, laboratório e medicina estão no ecrã inicial, na secção «Aplicações», áreas Biologia e Medicina: cinética enzimática de Michaelis e Menten (também com inibidor), equilíbrio de Hardy–Weinberg, diluições e contagem de colónias, potencial de membrana de Nernst e Goldman e dosagem de medicamentos. O formulário preenche-se como nas outras aplicações; o ícone «?» explica de onde vêm as fórmulas.

A partir das velocidades medidas de uma reação enzimática determina K_m e V_max duas vezes: pelo método escolar da reta de Lineweaver–Burk e, com mais precisão, por regressão não linear; o gráfico mostra os pontos e ambas as curvas. No equilíbrio de Hardy–Weinberg calcula, a partir das contagens dos genótipos, as frequências alélicas, as contagens esperadas e um teste χ^2; numa doença recessiva, a proporção de portadores a partir da sua incidência.

Diluições: o volume de solução-mãe por $c_1V_1 = c_2V_2$, a diluição seriada e as UFC/ml a partir de uma contagem de colónias. Dosagem: dose pelo peso ou pela superfície corporal (Mosteller, Du Bois), ritmo de perfusão em ml/h e em gotas por minuto e depuração da creatinina de Cockcroft e Gault. Os cálculos de doses são indicativos e não substituem o critério médico.

Exemplos

K_m e V_max a partir de velocidades medidas – Lineweaver–Burk e regressão não linear.

Enunciado: `model(enzyme; find=params[one]; SS=0.5 1 2 4 8[mmol_l]; vv=22 31 52 64`

`81[umol_l_min]; input=table)`

Resultado

$$V_{max} \approx 99{,}85\ \mu\text{mol}/(\text{l}\cdot\text{min})$$
$$K_m \approx 2{,}005\ \text{mmol/l}$$

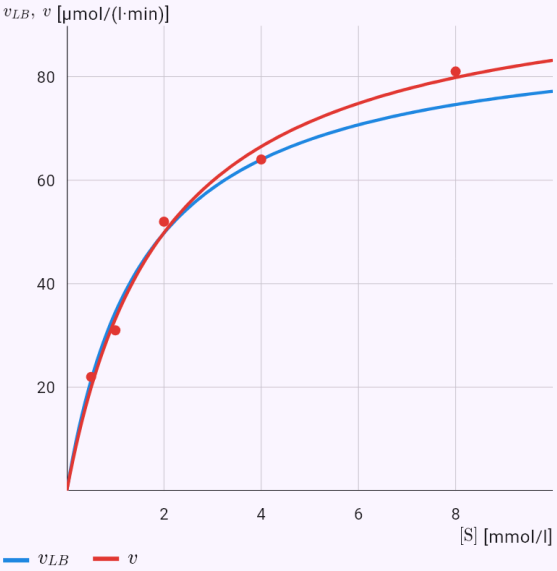
Passos

- Dados
  $[\text{S}]_i = (0{,}5;\ 1;\ 2;\ 4;\ 8)\ \text{mmol/l}, \quad v_i = (22;\ 31;\ 52;\ 64$
- Uma enzima E liga-se ao substrato S e transforma-o em produto. A velocidade v cresce com a concentração de substrato, mas satura – no máximo atinge a velocidade limite V_max, quando todas as moléculas de enzima estão ocupadas. A constante de Michaelis K_m é a concentração de substrato a que a velocidade é metade: v = V_max[S]/(K_m + [S]). A partir de velocidades medidas, as constantes obtêm-se da reta de Lineweaver–Burk (1/v em função de 1/[S], ordenada na origem 1/V_max, declive K_m/V_max) ou, com mais precisão, por regressão não linear. Um inibidor competitivo aumenta o K_m aparente, um não competitivo diminui V_max e um incompetitivo diminui ambos – sempre pelo fator α = 1 + [I]/K_i. Equação do modelo: $v = \dfrac{V_{max}[\text{S}]}{K_m + [\text{S}]}$
- Inversos para o gráfico de Lineweaver–Burk
  $\dfrac{1}{[\text{S}]_i} \approx (2;\ 1;\ 0{,}5;\ 0{,}25;\ 0{,}125), \quad \dfrac{1}{v_i} \approx (0{,}04545;\ 0{,}03$
- Reta de regressão de 1/v em função de 1/[S]
  $\dfrac{1}{v} = \dfrac{1}{V_{max}} + \dfrac{K_m}{V_{max}} \cdot \dfrac{1}{[\text{S}]}: \quad a \approx 0{,}01117, \quad b \approx 0{,}0178$
- Constantes a partir da reta (Lineweaver–Burk)
  $V_{max} = \dfrac{1}{a} \approx 89{,}49\ \mu\text{mol}/(\text{l}\cdot\text{min}), \quad K_m = \dfrac{b}{a} \approx 1{,}594$
- Regressão não linear – mínimos quadrados na própria curva

$$\min \sum \left(v_i - \frac{V_{max}[\text{S}]_i}{K_m + [\text{S}]_i} \right)^2 : \quad V_{max} \approx 99{,}85\ \mu\text{mol}/(\text{l}$$

- O gráfico de Lineweaver–Burk amplia os erros a concentrações baixas (1/v grande) – por isso o resultado é o da regressão não linear; a reta é o método escolar e a estimativa inicial.

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Velocidade de reação com um inibidor competitivo.

Enunciado: `model(enzyme; find=v[umol_l_min]; Vmax=100[umol_l_min]; Km=2[mmol_l];`

`S=2[mmol_l]; I=1[mmol_l]; Ki=1[mmol_l]; input=constants; inhibition=competitive)`

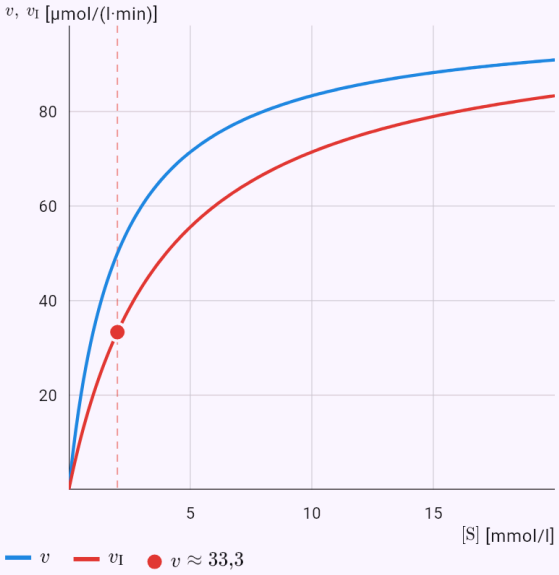
Resultado

$$v \approx 33{,}33\,\mu\text{mol}/(\text{l}\cdot\text{min})$$

Passos

- Procuramos v; dados $V_{max} = 100\,\mu\text{mol}/(\text{l}\cdot\text{min}), \quad K_m = 2\,\text{mmol/l}, \quad [\text{S}] =$
- Uma enzima E liga-se ao substrato S e transforma-o em produto. A velocidade v cresce com a concentração de substrato, mas satura – no máximo atinge a velocidade limite V_max, quando todas as moléculas de enzima estão ocupadas. A constante de Michaelis K_m é a concentração de substrato a que a velocidade é metade: v = V_max[S]/(K_m + [S]). A partir de velocidades medidas, as constantes obtêm-se da reta de Lineweaver–Burk (1/v em função de 1/[S], ordenada na origem 1/V_max, declive K_m/V_max) ou, com mais precisão, por regressão não linear. Um inibidor competitivo aumenta o K_m aparente, um não competitivo diminui V_max e um incompetitivo diminui ambos – sempre pelo fator α = 1 + [I]/K_i. Equação do modelo: $v = \dfrac{V_{max}[\text{S}]}{K_m + [\text{S}]}$
- Fator de inibição: $\alpha = 1 + \dfrac{[\text{I}]}{K_i} = 1 + \dfrac{1}{1} \approx 2$
- Constantes aparentes com o inibidor $K_m^{app} = \alpha K_m \approx 4\,\text{mmol/l}, \quad V_{max}^{app} = V_{max} = 100\,\mu\text{mol}/$
- Um inibidor competitivo compete com o substrato pelo centro ativo – aumenta o K_m aparente e V_max não muda (muito substrato desloca-o).
- Substituímos $v = \dfrac{100 \cdot 2}{4 + 2} \approx 33{,}33\,\mu\text{mol}/(\text{l}\cdot\text{min})$
- Saturação da enzima: $\dfrac{v}{V_{max}} \approx 33{,}3\,\%$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Grupos sanguíneos MN – frequências alélicas e teste χ² do equilíbrio.

Enunciado: `model(hardyweinberg; find=frequencies[one]; AA=1787[one]; Aa=3039[one];`

aa=1303[one]; input=counts)

Resultado

$p \approx 0{,}5395$
$q \approx 0{,}4605$
$\chi^2 \approx 0{,}02698$
$p_{\chi^2} \approx 0{,}87$

Passos

- Dados: $n_{AA} = 1787, \quad n_{Aa} = 3039, \quad n_{aa} = 1303$
- Numa população com cruzamentos ao acaso e sem seleção, mutação nem migração, as frequências alélicas mantêm-se e os genótipos estão na proporção p² : 2pq : q², onde p e q (p + q = 1) são as frequências dos alelos A e a. A partir das contagens dos genótipos calcula-se p = (2n_AA + n_Aa)/(2n) e as contagens esperadas; um teste χ² (1 grau de liberdade) mostra se a população se afasta do equilíbrio. Para um carácter recessivo só se conhece a proporção de homozigóticos q², donde q = √q² e a proporção de portadores 2pq. Equação do modelo: $p + q = 1, \quad p^2 + 2pq + q^2 = 1$
- Frequências alélicas – cada indivíduo tem dois $p = \frac{2n_{AA} + n_{Aa}}{2n} = \frac{2 \cdot 1787 + 3039}{2 \cdot 6129} \approx 0{,}5395, \quad q = 1$
- Contagens esperadas no equilíbrio $E_{AA} = np^2 \approx 1784, \quad E_{Aa} = 2npq \approx 3045, \quad E_{aa} = n($
- Teste de ajustamento χ² $\chi^2 = \sum \frac{(O - E)^2}{E} \approx 0{,}02698, \quad df = 1, \quad p \approx 0{,}87$
- p > 0,05 – o desvio do equilíbrio de Hardy–Weinberg não é significativo.

Proporção de portadores de uma doença recessiva com incidência de 1 : 2500.

Enunciado: `model(hardyweinberg; find=frequencies[one]; f=0.04[pct]; input=recessive)`

Resultado

$p \approx 0{,}98$
$q \approx 0{,}02$
$2pq \approx 0{,}0392$

Passos

- Dados: $f_{aa} = 0{,}04\,\%$
- Convertemos as unidades: $f_{aa} = 0{,}04\,\% = 4 \cdot 10^{-4}$
- Numa população com cruzamentos ao acaso e sem seleção, mutação nem migração, as frequências alélicas mantêm-se e os genótipos estão na proporção p² : 2pq : q², onde p e q (p + q = 1) são as frequências dos alelos A e a. A partir das contagens dos genótipos calcula-se p = (2n_AA + n_Aa)/(2n) e as contagens esperadas; um teste χ² (1 grau de liberdade) mostra se a população se afasta do equilíbrio. Para um carácter recessivo só se conhece a proporção de homozigóticos q², donde q = √q² e a proporção de portadores 2pq. Equação do modelo: $p + q = 1, \quad p^2 + 2pq + q^2 = 1$
- Frequência do alelo recessivo a partir da proporção de homozigóticos $q^2 = f_{aa} \Rightarrow q = \sqrt{4 \cdot 10^{-4}} \approx 0{,}02, \quad p = 1 - q \approx 0{,}98$
- Frequências genotípicas: $p^2 \approx 0{,}9604, \quad 2pq \approx 0{,}0392, \quad q^2 = 4 \cdot 10^{-4}$
- Os portadores (heterozigóticos) são $2pq \approx 3{,}92\,\% \approx \frac{1}{26}$

Quanta solução-mãe para 50 ml diluídos dez vezes.

Enunciado: `model(dilution; find=V1[ml]; c1=10[mg_ml]; c2=1[mg_ml]; V2=50[ml]; mode=simple)`

Resultado

$$V_1 \approx 5\,\mathrm{ml}$$

Passos

- Procuramos V_1; dados:
  $c_1 = 10\,\mathrm{mg/ml}, \quad c_2 = 1\,\mathrm{mg/ml}, \quad V_2 = 50\,\mathrm{ml}$
- Numa diluição a quantidade (massa) de soluto não muda: $c_1V_1 = c_2V_2$. Daí o volume de solução-mãe $V_1 = c_2V_2/c_1$, completado com solvente até V_2. Numa diluição seriada cada passo dilui pelo mesmo fator d (por exemplo 1 : 10); após n passos a concentração é c_0/d^n. Em microbiologia, a partir do número N de colónias numa placa onde se semearam V_p ml da diluição D, o número de células viáveis na amostra original é UFC/ml = N·D/V_p (fiável para 30 a 300 colónias). Equação do modelo: $c_1 V_1 = c_2 V_2$
- Isolamos a grandeza procurada: $V_1 = \dfrac{c_2 V_2}{c_1}$
- Substituímos: $V_1 = \dfrac{1 \cdot 50}{10} \approx 5\,\mathrm{ml}$
- Volume de solvente e diluição:
  $V_2 - V_1 \approx 45\,\mathrm{ml}, \quad \dfrac{c_1}{c_2} \approx 10$

Células numa amostra a partir das colónias de uma placa.

Enunciado: `model(dilution; find=cfu[cfu_ml]; N=150[one]; Vp=0.1[ml]; D=100000[one]; mode=cfu)`

Resultado

$$\mathrm{CFU} \approx 1{,}5 \cdot 10^8\,\mathrm{CFU/ml}$$

Passos

- Procuramos CFU; dados:
  $N = 150, \quad V_p = 0{,}1\,\mathrm{ml}, \quad D = 100\,000$
- Numa diluição a quantidade (massa) de soluto não muda: $c_1V_1 = c_2V_2$. Daí o volume de solução-mãe $V_1 = c_2V_2/c_1$, completado com solvente até V_2. Numa diluição seriada cada passo dilui pelo mesmo fator d (por exemplo 1 : 10); após n passos a concentração é c_0/d^n. Em microbiologia, a partir do número N de colónias numa placa onde se semearam V_p ml da diluição D, o número de células viáveis na amostra original é UFC/ml = N·D/V_p (fiável para 30 a 300 colónias). Equação do modelo: $\mathrm{CFU/ml} = \dfrac{N \cdot D}{V_p}$
- Substituímos
  $\mathrm{CFU/ml} = \dfrac{150 \cdot 100\,000}{0{,}1} \approx 1{,}5 \cdot 10^8\,\mathrm{CFU/ml}$

Potencial de membrana em repouso de um neurónio (Goldman).

Enunciado: `model(nernst; find=E[mV]; Ko=5[mmol_l]; Ki=140[mmol_l]; Nao=145[mmol_l]; Nai=15[mmol_l]; Clo=110[mmol_l]; Cli=10[mmol_l]; PK=1[one]; PNa=0.04[one]; PCl=0.45[one]; T=37[degC]; equation=goldman)`

Resultado

$$V_m \approx -67{,}3\,\mathrm{mV}$$

Passos

- Procuramos V_m; dados $[\mathrm{K^+}]_o = 5\,\mathrm{mmol/l}, \quad [\mathrm{K^+}]_i = 140\,\mathrm{mmol/l}, \quad [\mathrm{Na^+}]_o =$
- Convertemos as unidades: $T = 37\,^\circ\mathrm{C} = 310{,}1\,\mathrm{K}$
- Um ião para o qual a membrana é permeável distribui-se de modo que a força elétrica equilibra a difusão a favor do seu gradiente. A tensão de equilíbrio é dada pela equação de Nernst E = (RT/zF)·ln(c_o/c_i), com as concentrações exterior e interior c_o e c_i, a carga z, a constante dos gases R e a de Faraday F (a 37 °C, RT/F ≈ 26,7 mV). O potencial de repouso, para o qual contribuem vários iões, é descrito pela equação de Goldman – as concentrações ponderadas pelas permeabilidades relativas P_K, P_Na, P_Cl (para o anião $\mathrm{Cl^-}$ trocam-se interior e exterior). Equação do modelo $V_m = \dfrac{RT}{F}\ln\dfrac{P_K[\mathrm{K^+}]_o + P_{Na}[\mathrm{Na^+}]_o + P_{Cl}[\mathrm{Cl^-}]_i}{P_K[\mathrm{K^+}]_i + P_{Na}[\mathrm{Na^+}]_i + P_{Cl}[\mathrm{Cl^-}]_o}$
- A constante RT/F a esta temperatura: $\dfrac{RT}{F} = \dfrac{8{,}314 \cdot 310{,}1}{96\,485} \approx 26{,}73\,\mathrm{mV}$
- Concentrações ponderadas fora (o) e dentro (i) $\mathrm{o} : 1 \cdot 5 + 0{,}04 \cdot 145 + 0{,}45 \cdot 10 \approx 15{,}3, \quad \mathrm{i} : 1 \cdot 140 + 0$
- Substituímos: $V_m = 26{,}73 \cdot \ln\dfrac{15{,}3}{190{,}1} \approx -67{,}34\,\mathrm{mV}$
- O potencial de repouso está perto do potencial de equilíbrio do ião mais permeável – em repouso, o do potássio.

Dose de um citostático pela superfície corporal.

Enunciado: `model(dosage; find=dose[mg]; h=180[cm]; m=80[kg]; ds=100[mg_m2]; mode=bsa)`

Resultado

$$D \approx 200\,\mathrm{mg}$$

Passos

- Procuramos D; dados: $h = 180\,\mathrm{cm}, \quad m = 80\,\mathrm{kg}, \quad d_S = 100\,\mathrm{mg/m^2}$
- Cálculo indicativo – não substitui o critério médico, o folheto informativo nem os protocolos do serviço.
- Dose pelo peso D = d·m (mg/kg × kg); a concentração de uma solução dá o volume V = D/c. Nos citostáticos e nas crianças a dose calcula-se pela superfície corporal: fórmula de Mosteller S = √(altura·peso/3600) (cm, kg, m²) e, para comparar, a de Du Bois. O ritmo de uma perfusão em ml/h é o volume a dividir pelo tempo; em gotas por minuto, ainda vezes o fator de gotejamento do sistema (geralmente 20 gotas/ml). A depuração da creatinina de Cockcroft e Gault estima a função renal: Cl = (140 − idade)·peso/(72·S_cr) com a creatinina em mg/dl (µmol/l a dividir por 88,4), nas mulheres vezes 0,85.

Os resultados são indicativos – não substituem o critério médico nem o folheto informativo. Equação do modelo: $S = \sqrt{\dfrac{h \cdot m}{3600}}, \quad D = d_S \cdot S$

- Superfície corporal (Mosteller): $S = \sqrt{\dfrac{180 \cdot 80}{3600}} \approx 2\,\mathrm{m^2}$
- Para comparar, Du Bois: $S = 0{,}007184 \cdot h^{0{,}725} \cdot m^{0{,}425} \approx 2\,\mathrm{m^2}$
- Substituímos: $D = 100 \cdot 2 \approx 200\,\mathrm{mg}$

Depuração da creatinina de uma mulher (Cockcroft–Gault).

Enunciado: `model(dosage; find=crcl[ml_min]; age=60[yr]; m=72[kg]; scr=88.4[umol_l]; mode=crcl; sex=female)`

Resultado

$Cl_{cr} \approx 68\,\mathrm{ml/min}$

Passos

- Procuramos Cl_{cr}; dados $a = 60\,\mathrm{anos}, \quad m = 72\,\mathrm{kg}, \quad S_{cr} = 88{,}4\,\mu\mathrm{mol/l}$
- Cálculo indicativo – não substitui o critério médico, o folheto informativo nem os protocolos do serviço.
- Dose pelo peso D = d·m (mg/kg × kg); a concentração de uma solução dá o volume V = D/c. Nos citostáticos e nas crianças a dose calcula-se pela superfície corporal: fórmula de Mosteller S = √(altura·peso/3600) (cm, kg, m²) e, para comparar, a de Du Bois. O ritmo de uma perfusão em ml/h é o volume a dividir pelo tempo; em gotas por minuto, ainda vezes o fator de gotejamento do sistema (geralmente 20 gotas/ml). A depuração da creatinina de Cockcroft e Gault estima a função renal: Cl = (140 − idade)·peso/(72·S_cr) com a creatinina em mg/dl (µmol/l a dividir por 88,4), nas mulheres vezes 0,85.

Os resultados são indicativos – não substituem o critério médico nem o folheto informativo. Equação do modelo: $Cl_{cr} = \dfrac{(140 - a)m}{72\,S_{cr}} \cdot 0{,}85$

- Creatinina em mg/dl (µmol/l a dividir por 88,4): $S_{cr} = \dfrac{88{,}4}{88{,}4} \approx 1\,\mathrm{mg/dl}$
- Substituímos $Cl_{cr} = \dfrac{(140 - 60) \cdot 72}{72 \cdot 1} \cdot 0{,}85 \approx 68\,\mathrm{ml/min}$

Limitações conhecidas

- A cinética enzimática só para um substrato em estado estacionário (Michaelis–Menten); ainda não há enzimas alostéricas (equação de Hill).
- Hardy–Weinberg para um gene com dois alelos; ainda não há mais alelos nem genes ligados ao X.
- A dosagem é indicativa – não considera interações, grupos etários nem ajustes à função dos órgãos além da depuração da creatinina.

50. Economia, finanças e seguros

Os cálculos financeiros e económicos estão no ecrã inicial, na secção «Aplicações», área Economia: juros por dias (30E/360, ACT/360, ACT/365), uma letra de câmbio e o seu desconto, uma renda do que foi poupado (temporária, diferida, perpétua), juros mistos, poupança com depósito inicial e juros anuais, um empréstimo com amortização constante, juros de um depósito (simples, compostos, contínuos, com imposto e inflação), poupança regular, empréstimo com plano de amortização e TAEG, obrigação, investimento (VAL, TIR, período de recuperação), conversão de moedas, ponto crítico, maximização do lucro, equilíbrio de mercado, modelo de Leontief e cadeias de Markov, e ainda matemática atuarial – tábuas de mortalidade, seguro de vida, rendas, provisões e seguro não vida com bónus-malus.

O investimento em empréstimos P2P calcula o valor da carteira (saldo na conta e capital em aberto) mês a mês: os depósitos são investidos em valores inteiros por empréstimo, os empréstimos são pagos em prestações iguais, a plataforma cobra uma taxa de originação e uma parte dos juros, as perdas são uma taxa de inadimplência anual; para comparação, uma fórmula fechada com reinvestimento contínuo. Inversamente, encontra o depósito mensal ou o prazo para um valor-alvo.

Os montantes podem estar em qualquer moeda – escolhida no formulário (por omissão, a do país do telemóvel); o cálculo não depende dela. A conversão de moedas usa os câmbios diários do Banco Nacional Checo (em checo ou com o telemóvel configurado na Chéquia) ou as taxas de referência do Banco Central Europeu (nos outros idiomas) e converte qualquer par através de uma moeda comum, mostrando a fonte e a data.

Os montantes numa moeda são escritos segundo o costume da língua da aplicação e da região das definições do telefone (2 431,50 EUR; no Brasil 2.431,50; em inglês 2,431.50), tal como a data da tabela de câmbios.

Os passos mostram as fórmulas, a substituição e os resultados intermédios: a taxa efetiva e a real, o plano de amortização, o valor atual dos fluxos, a receita e o custo marginais como derivadas, os excedentes como integrais, a inversa de Leontief e a distribuição estacionária resolvendo um sistema. A matemática atuarial usa números de comutação; a provisão é mostrada de forma prospetiva e retrospetiva.

Exemplos

Depósito com capitalização mensal, imposto e inflação.

Enunciado: `model(deposit; find=Kn[one]; K0=100000[one]; p=5[pct]; n=10[one]; d=15[pct];`

`infl=3[pct]; kind=compound; freq=monthly; cur=CZK)`

Resultado

$$K_n \approx 152\,844{,}24\,\text{CZK}$$

Passos

- Dados:
  $K_0 = 100\,000, \quad p = 5\,\%, \quad n = 10, \quad d = 15\,\%, \quad \pi = 3\,\%$
- Convertemos as unidades:
  $p = 5\,\% = 0{,}05, \quad d = 15\,\% = 0{,}15, \quad \pi = 3\,\% = 0{,}03$
- Com juros simples, os juros calculam-se sempre sobre o capital inicial: K_n = K₀(1 + pn). Com juros compostos, são capitalizados e rendem também: K_n = K₀(1 + p/m)^(mn), sendo m o número de capitalizações por ano (anual, semestral, trimestral, mensal). A capitalização contínua é o limite m → ∞: K_n = K₀e^(pn). Um imposto d sobre os juros reduz a taxa para p(1 − d). A taxa anual efetiva compara as frequências. Atualizar é o cálculo inverso – quanto depositar hoje. Com inflação π, o valor real é K_n/(1 + π)^n. Os juros mistos (como os bancos creditam juros uma vez por ano) capitalizam os anos inteiros e aplicam juros simples ao resto do último: K_n = K₀(1 + p)^k·(1 + p·f), n = k + f. Equação do modelo:
  $K_n = K_0\left(1 + \frac{p'}{m}\right)^{mn}$
- Capitalizações por ano: $m = 12$
- Taxa após imposto:
  $p' = p(1 - d) = 5\,\% \cdot (1 - 0{,}15) = 4{,}25\,\%$
- Taxa anual efetiva: $p_{ef} = \left(1 + \frac{p'}{m}\right)^{m} - 1 \approx 4{,}334\,\%$
- Substituímos
  $K_n = 100\,000 \cdot \left(1 + \frac{0{,}0425}{12}\right)^{120} \approx 152\,844{,}24\,\text{CZK}$
- Juros no total: $K_n - K_0 \approx 52\,844{,}24\,\text{CZK}$
- Valor real (a preços de hoje):
  $\frac{K_n}{(1+\pi)^n} \approx 113\,730{,}47\,\text{CZK}$
- Taxa de juro real: $r = \frac{1 + p_{ef}}{1 + \pi} - 1 \approx 1{,}295\,\%$
- A taxa de juro supera a inflação – o valor real do dinheiro aumenta.

Poupança mensal durante 15 anos.

Enunciado: `model(savings; find=S[one]; a=2000[one]; p=3[pct]; n=15[one]; d=15[pct]; timing=due; freq=monthly; cur=CZK)`

Resultado

$$S \approx 438\,907{,}24\,\text{CZK}$$

Passos

- Dados: $a = 2\,000, \quad p = 3\,\%, \quad n = 15, \quad d = 15\,\%$
- Convertemos as unidades:
  $p = 3\,\% = 0{,}03, \quad d = 15\,\% = 0{,}15$
- Na poupança regular deposita-se um montante a em cada período (mês, ano). Cada depósito rende juros durante um tempo diferente, por isso o valor acumulado é a soma de uma progressão geométrica: S = a·q·(q^N − 1)/(q − 1) para depósitos no início do período (antecipados), sem o primeiro q para depósitos no fim (postecipados); q = 1 + p/m e N = mn é o número de depósitos. A equação dá também o depósito necessário ou o prazo. Um depósito inicial opcional K₀ rende juros o tempo todo – soma-se K₀·q^N. Com juros creditados uma vez por ano, os depósitos mensais rendem juros simples dentro do ano – um ano dá A = a(12 + p·13/2) com depósitos no início do mês, a(12 + p·11/2) no fim – e só esses valores anuais se capitalizam. Equação do modelo: $S = a\,q\,\frac{q^N - 1}{q - 1}, \quad q = 1 + \frac{p'}{m}, \quad N = mn$
- Taxa após imposto:
  $p' = p(1 - d) = 3\,\% \cdot (1 - 0{,}15) = 2{,}55\,\%$
- Fator de capitalização por período:
  $q = 1 + \frac{0{,}0255}{12} \approx 1{,}002125$
- Substituímos
  $S = 2\,000 \cdot 1{,}002125 \cdot \frac{1{,}002125^{180} - 1}{0{,}002125} \approx 438\,907{,}24\,\text{C}$
- Depositado no total e juros
  $N \cdot a = 180 \cdot 2\,000 = 360\,000\,\text{CZK}, \quad S - Na \approx 78\,90$

Crédito à habitação de 3 milhões a 25 anos – prestação, plano e TAEG.

Enunciado: `model(loan; find=a[one]; D=3000000[one]; p=5[pct]; n=25[one]; F=15000[one]; freq=monthly; cur=CZK)`

Resultado

$$a \approx 17\,537{,}70\,\mathrm{CZK}$$

$$\mathrm{RPSN} \approx 5{,}169\,\%$$

Passos

- Dados:
  $D = 3\,000\,000, \quad p = 5\,\%, \quad n = 25, \quad F = 15\,000$
- Convertemos as unidades: $p = 5\,\% = 0{,}05$
- Um empréstimo com prestações constantes paga-se com prestações iguais a. Cada prestação paga primeiro os juros sobre o capital em dívida e o resto amortiza a dívida, por isso a parte de juros diminui com o tempo. O valor atual de todas as prestações é igual ao empréstimo, donde a = D·q^N(q − 1)/(q^N − 1), q = 1 + p/m. O plano de amortização mostra em cada prestação os juros, a amortização e a dívida restante. A TAEG inclui também as comissões – é a taxa à qual o valor atual das prestações iguala o montante realmente recebido. Na amortização constante (SAC), a dívida diminui a cada período o mesmo valor M = D/N e a prestação a_k = M + U_k diminui com os juros – pagam-se menos juros do que na tabela Price, mas as primeiras prestações são maiores. O plano mostra o primeiro ano e a última prestação, ou tudo. Equação do modelo:
  $a = D\,\dfrac{q^N(q-1)}{q^N-1}, \quad q = 1 + \dfrac{p}{m}, \quad N = mn$
- Juro por período:
  $i = \dfrac{p}{m} = \dfrac{0{,}05}{12} \approx 0{,}00416667, \quad q = 1 + i$
- Substituímos
  $a = 3\,000\,000 \cdot \dfrac{1{,}0041667^{300} \cdot 0{,}00416667}{1{,}0041667^{300} - 1} \approx 17\,537{,}70$
- Plano de amortização (U juros, M amortização, D dívida restante)

k	a	U_k	M_k	D_k
1	17 537,70	12 500	5 037,70	2 994 962,30
2	17 537,70	12 479,01	5 058,69	2 989 903,61
3	17 537,70	12 457,93	5 079,77	2 984 823,84
4	17 537,70	12 436,77	5 100,94	2 979 722,90
5	17 537,70	12 415,51	5 122,19	2 974 600,71
6	17 537,70	12 394,17	5 143,53	2 969 457,18
7	17 537,70	12 372,74	5 164,96	2 964 292,22
8	17 537,70	12 351,22	5 186,48	2 959 105,73
9	17 537,70	12 329,61	5 208,09	2 953 897,64
10	17 537,70	12 307,91	5 229,79	2 948 667,85
11	17 537,70	12 286,12	5 251,59	2 943 416,26
12	17 537,70	12 264,23	5 273,47	2 938 142,79
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
300	17 537,70	72,77	17 464,93	0

- Pago no total e juros incluídos
  $\sum a \approx 5\,261\,310{,}37\,\mathrm{CZK}, \quad \sum U_k \approx 2\,261\,310{,}37\,\mathrm{CZ}$
- TAEG – taxa anual efetiva global com comissões
  $D - F = \sum_{k=1}^{N} \dfrac{a}{(1+\mathrm{RPSN})^{k/m}} \Rightarrow \mathrm{RPSN} \approx 5{,}169\,\%$
- › O método: bissecção, 14 iterações

Poupar 1 000 por mês com depósito inicial e juros creditados anualmente.

Enunciado: `model(savings; find=S[one]; a=1000[one]; K0=20000[one]; p=2[pct]; n=5[one];`

`timing=due; freq=monthly; credit=annual; cur=CZK)`

Resultado

$$S \approx 85\,206{,}62\ \mathrm{CZK}$$

Passos

- Dados: $a = 1\,000, \quad K_0 = 20\,000, \quad p = 2\,\%, \quad n = 5$
- Convertemos as unidades: $p = 2\,\% = 0{,}02$
- Na poupança regular deposita-se um montante a em cada período (mês, ano). Cada depósito rende juros durante um tempo diferente, por isso o valor acumulado é a soma de uma progressão geométrica: S = a·q·(q^N − 1)/(q − 1) para depósitos no início do período (antecipados), sem o primeiro q para depósitos no fim (postecipados); q = 1 + p/m e N = mn é o número de depósitos. A equação dá também o depósito necessário ou o prazo. Um depósito inicial opcional K_0 rende juros o tempo todo – soma-se K_0·q^N. Com juros creditados uma vez por ano, os depósitos mensais rendem juros simples dentro do ano – um ano dá A = a(12 + p·13/2) com depósitos no início do mês, a(12 + p·11/2) no fim – e só esses valores anuais se capitalizam. Equação do modelo

$$A = a\left(m + p'\,\frac{m+1}{2}\right), \quad S = A\,\frac{r^n - 1}{r - 1} + K_0 r^n, \quad r =$$

- Os depósitos de um ano com os juros dentro do ano:
  $A = a \cdot \left(12 + 0{,}02 \cdot \frac{13}{2}\right) = a \cdot 12{,}13$
- Fator de capitalização por período: $r = 1 + 0{,}02 = 1{,}02$
- Substituímos
  $S = 1\,000 \cdot 12{,}13 \cdot \frac{1{,}02^5 - 1}{0{,}02} + 20\,000 \cdot 1{,}02^5 \approx 85\,206,$
- Depositado no total e juros
  $K_0 + N \cdot a = 20\,000 + 60 \cdot 1\,000 = 80\,000\,\mathrm{CZK}, \quad S -$

Investimento em empréstimos P2P: 2 000 CZK por mês durante 10 anos, 200 CZK por empréstimo, com taxa e perdas.

Enunciado: `model(lending; find=V[one]; a=2000[one]; p=8[pct]; f=1[pct]; loss=2[pct];`

`L=200[one]; M=60[one]; n=10[one]; cur=CZK)`

Resultado

$$V \approx 318\,974{,}12\ \text{CZK}$$

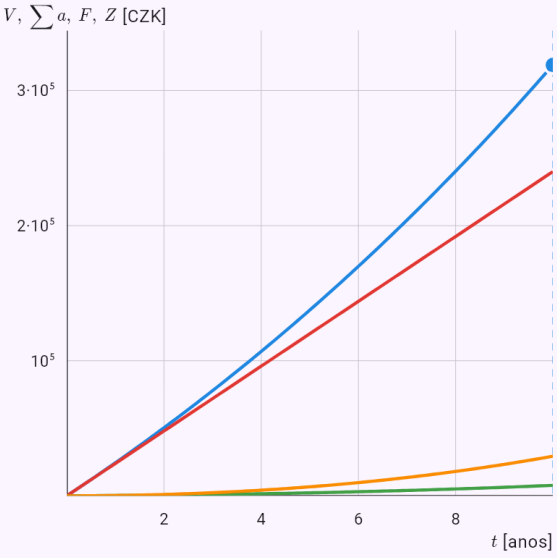
Passos

- Dados
  $a = 2\,000, \quad p = 8\,\%, \quad f = 1\,\%, \quad \lambda = 2\,\%, \quad L = 20$
- Convertemos as unidades:
  $p = 8\,\% = 0{,}08, \quad f = 1\,\% = 0{,}01, \quad \lambda = 2\,\% = 0{,}02$
- Numa plataforma de empréstimos P2P o investidor deposita todo mês o valor a na sua conta. O saldo é investido em múltiplos inteiros do valor L por empréstimo (p. ex. 200 CZK), o resto espera na conta. De cada investimento a plataforma desconta a taxa de originação f, o empréstimo recebe L(1 − f). Os empréstimos são pagos em prestações mensais iguais s = P₀·i/(1 − (1 + i)^(−M)) durante M meses, i = p/12; a plataforma fica com a parte g dos juros. A taxa de inadimplência λ (anual) dá como perdida todo mês uma parte do capital, λ_m = 1 − (1 − λ)^(1/12). As prestações voltam à conta e são reinvestidas. O valor da carteira V = H + P é o saldo na conta H mais o capital em aberto nos empréstimos P. O cálculo simula mês a mês e, para comparação, dá uma fórmula fechada com reinvestimento contínuo: V ≈ 12a(1 − f)(e^(rn) − 1)/r, r = p(1 − g)(1 − f) − λ − f·24/(M + 1). O problema inverso encontra o depósito mensal ou o prazo necessários para um valor-alvo. É uma estimativa com rendimento fixo – o resultado real depende sobretudo das perdas. O rendimento anunciado por uma plataforma costuma já ser líquido de taxas e perdas; nesse caso não as introduza de novo. Não é uma recomendação de investimento. Equação do modelo
  $V_k = H_k + P_k, \quad P' = P(1 - \lambda_m) - (s - iP), \quad H' =$
- Juros mensais, perdas mensais e prestação
  $i = \frac{p}{12} = 0{,}00666667, \quad \lambda_m = 1 - (1 - \lambda)^{1/12} \approx 0{,}001$
- Substituímos
  $V_{120} = H_{120} + P_{120} = 10\,735{,}19 + 308\,238{,}93 \approx 318\,97$
- Simulação mês a mês – estado no fim dos anos (k em meses): depositado, capital em empréstimos P, saldo H, taxas F, perdas Z, valor V

k	$\sum a$	P_k	H_k	F_k	
12	24 000	23 784,39	726,58	266	26
24	48 000	49 198,83	1 248,72	606	1 03
36	72 000	75 757,04	2 129,17	1 032	2 33
48	96 000	103 744,84	3 148,57	1 568	4 21
60	120 000	133 102,33	4 439,70	2 240	6 69
72	144 000	164 382,06	5 541,37	3 054	9 80
84	168 000	197 551,52	6 600,52	4 002	13 58
96	192 000	232 369,52	7 962,71	5 094	18 07
108	216 000	269 327,69	9 238,91	6 346	23 30
120	240 000	308 238,93	10 735,19	7 764	29 33

- Depositado, taxas F, perdas Z, juros líquidos U e ganho
  $\sum a = 240\,000\,\text{CZK}, \quad F = 7\,764\,\text{CZK}, \quad Z = 29\,337$
- Para comparação: fórmula fechada com reinvestimento contínuo
  $r = p(1 - g)(1 - f) - \lambda - f\,\frac{24}{M + 1} \approx 5{,}527\,\%, \quad V \approx$
- É uma estimativa com rendimento fixo e taxa de inadimplência constante – a realidade depende sobretudo das perdas. O rendimento anunciado por uma plataforma costuma já ser líquido de taxas e perdas. Não é uma recomendação de investimento.

Gráfico



As grandezas do modelo no tempo, calculadas a partir da solução; a resposta está marcada.

Um empréstimo com amortização constante – prestações decrescentes comparadas com a tabela Price.

Enunciado: `model(loan; find=a[one]; D=1200000[one]; p=5[pct]; n=10[one]; freq=monthly;`

`method=constant; schedule=short; cur=CZK)`

Resultado

$$a_1 \approx 15\,000\,\mathrm{CZK}$$
$$a_N \approx 10\,041{,}67\,\mathrm{CZK}$$

Passos

- Dados: $D = 1\,200\,000, \quad p = 5\,\%, \quad n = 10$
- Convertemos as unidades: $p = 5\,\% = 0{,}05$
- Um empréstimo com prestações constantes paga-se com prestações iguais a. Cada prestação paga primeiro os juros sobre o capital em dívida e o resto amortiza a dívida, por isso a parte de juros diminui com o tempo. O valor atual de todas as prestações é igual ao empréstimo, donde a = D·q^N(q − 1)/(q^N − 1), q = 1 + p/m. O plano de amortização mostra em cada prestação os juros, a amortização e a dívida restante. A TAEG inclui também as comissões – é a taxa à qual o valor atual das prestações iguala o montante realmente recebido. Na amortização constante (SAC), a dívida diminui a cada período o mesmo valor M = D/N e a prestação a_k = M + U_k diminui com os juros – pagam-se menos juros do que na tabela Price, mas as primeiras prestações são maiores. O plano mostra o primeiro ano e a última prestação, ou tudo. Equação do modelo
  $$M = \frac{D}{N}, \quad a_k = M + U_k, \quad U_k = D_{k-1}\, i, \quad i = \frac{p}{m},$$
- Juro por período: $i = \dfrac{p}{m} = \dfrac{0{,}05}{12} \approx 0{,}00416667$
- Substituímos: $M = \dfrac{1\,200\,000}{120} \approx 10\,000\,\mathrm{CZK}$
- Primeira e última prestação
  $a_1 = M + D\, i \approx 15\,000\,\mathrm{CZK}, \quad a_N = M(1+i) \approx 10\,0$
- Plano de amortização (U juros, M amortização, D dívida restante)

k	a_k	U_k	M_k	D_k
1	15 000	5 000	10 000	1 190 000
2	14 958,33	4 958,33	10 000	1 180 000
3	14 916,67	4 916,67	10 000	1 170 000
4	14 875	4 875	10 000	1 160 000
5	14 833,33	4 833,33	10 000	1 150 000
6	14 791,67	4 791,67	10 000	1 140 000
7	14 750	4 750	10 000	1 130 000
8	14 708,33	4 708,33	10 000	1 120 000
9	14 666,67	4 666,67	10 000	1 110 000
10	14 625	4 625	10 000	1 100 000
11	14 583,33	4 583,33	10 000	1 090 000
12	14 541,67	4 541,67	10 000	1 080 000
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
120	10 041,67	41,67	10 000	0

- Pago no total e juros incluídos:
  $\sum a_k \approx 1\,502\,500\,\mathrm{CZK}, \quad \sum U_k \approx 302\,500\,\mathrm{CZK}$
- Comparado com a tabela Price – prestação e juros totais:
  $a \approx 12\,727{,}86\,\mathrm{CZK}, \quad \sum U_k \approx 327\,343{,}42\,\mathrm{CZK}$
- A amortização constante poupa $24\,843{,}42\,\mathrm{CZK}$ de juros, mas as primeiras prestações são maiores.

Juros por dias pela 30E/360 com imposto de 15 %.

Enunciado: `model(daycount; find=Kn[one]; K0=50000[one]; p=2[pct]; start=2026-03-15;`

`end=2026-09-20; d=15[pct]; basis=e30; cur=CZK)`

Resultado

$u' \approx 436{,}81\ \mathrm{CZK}$
$K_n \approx 50\,436{,}81\ \mathrm{CZK}$

Passos

- Dados: $K_0 = 50\,000, \quad p = 2\,\%, \quad d = 15\,\%$
- Convertemos as unidades:
  $p = 2\,\% = 0{,}02, \quad d = 15\,\% = 0{,}15$
- Depósitos de curto prazo rendem juros simples por t dias: u = K₀·p·t/B. Os dias e a duração do ano B seguem a convenção de contagem de dias: 30E/360 (bancos checos e alemães) conta cada mês como 30 dias (o dia 31 como 30) e o ano como 360, ACT/360 (ano comercial: França, Espanha, Brasil, mercado monetário) os dias reais e um ano de 360, ACT/365 (ano civil, Reino Unido) os dias reais e um ano de 365. Os dias contam-se entre as datas do depósito e do saque, ou escrevem-se diretamente. O imposto é retido dos juros. O inverso – quanto depositar hoje para um valor – é o desconto.
  Equação do modelo: $u = K_0 \cdot p \cdot \frac{t}{B}, \quad K_n = K_0 + u$

- Convenção de contagem de dias e duração do ano:
  $30\mathrm{E}/360: \quad B = 360$
- Dias (30E/360: mês de 30 dias, o 31 como 30)
  $15/03/2026 \to 20/09/2026: \quad t = 360 \cdot (2026 - 2026$
- Substituímos: $u = 50\,000 \cdot 0{,}02 \cdot \frac{185}{360} \approx 513{,}89\ \mathrm{CZK}$
- Imposto sobre os juros e juros líquidos
  $u \cdot d \approx 77{,}08\ \mathrm{CZK}, \quad u' = u - u \cdot d \approx 436{,}81\ \mathrm{CZK}$
- Juros no total: $K_n = K_0 + u' \approx 50\,436{,}81\ \mathrm{CZK}$

Uma letra descontada – o que o banco paga 90 dias antes do vencimento.

Enunciado: `model(bill; find=payout[one]; N=100000[one]; dr=6[pct]; start=2026-01-10; end=2026-04-10; basis=act360; cur=CZK)`

Resultado

$K \approx 98\,500\ \mathrm{CZK}$
$D \approx 1\,500\ \mathrm{CZK}$

Passos

- Dados: $N = 100\,000, \quad d = 6\,\%$
- Convertemos as unidades: $d = 6\,\% = 0{,}06$
- Uma letra de câmbio promete pagar o valor nominal N no vencimento. Um banco pode comprá-la antes (descontá-la) e paga o nominal menos o desconto D = N·d·t/B, em que d é a taxa de desconto e t os dias até o vencimento: K = N(1 − d·t/B). O desconto calcula-se sobre o valor final, não sobre o pago, por isso o rendimento real do banco i = d/(1 − d·t/B) é maior que a taxa de desconto. O usual é ACT/360. Equação do modelo:
  $D = N \cdot d \cdot \frac{t}{B}, \quad K = N - D = N\left(1 - d\,\frac{t}{B}\right)$
- Convenção de contagem de dias e duração do ano:
  $\mathrm{ACT}/360: \quad B = 360$

- Dias pelo calendário:
  $10/01/2026 \to 10/04/2026: \quad t = 90$
- Substituímos: $D = 100\,000 \cdot 0{,}06 \cdot \frac{90}{360} \approx 1\,500\ \mathrm{CZK}$
- Valor pago: $K = N - D \approx 98\,500\ \mathrm{CZK}$
- Rendimento real do banco: $i = \frac{d}{1 - d\,\frac{t}{B}} \approx 6{,}091\,\%$
- O desconto calcula-se sobre o valor final – por isso o banco ganha na realidade mais do que a taxa de desconto.

Uma renda mensal de 2 milhões durante 20 anos, diferida 5 anos.

Enunciado: `model(annuity; find=a[one]; PV=2000000[one]; p=3[pct]; n=20[one]; k=5[one]; kind=temporary; timing=ordinary; freq=monthly; cur=CZK)`

Resultado

$$a \approx 12\,884{,}60\ \mathrm{CZK}$$

Passos

- Dados: $K = 2\,000\,000, \quad p = 3\,\%, \quad n = 20, \quad k = 5$
- Convertemos as unidades: $p = 3\,\% = 0{,}03$
- Uma renda paga um valor regular a de um capital K, que entretanto continua a render juros. O valor presente de N pagamentos é K = a·(1 − q^(−N))/(q − 1), q = 1 + p/m − a mesma fórmula da prestação de um empréstimo. Pagamentos no início dos períodos (renda antecipada) multiplicam-na por q. Uma renda diferida começa a pagar após k anos, e o capital cresce entretanto até K·q^(mk). Uma renda perpétua paga só os juros e o capital mantém-se: K = a/(q − 1). O resultado é o pagamento, o capital necessário ou quanto tempo duram os pagamentos. Equação do modelo:
  $$K = a\,\frac{1 - q^{-N}}{q - 1} \cdot q^{-mk}, \quad q = 1 + \frac{p'}{m}, \quad N = mn$$
- Fator de capitalização por período:
  $q = 1 + \frac{0{,}03}{12} \approx 1{,}0025$
- Descontado pelo diferimento:
  $q^{-mk} = 1{,}0025^{-60} \approx 0{,}860869$
- Isolamos a grandeza procurada: $a = \frac{K(q-1)q^{mk}}{1 - q^{-N}}$
- Substituímos: $a \approx 12\,884{,}60\ \mathrm{CZK}$

- Capital no início dos pagamentos:
  $K\,q^{mk} \approx 2\,323\,233{,}56\ \mathrm{CZK}$
- Evolução dos pagamentos (U juros, K saldo)

k	a	U_k	K_k
1	12 884,60	5 808,08	2 316 157,05
2	12 884,60	5 790,39	2 309 062,84
3	12 884,60	5 772,66	2 301 950,90
4	12 884,60	5 754,88	2 294 821,18
5	12 884,60	5 737,05	2 287 673,64
6	12 884,60	5 719,18	2 280 508,23
7	12 884,60	5 701,27	2 273 324,90
8	12 884,60	5 683,31	2 266 123,61
9	12 884,60	5 665,31	2 258 904,33
10	12 884,60	5 647,26	2 251 666,99
11	12 884,60	5 629,17	2 244 411,56
12	12 884,60	5 611,03	2 237 137,99
⋮	⋮	⋮	⋮
240	12 884,60	32,13	0

- Pago no total e os juros incluídos
  $\sum a \approx 3\,092\,303{,}41\ \mathrm{CZK}, \quad \sum a - K \approx 1\,092\,303{,}41$

Preço e duração de uma obrigação.

Enunciado: `model(bond; find=price[one]; N=1000[one]; cp=5[pct]; n=5[one]; y=4[pct];`

`freq=annual; cur=EUR)`

Resultado

$$P \approx 1\,044{,}52\,€$$

Passos

- Dados: $N = 1\,000, \quad c = 5\,\%, \quad n = 5, \quad y = 4\,\%$
- Convertemos as unidades:
  $c = 5\,\% = 0{,}05, \quad y = 4\,\% = 0{,}04$
- Uma obrigação paga em cada período um cupão C = c·N/m e, no fim, o valor nominal N. O seu preço é o valor atual desses pagamentos descontados ao rendimento de mercado y. Se o rendimento de mercado for inferior ao cupão, a obrigação cota acima do par; caso contrário, abaixo. O rendimento até à maturidade é a taxa à qual o valor atual dos pagamentos iguala o preço – calcula-se numericamente. A duração é o prazo médio ponderado dos pagamentos e mede a sensibilidade do preço às taxas de juro. Equação do modelo
  $$P = \sum_{k=1}^{N} \frac{C}{\left(1+\frac{y}{m}\right)^{k}} + \frac{N_{nom}}{\left(1+\frac{y}{m}\right)^{N}}$$
- Cupão por período: $C = \dfrac{c \cdot N_{nom}}{m} = 50\,€, \quad N = 5$
- Substituímos
  $$P = 50 \cdot \frac{1 - 0{,}961538^{5}}{0{,}04} + \frac{1\,000}{1{,}04^{5}} \approx 222{,}59 + 821{,}93 =$$
- O rendimento de mercado é inferior ao cupão – a obrigação cota acima do par.
- Duração (de Macaulay e modificada)
  $$D = \frac{1}{P}\sum_{k} t_k\, PV_k \approx 4{,}557, \quad D_{mod} = \frac{D}{1+\frac{y}{m}} \approx 4{,}382$$

Taxa interna de rentabilidade de um investimento.

Enunciado: `model(npv; find=irr[one]; CF=-1000 300 400 500 200[one]; r=10[pct]; cur=EUR)`

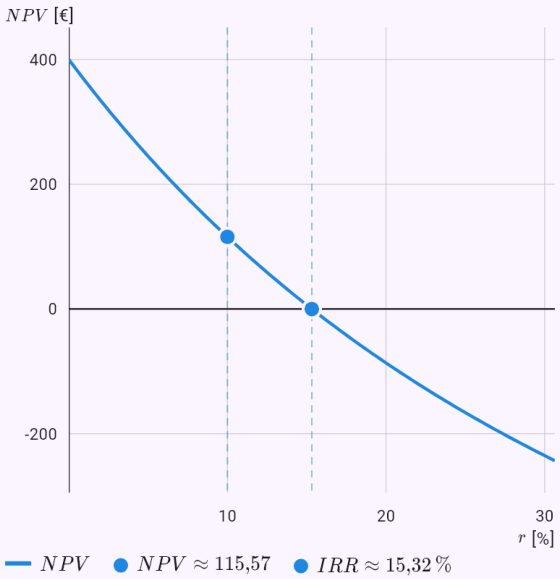
Resultado

$$IRR \approx 15{,}32\,\%$$

Passos

- Dados:
  $CF_t = (-1\,000;\ 300;\ 400;\ 500;\ 200), \quad r = 10\,\%$
- Convertemos as unidades: $r = 10\,\% = 0{,}1$
- O valor atual líquido VAL soma os fluxos de caixa CF_0, CF_1, … de um projeto atualizados à rentabilidade exigida r: VAL = Σ CF_t/(1 + r)^t. Um projeto com VAL > 0 rende mais do que o exigido. A taxa interna de rentabilidade TIR é a taxa à qual VAL = 0 – raiz de uma equação polinomial, procurada numericamente. O período de recuperação é o momento em que a soma acumulada (simples ou atualizada) deixa de ser negativa. Equação do modelo: $NPV = \sum_{t=0}^{n} \dfrac{CF_t}{(1+r)^{t}}$
- Valor atual líquido
  $$NPV = -1\,000 + \frac{300}{1{,}1^{1}} + \frac{400}{1{,}1^{2}} + \frac{500}{1{,}1^{3}} + \frac{200}{1{,}1^{4}} \approx 115{,}5$$
- VAL ≥ 0 – o projeto rende pelo menos o exigido.
- Resolvemos a equação numericamente (bisseção): $NPV(IRR) = 0 \Rightarrow IRR \approx 15{,}32\,\%$
- › O método: bissecção, 14 iterações

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Euros em coroas ao câmbio de hoje do ČNB.

Enunciado: `model(exchange; find=converted[one]; A=100[one]; from=EUR; to=CZK; source=cnb)`

Resultado

$$2\,443{,}50\,\mathrm{CZK}$$

$$1\,€ \approx 24{,}435\,\mathrm{CZK}$$

Passos

- Dados: $A = 100$
- A taxa de câmbio é o preço de uma unidade de moeda estrangeira. O Banco Nacional Checo publica em cada dia útil os câmbios da coroa e o Banco Central Europeu as taxas de referência do euro. Um montante converte-se através de uma moeda comum: $A_2 = A_1 \cdot k_1 / k_2$, onde k_1 e k_2 são os valores das duas moedas em coroas (ČNB) ou em euros (BCE) – uma taxa cruzada. Bancos e casas de câmbio aplicam as suas próprias taxas com margem; o resultado é indicativo. Equação do modelo: $A_2 = A_1 \cdot \dfrac{k_1}{k_2}$
- Tabela de câmbios: $\mathrm{ČNB},\ 27/11/2026$
- Câmbios: $1\,€ = 24{,}435\,\mathrm{CZK}$
- Substituímos: $A_2 = 100 \cdot \dfrac{24{,}435}{1} \approx 2\,443{,}50\,\mathrm{CZK}$
- Bancos e casas de câmbio aplicam as suas próprias taxas com margem – o resultado é indicativo.

Lucro máximo pela receita e custo marginais.

Enunciado: `model(profit; find=optimum[one]; a=100[one]; b=2[one]; F=200[one]; cv=20[one];`

`e=0.5[one]; cur=CZK)`

Resultado

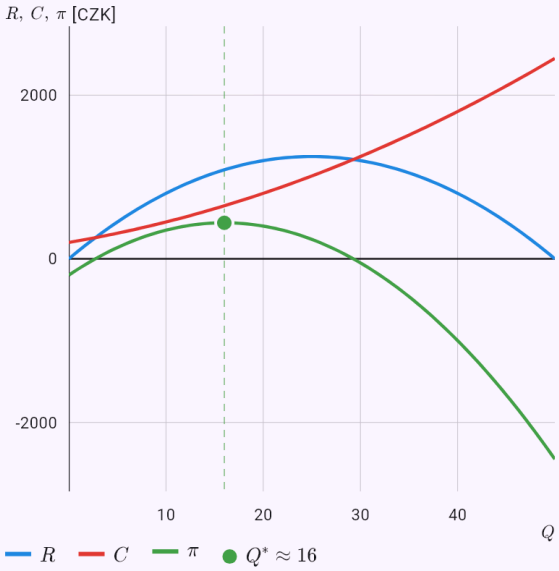
$$Q^* \approx 16$$
$$p^* \approx 68\,\mathrm{CZK}$$
$$\pi^* \approx 440\,\mathrm{CZK}$$

Passos

- Dados:
  $a = 100, \quad b = 2, \quad F = 200, \quad c = 20, \quad e = 0{,}5$
- Uma empresa com procura linear p = a − bQ tem receita R = pQ e custos C(Q) = F + cQ + eQ². O lucro π = R − C é máximo onde a sua derivada é zero, ou seja, onde a receita marginal iguala o custo marginal: RMg = R'(Q) = CMg = C'(Q). A segunda derivada confirma o máximo. A elasticidade-preço da procura ε = (dQ/dp)·(p/Q) diz em que percentagem varia a quantidade procurada quando o preço varia 1 %; |ε| > 1 é uma procura elástica.
  Equação do modelo:
  $p = a - bQ, \quad R = pQ, \quad \pi = R - C$
- Receita e custos:
  $R(Q) = (100 - 2Q)Q, \quad C(Q) = 200 + 20Q + 0{,}5Q^2$
- Receita marginal e custo marginal (derivadas):
  $MR = R'(Q) = 100 - 4Q, \quad MC = C'(Q) = 20 + 1Q$
- Substituímos:
  $MR = MC: \quad 100 - 4Q = 20 + 1Q \Rightarrow Q^* = \frac{80}{5} \approx 16$
- A segunda derivada do lucro é negativa – um máximo:
  $\pi''(Q) = -5 < 0$
- Preço e lucro no ótimo:
  $p^* = 100 - 2 \cdot 16 \approx 68\,\mathrm{CZK}, \quad \pi^* \approx 440\,\mathrm{CZK}$

- Elasticidade-preço da procura: $\varepsilon = -\frac{p^*}{bQ^*} \approx -2{,}125$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Equilíbrio de mercado, excedentes e imposto.

Enunciado: `model(market; find=equilibrium[one]; a=100[one]; b=2[one]; cs=10[one]; d=3[one];`

`t=5[one]; cur=CZK)`

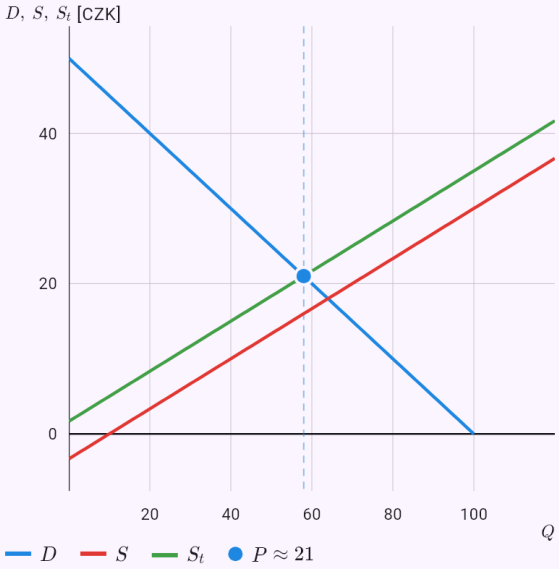
Resultado

$$P \approx 21\,\text{CZK}$$
$$Q \approx 58$$
$$CS \approx 841\,\text{CZK}$$
$$PS \approx 560{,}67\,\text{CZK}$$

Passos

- Dados: $a = 100, \quad b = 2, \quad c = 10, \quad d = 3, \quad t = 5$
- A procura Q_D = a − bP desce com o preço e a oferta Q_S = c + dP sobe. O mercado está em equilíbrio onde se cruzam: P* = (a − c)/(b + d). O excedente do consumidor é a área entre a curva da procura e o preço (o que os compradores pagariam a mais) e o do produtor a área entre o preço e a curva da oferta – ambos integrais. Um imposto t por unidade desloca a oferta t para cima: os compradores pagam mais, os vendedores recebem menos, transaciona-se menos e surge uma perda de peso morto. Equação do modelo: $Q_D = a - bP, \quad Q_S = c + d(P - t), \quad Q_D = Q_S$
- Substituímos:
  $$100 - 2P = 10 + 3P \Rightarrow P^* = \frac{90}{5} \approx 18, \quad Q^* \approx 64$$
- Com o imposto: preço para compradores e para vendedores
  $$P_D = \frac{a - c + dt}{b + d} \approx 21, \quad P_S = P_D - t \approx 16, \quad Q_t \approx 5$$
- Receita fiscal e perda de peso morto
  $$tQ_t \approx 290\,\text{CZK}, \quad \frac{1}{2}t(Q^* - Q_t) \approx 15\,\text{CZK}$$
- Excedente do consumidor:
  $$CS = \int_0^Q \left(\frac{a - Q}{b} - P_D\right) dQ \approx 841\,\text{CZK}$$
- Excedente do produtor:
  $$PS = \int_0^Q \left(P_S - \frac{Q - c}{d}\right) dQ \approx 560{,}67\,\text{CZK}$$
- Elasticidades da procura e da oferta no equilíbrio
  $$\varepsilon_D = -b\frac{P}{Q} \approx -0{,}7241, \quad \varepsilon_S = d\frac{P}{Q} \approx 0{,}8276$$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Modelo de Leontief com três setores.

Enunciado: `model(leontief; find=x[one]; A=0.2 0.3 0.1 0.4 0.1 0.2 0.1 0.2 0.3[one]; y=100`

200 150[one])

Resultado

$$x_1 \approx 349{,}3$$
$$x_2 \approx 465{,}8$$
$$x_3 \approx 397{,}3$$

Passos

- Dados
  $A = (0{,}2;\ 0{,}3;\ 0{,}1;\ 0{,}4;\ 0{,}1;\ 0{,}2;\ 0{,}1;\ 0{,}2;\ 0{,}3), \quad y =$
- O modelo de Leontief descreve uma economia de n setores que se abastecem mutuamente. O elemento a_ij da matriz dos coeficientes técnicos A indica quanto da produção do setor i o setor j consome por unidade da sua própria produção. A produção total x tem de cobrir o consumo intermédio Ax e a procura final y: x = Ax + y, donde x = (I − A)⁻¹y. A inversa de Leontief (I − A)⁻¹ mostra quanto cada setor tem de produzir por unidade de procura final. Equação do modelo:
  $x = Ax + y \Rightarrow (I - A)x = y \Rightarrow x = (I - A)^{-1}y$
- Coeficientes técnicos e procura final
  $$A = \begin{pmatrix} 0{,}2 & 0{,}3 & 0{,}1 \\ 0{,}4 & 0{,}1 & 0{,}2 \\ 0{,}1 & 0{,}2 & 0{,}3 \end{pmatrix}, \quad y = (100;\ 200;\ 150)$$
- A matriz I − A
  $$I - A = \begin{pmatrix} 0{,}8 & -0{,}3 & -0{,}1 \\ -0{,}4 & 0{,}9 & -0{,}2 \\ -0{,}1 & -0{,}2 & 0{,}7 \end{pmatrix}$$
- Inversa de Leontief
  $$(I - A)^{-1} \approx \begin{pmatrix} 1{,}616 & 0{,}6301 & 0{,}411 \\ 0{,}8219 & 1{,}507 & 0{,}5479 \\ 0{,}4658 & 0{,}5205 & 1{,}644 \end{pmatrix}$$
- Substituímos: $x = (I - A)^{-1}y \approx (349{,}3;\ 465{,}8;\ 397{,}3)$
- Fluxos entre setores
  $$x_{ij} = a_{ij}x_j: \quad \begin{pmatrix} 69{,}86 & 139{,}7 & 39{,}73 \\ 139{,}7 & 46{,}58 & 79{,}45 \\ 34{,}93 & 93{,}15 & 119{,}2 \end{pmatrix}$$

Quotas de clientes a longo prazo de três marcas.

Enunciado: `model(markov; find=stationary[one]; P=0.8 0.15 0.05 0.1 0.8 0.1 0.05 0.15 0.8[one])`

Resultado

$$\pi \approx (0{,}2857;\ 0{,}4286;\ 0{,}2857)$$

Passos

- Dados:
  $P = (0{,}8;\ 0{,}15;\ 0{,}05;\ 0{,}1;\ 0{,}8;\ 0{,}1;\ 0{,}05;\ 0{,}15;\ 0{,}8)$
- Uma cadeia de Markov passa entre estados com probabilidades p_ij que só dependem do estado atual (não da história). As linhas da matriz de transição P somam 1. A distribuição após um passo é $\pi_1 = \pi_0 P$, após n passos $\pi_n = \pi_0 P^n$. A distribuição estacionária satisfaz $\pi P = \pi$ e mostra as proporções de longo prazo dos estados – clientes de marcas, classes de bónus-malus, estados de uma máquina. Equação do modelo:
  $\pi_{k+1} = \pi_k P, \quad \pi_n = \pi_0 P^n, \quad \pi P = \pi$
- Matriz de transição
  $$P = \begin{pmatrix} 0{,}8 & 0{,}15 & 0{,}05 \\ 0{,}1 & 0{,}8 & 0{,}1 \\ 0{,}05 & 0{,}15 & 0{,}8 \end{pmatrix}$$
- O sistema da distribuição estacionária
  $$\pi_1 = 0{,}8\,\pi_1 + 0{,}1\,\pi_2 + 0{,}05\,\pi_3$$
  $$\pi_2 = 0{,}15\,\pi_1 + 0{,}8\,\pi_2 + 0{,}15\,\pi_3$$
  $$\pi_3 = 0{,}05\,\pi_1 + 0{,}1\,\pi_2 + 0{,}8\,\pi_3$$
  $\pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = 1$
- A longo prazo a distribuição estabiliza na estacionária, seja qual for o início (numa cadeia regular).

Esperança de vida de uma mulher de 65 anos.

Enunciado: `model(mortality; find=expectancy[one]; x=65[one]; table=female)`

Resultado

$$e_{65} \approx 20{,}57$$

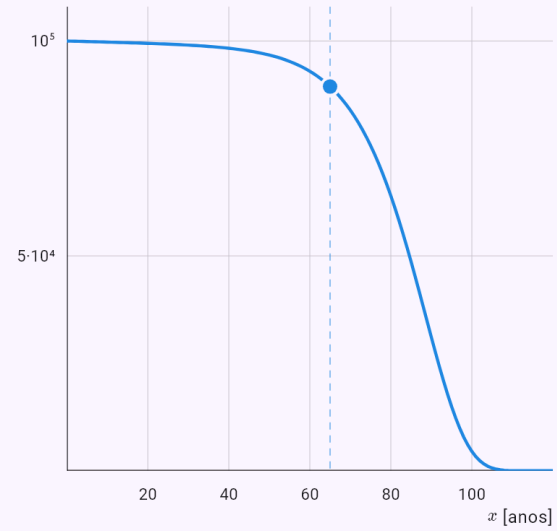
Passos

- Dados: $x = 65$
- Tábua modelo (Gompertz–Makeham) próxima da população checa – para resultados precisos introduza q_x oficiais.
- Uma tábua de mortalidade indica quantos de 100 000 recém-nascidos (l_x) chegam à idade x. A probabilidade de uma pessoa de x anos viver mais n anos é ${}_np_x$ = l_{x+n}/l_x e a de morrer ${}_nq_x$ = 1 − ${}_np_x$. A esperança de vida e_x é o número médio de anos que uma pessoa de x anos ainda vive. A tábua modelo segundo a lei de Gompertz–Makeham μ(x) = A + B·c^x aproxima-se da população checa; cálculos precisos usam tábuas oficiais – introduza os seus q_x. Equação do modelo

$$ {}_np_x = \frac{l_{x+n}}{l_x}, \quad {}_nq_x = 1 - {}_np_x, \quad e_x \approx \frac{1}{l_x}\sum_{k\geq 1} l_{x+k} + \frac{1}{2} $$

- Sobreviventes segundo a tábua: $l_{65} \approx 89\,397{,}8$
- Substituímos: $e_{65} \approx 20{,}57$
- Em média atinge-se a idade de $85{,}57$

Gráfico



O gráfico calculado a partir da solução do modelo; os pontos são os valores dados ou a resposta.

Prémio anual de um seguro misto.

Enunciado: `model(lifeinsurance; find=premium[one]; x=40[one]; n=20[one]; i=2.5[pct]; S=1000000[one]; product=endowment; payment=annual; table=male; cur=CZK)`

Resultado

$$P \approx 40\,227{,}05\ \text{CZK}$$

Passos

- Dados:
  $x = 40, \quad n = 20, \quad i = 2{,}5\,\%, \quad S = 1\,000\,000$
- Convertemos as unidades: $i = 2{,}5\,\% = 0{,}025$
- Tábua modelo (Gompertz–Makeham) próxima da população checa – para resultados precisos introduza q_x oficiais.
- O prémio puro resulta do princípio da equivalência: o valor atual dos prémios iguala o valor atual das prestações futuras. Com os números de comutação D_x = v^xl_x, N_x, C_x e M_x (v = 1/(1 + i), i a taxa técnica), o prémio único de um seguro temporário de morte a n anos é (M_x − M_{x+n})/D_x, de um capital diferido D_{x+n}/D_x, de um misto a sua soma; uma renda ä = (N_x − N_{x+n})/D_x. O prémio anual obtém-se dividindo por ä. A provisão no ano t é o valor atual das prestações futuras menos o dos prémios futuros (prospetiva) – e dá o mesmo que os prémios recebidos menos as prestações pagas (retrospetiva). Equação do modelo

$$D_x = v^x l_x, \quad N_x = \sum_{k\geq x} D_k, \quad C_x = v^{x+1} d_x, \quad M_x = \sum_{k\geq}$$

- Números de comutação
  $D_{40} \approx 35\,866{,}1, \quad N_{40} \approx 883\,077, \quad M_{40} \approx 14\,327{,}6,$
- Prémio único puro
  $A_{x:\overline{20}|} \approx 0{,}622543, \quad S \cdot A_{x:\overline{20}|} \approx 622\,543{,}08\ \text{CZK}$
- Prémio anual

$$\ddot{a}_{x:\overline{20}|} \approx 15{,}4757, \quad P = \frac{S \cdot A_{x:\overline{20}|}}{\ddot{a}_{x:\overline{20}|}} \approx 40\,227{,}05\ \text{CZK}$$

Sistema bónus-malus e nível médio do prémio.

Enunciado: `model(nonlife; find=stationary[one]; levels=100 90 80 70 60 50[one]; q=10[pct]; mode=bonusmalus; rule=reset; cur=CZK)`

Resultado

$$\bar{b} \approx 63{,}14$$

Passos

- Dados: $b = (100;\ 90;\ 80;\ 70;\ 60;\ 50), \quad q = 10\,\%$
- Convertemos as unidades: $q = 10\,\% = 0{,}1$
- Nos seguros não vida (automóvel, habitação), o custo anual esperado de um segurado é E[S] = λ·m, sendo λ o número médio de sinistros por ano e m o custo médio. O prémio de risco leva um carregamento θ para custos e segurança. Um sistema bónus-malus altera o prémio conforme o histórico: um ano sem sinistros passa a uma classe melhor, um sinistro faz recuar. As classes formam uma cadeia de Markov; a sua distribuição estacionária dá as proporções de longo prazo e o nível médio do prémio. Equação do modelo: $\pi P = \pi, \quad \bar{b} = \sum_i \pi_i b_i$
- Um ano sem sinistros desce uma classe (bónus), um sinistro volta à primeira classe.
- Matriz de transição

$$P = \begin{pmatrix} 0{,}1 & 0{,}9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0{,}1 & 0 & 0{,}9 & 0 & 0 & 0 \\ 0{,}1 & 0 & 0 & 0{,}9 & 0 & 0 \\ 0{,}1 & 0 & 0 & 0 & 0{,}9 & 0 \\ 0{,}1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0{,}9 \\ 0{,}1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0{,}9 \end{pmatrix}$$

- O sistema da distribuição estacionária

$$\begin{aligned} \pi_1 &= 0{,}1\,\pi_1 + 0{,}1\,\pi_2 + 0{,}1\,\pi_3 \\ \pi_2 &= 0{,}9\,\pi_1 \\ \pi_3 &= 0{,}9\,\pi_2 \\ \pi_4 &= 0{,}9\,\pi_3 \\ \pi_5 &= 0{,}9\,\pi_4 \\ \pi_6 &= 0{,}9\,\pi_5 + 0{,}9\,\pi_6 \end{aligned}$$

$$\pi_1 + \pi_2 + \pi_3 + \pi_4 + \pi_5 + \pi_6 = 1$$

- Proporções das classes a longo prazo: $\pi \approx (0{,}1;\ 0{,}09;\ 0{,}081;\ 0{,}0729;\ 0{,}0656;\ 0{,}5905)$
- Substituímos: $\bar{b} = \sum_i \pi_i b_i \approx 63{,}14$

Limitações conhecidas

- As tábuas de mortalidade são modelos (Gompertz–Makeham, próximas da população checa); para resultados precisos introduza os seus q_x de tábuas oficiais.
- Os câmbios são de referência – bancos e casas de câmbio aplicam câmbios e comissões próprios.
- Microeconomia com procura linear e custos quadráticos; ainda não há funções gerais dadas por uma fórmula.
- As convenções não deslocam datas por feriados – os juros contam-se pelos dias entre as datas dadas; o empréstimo não admite amortizações extraordinárias nem mudança de taxa.
- O investimento em empréstimos P2P é uma estimativa com rendimento fixo e taxa de inadimplência constante; não considera a recuperação de dívidas, o pagamento antecipado, o mercado secundário nem os impostos. Não é uma recomendação de investimento.

51. Programação linear, transporte, afetação e jogos matriciais

Os problemas de otimização estão no ecrã inicial, na secção «Aplicações», área Logística e redes (a programação linear também em Economia): programação linear e inteira, problema de transporte e problema de afetação. Um problema linear também pode ser escrito ou fotografado, p. ex. max 3x + 2y; x + y <= 4; x + 3y <= 6; x, y >= 0 – as restrições em linhas separadas ou após um ponto e vírgula, min em vez de max, e a palavra integer torna-o inteiro.

O procedimento mostra a forma padrão com variáveis de folga e artificiais e as tabelas simplex em frações exatas com o pivô marcado. As restrições ≥ e = resolvem-se por omissão com o método das duas fases; um chip escolhe o método do grande M. O ótimo vem acompanhado do problema dual, dos preços-sombra e de uma análise de sensibilidade (intervalos dos coeficientes do objetivo e dos segundos membros). Com duas variáveis, a aplicação desenha a região admissível, os vértices com os valores do objetivo e a reta de nível pelo ótimo. Um problema inteiro resolve-se por partição e avaliação; a árvore percorre-se com as setas como um grafo.

O problema de transporte dá-se pela matriz de custos unitários, pelas ofertas dos fornecedores e pelas procuras dos clientes; um problema desequilibrado recebe um fornecedor ou cliente fictício. A solução inicial vem do canto noroeste, do custo mínimo ou do método de Vogel, o ótimo do método MODI com potenciais e ciclos fechados; o plano de transporte mostra-se também como grafo. O problema de afetação resolve-se pelo método húngaro – redução de linhas e colunas, cobertura dos zeros com linhas e escolha de zeros independentes; admite também maximização e matrizes retangulares.

Jogos matriciais de dois jogadores (área Logística e redes, ou a notação game(3 -1 2; -2 4 1) – as linhas são as estratégias do jogador A, as colunas as do jogador B): um jogo de soma nula procura primeiro um ponto de sela (maximin = minimax), depois risca as estratégias dominadas e calcula as estratégias mistas por uma fórmula num jogo 2 × 2, graficamente em 2 × n e m × 2 (envolventes inferior e superior das retas) e por programação linear com quadros simplex num jogo maior – o problema dual dá a estratégia do outro jogador. O resultado são as estratégias ótimas de ambos os jogadores e o valor do jogo em frações exatas. Um jogo bimatricial (game(2 0; 0 1 | 1 0; 0 2), pagamentos de A | pagamentos de B) mostra as melhores respostas e os equilíbrios de Nash em estratégias puras e, num jogo 2 × 2, também o equilíbrio misto.

Exemplos

Um plano de produção pelo simplex com preços-sombra e sensibilidade.

Enunciado: `lp(max 3x1 + 5x2; x1 <= 4; 2x2 <= 12; 3x1 + 2x2 <= 18)`

Resultado

$$x_1 = 2$$
$$x_2 = 6$$
$$z_{max} = 36$$

Passos

- O problema de programação linear

  $\max z = 3x_1 + 5x_2$
  $x_1 \le 4$
  $2x_2 \le 12$
  $3x_1 + 2x_2 \le 18$
  $x_1, x_2 \ge 0$

- Não são dadas condições de não negatividade – supomos $x_1, x_2 \ge 0$
- A forma padrão: a uma restrição ≤ soma-se uma variável de folga s, a uma ≥ subtrai-se e junta-se uma variável artificial a, a uma igualdade só uma artificial. A base inicial é formada pelas s e a

  $x_1 + s_1 = 4$
  $2x_2 + s_2 = 12$
  $3x_1 + 2x_2 + s_3 = 18$

- Tabela simplex 1: entra x_2 (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai s_2 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	b	b/a
s_1	1	0	1	0	0	4	–
s_2	0	**2**	0	1	0	12	6
s_3	3	2	0	0	1	18	9
z	-3	-5	0	0	0	0	

- Tabela simplex 2: entra x_1 (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai s_3 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	b	b/a
s_1	1	0	1	0	0	4	4
x_2	0	1	0	$\frac{1}{2}$	0	6	–
s_3	**3**	0	0	-1	1	6	2
z	-3	0	0	$\frac{5}{2}$	0	30	

- Tabela 3: nenhum $z_j - c_j$ é negativo – a solução é ótima.

	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	b
s_1	0	0	1	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	2
x_2	0	1	0	$\frac{1}{2}$	0	6
x_1	1	0	0	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	2
z	0	0	0	$\frac{3}{2}$	1	36

- A solução ótima lida da última tabela (as variáveis não básicas são nulas): $x_1 = 2,\ x_2 = 6,\quad z_{max} = 36$
- O problema dual – uma variável dual por restrição, uma restrição por variável

  $\min w = 4y_1 + 12y_2 + 18y_3$
  $y_1 + 3y_3 \ge 3$
  $2y_2 + 2y_3 \ge 5$
  $y_1, y_2, y_3 \ge 0$

- Os preços-sombra (as variáveis duais ótimas) da última tabela: quanto muda o ótimo quando o segundo membro de uma restrição aumenta 1. Uma restrição com folga ($b_i - a_i x > 0$) tem preço-sombra 0.

	$b_i - a_i x$	y_i
1	2	0
2	0	$\frac{3}{2}$
3	0	1

- O ótimo do dual é igual ao do primal:
  $w = 12 \cdot \frac{3}{2} + 18 \cdot 1 = 36 = z$
- Análise de sensibilidade – os intervalos dos coeficientes do objetivo em que a mesma solução continua ótima

	c_j	
x_1	3	$\langle 0;\ \frac{15}{2} \rangle$
x_2	5	$\langle 2;\ \infty)$

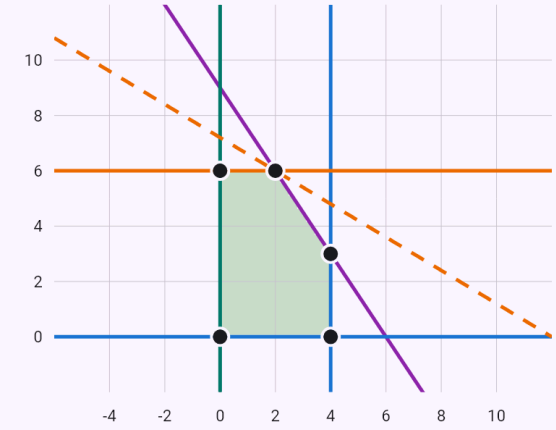
- Os intervalos dos segundos membros em que a mesma base continua ótima (os preços-sombra só valem aí)

	b_i	
1	4	$\langle 2;\ \infty)$
2	12	$\langle 6;\ 18 \rangle$
3	18	$\langle 12;\ 24 \rangle$

- A solução gráfica: a região admissível é um polígono e o ótimo está num vértice. Os valores do objetivo nos vértices (★ o ótimo)

$[x_1;\ x_2]$	z	
$[0;\ 0]$	0	
$[0;\ 6]$	30	
$[2;\ 6]$	36	★
$[4;\ 0]$	12	
$[4;\ 3]$	27	

Gráfico



- $x \le 4 \ \Leftrightarrow \ x \in (-\infty,\ 4]$
- $2y \le 12 \ \Leftrightarrow \ y \in (-\infty,\ 6]$
- $3x + 2y \le 18 \ \Leftrightarrow \ y \le 9 - \frac{3x}{2}$
- $x \ge 0 \ \Leftrightarrow \ x \in [0,\ \infty)$
- $y \ge 0 \ \Leftrightarrow \ y \in [0,\ \infty)$
- $z = 36 \ \Leftrightarrow \ 3x + 5y = 36$

As soluções são as interseções das curvas na região colorida (ponto cheio); um ponto vazio não satisfaz as inequações.

Interseções dos gráficos:

● $(0;0)$ ● $(0;6)$ ● $(2;6)$ ● $(4;0)$ ● $(4;3)$

Um problema escrito – a solução gráfica para duas variáveis.

Enunciado: `max 3x + 2y; x + y <= 4; x + 3y <= 6; x, y >= 0`

Resultado

$$x = 4$$
$$y = 0$$
$$z_{max} = 12$$

Passos

- O problema de programação linear

  $\max z = 3x + 2y$
  $x + y \leq 4$
  $x + 3y \leq 6$
  $x, y \geq 0$

- A forma padrão: a uma restrição ≤ soma-se uma variável de folga s, a uma ≥ subtrai-se e junta-se uma variável artificial a, a uma igualdade só uma artificial. A base inicial é formada pelas s e a

  $x + y + s_1 = 4$
  $x + 3y + s_2 = 6$

- Tabela simplex 1: entra x (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai s_1 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x	y	s_1	s_2	b	b/a
s_1	[1]	1	1	0	4	4
s_2	1	3	0	1	6	6
z	−3	−2	0	0	0	

- Tabela 2: nenhum $z_j - c_j$ é negativo – a solução é ótima.

	x	y	s_1	s_2	b
x	1	1	1	0	4
s_2	0	2	−1	1	2
z	0	1	3	0	12

- A solução ótima lida da última tabela (as variáveis não básicas são nulas): $x = 4,\ y = 0,\quad z_{max} = 12$

- O problema dual – uma variável dual por restrição, uma restrição por variável

  $\min v = 4u_1 + 6u_2$
  $u_1 + u_2 \geq 3$
  $u_1 + 3u_2 \geq 2$
  $u_1, u_2 \geq 0$

- Os preços-sombra (as variáveis duais ótimas) da última tabela: quanto muda o ótimo quando o segundo membro de uma restrição aumenta 1. Uma restrição com folga ($b_i - a_i x > 0$) tem preço-sombra 0.

	$b_i - a_i x$	u_i
1	0	3
2	2	0

- O ótimo do dual é igual ao do primal: $v = 4 \cdot 3 = 12 = z$

- Análise de sensibilidade – os intervalos dos coeficientes do objetivo em que a mesma solução continua ótima

	c_j	
x	3	$\langle 2;\ \infty)$
y	2	$(-\infty;\ 3\rangle$

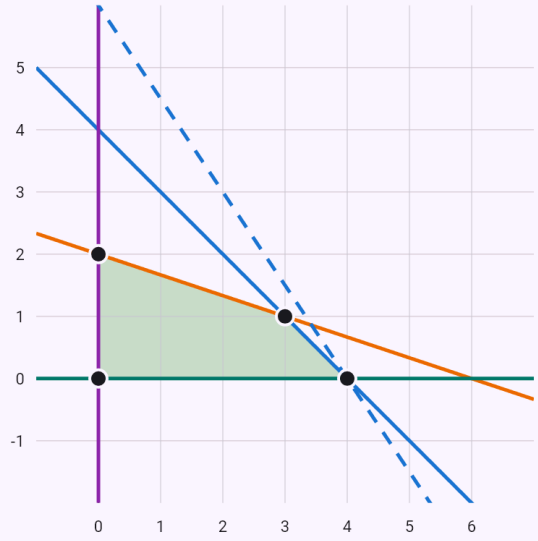
- Os intervalos dos segundos membros em que a mesma base continua ótima (os preços-sombra só valem aí)

	b_i	
1	4	$\langle 0;\ 6\rangle$
2	6	$\langle 4;\ \infty)$

- A solução gráfica: a região admissível é um polígono e o ótimo está num vértice. Os valores do objetivo nos vértices (★ o ótimo)

$[x;\ y]$	z	
$[0;\ 0]$	0	
$[0;\ 2]$	4	
$[3;\ 1]$	11	
$[4;\ 0]$	12	★

Gráfico



$x + y \leq 4 \ \Leftrightarrow\ y \leq 4 - x$
$x + 3y \leq 6 \ \Leftrightarrow\ y \leq 2 - \frac{x}{3}$
$x \geq 0 \ \Leftrightarrow\ x \in [0,\ \infty)$
$y \geq 0 \ \Leftrightarrow\ y \in [0,\ \infty)$
$z = 12 \ \Leftrightarrow\ 3x + 2y = 12$

As soluções são as interseções das curvas na região colorida (ponto cheio); um ponto vazio não satisfaz as inequações.

Interseções dos gráficos:
● $(0;0)$ ● $(0;2)$ ● $(3;1)$ ● $(4;0)$

Um mínimo com restrições ≥ pelo método das duas fases.

Enunciado: `lp(min 2x + 3y; x + y >= 4; x + 3y >= 6)`

Resultado

$$x = 3$$
$$y = 1$$
$$z_{min} = 9$$

Passos

- O problema de programação linear

  $\min z = 2x + 3y$

  $x + y \geq 4$

  $x + 3y \geq 6$

  $x, y \geq 0$

- Não são dadas condições de não negatividade – supomos $x, y \geq 0$
- Um mínimo procura-se como o máximo da função oposta: $\min z = -\max(-z), \quad -z = -2x - 3y$
- A forma padrão: a uma restrição ≤ soma-se uma variável de folga s, a uma ≥ subtrai-se e junta-se uma variável artificial a, a uma igualdade só uma artificial. A base inicial é formada pelas s e a

  $x + y - s_1 + a_1 = 4$

  $x + 3y - s_2 + a_2 = 6$

- Fase um: as variáveis artificiais não são uma solução real, por isso anulamo-las primeiro – minimizamos a sua soma $\min w = a_1 + a_2$
- Tabela simplex 1: entra y (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai a_2 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x	y	s_1	s_2	a_1	a_2	b	b/a
a_1	1	1	−1	0	1	0	4	4
a_2	1	$\boxed{3}$	0	−1	0	1	6	2
w	−2	−4	1	1	0	0	−10	

- Tabela simplex 2: entra x (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai a_1 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x	y	s_1	s_2	a_1	a_2	b	b/a
a_1	$\boxed{\frac{2}{3}}$	0	−1	$\frac{1}{3}$	1	$-\frac{1}{3}$	2	3
y	$\frac{1}{3}$	1	0	$-\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	2	6
w	$-\frac{2}{3}$	0	1	$-\frac{1}{3}$	0	$\frac{4}{3}$	−2	

- A fase um termina com w = 0 – as variáveis artificiais são nulas e retiram-se. A fase dois continua com o objetivo real.
- Tabela 3: nenhum $z_j - c_j$ é negativo – a solução é ótima.

	x	y	s_1	s_2	b
x	1	0	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	3
y	0	1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1
z	0	0	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	−9

- A solução ótima lida da última tabela (as variáveis não básicas são nulas): $x = 3,\ y = 1, \quad z_{min} = 9$
- O problema dual – uma variável dual por restrição, uma restrição por variável

  $\max v = 4u_1 + 6u_2$

  $u_1 + u_2 \leq 2$

  $u_1 + 3u_2 \leq 3$

  $u_1, u_2 \geq 0$

- Os preços-sombra (as variáveis duais ótimas) da última tabela: quanto muda o ótimo quando o segundo membro de uma restrição aumenta 1. Uma restrição com folga ($b_i - a_i x > 0$) tem preço-sombra 0.

	$b_i - a_i x$	u_i
1	0	$\frac{3}{2}$
2	0	$\frac{1}{2}$

- O ótimo do dual é igual ao do primal:
  $v = 4 \cdot \frac{3}{2} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 9 = z$
- Análise de sensibilidade – os intervalos dos coeficientes do objetivo em que a mesma solução continua ótima

	c_j	
x	2	$\langle 1;\ 3\rangle$
y	3	$\langle 2;\ 6\rangle$

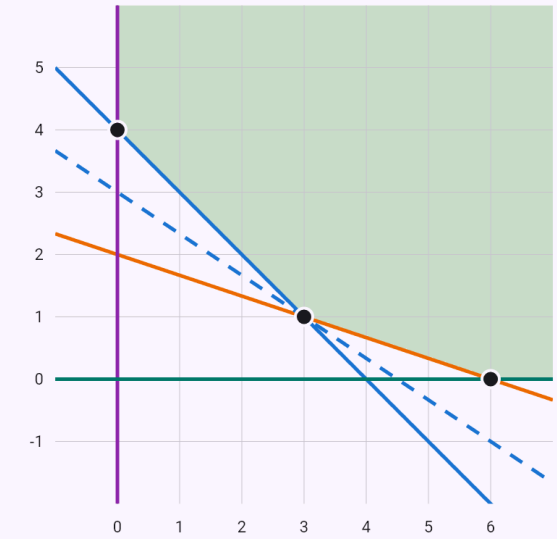
- Os intervalos dos segundos membros em que a mesma base continua ótima (os preços-sombra só valem aí)

	b_i	
1	4	$\langle 2;\ 6\rangle$
2	6	$\langle 4;\ 12\rangle$

- A solução gráfica: a região admissível é um polígono e o ótimo está num vértice. Os valores do objetivo nos vértices (★ o ótimo)

$[x;\ y]$	z	
$[0;\ 4]$	12	
$[3;\ 1]$	9	★
$[6;\ 0]$	12	

Gráfico



$x + y \geq 4 \ \Leftrightarrow \ y \geq 4 - x$
$x + 3y \geq 6 \ \Leftrightarrow \ y \geq 2 - \frac{x}{3}$
$x \geq 0 \ \Leftrightarrow \ x \in [0,\ \infty)$
$y \geq 0 \ \Leftrightarrow \ y \in [0,\ \infty)$
$z = 9 \ \Leftrightarrow \ 2x + 3y = 9$

As soluções são as interseções das curvas na região colorida (ponto cheio); um ponto vazio não satisfaz as inequações.

Interseções dos gráficos:
● $(0; 4)$ ● $(3; 1)$ ● $(6; 0)$

O mesmo problema pelo método do grande M.

Enunciado: `lp(min 2x + 3y; x + y >= 4; x + 3y >= 6; method=bigm)`

Resultado

$$x = 3$$
$$y = 1$$
$$z_{min} = 9$$

Passos

- O problema de programação linear
  $\min z = 2x + 3y$
  $x + y \geq 4$
  $x + 3y \geq 6$
  $x, y \geq 0$
- Não são dadas condições de não negatividade – supomos $x, y \geq 0$
- Um mínimo procura-se como o máximo da função oposta: $\min z = -\max(-z), \quad -z = -2x - 3y$
- A forma padrão: a uma restrição ≤ soma-se uma variável de folga s, a uma ≥ subtrai-se e junta-se uma variável artificial a, a uma igualdade só uma artificial. A base inicial é formada pelas s e a
  $x + y - s_1 + a_1 = 4$
  $x + 3y - s_2 + a_2 = 6$
- O método do grande M: as variáveis artificiais entram no objetivo com uma grande penalização −M para que o simplex as tire da base:
  $\max z' = -2x - 3y - Ma_1 - Ma_2$
- Tabela simplex 1: entra y (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai a_2 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x	y	s_1	s_2	a_1	a_2	b
a_1	1	1	-1	0	1	0	4
a_2	1	$\boxed{3}$	0	-1	0	1	6
z	$-2M+2$	$-4M+3$	M	M	0	0	-10

- Tabela simplex 2: entra x (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai a_1 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x	y	s_1	s_2	a_1	a_2
a_1	$\boxed{\frac{2}{3}}$	0	-1	$\frac{1}{3}$	1	$-\frac{1}{3}$
y	$\frac{1}{3}$	1	0	$-\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$
z	$-\frac{2}{3}M+1$	0	M	$-\frac{1}{3}M+1$	0	$\frac{4}{3}M-1$

- Tabela 3: nenhum $z_j - c_j$ é negativo – a solução é ótima.

	x	y	s_1	s_2	a_1	a_2	b
x	1	0	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	3
y	0	1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
z	0	0	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$M-\frac{3}{2}$	$M-\frac{1}{2}$	-9

- A solução ótima lida da última tabela (as variáveis não básicas são nulas): $x = 3,\ y = 1, \quad z_{min} = 9$
- O problema dual – uma variável dual por restrição, uma restrição por variável
  $\max v = 4u_1 + 6u_2$
  $u_1 + u_2 \leq 2$
  $u_1 + 3u_2 \leq 3$
  $u_1, u_2 \geq 0$
- Os preços-sombra (as variáveis duais ótimas) da última tabela: quanto muda o ótimo quando o segundo membro de uma restrição aumenta 1. Uma restrição com folga ($b_i - a_i x > 0$) tem preço-sombra 0.

	$b_i - a_i x$	u_i
1	0	$\frac{3}{2}$
2	0	$\frac{1}{2}$

- O ótimo do dual é igual ao do primal:
  $v = 4 \cdot \frac{3}{2} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 9 = z$
- Análise de sensibilidade – os intervalos dos coeficientes do objetivo em que a mesma solução continua ótima

	c_j	
x	2	$\langle 3;\ 1\rangle$
y	3	$\langle 6;\ 2\rangle$

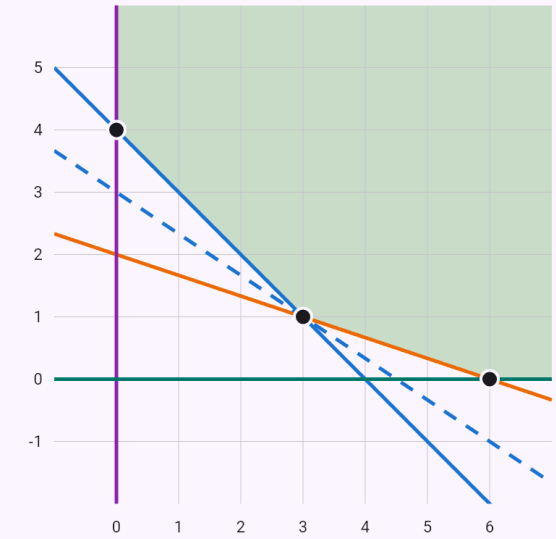
- Os intervalos dos segundos membros em que a mesma base continua ótima (os preços-sombra só valem aí)

	b_i	
1	4	$\langle 2;\ 6\rangle$
2	6	$\langle 4;\ 12\rangle$

- A solução gráfica: a região admissível é um polígono e o ótimo está num vértice. Os valores do objetivo nos vértices (★ o ótimo)

$[x;\ y]$	z	
$[0;\ 4]$	12	
$[3;\ 1]$	9	★
$[6;\ 0]$	12	

Gráfico



- $x + y \geq 4 \iff y \geq 4 - x$
- $x + 3y \geq 6 \iff y \geq 2 - \frac{x}{3}$
- $x \geq 0 \iff x \in [0, \infty)$
- $y \geq 0 \iff y \in [0, \infty)$
- $z = 9 \iff 2x + 3y = 9$

As soluções são as interseções das curvas na região colorida (ponto cheio); um ponto vazio não satisfaz as inequações.

Interseções dos gráficos:

● $(0; 4)$ ● $(3; 1)$ ● $(6; 0)$

Uma solução inteira por partição e avaliação.

Enunciado: `lp(max 5x + 4y; 6x + 4y <= 24; x + 2y <= 6; integer)`

Resultado

$$x = 4$$
$$y = 0$$
$$z_{max} = 20$$

Passos

- O problema de programação linear

  $\max z = 5x + 4y$
  $6x + 4y \le 24$
  $x + 2y \le 6$
  $x, y \ge 0,\ x, y \in \mathbb{Z}$

- Não são dadas condições de não negatividade – supomos $x, y \ge 0$
- A forma padrão: a uma restrição ≤ soma-se uma variável de folga s, a uma ≥ subtrai-se e junta-se uma variável artificial a, a uma igualdade só uma artificial. A base inicial é formada pelas s e a

  $6x + 4y + s_1 = 24$
  $x + 2y + s_2 = 6$

- Tabela simplex 1: entra x (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai s_1 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x	y	s_1	s_2	b	b/a
s_1	$\boxed{6}$	4	1	0	24	4
s_2	1	2	0	1	6	6
z	-5	-4	0	0	0	

- Tabela simplex 2: entra y (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai s_2 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	x	y	s_1	s_2	b	b/a
x	1	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$	0	4	6
s_2	0	$\boxed{\frac{4}{3}}$	$-\frac{1}{6}$	1	2	$\frac{3}{2}$
z	0	$-\frac{2}{3}$	$\frac{5}{6}$	0	20	

- Tabela 3: nenhum $z_j - c_j$ é negativo – a solução é ótima.

	x	y	s_1	s_2	b
x	1	0	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}$	3
y	0	1	$-\frac{1}{8}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{2}$
z	0	0	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}$	21

- A solução ótima lida da última tabela (as variáveis não básicas são nulas): $x = 3,\ y = \frac{3}{2},\quad z_{max} = 21$

- O problema é inteiro – usamos partição e avaliação. A solução sem a condição de integralidade acima é a raiz P_0 da árvore.
- Os nós da árvore (em profundidade, primeiro o ramo ≤): uma variável não inteira divide-se em dois ramos; × – sem solução admissível, z ≤ z* – o ramo não pode superar a melhor solução encontrada (cortado), ✓ – uma solução inteira.

		x, y	z	
P_0	–	$3,\ \frac{3}{2}$	21	$y \le 1,\ y \ge 2$
P_1	$y \le 1$	$\frac{10}{3},\ 1$	$\frac{62}{3}$	$x \le 3,\ x \ge 4$
P_2	$x \le 3$	$3,\ 1$	19	✓ $z^* = 19$
P_3	$x \ge 4$	$4,\ 0$	20	✓ $z^* = 20$
P_4	$y \ge 2$	$2,\ 2$	18	$z \le z^*$

- A melhor solução inteira: $x = 4,\ y = 0,\quad z_{max} = 20$

Gráfico



Estado inicial

$P_0 :\ x = 3,\ y = \frac{3}{2}$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

Um problema de transporte – método de Vogel e MODI.

Enunciado: `transport(19 30 50 10; 70 30 40 60; 40 8 70 20; supply=7 9 18; demand=5 8 7 14;`

```
method=vogel)
```

Resultado

$$x_{11} = 5,\ x_{14} = 2,\ x_{22} = 2$$
$$x_{23} = 7,\ x_{32} = 6,\ x_{34} = 12$$
$$z_{min} = 743$$

Passos

- Os custos unitários, as ofertas a_i dos fornecedores e as procuras b_j dos clientes

	B_1	B_2	B_3	B_4	a_i
A_1	19	30	50	10	7
A_2	70	30	40	60	9
A_3	40	8	70	20	18
b_j	5	8	7	14	

- A oferta é igual à procura – o problema está equilibrado: $\sum a_i = 34, \quad \sum b_j = 34$
- O método de Vogel: em cada passo calculamos as penalizações – a diferença dos dois custos menores de cada linha e coluna – e na linha ou coluna com maior penalização (enquadrada) atribuímos à célula mais barata.

k	A_1	A_2	A_3	B_1	B_2	B_3	B_4	
1	9	10	12	21	$\boxed{22}$	10	10	$(3,2)$
2	9	20	20	$\boxed{21}$		10	10	$(1,1)$
3	40	20	$\boxed{50}$			10	10	$(3,4)$
4	40	20				10	$\boxed{50}$	$(1,4)$
5		20				40	$\boxed{60}$	$(2,4)$
6		$\boxed{40}$				40		$(2,3)$

- A solução inicial (o número pequeno é o custo, o negrito a quantidade) – o custo $z = 19 \cdot 5 + 10 \cdot 2 + 40 \cdot 7 + 60 \cdot 2 + 8 \cdot 8 + 20 \cdot 10 = 779$

	B_1	B_2	B_3	B_4	a_i
A_1	$^{19}\mathbf{5}$	$^{30}.$	$^{50}.$	$^{10}\mathbf{2}$	7
A_2	$^{70}.$	$^{30}.$	$^{40}\mathbf{7}$	$^{60}\mathbf{2}$	9
A_3	$^{40}.$	$^{8}\mathbf{8}$	$^{70}.$	$^{20}\mathbf{10}$	18
b_j	5	8	7	14	

- Iteração MODI 1: os potenciais de $u_i + v_j = c_{ij}$ nas células ocupadas ($u_1 = 0$), nas vazias $d_{ij} = c_{ij} - u_i - v_j$ (entre parênteses). O d mais negativo, -18, está na célula $(2,2)$ – ocupamo-la. O ciclo fechado $(2,2)^+ \to (3,2)^- \to (3,4)^+ \to (2,4)^-$, deslocamos θ = 2 (a menor quantidade nas células marcadas −).

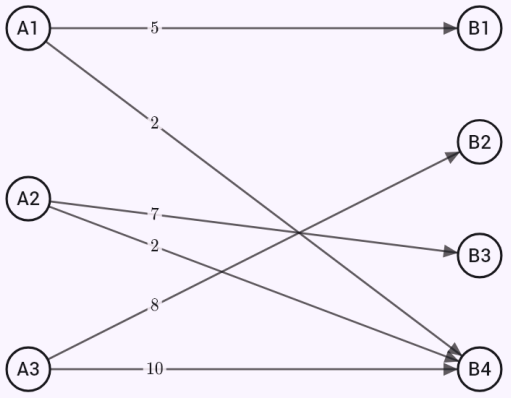
	B_1	B_2	B_3	B_4	a_i	u_i
A_1	$^{19}\mathbf{5}$	$^{30}(32)$	$^{50}(60)$	$^{10}\mathbf{2}$	7	0
A_2	$^{70}(1)$	$^{30}\boxed{-18}$	$^{40}\mathbf{7}$	$^{60}\mathbf{2}$	9	50
A_3	$^{40}(11)$	$^{8}\mathbf{8}$	$^{70}(70)$	$^{20}\mathbf{10}$	18	10
b_j	5	8	7	14		
v_j	19	-2	-10	10		

- Nenhum d_{ij} é negativo – o plano de transporte é ótimo.

	B_1	B_2	B_3	B_4	a_i	u_i
A_1	$^{19}\mathbf{5}$	$^{30}(32)$	$^{50}(42)$	$^{10}\mathbf{2}$	7	0
A_2	$^{70}(19)$	$^{30}\mathbf{2}$	$^{40}\mathbf{7}$	$^{60}(18)$	9	32
A_3	$^{40}(11)$	$^{8}\mathbf{6}$	$^{70}(52)$	$^{20}\mathbf{12}$	18	10
b_j	5	8	7	14		
v_j	19	-2	8	10		

- O custo total: $z = 19 \cdot 5 + 10 \cdot 2 + 30 \cdot 2 + 40 \cdot 7 + 8 \cdot 6 + 20 \cdot 12 = 743$

Gráfico



Estado inicial
$\sum$ =779

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

Um problema de transporte desequilibrado com um cliente fictício.

Enunciado: `transport(4 6 8; 5 7 3; supply=50 60; demand=30 40 20; method=northwest)`

Resultado

$$x_{11} = 30,\ x_{12} = 20,\ x_{22} = 20$$
$$x_{23} = 20$$
$$z_{min} = 440$$

Passos

- Os custos unitários, as ofertas a_i dos fornecedores e as procuras b_j dos clientes

	B_1	B_2	B_3	a_i
A_1	4	6	8	50
A_2	5	7	3	60
b_j	30	40	20	

- A oferta excede a procura ($\sum a_i = 110, \quad \sum b_j = 90$) – juntamos um cliente fictício B_4^* com procura 20 e custo zero (mercadoria que fica nos fornecedores).

- A solução inicial pelo canto noroeste: a partir da célula superior esquerda atribuímos o máximo possível e avançamos para a direita ou para baixo (o número pequeno é o custo, o negrito a quantidade), o custo $z = 4 \cdot 30 + 6 \cdot 20 + 7 \cdot 20 + 3 \cdot 20 = 440$

	B_1	B_2	B_3	B_4^*	a_i
A_1	$^{4}\mathbf{30}$	$^{6}\mathbf{20}$	$^{8}.$	$^{0}.$	50
A_2	$^{5}.$	$^{7}\mathbf{20}$	$^{3}\mathbf{20}$	$^{0}\mathbf{20}$	60
b_j	30	40	20	20	

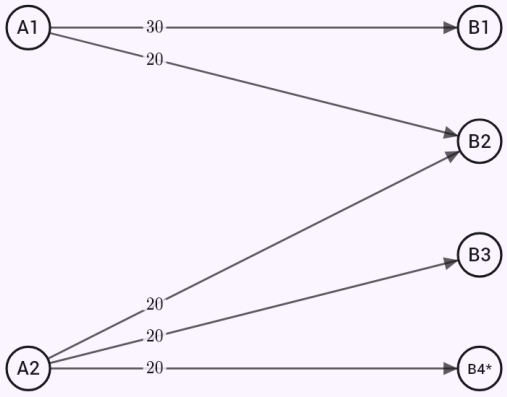
- Nenhum d_{ij} é negativo – o plano de transporte é ótimo.

	B_1	B_2	B_3	B_4^*	a_i	u_i
A_1	$^{4}\mathbf{30}$	$^{6}\mathbf{20}$	$^{8}(6)$	$^{0}(1)$	50	0
A_2	$^{5}(0)$	$^{7}\mathbf{20}$	$^{3}\mathbf{20}$	$^{0}\mathbf{20}$	60	1
b_j	30	40	20	20		
v_j	4	6	2	-1		

- Algum d_{ij} é zero – existe outra solução ótima com o mesmo custo.

- O custo total: $z = 4 \cdot 30 + 6 \cdot 20 + 7 \cdot 20 + 3 \cdot 20 = 440$

Gráfico



Estado inicial

$\sum = 440$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

Afetação de trabalhadores a tarefas com o menor custo.

Enunciado: `assignment(9 2 7 8; 6 4 3 7; 5 8 1 8; 7 6 9 4; goal=min)`

Resultado

$$R_1 \to S_2,\ R_2 \to S_1,\ R_3 \to S_3$$
$$R_4 \to S_4$$
$$z_{min} = 13$$

Passos

- Os custos – as linhas são trabalhadores (máquinas), as colunas tarefas

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	9	2	7	8
R_2	6	4	3	7
R_3	5	8	1	8
R_4	7	6	9	4

- A cada linha subtraímos o seu mínimo $(2,\ 3,\ 1,\ 4)$

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	7	0	5	6
R_2	3	1	0	4
R_3	4	7	0	7
R_4	3	2	5	0

- A cada coluna subtraímos o seu mínimo $(3,\ 0,\ 0,\ 0)$

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	4	0	5	6
R_2	0	1	0	4
R_3	1	7	0	7
R_4	0	2	5	0

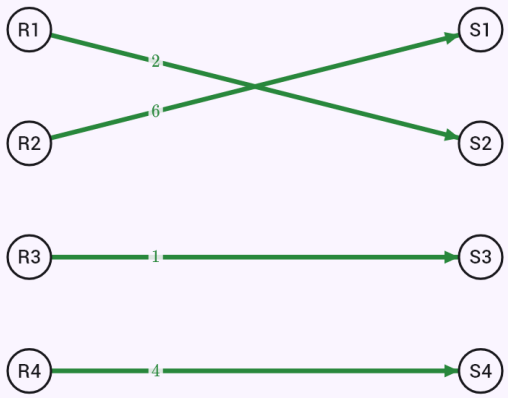
- São precisas 4 linhas para cobrir os zeros – escolhemos zeros independentes, um em cada linha e coluna (enquadrados).

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	4	$\boxed{0}$	5	6
R_2	$\boxed{0}$	1	0	4
R_3	1	7	$\boxed{0}$	7
R_4	0	2	5	$\boxed{0}$

- A afetação com os custos originais – total $z_{min} = 2 + 6 + 1 + 4 = 13$

		c
R_1	S_2	2
R_2	S_1	6
R_3	S_3	1
R_4	S_4	4

Gráfico



Uma afetação com o maior lucro.

Enunciado: `assignment(9 2 7 8; 6 4 3 7; 5 8 1 8; 7 6 9 4; goal=max)`

Resultado

$$R_1 \to S_1,\ R_2 \to S_4,\ R_3 \to S_2$$
$$R_4 \to S_3$$
$$z_{max} = 33$$

Passos

- Os custos – as linhas são trabalhadores (máquinas), as colunas tarefas

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	9	2	7	8
R_2	6	4	3	7
R_3	5	8	1	8
R_4	7	6	9	4

- Procuramos um máximo – transformamo-lo em mínimo subtraindo cada elemento do maior, 9.

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	0	7	2	1
R_2	3	5	6	2
R_3	4	1	8	1
R_4	2	3	0	5

- A cada linha subtraímos o seu mínimo $(0,\ 2,\ 1,\ 0)$

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	0	7	2	1
R_2	1	3	4	0
R_3	3	0	7	0
R_4	2	3	0	5

- A cada coluna subtraímos o seu mínimo $(0,\ 0,\ 0,\ 0)$

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	0	7	2	1
R_2	1	3	4	0
R_3	3	0	7	0
R_4	2	3	0	5

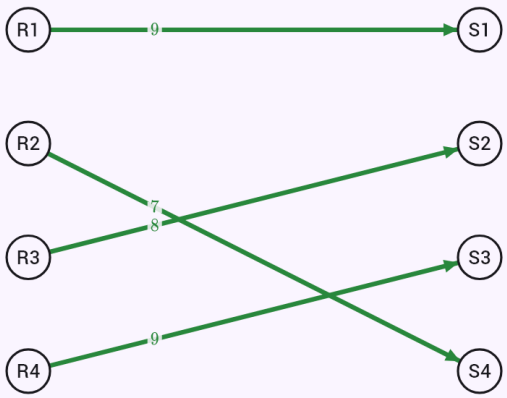
- São precisas 4 linhas para cobrir os zeros – escolhemos zeros independentes, um em cada linha e coluna (enquadrados).

	S_1	S_2	S_3	S_4
R_1	$\boxed{0}$	7	2	1
R_2	1	3	4	$\boxed{0}$
R_3	3	$\boxed{0}$	7	0
R_4	2	3	$\boxed{0}$	5

- A afetação com os custos originais – total $z_{max} = 9 + 7 + 8 + 9 = 33$

		c
R_1	S_1	9
R_2	S_4	7
R_3	S_2	8
R_4	S_3	9

Gráfico



Um jogo com ponto de sela – o maximin é igual ao minimax.

Enunciado: `game(4 2 5; 3 1 6; 6 0 2)`

Resultado

$$v = 2, \quad (A_1, B_2)$$

Passos

- A matriz de pagamentos (3×3): as linhas são as estratégias do jogador A, as colunas as do jogador B, e os números os ganhos de A (perdas de B). A quer ganhar o máximo, B perder o mínimo.

	B_1	B_2	B_3
A_1	4	2	5
A_2	3	1	6
A_3	6	0	2

- Procuramos um ponto de sela: o mínimo de cada linha (o que A garante) e o máximo de cada coluna (B não perde mais). $\max\limits_i \min\limits_j a_{ij} = 2, \quad \min\limits_j \max\limits_i a_{ij} = 2$ – o maximin é igual ao minimax, o jogo tem ponto de sela.

	B_1	B_2	B_3	min
A_1	4	2	5	2
A_2	3	1	6	1
A_3	6	0	2	0
max	6	2	6	

- As estratégias puras ótimas (pontos de sela): (A_1, B_2); o valor do jogo $v = 2$

Um jogo 2 × 2 sem ponto de sela – estratégias mistas pela fórmula.

Enunciado: `game(3 -1; -2 4)`

Resultado

$$v = 1, \quad p^* = \left(\frac{3}{5}, \frac{2}{5}\right), \quad q^* = \left(\frac{1}{2}, \frac{}{}\right.$$

Passos

- A matriz de pagamentos (2×2): as linhas são as estratégias do jogador A, as colunas as do jogador B, e os números os ganhos de A (perdas de B). A quer ganhar o máximo, B perder o mínimo.

	B_1	B_2
A_1	3	-1
A_2	-2	4

- Procuramos um ponto de sela: o mínimo de cada linha (o que A garante) e o máximo de cada coluna (B não perde mais).
$\max_i \min_j a_{ij} = -1, \quad \min_j \max_i a_{ij} = 3, \quad -1 < 3$ _ não existe ponto de sela. Os jogadores usarão estratégias mistas – cada estratégia pura com certa probabilidade.

	B_1	B_2	min
A_1	3	-1	-1
A_2	-2	4	-2
max	3	4	

- Um jogo 2 × 2 sem ponto de sela (estratégias A_1, A_2 e B_1, B_2): A joga a primeira linha com probabilidade p de modo que o ganho esperado seja igual contra ambas as colunas, e B a primeira coluna com probabilidade q do mesmo modo. Para a matriz (a b; c d)

$$p = \frac{d-c}{a-b-c+d} = \frac{4-(-2)}{3-(-1)-(-2)+4} = \frac{3}{5}$$
$$q = \frac{d-b}{a-b-c+d} = \frac{4-(-1)}{3-(-1)-(-2)+4} = \frac{1}{2}$$
$$v = \frac{ad-bc}{a-b-c+d} = \frac{3\cdot 4-(-1)\cdot(-2)}{3-(-1)-(-2)+4} = 1$$

- As estratégias mistas ótimas: $p^* = \left(\frac{3}{5}, \frac{2}{5}\right)$, $q^* = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$; o valor do jogo $v = 1$

Estratégias dominadas riscadas uma a uma.

Enunciado: `game(3 -1 4; -2 4 5; 1 -2 3)`

Resultado

$$v = 1, \quad p^* = \left(\frac{3}{5},\ \frac{2}{5},\ 0\right), \quad q^* = \left(\frac{1}{2}\right.$$

Passos

- A matriz de pagamentos (3×3): as linhas são as estratégias do jogador A, as colunas as do jogador B, e os números os ganhos de A (perdas de B). A quer ganhar o máximo, B perder o mínimo.

	B_1	B_2	B_3
A_1	3	-1	4
A_2	-2	4	5
A_3	1	-2	3

- Procuramos um ponto de sela: o mínimo de cada linha (o que A garante) e o máximo de cada coluna (B não perde mais).
$\max_i \min_j a_{ij} = -1, \quad \min_j \max_i a_{ij} = 3, \quad -1 < 3$ _ não existe ponto de sela. Os jogadores usarão estratégias mistas – cada estratégia pura com certa probabilidade.

	B_1	B_2	B_3	min
A_1	3	-1	4	-1
A_2	-2	4	5	-2
A_3	1	-2	3	-2
max	3	4	5	

- A estratégia A_3 é dominada por A_1, que dá ao jogador A pelo menos o mesmo em cada coluna. A não a escolherá; riscamo-la

	B_1	B_2	B_3
A_1	3	-1	4
A_2	-2	4	5

- A estratégia B_3 é dominada por B_1: com esta, o jogador B não perde mais em nenhuma linha. B não a escolherá; riscamo-la

	B_1	B_2
A_1	3	-1
A_2	-2	4

- Um jogo 2 × 2 sem ponto de sela (estratégias A_1, A_2 e B_1, B_2): A joga a primeira linha com probabilidade p de modo que o ganho esperado seja igual contra ambas as colunas, e B a primeira coluna com probabilidade q do mesmo modo. Para a matriz (a b; c d)

$$p = \frac{d-c}{a-b-c+d} = \frac{4-(-2)}{3-(-1)-(-2)+4} = \frac{3}{5}$$
$$q = \frac{d-b}{a-b-c+d} = \frac{4-(-1)}{3-(-1)-(-2)+4} = \frac{1}{2}$$
$$v = \frac{ad-bc}{a-b-c+d} = \frac{3\cdot 4-(-1)\cdot(-2)}{3-(-1)-(-2)+4} = 1$$

- As estratégias mistas ótimas: $p^* = \left(\frac{3}{5},\ \frac{2}{5},\ 0\right)$, $q^* = \left(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right)$; o valor do jogo $v = 1$

Um jogo 2 × 4 graficamente – o máximo da envolvente inferior.

Enunciado: `game(2 3 1 5; 4 1 6 0)`

Resultado

$$v = \frac{17}{7}, \quad p^* = \left(\frac{5}{7}, \frac{2}{7}\right), \quad q^* = \left(0,\right.$$

Passos

- A matriz de pagamentos (2×4): as linhas são as estratégias do jogador A, as colunas as do jogador B, e os números os ganhos de A (perdas de B). A quer ganhar o máximo, B perder o mínimo.

	B_1	B_2	B_3	B_4
A_1	2	3	1	5
A_2	4	1	6	0

- Procuramos um ponto de sela: o mínimo de cada linha (o que A garante) e o máximo de cada coluna (B não perde mais).
$\max_i \min_j a_{ij} = 1, \quad \min_j \max_i a_{ij} = 3, \quad 1 < 3$ – não existe ponto de sela. Os jogadores usarão estratégias mistas – cada estratégia pura com certa probabilidade.

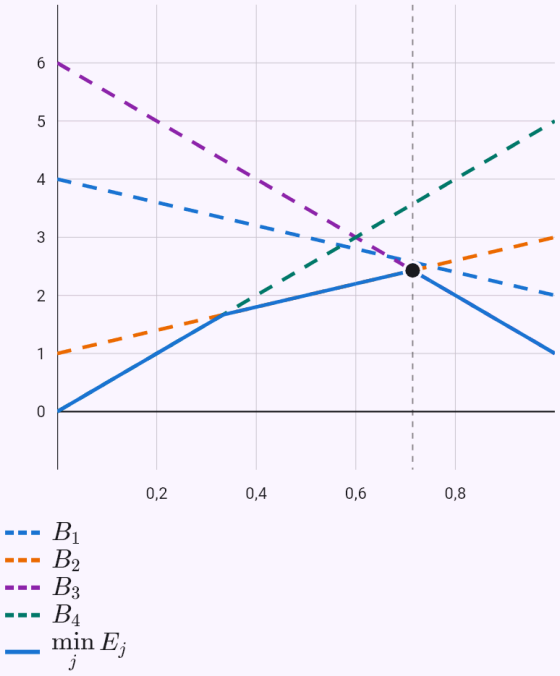
	B_1	B_2	B_3	B_4	min
A_1	2	3	1	5	1
A_2	4	1	6	0	0
max	4	3	6	5	

- O método gráfico: A joga a primeira linha com probabilidade p e a segunda com 1 − p. O seu ganho esperado contra cada estratégia de B é uma reta em p; B escolhe a mais baixa, por isso A procura o ponto mais alto da envolvente inferior – máximo $p^* = \frac{5}{7}, \quad v = \frac{17}{7}$.
As retas
$$B_1: \ E = 2p + 4(1-p) = -2p + 4$$
$$B_2: \ E = 3p + (1-p) = 2p + 1$$
$$B_3: \ E = p + 6(1-p) = -5p + 6$$
$$B_4: \ E = 5p + 0(1-p) = 5p$$

- O ótimo está no cruzamento das retas B_2, B_3. B mistura-as com probabilidades w e 1 − w de modo que a A seja indiferente qual linha jogar:
$2w + (-5)(1-w) = 0 \ \Rightarrow \ w = \frac{5}{7}$

- As estratégias mistas ótimas: $p^* = \left(\frac{5}{7}, \frac{2}{7}\right)$, $q^* = \left(0, \frac{5}{7}, \frac{2}{7}, 0\right)$; o valor do jogo $v = \frac{17}{7}$

Gráfico



As retas são os ganhos esperados de A contra as estratégias de B em função de p; a envolvente inferior destacada é o que A pode garantir, e o ponto é o seu máximo.

Pedra, papel, tesoura por programação linear – cada estratégia com probabilidade 1/3.

Enunciado: `game(0 -1 1; 1 0 -1; -1 1 0)`

Resultado

$$v = 0, \quad p^* = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right), \quad q^* = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$$

Passos

- A matriz de pagamentos (3×3): as linhas são as estratégias do jogador A, as colunas as do jogador B, e os números os ganhos de A (perdas de B). A quer ganhar o máximo, B perder o mínimo.

	B_1	B_2	B_3
A_1	0	-1	1
A_2	1	0	-1
A_3	-1	1	0

- Procuramos um ponto de sela: o mínimo de cada linha (o que A garante) e o máximo de cada coluna (B não perde mais). $\max_i \min_j a_{ij} = -1, \quad \min_j \max_i a_{ij} = 1, \quad -1 < 1$ _ não existe ponto de sela. Os jogadores usarão estratégias mistas – cada estratégia pura com certa probabilidade.

	B_1	B_2	B_3	min
A_1	0	-1	1	-1
A_2	1	0	-1	-1
A_3	-1	1	0	-1
max	1	1	1	

- Somamos k = 2 a todos os elementos para os tornar positivos – as estratégias ótimas não mudam e o valor aumenta k.
- Um jogo maior torna-se um problema de programação linear. Jogador B: max Σ y⃗ sujeito a Σ⃗ a'⃗⃗·y⃗ ≤ 1, y⃗ ≥ 0, onde $y_j = \frac{q_j}{v'}, \quad v' = v + k$. O seu problema dual corresponde ao jogador A.
- O problema de programação linear

$$\max z = y_1 + y_2 + y_3$$
$$2y_1 + y_2 + 3y_3 \le 1$$
$$3y_1 + 2y_2 + y_3 \le 1$$
$$y_1 + 3y_2 + 2y_3 \le 1$$
$$y_1, y_2, y_3 \ge 0$$

- A forma padrão: a uma restrição ≤ soma-se uma variável de folga s, a uma ≥ subtrai-se e junta-se uma variável artificial a, a uma igualdade só uma artificial. A base inicial é formada pelas s e a

$$2y_1 + y_2 + 3y_3 + s_1 = 1$$
$$3y_1 + 2y_2 + y_3 + s_2 = 1$$
$$y_1 + 3y_2 + 2y_3 + s_3 = 1$$

- Tabela simplex 1: entra y_1 (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai s_2 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	y_1	y_2	y_3	s_1	s_2	s_3	b	b/a
s_1	2	1	3	1	0	0	1	$\frac{1}{2}$
s_2	$\boxed{3}$	2	1	0	1	0	1	$\frac{1}{3}$
s_3	1	3	2	0	0	1	1	1
z	-1	-1	-1	0	0	0	0	

- Tabela simplex 2: entra y_3 (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai s_1 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	y_1	y_2	y_3	s_1	s_2	s_3	b	b/a
s_1	0	$-\frac{1}{3}$	$\boxed{\frac{7}{3}}$	1	$-\frac{2}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{7}$
y_1	1	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	1
s_3	0	$\frac{7}{3}$	$\frac{5}{3}$	0	$-\frac{1}{3}$	1	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{5}$
z	0	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	

- Tabela simplex 3: entra y_2 (o $z_j - c_j$ mais negativo), sai s_3 (o menor quociente b/a); o pivô está enquadrado.

	y_1	y_2	y_3	s_1	s_2	s_3	b	b/a
y_3	0	$-\frac{1}{7}$	1	$\frac{3}{7}$	$-\frac{2}{7}$	0	$\frac{1}{7}$	—
y_1	1	$\frac{5}{7}$	0	$-\frac{1}{7}$	$\frac{3}{7}$	0	$\frac{2}{7}$	$\frac{2}{5}$
s_3	0	$\boxed{\frac{18}{7}}$	0	$-\frac{5}{7}$	$\frac{1}{7}$	1	$\frac{3}{7}$	$\frac{1}{6}$
z	0	$-\frac{3}{7}$	0	$\frac{2}{7}$	$\frac{1}{7}$	0	$\frac{3}{7}$	

- Tabela 4: nenhum $z_j - c_j$ é negativo – a solução é ótima.

	y_1	y_2	y_3	s_1	s_2	s_3	b
y_3	0	0	1	$\frac{7}{18}$	$-\frac{5}{18}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{6}$
y_1	1	0	0	$\frac{1}{18}$	$\frac{7}{18}$	$-\frac{5}{18}$	$\frac{1}{6}$
y_2	0	1	0	$-\frac{5}{18}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{7}{18}$	$\frac{1}{6}$
z	0	0	0	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{2}$

- A solução ótima lida da última tabela (as variáveis não básicas são nulas)

$$y_1 = \frac{1}{6},\ y_2 = \frac{1}{6},\ y_3 = \frac{1}{6}, \quad z_{max} = \frac{1}{2}$$

- O problema dual – uma variável dual por restrição, uma restrição por variável

$$\min v = u_1 + u_2 + u_3$$
$$2u_1 + 3u_2 + u_3 \geq 1$$
$$u_1 + 2u_2 + 3u_3 \geq 1$$
$$3u_1 + u_2 + 2u_3 \geq 1$$
$$u_1, u_2, u_3 \geq 0$$

- Os preços-sombra (as variáveis duais ótimas) da última tabela: quanto muda o ótimo quando o segundo membro de uma restrição aumenta 1. Uma restrição com folga ($b_i - a_i x > 0$) tem preço-sombra 0.

	$b_i - a_i x$	u_i
1	0	$\frac{1}{6}$
2	0	$\frac{1}{6}$
3	0	$\frac{1}{6}$

- O ótimo do dual é igual ao do primal:

$$v = 1 \cdot \frac{1}{6} + 1 \cdot \frac{1}{6} + 1 \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{2} = z$$

- Análise de sensibilidade – os intervalos dos coeficientes do objetivo em que a mesma solução continua ótima

	c_j	
y_1	1	$\langle \frac{4}{7};\ \frac{8}{5} \rangle$
y_2	1	$\langle \frac{4}{7};\ \frac{8}{5} \rangle$
y_3	1	$\langle \frac{4}{7};\ \frac{8}{5} \rangle$

- Os intervalos dos segundos membros em que a mesma base continua ótima (os preços-sombra só valem aí)

	b_i	
1	1	$\langle \frac{4}{7};\ \frac{8}{5} \rangle$
2	1	$\langle \frac{4}{7};\ \frac{8}{5} \rangle$
3	1	$\langle \frac{4}{7};\ \frac{8}{5} \rangle$

- Do ótimo: $v' = \frac{1}{\sum y_j} = 2, \quad v = v' - k = 0$. As estratégias são os y⃰ ótimos (para o jogador A, os preços-sombra) multiplicados por v'.
- As estratégias mistas ótimas: $p^* = \left(\frac{1}{3},\ \frac{1}{3},\ \frac{1}{3}\right)$, $q^* = \left(\frac{1}{3},\ \frac{1}{3},\ \frac{1}{3}\right)$; o valor do jogo $v = 0$

Um jogo bimatricial (a batalha dos sexos) – dois equilíbrios de Nash puros e um misto.

Enunciado: `game(2 0; 0 1 | 1 0; 0 2)`

Resultado

$$(A_1, B_1); \quad (A_2, B_2); \quad p^* = \left(\frac{2}{3},\ \frac{1}{3}\right)$$

Passos

- Um jogo bimatricial (2 × 2): cada casa contém (pagamento de A, pagamento de B), e cada jogador quer o seu o maior possível.

	B_1	B_2
A_1	$(2,\ 1)$	$(0,\ 0)$
A_2	$(0,\ 0)$	$(1,\ 2)$

- Melhores respostas: em cada coluna sublinhamos o maior pagamento de A, em cada linha marcamos por cima o maior de B. As casas com ambos (enquadradas) são equilíbrios de Nash em estratégias puras: $(A_1, B_1),\ (A_2, B_2)$.

	B_1	B_2
A_1	$\boxed{(\underline{2},\ \overline{1})}$	$(0,\ 0)$
A_2	$(0,\ 0)$	$\boxed{(\underline{1},\ \overline{2})}$

- O equilíbrio misto: A escolhe p de modo que a B seja indiferente qual coluna jogar, B escolhe q de modo que a A seja indiferente qual linha jogar (pagamentos esperados $E_A = \frac{2}{3}, \quad E_B = \frac{2}{3}$)

$$p \cdot 1 + (1-p) \cdot 0 = p \cdot 0 + (1-p) \cdot 2 \ \Rightarrow\ p = \frac{2}{3}$$
$$q \cdot 2 + (1-q) \cdot 0 = q \cdot 0 + (1-q) \cdot 1 \ \Rightarrow\ q = \frac{1}{3}$$

Limitações conhecidas

- No máximo 12 variáveis e 15 restrições; problemas inteiros até 6 variáveis. Todas as variáveis têm de ser não negativas – as variáveis livres ainda não são suportadas.
- Problemas de transporte e de afetação até 8 × 8.
- Jogos matriciais até 6 × 6; o equilíbrio de Nash misto de um jogo bimatricial só em jogos 2 × 2.

52. Grafos, redes e logística

Os problemas de grafos e redes estão no ecrã inicial, na secção «Aplicações», área Logística e redes: caminho mais curto (algoritmos de Dijkstra, Bellman-Ford e Floyd-Warshall), árvore geradora mínima (Kruskal, Prim), fluxo máximo e corte mínimo, arbitragem cambial como procura de um ciclo negativo e caminho crítico de um projeto (CPM, PERT).

O grafo introduz-se num campo de várias linhas, uma aresta por linha – A-B 4 é uma aresta não orientada de peso 4, A->B 4 uma orientada, num fluxo A->B 3/7 um fluxo dado e a capacidade; sem número, uma aresta tem peso 1. Em vez das arestas pode colar uma matriz de pesos por linhas (-, ∞ ou 0 significa que não há aresta), opcionalmente com uma linha de nomes dos vértices acima. Os vértices podem chamar-se por uma letra ou uma palavra (PHA, Lisboa). As atividades de um projeto dão-se pelo nome, duração e predecessoras (D 5 B C); para PERT, com três estimativas (B 3/4/11 A).

Na arbitragem pode escolher, em vez de câmbios próprios, a tabela de hoje do ČNB ou do BCE – basta enumerar as moedas (CZK EUR USD GBP). Com uma só tabela a arbitragem nunca surge (os passos mostram porquê); com as duas tabelas ao mesmo tempo cada par de moedas toma o melhor câmbio e pode surgir um ciclo acima de 1. O botão «Preencher os câmbios para editar» coloca os câmbios de uma tabela no campo Taxas de câmbio – edite-os, por exemplo, segundo os câmbios de compra e venda de uma casa de câmbio.

O procedimento mostra uma tabela de iterações como nos apontamentos – marcas definitivas e provisórias de Dijkstra, passagens de Bellman-Ford, a matriz de Floyd-Warshall após cada vértice, as arestas ordenadas de Kruskal, os caminhos de aumento de um fluxo, as passagens para a frente e para trás do CPM. Sob o resultado está o grafo, que percorre passo a passo com as setas: a vermelho a alteração do passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado.

Exemplos

O caminho mais curto com o algoritmo de Dijkstra.

Enunciado: `shortestpath(A-B 4; A-C 2; B-C 1; B-D 5; C-D 8; C-E 10; D-E 2; D-F 6; E-F 2;`

`from=A; to=F; method=dijkstra)`

Resultado

$$d(\mathrm{A},\mathrm{F}) = 12$$

$$\mathrm{A} \to \mathrm{C} \to \mathrm{B} \to \mathrm{D} \to \mathrm{E} \to \mathrm{F}$$

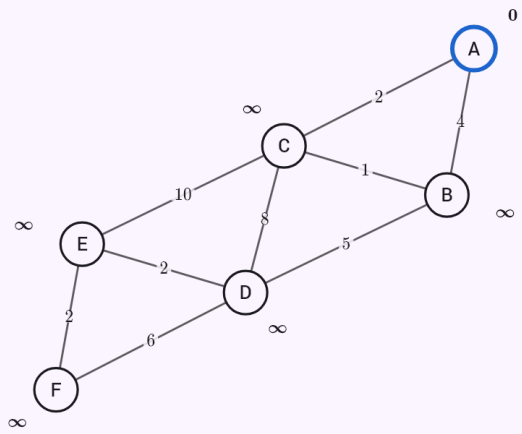
Passos

- Um grafo não orientado com 6 vértices e 9 arestas.
- Algoritmo de Dijkstra: em cada passo o vértice com a menor marca provisória torna-se definitivo (enquadrado) e as marcas dos vizinhos baixam se por ele passar um caminho mais curto (a negrito); o índice é o predecessor.

		A	B	C	D	E	F
0		0	∞	∞	∞	∞	∞
1	A	$\boxed{0}$	$\mathbf{4_A}$	$\mathbf{2_A}$	∞	∞	∞
2	C		$\mathbf{3_C}$	$\boxed{2_A}$	$\mathbf{10_C}$	$\mathbf{12_C}$	∞
3	B		$\boxed{3_C}$		$\mathbf{8_B}$	12_C	∞
4	D				$\boxed{8_B}$	$\mathbf{10_D}$	$\mathbf{14_D}$
5	E					$\boxed{10_D}$	$\mathbf{12_E}$
6	F						$\boxed{12_E}$

- O caminho lido de trás para a frente pelos predecessores: $\mathrm{A} \to \mathrm{C} \to \mathrm{B} \to \mathrm{D} \to \mathrm{E} \to \mathrm{F}$, o seu comprimento $2 + 1 + 5 + 2 + 2 = 12$

Gráfico



Estado inicial
$d(\mathrm{A}) = 0$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

Um peso de aresta negativo – o algoritmo de Bellman-Ford.

Enunciado: `shortestpath(S->A 4; S->B 5; B->A -2; A->C 3; C->D 2; B->D 6; from=S; to=D; method=bellmanford)`

Resultado

$$d(\mathrm{S},\mathrm{D}) = 8$$

$$\mathrm{S} \to \mathrm{B} \to \mathrm{A} \to \mathrm{C} \to \mathrm{D}$$

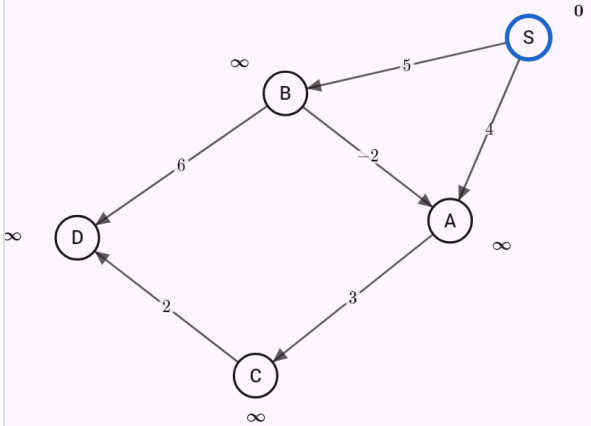
Passos

- Um grafo orientado com 5 vértices e 6 arestas.
- Algoritmo de Bellman-Ford: em cada passagem tentamos encurtar o caminho por cada aresta, $d(v) = \min\left(d(v), d(u) + w(u,v)\right)$; as marcas alteradas estão a negrito, o índice é o predecessor.

	S	A	B	C	D
0	0	∞	∞	∞	∞
1	0	$\mathbf{3_B}$	$\mathbf{5_S}$	$\mathbf{6_A}$	$\mathbf{8_C}$

- Na passagem 2 já nenhuma marca mudou – as distâncias são definitivas.
- O caminho lido de trás para a frente pelos predecessores: $\mathrm{S} \to \mathrm{B} \to \mathrm{A} \to \mathrm{C} \to \mathrm{D}$, o seu comprimento $5 - 2 + 3 + 2 = 8$

Gráfico



Estado inicial
$d(\mathrm{S}) = 0$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

As distâncias entre todos os pares de vértices.

Enunciado: `shortestpath(A->B 3; B->C -1; A->C 4; C->A 2; C->D 2; D->B 1; method=floyd)`

Resultado

$$D = \begin{array}{c|cccc} & \mathrm{A} & \mathrm{B} & \mathrm{C} & \mathrm{D} \\ \hline \mathrm{A} & 0 & 3 & 2 & 4 \\ \mathrm{B} & 1 & 0 & -1 & 1 \\ \mathrm{C} & 2 & 3 & 0 & 2 \\ \mathrm{D} & 2 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

Passos

- Um grafo orientado com 4 vértices e 6 arestas.
- O algoritmo de Floyd-Warshall começa com a matriz dos pesos das arestas (∞ – não há aresta)

$$D^{(0)} = \begin{array}{c|cccc} & \mathrm{A} & \mathrm{B} & \mathrm{C} & \mathrm{D} \\ \hline \mathrm{A} & 0 & 3 & 4 & \infty \\ \mathrm{B} & \infty & 0 & -1 & \infty \\ \mathrm{C} & 2 & \infty & 0 & 2 \\ \mathrm{D} & \infty & 1 & \infty & 0 \end{array}$$

- Permitimos o vértice A como paragem: $d(i,j) = \min\left(d(i,j), d(i,k) + d(k,j)\right)$; as distâncias encurtadas estão a negrito.

$$D^{(1)} = \begin{array}{c|cccc} & \mathrm{A} & \mathrm{B} & \mathrm{C} & \mathrm{D} \\ \hline \mathrm{A} & 0 & 3 & 4 & \infty \\ \mathrm{B} & \infty & 0 & -1 & \infty \\ \mathrm{C} & 2 & \mathbf{5} & 0 & 2 \\ \mathrm{D} & \infty & 1 & \infty & 0 \end{array}$$

- Permitimos o vértice B como paragem: $d(i,j) = \min\left(d(i,j), d(i,k) + d(k,j)\right)$; as distâncias encurtadas estão a negrito.

$$D^{(2)} = \begin{array}{c|cccc} & \mathrm{A} & \mathrm{B} & \mathrm{C} & \mathrm{D} \\ \hline \mathrm{A} & 0 & 3 & \mathbf{2} & \infty \\ \mathrm{B} & \infty & 0 & -1 & \infty \\ \mathrm{C} & 2 & 5 & 0 & 2 \\ \mathrm{D} & \infty & 1 & \mathbf{0} & 0 \end{array}$$

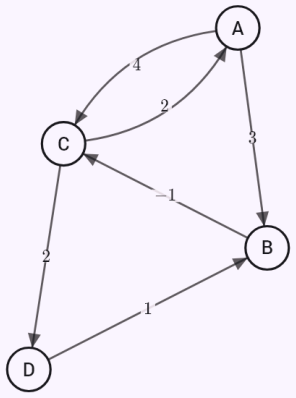
- Permitimos o vértice C como paragem: $d(i,j) = \min\left(d(i,j), d(i,k) + d(k,j)\right)$; as distâncias encurtadas estão a negrito.

$$D^{(3)} = \begin{array}{c|cccc} & \mathrm{A} & \mathrm{B} & \mathrm{C} & \mathrm{D} \\ \hline \mathrm{A} & 0 & 3 & 2 & \mathbf{4} \\ \mathrm{B} & \mathbf{1} & 0 & -1 & \mathbf{1} \\ \mathrm{C} & 2 & 5 & 0 & 2 \\ \mathrm{D} & \mathbf{2} & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

- Permitimos o vértice D como paragem: $d(i,j) = \min\left(d(i,j), d(i,k) + d(k,j)\right)$; as distâncias encurtadas estão a negrito.

$$D^{(4)} = \begin{array}{c|cccc} & \mathrm{A} & \mathrm{B} & \mathrm{C} & \mathrm{D} \\ \hline \mathrm{A} & 0 & 3 & 2 & 4 \\ \mathrm{B} & 1 & 0 & -1 & 1 \\ \mathrm{C} & 2 & \mathbf{3} & 0 & 2 \\ \mathrm{D} & 2 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

Gráfico



Estado inicial
$D^{(0)}$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

A árvore geradora mínima com o algoritmo de Kruskal.

Enunciado: `spanningtree(A-B 7; A-D 5; B-C 8; B-D 9; B-E 7; C-E 5; D-E 15; D-F 6; E-F 8; E-G`

`9; F-G 11; method=kruskal)`

Resultado

$w = 39$

$\mathrm{AB},\ \mathrm{AD},\ \mathrm{BE}$
$\mathrm{CE},\ \mathrm{DF},\ \mathrm{EG}$

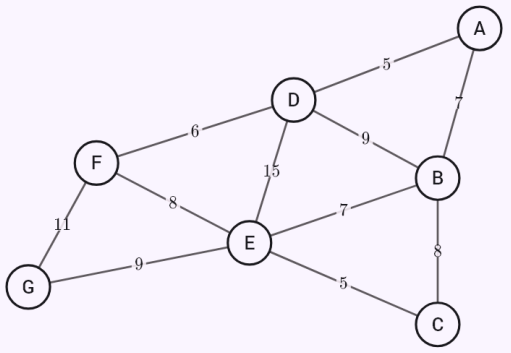
Passos

- Um grafo não orientado com 7 vértices e 11 arestas.
- Algoritmo de Kruskal: as arestas da mais barata para a mais cara, cada uma é acrescentada (✓) a menos que feche um ciclo (×).

	w	
AD	5	✓
CE	5	✓
DF	6	✓
AB	7	✓
BE	7	✓
BC	8	×
EF	8	×
BD	9	×
EG	9	✓

- O peso total das arestas da árvore:
  $7 + 5 + 7 + 5 + 6 + 9 = 39$

Gráfico



Estado inicial

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

A rede mais curta que liga capitais regionais com o algoritmo de Prim.

Enunciado: `spanningtree(PHA-PLZ 93; PHA-LBC 110; PHA-HK 115; PHA-JI 128; PHA-BRN 205; LBC-HK 100; HK-OL 140; JI-BRN 88; BRN-OL 78; OL-OVA 100; BRN-OVA 170; PLZ-JI 210; start=PHA; method=prim)`

Resultado

$w = 697$

$\mathrm{PHA}-\mathrm{PLZ},\ \mathrm{PHA}-\mathrm{LBC},\ \mathrm{PHA}-\mathrm{JI}$
$\mathrm{LBC}-\mathrm{HK},\ \mathrm{JI}-\mathrm{BRN},\ \mathrm{BRN}-\mathrm{OL}$
$\mathrm{OL}-\mathrm{OVA}$

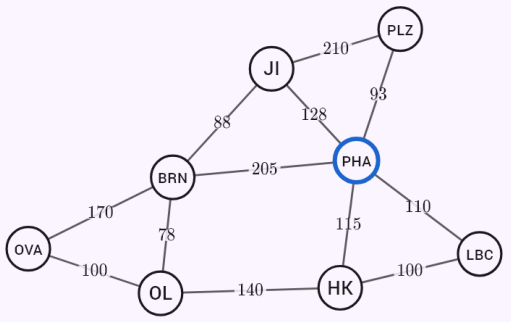
Passos

- Um grafo não orientado com 8 vértices e 12 arestas.
- Algoritmo de Prim a partir do vértice PHA: em cada passo acrescentamos a aresta mais barata que vai da árvore a um vértice fora dela.

		w
1	$\mathrm{PHA}-\mathrm{PLZ}$	93
2	$\mathrm{PHA}-\mathrm{LBC}$	110
3	$\mathrm{LBC}-\mathrm{HK}$	100
4	$\mathrm{PHA}-\mathrm{JI}$	128
5	$\mathrm{JI}-\mathrm{BRN}$	88
6	$\mathrm{BRN}-\mathrm{OL}$	78
7	$\mathrm{OL}-\mathrm{OVA}$	100

- O peso total das arestas da árvore:
  $93 + 110 + 128 + 100 + 88 + 78 + 100 = 697$

Gráfico



Estado inicial
PHA

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

O fluxo máximo e o corte mínimo.

Enunciado: `maxflow(S->A 16; S->B 13; B->A 4; A->C 12; C->B 9; B->D 14; D->C 7; C->T 20; D->T 4; from=S; to=T)`

Resultado

$f_{max} = 23$

$S = \{\mathrm{S}, \mathrm{A}, \mathrm{B}, \mathrm{D}\}$

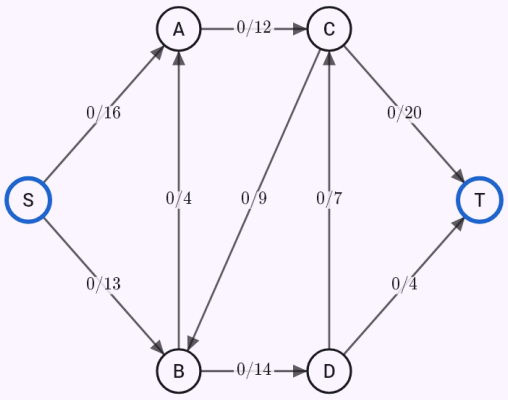
Passos

- Procuramos o fluxo máximo da fonte S para o sumidouro T, partindo de um fluxo de valor 0
- 1.º caminho de aumento (o mais curto na rede residual): $\mathrm{S} \to \mathrm{A} \to \mathrm{C} \to \mathrm{T}$. O fluxo aumenta da menor capacidade residual $\min(16, 12, 20) = 12$; o seu valor é agora 12
- 2.º caminho de aumento (o mais curto na rede residual): $\mathrm{S} \to \mathrm{B} \to \mathrm{D} \to \mathrm{T}$. O fluxo aumenta da menor capacidade residual $\min(13, 14, 4) = 4$; o seu valor é agora 16
- 3.º caminho de aumento (o mais curto na rede residual): $\mathrm{S} \to \mathrm{B} \to \mathrm{D} \to \mathrm{C} \to \mathrm{T}$. O fluxo aumenta da menor capacidade residual $\min(9, 10, 7, 8) = 7$; o seu valor é agora 23
- Não há mais caminhos de aumento – na rede residual a fonte só alcança os vértices $S = \{\mathrm{S}, \mathrm{A}, \mathrm{B}, \mathrm{D}\}$
- O fluxo nas arestas (f) e as suas capacidades (c)

	f	c
$\mathrm{S} \to \mathrm{A}$	12	16
$\mathrm{S} \to \mathrm{B}$	11	13
$\mathrm{B} \to \mathrm{A}$	0	4
$\mathrm{A} \to \mathrm{C}$	12	12
$\mathrm{C} \to \mathrm{B}$	0	9
$\mathrm{B} \to \mathrm{D}$	11	14
$\mathrm{D} \to \mathrm{C}$	7	7
$\mathrm{C} \to \mathrm{T}$	19	20
$\mathrm{D} \to \mathrm{T}$	4	4

- As arestas que saem do conjunto S formam o corte mínimo: $\mathrm{A} \to \mathrm{C}$, $\mathrm{D} \to \mathrm{C}$, $\mathrm{D} \to \mathrm{T}$. Estão todas saturadas e a sua capacidade total $12 + 7 + 4 = 23$ é igual ao fluxo máximo.

Gráfico



Estado inicial
$f = 0$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

Um ciclo de câmbio lucrativo entre três moedas.

Enunciado: `arbitrage(USD->EUR 0.9; EUR->GBP 0.8; GBP->USD 1.4; EUR->USD 1.1; GBP->EUR 1.24;`

USD->GBP 0.7)

Resultado

$$\mathrm{USD} \to \mathrm{EUR} \to \mathrm{GBP} \to \mathrm{USD}$$

$$\prod r \approx 1{,}008 \; (+0{,}8\,\%)$$

Passos

- As taxas e os pesos das arestas $w = -\ln r$

	r	$w = -\ln r$
$\mathrm{USD} \to \mathrm{EUR}$	$0{,}9$	$0{,}10536$
$\mathrm{EUR} \to \mathrm{GBP}$	$0{,}8$	$0{,}22314$
$\mathrm{GBP} \to \mathrm{USD}$	$1{,}4$	$-0{,}33647$
$\mathrm{EUR} \to \mathrm{USD}$	$1{,}1$	$-0{,}09531$
$\mathrm{GBP} \to \mathrm{EUR}$	$1{,}24$	$-0{,}21511$
$\mathrm{USD} \to \mathrm{GBP}$	$0{,}7$	$0{,}35667$

- Um ciclo é lucrativo quando o produto das suas taxas excede 1 – em logaritmos, um ciclo negativo dos pesos

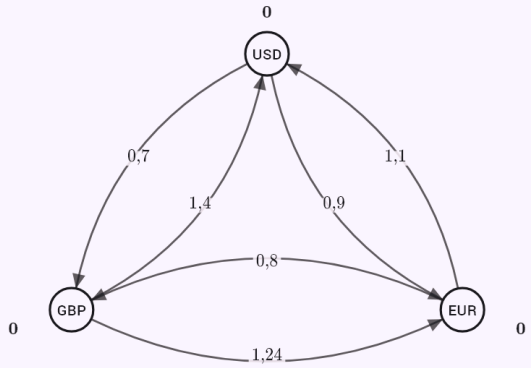
$$r_1 r_2 \cdots r_k > 1 \iff \ln r_1 + \cdots + \ln r_k > 0 \iff (-\ln$$

- Iniciamos o algoritmo de Bellman-Ford a partir de todas as moedas ao mesmo tempo (todas as marcas 0); as marcas alteradas estão a negrito, o índice é o predecessor.

	USD	EUR	GBP
0	0	0	0
1	$\mathbf{-0{,}336472_{\mathrm{GBP}}}$	$\mathbf{-0{,}215111_{\mathrm{GBP}}}$	0
2	$\mathbf{-0{,}34444_{\mathrm{GBP}}}$	$\mathbf{-0{,}231112_{\mathrm{USD}}}$	$\mathbf{-0{,}007968}$
3	$\mathbf{-0{,}352409_{\mathrm{GBP}}}$	$\mathbf{-0{,}23908_{\mathrm{USD}}}$	$\mathbf{-0{,}015936}$

- As marcas mudam também na n-ésima passagem – os predecessores levam ao ciclo negativo $\mathrm{USD} \to \mathrm{EUR} \to \mathrm{GBP} \to \mathrm{USD}$. Produto das taxas $0{,}9 \cdot 0{,}8 \cdot 1{,}4 \approx 1{,}008$, ganho de $0{,}8\,\%$: 1000 unidades passam a 1008 após uma volta.

Gráfico



Estado inicial
$d = 0$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

Taxas consistentes dadas como matriz – não há arbitragem.

Enunciado: `arbitrage(CZK EUR USD; 1 0.04 0.0432; 25 1 1.08; 23.148148 0.925926 1)`

Resultado

Não há arbitragem – nenhum ciclo de câmbio é lucrativo.

Passos

- As taxas e os pesos das arestas $w = -\ln r$

	r	$w = -\ln r$
$\mathrm{CZK} \to \mathrm{EUR}$	0,04	3,2189
$\mathrm{CZK} \to \mathrm{USD}$	0,0432	3,1419
$\mathrm{EUR} \to \mathrm{CZK}$	25	−3,2189
$\mathrm{EUR} \to \mathrm{USD}$	1,08	−0,076961
$\mathrm{USD} \to \mathrm{CZK}$	23,1481	−3,1419
$\mathrm{USD} \to \mathrm{EUR}$	0,925926	0,076961

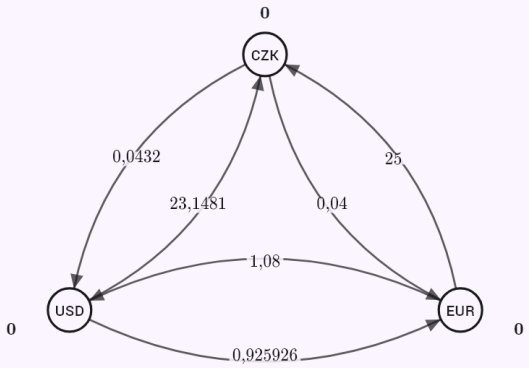
- Um ciclo é lucrativo quando o produto das suas taxas excede 1 – em logaritmos, um ciclo negativo dos pesos $r_1 r_2 \cdots r_k > 1 \iff \ln r_1 + \cdots + \ln r_k > 0 \iff (-\ln$
- Iniciamos o algoritmo de Bellman-Ford a partir de todas as moedas ao mesmo tempo (todas as marcas 0); as marcas alteradas estão a negrito, o índice é o predecessor.

	CZK	EUR	USD
0	0	0	0
1	$\mathbf{-3{,}218876_{EUR}}$	0	$\mathbf{-0{,}076961_{EUR}}$

- Na passagem 2 já nenhuma marca mudou – as distâncias são definitivas.
- Nem na n-ésima passagem mudou alguma marca – não há ciclo negativo e, portanto, não há arbitragem. Os potenciais p = −d são logaritmos de «preços» consistentes das moedas: cada taxa satisfaz $\ln r \le p($ destino) − p(origem).

	$p = -d$
CZK	3,2189
EUR	0
USD	0,076961

Gráfico



Estado inicial
$d = 0$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

Os câmbios de uma só tabela (ČNB) – nunca há arbitragem.

Enunciado: `arbitrage(source=cnb; CZK EUR USD GBP)`

Resultado

Não há arbitragem – nenhum ciclo de câmbio é lucrativo.

Passos

- Câmbios da tabela de câmbios: $\check{\mathrm{C}}\mathrm{NB},\ 27/11/2026$
- A tabela dá o valor de uma unidade de cada moeda na moeda base CZK (k) – e o seu logaritmo p = ln k

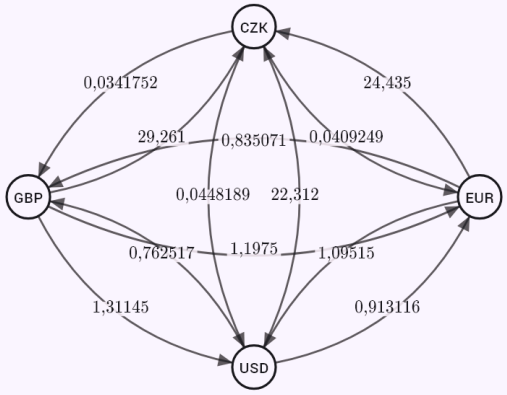
	k	$p = \ln k$
CZK	1	0
EUR	$1\,€ = 24{,}435\,\mathrm{CZK}$	$3{,}196$
USD	$1\,\$ = 22{,}312\,\mathrm{CZK}$	$3{,}1051$
GBP	$1\,\mathrm{GBP} = 29{,}261\,\mathrm{CZK}$	$3{,}3763$

- O câmbio entre duas moedas é uma taxa cruzada através da moeda base: $r_{ij} = \dfrac{k_i}{k_j}$
- Em cada ciclo os valores k simplificam-se e o produto dos câmbios é exatamente 1. Os câmbios de uma só tabela ($\check{\mathrm{C}}\mathrm{NB}$) são coerentes e nunca dão arbitragem – os logaritmos p = ln k são os «preços» das moedas que o mostram.

$$r_{ij}\, r_{jl} \cdots r_{mi} = \frac{k_i}{k_j} \cdot \frac{k_j}{k_l} \cdots \frac{k_m}{k_i} = 1$$

- O ČNB e o BCE publicam apenas câmbios médios (de referência), sem compra nem venda. Com os câmbios de uma casa de câmbio (compra e venda), cada ciclo perde.

Gráfico



Os câmbios do ČNB e do BCE juntos – um «ganho» mínimo entre câmbios de referência.

Enunciado: `arbitrage(source=cnb+ecb; CZK EUR USD GBP CHF)`

Resultado

$$\mathrm{USD} \to \mathrm{CHF} \to \mathrm{USD}$$

$$\prod r \approx 1{,}0009332\ (+0{,}09332\,\%)$$

Passos

- Câmbios da tabela de câmbios:
  $\check{\mathrm{C}}\mathrm{NB},\ 27/11/2026; \quad \mathrm{ECB},\ 27/11/2026$
- Para cada par de moedas tomamos o melhor dos dois câmbios – o do ČNB ou o do BCE (última coluna da tabela). O outro não melhoraria nenhum ciclo.
- As taxas e os pesos das arestas $w = -\ln r$

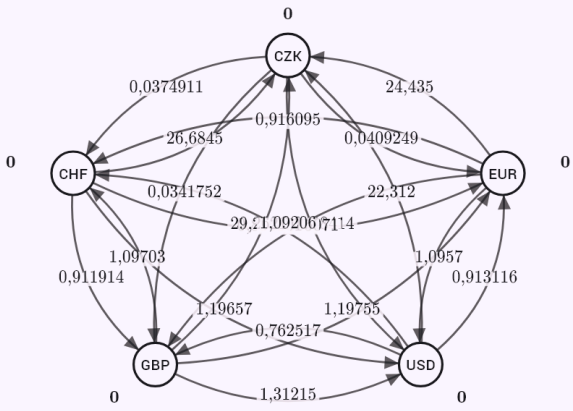
	r	$w = -\ln r$	
CZK → EUR	0,0409249	3,196	ČNB
CZK → USD	0,0448414	3,1046	ECB
CZK → GBP	0,0341752	3,3763	ČNB
CZK → CHF	0,0374911	3,2837	ČNB
EUR → CZK	24,435	−3,196	ČNB
EUR → USD	1,0957	−0,091393	ECB
EUR → GBP	0,835071	0,18024	ČNB
EUR → CHF	0,916095	0,087635	ČNB
USD → CZK	22,312	−3,1051	ČNB
USD → EUR	0,913116	0,090892	ČNB
USD → GBP	0,762517	0,27113	ČNB
USD → CHF	0,836501	0,17853	ČNB
GBP → CZK	29,2621	−3,3763	ECB
GBP → EUR	1,19755	−0,18028	ECB
GBP → USD	1,31215	−0,27167	ECB
GBP → CHF	1,09703	−0,092604	ČNB
CHF → CZK	26,6845	−3,2841	ECB
CHF → EUR	1,09206	−0,088066	ECB
CHF → USD	1,19657	−0,17946	ECB
CHF → GBP	0,911914	0,092209	ECB

- Um ciclo é lucrativo quando o produto das suas taxas excede 1 – em logaritmos, um ciclo negativo dos pesos
  $r_1 r_2 \cdots r_k > 1 \iff \ln r_1 + \cdots + \ln r_k > 0 \iff (-\ln$
- Iniciamos o algoritmo de Bellman-Ford a partir de todas as moedas ao mesmo tempo (todas as marcas 0); as marcas alteradas estão a negrito, o índice é o predecessor.

	CZK	EUR	USD
0	0	0	0
1	$\mathbf{-3{,}376687_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}18067_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}272064}$
2	$\mathbf{-3{,}37762_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}181603_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}272996}$
3	$\mathbf{-3{,}378552_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}182536_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}273929}$
4	$\mathbf{-3{,}379485_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}183468_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}274862}$
5	$\mathbf{-3{,}380418_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}184401_{CHF}}$	$\mathbf{-0{,}275795}$

- As marcas mudam também na n-ésima passagem – os predecessores levam ao ciclo negativo $\mathrm{USD} \to \mathrm{CHF} \to \mathrm{USD}$. Produto das taxas $0{,}836501 \cdot 1{,}19657 \approx 1{,}0009332$, ganho de $0{,}09332\,\%$: 1000 unidades passam a $1000{,}933$ após uma volta.
- O ciclo só surge entre os câmbios de referência de dois bancos, fixados em momentos diferentes e arredondados de outra forma. Ninguém negoceia a estes câmbios – o ganho é praticamente inalcançável.

Gráfico



Estado inicial
$d = 0$

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

O caminho crítico e as folgas das atividades.

Enunciado: `cpm(A 3; B 4 A; C 2 A; D 5 B C; E 3 C; F 2 D E)`

Resultado

$T = 14$

$\mathrm{A} \to \mathrm{B} \to \mathrm{D} \to \mathrm{F}$

Passos

- As atividades, as suas durações e predecessoras

	t	
A	3	–
B	4	A
C	2	A
D	5	B, C
E	3	C
F	2	D, E

- Passagem para a frente: uma atividade começa o mais cedo quando terminam todas as suas predecessoras (ES = o maior EF das predecessoras) e termina em EF = ES + t.

	ES	$\mathrm{EF} = \mathrm{ES} + t$
A	0	3
B	3	7
C	3	5
D	$\max(7, 5) = 7$	12
E	5	8
F	$\max(12, 8) = 12$	14

- A duração do projeto é o mais tardio dos fins mais cedo: $T = 14$
- Passagem para trás: uma atividade tem de terminar o mais tardar quando as sucessoras têm de começar (LF = o menor LS das sucessoras) e começar o mais tardar em LS = LF − t.

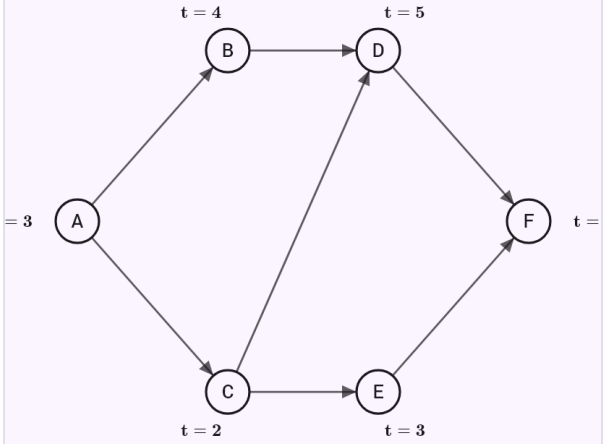
	LF	$\mathrm{LS} = \mathrm{LF} - t$
F	14	12
E	12	9
D	12	7
C	$\min(7, 9) = 7$	5
B	7	3
A	$\min(3, 5) = 3$	0

- A folga de cada atividade; as atividades críticas (★) não têm nenhuma

	$R = \mathrm{LS} - \mathrm{ES}$	
A	0	★
B	0	★
C	2	
D	0	★
E	4	
F	0	★

- O caminho crítico – um atraso de qualquer das suas atividades atrasa todo o projeto: $\mathrm{A} \to \mathrm{B} \to \mathrm{D} \to \mathrm{F}$

Gráfico



Estado inicial

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

PERT – a probabilidade de terminar o projeto até ao prazo.

Enunciado: `cpm(A 2/3/4; B 3/4/11 A; C 1/2/3 A; D 4/5/6 B C; T=15)`

Resultado

$T = 13$

$\mathrm{A} \to \mathrm{B} \to \mathrm{D}$

$P(T \le 15) \approx 0{,}9214$

Passos

- As atividades, as suas durações e predecessoras

	t	
A	3	–
B	5	A
C	2	A
D	5	B, C

- PERT: durações esperadas e variâncias a partir das três estimativas

	a	m	b	$t = \frac{a+4m+b}{6}$	$\sigma^2 = \left(\frac{b-a}{6}\right)^2$
A	2	3	4	3	0,1111
B	3	4	11	5	1,778
C	1	2	3	2	0,1111
D	4	5	6	5	0,1111

- Passagem para a frente: uma atividade começa o mais cedo quando terminam todas as suas predecessoras (ES = o maior EF das predecessoras) e termina em EF = ES + t.

	ES	$\mathrm{EF} = \mathrm{ES} + t$
A	0	3
B	3	8
C	3	5
D	$\max(8, 5) = 8$	13

- A duração do projeto é o mais tardio dos fins mais cedo: $T = 13$
- Passagem para trás: uma atividade tem de terminar o mais tardar quando as sucessoras têm de começar (LF = o menor LS das sucessoras) e começar o mais tardar em LS = LF − t.

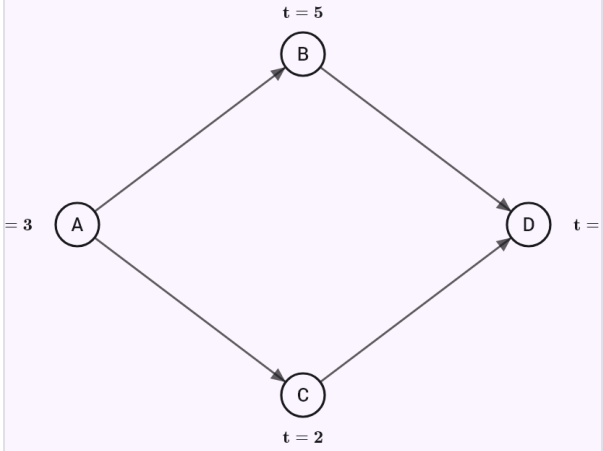
	LF	$\mathrm{LS} = \mathrm{LF} - t$
D	13	8
C	8	6
B	8	3
A	$\min(3, 6) = 3$	0

- A folga de cada atividade; as atividades críticas (★) não têm nenhuma

	$R = \mathrm{LS} - \mathrm{ES}$	
A	0	★
B	0	★
C	3	
D	0	★

- O caminho crítico – um atraso de qualquer das suas atividades atrasa todo o projeto: $\mathrm{A} \to \mathrm{B} \to \mathrm{D}$
- A variância da duração do projeto é a soma das variâncias no caminho crítico: $\sigma_T^2 = 0{,}1111 + 1{,}778 + 0{,}1111 = 2, \quad \sigma_T \approx 1{,}414$
- A duração segue aproximadamente uma distribuição normal – probabilidade de terminar até ao prazo: $P(T \le 15) = \Phi\left(\frac{15-13}{1{,}414}\right) = \Phi(1{,}41) \approx 0{,}9214$

Gráfico



Estado inicial

Com as setas percorre o algoritmo passo a passo. A vermelho a alteração deste passo, a azul o que já está decidido, a verde o resultado. Junto aos vértices estão as suas marcas (distância, tempos mais cedo e mais tarde).

Limitações conhecidas

- Um grafo pode ter no máximo 30 vértices e 200 arestas; as matrizes de Floyd-Warshall vértice a vértice são mostradas até 6 vértices, em grafos maiores só a matriz final.

- A procura de arbitragem encontra um ciclo lucrativo (não necessariamente o mais lucrativo); diferenças abaixo de 0,0001 % contam como arredondamento das taxas.
- O ČNB e o BCE publicam apenas câmbios médios (de referência), aos quais ninguém negoceia; o «ganho» com as duas tabelas ao mesmo tempo é de centésimas de ponto percentual e praticamente inalcançável.
- Com as duas tabelas apenas as moedas que os dois bancos publicam (nenhum publica o rublo russo).
- As rotas de veículos, o problema da mochila, os inventários e as filas de espera estão em preparação; a programação linear, o transporte e a afetação têm um capítulo próprio.

53. Psicometria

Os cálculos psicométricos para interpretar resultados de testes (segundo o texto «Psicometria clínica – do número à interpretação») estão no formulário «Estatística e psicometria» – secção «Aplicações» do ecrã inicial, área Psicologia. Escolha a tarefa, a escala e o que procura e preencha os valores medidos; a escala preenche a média e o desvio padrão da norma (QI 100; 15, T 50; 10, ponderada 10; 3, z 0; 1, sten 5,5; 2, stanine 5; 2), «Outra» permite introduzir a norma de outro teste. O ícone «?» explica de onde vem a fórmula.

Ajuda dentro da aplicação: o ícone «?» de cada tarefa do formulário explica o que calcula e de onde vem a fórmula. O resultado mostra a resolução passo a passo e os termos técnicos nela (kappa de Cohen, curva ROC, intervalo de confiança, valor p, percentil, pontuação verdadeira, valores preditivos…) estão sublinhados a pontilhado – um toque num termo mostra a sua breve explicação em palavras simples, muitas vezes com um exemplo. As notas no fim da resolução dizem como interpretar o resultado e a que ter atenção.

Conversão de pontuações padronizadas: $z = (X - M)/DP$ e a partir dela T, QI, a pontuação ponderada, sten e stanine (arredondados a um inteiro dentro da escala) e o percentil. Pontuação e percentil: $PR = 100 \cdot \Phi(z)$ supondo a distribuição normal e, ao contrário, a pontuação de um percentil dado.

O erro padrão de medida $EPM = DP \cdot \sqrt{(1 - r)}$ a partir da fidedignidade r. O intervalo de confiança em torno da pontuação observada $X \pm z \cdot EPM$ a 80, 90, 95 ou 99 % ($z = 1{,}28$; 1,645; 1,96; 2,576). A estimativa da pontuação verdadeira $T' = M + r(X - M)$ – regressão à média – com o intervalo em torno de T' e o erro padrão de estimativa $SEE = DP \cdot \sqrt{(r(1 - r))}$.

A significância da diferença entre duas pontuações da mesma escala (índices da WAIS, por exemplo): erro padrão da diferença $EP\_dif = DP \cdot \sqrt{(2 - r_{11} - r_{22})}$ e diferença crítica $z \cdot EP\_dif$. Valores preditivos de um teste pelo teorema de Bayes: VPP e VPN a partir da sensibilidade, da especificidade e da prevalência – ou de uma tabela 2×2 (verdadeiros e falsos positivos e negativos), opcionalmente com a prevalência da população onde o teste é usado – com as razões de verosimilhança LR^+ e LR^-.

A fórmula de Spearman-Brown (no mesmo formulário) calcula a fidedignidade de um teste alongado k vezes, $r' = k \cdot r / (1 + (k - 1) \cdot r)$, ou ao contrário quantas vezes alongar o teste para uma fidedignidade desejada – com o número atual de itens, também os itens necessários. A correção de Bonferroni dá o nível mais rigoroso $\alpha' = \alpha/m$ para m comparações, junto com a probabilidade de um resultado falsamente significativo sem correção e a correção de Šidák.

A fidedignidade e a concordância a partir de dados medidos vêm dos chips de data(…) ou da grade “Como dados” (colada do Excel, arquivo CSV): alfa de Cronbach – itens nas colunas, respondentes nas linhas – com análise de itens (correlação do item com o resto do teste, alfa sem o item); o ICC – avaliadores nas colunas, sujeitos nas linhas – as seis formas de Shrout e Fleiss a partir de uma tabela

de análise de variância; kappa de Cohen de duas colunas de avaliações (categorias como números) ou de uma tabela de concordância quadrada; curva ROC e AUC de uma coluna de escores e uma coluna de estado 0/1 (1 = transtorno) pela estatística U de Mann-Whitney, com o ponto de corte pelo índice de Youden e o gráfico da curva ROC. Alfa, ICC, kappa e AUC vêm com um intervalo de confiança (90, 95 ou 99 % por um chip): alfa segundo Feldt, ICC a partir da distribuição F, kappa a partir do erro padrão assintótico, AUC segundo Hanley e McNeil. Com categorias ordenadas, calcula o kappa também com pesos lineares ou quadráticos. A curva ROC pode vir também de duas colunas com os escores de dois grupos (a primeira positiva, de qualquer comprimento), juntando-se à AUC o teste de Mann-Whitney. Três colunas – os escores de dois testes e o estado – comparam-se pelo teste de DeLong, com as duas curvas num gráfico.

A resolução termina com uma nota de interpretação: os percentis são ordinais (não se somam nem se tira a média), a conversão em percentil só vale com distribuição normal, uma diferença significativa não é necessariamente rara (taxa de base da discrepância), os valores preditivos dependem da prevalência. O gráfico mostra a curva normal com a pontuação, o intervalo ou a região crítica marcados.

Exemplos

QI 85 em todas as escalas: z = −1, T = 40, pontuação ponderada 7.

Enunciado: `model(scores; find=all[one]; X=85[one]; M=100[one]; SD=15[one]; scale=iq)`

Resultado

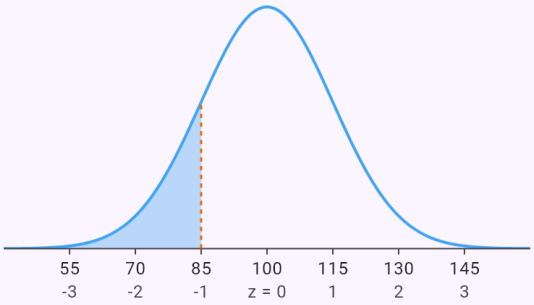
$$z = -1$$
$$T = 40$$
$$IQ = 85$$
$$SS = 7$$
$$\text{sten} = 4$$
$$\text{stanin} = 3$$
$$PR \approx 16$$

Passos

- Dados: $X = 85, \quad M = 100, \quad SD = 15$
- As pontuações padronizadas indicam a quantos desvios padrão da média da norma está um desempenho. Primeiro z = (X − M)/DP, depois a outra escala: T = 50 + 10z, QI = 100 + 15z, ponderada = 10 + 3z, sten = 5,5 + 2z (1–10), stanine = 5 + 2z (1–9). O percentil é a percentagem da população com pontuação menor – só para uma pontuação com distribuição normal. Equação do modelo: $z = \frac{X - M}{SD}, \quad X' = M' + z \cdot SD'$
- Isolamos a grandeza procurada: $z = \frac{X - M}{SD}$
- Substituímos: $z = \frac{85 - 100}{15} = -1$
- Substituímos: $T = 50 + 10z = 50 + 10 \cdot (-1) = 40$
- Substituímos: $IQ = 100 + 15z = 100 + 15 \cdot (-1) = 85$
- Substituímos: $SS = 10 + 3z = 10 + 3 \cdot (-1) = 7$
- Substituímos $\text{sten} = 5{,}5 + 2z = 5{,}5 + 2 \cdot (-1) = 3{,}5 \Rightarrow \text{sten} = 4$
- Substituímos: $\text{stanin} = 5 + 2z = 5 + 2 \cdot (-1) = 3 \Rightarrow \text{stanin} = 3$
- Sten e stanine são inteiros – o valor é arredondado e limitado ao intervalo da escala (1–10, 1–9).
- Substituímos: $PR = 100 \cdot \Phi(z) = 100 \cdot \Phi(-1) \approx 15{,}87$
- A conversão em percentil só vale para uma pontuação com distribuição normal. Em testes assimétricos (os tempos do TMT, por exemplo) o percentil lê-se na tabela normativa.
- Os percentis são uma escala ordinal – os passos não são iguais (no centro os percentis 50 e 60 estão perto em pontuação, nos extremos longe). Por isso não se somam, não se tira a média nem se subtraem.

Gráfico

Densidade normal, a área colorida é a probabilidade procurada



$PR \approx 16 \quad X = 85$

Um QI de 130 corresponde ao percentil 98.

Enunciado: `model(percentile; find=PR[one]; X=130[one]; M=100[one]; SD=15[one]; scale=iq)`

Resultado

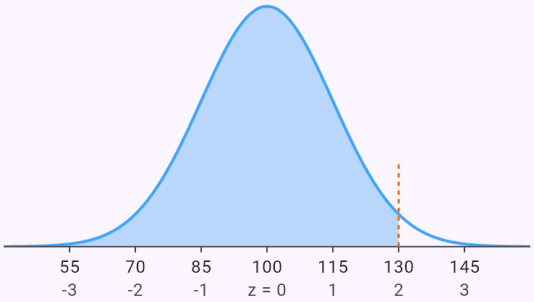
$$PR \approx 98$$

Passos

- Procuramos PR; dados: $X = 130, \quad M = 100, \quad SD = 15$
- O percentil indica que percentagem do grupo normativo obteve uma pontuação menor. Supondo a distribuição normal, resulta da pontuação z: PR = 100·Φ(z); a pontuação a partir do percentil, pelo quantil z = Φ⁻¹(PR/100). Equação do modelo: $PR = 100 \cdot \Phi\left(\frac{X - M}{SD}\right)$
- Isolamos a grandeza procurada: $z = \frac{X - M}{SD}$
- Substituímos: $z = \frac{130 - 100}{15} = 2$
- Substituímos: $PR = 100 \cdot \Phi(2) \approx 97{,}72$
- A conversão em percentil só vale para uma pontuação com distribuição normal. Em testes assimétricos (os tempos do TMT, por exemplo) o percentil lê-se na tabela normativa.
- Os percentis são uma escala ordinal – os passos não são iguais (no centro os percentis 50 e 60 estão perto em pontuação, nos extremos longe). Por isso não se somam, não se tira a média nem se subtraem.

Gráfico

Densidade normal, a área colorida é a probabilidade procurada



$PR \approx 98 \quad X = 130$

A pontuação T do percentil 16.

Enunciado: `model(percentile; find=X[one]; PR=16[pct]; M=50[one]; SD=10[one]; scale=t)`

Resultado

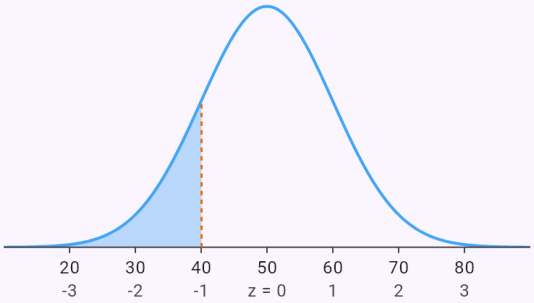
$$X \approx 40{,}1$$

Passos

- Procuramos X; dados: $PR = 16\,\%, \quad M = 50, \quad SD = 10$
- Convertemos as unidades: $PR = 16\,\% = 0{,}16$
- O percentil indica que percentagem do grupo normativo obteve uma pontuação menor. Supondo a distribuição normal, resulta da pontuação z: PR = 100·Φ(z); a pontuação a partir do percentil, pelo quantil z = Φ⁻¹(PR/100). Equação do modelo: $PR = 100 \cdot \Phi\left(\dfrac{X - M}{SD}\right)$
- Isolamos a grandeza procurada: $z = \Phi^{-1}\left(\dfrac{PR}{100}\right), \quad X = M + z \cdot SD$
- Substituímos $z = \Phi^{-1}(0{,}16) \approx -0{,}9945, \quad X = 50 + (-0{,}9945) \cdot 10$
- A conversão em percentil só vale para uma pontuação com distribuição normal. Em testes assimétricos (os tempos do TMT, por exemplo) o percentil lê-se na tabela normativa.
- Os percentis são uma escala ordinal – os passos não são iguais (no centro os percentis 50 e 60 estão perto em pontuação, nos extremos longe). Por isso não se somam, não se tira a média nem se subtraem.

Gráfico

Densidade normal, a área colorida é a probabilidade procurada



$PR = 16 \quad X \approx 40{,}1$

O erro padrão de medida de um teste com fidedignidade 0,97.

Enunciado: `model(sem; find=SEM[one]; SD=15[one]; r=0.97[one]; scale=iq)`

Resultado

$$SEM \approx 2{,}6$$

Passos

- Procuramos SEM; dados: $SD = 15, \quad r_{xx} = 0{,}97$
- Nenhuma medida é exata: pontuação observada X = verdadeira T + erro E. O erro padrão de medida EPM = DP·√(1 − r) indica quanto a observada difere tipicamente da verdadeira; r é a fidedignidade do teste (teste-reteste, α de Cronbach). Quanto maior a fidedignidade, menor o erro. Equação do modelo: $SEM = SD\sqrt{1 - r_{xx}}$
- Erro padrão de medida: $SEM = 15\sqrt{1 - 0{,}97} \approx 2{,}598$

O intervalo de confiança a 95 % em torno de um QI de 95.

Enunciado: `model(interval; find=CI[one]; X=95[one]; SD=15[one]; r=0.97[one]; scale=iq;`

`level=95)`

Resultado

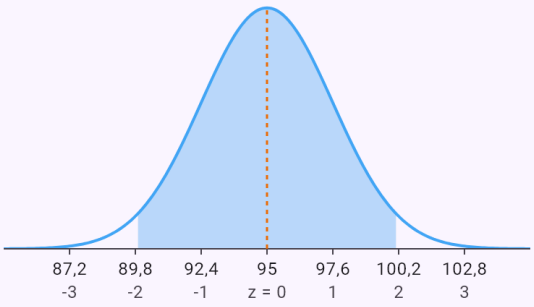
$95\,\%:\ [89{,}9,\ 100{,}1]$

Passos

- Procuramos X; dados:
  $X = 95,\quad SD = 15,\quad r_{xx} = 0{,}97$
- Em torno da pontuação observada traçamos a faixa onde está a verdadeira com uma confiança dada: X ± z·EPM, com z = 1,28 (80 %), 1,645 (90 %), 1,96 (95 %) ou 2,576 (99 %). Uma pontuação lê-se como um intervalo, não como um número exato. Equação do modelo
  $X \pm z_{1-\alpha/2} \cdot SEM$
  $SEM = SD\sqrt{1 - r_{xx}}$
- Erro padrão de medida: $SEM = 15\sqrt{1 - 0{,}97} \approx 2{,}598$
- Valor crítico da normal padrão:
  $z_{1-\alpha/2} = z_{0{,}975} = 1{,}96 \quad (95\,\%)$
- Substituímos:
  $95 \pm 1{,}96 \cdot 2{,}6 = 95 \pm 5{,}09 \Rightarrow [89{,}91,\ 100{,}1]$
- O intervalo é construído em torno da pontuação observada. Mais preciso (sobretudo em pontuações extremas) é o intervalo em torno da verdadeira estimada – o modelo «Estimativa da pontuação verdadeira».

Gráfico

Densidade normal, a área colorida é a probabilidade procurada



$95\,\%:\ [89{,}9,\ 100{,}1] \quad X = 95$

A estimativa da pontuação verdadeira de um QI de 74 com fidedignidade 0,92.

Enunciado: `model(truescore; find=T[one]; X=74[one]; M=100[one]; SD=15[one]; r=0.92[one];`

`scale=iq; level=95)`

Resultado

$$T' \approx 76{,}1$$

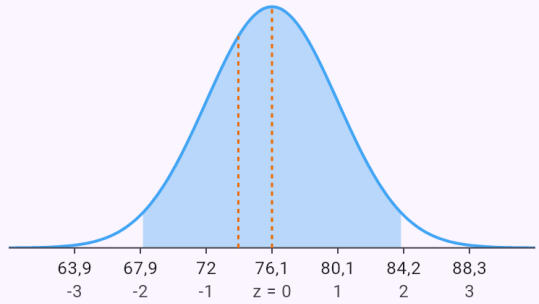
$$95\,\%:\ [68{,}1,\ 84{,}1]$$

Passos

- Procuramos T'; dados:
  $X = 74,\quad M = 100,\quad SD = 15,\quad r_{xx} = 0{,}92$
- Em pontuações extremas a verdadeira estima-se mais perto da média (regressão à média): T' = M + r(X − M). O intervalo de confiança constrói-se então em torno de T' com o erro padrão de estimativa SEE = DP·√(r(1 − r)) – mais preciso do que em torno da observada, sobretudo com baixa fidedignidade. Equação do modelo
  $T' = M + r_{xx}(X - M)$
  $SEE = SD\sqrt{r_{xx}(1 - r_{xx})}$
- Substituímos: $T' = 100 + 0{,}92 \cdot (74 - 100) = 76{,}08$
- A estimativa da pontuação verdadeira está mais perto da média do que a observada – medido de novo, um resultado extremo sairia provavelmente menos extremo.
- Erro padrão de estimativa da pontuação verdadeira:
  $SEE = 15\sqrt{0{,}92 \cdot (1 - 0{,}92)} \approx 4{,}069$
- Valor crítico da normal padrão:
  $z_{1-\alpha/2} = z_{0{,}975} = 1{,}96 \quad (95\,\%)$
- Substituímos
  $T' \pm z \cdot SEE = 76{,}08 \pm 1{,}96 \cdot 4{,}07 \Rightarrow [68{,}1,\ 84{,}06]$

Gráfico

Densidade normal, a área colorida é a probabilidade procurada



$X = 74 \quad T'$

Dois índices, 112 e 97 – a diferença é significativa?

Enunciado: `model(difference; find=D[one]; X1=112[one]; X2=97[one]; SD=15[one];`

```
r1=0.95[one]; r2=0.90[one]; scale=iq; level=95)
```

Resultado

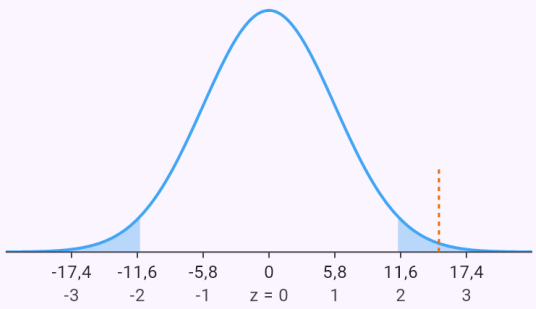
$$D = 15 \geq D_{crit} \approx 11{,}4$$

Passos

- Procuramos D; dados:
  $X_1 = 112, \quad X_2 = 97, \quad SD = 15, \quad r_{11} = 0{,}95, \quad r_{22} = 0{,}9$
- Duas pontuações (índices da WAIS, por exemplo) diferem mais do que explicaria o erro de medida? Erro padrão da diferença EP_dif = DP·√(2 − r_{11} − r_{22}), diferença crítica z·EP_dif. Uma diferença que a atinge é significativa – o que não quer dizer que seja rara.
  Equação do modelo
  $SE_{diff} = SD\sqrt{2 - r_{11} - r_{22}}$
  $D_{crit} = z_{1-\alpha/2} \cdot SE_{diff}$
- Erro padrão da diferença:
  $SE_{diff} = 15\sqrt{2 - 0{,}95 - 0{,}9} \approx 5{,}809$
- Valor crítico da normal padrão:
  $z_{1-\alpha/2} = z_{0{,}975} = 1{,}96 \quad (95\,\%)$
- Diferença crítica: $D_{crit} = 1{,}96 \cdot 5{,}81 \approx 11{,}39$
- Substituímos:
  $D = |X_1 - X_2| = |112 - 97| = 15 \geq 11{,}4$
- A diferença atinge o valor crítico – é significativa (não se explica só pelo erro de medida).
- Significativa não quer dizer rara: diferenças de índices deste tamanho surgem muitas vezes em 20–30 % da amostra normativa (taxa de base da discrepância). Para a interpretação conta também a sua frequência na norma.

Gráfico

Densidade normal, a área colorida é a probabilidade procurada



$95\,\%$ $D = 15$

Um rastreio com sensibilidade de 92,5 % e especificidade de 74,6 % com prevalência de 2 %.

Enunciado: `model(predictive; find=values[one]; sens=92.5[pct]; spec=74.6[pct]; p=2[pct];`

`input=rates)`

Resultado

$$PPV \approx 0{,}0692 = 6{,}92\,\%$$
$$NPV \approx 0{,}998 = 99{,}8\,\%$$

Passos

- Procuramos PPV; dados:
  $Se = 92{,}5\,\%, \quad Sp = 74{,}6\,\%, \quad p = 2\,\%$
- Convertemos as unidades:
  $Se = 92{,}5\,\% = 0{,}925, \quad Sp = 74{,}6\,\% = 0{,}746, \quad p = 2\,\% = 0{,}02$
- A sensibilidade (Se) é a proporção de doentes que o teste deteta, a especificidade (Sp) a de saudáveis que exclui corretamente. Na prática importa a probabilidade da perturbação perante um resultado positivo – o valor preditivo positivo VPP. Pelo teorema de Bayes depende da prevalência p: VPP = Se·p / (Se·p + (1 − Sp)(1 − p)); o negativo VPN = Sp(1 − p) / (Sp(1 − p) + (1 − Se)p).
  Equação do modelo
  $$PPV = \frac{Se \cdot p}{Se \cdot p + (1 - Sp)(1 - p)}$$
  $$NPV = \frac{Sp(1 - p)}{Sp(1 - p) + (1 - Se)p}$$

- Substituímos
  $$PPV = \frac{0{,}925 \cdot 0{,}02}{0{,}925 \cdot 0{,}02 + 0{,}254 \cdot 0{,}98} = \frac{0{,}0185}{0{,}2674} \approx 0{,}0691$$
- Substituímos
  $$NPV = \frac{0{,}746 \cdot 0{,}98}{0{,}746 \cdot 0{,}98 + 0{,}075 \cdot 0{,}02} = \frac{0{,}7311}{0{,}7326} \approx 0{,}998$$
- Razões de verosimilhança:
  $$LR^{+} = \frac{Se}{1 - Sp} \approx 3{,}642, \quad LR^{-} = \frac{1 - Se}{Sp} \approx 0{,}1005$$
- Os valores preditivos dependem da prevalência: com prevalência baixa, mesmo com um bom teste, a maioria dos positivos são falsos positivos. Um rastreio positivo deve ser confirmado.

Valores preditivos a partir de uma tabela 2×2.

Enunciado: `model(predictive; find=values[one]; TP=37[one]; FP=10[one]; FN=3[one]; TN=50[one]; input=table)`

Resultado

$$PPV \approx 0{,}787 = 78{,}7\,\%$$
$$NPV \approx 0{,}943 = 94{,}3\,\%$$

Passos

- Procuramos PPV; dados:
  $TP = 37, \quad FP = 10, \quad FN = 3, \quad TN = 50$
- Sensibilidade: $Se = \frac{TP}{TP + FN} = \frac{37}{40} = 0{,}925$
- Especificidade: $Sp = \frac{TN}{TN + FP} = \frac{50}{60} \approx 0{,}8333$
- Prevalência na amostra: $p = \frac{TP + FN}{N} = \frac{40}{100} = 0{,}4$
- A sensibilidade (Se) é a proporção de doentes que o teste deteta, a especificidade (Sp) a de saudáveis que exclui corretamente. Na prática importa a probabilidade da perturbação perante um resultado positivo – o valor preditivo positivo VPP. Pelo teorema de Bayes depende da prevalência p: VPP = Se·p / (Se·p + (1 − Sp)(1 − p)); o negativo VPN = Sp(1 − p) / (Sp(1 − p) + (1 − Se)p).
  Equação do modelo
  $$PPV = \frac{Se \cdot p}{Se \cdot p + (1 - Sp)(1 - p)}$$
  $$NPV = \frac{Sp(1 - p)}{Sp(1 - p) + (1 - Se)p}$$

- Substituímos
  $$PPV = \frac{0{,}925 \cdot 0{,}4}{0{,}925 \cdot 0{,}4 + 0{,}1667 \cdot 0{,}6} = \frac{0{,}37}{0{,}47} \approx 0{,}7872$$
- Substituímos
  $$NPV = \frac{0{,}8333 \cdot 0{,}6}{0{,}8333 \cdot 0{,}6 + 0{,}075 \cdot 0{,}4} = \frac{0{,}5}{0{,}53} \approx 0{,}9434$$
- Razões de verosimilhança:
  $$LR^{+} = \frac{Se}{1 - Sp} = 5{,}55, \quad LR^{-} = \frac{1 - Se}{Sp} = 0{,}09$$
- Os valores preditivos dependem da prevalência: com prevalência baixa, mesmo com um bom teste, a maioria dos positivos são falsos positivos. Um rastreio positivo deve ser confirmado.

Consistência interna de um questionário de quatro itens.

Enunciado: `data(P1 P2 P3 P4; 3 4 3 5; 2 2 3 2; 4 5 4 4; 5 4 5 5; 1 2 2 1; 3 3 4 3)`

Alfa de Cronbach

Resultado

$$\alpha \approx 0{,}9343$$

$$95\,\%:\ [0{,}765,\ 0{,}990]$$

Passos

- Número de itens (colunas) k = 4, número de respondentes (linhas) 6
- As variâncias amostrais dos itens e a sua soma

$$s^2_{\mathrm{P1}} = 2,\ s^2_{\mathrm{P2}} \approx 1{,}467,\ s^2_{\mathrm{P3}} = 1{,}1,\ s^2_{\mathrm{P4}} \approx 2{,}667$$

$$\sum_{i=1}^{4} s_i^2 = 2 + 1{,}467 + 1{,}1 + 2{,}667 = 7{,}233$$

- O escore total de cada respondente (soma das suas respostas): $15,\ 9,\ 17,\ 19,\ 6,\ 13$. A variância dos escores totais: $s^2_X \approx 24{,}17$
- Alfa de Cronbach – a consistência interna é excelente.

$$\alpha = \frac{k}{k-1}\left(1 - \frac{\sum s_i^2}{s_X^2}\right) = \frac{4}{3}\left(1 - \frac{7{,}233}{24{,}17}\right) \approx 0{,}9343$$

- Análise de itens – média, variância, correlação do item com o resto do teste e alfa sem o item

	$\bar{x}_i$	s_i^2	r_{it}	α_{-i}
P1	3	2	0,957	0,875
P2	3,333	1,467	0,825	0,922
P3	3,5	1,1	0,804	0,934
P4	3,333	2,667	0,869	0,918

- Intervalo de confiança de 95 % segundo Feldt – a razão (1 − α)/(1 − α□) segue a distribuição F com n − 1 e (n − 1) (k − 1) graus de liberdade

$$F_{0{,}975}(5;\ 15) = 3{,}576$$

$$F_{0{,}025}(5;\ 15) = 0{,}1556$$

$$\alpha_L = 1 - (1-\alpha)F_{0{,}975} = 1 - 0{,}06575 \cdot 3{,}576$$

$$\alpha_U = 1 - (1-\alpha)F_{0{,}025} = 1 - 0{,}06575 \cdot 0{,}155$$

- Orientação para α: ≥ 0,9 excelente, ≥ 0,8 boa, ≥ 0,7 aceitável consistência interna. Para pesquisa basta cerca de 0,7; para decisões sobre uma pessoa (diagnóstico) recomenda-se pelo menos 0,9.
- Um α alto não significa que o teste meça um único traço, e ele cresce com o simples número de itens. Se α aumenta ao retirar um item (última coluna da tabela), o item provavelmente não pertence à escala.

Concordância de quatro avaliadores em seis sujeitos (exemplo de Shrout e Fleiss).

Enunciado: `data(H1 H2 H3 H4; 9 2 5 8; 6 1 3 2; 8 4 6 8; 7 1 2 6; 10 5 6 9; 6 2 4 7)`

ICC (concordância entre avaliadores)

Resultado

$$ICC(1,1) \approx 0{,}1657 \quad [-0{,}133,\ 0{,}723]$$
$$ICC(1,4) \approx 0{,}4428 \quad [-0{,}884,\ 0{,}912]$$
$$ICC(2,1) \approx 0{,}2898 \quad [0{,}019,\ 0{,}761]$$
$$ICC(2,4) \approx 0{,}6201 \quad [0{,}071,\ 0{,}927]$$
$$ICC(3,1) \approx 0{,}7148 \quad [0{,}342,\ 0{,}946]$$
$$ICC(3,4) \approx 0{,}9093 \quad [0{,}676,\ 0{,}986]$$

Passos

- Número de sujeitos avaliados (linhas) 6, número de avaliadores (colunas) k = 4, média geral $\bar{x} = 5{,}292$
- Análise de variância – somas de quadrados SS, graus de liberdade df e quadrados médios MS entre sujeitos (R), entre avaliadores (C), residual (E) e dentro dos sujeitos (W)

	SS	df	MS
R	56,21	5	11,24
C	97,46	3	32,49
E	15,29	15	1,019
W	112,7	18	6,264
$\sum$	169	23	

- Modelo de um fator – cada sujeito pode ser avaliado por avaliadores diferentes

$$ICC(1,1) = \frac{MS_R - MS_W}{MS_R + (k-1)MS_W} = \frac{11{,}24 - 6{,}264}{11{,}24 + 3 \cdot 6{,}264} \approx 0{,}1657$$
$$ICC(1,4) = \frac{MS_R - MS_W}{MS_R} = \frac{11{,}24 - 6{,}264}{11{,}24} \approx 0{,}4428$$

- Modelo de dois fatores com avaliadores aleatórios – concordância absoluta

$$ICC(2,1) = \frac{MS_R - MS_E}{MS_R + (k-1)MS_E + \frac{k}{n}(MS_C - MS_E)} = \frac{11{,}24 - 1{,}019}{11{,}24 + 3 \cdot 1{,}019 + \frac{4}{6}(32{,}49 - 1{,}019)} \approx 0$$
$$ICC(2,4) = \frac{MS_R - MS_E}{MS_R + \frac{MS_C - MS_E}{n}} = \frac{11{,}24 - 1{,}019}{11{,}24 + \frac{32{,}49 - 1{,}019}{6}} \approx 0{,}6201$$

- Modelo de dois fatores com avaliadores fixos – consistência

$$ICC(3,1) = \frac{MS_R - MS_E}{MS_R + (k-1)MS_E} = \frac{11{,}24 - 1{,}019}{11{,}24 + 3 \cdot 1{,}019} \approx 0{,}7148$$
$$ICC(3,4) = \frac{MS_R - MS_E}{MS_R} = \frac{11{,}24 - 1{,}019}{11{,}24} \approx 0{,}9093$$

- Intervalos de confiança de 95 % a partir da distribuição F (Shrout e Fleiss) – as razões dos quadrados médios e os seus limites

$$F_W = \frac{MS_R}{MS_W} = 1{,}795$$
$$F_E = \frac{MS_R}{MS_E} = 11{,}03$$
$$F_{W,L} = \frac{F_W}{F_{0{,}975}(5;\ 18)} = 0{,}5307$$
$$F_{W,U} = F_W \cdot F_{0{,}975}(18;\ 5) = 11{,}42$$
$$F_{E,L} = \frac{F_E}{F_{0{,}975}(5;\ 15)} = 3{,}083$$
$$F_{E,U} = F_E \cdot F_{0{,}975}(15;\ 5) = 70{,}88$$
$$ICC(\cdot,1)_L = \frac{F_L - 1}{F_L + k - 1}$$
$$ICC(\cdot,k)_L = 1 - \frac{1}{F_L}$$

- Os seis ICC com os seus intervalos de confiança de 95 %

	ICC	95 %
$ICC(1,1)$	0,166	$[-0{,}133,\ 0{,}723]$
$ICC(1,4)$	0,443	$[-0{,}884,\ 0{,}912]$
$ICC(2,1)$	0,290	$[0{,}019,\ 0{,}761]$
$ICC(2,4)$	0,620	$[0{,}071,\ 0{,}927]$
$ICC(3,1)$	0,715	$[0{,}342,\ 0{,}946]$
$ICC(3,4)$	0,909	$[0{,}676,\ 0{,}986]$

- Qual ICC usar: ICC(1,·) – cada sujeito avaliado por avaliadores diferentes; ICC(2,·) – os avaliadores são uma amostra aleatória e importa a concordância absoluta; ICC(3,·) – avaliadores fixos, importa a consistência. ICC(·,1) vale para um avaliador, ICC(·,k) para a média de k avaliadores. Orientação (Koo e Li): abaixo de 0,5 fraca, 0,5–0,75 moderada, 0,75–0,9 boa, acima de 0,9 excelente.
- ICC(3,k) é igual ao alfa de Cronbach dos mesmos dados (os avaliadores como itens).
- O intervalo de confiança de um ICC costuma ser largo com poucos sujeitos – mesmo um ICC alto pode ter um limite inferior baixo. Os intervalos dos ICC(2,·) são aproximados (graus de liberdade de Satterthwaite).
- Atenção: há poucos dados, as estimativas (sobretudo da variância e dos quartis) são incertas.

Concordância de dois médicos em três categorias diagnósticas.

Enunciado: `data(A B; 1 1; 1 1; 2 2; 1 2; 2 2; 3 3; 1 1; 2 3; 3 3; 2 2; 1 1; 3 2)`

Kappa de Cohen

Resultado

$\kappa \approx 0{,}6211$

$95\,\%:\ [0{,}256,\ 0{,}986]$

$p_o = 0{,}75$

$p_e \approx 0{,}3403$

Passos

- Os pares de avaliações formam a tabela de concordância (linhas avaliador A, colunas avaliador B, concordância na diagonal)

$A\backslash B$	1	2	3	$\sum$
1	**4**	1	0	5
2	0	**3**	1	4
3	0	1	**2**	3
$\sum$	4	5	3	12

- A concordância observada – a proporção de casos na diagonal: $p_o = \frac{\sum n_{ii}}{N} = \frac{4+3+2}{12} = \frac{9}{12} = 0{,}75$
- A concordância esperada por acaso – a partir dos totais das linhas e colunas

  $p_e = \frac{\sum n_{i\cdot} n_{\cdot i}}{N^2} = \frac{5\cdot 4 + 4\cdot 5 + 3\cdot 3}{12^2} = \frac{49}{144} \approx 0{,}3403$

- Kappa de Cohen – a concordância é substancial (Landis e Koch).

$\kappa = \frac{p_o - p_e}{1 - p_e} = \frac{0{,}75 - 0{,}3403}{1 - 0{,}3403} \approx 0{,}6211$

- Intervalo de confiança de 95 % a partir do erro padrão assintótico (Fleiss, Cohen e Everitt)

  $SE \approx 0{,}1861$

  $\kappa \pm z \cdot SE = 0{,}6211 \pm 1{,}96 \cdot 0{,}1861 \Rightarrow [0{,}256,\ 0{,}986]$

- κ desconta da concordância a esperada por acaso: 0 significa concordância apenas por acaso, 1 concordância total. Quando uma categoria predomina, κ sai baixo mesmo com alta porcentagem de concordância – por isso também se indica p_o.
- As categorias são tomadas como nominais – toda discordância pesa igual. Para categorias ordenadas (p. ex. grau de gravidade) usa-se o κ ponderado, que penaliza menos uma discordância menor.

Os mesmos diagnósticos com pesos quadráticos – categorias vizinhas contam como concordância parcial.

Enunciado: `data(A B; 1 1; 1 1; 2 2; 1 2; 2 2; 3 3; 1 1; 2 3; 3 3; 2 2; 1 1; 3 2)`

Kappa de Cohen, Pesos quadráticos

Resultado

$$\kappa_w \approx 0{,}7955$$
$$95\,\%: \ [0{,}576,\ 1{,}000]$$
$$p_o = 0{,}9375$$
$$p_e \approx 0{,}6944$$

Passos

- Os pares de avaliações formam a tabela de concordância (linhas avaliador A, colunas avaliador B, concordância na diagonal)

$A\backslash B$	1	2	3	$\sum$
1	**4**	1	0	5
2	0	**3**	1	4
3	0	1	**2**	3
$\sum$	4	5	3	12

- Pesos de concordância quadráticos – uma pequena discordância custa pouco, uma grande muito:

$$w_{ij} = 1 - \frac{(i-j)^2}{(k-1)^2}$$

	1	2	3
1	1	0,75	0
2	0,75	1	0,75
3	0	0,75	1

- A concordância observada ponderada – as frequências da tabela vezes os pesos:

$$p_o = \frac{\sum w_{ij} n_{ij}}{N} = \frac{11{,}25}{12} = 0{,}9375$$

- A concordância ponderada esperada por acaso – a partir dos totais das linhas e colunas com os pesos:

$$p_e = \frac{\sum w_{ij} n_{i\cdot} n_{\cdot j}}{N^2} = \frac{100}{144} \approx 0{,}6944$$

- O kappa de Cohen ponderado – a concordância é substancial (Landis e Koch).

$$\kappa_w = \frac{p_o - p_e}{1 - p_e} = \frac{0{,}9375 - 0{,}6944}{1 - 0{,}6944} \approx 0{,}7955$$

- Intervalo de confiança de 95 % a partir do erro padrão assintótico (Fleiss, Cohen e Everitt)

$$SE \approx 0{,}1119$$
$$\kappa_w \pm z \cdot SE = 0{,}7955 \pm 1{,}96 \cdot 0{,}1119 \Rightarrow [0{,}576,\ 1{,}000]$$

- κ desconta da concordância a esperada por acaso: 0 significa concordância apenas por acaso, 1 concordância total. Quando uma categoria predomina, κ sai baixo mesmo com alta porcentagem de concordância – por isso também se indica p_o.
- O kappa ponderado conta também a concordância parcial: avaliações a um grau de distância não são uma discordância total. Com pesos quadráticos aproxima-se do ICC; convém indicar os pesos usados.

Kappa de Cohen de uma tabela de concordância 2×2.

Enunciado: `data(20 5; 10 15)` Kappa de Cohen

Resultado

$$\kappa = 0{,}4$$
$$95\,\%:\ [0{,}151,\ 0{,}649]$$
$$p_o = 0{,}7$$
$$p_e = 0{,}5$$

Passos

- A tabela de concordância (linhas avaliador A, colunas avaliador B, concordância na diagonal) com os totais das linhas e colunas

$A\backslash B$	1	2	$\sum$
1	**20**	5	25
2	10	**15**	25
$\sum$	30	20	50

- A concordância observada – a proporção de casos na diagonal: $p_o = \frac{\sum n_{ii}}{N} = \frac{20+15}{50} = \frac{35}{50} = 0{,}7$
- A concordância esperada por acaso – a partir dos totais das linhas e colunas

$$p_e = \frac{\sum n_{i\cdot} n_{\cdot i}}{N^2} = \frac{25 \cdot 30 + 25 \cdot 20}{50^2} = \frac{1250}{2500} = 0{,}5$$

- Kappa de Cohen: $\kappa = \frac{p_o - p_e}{1 - p_e} = \frac{0{,}7 - 0{,}5}{1 - 0{,}5} = 0{,}4$ – a concordância é razoável (Landis e Koch).
- Intervalo de confiança de 95 % a partir do erro padrão assintótico (Fleiss, Cohen e Everitt)

  $SE \approx 0{,}127$

  $\kappa \pm z \cdot SE = 0{,}4 \pm 1{,}96 \cdot 0{,}127 \Rightarrow [0{,}151,\ 0{,}649]$

- κ desconta da concordância a esperada por acaso: 0 significa concordância apenas por acaso, 1 concordância total. Quando uma categoria predomina, κ sai baixo mesmo com alta porcentagem de concordância – por isso também se indica p_o.

Quão bem o escore do teste separa pacientes (estado 1) de pessoas saudáveis (estado 0).

Enunciado: `data(12 0; 15 1; 9 0; 20 1; 18 1; 11 0; 7 0; 14 1; 16 0; 10 0)` Curva ROC e AUC

Resultado

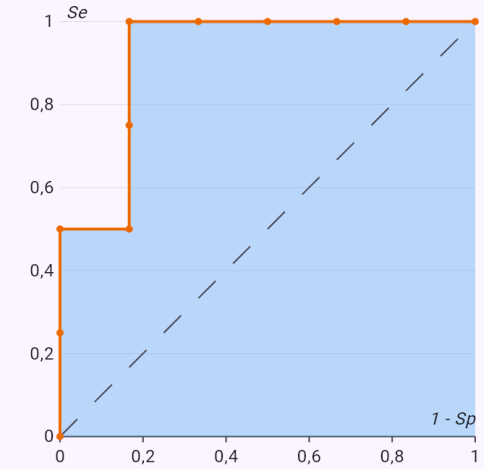
$$AUC \approx 0{,}9167$$
$$95\,\%:\ [0{,}706,\ 1{,}000]$$
$$z \approx 2{,}132,\ p \approx 0{,}03301 \le \alpha = 0{,}05$$
$$c = 14:\ Se = 1,\ Sp \approx 0{,}8333$$

Passos

- Casos positivos (estado 1) e negativos (estado 0): $n_1 = 4, \quad n_0 = 6$
- Todos os escores são ordenados e recebem o seu posto. A soma dos postos dos casos positivos: $R_1 = 6 + 7 + 9 + 10 = 32$
- A estatística U de Mann-Whitney – o número de pares (positivo, negativo) em que o caso positivo tem escore maior: $U = R_1 - \frac{n_1(n_1+1)}{2} = 32 - \frac{4 \cdot 5}{2} = 22$
- A área sob a curva ROC: $AUC = \frac{U}{n_1 n_0} = \frac{22}{4 \cdot 6} \approx 0{,}9167$ – a capacidade discriminativa do teste é notável.
- Intervalo de confiança de 95 % segundo Hanley e McNeil
  $$Q_1 = \frac{AUC}{2 - AUC} = 0{,}8462$$
  $$Q_2 = \frac{2\,AUC^2}{1 + AUC} = 0{,}8768$$
  $$SE = \sqrt{\frac{AUC(1-AUC) + (n_1 - 1)\left(Q_1 - AUC^2\right)}{n_1 n_0}}$$
  $$AUC \pm z \cdot SE = 0{,}9167 \pm 1{,}96 \cdot 0{,}1074 \Rightarrow [0{,}706,\ 1{,}0$$
- Hipótese nula: o teste não discrimina (AUC = 0,5), alternativa: discrimina – teste de Mann-Whitney: $H_0: AUC = 0{,}5, \quad H_1: AUC \neq 0{,}5$
- A estatística de teste – sob H_0 segue a distribuição normal padrão: $z = \frac{U - \frac{n_1 n_0}{2}}{\sigma_U} = \frac{22 - 12}{4{,}69} \approx 2{,}132$
- O valor crítico ao nível α: $z_{0{,}975} \approx 1{,}96$, a região crítica $|z| \ge 1{,}96$
- O valor p: $p = 2\,P(Z \ge 2{,}132) \approx 0{,}03301$
- Como $p \approx 0{,}03301 \le \alpha = 0{,}05$, rejeitamos a hipótese nula – o resultado é estatisticamente significativo.
- O valor p é a probabilidade de um resultado pelo menos tão extremo quanto o observado se H_0 for verdadeira – não a probabilidade de H_0 ser verdadeira. Não rejeitar H_0 não significa que H_0 seja verdadeira; a significância estatística nada diz sobre o tamanho ou a importância prática de uma diferença.
- O ponto de corte com o maior índice de Youden é 14 (é positivo um escore ≥ 14)
  $Se = 1$
  $Sp \approx 0{,}8333$
  $J = Se + Sp - 1 \approx 0{,}8333$
- A AUC é a probabilidade de um caso positivo escolhido ao acaso ter escore maior que um caso negativo escolhido ao acaso (0,5 – o teste não discrimina, 1 – discrimina perfeitamente). O ponto de corte pelo índice de Youden é só uma opção – na prática conta também o custo dos falsos positivos e falsos negativos.
- Atenção: há poucos dados, as estimativas (sobretudo da variância e dos quartis) são incertas.

Gráfico

Curva ROC – a área sombreada é a AUC, a diagonal tracejada corresponde a um teste que não discrimina



Escores de doentes e saudáveis em dois grupos de tamanhos diferentes, com o teste de Mann-

Whitney.

Enunciado: `data(pacienti = 15 20 18 14 17; zdravi = 12 9 11 7 16 10 13)` Curva ROC e AUC

Resultado

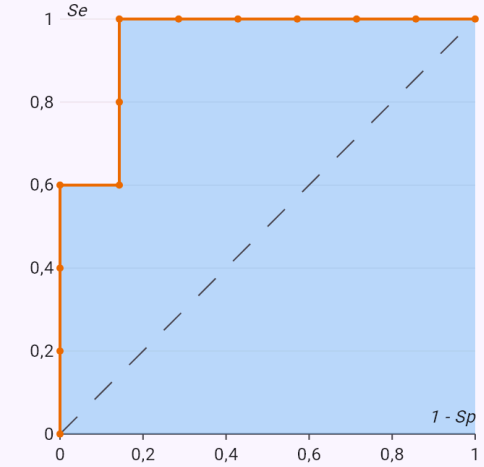
$$AUC \approx 0{,}9429$$
$$95\,\%: \ [0{,}787,\ 1{,}000]$$
$$z \approx 2{,}517,\ p \approx 0{,}01183 \le \alpha = 0{,}05$$
$$c = 14:\ Se = 1,\ Sp \approx 0{,}8571$$

Passos

- O grupo positivo $\mathrm{pacienti}$ e o grupo negativo zdravi: $n_1 = 5, \quad n_0 = 7$
- Todos os escores são ordenados e recebem o seu posto. A soma dos postos dos casos positivos: $R_1 = 7 + 8 + 10 + 11 + 12 = 48$
- A estatística U de Mann-Whitney – o número de pares (positivo, negativo) em que o caso positivo tem escore maior: $U = R_1 - \frac{n_1(n_1+1)}{2} = 48 - \frac{5 \cdot 6}{2} = 33$
- A área sob a curva ROC: $AUC = \frac{U}{n_1 n_0} = \frac{33}{5 \cdot 7} \approx 0{,}9429$ – a capacidade discriminativa do teste é notável.
- Intervalo de confiança de 95 % segundo Hanley e McNeil
  $$Q_1 = \frac{AUC}{2 - AUC} = 0{,}8919$$
  $$Q_2 = \frac{2\,AUC^2}{1 + AUC} = 0{,}9151$$
  $$SE = \sqrt{\frac{AUC(1-AUC) + (n_1 - 1)\left(Q_1 - AUC^2\right)}{n_1 n_0}}$$
  $$AUC \pm z \cdot SE = 0{,}9429 \pm 1{,}96 \cdot 0{,}07971 \Rightarrow [0{,}787,\ 1{,}$$
- Hipótese nula: o teste não discrimina (AUC = 0,5), alternativa: discrimina – teste de Mann-Whitney: $H_0: AUC = 0{,}5, \quad H_1: AUC \neq 0{,}5$
- A estatística de teste – sob H_0 segue a distribuição normal padrão: $z = \frac{U - \frac{n_1 n_0}{2}}{\sigma_U} = \frac{33 - 17{,}5}{6{,}158} \approx 2{,}517$
- O valor crítico ao nível α: $z_{0{,}975} \approx 1{,}96$, a região crítica $|z| \ge 1{,}96$
- O valor p: $p = 2\,P(Z \ge 2{,}517) \approx 0{,}01183$
- Como $p \approx 0{,}01183 \le \alpha = 0{,}05$, rejeitamos a hipótese nula – o resultado é estatisticamente significativo.
- O valor p é a probabilidade de um resultado pelo menos tão extremo quanto o observado se H_0 for verdadeira – não a probabilidade de H_0 ser verdadeira. Não rejeitar H_0 não significa que H_0 seja verdadeira; a significância estatística nada diz sobre o tamanho ou a importância prática de uma diferença.
- O ponto de corte com o maior índice de Youden é 14 (é positivo um escore ≥ 14)
  $Se = 1$
  $Sp \approx 0{,}8571$
  $J = Se + Sp - 1 \approx 0{,}8571$
- A AUC é a probabilidade de um caso positivo escolhido ao acaso ter escore maior que um caso negativo escolhido ao acaso (0,5 – o teste não discrimina, 1 – discrimina perfeitamente). O ponto de corte pelo índice de Youden é só uma opção – na prática conta também o custo dos falsos positivos e falsos negativos.
- Atenção: há poucos dados, as estimativas (sobretudo da variância e dos quartis) são incertas.

Gráfico

Curva ROC – a área sombreada é a AUC, a diagonal tracejada corresponde a um teste que não discrimina



Dois testes nas mesmas pessoas – discriminam igualmente bem? (teste de DeLong)

Enunciado: `data(A B stav; 12 10 0; 15 14 1; 9 11 0; 20 13 1; 18 19 1; 11 9 0; 7 12 0; 14 16`

1; 16 8 0; 10 13 0)

Curva ROC e AUC

Resultado

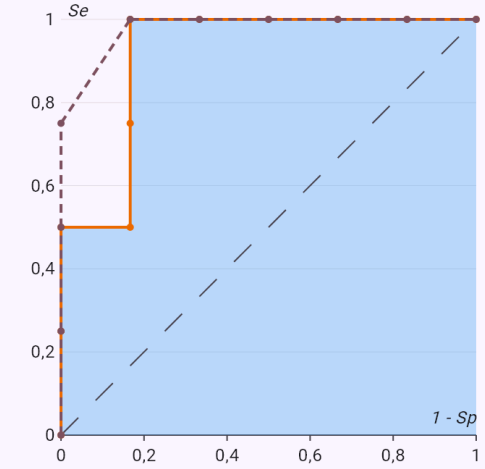
$$AUC_{\mathrm{A}} \approx 0{,}9167,\ AUC_{\mathrm{B}} \approx 0{,}9792$$
$$z \approx -0{,}571,\ p \approx 0{,}568 > \alpha = 0{,}05$$
$$95\,\%:\ [-0{,}277,\ 0{,}152]$$

Passos

- Dois testes A e B nos mesmos casos, estado positivo 1: $n_1 = 4, \quad n_0 = 6$
- As áreas sob as curvas ROC dos dois testes e os seus erros padrão (DeLong)
  $AUC_{\mathrm{A}} \approx 0{,}9167$
  $AUC_{\mathrm{B}} \approx 0{,}9792$
  $SE_{\mathrm{A}} \approx 0{,}09623$
  $SE_{\mathrm{B}} \approx 0{,}02946$
- A variância da diferença segundo DeLong – os testes incidem sobre os mesmos casos, por isso subtrai-se a sua covariância (correlação das AUC $-0{,}327$)
  $\operatorname{var}(AUC_{\mathrm{A}} - AUC_{\mathrm{B}}) = \operatorname{var} AUC_{\mathrm{A}} + \operatorname{var} AUC_{\mathrm{B}} - 2\,\mathrm{c}$
  $= 0{,}009259 + 8{,}681 \cdot 10^{-4} - 2 \cdot$
  $SE = \sqrt{0{,}01198} \approx 0{,}1094$
- Hipótese nula: os dois testes discriminam igualmente, alternativa: diferem
  H_0: $AUC_{\mathrm{A}} = AUC_{\mathrm{B}}$
  H_1: $AUC_{\mathrm{A}} \neq AUC_{\mathrm{B}}$
- A estatística de teste – sob H_0 segue a distribuição normal padrão
  $$z = \frac{AUC_{\mathrm{A}} - AUC_{\mathrm{B}}}{SE} = \frac{-0{,}0625}{0{,}1094} \approx -0{,}571$$
- O valor crítico ao nível α: $z_{0{,}975} \approx 1{,}96$, a região crítica $|z| \geq 1{,}96$
- O valor p: $p = 2\,P(Z \geq 0{,}571) \approx 0{,}568$
- Como $p \approx 0{,}568 > \alpha = 0{,}05$, não rejeitamos a hipótese nula – os dados não fornecem evidência suficiente contra ela.
- O valor p é a probabilidade de um resultado pelo menos tão extremo quanto o observado se H_0 for verdadeira – não a probabilidade de H_0 ser verdadeira. Não rejeitar H_0 não significa que H_0 seja verdadeira; a significância estatística nada diz sobre o tamanho ou a importância prática de uma diferença.
- Intervalo de confiança de 95 % da diferença das duas AUC
  $AUC_{\mathrm{A}} - AUC_{\mathrm{B}} \pm z \cdot SE = -0{,}0625 \pm 1{,}96 \cdot 0{,}1094 =$
- O teste de DeLong compara as AUC de dois testes nos mesmos casos – tem em conta que estão correlacionadas. Uma diferença não significativa não quer dizer que os testes sejam igualmente bons, apenas que os dados não mostraram diferença.
- Atenção: há poucos dados, as estimativas (sobretudo da variância e dos quartis) são incertas.

Gráfico

Curvas ROC dos dois testes – a primeira a cheio com a área sombreada, a segunda tracejada



Quanto alongar um teste de 20 itens com fidedignidade 0,7 para chegar a 0,9.

Enunciado: `model(spearmanbrown; find=k[one]; r=0.7[one]; rt=0.9[one]; items=20[one])`

Resultado

$$k \approx 3{,}86$$

$$n' = 78$$

Passos

- Procuramos k; dados: $r_{xx} = 0{,}7, \quad r'_{xx} = 0{,}9, \quad n = 20$
- Um teste mais longo mede de forma mais fidedigna: alongado k vezes com itens da mesma qualidade (paralelos), a fidedignidade cresce pela fórmula de Spearman-Brown r' = k·r / (1 + (k − 1)·r). Inversamente, indica quantas vezes alongar um teste para atingir uma fidedignidade desejada. A fórmula também corrige a fidedignidade por metades (k = 2). Equação do modelo:
  $k = \dfrac{r'_{xx}(1 - r_{xx})}{r_{xx}(1 - r'_{xx})}$
- Substituímos
  $k = \dfrac{0{,}9 \cdot (1 - 0{,}7)}{0{,}7 \cdot (1 - 0{,}9)} \approx 3{,}857$
- Número de itens necessário:
  $n' = k \cdot n = 3{,}857 \cdot 20 \approx 77{,}14 \Rightarrow n' = 78$
- A fórmula supõe que os itens acrescentados são tão bons quanto os originais (paralelos). O ganho real costuma ser menor, e um teste mais longo cansa mais.

O nível corrigido para 10 comparações.

Enunciado: `model(bonferroni; find=alpha[one]; alpha=0.05[one]; m=10[one])`

Resultado

$$\alpha' = 0{,}005$$

Passos

- Procuramos α'; dados: $\alpha = 0{,}05, \quad m = 10$
- Com m testes ao nível α, cresce a probabilidade de que pelo menos um resulte significativo só por acaso: 1 − (1 − α)^m. A correção de Bonferroni avalia por isso cada teste ao nível mais rigoroso α' = α/m. A correção de Šidák 1 − (1 − α)^(1/m) é um pouco menos rigorosa. Equação do modelo: $\alpha' = \frac{\alpha}{m}$
- Substituímos: $\alpha' = \frac{0{,}05}{10} = 0{,}005$
- Probabilidade de pelo menos um resultado falsamente significativo sem correção: $1 - (1-\alpha)^m = 1 - (1 - 0{,}05)^{10} \approx 0{,}4013$
- Correção de Šidák $\alpha'_S = 1 - (1-\alpha)^{1/m} = 1 - (1 - 0{,}05)^{1/10} \approx 0{,}005116$
- A correção de Bonferroni é conservadora: protege contra resultados falsamente significativos, mas com muitas comparações deixa facilmente escapar uma diferença real. Menos rigorosos são, p. ex., o método de Holm ou o controle da FDR (Benjamini-Hochberg).

Limitações conhecidas

- O percentil calcula-se pela distribuição normal – em testes assimétricos (tempos do TMT) só o percentil da tabela normativa está certo.
- Os intervalos de confiança são assintóticos ou aproximados – com amostras pequenas (até 10–20 casos) tome-os apenas como orientação.
- Uma tarefa em palavras ou a partir de uma foto ainda não é suportada – os valores introduzem-se no formulário.

Gerado a partir da aplicação Mathtrace