# Capítulo 5

# Derivação e integração numérica

## 5.1 Breve referência histórica

As técnicas de derivação e integração numérica, da forma como as iremos estudar neste capítulo, têm a mesma origem da interpolação. No entanto, temos que salientar alguns matemáticos que se destacaram especificamente nesta área.

As técnicas de integração, tal com as conhecemos hoje, tiveram a sua origem em Bonaventura Cavalieri (1598-1647), cerca de 1639, que descobriu geometricamente a chamada regra de Simpson (que é também a segunda fórmula de Newton-Cotes) e que consiste em aproximar o valor do integral de uma determinada função num intervalo palo integral do seu polinómio interpolador do segundo grau.

Outros matemáticos do séc. XVII que trabalharam nesta área foram James Gregory (1659-1708) (que também conhecia a regra de Simpson), que deduziu uma nova regra de integração designada actualmente por regra de Gregory, e Isaac Newton (1643-1727) pelas razões já apresentadas para a interpolação.

De entre os matemáticos do séc. XVIII a destacar pela sua contribuição nesta área salientamos Thomas Simpson (1710-1761), que apresentou o seu trabalho em 1743, Roger Cotes (1681-1761) e Carl Friedrich Gauss (1777-1855) que descobriu as famosas fórmulas de quadratura com o seu nome.

## 5.2 Derivação numérica

Acontece frequentemente sermos confrontados com a necessidade de determinar valores da derivada de uma função num conjunto de pontos conhecendo o valor da função apenas nesses pontos. Na impossibilidade de obter esses valores de forma exacta, vamos considerar a sua aproximação através do valor da derivada do polinómio interpolador da função nos referidos pontos.

### 5.2.1 Aproximação da primeira derivada

Seja $f \in C^{n+1}([a,b])$ conhecida num conjunto de pontos da partição uniforme

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b, \tag{5.1}$$

com $x_i - x_{i-1} = h$, $i = 1, \ldots, n$. Queremos aproximar a derivada de $f$ num dos pontos $x_k$, $k \in \{0, 1, \ldots, n\}$, da partição (5.1). Usando a fórmula interpoladora de Lagrange temos que, para $x \in (a, b)$,

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x),$$

sendo $l_i$, $i = 0, \ldots, n$, os polinómios de Lagrange dados por (4.4), $w$ a função dada por (4.6) e $\xi \in (a, b)$. Derivando esta expressão obtemos

$$f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x) + \left( \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x) \right)'.$$

Podemos, assim, considerar a aproximação

$$f'(x) \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x),$$

com erro dado por

$$e(x) := \left( \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x) \right)' = \frac{\left( f^{(n+1)}(\xi) \right)'}{(n+1)!} w(x) + \frac{w'(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$$

Ora, como se sabe,

$$w'(x) = \sum_{l=0}^{n-1} \prod_{j=0, j \neq l}^{n-1} (x - x_j);$$

a dificuldade reside no facto de não sabermos como calcular $\left( f^{(n+1)}(\xi) \right)'$ e assim não conseguimos estimar o erro cometido. No entanto, para um ponto $x = x_k$, $k \in \{0, 1, \ldots, n\}$, da partição (5.1) temos que $w(x_k) = 0$ e como tal

$$f'(x_k) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w'(x_k), \tag{5.2}$$

Como $x_k - x_j = (k - j)h$ temos que

$$f'(x_k) \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_k + (i - k)h) l_i'(x_k), \tag{5.3}$$

sendo o erro cometido dado por

$$e(x_k) = h^n \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \sum_{l=0}^{n-1} \prod_{j=0, j \neq l}^{n-1} (k - j).$$

Podemos então concluir que

$$|e(x_k)| \leq C h^n,$$

onde $C$ é um valor que não depende de $h$. Por este facto dizemos que a fórmula usada para aproximar a derivada da função é de ordem $n$. É também usual usar a notação $e(x_k) = \mathcal{O}(h^n)$.

**Exercício 5.2.1** Atendendo a que, pela fórmula interpoladora de Newton das diferenças progressivas, o polinómio interpolador de $f$ nos pontos da partição (5.1) é dado por

$$f(x_0) + \sum_{i=1}^{n} \frac{\Delta^i f(x_0)}{i!h^i} \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j),$$

prove que a fórmula (5.3) pode ser escrito na forma

$$f'(x_k) \approx \sum_{i=0}^{n} \frac{\Delta^i f(x_0)}{i!h} \left( \sum_{l=0}^{i-1} \prod_{j=0, j\neq l}^{i-1} (k - j) \right). \qquad (5.4)$$

**Exercício 5.2.2** Elabore um algoritmo que permita obter fórmulas para aproximar a primeira derivada de uma função num ponto com qualquer número de pontos.

A fórmula de diferenças finitas (5.4), convenhamos, não é nada simpática. Vamos particulariza-la deduzindo vários fórmulas de diferenças finitas para aproximar a derivada de uma função $f$.

### Fórmulas com dois pontos

Temos que, para $x \in [x_k, x_{k+1}]$,

$$f(x) = f(x_k) + \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{h}(x - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_k)(x - x_{k+1}), \qquad \xi \in (x_k, x_{k+1}).$$

Derivando sai que

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{h} - h\frac{f''(\xi)}{2}, \qquad \xi \in (x_k, x_{k+1}),$$

e

$$f'(x_{k+1}) = \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{h} + h\frac{f''(\xi)}{2} \qquad \xi \in (x_k, x_{k+1}).$$

Obtemos assim duas fórmulas de diferenças finitas de primeira ordem para aproximar a primeira derivada. A

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{h}$$

é usual chamar fórmula de diferenças progressivas (ou *forward* ou *forwind*) e a

$$f'(x_k) = \frac{f(x_{k-1}) - f(x_k)}{h}$$

costuma chamar-se fórmula de diferenças regressivas (ou *upward* ou *upwind*).

### Fórmulas com três pontos

Para obter fórmulas mais precisas para aproximar a primeira derivada de uma função, podemos pensar em aumentar o número de pontos da interpolação. No próximo exercício apresentam-se as fórmulas de diferenças progressivas, centradas e regressivas com três pontos.

**Exercício 5.2.3** Prove que:

1. $f'(x_k) = \dfrac{1}{2h}\left[-3f(x_k) + 4f(x_{k+1}) - f(x_{k+2})\right] + \dfrac{h^2}{3}f'''(\xi_0)$;
2. $f'(x_k) = \dfrac{1}{2h}\left[-f(x_{k-1}) + f(x_{k+1})\right] - \dfrac{h^2}{6}f'''(\xi_1)$;
3. $f'(x_k) = \dfrac{1}{2h}\left[f(x_{k-2}) - 4f(x_{k-1}) + 3f(x_k)\right] + \dfrac{h^2}{3}f'''(\xi_2)$;

**Resolução:** Vamos só deduzir a segunda fórmula. Assim, temos que

$$f(x) = f(x_{k-1}) + \tfrac{\Delta f(x_{k-1})}{h}(x - x_{k-1}) + \tfrac{\Delta^2 f(x_{k-1})}{2h^2}(x - x_{k-1})(x - x_k)$$

$$+\tfrac{f'''(\xi)}{6}(x - x_{k-1})(x - x_k)(x - x_{k+1}), \qquad \xi_1 \in (x_{k-1}, x_{k+1}).$$

Derivando sai que

$$\begin{aligned} f'(x_k) &= \tfrac{\Delta f(x_{k-1})}{h} + \tfrac{\Delta^2 f(x_{k-1})}{2h^2}[(x_k - x_{k-1}) + (x_k - x_k)] \\ &\quad +\tfrac{f'''(\xi_1)}{6}(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}), \qquad \xi_1 \in (x_{k-1}, x_{k+1}). \end{aligned}$$

Atendendo a que

| $x_i$ | $f(x_i)$ | $\Delta f(x_i)$ | $\Delta^2 f(x_i)$ |
|---|---|---|---|
| $x_{k-1}$ | $f(x_{k-1})$ | | |
| | | $f(x_k) - f(x_{k-1})$ | |
| $x_k$ | $f(x_k)$ | | $f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1})$ |
| | | $f(x_{k+1}) - f(x_k)$ | |
| $x_{k+1}$ | $f(x_{k+1})$ | | |

temos

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{h} + \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1})}{2h} - h^2\frac{f'''(\xi_1)}{6},$$

com $\xi_1 \in (x_{k-1}, x_{k+1})$, ou seja

$$f'(x_k) = \frac{1}{2h}[-f(x_{k-1}) + f(x_{k-1})] - h^2\frac{f'''(\xi)}{6}, \qquad \xi_1 \in (x_{k-1}, x_{k+1}).$$

**Exercício 5.2.4** Considere os seguintes valores da função $f(x) = xe^x$:

| $x_i$ | 1.8 | 1.9 | 2.0 | 2.1 | 2.2 |
|---|---|---|---|---|---|
| $f(x_i)$ | 10.889365 | 12.703199 | 14.778112 | 17.148957 | 19.855030 |

Aproxime o valor de $f'(2.0) = 22.167168$ usando as fórmulas de diferenças finitas dadas no exercício anterior e compare os erros cometidos.

**Resolução:** Vamos considerar as três fórmulas separadamente.

- Fórmula progressiva de segunda ordem com $h = 0.1$.

$$f'(2.0) \approx \frac{1}{0.2}[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.032310.$$

  O erro cometido é aproximadamente $1.35 \times 10^{-1}$.

- Fórmula regressiva de segunda ordem com $h = 0.1$.

$$f'(2.0) \approx \frac{1}{0.2}[f(1.8) - 4f(1.9) + 3f(2.0)] = 22.054525.$$

  O erro cometido é aproximadamente $1.13 \times 10^{-1}$.

- Fórmula centrada de segunda ordem com $h = 0.1$.

$$f'(2.0) \approx \frac{1}{0.2}[f(2.1) - f(1.9)] = 22.228790.$$

  O erro cometido é aproximadamente $-6.16 \times 10^{-2}$.

Note-se que o erro cometido quando se usa a fórmula de diferenças centradas é aproximadamente metade do erro cometido com as outras fórmulas, o que confirma o resultado do exercício anterior.

### 5.2.2 Aproximação da segunda derivada. Algumas fórmulas

Seja $f \in C^{n+1}([a,b])$ conhecida num conjunto de pontos da partição uniforme (5.1), com $x_i - x_{i-1} = h$, $i = 1, \ldots, n$. Queremos aproximar a segunda derivada de $f$ num dos pontos $x_k$, $k \in \{0, 1, \ldots, n\}$, da partição (5.1). Poderíamos, tal como para a primeira derivada, usar o polinómio interpolador na dedução das fórmulas para a segunda derivada. A obtenção de estimativas para o erro é, no entanto, mais complicada. Um processo alternativo para a dedução das fórmulas de derivação (e respectivo erro) faz uso da série de Taylor da função.

Desenvolvendo $f$ em série de Taylor em torno do ponto $x_k$ temos:

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + f'(x_k)h + \frac{h^2}{2}f''(x_k) + \frac{h^3}{6}f'''(x_k) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_1), \qquad \xi_1 \in (x_k, x_{k+1});$$

$$f(x_{k-1}) = f(x_k) - f'(x_k)h + \frac{h^2}{2}f''(x_k) - \frac{h^3}{6}f'''(x_k) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_2), \qquad \xi_2 \in (x_{k-1}, x_k).$$

Se adicionarmos estas duas expressões obtemos

$$f''(x_k) = \frac{1}{h^2}[f(x_{k-1} - 2f(x_k) + f(x_{k+1})] - \frac{h^2}{24}(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)).$$

Admitindo que $f^{(4)}$ é contínua em $[x_{k-1}, x_{k+1}]$, o Teorema de Bolzano permite concluir que existe um $\xi \in (x_{k-1}, x_{k+1})$ tal que

$$f^{(4)}(\xi) = \frac{1}{2}(f(\xi_1) + f(\xi_2)).$$

Assim

$$f''(x_k) = \frac{1}{h^2}[f(x_{k-1}) - 2f(x_k) + f(x_{k+1})] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi). \tag{5.5}$$

Esta fórmula é conhecida como fórmula de diferenças centradas de segunda ordem para aproximar a segunda derivada. Por um raciocínio semelhante poderiam ser obtidas outras fórmulas de diferenças finitas para aproximar a segunda derivada, não só centradas como também progressivas e regressivas.

**Exercício 5.2.5** Prove que

$$f''(x_k) = \frac{1}{12h^2}[-f(x_{k-2}) + 16f(x_{k-1}) - 30f(x_k) + 16f(x_{k+1}) - f(x_{k+2})] + \frac{h^4}{90}f^{(4)}(\xi),$$

com $\xi \in (x_{k-2}, x_{k+2})$.

**Exercício 5.2.6** Considere, de novo, os valores da função $f(x) = xe^x$ dados na tabela do Exercício 5.2.4. Aproxime o valor de $f''(2.0) = 29.556224$ usando a fórmula de diferenças finitas centradas de segunda ordem.

**Resolução:** Temos que

$$f''(2.0) \approx \frac{1}{0.01}[f(1.9) - 2f(2.0) + f(2.1)] = 29.593200.$$

O erro cometido é aproximadamente $-3.7 \times 10^{-2}$.

### 5.2.3 Aproximação de derivadas de ordem superior

O estudo efectuado pode ser generalizado para obter fórmulas de diferenças finitas para aproximar derivadas de ordem superior. Essas fórmulas podem ser obtidas quer por interpolação quer recorrendo à série de Taylor.

**Exercício 5.2.7** Prove que:

1. $f'''(x_k) = \dfrac{1}{2h^3}\left[-f(x_{k-2}) + 2f(x_{k-1}) - 2f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})\right] - \dfrac{h^2}{4}f^{(5)}(\xi_1)$;
2. $f^{(4)}(x_k) = \dfrac{1}{h^4}\left[f(x_{k-2}) - 4f(x_{k-1}) + 6f(x_k) - 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})\right] - \dfrac{h^2}{6}f^{(6)}(\xi_2)$.

Um algoritmo para obter fórmulas de diferenças finitas de qualquer ordem para aproximar qualquer derivada de uma função pode ser visto em Fornberg (1988).

## 5.3 Integração numérica

Para muitas funções a obtenção de primitivas em termos de funções elementares é uma tarefa difícil ou mesmo impossível; é o caso que acontece quando a função a primitivar é apenas conhecida num conjunto discreto de pontos. Nesta secção vamos obter e analisar as chamadas fórmulas de quadratura numérica que permitem determinar de forma aproximada o integral definido de uma função num dado intervalo real. As fórmulas que iremos obter serão da forma

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i).$$

A grande maioria das fórmulas existentes baseia-se na ideia de substituir a função integranda por uma outra pertencente a uma determinada família de funções $\{\phi_n(x)\}$, $n = 0, 1, \ldots$, e considerar

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \phi_n(x)dx,$$

requerendo,usualmente, que

$$e(f) = \int_a^b (f(x) - \phi_n(x))dx \longrightarrow 0, \qquad n \longrightarrow \infty.$$

### 5.3.1 Fórmulas de Newton-Cotes

Um processo de determinar essa família de funções pode ser por interpolação. Seja $f$ uma função conhecida em $n+1$ pontos $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$. Como é sabido, existe um e um só polinómio $P_n$ de grau menor ou igual a $n$ interpolador de $f$ nos pontos dados tal que $f(x) = P_n(x) + e_n(x)$, onde

$$e_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x), \qquad \xi \in (a, b),$$

e $w$ dado por (4.6). Assim,

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_n(x)dx + \int_a^b e_n(x)dx.$$

Atendendo à definição do polinómio interpolador temos que

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i), \tag{5.6}$$

com

$$a_i = \int_a^b l_i(x)dx,$$

sendo $l_i$ as funções de Lagrange dadas por (4.4). O erro cometido é da forma

$$e(f) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x)dx.$$

As fórmulas (5.6) são conhecidas como Fórmulas de Newton-Cotes e dependem, obviamente, do grau do polinómio escolhido.

**Observação 5.1** *Note-se que, quando se usam as fórmulas de Newton-Cotes, se aproxima o integral de uma função $f$ pelo integral de um polinómio.*

Uma vez que a $n$-ésima fórmula de Newton-Cotes é obtida pela aproximação da função integranda por um polinómio de grau $n$, será de esperar que seja exacta para polinómios de grau menor ou igual a $n$. Este facto conduz-nos ao conceito de ordem de precisão de uma fórmula de quadratura numérica.

**Definição 5.2** *Uma fórmula de quadratura numérica diz-se com* ordem de precisão *$n$ se é exacta para polinómios de grau menor ou igual a $n$.*

**Fórmula dos Trapézios**

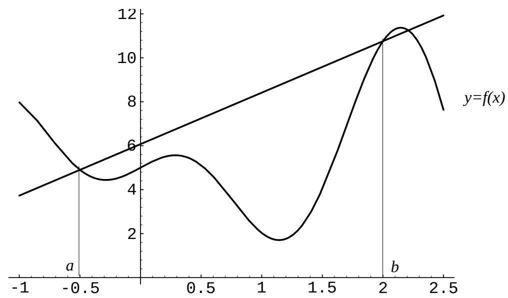


Figura 5.1: Fórmula dos Trapézios

Vamos considerar o caso em que pretendemos aproximar a função $f \in C^2([a,b])$ por um polinómio do primeiro grau que passa pelos pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$. Como é sabido

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

Assim

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b \left(f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a)\right)dx + \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx \\ &= f(a)(b-a) + \frac{1}{2}(f(b)-f(a))(b-a) + \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx.\end{aligned}$$

Como $(x-a)(x-b)$ não muda de sinal em $(a,b)$ temos, pelo Teorema do Valor Médio para integrais, que

$$\int_a^b f(x)dx = f(a)(b-a) + \frac{1}{2}(f(b)-f(a))(b-a) + \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx,$$

com $\eta \in (a,b)$. Deduzimos assim a chamada fórmula dos Trapézios

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)], \tag{5.7}$$

para aproximar o valor do integral definido de uma função. O valor do erro cometido na aproximação anterior é dado por

$$e_T(f) := -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta), \qquad \eta \in (a,b).$$

**Observação 5.3** *Note-se que a expressão do erro associado à fórmula dos Trapézios nos permite afirmar, como seria de esperar, que esta tem ordem de precisão um.*

**Fórmula de Simpson**

Consideremos agora o caso em que se aproximar a função $f \in C^3([a,b])$ por um polinómio do segundo grau que passa pelos pontos $(a, f(a))$, $(c, f(c))$, com $c = (a+b)/2$, e $(b, f(b))$. Como foi visto no capítulo anterior

$$f(x) = f(a) + \frac{f(c)-f(a)}{c-a}(x-a) + \frac{f(b)-2f(c)-f(a)}{(b-a)(b-c)}(x-a)(x-c) + \frac{f'''(\xi)}{6}(x-a)(x-c)(x-b).$$

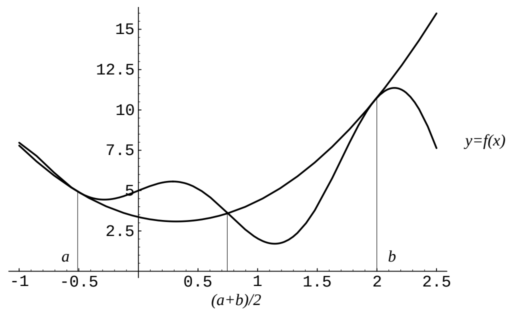


Figura 5.2: Fórmula de Simpson.

**Exercício 5.3.1** Prove que o valor do integral

$$\int_a^b \left( f(a) + \frac{f(c)-f(a)}{c-a}(x-a) + \frac{f(b)-2f(c)-f(a)}{(b-a)(b-c)}(x-a)(x-c) \right) dx,$$

com $c = \frac{a+b}{2}$, é dado por

$$\frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f(c)) + f(b)\right].$$

Pelo exercício anterior podemos obter a seguinte fórmula de integração

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right], \tag{5.8}$$

conhecida por fórmula de Simpson.

Ao contrário do que foi efectuado para a fórmula dos Trapézios, neste caso não podemos aplicar o Teorema do Valor Médio para integrais para determinar o erro cometido na aproximação do valor do integral pela fórmula de Simpson uma vez que $(x-a)(x-c)(x-a)$ muda de sinal em $[a,b]$. É possível, no entanto, demonstrar (ver Valença (1988)) que o erro associado à fórmula de Simpson é dado por

$$e_S(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), \qquad \eta \in (a,b).$$

**Observação 5.4** *Uma vez que a fórmula de Simpson foi obtida pela aproximação da função integranda por um polinómio de segundo grau, seria de esperar que tivesse ordem de precisão dois. No entanto, de forma surpreendente, a expressão obtida para o erro diz-nos que a fórmula de Simpson tem ordem de precisão três, isto é, a fórmula é exacta sempre que a função a integrar é um polinómio de grau menor ou igual a três!*

### 5.3.2 Fórmulas compostas

Note-se que, se a amplitude do intervalo $[a, b]$ for muito grande, os erros associados às fórmulas de quadratura numérica também são grandes. Poderemos pensar então em dividir o intervalo em $n$ subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \ldots, n$, de amplitude constante $h = \frac{b-a}{n}$ e aplicar a fórmula de quadratura a cada um desses subintervalos.

**Fórmula dos Trapézios composta**

Se $f \in C^2([a, b])$, aplicando a fórmula dos Trapézios a cada um dos subintervalos, temos

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

com $\xi_i \in (x_{i-1}, x_i)$, $i = 1, \ldots, n$. Concluímos então que o integral pode ser dado aproximadamente por

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)], \tag{5.9}$$

sendo o erro dado por

$$e_T(f) := -\frac{h^3}{12} \sum_{i=1}^n f''(\xi_i).$$

Ora, como

$$\sum_{i=1}^n f''(\xi_i) \in [\min_{x \in [a,b]} f''(x), \max_{x \in [a,b]} f''(x)],$$

pelo Teorema de Bolzano, existe um $\eta \in (a, b)$ tal que

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

Assim sendo,

$$e_T(x) := -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta), \qquad \eta \in (a, b).$$

A fórmula (5.9) é conhecida por fórmula dos Trapézios (composta).

**Observação 5.5** *Na prática a fórmula do erro aparece, normalmente, em valor absoluto. É usual considerar a expressão*

$$|e_T(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 M_2,$$

*com*

$$M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|.$$

O valor do integral de uma determinada função $f$ num intervalo $[a, b]$ pela fórmula dos Trapézios pode ser dado de acordo com o seguinte algoritmo.

---

**Algoritmo 5.1** Fórmula dos Trapézios

Ler $n$;
Ler $a$ e $b$;
$h := (b-a)/n$;
$x := a$;
$s := 0$;
Para $i$ de 1 até $n-1$ fazer
  $x := x + h$;
  $s := s + f(x)$;
$I_T := (h/2)(f(a) + 2s + f(b))$;
Escrever $i \approx I_T$.

---

**Exercício 5.3.2** Seja $I = \displaystyle\int_{-2}^{-1} xe^{2x}dx$. Calcule, usando a fórmula dos Trapézios, o valor aproximado de $I$ com três casas decimais correctas.

**Resolução:** Seja $f(x) = xe^{2x}$. Temos que, para $x \in [-2,-1]$, o erro para a regra dos trapézios é dado por

$$|e_T(x)| \leq \frac{1}{12}h^2 M_2 = \frac{1}{12n^2}M_2,$$

sendo

$$M_2 = \max_{x\in[-2,-1]} |f''(x)| = \max_{x\in[-2,-1]} (-4e^{2x}(x+1)).$$

Se tomarmos $g(x) = -4e^{2x}(x+1)$ temos que $g'(x) = 0 \Rightarrow x = -1.5$. Logo

$$M_2 = \max\{g(-2), g(-1.5), g(-1)\} = 2e^{-3}.$$

Vamos então determinar qual o menor valor de $n$ que satisfaz

$$\frac{e^{-n}}{2n^2} \leq 0.5 \times 10^{-3}.$$

Efectuando os cálculos, concluímos imediatamente que $n \geq 4.074$ o que implica $n = 5$. Necessitamos de 6 pontos igualmente distanciados no intervalo $[-2,-1]$ para obter uma aproximação ao valor de $I$ com três casas decimais correctas. Assim,

$$I \approx 0.1[f(-2) + 2f(-1.8) + 2f(-1.6) + 2f(-1.4) + 2f(-1.2) + f(-1)] = -0.0788762.$$

Como só podemos garantir três casas decimais correctas temos que $I \approx -0.079$.

**Fórmula de Simpson composta**

Poderemos, tal como para a regra dos trapézios, pensar em dividir o intervalo $[a, b]$ num número $n$ (par) de subintervalos $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \ldots, n$, de amplitude constante $h = \frac{b-a}{n}$ e aplicarmos a fórmula (5.8) a cada um desses subintervalos.

**Exercício 5.3.3** De forma análoga ao efectuado na obtenção da fórmula dos Trapézios composta mostre que, para o caso da fórmula de Simpson se tem

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+\cdots+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)], \qquad n \text{ par.} \tag{5.10}$$

com erro

$$e_S(f) := -\frac{h^5}{2880}\sum_{i=1} nf^{(4)}(\eta_i).$$

A fórmula (5.10) é conhecida por fórmula de Simpson (composta). A determinação do valor do erro que lhe está associado pode ser feita de forma semelhante ao efectuado para a fórmula dos Trapézios composta. De facto, como

$$\sum_{i=1}^{n} f^{(4)}(\xi_i) \in [\min_{x\in[a,b]} f^{(4)}(x), \max_{x\in[a,b]} f^{(4)}(x)],$$

pelo Teorema de Bolzano, existe um $\eta \in (a, b)$ tal que

$$\sum_{i=1}^{n} f^{(4)}(\xi_i) = nf^{(4)}(\eta).$$

Assim sendo,

$$e_S(x) = -\frac{h^5}{2880}nf^{(4)}(\eta),$$

ou, o que é equivalente,

$$e_S(f) = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\eta), \qquad \eta \in (a, b).$$

**Observação 5.6** *Na prática a fórmula do erro aparece, normalmente, em valor absoluto. Assim, costuma-se usar a expressão*

$$|e_S(f)| \leq \frac{b-a}{180}h^4 M_4,$$

*com*

$$M_4 = \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|.$$

O valor do integral de uma determinada função $f$ num intervalo $[a, b]$ pela fórmula de Simpson pode ser dado de acordo com o seguinte algoritmo.

---

**Algoritmo 5.2** Fórmula de Simpson

Ler $n$;
Ler $a$ e $b$;
$h := (b-a)/n$;
$x := a$;
$s := 0$;
Para $i$ de 1 até $n-1$ fazer
  $x := x + h$;
  Se $i$ par então $s := s + 2f(x)$ caso contrário $s := s + 4f(x)$;
$I_S := (h/3)(f(a) + s + f(b))$;
Escrever $I \approx I_S$.

---

**Exercício 5.3.4** Melhore o algoritmo anterior.

**Exercício 5.3.5** Seja $I = \displaystyle\int_0^1 e^x \cos x dx$. Calcule, usando a fórmula de Simpson, o valor aproximado de $I$ com erro inferior a $10^{-3}$.

**Resolução:** Seja $f(x) = e^x \cos x$. Temos que, para $x \in [0,1]$, o erro dado pela regra de Simpson é

$$|e_S(x)| \leq \frac{1}{180} h^4 M_4 = \frac{1}{180n^4} M_4,$$

sendo

$$M_4 = \max_{x\in[0,1]} |f^{(4)}(x)| = \max_{x\in[0,1]} (4e^x \cos x).$$

Se tomarmos $g(x) = 4e^x \cos x$ temos que $g'(x) = 0 \Rightarrow x = \frac{\pi}{4}$. Logo

$$M_4 = \max\{g(0), g(\frac{\pi}{4}), g(1)\} = 2\sqrt{2}e^{\pi/4}.$$

Vamos então determinar qual o menor valor de $n$ que satisfaz

$$\frac{\sqrt{2}e^{\pi/4}}{90n^4} \leq 10^{-3}.$$

Efectuando os cálculos, concluímos imediatamente que $n \geq 2.42$. Como $n$ tem que ser par temos que $n = 4$. Então, necessitamos de 5 pontos igualmente distanciados no intervalo $[0,1]$ para obter uma aproximação ao valor de $I$ um erro inferior ao pretendido. Assim,

$$I \approx \frac{1}{12}[f(0) + 4f(0.25) + 2f(0.5) + 4f(0.75) + f(1)] = 1.377903843.$$

Como só podemos garantir duas casas decimais correctas $I \approx 1.38$.

## 5.4 Exercícios de aplicação à engenharia

**Exercício 5.4.1** A função
$$f(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$
é usada com muita frequência em disciplinas tão diversas como a teoria das probabilidades, distribuição de calor, difusão de matérias, etc. Usando uma das regras de integração estudadas, calcule uma aproximação para o valor do referido integral indicando um majorante para o erro cometido.

**Exercício 5.4.2** Num circuito eléctrico com voltagem aplicada $E(t)$ e inductância $L$, a primeira Lei de Kirchoff dá-nos a relação
$$E(t) = LI'(t)RI(t),$$
onde $R$ é a resistência no circuito e $I(t)$ a corrente no instante $t$. Suponhamos que medimos a corrente para vários valores de $t = t_i$, $i = 1, \ldots, 5$, obtendo

| $t_i$ | 1.00 | 1.01 | 1.02 | 1.03 | 1.04 |
|---|---|---|---|---|---|
| $I(t_i)$ | 3.10 | 3.12 | 3.14 | 3.18 | 3.24 |

,

onde tempo é medido em segundos, a corrente em amperes, a inductância é uma constante dada por $L = 0.98$ henries e a resistência é $0.142$ ohms. Aproxime a voltagem $E$ nos valores de $t$ dados na tabela.

**Exercício 5.4.3** Fugacidade é o termo usado na engenharia para descrever a trabalho resultante de um processo isotérmico. Para um gás ideal, a fugacidade $f$ é igual à pressão $P$, mas para os gases reais,
$$\ln \frac{f}{P} = \int_0^P \frac{C-1}{P} dp$$
onde $C$ é um factor de compressibilidade determinado experimentalmente. Para o metano os valores de $C$ são

| $P$ (atm.) | $C$ |
|---|---|
| 1 | 0.9940 |
| 10 | 0.9370 |
| 20 | 0.8683 |
| 40 | 0.7043 |
| 60 | 0.4515 |

| $P$ (atm.) | $C$ |
|---|---|
| 80 | 0.3429 |
| 120 | 0.4259 |
| 160 | 0.5252 |
| 250 | 0.7468 |
| 400 | 1.0980 |

.

Escreva um programa que calcule o valor de $f$ correspondente a cada valor da pressão dado na tabela. Assuma que o valor de $C$ varia linearmente entre os valores calculados e que $C$ tende para um quando $P$ tende para zero.

**Exercício 5.4.4** Uma partícula de massa $m$ movendo-se num fluído está sujeita a uma resistência de viscosidade $R$, que é função da velocidade $v$. A relação entre a resistência $R$, a velocidade $v$ e o tempo $t$ é dada pela equação
$$t = \int_{v(t_0)}^{v(t)} \frac{m}{R(u)} du.$$

onde $R$ é a resistência no circuito e $I(t)$ a corrente. Suponhamos que $R(v) = -v\sqrt{v}$ para um fluído particular, onde $R$ é dado em newtons e $v$ em metros/segundo. Se $m = 10\ kg$ e $v(0) = 10\ m/seg$ aproxime o tempo necessário para a partícula reduzir a sua velocidade para $v = 5\ m/seg$.

## 5.5 Referências bibliográficas

R.L. Burden e J.D. Faires (1988), Numerical Analysis, 4th ed., PWS-Kent, Boston.

B.J. Caraça (1989), Conceitos Fundamentais da Matemática, $9^a$ ed., Livraria Sá Costa, Lisboa.

S.D. Conte e C. de Boor (1980), Elementary Numerical Analysis, 3th ed., McGraw-Hill, New York.

B. Fornberg (1988), *Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids*, Math. Comp., 51, 699-706.

H. Goldstine (1977), A History of Numerical Analysis from $16^{th}$ Through the $19^{th}$ Century, Springer-Verlag, New York.

J.R. Rice (1983), Numerical Methods, Software, and Analysis, McGraw-Hill, Tokyo.

M. Rosa (1992), Tópicos de Análise Numérica, Dep. Matemática, Univ. Coimbra.

M.R. Valença (1988), Métodos Numéricos, INIC, Braga.