

# Matemática Computacional

## Cap. 5 - Integração numérica

### Sumário

<b>1</b>	<b>Regras de quadratura ou de integração numérica</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Quadratura de tipo interpolação</b>	<b>4</b>
2.1	Representações exatas para polinómios. Grau de exatidão de uma quadratura	4
2.2	Cálculo dos pesos. Método dos coeficientes indeterminados . . . . .	5
2.3	Fórmulas de Newton-Cotes . . . . .	7
2.3.1	Regra do ponto médio ou do retângulo . . . . .	7
2.3.2	Regra do trapézio . . . . .	10
2.3.3	Regra de Simpson . . . . .	11
2.3.4	Regra dos três oitavos . . . . .	14
2.4	Fórmulas de Gauss (tópico opcional) . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Fórmulas de quadratura compostas</b>	<b>19</b>
3.1	Regra do ponto médio composta ou regra dos retângulos . . . . .	20
3.2	Regra dos trapézios . . . . .	23
3.3	Regra de Simpson composta . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Recursos computacionais</b>	<b>26</b>

# 1 Regras de quadratura ou de integração numérica

No capítulo anterior estudámos algumas técnicas para aproximar uma função por outras mais simples. Tal aproximação é útil, ou mesmo necessária, quando se pretende efetuar cálculos fundamentais e se conhece apenas alguns valores da função ou esta tem uma expressão muito complicada. Neste contexto, há que destacar:

- o cálculo de *derivadas*, por exemplo, na resolução numérica de equações diferenciais,
- o cálculo aproximado de *integrals*, quando a função a integrar não tem primitiva explícita ou se conhecem apenas alguns dos seus valores. Recorde-se o cálculo de integrais que surgem associados a séries de Fourier, na resolução do sistema normal no método dos mínimos quadrados ou ainda na construção de tabelas de probabilidades relativas a distribuições normais.

Neste capítulo, vamos estudar técnicas básicas de integração numérica. Suponhamos que são conhecidos os valores de uma função  $f$  no subconjunto finito  $\mathcal{X} := \{x_0, \dots, x_n\}$  do intervalo  $[a, b]$  e queremos usar esses valores para obter uma aproximação para  $\int_a^b f(x)dx$ . Podemos determinar o polinómio  $p_n \in \mathcal{P}_n$  interpolador de  $f$  em  $\mathcal{X}$  e tomar a aproximação

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_n(x)dx.$$

É claro que este procedimento pode também ser útil quando a função  $f$  for complicada e não for possível utilizar a sua primitiva. Se  $f$  for conhecida e suficientemente regular no intervalo  $[a, b]$ , o erro associado pode ser escrito em termos do erro de interpolação polinomial:

$$E_n(f) = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_n(x)dx = \int_a^b e_n(x)dx,$$

sendo

$$e_n(f) = f(x) - p_n(x) = f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

ou

$$e_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i),$$

se  $f \in C^{n+1}([a, b])$ . Neste caso, um majorante do erro de interpolação é dado por

$$\left| \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_n(x)dx \right| \leq \frac{\max_{[a,b]} |f^{(n+1)}|}{(n+1)!} \int_a^b \prod_{i=0}^n |x - x_i| dx.$$

Para evitar o cálculo de  $p_n$  para cada função  $f$  que se pretenda integrar, vamos encarar a integração numérica como uma aproximação do funcional  $I$

$$\begin{aligned} I : C([a, b]) &\rightarrow \mathbb{R} \\ I(f) &= \int_a^b f(x)dx \end{aligned} \tag{1}$$

em vez da abordagem anterior, centrada na aproximação de cada função  $f$  isolamente. As representações aproximadas para  $I$  devem envolver cálculos simples, baseados no conhecimento das funções a que são aplicadas apenas num subconjunto  $\mathcal{X} := \{x_0, \dots, x_n\} \subset [a, b]$ , o qual deve ser fixado a priori e independente de  $f$ . Assim, é natural procurar uma aproximação através de uma soma ponderada de um número finito de valores de  $f$

$$I(f) \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \quad (f \in C([a, b]))$$

com  $A_i$ ,  $i = 0, \dots, n$ , independentes de  $f$ .

No que se segue, supomos que os pontos  $x_0, \dots, x_n$  são conhecidos e distintos entre si, e que estão ordenados:  $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ .

**Definição 1.1.** *Chama-se regra de quadratura ou regra de integração numérica ou fórmula de integração numérica a um funcional da forma*

$$\begin{aligned} Q : C([a, b]) &\rightarrow \mathbb{R} \\ Q(f) &= \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) \end{aligned} \tag{2}$$

Os pontos  $x_0, \dots, x_n$  dizem-se os nós de integração e os coeficientes  $A_0, \dots, A_n$  são os pesos da quadratura.

Na Secção 2 veremos que os polinómios têm um papel fundamental na construção de regras de quadratura e que a interpolação polinomial está efetivamente presente na análise das mesmas.

Recordando as somas de Riemann de  $f \in C([a, b])$  e as suas propriedades de convergência para o integral  $\int_a^b f(x)dx$ , podemos usá-las para definir as seguintes regras de quadratura

$$Q(f) := \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f(x_i), \quad Q(f) := \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f(x_{i+1})$$

onde  $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ . Esta ideia será explorada no desenvolvimento das fórmulas de integração compostas na Secção 3.

## 2 Quadratura de tipo interpolação

Vamos ver como se pode, em geral, determinar/fixar os coeficientes  $A_0, \dots, A_n$  na fórmula de integração numérica (2).

### 2.1 Representações exatas para polinómios. Grau de exatidão de uma quadratura

O nosso objetivo é fixar um critério para a determinação dos pesos de (2) de forma única, dependendo apenas dos nós de integração, os quais, para já, se supõem conhecidos.

**Definição 2.1.** Diz-se que a regra de quadratura (2) representa exatamente o integral (1) sobre  $\mathcal{P}_m$  se

$$Q(p) = I(p), \forall p \in \mathcal{P}_m. \quad (3)$$

Diz-se ainda que  $Q$  é uma aproximação de  $I$  com grau de exatidão igual a  $m$  se  $m$  é o maior inteiro não negativo tal que  $Q$  é exata sobre  $\mathcal{P}_m$ , ou seja, se (3) for satisfeita mas existir  $q \in \mathcal{P}_{m+1}$  tal que  $Q(q) \neq I(q)$ .

Tem-se o seguinte resultado auxiliar.

**Proposição 2.1.** Seja  $\{g_0, \dots, g_m\}$  uma base de  $\mathcal{P}_m$ . O funcional  $Q$  é uma representação exata de  $I$  sobre  $\mathcal{P}_m$  se e só se

$$\sum_{i=0}^n A_i g_j(x_i) = I(g_j), \forall j \in \{0, \dots, m\}.$$

*Demonstração.* Basta notar que qualquer  $p \in \mathcal{P}_m$  se escreve na forma  $p = \sum_{j=0}^m \alpha_j g_j$  e usar a linearidade de  $I$  e  $Q$  para obter sucessivamente

$$\begin{aligned} I(p) = Q(p), \forall p \in \mathcal{P}_m &\iff I\left(\sum_{j=0}^m \alpha_j g_j\right) = \sum_{i=0}^n A_i \left(\sum_{j=0}^m \alpha_j g_j\right)(x_i), \forall \alpha_0, \dots, \alpha_m \in \mathbb{R} \\ &\iff \sum_{j=0}^m \alpha_j I(g_j) = \sum_{j=0}^m \alpha_j \left(\sum_{i=0}^n A_i g_j(x_i)\right), \forall \alpha_0, \dots, \alpha_m \in \mathbb{R} \\ &\iff I(g_j) = \sum_{i=0}^n A_i g_j(x_i), \forall j \in \{0, \dots, m\}. \end{aligned}$$

□

Da Proposição 2.1 resulta que

**Proposição 2.2.**  *$Q$  é uma aproximação de  $I$  com grau de exatidão igual a  $m$  se e só se*

$$Q(x^k) = I(x^k), \quad k = 0, \dots, m; \quad Q(x^{m+1}) \neq I(x^{m+1}).$$

Note-se que a Proposição 2.1 fornece um algoritmo para o cálculo dos coeficientes  $A_0, \dots, A_n$  da regra  $Q$  de modo que esta seja, pelo menos, de grau  $n$  como aproximação de  $I$ . Basta então resolver o seguinte sistema linear

$$\begin{bmatrix} g_0(x_0) & g_0(x_1) & \cdots & g_0(x_n) \\ g_1(x_0) & g_1(x_1) & \cdots & g_1(x_n) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ g_n(x_0) & g_n(x_1) & \cdots & g_n(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I(g_0) \\ I(g_1) \\ \vdots \\ I(g_n) \end{bmatrix} \quad (4)$$

De facto, como o conjunto  $\{g_0, \dots, g_n\}$  é linearmente independente sobre  $\mathcal{X}$ , em consequência do Teorema fundamental da Álgebra, o sistema (4) tem uma e uma só solução. Assim, os pesos  $A_0, \dots, A_n$  dependem apenas do intervalo  $[a, b]$  e dos nós de integração aí escolhidos.

**Observação 2.1.** *Consideremos a interpolação polinomial de uma função  $f$ : dadas as funções de base  $g_0, \dots, g_n$  para  $\mathcal{P}_n$ , determinar os coeficientes  $a_0, \dots, a_n \in \mathbb{R}$  tais que*

$$f(x_i) = \sum_{i=0}^n a_i g(x_i), \quad \forall x_i \in \mathcal{X}.$$

*Este problema traduz-se na resolução do seguinte sistema linear*

$$\begin{bmatrix} g_0(x_0) & g_1(x_0) & \cdots & g_n(x_0) \\ g_0(x_1) & g_1(x_1) & \cdots & g_n(x_1) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ g_0(x_n) & g_1(x_n) & \cdots & g_n(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{bmatrix}. \quad (5)$$

A matriz deste sistema é a transposta da matriz do sistema (4), pelo que a interpolação polinomial e a aproximação de um integral por uma regra de quadratura (2) se dizem problemas duais.

## 2.2 Cálculo dos pesos. Método dos coeficientes indeterminados

Começemos por explicitar o sistema (4) para a base canónica de  $\mathcal{P}_n$ ,  $\{g_0, \dots, g_n\} = \{1, \dots, x^n\}$ . Substituindo em (4), obtém-se o chamado *método dos coeficientes indeterminados* para calcular os pesos  $A_0, \dots, A_n$  de uma quadratura:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I(1) \\ I(x) \\ \vdots \\ I(x^n) \end{bmatrix}. \quad (6)$$

em que a matriz (transposta da matriz de Vandermonde) é não-singular, mas pode apresentar problemas de condicionamento para valores de  $n$  grandes.

À semelhança do que fizemos na interpolação polinomial, podemos procurar algoritmos alternativos para o cálculo aproximado de  $I$  mudando a base do espaço  $\mathcal{P}_n$ . Sejam  $\ell_0, \dots, \ell_n$  os *polinómios característicos de Lagrange*,

$$\ell_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \quad i = 0, \dots, n,$$

os quais, como se sabe, formam uma base de  $\mathcal{P}_n$ . Neste caso, a matriz do sistema (4) é simplesmente a matriz identidade, pois  $\ell_i(x_k) = \delta_{ik}$ . Tem-se então que o funcional  $Q$  é uma representação exata de  $I$  sobre  $\mathcal{P}_n$  se e só se

$$A_i = I(\ell_i), \quad \forall i \in \{0, \dots, n\}, \quad (7)$$

o que constitui um *algoritmo alternativo* para o cálculo dos pesos.

**Teorema 2.1.** *Seja  $Q$  uma representação exata de  $I$  sobre  $\mathcal{P}_n$ . Então tem-se*

$$I(f) - Q(f) = I(e_n), \quad \forall f \in C([a, b])$$

onde

$$e_n(x) := f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

ou

$$e_n(x) := \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i) \quad (f \in C^{n+1}([a, b]))$$

é o erro de interpolação polinomial.

*Demonstração.* Como  $Q$  é exata sobre  $\mathcal{P}_n$ , tem-se

$$I(f) - Q(f) = I(f) - Q(p_n) = I(f) - I(p_n) = I(f - p_n) = I(e_n),$$

onde  $p_n$  é o polinómio interpolador de  $f$  nos nós  $x_0, \dots, x_n$ . □

Em resumo, se os nós de integração forem dados (distintos entre si) e os coeficientes  $A_0, \dots, A_n$  forem calculados através de (6) ou (7), obtém-se uma quadratura com grau igual ou superior a  $n$ .

A seguir, estudaremos duas escolhas habituais para os nós de integração numérica.

## 2.3 Fórmulas de Newton-Cotes

A escolha mais simples dos nós de integração na aproximação do integral  $I$  consiste em *nós igualmente espaçados*, i.e.,  $x_{i+1} - x_i = h$ .

As fórmulas de Newton-Cotes abertas são dadas por

$$Q_{n-1}(f) = \sum_{i=0}^{n-1} A_i f(x_i), \text{ com } x_i = a + (i + \frac{1}{2})h, \ i = 0, \dots, n-1,$$

com  $h = (b - a)/n$ . Neste caso, os extremos do intervalo não fazem parte dos nós de integração.

### 2.3.1 Regra do ponto médio ou do retângulo

O caso mais simples das fórmulas de Newton-Cotes abertas é a regra do ponto médio

$$Q_0(f) := (b - a)f\left(\frac{a + b}{2}\right) \tag{8}$$

baseada apenas em 1 nó de integração, com erro

$$\int_a^b f(x)dx - Q_0(f) = \frac{h^3}{24}f''(\xi), \quad \xi \in (a, b), \quad h = b - a, \tag{9}$$

para funções  $f \in C^2([a, b])$ . As fórmulas (8) e (9) podem ser obtidas a partir da expansão de Taylor

$$f(x) = f\left(\frac{a + b}{2}\right) + f'\left(\frac{a + b}{2}\right)\left(x - \frac{a + b}{2}\right) + \frac{f''(\xi(x))}{2}\left(x - \frac{a + b}{2}\right)^2.$$

Integrando esta última igualdade em  $[a, b]$  e como  $\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right) dx = 0$ , obtém-se

$$\int_a^b f(x) dx - Q_0(f) = \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2} \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx.$$

e para obter (9), é útil o seguinte Teorema do valor médio para integrais.

**Teorema 2.2.** *Sejam  $u, v \in C([a, b])$  tais que  $v$  não muda de sinal em  $[a, b]$ . Então existe  $c \in (a, b)$  tal que*

$$\int_a^b u(x)v(x)dx = u(c) \int_a^b v(x)dx$$

*Demonstração.* Podemos considerar dois casos:

1.  $v(x) \neq 0$  para todo  $x \in (a, b)$

Sejam  $f(x) := \int_a^x u(s)v(s)ds$ ,  $g(x) := \int_a^x v(s)ds$ . Tem-se  $f(a) = g(a) = 0$ ,  $f(b) = \int_a^b u(s)v(s)ds$  e  $g(b) = \int_a^b v(s)ds \neq 0$ . Podemos usar o Teorema de Cauchy para obter

$$\frac{\int_a^b u(s)v(s)ds}{\int_a^b v(s)ds} = \frac{f(b)}{g(b)} = \frac{f(a) - f(b)}{g(a) - g(b)} = \frac{f'(c)}{g'(c)} = \frac{u(c)v(c)}{v(c)} = u(c)$$

para algum  $c \in (a, b)$ ;

2.  $v$  anula-se em algum ponto de  $(a, b)$ , mas não é identicamente nula

Neste caso continuamos a ter  $\int_a^b v(s)ds \neq 0$ . Pondo  $w(x) := u(x) - \frac{\int_a^b u(s)v(s)ds}{\int_a^b v(s)ds}$ , obtém-se

$$\int_a^b w(x)v(x)dx = 0$$

pelo que a função  $wv$  tem de mudar de sinal em  $(a, b)$ . Como  $v$  não muda de sinal então tem de ser  $w$  a ter essa propriedade, i.e., existe  $c \in (a, b)$  tal que

$$w(c) = u(c) - \frac{\int_a^b u(s)v(s)ds}{\int_a^b v(s)ds} = 0.$$

□



É claro que  $v(x) := \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2$  não muda de sinal em  $[a, b]$ , pelo que existe  $\xi \in (a, b)$  tal que

$$\int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2} \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx = \frac{f''(\xi)}{2} \int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx = \frac{f''(\xi)}{2} \frac{(b-a)^3}{12} = \frac{h^3}{24} f''(\xi)$$

e assim se deduz (9) como erro da regra do ponto médio.

Consideremos agora nós igualmente espaçados que incluem os extremos do intervalo de integração:

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, \dots, n, \quad \text{com } h = \frac{b-a}{n}.$$

As fórmulas de Newton-Cotes fechadas são da forma

$$Q_n(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \quad \text{com } x_i = a + ih, \quad i = 0, \dots, n,$$

e obviamente, os pesos podem ser calculados através de (6) ou (7). Se usarmos (7), pode-se considerar ainda a seguinte simplificação:

**Proposição 2.3.** *Nas fórmulas de Newton-Cotes fechadas, tem-se*

$$1. \quad A_j = \int_a^b \ell_j(x) dx = \frac{(-1)^{n-j} h}{j!(n-j)!} \int_0^n \prod_{k=0, k \neq j}^n (t-k) dt,$$

$$2. \quad A_j = A_{n-j}, \quad j = 0, \dots, n.$$

*Demonstração.* Para obter a expressão para os coeficientes  $A_j$ , basta fazer a mudança de variável  $x = x_0 + th$ ,  $t \in [0, n]$ , no integral  $\int_a^b \ell_j(x) dx$ .

A propriedade de simetria prova-se recorrendo à mudança de variável  $t = n - y$  na nova expressão nos coeficientes  $A_j$  dada em 1.  $\square$

Para efeitos de análise de erros de integração numérica, pode ser útil considerar as seguintes funções (ver Fig.1):

$$\psi_n(t) := \prod_{j=0}^n (t-j), \quad (t \in [0, n])$$

para  $n = 1, 2, \dots$ . Tem-se

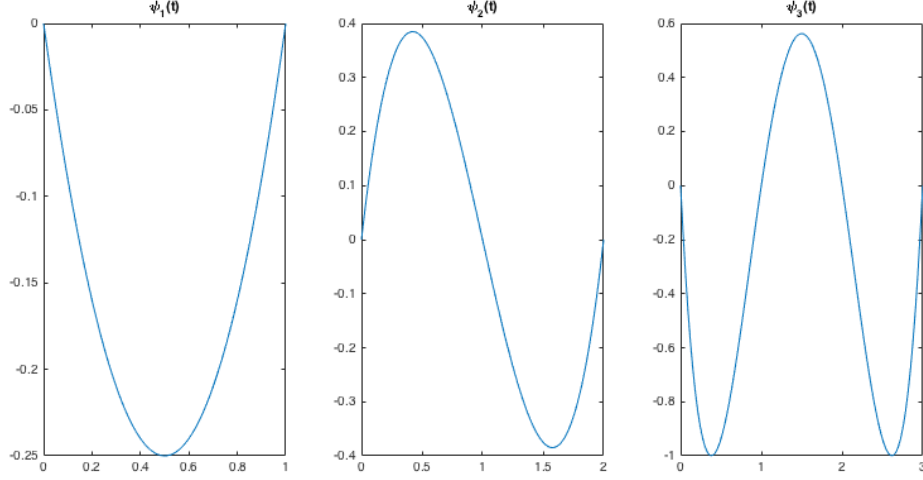


Figura 1: Funções auxiliares na análise do erro de integração

$$|\psi_n(t)| \leq \frac{n!}{4}, \quad \forall t \in [0, n], \quad (10)$$

e

$$\int_a^b w_{n+1}(x)dx = \int_a^b \prod_{j=0}^n (x - x_j)dx = h^{n+2} \int_0^n \psi_n(t)dt. \quad (11)$$

onde se usou a mudança de variável  $x = x_0 + th$ ,  $t \in [0, n]$ .

A seguir concretizamos as fórmulas de Newton-Cotes fechadas para alguns valores de  $n$ .

### 2.3.2 Regra do trapézio

Esta regra usa 2 nós:  $x_0 = a$  e  $x_1 = b$ . Pela Proposição 2.3, tem-se

$$A_0 = A_1 = h \int_0^1 t dt = \frac{h}{2},$$

onde  $h := b - a$ . Antes de deduzirmos o erro da aproximação

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] =: T(f)$$

começamos por observar que  $T$  tem grau de exatidão igual a 1, pois, como o polinómio de segundo grau  $w_2(x) := (x - a)(x - b)$  não muda de sinal em  $[a, b]$  mas é nulo nos extremos do intervalo, tem-se  $I(w_2) < 0$  e  $T(w_2) = 0$ .

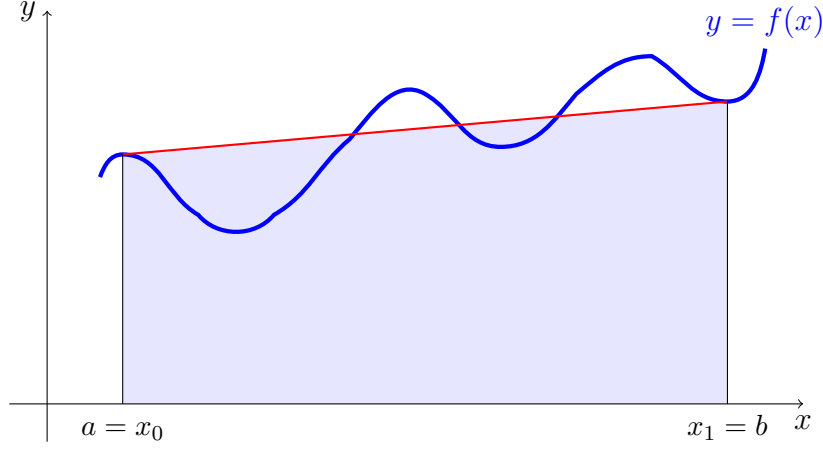


Figura 2: Regra do trapézio. A linha vermelha representa o polinómio  $p_1$  interpolador de  $f$  em  $x_0$  e  $x_1$ .

Dada uma função  $f \in C^2([a, b])$ , seja  $p_1$  o polinómio de grau menor ou igual a 1, interpolador de  $f$  em  $x_0$  e  $x_1$ . Tem-se

$$\int_a^b f(x)dx - T(f) = \int_a^b f(x)dx - T(p_1) = \int_a^b [f(x) - p_1(x)]dx = \int_a^b \frac{f^{(2)}(\xi(x))}{2} w_2(x)dx.$$

Uma vez que  $w_2$  não muda de sinal em  $[a, b]$ , pelo Teorema 2.2, existe  $\xi \in (a, b)$  tal que

$$E^T(f) := \int_a^b f(x)dx - T(f) = \frac{f''(\xi)}{2} \int_a^b w_2(x)dx = \frac{f''(\xi)}{2} h^3 \int_0^1 t(t-1)dt = -\frac{h^3 f''(\xi)}{12},$$

onde usámos (11). Assim, o erro de integração em  $[a, b]$  é dado por

$$E^T(f) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

### 2.3.3 Regra de Simpson

A regra de Simpson baseia-se em 3 nós igualmente espaçados:  $x_0 = a$ ,  $x_1 = \frac{a+b}{2}$  e  $x_2 = b$ . Neste caso, a Proposição 2.3 fornece

$$A_0 = A_2 = \frac{h}{2} \int_0^2 t(t-1)dt = \frac{h}{2} \times \frac{2}{3} = \frac{h}{3},$$

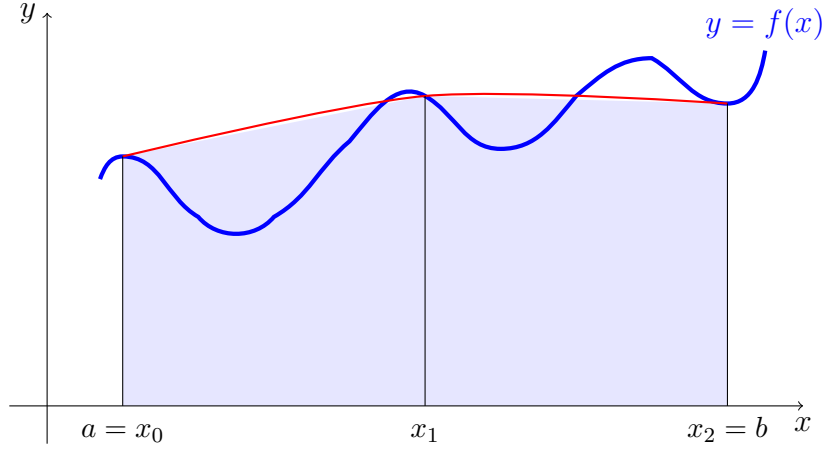


Figura 3: Regra de Simpson. A linha vermelha representa o polinómio  $p_2$  interpolador de  $f$  em  $x_0$ ,  $x_1$  e  $x_2$ .

$$A_1 = -h \int_0^2 t(t-2)dt = (-h) \times \left(-\frac{4}{3}\right) = \frac{4h}{3},$$

e a aproximação obtida para o integral é

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] =: S(f)$$

onde  $h := \frac{b-a}{2}$ . Quanto à interpretação geométrica do método, note-se que

$$S(f) = S(p_2) = \int_a^b p_2(x)dx$$

onde  $p_2$  é a parábola que passa nos pontos  $(x_i, f(x_i))$ ,  $i = 0, 1, 2$  (ver Figura 3).

Antes de analisarmos o erro de integração, convém observar que, efetivamente,  $S_1$  tem grau de exatidão igual a 3, informação que deve surgir na fórmula de erro. Recordamos também uma generalização do Teorema de Rolle.

**Teorema 2.3.** *Sejam  $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$   $n + 1$  pontos distintos e  $m_0, \dots, m_n$  inteiros positivos. Seja  $f \in C^{k-1}([a, b])$ , com  $k = \sum_{i=0}^n m_i$ . Se cada  $x_i$  é um zero de  $f$  com multiplicidade  $m_i$  então existe  $\xi \in (a, b)$  tal que  $f^{(k-1)}(\xi) = 0$ .*

Seja  $p$  o único polinómio de  $\mathcal{P}_3$  tal que

$$p(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, 2 \quad p'(x_1) = f'(x_1).$$

Vamos mostrar que, para cada  $x \in [a, b]$ , existe  $\xi(x) \in (a, b)$  tal que

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(4)}(\xi(x))}{4!} w_3(x)(x - x_1). \quad (12)$$

Para  $x \in [a, b] \setminus \{x_0, x_1, x_2\}$  fixo, consideremos o polinómio  $q = q(t) \in \mathcal{P}_4$  definido por

$$q(t) = p(t) + \frac{f(x) - p(x)}{W(x)} W(t), \quad W(s) := w_3(s)(s - x_1)$$

o qual satisfaz

$$q(x_i) = p(x_i), \quad i = 0, 1, 2; \quad q(x) = f(x); \quad q'(x_1) = p'(x_1).$$

Definindo  $E(t) := f(t) - q(t)$ , tem-se que  $E$  admite em cada nó  $x_0, x_2, x$  um zero com multiplicidade 1 e no nó  $x_1$  um zero com multiplicidade 2. Portanto, a função  $E$  tem pelo menos 5 zeros (contados com a sua multiplicidade) em  $[a, b]$ . Pelo Teorema 2.3,

$$\exists \xi(x) \in (a, b) : \quad E^{(4)}(\xi(x)) = 0,$$

ou seja,

$$\exists \xi(x) \in (a, b) : \quad q^{(4)}(\xi(x)) = f^{(4)}(\xi(x)).$$

Como  $q^{(4)}$  é constante e tem o valor  $q^{(4)} = 4! \frac{f(x) - p(x)}{W(x)}$ , conclui-se que

$$\exists \xi(x) \in (a, b) : \quad f(x) - p(x) = \frac{f^{(4)}(\xi(x))}{4!} w_3(x)(x - x_1).$$

Agora, integrando (12) em  $[a, b]$  e notando que  $W(x) := w_3(x)(x - x_1)$  não muda de sinal em  $[a, b]$ , conclui-se, através do Teorema 2.2, que existe  $\xi \in (a, b)$  tal que

$$\begin{aligned} E^S(f) &:= I(f) - S(f) = I(f) - S(p) = I(f - p) \\ &= \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)^2(x - x_2) dx \\ &= \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} h^5 \int_0^2 t(t-1)^2(t-2) dt = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi). \end{aligned}$$

### 2.3.4 Regra dos três oitavos

Consideremos ainda 4 nós igualmente espaçados no intervalo  $[a, b]$ ,  $x_i = a + ih$ ,  $i = 0, \dots, 3$ , onde  $h := \frac{b-a}{3}$ . Tem-se

$$A_0 = A_3 = \frac{h}{3!} \int_0^3 t(t-1)(t-2)dt = \frac{h}{6} \times \frac{9}{4} = \frac{3h}{8}$$

$$A_1 = A_2 = -\frac{h}{2} \int_0^3 t(t-1)(t-3)dt = \frac{h}{2} \times \left(-\frac{9}{4}\right) = -\frac{9h}{8}$$

pelo que a aproximação obtida é

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{3}{8}h[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)].$$

O respetivo erro, quando  $f \in C^4([a, b])$ , é dado por

$$\int_a^b f(x)dx - \frac{3}{8}h[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] = -\frac{3h^5}{80}f^{(4)}(\xi)$$

para algum  $\xi \in (a, b)$ .

**Observação 2.2.** *Em geral, tem-se a seguinte majoração para erros de integração numérica pelas fórmulas de Newton-Cotes fechadas*

$$|I(f) - Q_n(f)| \leq \frac{(b-a)h^{n+1} \max_{t \in [a,b]} |f^{(n+1)}(t)|}{4(n+1)},$$

o que não garante que, quando  $h$  tende para zero, ou de forma equivalente,  $n \rightarrow \infty$ , o erro de integração tenda para zero. Aliás, basta mencionar o exemplo da função de Runge (ilustrado na Figura 4 a seguir) e a sua aproximação polinomial com nós de interpolação igualmente espaçados. Se os polinómios  $p_n$  não constituem boas aproximações para  $f$  então não se pode esperar que  $Q_n(f) = Q_n(p_n) = \int_a^b p_n(x)dx$  sejam boas aproximações para  $\int_a^b f(x)dx$ .

## 2.4 Fórmulas de Gauss (tópico opcional)

Podemos também considerar a escolha mais eficaz dos nós de integração, no sentido em que se maximiza o grau de exatidão da fórmula de quadratura.

Relembramos que se fixarmos os nós de integração e tomarmos  $A_i = \int_a^b \ell_i(x)dx$ ,  $i = 0, \dots, n$ , ou, de forma equivalente, a solução de (6), obtemos uma fórmula de integração com grau, pelo menos, igual a  $n$ . Antes de tentarmos construir fórmulas com grau superior  $n$ , é conveniente mostrar o seguinte resultado.

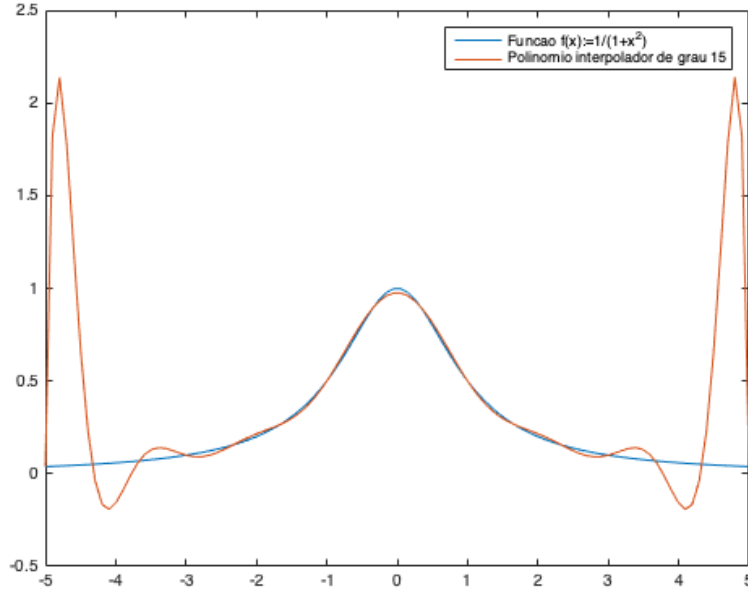


Figura 4: Exemplo de Runge: interpolação polinomial de  $f(x) := 1/(1+x^2)$ ,  $x \in [-5, 5]$ , em nós igualmente espaçados. Perto dos extremos do intervalo  $[-5, 5]$  o erro de interpolação atinge valores muito elevados.

**Teorema 2.4.** *Seja  $Q(f) := \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$ , com  $x_i \in [a, b]$ ,  $i = 0, \dots, n$ , uma fórmula de integração para aproximar o integral  $I(f) := \int_a^b f(x)dx$ . Então qualquer que seja a escolha dos nós de integração, a fórmula  $Q$  não pode ter grau superior a  $2n + 1$ .*

*Demonstração.* Basta notar que o polinómio  $p(x) := \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2$  de grau  $2n + 2$  satisfaz

1.  $Q(p) = 0$ , pois  $p(x_i) = 0$ , para todo  $i = 0, \dots, n$ ,

2.  $\int_a^b p(x)dx > 0$ .

Logo,  $Q$  não tem grau  $2n + 2$ . □

**Definição 2.2.** *Uma fórmula de quadratura com  $n+1$  nós  $Q(f) := \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$  diz-se uma fórmula de Gauss se tiver grau de exatidão igual a  $2n + 1$ .*

Um processo para construir quadraturas de Gauss-Legendre é considerar os nós de integração como incógnitas, para além dos pesos da quadratura, e tentar resolver o seguinte sistema não linear (sistema com  $2n + 2$  equações para  $2n + 2$  incógnitas)

$$\left\{ \begin{array}{l} A_0 + A_1 + \dots + A_n = \int_a^b dx \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + \dots + A_n x_n = \int_a^b x dx \\ \dots \\ A_0 x_0^n + A_1 x_1^n + \dots + A_n x_n^n = \int_a^b x^n dx \\ \dots \\ A_0 x_0^{2n+1} + A_1 x_1^{2n+1} + \dots + A_n x_n^{2n+1} = \int_a^b x^{2n+1} dx \end{array} \right. \quad (13)$$

Aqui será vantajoso considerar o intervalo de referência  $[\hat{a}, \hat{b}] := [-1, 1]$ , onde se pode tirar partido de algumas anti-simetrias para calcular os nós e os pesos de integração. Por exemplo,  $\int_{-1}^1 x^{2k-1} dx = 0$ ,  $k \in \mathbb{N}$ , porque as funções integrandas são ímpares. Isto não constitui uma limitação, pois um integral sobre  $[a, b]$  pode ser transformado num integral sobre  $[-1, 1]$  fazendo

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \hat{x}\right) d\hat{x}.$$

Tendo calculado os pesos e nós  $\hat{x}_i$  e  $\hat{A}_i$ ,  $i = 0, \dots, n$ , no intervalo de referência, é fácil voltar ao intervalo original através da mudança de variável

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \hat{x} \quad (\hat{x} \in [-1, 1])$$

e no intervalo  $[a, b]$  fica:

$$A_i = \frac{b-a}{2} \hat{A}_i, \quad x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \hat{x}_i.$$

Deste modo, a regra de quadratura de Gauss resulta na seguinte aproximação:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n \hat{A}_i f\left(\frac{b-a}{2} \hat{x}_i + \frac{a+b}{2}\right).$$



Note-se que se  $\hat{x}_0, \dots, \hat{x}_n \in [-1, 1]$  são solução do sistema (13) então  $-\hat{x}_0, \dots, -\hat{x}_n$  também serão solução, pelo que basta procurar nós simétricos.

**Exemplo 2.1.** Seja  $I(f) := \int_{-1}^1 f(x)dx$ . A fórmula de integração

$$Q(f) := f(-\sqrt{3}/3) + f(\sqrt{3}/3)$$

tem grau 3, grau máximo para uma fórmula baseada em 2 nós de integração, enquanto que

$$Q(f) := \frac{1}{9} \left[ 5f(-\sqrt{3/5}) + 8f(0) + 5f(\sqrt{3/5}) \right]$$

tem grau 5, que é o grau máximo para uma fórmula com 3 nós.

Vamos ver que é possível obter fórmulas de integração com grau  $2n + 1$  (grau máximo) através de um processo alternativo à resolução do sistema não-linear (13). Começamos com a seguinte caracterização de tais fórmulas.

**Teorema 2.5.** A fórmula de integração  $Q(f) := \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$ , com  $x_i \in [a, b]$ , para aproximar o integral  $\int_a^b f(x)dx$  tem grau  $2n + 1$  se e só se os nós de integração forem tais que

$$\int_a^b q(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx = 0, \forall q \in \mathcal{P}_n.$$

*Demonstração.* Se  $Q$  tem grau  $2n + 1$  então, como o polinómio  $p(x) := q(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i)$  com  $q \in \mathcal{P}_n$  é de degrau  $2n + 1$ , tem-se

$$\int_a^b q(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx = \int_a^b p(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i p(x_i) = 0.$$

Suponhamos agora que

$$\int_a^b q(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx = 0, \forall q \in \mathcal{P}_n,$$

e seja  $p \in \mathcal{P}_{2n+1}$ . Queremos mostrar que  $\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i p(x_i)$ . Atendendo a que  $p$  se pode decompor na forma

$$p(x) = p_n(x) + q(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

onde  $p_n \in \mathcal{P}_n$  é o polinómio interpolador de  $p$  e  $q \in \mathcal{P}_n$ , tem-se

$$\int_a^b p(x) dx = \int_a^b p_n(x) dx + \int_a^b q(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx = \int_a^b p_n(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i p(x_i).$$

Portanto,  $Q$  é exata sobre  $\mathcal{P}_{2n+1}$ . □

Tem-se ainda

**Teorema 2.6.** *Um polinómio  $q \in \mathcal{P}_{n+1}$  que seja ortogonal a  $\mathcal{P}_n$  relativamente ao produto interno  $(f, g) \mapsto \int_a^b f(x)g(x)dx$ , i.e., que satisfaça*

$$\int_a^b q(x)p(x)dx = 0, \forall p \in \mathcal{P}_n,$$

*tem  $n + 1$  zeros simples no intervalo  $(a, b)$ .*

*Demonstração.* Começamos por ver que  $q$  tem pelo menos um zero em  $(a, b)$ . De facto, como  $q$  é ortogonal a  $\mathcal{P}_0$ , tem-se

$$\int_a^b q(x)dx = 0$$

e, portanto,  $q$  tem que mudar de sinal em  $(a, b)$ .

Sejam  $x_0, \dots, x_m$  ( $m \geq 0$ ) os zeros de  $q$  em  $(a, b)$ . Vamos mostrar que  $m = n$ . Suponhamos que se tinha  $m < n$  e seja  $r(x) := \prod_{i=0}^m (x - x_i) \in \mathcal{P}_{m+1} \subseteq \mathcal{P}_n$ . Tem-se

$$\int_a^b q(x)r(x)dx = 0$$

porque  $q$  é ortogonal a  $\mathcal{P}_n$ . Mas como  $q$  muda de sinal nos nós  $x_0, \dots, x_m$  então o polinómio  $qr$  não muda de sinal em  $[a, b]$ . Consequentemente,  $\int_a^b q(x)r(x)dx > 0$ . Portanto,  $n = m$ .  $\square$

No intervalo (de referência)  $[-1, 1]$ , os polinómios ortogonais, chamados *polinómios de Legendre*, definem-se recursivamente por:

$$\begin{cases} L_0(x) = 1, \\ L_1(x) = x, \\ L_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1}xL_k(x) - \frac{k}{k+1}L_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Os primeiros polinómios de Legendre são

$$L_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$L_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$$L_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$

Em resumo:

Para cada  $n \in \mathbb{N}_0$ , existe uma e uma só fórmula de integração

$$Q(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \quad x_i \in [a, b]$$

com grau  $2n + 1$  para aproximar  $\int_a^b f(x)dx$ , a chamada *quadratura de Gauss-Legendre*. Os nós de integração são dados pelos zeros do polinómio ortogonal  $q_{n+1}$  de grau  $n + 1$ :

$$\int_a^b q_{n+1}(x)p(x)dx = 0, \quad \forall p \in \mathcal{P}_n.$$

**Observação 2.3.** Para além da propriedade de grau máximo, prova-se que as quadraturas de Gauss são convergentes para  $I(f)$  quando  $n \rightarrow \infty$ .

### 3 Fórmulas de quadratura compostas

De modo a aumentar a precisão das aproximações dos integrais, em vez de aumentar o grau de exatidão das fórmulas de Newton-Cotes, é preferível utilizar as fórmulas de integração compostas.

No que se segue, será útil o seguinte Teorema do valor médio discreto:

**Teorema 3.1.** Sejam  $u \in C([a, b])$ ,  $x_k \in [a, b]$  e  $v_k \geq 0$ ,  $k = 1, \dots, n$ . Então existe  $c \in [\min\{x_0, \dots, x_n\}, \max\{x_0, \dots, x_n\}]$  tal que

$$\sum_{k=1}^n u(x_k)v_k = u(c) \sum_{k=1}^n v_k.$$

*Demonstração.* Sejam  $I := [\min\{x_0, \dots, x_n\}, \max\{x_0, \dots, x_n\}]$ ,  $x_m, x_M \in I$  tais que  $u(x_m) = \min_{x \in I} u(x)$  e  $u(x_M) = \max_{x \in I} u(x)$ . Tem-se

$$u(x_m) \sum_{k=1}^n v_k \leq \sum_{k=1}^n u(x_k)v_k \leq u(x_M) \sum_{k=1}^n v_k$$

ou ainda

$$u(x_m) \leq \frac{\sum_{k=1}^n u(x_k)v_k}{\sum_{k=1}^n v_k} \leq u(x_M)$$

e, pelo Teorema do valor intermédio, existe  $c \in I$  tal que

$$\frac{\sum_{k=1}^n u(x_k)v_k}{\sum_{k=1}^n v_k} = u(c).$$

□

### 3.1 Regra do ponto médio composta ou regra dos retângulos

Recordamos a regra do ponto médio simples:

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{h^3}{24}f''(\xi), \quad \xi \in (a,b).$$

Sendo  $h = \frac{b-a}{n}$  e  $x_i = a + \frac{h}{2} + ih$ ,  $i = 0, \dots, n-1$ , a aproximação para o integral pela regra composta é dada por

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)$$

Para obter o erro da regra composta, supomos  $f \in C^2([a,b])$  e, depois de somarmos os

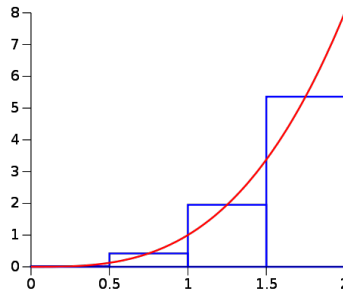


Figura 5: Regra dos retângulos

erros de integração nos subintervalos  $[x_i - \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2}]$ ,  $i = 0, \dots, n-1$ , onde se aplicou a regra simples, recorreremos ao Teorema 3.1 para concluir que existe  $\xi \in (a,b)$  tal que

$$\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) = n f''(\xi).$$

Assim, o erro de integração pela regra do ponto médio composta pode ser simplificado do seguinte modo

$$\int_a^b f(x)dx - h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) = \frac{h^3}{24} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) = \frac{h^3}{24} n f''(\xi)$$

ou ainda

$$\int_a^b f(x)dx - h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) = \frac{b-a}{24} h^2 f''(\xi) = \frac{(b-a)^3}{24n^2} f''(\xi).$$

Como

$$\left| \int_a^b f(x)dx - h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \right| \leq Ch^2$$

com  $C > 0$  independente de  $h$ , diz-se que a regra dos retângulos tem precisão de segunda ordem em  $h$  ou ordem de convergência igual a 2.

Em geral,

**Definição 3.1.** A ordem de precisão de uma quadratura composta é a sua ordem em relação ao comprimento  $h$  dos subintervalos em que se divide o intervalo original  $[a, b]$ .

**Exemplo 3.1.** Consideremos o integral

$$I := \int_0^1 \exp(x^2)dx.$$

Vamos calcular um valor aproximado para este integral recorrendo à regra dos retângulos com 4 nós de integração:

$$x_0 = 0.125, \quad x_1 = 0.375, \quad x_2 = 0.625, \quad x_3 = 0.875$$

espaçados de  $h = 0.25$ . Fica então

$$I \approx 0.25(\exp(0.125^2) + \exp(0.375^2) + \exp(0.625^2) + \exp(0.875^2)) = 1.44874569116048.$$

Sendo  $f(x) := \exp(x^2)$ , tem-se  $f''(x) = (4x^2 + 2) \exp(x^2)$  e

$$\max_{x \in [0,1]} |f''(x)| = f''(1) = 6 \exp(1) = 16.3097$$

pelo que

$$|I - 1.44874569116048| \leq 0.0424732.$$

Esta estimativa de erro diz-nos que a aproximação calculada tem (apenas) 2 algarismos significativos.

A regra do ponto médio composta pode ser implementada em MATLAB através da seguinte função:

```
function q = pto_medio(a,b,f,n)
%Calcula um valor aproximado do integral de f
% no intervalo [a,b]
% usando a regra do ponto médio (composta)
h=(b-a)/n;
% Definição dos nós de integração
x=linspace(a+h/2,b-h/2,n);
% Cálculo do valor aproximado do integral
q = h*sum(f(x));
end
```

**Exemplo 3.2.** Aplicamos agora o programa MATLAB ao integral  $\int_0^1 \exp(x^2)dx$ :

```
>> format long g
>> pto_medio(0,1,@(x)exp(x.^2),30)
ans = 1.46240013467514

>> pto_medio(0,1,@(x)exp(x.^2),60)
ans = 1.46258882781407

>> pto_medio(0,1,@(x)exp(x.^2),120)
ans = 1.46263601542818
```

Com o comando *integral* do MATLAB, obtemos

```
>> integral(@(x)exp(x.^2),0,1)
ans = 1.46265174590718
```

**Exemplo 3.3.** Consideremos uma população com  $M = 200$  indivíduos. Sabe-se que a distribuição das alturas destes indivíduos pode ser representada por uma Gaussiana que se caracteriza pelo valor médio  $\bar{a} = 1.70$  m e pelo desvio padrão  $\sigma = 0.10$  m (distribuição normal):

$$f(a) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(\bar{a}-a)^2/(2\sigma^2)}.$$

Uma estimativa para o número de indivíduos  $N$  cuja altura varia na faixa 1.80 – 1.90 m é dada por

$$N \approx M \int_{1.80}^{1.90} f(a) da = 797.885 \int_{1.80}^{1.90} e^{-50(1.70-a)^2} da.$$

Para calcular

$$797.885 \int_{1.80}^{1.90} e^{-50(1.70-a)^2} da.$$

recorremos ao programa MATLAB apresentado acima:

```
>> 797.885*pto_medio(1.80,1.90,@(a)exp(-50*(1.70-a).^2),30)
ans = 27.1798
```

```
>> 797.885*pto_medio(1.80,1.90,@(a)exp(-50*(1.70-a).^2),100)
ans = 27.1809
```

```
>> 797.885*pto_medio(1.80,1.90,@(a)exp(-50*(1.70-a).^2),200)
ans = 27.1810
```

Assim,  $N \approx 27$ .

### 3.2 Regra dos trapézios

Para deduzir a *regra dos trapézios composta* para aproximar  $I(f)$ , sejam  $x_i = a + ih$ ,  $i = 0, \dots, n$ , com  $h := \frac{b-a}{n}$ . Recordamos que, para  $f \in C^2([a, b])$  se tem, em cada subintervalo  $[x_i, x_{i+1}]$ ,

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] - \frac{h^3}{12} f''(\xi_i),$$

para algum  $\xi_i \in (x_i, x_{i+1})$ . Daqui resulta

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} [f(x_i) + f(x_{i+1})] - \frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i).$$

Notamos ainda que

$$\frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} [f(x_i) + f(x_{i+1})] = \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_n)] + h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i).$$

Tal como na regra do ponto médio composta, se  $f \in C^2([a, b])$ , o Teorema 3.1 garante a existência de  $\xi \in (a, b)$  tal que

$$\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) = n f''(\xi),$$

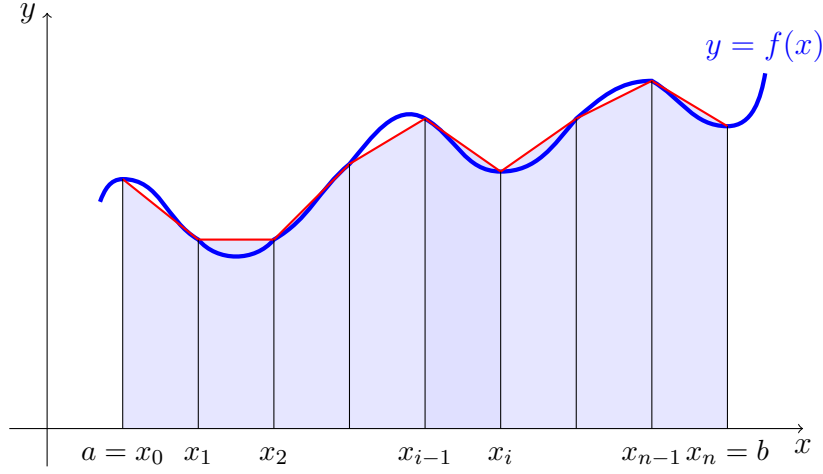


Figura 6: Regra dos trapézios composta

donde o erro de integração pela regra dos trapézios composta pode ser simplificado do seguinte modo

$$-\frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) = -\frac{h^3}{12} n f''(\xi) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi)$$

Assim,  $T_n$  tem ordem de precisão igual a 2.

Iremos usar as seguintes notações e fórmulas para a regra dos trapézios:

$$T_n(f) = \frac{h}{2} \left[ f(x_0) + f(x_n) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right], \text{ com } h = \frac{b-a}{n} \text{ e } x_i = a + ih \ (i = 0, \dots, n)$$

e, para  $f \in C^2([a, b])$ ,

$$E_n^T(f) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi), \ \xi \in (a, b).$$

**Observação 3.1.** 1. Se  $f \in C^2([a, b])$  então  $\lim_{n \rightarrow \infty} T_n(f) = I(f)$ .



2. Note-se que  $T_1(f)$  é uma representação exacta de  $I(f)$  sobre  $\mathcal{P}_1([a, b])$ , mas  $T_n(f)$  não é uma representação exacta de  $I(f)$  sobre  $\mathcal{P}_n([a, b])$ . Mais concretamente  $T_n(f)$  corresponde a aproximar a função  $f$  por um spline de grau 1 associado aos nós  $\mathcal{X}$ , i.e., uma função seccionalmente linear em  $[a, b]$  (função a vermelho na Fig. 5).

**Exemplo 3.4.** Consideremos novamente o integral  $I := \int_0^1 \exp(x^2)dx$ . Vamos calcular um valor aproximado para este integral recorrendo à regra dos trapézios com 4 subintervalos, ou seja, 5 nós de integração:  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = 0.25$ ,  $x_2 = 0.5$  e  $x_3 = 0.75$  e  $x_4 = 1$ , espaçados de  $h = 0.25$ . Obtém-se

$$I \approx 0.25((1 + \exp(1^2))/2 + \exp(0.75^2) + \exp(0.25^2) + \exp(0.5^2)) = 1.49067886169886.$$

Tem-se ainda, recorrendo a

$$|E_n^T(f)| \leq \frac{h^2}{12} \max_{x \in [0, 1]} |f''(x)|,$$

a seguinte estimativa de erro (comparar com o Exemplo 3.1)

$$|I - 1.49067886169886| \leq 0.0849464.$$

### 3.3 Regra de Simpson composta

Seja  $n$  par e sejam  $x_i = a + ih$ ,  $i = 0, \dots, n$ , com  $h := \frac{b-a}{n}$ . A regra de Simpson composta resulta de

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n/2} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)dx = \frac{h}{3} \sum_{i=1}^{n/2} [f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})] - \frac{h^5}{90} \sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i),$$

onde  $\xi_i \in (x_{2i-2}, x_{2i})$ . Como ilustrado na Figura 7, em cada subintervalo  $[x_{2i-2}, x_{2i}]$ ,  $i = 0, \dots, n/2$ , aplicou-se a regra simples com base nos nós  $x_{2i-2}$ ,  $x_{2i-1}$ ,  $x_{2i}$ . Supusemos também que  $f \in C^4([a, b])$  para poder usar aquela expressão para o erro de integração. Notamos agora que

$$\frac{h}{3} \sum_{i=1}^{n/2} [f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})] = \frac{h}{3} \left[ f(x_0) + f(x_n) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) \right]$$

e que o erro de integração pela regra composta pode ser simplificado do seguinte modo:

$$-\frac{h^5}{90} \sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i) = -\frac{h^5}{180} n f^{(4)}(\xi) = -\frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

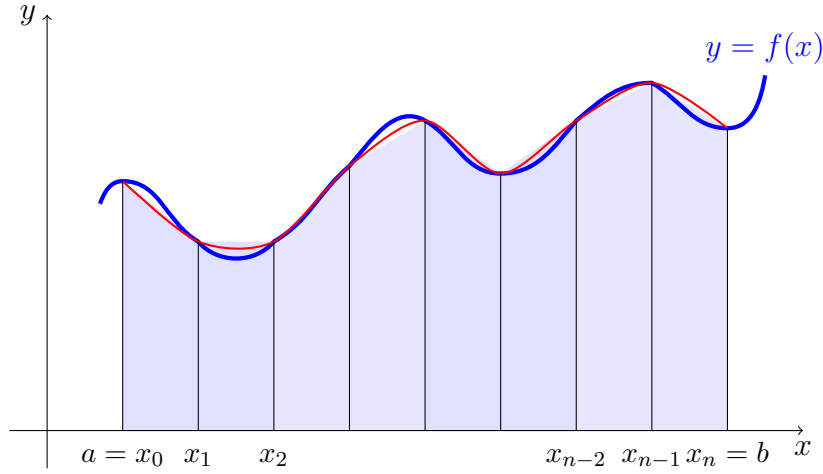


Figura 7: Regra de Simpson composta

Portanto, a fórmula  $S_n$  tem ordem de precisão (ou de convergência) igual a 4 e grau de exatidão igual a 3.

Em resumo, estas são as notações e fórmulas para a regra de Simpson composta:

$$S_n(f) = \frac{h}{3} \left[ f(x_0) + f(x_n) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) \right],$$

com  $h = \frac{b-a}{n}$  e  $x_i = a + ih$  ( $i = 0, \dots, n$ ) e, para  $f \in C^4([a, b])$ ,

$$E_n^S(f) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)^5}{180n^4} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

## 4 Recursos computacionais

Para terminar, fazemos uma breve referência a alguns recursos computacionais disponíveis para o cálculo numérico de integrais.

- MATHEMATICA

A função **NIntegrate** faz **integração numérica**.

O problema do Exemplo 3.3 pode ser resolvido (numericamente) do seguinte modo:

```
In[1] := 797.885 NIntegrate[Exp[-50(1.70-a)^2], {a, 1.80, 1.90}]
Out[1] := 27.181
```

- MATLAB

Como já foi referido, está disponível a função **integral** para fazer **integração numérica**.

Já aplicámos a função **integral** ao Exemplo 3.3, tendo obtido

```
>> 797.885*integral(@(a)exp(-50*(1.70-a).^2), 1.80, 1.90)
ans = 27.1810
```

A **regra dos trapézios** está implementada em **trapz** e **cumtrapz**.

- PYTHON

As funções **quad**, **trapz**, **simps**, ..., fazem **integração numérica**. Estão disponíveis no pacote **integrate** da biblioteca **scipy** (**scipy.integrate**).

## Referências

- [1] M. Atteia e M. Pradel, Elements d'Analyse Numérique, Cepadues-Editions, 1990.
- [2] R. Kress, Numerical Analysis, Springer-Verlag, 1998.
- [3] A. Quarteroni, R. Sacco e F. Saleri, Cálculo Científico com Matlab e Octave, Springer-Verlag, 2007 (traduzido por Adélia Sequeira).
- [4] F. Romeiras, Matemática Computacional, Apontamentos das aulas, 2008.