# Métodos Numéricos (M2039)

DM/FCUP – 2023/2024

Departamento de Matemática
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

# Capítulo 4

Integração numérica e derivação numérica

- Regras simples de integração numérica.
- Fórmulas do erro.
- Regras compostas: dos retângulos, dos trapézios e de Simpson.
- Derivação numérica.

Queremos calcular

$$I_f = \int_a^b f(x)dx$$

# Integração numérica

Queremos calcular

$$I_f = \int_a^b f(x)dx$$

Se for conhecida uma primitiva $\varphi(x)$ de $f(x)$ então

$$I_f = \varphi(b) - \varphi(a)$$

Queremos calcular

$$I_f = \int_a^b f(x)dx$$

Se for conhecida uma primitiva $\varphi(x)$ de $f(x)$ então

$$I_f = \varphi(b) - \varphi(a)$$

No entanto se $\varphi(x)$ não puder ser expressa em termos de funções elementares, não for conhecida ou tiver uma representação analítica muito complicada, ou se apenas se conhecer um conjunto discreto de valores de $f(x)$ no intervalo $[a,b]$, temos de calcular $I_f$ numéricamente.

Queremos calcular

$$I_f = \int_a^b f(x)dx$$

Se for conhecida uma primitiva $\varphi(x)$ de $f(x)$ então

$$I_f = \varphi(b) - \varphi(a)$$

No entanto se $\varphi(x)$ não puder ser expressa em termos de funções elementares, não for conhecida ou tiver uma representação analítica muito complicada, ou se apenas se conhecer um conjunto discreto de valores de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$, temos de calcular $I_f$ numéricamente.

A integração numérica consiste em substituir $f(x)$ por uma aproximação $F(x)$, cujo integral seja fácil de calcular e estimar $I_f$ por $I_F$:

$$I_f \approx I_F = \int_a^b F(x)dx$$

# Integração numérica

Podemos usar para função aproximada de $f$ o polinómio $P_n$ de grau $\leq n$ que interpola $f$ em $n+1$ pontos de abcissas distintas $x_0, x_1, \ldots, x_n$, de $[a, b]$.

$$f \approx P_n$$

Podemos usar para função aproximada de $f$ o polinómio $P_n$ de grau $\leq n$ que interpola $f$ em $n+1$ pontos de abcissas distintas $x_0, x_1, \ldots, x_n$, de $[a, b]$.

$$f \approx P_n$$

Então se $f(x) \in C^{n+1}[a, b]$

$$f(x) - P_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(c_x)\pi_{n+1}(x)$$

onde $c_x \in ]a, b[$ e $\pi_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_n)$, Podemos usar para função aproximada de $f$ o polinómio $P_n$ de grau $\leq n$ que interpola $f$ em $n+1$ pontos de abcissas distintas $x_0, x_1, \ldots, x_n$, de $[a,b]$.

$$f \approx P_n$$

Então se $f(x) \in C^{n+1}[a,b]$

$$f(x) - P_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(c_x)\pi_{n+1}(x)$$

onde $c_x \in ]a,b[$ e $\pi_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$,

e obtemos, integrando,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_n(x)dx + \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(c_x)\pi_{n+1}(x)dx$$

$$I_f = I_{P_n} + E_n$$

Na forma de Lagrange o polinómio interpolador $P_n$ escreve-se

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k l_k(x), \text{ onde } f_k = f(x_k), \; l_k(x) = \prod_{k \neq i = 0}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}$$

Na forma de Lagrange o polinómio interpolador $P_n$ escreve-se

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k l_k(x), \text{ onde } f_k = f(x_k), \ l_k(x) = \prod_{k \neq i = 0}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}$$

e então

$$I_{P_n} = \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f_k, \quad A_k = \int_a^b l_k(x)dx$$

# Integração numérica

Na forma de Lagrange o polinómio interpolador $P_n$ escreve-se

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k l_k(x), \text{ onde } f_k = f(x_k), \; l_k(x) = \prod_{k \neq i=0}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}$$

e então

$$I_{P_n} = \int_a^b P_n(x) dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f_k, \quad A_k = \int_a^b l_k(x) dx$$

Assim

- fixadas as abcissas $x_0, x_1, \ldots, x_n$ obtem-se a fórmula de integração numérica

$$I_f \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f_k$$

Na forma de Lagrange o polinómio interpolador $P_n$ escreve-se

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k l_k(x), \ \text{ onde } \ f_k = f(x_k), \ \ l_k(x) = \prod_{k \neq i = 0}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}$$

e então

$$I_{P_n} = \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f_k, \quad A_k = \int_a^b l_k(x)dx$$

Assim

- fixadas as abcissas $x_0, x_1, \ldots, x_n$ obtem-se a fórmula de integração numérica

$$I_f \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f_k$$

- podemos calcular um valor aproximado de $\int_a^b f(x)dx$, conhecendo apenas um conjunto de pontos de $f$, $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$

Na forma de Lagrange o polinómio interpolador $P_n$ escreve-se

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k l_k(x), \quad \text{onde} \quad f_k = f(x_k), \quad l_k(x) = \prod_{k \neq i=0}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}$$

e então

$$I_{P_n} = \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f_k, \quad A_k = \int_a^b l_k(x)dx$$

Assim

- fixadas as abcissas $x_0, x_1, \ldots, x_n$ obtem-se a fórmula de integração numérica

$$I_f \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f_k$$

- podemos calcular um valor aproximado de $\int_a^b f(x)dx$, conhecendo apenas um conjunto de pontos de $f$, $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$
- se $f$ for um polinómio de grau $\leq n$ então $f^{(n+1)} = 0$, e portanto $E_n = 0$, isto é, esta fórmula é exata em $\mathbb{P}_n$.

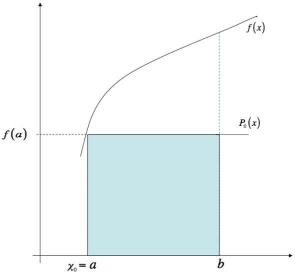
# Regras simples: Regra do retângulo

Substituir $f(x)$ por $P_0(x) = f(a)$ que interpola $f$ em $x_0$=a:

# Regras simples: Regra do retângulo

Substituir $f(x)$ por $P_0(x) = f(a)$ que interpola $f$ em $x_0$=a:

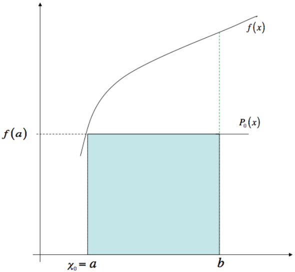
- $n = 0, \quad x_0 = a$



# Regras simples: Regra do retângulo

Substituir $f(x)$ por $P_0(x) = f(a)$ que interpola $f$ em $x_0$=a:

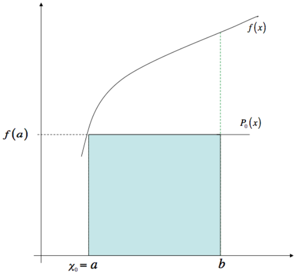
- $n = 0, \quad x_0 = a$




- $l_0(x) = 1 \longrightarrow A_0 = \int_a^b 1\,dx = (b-a)$

Substituir $f(x)$ por $P_0(x) = f(a)$ que interpola $f$ em $x_0$=a:

- $n = 0, \quad x_0 = a$




- $l_0(x) = 1 \longrightarrow A_0 = \int_a^b 1dx = (b-a)$

Então $\quad I_f = I_{P_0} + E_0 = A_0 f(a) + E_0 \quad$ e obtemos

- a aproximação $\quad I_f \approx A_0 f(a)$

$$\boxed{I_f \approx (b-a)f(a)}$$

- o erro que se comete

$$E_0 = \int_a^b \frac{1}{1!} f'(c_x)(x-a)dx$$

- o erro que se comete

$$E_0 = \int_a^b \frac{1}{1!} f'(c_x)(x-a)dx$$

Se $f'(x)$ for contínua, como $(x-a)$ mantém sinal constante em $[a,b]$ então

$$\exists t \in ]a,b[ : \; E_0 = f'(t)\int_a^b (x-a)dx = f'(t)\frac{(b-a)^2}{2}$$

- o erro que se comete

$$E_0 = \int_a^b \frac{1}{1!} f'(c_x)(x-a)dx$$

Se $f'(x)$ for contínua, como $(x-a)$ mantém sinal constante em $[a,b]$ então

$$\exists t \in ]a,b[ \, : \; E_0 = f'(t) \int_a^b (x-a)dx = f'(t)\frac{(b-a)^2}{2}$$

$$\boxed{E_0 = f'(t)\frac{(b-a)^2}{2}, \;\; a < t < b}$$

# Regras simples: Regra do retângulo

- o erro que se comete
$$E_0 = \int_a^b \frac{1}{1!} f'(c_x)(x-a)dx$$
Se $f'(x)$ for contínua, como $(x-a)$ mantém sinal constante em $[a,b]$ então
$\exists t \in ]a,b[ : \; E_0 = f'(t) \int_a^b (x-a)dx = f'(t) \frac{(b-a)^2}{2}$

$$\boxed{E_0 = f'(t) \frac{(b-a)^2}{2}, \quad a < t < b}$$

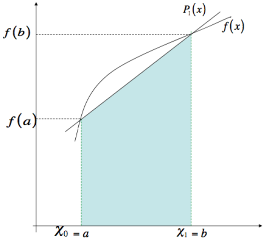
- atenção! obtemos outras fórmulas se usarmos outro valor para $x_0 \in [a,b]$

- o erro que se comete
$$E_0 = \int_a^b \frac{1}{1!} f'(c_x)(x-a)dx$$
Se $f'(x)$ for contínua, como $(x-a)$ mantém sinal constante em $[a,b]$ então
$$\exists t \in ]a,b[ : \; E_0 = f'(t) \int_a^b (x-a)dx = f'(t)\frac{(b-a)^2}{2}$$
$$\boxed{E_0 = f'(t)\frac{(b-a)^2}{2}, \quad a < t < b}$$
- atenção! obtemos outras fórmulas se usarmos outro valor para $x_0 \in [a,b]$

Teorema do valor médio para integrais:
Se $h(x)$ for contínua em $[a,b]$ e $g(x)$ mantiver sinal constante em $[a,b]$ e for integrável em $[a,b]$ então existe $\xi \in ]a,b[$ tal que $\int_a^b h(x)g(x)dx = h(\xi)\int_a^b g(x)dx$

Substituir $f(x)$ pela reta $P_1(x)$ que passa em $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$

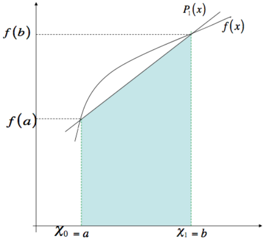
- $n = 1, \quad x_0 = a, \quad x_1 = b$



# Regras simples: Regra do trapézio

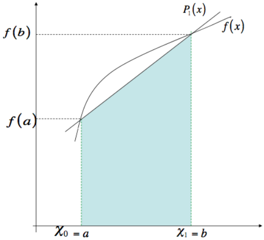
Substituir $f(x)$ pela reta $P_1(x)$ que passa em $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$

- $n = 1, \quad x_0 = a, \quad x_1 = b$




- $l_0(x) = \dfrac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \dfrac{x - b}{a - b} \longrightarrow A_0 = \displaystyle\int_a^b l_0(x)dx = \dfrac{b - a}{2}$

Substituir $f(x)$ pela reta $P_1(x)$ que passa em $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$




- $n = 1, \quad x_0 = a, \quad x_1 = b$

- $l_0(x) = \dfrac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \dfrac{x - b}{a - b} \longrightarrow A_0 = \displaystyle\int_a^b l_0(x)dx = \dfrac{b-a}{2}$
- $A_1 = \displaystyle\int_a^b l_1(x)dx = \dfrac{b-a}{2}$

Então $\quad I_f = I_{P_1} + E_1 = \left(A_0 f_0 + A_1 f_1\right) + E_1 \quad$ e obtemos

# Regras simples: Regra do trapézio

Então $I_f = I_{P_1} + E_1 = \left(A_0 f_0 + A_1 f_1\right) + E_1$ e obtemos

- a aproximação $I_f \approx A_0 f_0 + A_1 f_1$

$$\boxed{I_f \approx \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))}$$

# Regras simples: Regra do trapézio

Então $\quad I_f = I_{P_1} + E_1 = \big(A_0 f_0 + A_1 f_1\big) + E_1 \quad$ e obtemos

- a aproximação $\quad I_f \approx A_0 f_0 + A_1 f_1$

$$\boxed{I_f \approx \frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big)}$$

- o erro

$$E_1 = \frac{1}{2}\int_a^b f''(c_x)(x-a)(x-b)dx$$

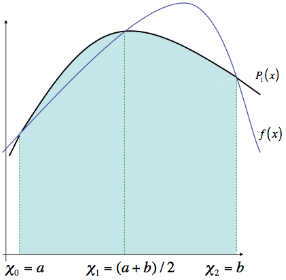
se $f''(x)$ for contínua em $[a,b]$, como $(x-a)(x-b)$ não muda de sinal para $x \in [a,b]$ então

$$\boxed{E_1 = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(t), \quad a < t < b}$$

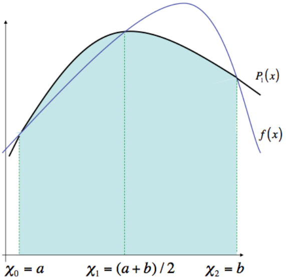
# Regras simples: Regra de Simpson

Substituir $f(x)$ pela parábola $P_2(x)$ que interpola $f$ nos pontos de abcissas

- $n = 2, \quad x_0 = a, \quad x_1 = \frac{a+b}{2}, \quad x_2 = b$



Substituir $f(x)$ pela parábola $P_2(x)$ que interpola $f$ nos pontos de abcissas




- $n = 2, \quad x_0 = a, \quad x_1 = \frac{a+b}{2}, \quad x_2 = b$

- $l_0(x) = \dfrac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \longrightarrow A_0 = \displaystyle\int_a^b l_0(x)dx = \dfrac{b-a}{6}$
- $A_1 = \dfrac{2}{3}(b-a), \;\; A_2 = A_0$

# Regras simples: Regra de Simpson

Então $I_f = I_{P_2} + E_2 = (A_0 f_0 + A_1 f_1 + A_2 f_2) + E_2$ e obtemos

- a aproximação

$$\boxed{I_f \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)}$$

# Regras simples: Regra de Simpson

Então $\quad I_f = I_{P_2} + E_2 = (A_0 f_0 + A_1 f_1 + A_2 f_2) + E_2 \quad$ e obtemos

- a aproximação

$$\boxed{I_f \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)}$$

- o erro

$$\boxed{E_2 = -\frac{\left(\frac{b-a}{2}\right)^5}{90} f^{(4)}(t), \quad a < t < b}$$

Então $I_f = I_{P_2} + E_2 = (A_0 f_0 + A_1 f_1 + A_2 f_2) + E_2$ e obtemos

- a aproximação

$$\boxed{I_f \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)}$$

- o erro

$$\boxed{E_2 = -\frac{\left(\frac{b-a}{2}\right)^5}{90} f^{(4)}(t), \quad a < t < b}$$

Na demonstração da fórmula do erro não se pode usar o teorema do valor médio para integrais uma vez que $(x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)$ muda de sinal em $[a,b]$.
Usando o facto de $\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)dx = 0$ chega-se ao resultado, que mostra que a regra de Simpson é exacta em $\mathbb{P}_3$.

# Regras simples: Exemplo

Calcular $I = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx$

$$f(x) = \frac{1}{1+x}, \quad a = 0, \quad b = 1, \quad \text{valor exato: } \; I = \ln(2) = 0.6931471806\ldots$$

- regra do retângulo (exercício)

# Regras simples: Exemplo

Calcular $I = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx$

$$f(x) = \frac{1}{1+x}, \quad a = 0, \quad b = 1, \quad \text{valor exato: } \; I = \ln(2) = 0.6931471806\ldots$$

- regra do retângulo (exercício)
- regra do trapézio

  $I \approx I_1 = \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) = 0.75, \qquad |I - I_1| = 0.056\ldots.$

  $f''(x) = 2/(1+x)^3, \max_{0 \le x \le 1} |f''(x)| = 2, \longrightarrow |E_1| \le \frac{1}{12} \times 2 \le 1.7 \times 10^{-1}$

  Logo, $\quad I = 0.75 \pm 1.7 \times 10^{-1}$

# Regras simples: Exemplo

Calcular $I = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx$

$$f(x) = \frac{1}{1+x}, \quad a = 0, \quad b = 1, \quad \text{valor exato: } \; I = \ln(2) = 0.6931471806\ldots$$

- regra do retângulo (exercício)
- regra do trapézio

  $I \approx I_1 = \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) = 0.75, \qquad |I - I_1| = 0.056\ldots.$

  $f''(x) = 2/(1+x)^3, \max\limits_{0 \leq x \leq 1} |f''(x)| = 2, \longrightarrow |E_1| \leq \frac{1}{12} \times 2 \leq 1.7 \times 10^{-1}$

  Logo, $\quad I = 0.75 \pm 1.7 \times 10^{-1}$
- regra de Simpson

  $I \approx I_2 = \frac{1}{6}(f(0) + 4f(0.5) + f(1)) = 0.694444444\ldots, \qquad |I - I_2| = 0.0012\ldots.$

  $f^{(4)}(x) = 24/(1+x)^5, \max\limits_{0 \leq x \leq 1} |f^{(4)}| = 24, \longrightarrow |E_2| \leq \frac{0.5^5}{90} \times 24 \leq 8.4 \times 10^{-3}$

  Logo, $\quad I = 0.6944 \pm 8.4 \times 10^{-3}$

# Regras compostas

Como melhorar a aproximação do valor do integral?

# Regras compostas

Como melhorar a aproximação do valor do integral?

- aumentar o grau $n$ do polinómio interpolador $P_n$ que aproxima a função $f(x)$, obtendo novas fórmulas de integração numérica simples.

# Regras compostas

Como melhorar a aproximação do valor do integral?

- aumentar o grau $n$ do polinómio interpolador $P_n$ que aproxima a função $f(x)$, obtendo novas fórmulas de integração numérica simples.
- dividir o intervalo de integração em vários subintervalos e aplicar uma regra simples em cada um dos subintervalos, obtendo fórmulas compostas.

Como melhorar a aproximação do valor do integral?

- aumentar o grau $n$ do polinómio interpolador $P_n$ que aproxima a função $f(x)$, obtendo novas fórmulas de integração numérica simples.
- dividir o intervalo de integração em vários subintervalos e aplicar uma regra simples em cada um dos subintervalos, obtendo fórmulas compostas.

Consideremos uma partição do intervalo $[a,b]$ em $n$ subintervalos de igual amplitude $h=(b-a)/n$, definidos pelas abcissas $x_i = a+ih, \ \ i=0,\ldots,n$.

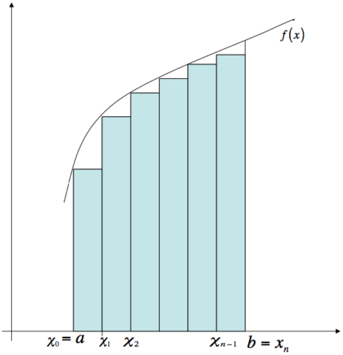
Então

$$I_f = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx$$

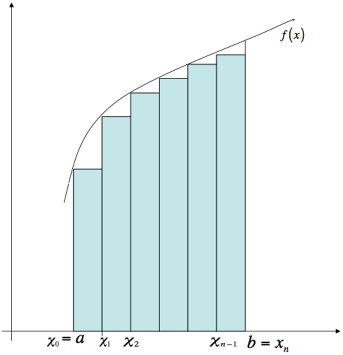
e aplicamos uma das regras simples ao cálculo de $\displaystyle\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx, \ \ i=1,\ldots,n.$

# Regra dos retângulos

$$
\begin{aligned}
I_f = \int_a^b f(x)dx &= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \\
&\approx \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) f(x_{i-1}) \\
&= \sum_{i=1}^{n} h f(x_{i-1}) \\
&= h \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1}) = R_n
\end{aligned}
$$



$$
\begin{aligned}
I_f = \int_a^b f(x)dx &= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \\
&\approx \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) f(x_{i-1}) \\
&= \sum_{i=1}^{n} h f(x_{i-1}) \\
&= h \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1}) = R_n
\end{aligned}
$$




$R_n$ é o valor aproximado do integral $I_f$ quando se considera uma partição de $[a, b]$ em $n$ subintervalos de igual amplitude e se aplica a regra simples do retângulo ao integral em cada um dos subintervalos.

O erro total cometido é dado por

$$E_n^R = \sum_{i=1}^{n} \frac{h^2}{2} f'(t_i) = \frac{h^2}{2} \sum_{i=1}^{n} f'(t_i) = (*), \quad x_{i-1} < t_i < x_i$$

# Regra dos retângulos

O erro total cometido é dado por

$$E_n^R = \sum_{i=1}^{n} \frac{h^2}{2} f'(t_i) = \frac{h^2}{2} \sum_{i=1}^{n} f'(t_i) = (*), \quad x_{i-1} < t_i < x_i$$

e, se $f'$ é contínua, $\exists t \in ]a, b[: \; \dfrac{\sum_{i=1}^{n} f'(t_i)}{n} = f'(t)$

O erro total cometido é dado por

$$E_n^R = \sum_{i=1}^{n} \frac{h^2}{2} f'(t_i) = \frac{h^2}{2} \sum_{i=1}^{n} f'(t_i) = (*), \quad x_{i-1} < t_i < x_i$$

e, se $f'$ é contínua, $\quad \exists t \in ]a,b[ : \; \frac{\sum_{i=1}^{n} f'(t_i)}{n} = f'(t)$

e então

$$(*) = \frac{h^2}{2}\, n\, f'(t) = \frac{b-a}{2}\, h\, f'(t), \quad a < t < b,$$

uma vez que $nh = b - a$.

# Regra dos retângulos

$$\boxed{I_f \approx R_n = \; h\sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1})}$$

$$\boxed{E_n^R = \frac{b-a}{2}\, h\, f'(t), \quad a < t < b}$$

# Regra dos retângulos

$$\boxed{I_f \approx R_n = \; h \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1})}$$

$$\boxed{E_n^R = \frac{b-a}{2}\, h\, f'(t), \quad a < t < b}$$

- Para calcular um valor aproximado de $I_f$, fixamos um valor de $n$ e calculamos $R_n$. O erro cometido é majorado por

$$|E_n^R| \leq \frac{b-a}{2} \times h \times M, \quad \text{onde} \quad M = \max_{a \leq x \leq b} |f'(x)|$$

# Regra dos retângulos

$$\boxed{I_f \approx R_n = \ h\sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1})}$$

$$\boxed{E_n^R = \frac{b-a}{2}\, h\, f'(t), \quad a < t < b}$$

- Para calcular um valor aproximado de $I_f$, fixamos um valor de $n$ e calculamos $R_n$. O erro cometido é majorado por

$$|E_n^R| \leq \frac{b-a}{2} \times h \times M, \quad \text{onde} \quad M = \max_{a \leq x \leq b} |f'(x)|$$

- Para calcular um valor aproximado de $I_f$ com erro absoluto $\leq \varepsilon$, basta determinar $n$ tal que $|E_n^R| \leq \varepsilon$ e calcular $R_n$.

# Regra dos retângulos

$$\boxed{I_f \approx R_n = \; h \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1})}$$

$$\boxed{E_n^R = \frac{b-a}{2}\, h\, f'(t), \quad a < t < b}$$

- Para calcular um valor aproximado de $I_f$, fixamos um valor de $n$ e calculamos $R_n$. O erro cometido é majorado por

$$|E_n^R| \leq \frac{b-a}{2} \times h \times M, \quad \text{onde} \quad M = \max_{a \leq x \leq b} |f'(x)|$$

- Para calcular um valor aproximado de $I_f$ com erro absoluto $\leq \varepsilon$, basta determinar $n$ tal que $|E_n^R| \leq \varepsilon$ e calcular $R_n$. O número de casas decimais a deixar no resultado fica determinado pelo erro $|E_n^R|$ (ou pelo número de casas decimais dos valores da função no conjunto de pontos).

Valor aproximado do integral:

$$
\begin{aligned}
I_f &= \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{2}\left(f(x_{i-1}) + f(x_i)\right) \\
&\approx \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\right) \\
&= \boxed{\frac{h}{2}\left(f(a) + f(b)\right) + h\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) = T_n}
\end{aligned}
$$

# Regra dos trapézios

Valor aproximado do integral:

$$I_f = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i))$$

$$\approx \frac{h}{2}(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n))$$

$$= \boxed{\frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + h\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) = T_n}$$

Erro cometido:

$$E_n^T = \sum_{i=1}^{n} -\frac{(x_i - x_{i-1})^3}{12} f''(t_i) = \sum_{i=1}^{n} -\frac{h^3}{12} f''(t_i), \quad x_{i-1} < t_i < x_i$$

$$= -\frac{h^3}{12}\, n\, f''(t), \quad a < t < b, \quad \text{se } f'' \text{ for contínua}$$

$$\boxed{E_n^T = -\frac{h^2}{12}(b-a)\, f''(t), \quad a < t < b}$$

# Regra de Simpson

$$
\begin{aligned}
I_f = \int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx \\
\approx \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) + \frac{h}{3}(f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)) + \cdots + \\
+ \frac{h}{3}(f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)) = S_n
\end{aligned}
$$

uma vez que

$$
\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{x_2 - x_0}{6}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) = \frac{2h}{6}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))
$$

# Regra de Simpson

$$I_f = \int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx$$

$$\approx \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) + \frac{h}{3}(f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)) + \cdots +$$

$$+ \frac{h}{3}(f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)) = S_n$$

uma vez que

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{x_2 - x_0}{6}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) = \frac{2h}{6}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$$

- Valor aproximado do integral:

$$\boxed{S_n = \frac{h}{3}(f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(b))}$$

# Regra de Simpson

$$I_f = \int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx$$

$$\approx \frac{h}{3}(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)) + \frac{h}{3}(f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)) + \cdots +$$

$$+\frac{h}{3}(f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)) = S_n$$

uma vez que

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{x_2-x_0}{6}(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)) = \frac{2h}{6}(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2))$$

- Valor aproximado do integral:

$$\boxed{S_n = \frac{h}{3}(f(a)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+2f(x_4)+\cdots+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(b))}$$

- Erro cometido:

$$\boxed{E_n^S = -\frac{h^4}{180}(b-a)\, f^4(t), \quad a < t < b}$$

# Exemplo

Calcular $I = \int_0^1 \frac{1}{1+x}\,dx$ usando as regras compostas

valor exato: $I = \ln(2) = 0.6931471806\ldots$

| $n$ | retângulos | Trapézios | Simpson |
|---|---|---|---|
| 2 | 0.8333333335 | 0.7083333334 | 0.6944444445 |
| 4 | 0.7595238095 | 0.6970238095 | 0.6932359681 |
| 8 | 0.7253718504 | 0.6941218504 | 0.6931545307 |
| 16 | 0.7090162025 | 0.6933912025 | 0.6931476527 |
| 32 | 0.7010207081 | 0.6932082081 | 0.6931472104 |
| 64 | 0.6970686889 | 0.6931624389 | 0.6931471823 |

Queremos calcular valores aproximados de $f'(x)$.

Da definição de derivada

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

resulta imediatamente a aproximação

$$f'(x) \approx D_h f(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (*)$$

válida para valores de $h$ pequenos.

A uma aproximação deste tipo chama-se derivada numérica de $f(x)$ com passo $h$.

# Exemplo

Exemplo: Usar $D_h f(x)$ para aproximar a derivada de $f(x) = \cos(x)$ em $x = \pi/6$

valor exato: $f'(\pi/6) = -0.5$

| $h$ | $D_h f$ | $\lvert f'(\pi/6) - D_h f\rvert$ | razão |
|---|---|---|---|
| 0.1 | -0.54243 | 0.04243 | |
| 0.05 | -0.52144 | 0.02144 | 1.98 |
| 0.025 | -0.51077 | 0.01077 | 1.99 |
| 0.0125 | -0.50540 | 0.00540 | 1.99 |
| 0.00625 | -0.50270 | 0.00270 | 2.00 |
| 0.003125 | -0.50135 | 0.00135 | 2.00 |

Vemos que o erro é proporcional a $h$. O erro passa a metade quando $h$ passa a $h/2$.

# Erro da fórmula $D_h f$

Determinar o erro cometido naquela aproximação. Desenvolvendo f(x) em série

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(c), \quad x < c < x+h$$

e substituindo em $(*)$ obtemos

$$\begin{aligned} D_h f(x) &= \frac{1}{h}\left( f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(c) - f(x) \right) \\ &= f'(x) + \frac{h}{2} f''(c) \end{aligned}$$

donde

$$E_T = f'(x) - D_h f(x) = -\frac{f''(c)}{2} h$$

isto é, o erro cometido é $O(h)$. O erro absoluto $|E_T|$ é majorado por

$$|E_T| = |f'(x) - D_h f(x)| \leq \frac{Mh}{2}, \ \text{onde} \ M = \max_{x \leq c \leq x+h} |f''(c)|$$

Exercício: Deduzir as seguintes fórmulas de derivação numérica

- $f'(x) \approx \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h}, \quad E_T = \dfrac{h}{2} f''(c), \;\; x - h < c < x$

- regra do ponto médio ou das diferenças centrais

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \quad E_T = -\frac{h^2}{6} f'''(c), \;\; x - h < c < x + h$$

- $f''(x) \approx \dfrac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}, \quad E_T = -\dfrac{h^2}{12} f^{(4)}(c), \;\; x - h < c < x + h$

Seja $p_n(x)$ o polinómio de grau $\leq n$ que interpola $f(x)$ em $n+1$ pontos $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Podemos estimar $f'(x)$ num ponto $x = t$ por

$$f'(t) \approx p_n'(t)$$

Por exemplo fazer

$$n = 2, \quad x_1 = t, \quad x_0 = x_1 - h, \quad x_2 = x_1 + h$$

$$p_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$

e vem

$$p_2'(x) = \left(\frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2}\right) f(x_0) + \left(\frac{2x - x_0 - x_2}{-h^2}\right) f(x_1) + \left(\frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2}\right) f(x_2)$$

e avaliando em $x = x_1$

$$p_2'(x_1) = \left(\frac{x_1 - x_2}{2h^2}\right) f(x_0) + \left(\frac{2x_1 - x_0 - x_2}{-h^2}\right) f(x_1) + \left(\frac{x_1 - x_0}{2h^2}\right) f(x_2)$$

$$= \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h}$$

Então obtemos a fórmula das diferenças centrais

$$f'(t) \approx \frac{f(t+h) - f(t-h)}{2h}$$

a que está associado um erro $O(h^2)$

$$E_T = -\frac{h^2}{6} f'''(c), \quad t-h < c < t+h$$

O método dos coeficientes indeterminados permite obter fórmulas para derivação, interpolação e integração numéricas.

Exemplo: Para estimar $f''(x)$ em $x = t$ usar

$$f''(t) \approx D_h^{(2)} f(t) \equiv Af(t+h) + Bf(t) + Cf(t-h)$$

$$?\ A, \quad B, \quad C$$

Desenvolvendo, se possível,

$$f(t-h) \approx f(t) - hf'(t) + \frac{h^2}{2} f''(t) - \frac{h^3}{6} f'''(t) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(t)$$

$$f(t+h) \approx f(t) + hf'(t) + \frac{h^2}{2} f''(t) + \frac{h^3}{6} f'''(t) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(t)$$

e substituindo em $D_h^{(2)} f(t)$ vem

$$D_h^{(2)} f(t) \approx (A+B+C)f(t) + h(A-C)f'(t) + \frac{h^2}{2}(A+C)f''(t)$$

$$+\frac{h^3}{6}(A-C)f'''(t) + \frac{h^4}{24}(A+C)f^{(4)}(t)$$

Para que $D_h^{(2)} f(t)$ aproxime $f''(t)$ para funções arbitrárias é necessário que

$$\begin{cases} A+B+C=0 \\ h(A-C)=0 \\ \dfrac{h^2}{2}(A+C)=1 \end{cases}$$

que tem solução

$$A=C=\frac{1}{h^2}, \quad B=-\frac{2}{h^2}$$

e obtemos a fórmula

$$f''(t) \approx D_h^{(2)} f(t) = \frac{f(t+h) - 2f(t) + f(t-h)}{h^2}$$

a que está associado um erro $O(h^2)$, pois

$$D_h^{(2)} f(t) \approx f''(t) + \frac{h^2}{12} f^{(4)}(t)$$

uma vez que $A = C$ e $\dfrac{h^2}{2}(A+C) = 1$.