Capítulo 6

Derivação e integração numérica

6.1 Introdução à derivação numérica

Sejam $a,\ b \in \mathbb{R}$, com $a < b$, $f \in C^2(a,b)$ e $x_0 \in [a,b]$.

Para aproximarmos $f'(x_0)$, façamos

$$x_1 = x_0 + h\,.$$

para algum $h \neq 0$ suficientemente pequeno.

Calculemos o polinómio de Lagrange que interpola x_0 e x_1,

$$\begin{aligned}
P_{0,1}(x) =& \frac{x-x_0}{x_1-x_0}P_1(x) + \frac{x-x_1}{x_1-x_0}P_0(x) = \frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1) + \frac{x-x_1}{x_1-x_0}f(x_0)\\
=& \frac{x-x_0}{x_0+h-x_0}f(x_0+h) + \frac{x-(x_0+h)}{x_0+h-x_0}f(x_0)\\
=& -f(x_0)\frac{x-x_0-h}{h} + f(x_0+h)\frac{x-x_0}{h}
\end{aligned}$$

Usando o polinómio interpolador de Lagrange para dois pontos, temos então

$$\begin{aligned}
f(x) =& P_{0,1}(x) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)(x-x_1), \qquad \xi = \xi(x) \in [a,b]\,,\\
=& -f(x_0)\frac{x-x_0-h}{h} + f(x_0+h)\frac{x-x_0}{h} + \frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)(x-x_1)
\end{aligned}$$

Derivando esta expressão em ordem a x, obtemos

$$\begin{aligned}
f'(x) =& -f(x_0)\frac{1}{h} + f(x_0+h)\frac{1}{h} + \frac{f'''(\xi(x))\xi'(x)}{2!}(x-x_0)(x-x_1) + \frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-x_1) +\\
& \frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-x_0)\\
=& \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} + \frac{f'''(\xi(x))\xi'(x)}{2!}(x-x_0)(x-x_1) + \frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-x_1) + \frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-x_0)\,.
\end{aligned}$$

Substituindo $x_1 = x_0 + h$,

$$f'(x) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} + \frac{f'''(\xi(x))\xi'(x)}{2!}(x-x_0)(x-x_0-h) + \frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-x_0-h) + \frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-x_0)\,.$$

Uma dificuldade com esta fórmula para aproximar $f'(x)$ para valores arbitrários de x é que não temos informação suficiente para calcular

$$f'''(\xi(x))\xi'(x)\,.$$

Contudo, se $x = x_0$ sabemos que $f'''(\xi(x_0)) = 0$ e temos

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(\xi)}{2!}, \qquad \xi \in [x_0, x_0+h]\,.$$

Assim, para valores suficientemente pequenos de h, a razão

$$\frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}$$

pode ser usada para aproximar $f'(x_0)$ com erro, em valor absoluto, majorado por

$$\max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \frac{h}{2}\,.$$

Exemplo 6.1.1. Sejam $f(x) = \ln(x)$ e $x_0 = 1.8$.

A razão

$$\frac{f(1.8+h) - f(1.8)}{h}, \quad h > 0\,,$$

é usada para aproximar $f'(1.8)$ com erro majorado por

$$\max_{x\in[1.8,1.8+h]} |f''(x)| \frac{h}{2} = \max_{x\in[1.8,1.8+h]} \left|-\frac{1}{x^2}\right| \frac{h}{2} \le \frac{h}{2\times 1.8^2}\,.$$

Construímos a tabela seguinte para diferentes valores de h.

h	$f(1.8+h)$	$\frac{f(1.8+h)-f(1.8)}{h}$	$\frac{h}{2\times 1.8^2}$
0.1	0.64185389	0.5406722	0.0154321
0.01	0.59332685	O.5540180	0.0015432
0.001	0.58834207	O.5551403	0.00011543

Como $f'(x) = \frac{1}{x}$, e sendo o valor exacto $f'(1.8) = 0.555$, os erros indicados pela tabela são adequados.

Para obtermos formular mais gerais, suponhamos que

$$x_0,\ x_1,\ \ldots,\ x_n$$

são $(n+1)$ abcissas distintas contidos num intervalo I de $\mathbb{R}$. Se $f \in C^{n+1}(I)$, f pode ser aproximada usando o polinómio de Lagrange de grau n para interpolar os pontos $x_0,\ x_1,\ \ldots,\ x_n$,

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} \mathcal{L}_i(x) f(x_i) + \frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n)\,, \qquad \xi(x) \in I\,, \tag{6.1.1}$$

onde

$$\mathcal{L}_i(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_k-x_n)}$$

é o coeficiente de ordem i do polinómio interpolador de Lagrange.

Derivando (6.1.2), obtemos

$$\begin{aligned}
&f'(x) = \\
&\sum_{i=0}^{n} \mathcal{L}_i'(x) f(x_i) + \frac{f^{n+2}(\xi(x))\xi'(x)}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n) + \\
&\frac{f^{n+1}(\xi(x))\xi'(x)}{(n+1)!}\big[(x-x_0)\cdots(x-x_n)\big]' = \\
&\sum_{i=0}^{n} \mathcal{L}_i'(x) f(x_i) + \frac{f^{n+2}(\xi(x))\xi'(x)}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n) + \\
&\frac{f^{n+1}(\xi(x))\xi'(x)}{(n+1)!}(x-x_1)\cdots(x-x_n) + \cdots + \frac{f^{n+1}(\xi(x))\xi'(x)}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})\,.
\end{aligned} \tag{6.1.2}$$

Novamente, temos um problema em estimar o erro, pois não temos informação suficiente sobre o erro de truncatura, pois não temos informação suficiente sobre

$$f^{n+2}(\xi(x))\xi'(x)\,.$$

No entanto, se $x \in \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$, então $\xi(x)$ é constante e assim

$$\xi'(x) = 0 \Rightarrow f^{n+2}(\xi(x))\xi'(x) = 0 \Rightarrow \left(\frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!}\right)' = 0\,.$$

Assim, para cada $x_i \in \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$, temos

$$f'(x_i) = \sum_{k=0}^{n} \mathcal{L}_k'(x_i) f(x_i) + \frac{f^{n+1}(\xi(x_i))}{(n+1)!} \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} (x_i - x_k)\,, \tag{6.1.3}$$

onde o erro é dado por

$$E_n(f'(x_i)) = \frac{f^{n+1}(\xi(x_i))}{(n+1)!} \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} (x_i - x_k)\,.$$

Se usarmos a fórmula interpoladora de Newton das diferenças, divididas procedemos de igual modo. Consideramos a função aproximada pelo polinómio interpolador respectivo,

$$\begin{aligned}
f(x) = & f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, x_1, \cdots, x_k](x-x_0)\cdots(x-x_{k-1}) + \\
& f[x_0, x_1, \cdots, x_n; x](x-x_0)\cdots(x-x_n)\,,
\end{aligned} \tag{6.1.4}$$

onde

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_n; x] = \frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!}, \qquad \xi(x) \in I\,.$$

Derivando (6.1.4) em ordem a x, obtemos

$$f'(x) = \sum_{k=1}^{n} f[x_0, x_1, \cdots, x_k]\big[(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})\big]' + \frac{f^{n+2}(\xi(x))\xi'(x)}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n) + \frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!}(x-x_1)\cdots(x-x_n) + \cdots + \frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})\,.$$

E para $x \in \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$, temos $\xi'(x_i) = 0$ e assim

$$f'(x_i) = \sum_{k=1}^{n} f[x_0, x_1, \cdots, x_k] \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}(x_i - x_k) + \frac{f^{n+1}(\xi(x_i))}{(n+1)!}\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}(x_i - x_k)\,. \tag{6.1.5}$$

onde o erro é dado por

$$E_n(f'(x_i)) = \frac{f^{n+1}(\xi(x_i))}{(n+1)!}\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}(x_i - x_k)\,.$$

Na proposição seguinte apresentam-se as fórmulas mais usadas para derivação numérica.

Proposição 6.1.1. (1) Com dois pontos de interpolação: x_0 e x_1 ($n = 1$)

(i) Com o polinómio interpolador de Lagrange:

$$f'(x_i) = \frac{1}{x_0 - x_1}f(x_0) + \frac{1}{x_0 - x_1}f(x_1) + \frac{f''(\xi(x_i))}{2!}\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{1}(x_i - x_k)\,, \qquad i = 0,\ 1\,.$$

(ii) Com as diferenças divididas de Newton:

$$f'(x_i) = f[x_0, x_1] + \frac{f''(\xi(x_i))}{2!}\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{1}(x_i - x_k)\,, \qquad i = 0,\ 1\,.$$

(2) Com três pontos de interpolação: x_0, x_1 e x_2 ($n = 2$)

(i) Com o polinómio interpolador de Lagrange:

$$f'(x_i) = \frac{2x_i - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}f(x_0) + \frac{2x_i - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}f(x_1) + \frac{2x_i - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}f(x_2) + \frac{f'''(\xi(x_i))}{3!}\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{2}(x_i - x_k)\,, \qquad i = 0,\ 1,\ 2\,. \tag{6.1.6}$$

(ii) Com as diferenças divididas de Newton:

$$f'(x_i) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2] \sum_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{2} (x_i - x_k) + \frac{f'''(\xi(x_i))}{3!} \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{2} (x_i - x_k)\,, \qquad i = 0,\ 1,\ 2\,.$$

6.2 Fórmulas de derivação numérica

As fórmulas obtidas na secção anterior são particularmente úteis quando os pontos a interpolar estão igualmente espaçados. Por exemplo, no caso de três pontos igualmente espaçados,

$$x_i = x_0, \quad x_1 = x_0 + h, \quad x_1 = x_0 + 2h, \qquad h \neq 0\,,$$

temos na fórmula (6.1.6)

$$\begin{aligned} f'(x_0) =& \frac{2x_0 - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{2x_0 - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \\ & \frac{2x_0 - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2) + \frac{f'''(\xi(x_0))}{3!} \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{2} (x_i - x_k) \\ =& \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2} f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2} f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3} f'''(\xi_0)\,. \end{aligned} \tag{6.2.7}$$

Procedendo de igual modo para $x_i = x_1$, obtemos

$$f'(x_1) = \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2} f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_2)\right] - \frac{h^2}{3!} f'''(\xi_1)\,, \tag{6.2.8}$$

e para $x_i = x_2$,

$$f'(x_2) = \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2} f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2} f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3} f'''(\xi_2)\,. \tag{6.2.9}$$

Como $x_1 = x_0 + h$ e $x_2 = x_0 + 2h$, temos nas fórmulas (6.2.7)-(6.2.9)

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2} f(x_0) + 2f(x_0 + h) - \frac{1}{2} f(x_0 + 2h)\right] + \frac{h^2}{3} f'''(\xi_0)\,, \tag{6.2.10}$$

$$f'(x_0 + h) = \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2} f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_0 + 2h)\right] - \frac{h^2}{3!} f'''(\xi_1)\,, \tag{6.2.11}$$

$$f'(x_0 + 2h) = \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2} f(x_0) - 2f(x_0 + h) + \frac{3}{2} f(x_0 + 2h)\right] + \frac{h^2}{3} f'''(\xi_2)\,. \tag{6.2.12}$$

Substituindo $x_0 + h$ por x_0 em (6.2.11), e $x_0 + 2h$ por x_0 em (6.2.12), obtemos

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\big[-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)\big] + \frac{h^2}{3} f'''(\xi_0), \quad \xi_0 \in (x_0, x_0 + 2h)\,, \tag{6.2.13}$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\big[-f(x_0 - h) + f(x_0 + h)\big] - \frac{h^2}{3!} f'''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x_0 - h, x_0 + 2)\,, \tag{6.2.14}$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\big[f(x_0-2h) - 4f(x_0-h) + 3f(x_0)\big] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_1), \quad \xi_0 \in (x_0-2h, x_0)\,. \qquad (6.2.15)$$

Observe-se que (6.2.15) pode ser obtida a partir de (6.2.13), substituindo h por $-h$. Temos então duas fórmulas apenas,

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\big[-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)\big] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_0), \quad \xi_0 \in (x_0, x_0+2h)\,, \qquad (6.2.16)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\big[f(x_0+h) - f(x_0-h)\big] - \frac{h^2}{3!}f'''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x_0-h, x_0+h)\,. \qquad (6.2.17)$$

Observações. (1) O erro na equação (6.2.17) é aproximadamente metade do erro na equação (6.2.17). Isto é razoável, porque em (6.2.17) os dados estão a ser analisados em ambos os lados de x_0 e não apenas num, com acontece em (6.2.16). Por outro lado, em (6.2.17) a função f tem de ser avaliada em apenas dois pontos, ao contrário de (6.2.16) onde é avaliada em três pontos.

(2) A aproximação dada por (6.2.16) é útil nas proximidades dos extremos do intervalo, já que poderá não estar disponível informação fora do intervalo considerado.

Exemplo 6.2.1. Na tabela seguinte estão apresentados valores para a função $f(x) = xe^x$:

x	1.8	1.9	2.0	2.1	2.2
y	10.889365	12.703199	14.778112	17148957	19.85503

(a) Calcule um valor aproximado de $f'(2.0)$ usando diferentes valores para o acréscimo h.

(b) Para cada uma das fórmulas encontradas em (a), indique uma majoração para o erro dado pela respectiva fórmula.

Resolução: (1) Com $h = 0.1$, temos

(i) na fórmula (6.2.16):

$$\begin{aligned} f'(2.0) =& \frac{1}{2\times 0.1}\big[-3f(2.0) + 4f(2.0+0.1) - f(2.0+2\times 0.1)\big] \\ =& \frac{1}{0.2}\big[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)\big] = 22.032310, \end{aligned}$$

sendo o erro estimado por

$$\begin{aligned} E_0 = \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0),\ \xi_0 \in (2.0, 2.2),\ f^{(3)}(x) = (x+3)e^x \Rightarrow |E_0| \leq& \frac{0.1^2}{3}\max_{\xi\in[2.0,2.2]}|(\xi+3)e^\xi| \\ =& \frac{0.1^2}{3}(2.2+3)e^{2.2} \leq 0.157\,; \end{aligned}$$

(ii) na fórmula (6.2.17):

$$f'(2.0) = \frac{1}{2\times 0.1}\big[f(2.0+0.1) - f(2.0-0.1)\big] = \frac{1}{0.2}\big[f(2.1) - f(1.99)\big] = 22.228790,$$

com o erro estimado por

$$E_1 = -\frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1),\ \xi_1 \in (1.9, 2.1),\ f^{(3)}(x) = (x+3)e^x \Rightarrow |E_1| \leq \frac{0.1^2}{6} \max_{\xi \in [1.9, 2.1]} |(\xi+3)e^{\xi}|$$
$$= \frac{0.1^2}{6}(2.1+3)e^{2.1} \leq 0.07\,.$$

(2) Com $h = -0.1$, temos

(i) na fórmula (6.2.16):

$$\begin{aligned} f'(2.0) =& \frac{1}{2 \times (-0.1)} \big[-3f(2.0) + 4f(2.0-0.1) - f(2.0 + 2 \times (-0.1)) \big] \\ =& -\frac{1}{0.2} \big[-3f(2.0) + 4f(1.9) - f(1.8) \big] = 22.054525, \end{aligned}$$

sendo o erro estimado por

$$E_0 = \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0),\ \xi_0 \in (1.8, 2.0),\ f^{(3)}(x) = (x+3)e^x \Rightarrow |E_0| \leq \frac{0.1^2}{3} \max_{\xi \in [1.8, 2.0]} |(\xi+3)e^{\xi}|$$
$$= \frac{0.1^2}{3}(2.0+3)e^{2.0} \leq 0.124\,;$$

(ii) na fórmula (6.2.17):

$$f'(2.0) = \frac{1}{2 \times (-0.1)} \big[f(2.0-0.1) - f(2.0 - (-)0.1) \big] = -\frac{1}{0.2} \big[f(1.9) - f(2.1) \big] = 22.228790,$$

com o erro estimado por

$$E_1 = -\frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1),\ \xi_1 \in (1.9, 2.1),\ f^{(3)}(x) = (x+3)e^x \Rightarrow |E_1| \leq \frac{0.1^2}{6} \max_{\xi \in [1.9, 2.1]} |(\xi+3)e^{\xi}|$$
$$= \frac{0.1^2}{6}(2.1+3)e^{2.1} \leq 0.07\,.$$

Fórmula para a derivada de 2ª ordem

Consideremos a Fórmula de Taylor de ordem $n = 3$ da função f em torno de uma abcissa x_0,

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x-x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x-x_0)^3 + \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)^4\,, \quad (6.2.18)$$

para algum ξ entre x e x_0. Consideremos $h \neq 0$ suficientemente pequeno. Substituindo em (6.2.18), primeiro x por $x_0 + h$, e depois x por $x_0 - h$, temos:

$$\begin{aligned} f(x_0+h) &= f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_+)}{4!}h^4; \\ f(x_0-h) &= f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 - \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_-)}{4!}h^4\,. \end{aligned}$$

Somando estas identidades, temos

$$f(x_0+h)+f(x_0-h)=2f(x_0)+f''(x_0)h^2+\frac{f^{(4)}(\xi_+)+f^{(4)}(\xi_-)}{4!}h^4\,.$$

Admitindo que $f^{(4)}(x)$ é contínua no intervalo de extremos x_0-h e x_0+h, podemos escrever, pelo Teorema do Valor Intermédio,

$$\exists\,\xi\in(x_0-h,x_0+h):f^{(4)}(\xi)=\frac{f^{(4)}(\xi_+)+f^{(4)}(\xi_-)}{2}\,.$$

Substituindo $f^{(4)}(\xi_+)+f^{(4)}(\xi_-)$ na expressão anterior, obtemos

$$f''(x_0)=\frac{1}{h^2}\big[f(x_0-h)-2f(x_0)+f(x_0+h)\big]-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)\,. \tag{6.2.19}$$

6.3 Introdução à integração numérica

Nesta secção pretendemos desenvolver métodos numéricos para calcular valores aproximados de integrais da forma

$$\int_a^b f(x)\,dx,\qquad a,\ b\in\mathbb{R},\quad a<b\,.$$

O desenvolvimento destes métodos é particularmente necessário em situações em que não seja possível calcular a primitiva da função integranda (como soma finita de funções elementares). São também úteis no caso de não se conhecer a expressão designatória da função integranda.

Vamos começar por estudar os métodos quadrados.

Os métodos de quadratura usam somas do tipo

$$\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

para aproximar o integral

$$\int_a^b f(x)\,dx\,.$$

De entre a vasta gama de métodos de quadratura, vamos considerar aqui aqueles que são baseados em polinómios interpoladores que foram apresentados na secção anterior.

Seleccionamos primeiro um conjunto de abcissas

$$x_0,\ x_1,\ \ldots,\ x_n\in[a,b]$$

e o correspondente polinómio interpolador de Lagrange

$$\sum_{i=0}^{n}\mathcal{L}_i(x)f(x_i)\,,\qquad \mathcal{L}_i(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\frac{x-x_k}{x_i-x_k}\,.$$

Sabendo que

$$f(x) = P_n(x) + E_n(f(x)), \qquad E_n(f(x)) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)\,, \qquad \xi(x) \in (a,b)\,,$$

então

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x)) \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)\,dx\,, \tag{6.3.20}$$

onde

$$a_i = \int_a^b \mathcal{L}_i(x)\,dx, \qquad i = 0,\ 1,\ \ldots,\ n\,. \tag{6.3.21}$$

A fórmula de quadratura é então

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i), \qquad a_i = \int_a^b \mathcal{L}_i(x)\,dx, \quad i = 0,\ 1,\ \ldots,\ n\,, \tag{6.3.22}$$

com o erro dado por

$$E_n(f) = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x)) \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)\,dx\,. \tag{6.3.23}$$

Proposição 6.3.1 (Regra do Trapézio)**.** Seja f uma função contínua num intervalo $[a,b]$ e façamos $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Então

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \frac{h}{2}\big[f(x_0) + f(x_1)\big] - \frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad \xi \in (a,b)\,. \tag{6.3.24}$$

Proposição 6.3.2 (Regra de Simpson)**.** Seja f uma função contínua num intervalo $[a,b]$ e façamos $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $x_2 = b$. Então

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\big[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\big] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b)\,. \tag{6.3.25}$$

Exemplo 6.3.1. Para a função $f(x) = x^2$, calcular uma aproximação de $\displaystyle\int_0^2 f(x)\,dx$, bem como o erro cometido, usando a:

(a) Regra do Trapézio;

(b) Regra de Simpson.

Resolução: (a) Neste caso, temos $x_0 = 0$, $x_1 = 2$ e $h = x_1 - x_0 = 2$, e, usando (6.3.24), temos

$$\int_0^2 f(x)\,dx \simeq \frac{h}{2}\big[f(x_0) + f(x_1)\big] = \frac{2}{2}\big[f(0) + f(2)\big] = 0^2 + 2^2 = 4.$$

(b) Aqui, temos $x_0 = 0$, $x_2 = 2$, $x_1 = \frac{x_0+x_1}{2} = 1$ e $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = 1$, pelo que, usando (6.3.25), temos

$$\int_0^2 f(x)\,dx \simeq \frac{h}{3}\big[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\big] = \frac{1}{3}\big[f(0) + 4f(1) + f(2)\big] = 0^2 + 4 \times 1^2 + 2^2 = \frac{8}{3}.$$

No exemplo anterior repare que, pela fórmula de Simpson, obtivemos o valor exacto do integral. De facto,

$$\int_0^2 x^2 dx = \left[\frac{x^3}{3}\right]_{x=0}^{x=2} = \frac{8}{3}.$$

A coincidência da fórmula de Simpson com o valor exacto do integral deveu-se, neste caso, ao facto $de f^{(4)}(x) = 0$ e, por isso, o erro $E(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi) = 0$.

Na tabela seguinte apresentam-se valores aproximados para $\displaystyle\int_0^2 f(x)\,dx$ para diferentes funções:

$f(x)$	x^2	x^4	$\frac{1}{x+1}$	$\sqrt{1+x^2}$	$\operatorname{sen}(x)$	e^x
Valor Exacto	2.667	6.400	1.099	2.958	1.416	6.389
Regra Trapézio	4.000	16.000	1.333	3.326	0.909	8.389
Regra Simpson	2.667	6.667	1.111	2.964	1.425	6.421

Como se observa, a Regra de Simpson é muito mais precisa.

A **Regra do Trapézio Composta** consiste em aplicar a Regra do Trapézio a um conjunto de pontos $x_0,\ x_1,\ \ldots,\ x_n$. Aplicamos esta regra a cada dois pontos sucessivos x_i e x_{i+1}, admitindo que os pontos estão igualmente espaçados entre si, ou seja, para

$$x_0, \quad x_1 = x_0 + h, \quad x_2 = x_0 + 2h, \quad \ldots, \quad x_n = x_0 + nh, \qquad h = \frac{x_n - x_0}{n}$$

tem-se, pela propriedade aditiva do integral,

$$\begin{aligned}
&\int_a^b f(x)\,dx \simeq \\
&\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_{n-1}} f(x)\,dx + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx = \\
&\frac{h}{2}\big[f(x_0) + f(x_1)\big] + \frac{h}{2}\big[f(x_1) + f(x_2)\big] + \cdots + \frac{h}{2}\big[f(x_{n-2}) + f(x_{n-1})\big] + \frac{h}{2}\big[f(x_{n-1}) + f(x_n)\big] = \\
&\frac{h}{2}\big[f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\big]\,.
\end{aligned}$$

O erro nesta fórmula resulta da soma dos erros que se cometem na aproximação em cada dois pontos:

$$E(f) = -\frac{x_1 - x_0}{12} h^2 f''(\xi_1) - \cdots - \frac{x_n - x_{n-1}}{12} f''(\xi_n) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi)\,.$$

Escrevendo de forma abreviada, a **Regra do Trapézio Composta** é escrita na forma seguinte:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right) - \frac{b-a}{2} h^2 f''(\xi), \qquad \xi \in (a,b)\,. \tag{6.3.26}$$

De forma análoga, a Regra de Simpson Composta é dada por

$$
\begin{aligned}
&\int_a^b f(x)\,dx \simeq \\
&\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-4}}^{x_{n-2}} f(x)\,dx + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\,dx = \\
&\frac{h}{3}\big[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\big] + \frac{h}{3}\big[f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)\big] + \cdots + \\
&\frac{h}{3}\big[f(x_{n-4}) + 4f(x_{n-3}) + f(x_{n-2})\big] + \frac{h}{3}\big[f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\big] = \\
&\frac{h}{3}\big[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\big].
\end{aligned}
$$

Como se observa da derivação da **fórmula de Simpson composta**, esta **é apenas possível se n for um número par**.

O erro cometido na fórmula de Simpson composta é dado pela soma dos erros cometidos em cada três pontos,

$$
\begin{aligned}
E(f) &= -\frac{(x_1 - x_0)^5}{90} f^{(4)}(\xi_1) - \cdots - \frac{(x_n - x_{n-1})^5}{90} f^{(4)}(\xi_{\frac{n}{2}}) \\
&= -\frac{h^5}{90}\big(f^{(4)}(\xi_1) + \cdots + f^{(4)}(\xi_{\frac{n}{2}})\big)\,.
\end{aligned}
$$

Se n for um número par, pelo Teorema do Valor Intermédio, temos

$$
\exists\ \xi \in (a,b) : f^{(4)}(\xi) = \frac{1}{\frac{n}{2}}\left[f^{(4)}(\xi_1) + \cdots + f^{(4)}(\xi_{\frac{n}{2}})\right]\,.
$$

Assim,

$$
h = \frac{b-a}{\frac{n}{2}} \Rightarrow E(f) = -\frac{h^5}{90} n f^{(4)}(\xi) = -\frac{h \times h^4}{90} n f^{(4)}(\xi) = -\frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi)\,.
$$

Resumidamente, a **Regra de Simpson Composta** para um número par de pontos

$$
x_0,\ x_2,\ \ldots,\ x_n
$$

é dada por

$$
\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4\sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i}) + f(b)\right) - \frac{b-a}{180} f^{(4)}(\xi) h^4\,, \tag{6.3.27}
$$

onde

$$
a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = x_0 + ih,\ i = 0,\ 1,\ \ldots,\ n\,.
$$

Exemplo 6.3.2. Calcule uma aproximação do integral $\displaystyle\int_{1.1}^{1.5} e^{-x^2} dx$, usando:

(a) a regra do trapézio composta com $n = 4$;

(b) a regra de Simpson composta com $n = 4$.

Resolução:

Em ambas as regras, temos:

$$\begin{aligned}
&n = 4, \quad a = 1.1, \quad b = 1.5, \quad h = \frac{b-a}{n} = 0.1,\\
&x_0 = a = 1.1, \quad x_2 = x_0 + h = 1.2, \quad x_2 = x_0 + 2h = 1.3\,, \quad x_3 = x_0 + 3h = 1.4\,,\\
&x_5 = x_0 + 4h = 1.5\,.
\end{aligned}$$

(a) Usando (6.3.26) com $n = 4$,

$$\begin{aligned}
\int_{1.1}^{1.5} &\simeq \frac{h}{2}\big[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + f(x_4)\big]\\
&= \frac{0.1}{2}\,(0.2981 + 2\times 0.2369 + 2\times 0.1845 + 2\times 0.1408 + 0.1053) = 0.0764\,.
\end{aligned}$$

Usando, agora, (6.3.27) com $n = 4$,

$$\begin{aligned}
\int_{1.1}^{1.5} &\simeq \frac{h}{3}\big[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)\big]\\
&= \frac{0.1}{2}\,(0.2981 + 4\times 0.2369 + 3\times 0.1845 + 4\times 0.1408 + 0.1053) = 0.0761\,.
\end{aligned}$$

As regras do Trapézio e de Simpson são exemplos de uma classe de métodos numéricos para cálculo de integrais, conhecidas por fórmulas de Newton-Cotes.

6.4 Fórmulas de Newton-Cotes

Consideremos $(n+1)$ abcissas, distintas entre si, que dividem um intervalo $[a, b]$ em n intervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \ldots, n$,

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b\,.$$

As fórmulas de Newton-Cotes podem ser fechadas se o intervalo $[x_1, x_n]$ for incluído no cálculo. As fórmulas de Newton-Cotes dizem-se abertas se forem utilizados apenas os intervalos $[x_2, x_{n-1}]$, ou alguma sua variação.

Fórmulas de Newton-Cotes Fechadas

Nas fórmulas de Newton-Cotes fechadas usam-se as abcissas

$$x_i = x_0 + ih, \qquad i = 0, 1, \ \ldots, \ n\,, \qquad h = \frac{b-a}{n},$$

e têm a forma

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)\,, \qquad a_i = \int_{x_0}^{x_n} \mathcal{L}_i(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_n} \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{x - x_i}{x_i - x_k}\,, dx\,. \tag{6.4.28}$$

Proposição 6.4.1. Suponhamos que

$$\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

denota a fórmula de Newton-Cotes fechada para $(n+1)$ abcissas. Então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que:

(1) se n é par e $f \in C^{n+2}(a,b)$, então

$$\int_a^b .f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + \frac{f^{(n+3)}(\xi)}{(n+2)!} h^{n+3} \int_0^n t^2(t-1)\dots(t-n)\,dt \tag{6.4.29}$$

(2) se n é ímpar e $f \in C^{n+1}(a,b)$, então

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+2} \int_0^n t(t-1)\dots(t-n)\,dt \tag{6.4.30}$$

A seguir indicam-se as fórmulas de Newton-Cotes fechadas mais usadas:

(i) $\mathbf{n=1}$: **Regra do Trapézio**

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \frac{h}{2}\big[f(x_0)+f(x_1)\big] - \frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad \xi \in (x_0,x_1); \tag{6.4.31}$$

(ii) $\mathbf{n=2}$: **Regra de Simpson**

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\big[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\big] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_0,x_2); \tag{6.4.32}$$

(iii) $\mathbf{n=3}$: **Regra de Simpson dos $\mathbf{\frac{3}{8}}$**

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)\,dx = \frac{3h}{8}\big[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)\big] - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_0,x_3); \tag{6.4.33}$$

(iv) $\mathbf{n=4}$: **Regra de Boole**

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)\,dx = \frac{2h}{45}\big[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)\big] - \frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi), \quad \xi \in (x_0,x_4). \tag{6.4.34}$$

Fórmulas de Newton-Cotes Abertas

Nas fórmulas de Newton-Cotes abertas usam-se as abcissas

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0,1,\ \dots,\ n\,, \qquad x_0 = a+h\,, \qquad x_n = b-h\,. \qquad h = \frac{b-a}{n+2},$$

Aqui, considera-se

$$x_{-1} = a\,, \qquad x_{n+1} = b\,.$$

A fórmula correspondente é escrita na forma

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_{-1}}^{x_{n+1}} f(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)\,, \quad a_i = \int_{x_0}^{x_n} \mathcal{L}_i(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_n} \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{x-x_i}{x_i-x_k}\,, dx\,. \tag{6.4.35}$$

Proposição 6.4.2. Suponhamos que

$$\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

denota a fórmula de Newton-Cotes aberta para $(n+1)$ abcissas, onde

$$x_{-1} = a\,, \qquad x_{n+1} = b\,, \qquad h = \frac{b-a}{n+2}\,.$$

Então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que:

(1) se n é par e $f \in C^{n+2}(a,b)$, então

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} h^{n+3} \int_{-1}^{n+1} t^2(t-1)\dots(t-n)\,dt \tag{6.4.36}$$

(2) se n é ímpar e $f \in C^{n+1}(a,b)$, então

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+2} \int_{-1}^{n+1} t(t-1)\dots(t-n)\,dt \tag{6.4.37}$$

Indicam-se, a seguir, as fórmulas de Newton-Cotes abertas mais usadas:

(i) $\mathbf{n=0}$: **Regra do Ponto Médio**

$$\int_{x_{-1}}^{x_1} f(x)\,dx = 2hf(x_0) + \frac{h^3}{3} f''(\xi), \quad \xi \in (x_{-1}, x_1); \tag{6.4.38}$$

(ii) $\mathbf{n=1}$:

$$\int_{x_{-1}}^{x_2} f(x)\,dx = \frac{3h}{2}\big[f(x_0) + f(x_1)\big] + \frac{3h^3}{4} f''(\xi), \quad \xi \in (x_{-1}, x_2); \tag{6.4.39}$$

(iii) $\mathbf{n=2}$: **Regra de Milne**

$$\int_{x_{-1}}^{x_3} f(x)\,dx = \frac{4h}{3}\big[2f(x_0) - f(x_1) + 2f(x_2)\big] + \frac{14h^5}{45} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_{-1}, x_3); \tag{6.4.40}$$

(iv) $\mathbf{n=3}$:

$$\int_{x_{-1}}^{x_4} f(x)\,dx = \frac{5h}{24}\big[11f(x_0)+f(x_1)+f(x_2)+11f(x_3)\big] + \frac{95h^5}{144}f^{(4)}(\xi), \qquad (6.4.41)$$
$\xi \in (x_{-1}, x_4)$.

Na tabela seguinte apresentam-se aproximações do integral

$$\int_0^{\frac{\pi}{4}} \operatorname{sen}(x)\,dx\,,$$

usando as Fórmulas de Newton-Cotes fechadas e abertas para os valores de n mais usados.

n	0	1	2	3	4
Fórmulas fechadas		0.27768018	0.29293264	0.29291070	0.29289318
Erro absoluto		0.01521303	0.00003942	0.00001748	0.00000004
Fórmulas abertas	0.30055887	0.29798754	0.29285866	0.29286923	
Erro absoluto	0.00766565	0.00509432	0.00003456	0.00002399	

Observe-se que nas fórmulas abertas estamos a considerar $n+2$ pontos de abcissa, enquanto que nas fórmulas fechadas estamos a usar somente $n+1$. Por isso, na tabela anterior, a comparação directa com os mesmos valores de n não é razoável. Por exemplo, a aproximação obtida com a fórmula fechada com $n=2$ deve ser comparada com a formula aberta com $n=1$, e não com fórmula aberta com $n=2$.

Implementação numérica das fórmulas de Newton-Cotes

Implementar numericamente as quatro primeiras fórmulas simples de Newton–Cotes fechadas e abertas-

(i) Input

- função $f(x)$
- intervalo de integração $[a, b]$
- fórmulas fechadas ou abertas
- número de pontos (n)

(ii) Output: valor aproximado de $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$, ou mensagem de erro