Regras companheiras de Simpson-Milne

Mário M. Graça
Departamento de Matemática,
Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa,
Av. Rovisco Pais, 1049–001 Lisboa, Portugal.
e-mail: `mario.meireles.graca@tecnico.ulisboa.pt`

Resumo: Introduzimos a noção de *sinal* de uma regra de quadratura e observamos que as regras de Newton-Cotes, respectivamente fechadas e abertas e do mesmo grau de precisão, são de sinais contrários. Regras nessas condições dir-se-ão *companheiras*. A partir de um par de duas regras companheiras $(Q(f), C(f))$ construímos uma terceira regra $M(f)$, a que chamamos regra *associada*. Este procedimento habilita-nos não só a estimar facilmente o erro de $M(f)$, como a obter um encaixe de intervalos contendo o valor exacto de $I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$. Como modelo usamos o par de regras companheiras (Simpson, Milne) e construímos a sua regra associada. Mostramos ainda que a regra de Simpson é a regra associada ao primeiro par de regras de Newton-Cotes companheiras, as bem conhecidas regras dos trapézios e do ponto médio. Damos alguns exemplos numéricos e fornecemos código *Mathematica* tendo em vista a construção de novas regras e exemplos de aplicação.

Abstract: The notion of *sign* of a quadrature formula is introduced which enables us to classify two Newton-Cotes rules of the same degree of precision, one open and the other closed, as having opposite signs. Quadrature rules satisfying these conditions will be called *companion* rules.
From a pair $(Q(f), C(f))$ of companion rules we construct another rule $M(f)$ which will be called *associated* rule. This procedure allows us not only to easily estimate the error of $M(f)$ but also to obtain a nest of intervals containing the exact value of the integral $I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$. The pair (Simpson, Milne) is used as a model to get its associated rule. It is also shown that the Simpson rule is the associated rule to the first pair of Newton-Cotes companion rules, the well-known trapezoidal and midpoint rules.
Some numerical examples illustrate the main results and *Mathematica* code is given aiming to enable further develop of new rules and examples.

Palavras-chave: Regra positiva; regra negativa; regras companheiras; regra associada; regra de Simpson; regra de Milne.

Keywords: Positive rule; negative rule; companion rules; associated rule; Simpson rule; Milne rule.

1 Introdução

Em termos de *quadraturas numéricas* [17] há dogmas que são repetidos até à exaustão. Um deles diz respeito à preferência dada às regras de Newton-Cotes *fechadas* em detrimento das regras de Newton-Cotes *abertas*, sem ter em conta a valia inerente a certos pares dessas regras que, neste trabalho, designamos por regras *companheiras.* Na literatura, a preferência por regras de Newton-Cotes fechadas é fundamentada através de afirmações como em ([4], p. 171) "... the closed formulas generally produce results superior to the open formulas of the same order, since they use more complete information about the function. Consequently, the closed formulas are used more frequently in practice. The open formulas are primarily used for the numerical solution of ordinary differential equations." Argumentos que remontam pelo menos a 1933 (ver, por exemplo, [16] p. 166).

Nesta nota mostramos que para uma ordem de precisão fixa e sob certas condições, a propriedade fundamental de um par de regras de Newton-Cotes (fechada,aberta) reside no facto de as suas expressões de erro serem de sinal contrário, segundo a definição de sinal de uma regra que introduzimos na Definição 2.3. De acordo com esta definição, a regra fechada é *negativa* e a regra aberta *positiva.* Tal constitui uma vantagem porquanto, nomeadamente, ao considerarmos um par dessas regras ficamos habilitados a construir um encaixe de intervalos contendo o valor exacto do integral $I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$. Por isso chamamos *regras companheiras* a um par de regras do mesmo grau e de sinais contrários.

A partir de um par de regras companheiras $(Q(f), C(f))$ construímos uma regra $M(f)$ mais precisa e estimamos o erro de $M(f)$ levando em consideração as fórmulas de erro de cada membro do par. Designamos $M(f)$ por *regra associada* ao par de regras companheiras $(Q(f), S(f))$. Mostramos também que uma regra associada se obtém como uma *média pesada* de duas regras companheiras.
Em particular, tomamos como modelo as regras de Simpson (fechada)[1] e de Milne [15] (aberta), ambas de terceira ordem de precisão, mostrando que são regras companheiras e construímos a sua regra associada $M(f)$, estimando o respectivo erro através de certas *diferenças divididas* (ver Secção 3).

No parágrafo 3.4 vemos que as regras dos trapézios e do ponto médio são as

[1] Segundo informação em `https://en.wikipedia.org/wiki/Thomas_Simpson`, esta regra é atribuída ao matemático britânico Thomas Simpson (1710 – 1761), embora se saiba que a mesma regra foi usada por Johannes Kepler 100 anos antes.

primeiras regras de Newton-Cotes companheiras, sendo a célebre regra de Simpson a sua associada.

A passagem a regras companheiras *compostas*, ou seja, para um certo número $n \geq 2$ de subintervalos de $[a, b]$, é facilmente obtida. Verificamos que o erro da regra composta $M_n(f)$, associada das regras Simpson-Milne, pode ser estimado usando diferenças divididas num suporte de 5 números pseudo--aleatórios, gerados em cada subintervalo de $[a, b]$, mediante o comando `RandomReal` do sistema *Mathematica* [21].

Apresentamos alguns exemplos numéricos e fornecemos código contendo programas básicos, para que o leitor possa efectuar a sua própria experimentação (Secção 5).

2 Preliminares

> "To study, and when the occasion arises to put what one has learned into practice – is that not deeply satisfying?"
> Confucius, Analects 1.1.1 (citado em [11]).

Dada uma função real f integrável no intervalo $[a, b]$, sejam $\mathcal{P}_n$ o espaço vectorial dos polinómios de grau menor ou igual a $n \geq 0$, $\{1, \phi_1(x), \phi_2(x), \ldots, \phi_n\}$ uma base de $\mathcal{P}_n$ e

$$I(f) = \int_a^b f(x)\, dx\ . \tag{1}$$

Comecemos por relembrar as definições de *fórmula* (ou *regra*) *de quadratura* e de *grau* (ou *ordem*) de precisão de uma fórmula de quadratura.

Definição 2.1. *(fórmula de quadratura)([7], p. 1)*
Uma fórmula de quadratura $Q(f)$ é um processo de cálculo numérico de uma aproximação para o integral (1) *em que se usam os valores de f apenas num conjunto discreto de pontos pertencentes a $[a, b]$.*

Ao conjunto de pontos usados na fórmula de quadratura, aos quais se dá o nome de *nós de quadratura*, chamamos *suporte da fórmula* (ou *suporte da regra*).
Relembra-se que uma regra se diz *fechada* quando os extremos do intervalo são nós de quadratura e se diz *aberta* quando algum desses extremos não é nó de quadratura.

As regras de Newton-Cotes são regras de quadratura *interpolatória* no sentido em que a função integranda é substituída pelo polinómio interpolador num suporte em que os nós são equidistantes. Por construção, uma regra de Newton-Cotes com $k+1$ nós é exacta, pelo menos, para qualquer polinómio $p_k \in \mathcal{P}_k$, o que justifica a definição a seguir.

Definição 2.2. *(Grau de uma fórmula de quadratura)([9], p. 157)*
Uma fórmula de quadratura $Q(f)$ diz-se de grau (ou ordem) de precisão $k \geq 0$ se é exacta para qualquer polinómio $p_k \in \mathcal{P}_k$, mas não é exacta para algum polinómio de grau $k+1$.

Mostra-se que uma regra de quadratura é de grau exactamente k se e só se é exacta para os elementos de uma base de $\mathcal{P}_k$, mas não é exacta para algum polinómio de grau $k+1$. Por exemplo, dados os $k+1$ nós distintos $x_0, x_1, \ldots, x_k$, e a base de $\mathcal{P}_k$,

$$\begin{aligned} \phi_0(x) &= 1, \\ \phi_1(x) &= (x - x_0) \\ \phi_2(x) &= (x - x_0)\,(x - x_1) \\ &\vdots \\ \phi_k(x) &= (x - x_0)\,(x - x_1) \ldots (x - x_{k-1}), \end{aligned} \tag{2}$$

uma regra $Q(f)$ é de grau k se e só se

$$\left\{ \begin{array}{ll} Q(1) & = \displaystyle\int_a^b dx \\ Q(\phi_1) & = \displaystyle\int_a^b \phi_1(x)\, dx \\ Q(\phi_2) & = \displaystyle\int_a^b \phi_2(x)\, dx \\ & \vdots \\ Q(\phi_k) & = \displaystyle\int_a^b \phi_k(x)\, dx, \end{array} \right. \tag{3}$$

e para o polinómio $\phi_{k+1} = \phi_k(x)\,(x - x_k)$ (ou algum outro polinómio de grau $k+1$), tem-se

$$Q(\phi_{k+1}) \neq \int_a^b \phi_{k+1}(x)\, dx\ .$$

Para uma determinada regra de quadratura da forma

$$Q(f) = A_0\, f(x_0) + A_1\, f(x_1) + \cdots + A_k\, f(x_k), \tag{4}$$

os "pesos" A_i, $i = 1, \ldots, k$, podem ser determinados usando o *método dos coeficientes indeterminados* ([9], p. 171). Este método conduz à resolução de um sistema de equações lineares como em (3), ou equivalente, se considerarmos outra base de $\mathcal{P}_k$, cujas incógnitas são os pesos A_i. Repare-se que a escolha da base $\{1, \phi_0, \ldots, \phi_k\}$ em (2) conduz a um sistema triangular superior cuja solução é única.

Uma vez adotada a base polinomial (2), que designamos por base canónica associada aos nós x_i, para o monómio $\phi_{k+1}(x) = \phi_k(x)(x - x_k)$, numa regra $Q(f)$ como em (4), tem-se

$$Q(\phi_{k+1}) = 0,$$

dado que $\phi_{k+1}(x_i) = 0$, $i = 0, \ldots, k$. Se a regra for de grau k, temos

$$Q(\phi_{k+1}) \neq I(\phi_{k+1})$$

ou, de outra forma, o erro em ϕ_{k+1} é não nulo, isto é,

$$E_Q(\phi_{k+1}) = I(\phi_{k+1}) - Q(\phi_{k+1}) = I(\phi_{k+1}) - 0 \neq 0 \ .$$

Designamos

$$\mu_{k+1} = I(\phi_{k+1}) = \int_a^b \phi_{k+1}(x)\, dx \tag{5}$$

por *momento principal* da regra de quadratura (4).

Na abordagem usual de construção de fórmulas de quadratura, a fórmula (4) corresponde ao valor do integral do polinómio interpolador de f em $x_0, x_1, \ldots, x_k$. Através da fórmula de interpolação de Lagrange obtemos

$$\begin{aligned} A_0\, f(x_0) + A_1\, f(x_1) + \cdots + A_k\, f(x_k) &= \int_a^b \sum_{i=0}^{k} f(x_i) L_i(x) dx \\ &= \sum_{i=0}^{k} f(x_i) \int_a^b L_i(x) dx, \end{aligned}$$

onde

$$L_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{k} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \ .$$

Assim, os pesos A_i podem também ser dados através dos integrais dos polinómios de Lagrange L_i. Esta é a estratégia normalmente usada para o desenvolvimento das regras de quadratura de Newton-Cotes em que os nós de interpolação são igualmente espaçados.

É bem conhecido que uma regra interpolatória $Q(f)$ tem pelo menos grau k e no máximo grau $2\,k+1$. No caso da regra ter grau $k+1$, teremos

$$Q(\phi_{k+1}) = I_{k+1} = 0, \qquad Q(\phi_{k+2}) = 0 \neq I_{k+2},$$

para $\phi_{k+2}(x) = \phi_{k+1}(x)(x-x_0)$, e o seu momento principal é $\mu_{k+2} = I_{k+2}$. Ver [10] onde são usados os polinómios $\phi_j(x)$ e os momentos μ_j, para $j = 1\ldots, 2\,k+2$.

Tomamos como conhecidas a fórmula e a expressão do erro de cada uma das regras de Newton-Cotes, fechadas ou abertas, que utilizaremos adiante. Transcrevemos abaixo de [4, Section 4.3] os resultados relativos aos erros nestas fórmula onde se assume que $f \in C^{k+2}([a,b])$, se k é par, e $C^{k+1}([a,b])$, se k é ímpar.

Proposição 2.1 *([4], p. 169)* Suponhamos que $Q(f) = \sum_{i=0}^{k} A_i f(x_i)$ denota a regra de Newton-Cotes fechada com $k+1$ pontos, sendo $x_0 = a$, $x_k = b$ e $x_i = a + i\,h$, $i = 1, \ldots, k-1$, com $h = (b-a)/k$. Existe $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)\,dx = Q(f) + c\,f^{(k+2)}(\xi), \quad \text{onde } c = \frac{h^{k+3}}{(k+2)!}\int_0^k t^2(t-1)\cdots(t-k)\,dt,$$

se k é par e $f \in C^{k+2}([a,b])$, e

$$\int_a^b f(x)\,dx = Q(f) + c\,f^{(k+1)}(\xi), \quad \text{onde } c = \frac{h^{k+2}}{(k+1)!}\int_0^k t(t-1)\cdots(t-k)\,dt,$$

se k é ímpar e $f \in C^{k+1}([a,b])$.

Proposição 2.2 *([4], p. 170)* Suponhamos que $C(f) = \sum_{i=0}^{k} A_i f(x_i)$ denota a regra de Newton-Cotes aberta com $k+1$ pontos, sendo $x_{-1} = a$, $x_{k+1} = b$ e $x_i = a + (i+1)\,h$, $i = 0, \ldots, k$, com $h = (b-a)/(k+2)$. Existe $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)\,dx = C(f) + c\,f^{(k+2)}(\xi), \quad \text{onde } c = \frac{h^{k+3}}{(k+2)!}\int_{-1}^{k+1} t^2(t-1)\cdots(t-k)\,dt,$$

se k é par e $f \in C^{k+2}([a,b])$, e

$$\int_a^b f(x)\,dx = C(f) + c\,f^{(k+1)}(\xi), \quad \text{onde } c = \frac{h^{k+2}}{(k+1)!}\int_{-1}^{k+1} t(t-1)\cdots(t-k)\,dt,$$

se k é ímpar e $f \in C^{k+1}([a,b])$.

Pode mostrar-se que as constantes c associadas às regras de Newton-Cotes fechadas são sempre negativas e as associadas às regras abertas são sempre positivas, o que justifica que adoptemos as definições seguintes.

Definição 2.3. *(Regra positiva/negativa)*
Uma regra $Q(f)$, de grau $m \geq 0$, diz-se positiva *se a respectiva constante de erro c é positiva, e diz-se* negativa *no caso contrário.*

Definição 2.4. *(Regras companheiras)*
Um par de regras $(Q(f), C(f))$ diz-se um par de regras companheiras se as regras $Q(f)$ e $C(f)$ são do mesmo grau e de sinais contrários.

3 Regras companheiras de Simpson-Milne

Quando tomamos $k = 2$ obtemos as bem conhecidas regras de Simpson (fechada) e de Milne (aberta) e, no caso de $f \in C^4([a, b])$, temos, aplicando as Proposições 2.1 e 2.2, expressões para os erros (de sinais contrários):

(i) Simpson (fechada)

$$S(f) = \frac{h}{3} \left(f(a) + 4\, f(a + h) + f(b) \right), \text{ para } h = (b - a)/2, \tag{6}$$

com erro

$$E_S(f) = I(f) - S(f) = -\frac{(b - a)^5}{2\,880} f^{(4)}(\xi), \qquad \xi \in (a, b). \tag{7}$$

(ii) Milne (aberta)

$$N(f) = \frac{4\,h}{3} \left(2\, f(a + h) - f(a + 2\,h) + f(a + 3\,h) \right), \text{ para } h = (b - a)/4, \tag{8}$$

com erro

$$E_N(f) = I(f) - N(f) = \frac{7\,(b - a)^5}{23\,040} f^{(4)}(\bar{\xi}), \quad \bar{\xi} \in (a, b)\ . \tag{9}$$

Note-se que estas regras são ambas de grau $k + 1 = 3$, uma vez que as expressões para os erros envolvem $f^{(4)}$ e, portanto, são regras exactas para polinómios $p \in \mathcal{P}_3$. Ou seja, o par $(S(f), N(f))$ é um par de regras companheiras.

3.1 A regra de Simpson é negativa e a de Milne positiva

Neste parágrafo pretendemos decidir, sem recorrer ao resultado da Proposição 2.1, qual o grau e o sinal da regra de Simpson, usando o método dos coeficientes indeterminados, com a base polinomial (2), e o conceito de momento principal. Um estudo análogo pode ser feito para a regra de Milne.

Começamos por considerar o intervalo $[-1,1]$, e adiante veremos como a partir deste intervalo os resultados se deduzem para qualquer outro intervalo $[a,b]$.

A regra de Simpson é fechada, usando para suporte os 3 nós equidistantes $t_0=-1$, $t_1=0$ e $t_2=1$.
Comprovemos tratar-se de uma regra de grau 3, mediante aplicação das condições (3). Neste caso, a base de $\mathcal{P}_3$ em (2) é dada por: $\phi_0(t)=1$, $\phi_1(t)=t+1$, $\phi_2(t)=(t+1)\,t$, $\phi_3(t)=(t+1)\,t(t-1)$, e considere-se

$$\phi_4(t)=\phi_3(t)\,(t-t_0)=(t+1)^2\,t\,(t-1)\ .$$

Suponhamos que $g\in C^4([-1,1]$ e designemos por $S(g)$ a regra de Simpson aplicada a g. A regra é da forma

$$S(g)=A_0\,g(-1)+A_1\,g(0)+A_2\,g(1)\ .$$

Os "pesos" A_0 a A_2 deverão satisfazer as condições (3), isto é,

$$\left\{\begin{aligned} A_0+A_1+A_2 &= \int_{-1}^{1} dt = 2\\ A_1+2\,A_2 &= \int_{-1}^{1} (t+1)dt = 2\\ 2\,A_2 &= \int_{-1}^{1} (t+1)\,t\,dt = 2/3\ . \end{aligned}\right.$$

A solução do sistema triangular anterior é imediata, obtendo-se $A_2=1/3$, $A_1=4/3$ e $A_0=1/3$. Assim,

$$S(g)=\frac{1}{3}\,(g(-1)+4\,g(0)+g(1))\ . \tag{10}$$

A regra é de grau $m=2$, pelo menos, por ser exacta para qualquer polinómio de grau menor ou igual a 2. No entanto, também é exata para polinómios de grau 3 uma vez que

$$S(\phi_3)=\frac{1}{3}(\phi_3(-1)+4\,\phi_3(0)+\phi_3(1))=0=I(\phi_3)=\int_{-1}^{1}(t+1)\,t\,(t-1)\,dt\ .$$

Todavia, a regra não é exacta para polinómios de grau 4, porquanto

$$
\begin{aligned}
S(\phi_4) &= \frac{1}{3}\,(\phi_4(-1) + 4\,\phi_4(0) + \phi_4(1)) = 0\\
I(\phi_4) &= \int_{-1}^{1} (t+1)^2\, t\,(t-1)\,dt = -\frac{4}{15} \quad \text{(momento principal)}\ . \qquad (11)
\end{aligned}
$$

Por conseguinte, o momento principal, $\mu_4 = -4/15$, é negativo. Logo, atendendo à Proposição 2.1, existe uma constante $c \neq 0$, tal que

$$
E_S(g) = I(g) - S(g) = c\; g^{(4)}(\theta), \quad \theta \in (-1,1)\ . \qquad (12)
$$

Dado que para $g(t) = \phi_4(t)$ tem por derivada de quarta ordem $\phi_4^{(4)}(t) = 4!$, a constante c em (12) tem o sinal de μ_4, porquanto

$$
c = \frac{I(\phi_4) - S(\phi_4)}{4!} = \frac{\mu_4}{4!} = -\frac{1}{90} = -\frac{1}{2\,3^2\,5}\ .
$$

Por conseguinte, segundo a Definição 2.3, a regra é negativa e

$$
E_S(g) = \frac{\mu_4}{4!}\, g^{(4)}(\theta), \quad \theta \in (-1,1), \qquad (13)
$$

onde o momento principal μ_4 é dado por (11).

Argumentos análogos podem ser usados para provar que, uma vez conhecido o grau de uma regra de Newton-Cotes qualquer, o seu sinal (segundo a Definição 2.3) é o mesmo que o sinal do respectivo momento principal, dado que a constante c na expressão do erro satisfaz

$$
c = \frac{\mu_{m+1}}{(m+1)!},
$$

sendo m o grau da regra.

Mudança de intervalo de integração

A reescrita das fórmulas (10) e (13) relativamente a um intervalo $[a,b]$ obtém-se facilmente. Com efeito, para $t \in [-1,1]$ a função

$$
x = \gamma(t) = a + \frac{b-a}{2}\,(t+1) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t,
$$

aplica bijectivamente o intervalo $[-1,1]$ no intervalo $[a,b]$. Donde,

$$
\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f(\gamma(t))\,dt\ .
$$

Fazendo $g(t) = f(\gamma(t))$, obtêm-se as derivadas

$$g^{(j)}(t) = \left(\frac{b-a}{2}\right)^j f^{(j)}(\gamma(t)), \quad j = 1, 2, \ldots \ .$$

Assim, denotando por $h = (b-a)/2$, obtemos para a regra de Simpson as fórmulas (6) e (7). Isto é,

$$S(f) = \frac{b-a}{2}\, S(g) = \frac{h}{3}\, \left(f(a) + 4\, f(a+h) + f(b)\right), \tag{14}$$

e

$$\begin{aligned} E_S(f) &= I(f) - S(f) = \frac{b-a}{2}\, E_S(g) \\ &= \frac{b-a}{2} \left(\frac{b-a}{2}\right)^4 \frac{\mu_4}{4!}\, f^{(4)}(\xi) \\ &= -\frac{(b-a)^5}{2\,880}\, f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b)\ . \end{aligned} \tag{15}$$

3.2 Regra associada a um par de regras companheiras

Nas duas tabelas a seguir apresentamos as fórmulas para as bem conhecidas primeiras regras de Newton-Cotes, fechadas e abertas, respectivamente, assim como as expressões para os erros e o grau de precisão.

k	$Q_k(f) = \sum_{i=0}^{k} A_i\, f(x_i)$	$I(f) - Q_k(f)$	Nome	m
1	$h/2\,(f(a) + f(b))$	$-\frac{(b-a)^3}{2^2\, 3^1}\, f^{(2)}(\xi)$	Trapézios	1
2	$h/3\,(f(a) + 4f(x_1) + f(b))$	$-\frac{(b-a)^5}{2^6\, 3^2\, 5^1}\, f^{(4)}(\xi)$	Simpson	3
3	$3\,h/8\,(f(a) + 3\,f(x_1) + 3\,f(x_2) + f(b))$	$-\frac{(b-a)^5}{2^4\, 3^4\, 5^1}\, f^{(4)}(\xi)$	3/8	3
4	$2\,h/45\,(7f(a) + 32\,f(x_1) + 12\,f(x_2) +$ $+32\,f(x_3) + 7\,f(b))$	$-\frac{(b-a)^7}{2^{11}\, 3^3\, 5^1\, 7^1}\, f^{(6)}(\xi)$	Boole	5

Tab. 1: Primeiras regras de Newton-Cotes fechadas com $h = (b-a)/k$, suporte $x_i = a + i\,h$, para $i = 0, \ldots, k$, e expresssões para os erros de truncatura, sendo m o grau (ou ordem) de precisão.

Tabelas mais ou menos completas contendo as expressões das regras de Newton-Cotes fechadas e abertas, para um intervalo $[a,b]$, e em alguns casos as suas expressões de erro (em formato eventualmente distinto mas equivalente ao da Tabela 1), são usuais em obras de introdução aos métodos numéricos

k	$C_k(f)=\sum_{i=0}^{k} A_i\, f(x_i)$	$I(f)-S_k(f)$	Nome	m
0	$2\,h\,f(x_0)$	$+\dfrac{(b-a)^3}{2^3\,3^1}\,f^{(2)}(\xi)$	Ponto médio	1
1	$3\,h/2\,(f(x_0)+f(x_1))$	$+\dfrac{(b-a)^3}{2^2\,3^1}\,f^{(2)}(\xi)$	Trapezoidal	1
2	$4\,h/3\,(2\,f(x_0)-f(x_1)+2\,f(x_2))$	$+\dfrac{7\,(b-a)^5}{2^9\,3^2\,5^1}\,f^{(4)}(\xi)$	Milne	3
3	$5\,h/24\;(11\,f(x_0)+f(x_1)+f(x_2)+11\,f(x_3))$	$+\dfrac{(b-a)^5}{2^4\,3^2\,5^4\,19^1}\,f^{(4)}(\xi)$		3

Tab. 2: Primeiras regras de Newton-Cotes abertas com $h=(b-a)/(k+2)$, suporte $x_i=a+(i+1)\,h$, para $i=0,\ldots,k$, e expressões para os erros de truncatura, sendo m o grau (ou ordem) de precisão.

[2], [20], [4], [5], [6], [9], [11], [12], [19], ou em obras especializadas como [1], [3], [7], [8], [13], [14], [18]. No entanto, aparentemente nenhuma das obras citadas põe em destaque a positividade ou negatividade de uma regra de Newton-Cotes e as vantagens computacionais que poderão advir da consideração de duas regras de Newton-Cotes, do mesmo grau m de precisão, mas com expressões de erro de sinais opostos. Refira-se de novo que, neste caso, admitindo que no intervalo de integração a derivada de ordem $m+1$ não muda de sinal no intervalo, o valor exacto do integral $I(f)$ fica automaticamente enquadrado pelos valores calculados para cada uma das regras consideradas. Por exemplo, para as regras de Simpson $S(f)$ (fechada) e de Milne $N(f)$ (aberta), temos os seguintes enquadramentos para o valor exacto do integral $I(f)$: no caso em que a derivada de quarta ordem $f^{(4)}$ é positiva em (a,b),

$$N(f)\leq I(f)\leq S(f),$$

e quando a derivada de quarta ordem $f^{(4)}$ é negativa em (a,b),

$$S(f)\leq I(f)\leq N(f)\ .$$

Consequentemente, uma terceira regra se impõe naturalmente, que designamos por *regra associada*, ao levarmos em conta as expressões dos erros dessas duas regras, conforme se discute no parágrafo a seguir.

Vamos agora ver como construir uma regra associada a um par de regras do mesmo grau mas de sinais contrários, ou seja, um par de regras companheiras. Para tal, sejam $Q(f)$ e $C(f)$ duas regras de grau $m\geq 1$, respectivamente, negativa e positiva, de uma função $f\in C^{m+1}([a,b])$, tal que f^{m+1} não muda de sinal em $[a,b]$. Das Proposições 2.1 e 2.2, sabemos que existem constantes positivas c_1, c_2, d_1, d_2 tais que

$$\begin{aligned} E_Q(f) &= I(f) - Q(f) = -\frac{c_1}{c_2}\,(b-a)^{m+2} f^{(m+1)}(\xi), \quad \xi \in (a,b), \\ E_C(f) &= I(f) - C(f) = \frac{d_1}{d_2}\,(b-a)^{m+2} f^{(m+1)}(\bar{\xi}), \quad \bar{\xi} \in (a,b)\ . \end{aligned} \tag{16}$$

Por conseguinte,

$$I(f) = \frac{c_2\, Q(f) + d_2\, C(f)}{c_2 + d_2} + \frac{(b-a)^{m+2}}{c_2 + d_2} \left(d_1 f^{(m+1)}(\bar{\xi}) - c_1 f^{(m+1)}(\xi) \right)\ . \tag{17}$$

A expressão anterior mostra que se definirmos a regra de quadratura

$$M(f) = \frac{c_2\, Q(f) + d_2\, C(f)}{c_2 + d_2}, \tag{18}$$

o respectivo erro é:

$$E_M(f) = \frac{(b-a)^{m+2}}{c_2 + d_2} \left(d_1\, f^{(m+1)}(\bar{\xi}) - c_1\, f^{(m+1)}(\xi) \right)\ . \tag{19}$$

A regra (18) é uma *média pesada* das regras $Q(f)$ e $C(f)$, com pesos positivos, e consequentemente o valor de $M(f)$ encontra-se entre os valores de $Q(f)$ e $S(f)$.

3.3 Regra associada de Simpson-Milne e estimativas de erro

Tomando para o par de regras companheiras o par $(S(f), N(f))$, com as regras de Simpson (6) e de Milde (8), cujo grau é $m = 3$, das respectivas expressões para os erros em (7) e (9), deduzimos que podemos tomar

$$\begin{aligned} c_1 &= 1 \quad \text{e} \quad c_2 = 2\,880 = 2^6\, 3^2\, 5 \quad \text{(Simpson)}, \\ d_1 &= 7 \quad \text{e} \quad d_2 = 23\,040 = 2^9\, 3^2\, 5 \quad \text{(Milne)}. \end{aligned}$$

A regra associada $M(f)$ é da forma

$$M(f) = \frac{2^6\, 3^2\, 5\, (S(f) + 8\, N(f))}{2^6\, 3^2\, 5 (1+8)} = \frac{S(f) + 8N(f)}{9}\ . \tag{20}$$

Como a regra de Simpson $S(f)$ é negativa enquanto a regra de Milne $N(f)$ é positiva, no pressuposto da quarta derivada da função f não mudar de sinal no intervalo de integração, deverão verificar-se as seguintes desigualdades:

$$N(f) \leq M(f) \leq I(f) \leq S(f)$$
ou
$$S(f) \leq I(f) \leq M(f) \leq N(f),$$

dependendo de $f^{(4)}$ ser positiva ou negativa, respectivamente.

Substituindo na média pesada (20) as expressões das regras de Simpson e de Milne, após simplificações, obtém-se a seguinte expressão para a regra associada $M(f)$,

$$M(f) = \frac{(b-a)}{54}\left[f(a) + 4\left(8\,f\left(\frac{3\,a+b}{4}\right) - 3\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 8\,f\left(\frac{a+3\,b}{4}\right)\right) + f(b)\right] . \tag{21}$$

Recorrendo ao método dos coeficientes indeterminados (3)-(5), pode verificar-se que a regra associada M em (21) é de grau 3, tal como as regras companheiras de Simpson-Milne, de que a regra $M(f)$ é 'descendente'.

Os resultados obtidos para as regras de Simpson-Milne e regra associada podem facilmente ser reproduzidos de modo a construirmos uma família de regras e suas associadas, a partir de um dado par inicial de regras companheiras.

Observe-se que as tabelas Tab.1 e Tab.2 evidenciam não só o grau das regras como em particular a factorização das constantes inteiras c_1, c_2, d_1, d_2 que entram na construção de uma regra associada a um par de regras de sinais opostos.
Atendendo a (19), como $m = 3$ e $c_2 + d_2 = 25\,920$, a expressão do erro de $M(f)$ é da forma

$$E_M(f) = \frac{(b-a)^5}{1080}\left(7\,f^{(4)}(\bar{\xi}) - f^{(4)}(\xi)\right), \quad \bar{\xi}, \xi \in (a,b) \; . \tag{22}$$

A expressão (22) sugere que uma boa estimativa do erro da regra associada $M(f)$, supondo o intervalo $[a,b]$ suficientemente pequeno, poderá ser calculada mediante aplicação de diferenças divididas ([16] e [2], p. 144), para aproximar as derivadas de quarta ordem que constam dessa expressão.
Com efeito, uma vez que por hipótese $f \in C^4([a,b])$, sabe-se que fixados 5 nós $x_0 < x_1 < \ldots < x_4$ no intervalo em causa, existe $\theta \in (x_0, x_4)$, tal que

$$f^{(4)}(\theta) = 4!\, f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4], \qquad \theta \in (x_0, x_4),$$

onde $f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$ designa a diferença dividida de quarta ordem, para os nós considerados.

Substituindo cada quarta derivada em (22) por uma diferença dividida, obtém-se uma estimativa do erro da regra associada $M(f)$, dada por

$$\begin{aligned} E_M(f) &= I(f) - M(f) \\ &\simeq \frac{(b-a)^5\,4!}{25\,920}\left(7\,f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] - f[\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3, \tilde{x}_4]\right) . \end{aligned} \tag{23}$$

Observação

A escolha das constantes c_1, c_2, d_1, d_2 feita na dedução da regra associada de Simpson-Milne não é a única possível. De facto, com as escolhas feitas, temos

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{1}{2^6 3^2 5}, \quad \frac{d_1}{d_2} = \frac{7}{2^9 3^2 5},$$

mas também poderíamos ter escolhido, por exemplo,

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{1}{2^6 3^2 5}, \quad \frac{d_1}{d_2} = \frac{7/2}{2^8 3^2 5} \qquad \text{ou} \qquad \frac{c_1}{c_2} = \frac{1}{2^6 3^2 5}, \quad \frac{d_1}{d_2} = \frac{7/8}{2^6 3^2 5}.$$

Com estas escolhas obteríamos as regras associadas

$$\begin{aligned} M(f) &= \frac{S(f) + 4\,N(f)}{5} \\ &= \frac{(b-a)}{30}\left[f(a) + 4\left(4\,f\left(\frac{3a+b}{4}\right) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 4\,f\left(\frac{a+3\,b}{4}\right)\right) + f(b)\right] \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} M(f) &= \frac{S(f) + N(f)}{2} \\ &= \frac{(b-a)}{12}\left[f(a) + 2\left(2\,f\left(\frac{3\,a+b}{4}\right) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f\left(\frac{a+3\,b}{4}\right)\right) + f(b)\right], \end{aligned}$$

com propriedades análogas à regra deduzida em (21). Nestas novas escolhas, mantivemos os valores de c_1 e c_2 e apenas diminuímos os valores de d_1 e d_2. Se analizarmos a expressão (19) para o erro da regra associada, admitindo que $f^{(4)}(\xi) \simeq f^{(4)}(\bar{\xi})$, temos

$$E_M(f) \simeq (b-a)^5\left(\frac{d_1 - c_1}{c_2 + d_2}\right) f^{(4)}(\xi).$$

O fator $(d_1 - c_1)/(c_2 + d_2)$ assume os valores 2.3×10^{-4} (para $d_1 = 7$), 1.7×10^{-4} (para $d_1 = 7/2$) e 2.2×10^{-5} (para $d_1 = 7/8$), no caso das três regras consideradas. Sendo assim, esta análise mostra que não será sempre verdade que a primeira escolha á a que levará um menor erro de truncatura (caso que seria a escolha ideal). Questões relacionadas com a optimização de regras companheiras em geral serão abordadas noutro trabalho.

3.4 Regra associada das regras companheiras trapézios e ponto médio

Mostramos a seguir que a regra associada ao primeiro par de regras de Newton-Cotes que são companheiras (trapézios, ponto médio) é a regra de Simpson, para a qual obtemos uma expressão de erro a partir das fórmulas de erro de cada regra do par.

As regras dos trapézios $T(f)$ e do ponto médio $P(f)$ (cf. Tabelas 1 e 2) são companheiras, ambas de grau $m = 1$. A partir das expressões dos respectivos erros, podemos definir

$$\begin{array}{ll} c_1 = 1 \quad \text{e} \quad c_2 = 12 = 2^2\,3 & \text{(trapézios)}, \\ d_1 = 1 \quad \text{e} \quad d_2 = 24 = 2^3\,3 & \text{(ponto médio)}. \end{array}$$

Usando (18) com $Q(f) = T(f)$ e $C(f) = P(f)$, concluímos que a regra associada $M(f)$ ao par $(T(f), P(f))$ é da forma

$$M(f) = \frac{2^2\,3\,(T(f) + 2\,P(f))}{2^2\,3\,(1+2)} = \frac{T(f) + 2\,P(f)}{3},$$

isto é, a regra associada é uma *média pesada* das regras do par considerado.

Note-se que à regra do ponto médio é atribuído o peso 2 enquanto à regra dos trapézios corresponde o peso 1, de acordo com o facto de que o erro da regra do ponto médio, em módulo, ser aproximadamente metade do erro da regra dos trapézios.

Substituindo as expressões de $T(f)$ e $P(f)$ e simplificando, resulta

$$M(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right),$$

que coincide com a expressão da célebre regra de Simpson (ver (6)).

4 Exemplos numéricos

Nos exemplos numéricos que propomos, onde testamos as regras companheiras Simpson-Milne e respectiva regra associada, usamos como estratégia aproximar cada uma das derivadas de quarta ordem em (22) recorrendo a uma diferença dividida num suporte com 5 pontos, mediante o comando `RandomReal[{a,b},{5}]`, aplicado duas vezes (cf. com funções `ErroM[f,a,b]`, e `ErroM[f,a,b,n]`, definidas na Secção 5).

Regras compostas

Nos exemplos apresentados adiante consideramos regras *compostas*. Para tal, subdividindo o intervalo $[a,b]$ em n ($n \geq 2$) partes, de comprimento uniforme $h = (b-a)/n$, as regras anteriormente consideradas são aplicadas sucessivamente a cada subintervalo $[a_i, b_i]$, que resulta de particionar dois a dois a lista de valores $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ (onde $x_0 = a$ e $x_n = b$, $x_i = a + i\,h$, para $i = 1, \ldots, n-1$), e somamos os resultados obtidos.
Para o efeito, nalgumas funções definidas no código *Mathematica*, na Secção 5, são usados os comandos `Range`, `Partition` e `Total` .

Exemplo 4.1.

Para aproximar

$$I(f) = \int_{1/20}^{3/2} \frac{\sin(x)}{x}\, dx = Si(3/2) - Si(1/20) = 1.2746904\cdots,$$

(Si designa a função seno integral), subdividamos o intervalo $[a,b] = [1/20, 3/2]$ em n partes iguais, para $n = 2^j$, com $j = 1, 2, \ldots, 5$. Iremos aplicar as duas primeiras regras companheiras de Newton-Cotes, de grau 1, compostas.

Designe-se por $P_n(f)$ a regra do ponto médio composta, por $T_n(f)$ a regra dos trapézios composta e por $M_n(f)$ a regra associada (coincidente com a regra de Simpson composta). Na tabela Tab. 3, para cada n, apresenta-se o resultado da aplicação das referidas regras, sendo os erros $I(f) - T_n(f)$, $I(f) - P_n(f)$ e $I(f) - M_n(f)$, arredondados de modo a economizar o espaço ocupado pelas respectivas colunas.
Note-se que a sucessão dos valores de $T_n(f)$ (trapézios) é crescente, a sucessão dos valores de $P_n(f)$ (ponto médio) é decrescente e $T_n(f) < M_n(f) < P_n(f)$. Os resultados numéricos obtidos sugerem que o encaixe de intervalos $[T_2(f), P_2(f)] \supset [T_4(f), P_4(f)] \supset \cdots \supset [T_{32}(f), P_{32}(f)] \supset \cdots$ contém o valor exacto de $I(f)$. Com efeito, dado que

n	Trapézios	I(f)-T_n(f)	Ponto médio	I(f)-P_n(f)	M_n(f)	I(f)-M_n(f)
2	1.25798336839	0.01671	1.28307550595	-0.00839	1.2747114601	-0.000020985
4	1.27052943717	0.00416	1.27677294535	-0.00208	1.27469177596	-1.3009×10^{-6}
8	1.27365119126	0.00104	1.27521023872	-0.00052	1.27469055623	-8.11×10^{-8}
16	1.27443071499	0.00026	1.27482036275	-0.00013	1.27469048016	-5.1×10^{-9}
32	1.27462553887	0.00006	1.27472294368	-0.00003	1.27469047541	$-3. \times 10^{-10}$

Tab. 3: Regras compostas (trapézios, ponto médio) e associada (Simpson).

$$f^{(2)}(x) = \frac{(2-x^2)\,\sin(x) - 2\,x\,\cos(x)}{x^3} < 0, \quad \forall x \in [1/20, 3/2],$$

atendendo às respectivas fórmulas de erro, para a regra dos trapézios tem-se $I(f) - T_n(f) > 0$, e para a regra do ponto médio $I(f) - P_n(f) < 0$, donde

$$T_n(f) < I(f) < P_n(f), \quad n = 2, 4, 8, \ldots \, .$$

e

$$|I(f) - M_n(f)| \le min\left(|T_n(f) - M_n(f)|, |P_n(f) - M_n(f)|\right),$$

onde $M_n(f)$ designa a regra de Simpson composta para n subintervalos de $[1/20, 3/2]$.

Os dois exemplos numéricos a seguir referem-se ao par de regras companheiras (Simpson,Milne) e respectiva regra associada.

Exemplo 4.2.

Para aproximar o integral[2]

$$I(f) = \int_0^{\pi} \sin(x^2)\, dx,$$

apliquemos as regras companheiras Simpson-Milne e a respectiva regra associada $M(f)$ em (21), bem como as estimativas de erro (23), compondo para um número de subintervalos $n \in \{2, 4, 8 \ldots, 1024\}$. O resultado é apresentado na tabela Tab. 4. O último valor produzido pela regra $M(f)$ tem um erro exacto $I(f) - M_{1024}(f) = 4.92461627033 * 10^{-12}$ (para a precisão dupla nos cálculos, da ordem de 10^{-16}, usada por defeito no sistema *Mathematica* ao aplicar-se o comando `NIntegrate`).
Comparando com o erro estimado que consta na última coluna da tabela, em último lugar, conclui-se que neste caso a fórmula (23), adoptada para estimativa de erro, dá uma excelente aproximação do erro efectivamente cometido, embora se recorra a números pseudo-aleatórios.

n	Simpson	Milne	M	Erro estimado de M
2	0.120443827899	1.55309670815	1.39391305479	-0.385838966585
4	0.836770268026	0.713447478675	0.727150010825	0.0286290141207
8	0.775108873351	0.770455536125	0.770972573595	0.00281025143553
16	0.772782204738	0.77253691081	0.772564165691	0.0000994955173022
32	0.772659557774	0.772644838899	0.772646474329	$5.55562564783\times 10^{-6}$
64	0.772652198336	0.772651287605	0.772651388797	$3.25709019048\times 10^{-7}$
128	0.772651742971	0.772651686192	0.772651692501	$1.99779536495\times 10^{-8}$
256	0.772651714581	0.772651711035	0.772651711429	$1.25423807114\times 10^{-9}$
512	0.772651712808	0.772651712587	0.772651712611	$7.87398784067\times 10^{-11}$
1024	0.772651712697	0.772651712684	0.772651712685	$5.03910599123\times 10^{-12}$

Tab. 4: $f(x) = \sin(x^2),\ a = 0,\ b = \pi$. Regras compostas Simpson-Milne e associada $M(f)$.

Observe-se que, a partir de $n = 4$, a sucessão de valores calculados para a regra de Simpson é decrescente, de acordo com o facto de se tratar de uma regra *negativa*, enquanto a sucessão de valores da regra de Milne é crescente, igualmente de acordo com o facto de esta regra ser *positiva*. O par de regras companheiras (usado na forma de regras compostas, para um número n crescente de subintervalos), produz um encaixe de intervalos contendo o valor exacto do integral $I(f)$.

[2] O comando Integrate do *Mathematica dá como resposta* $\sqrt{\pi/2}$ *FresnelS*$[\sqrt{2\,\pi}]$.

A discussão da teoria algorítmica para a construção de encaixes de intervalos a partir de regras companheiras, quer sejam do tipo das regras de Newton-Cotes ou outro, ultrapassa o âmbito desta nota.

n	Simpson	Milne	M	Erro estimado de M
2	892.345588224	880.400393147	881.727637045	1.81083464047
4	886.372990686	885.403727595	885.511423494	0.364551173785
8	885.88835914	885.82883781	885.835451291	0.0216819364967
16	885.858598475	885.854876956	885.855290458	0.00133815034131
32	885.856737716	885.856505057	885.856530908	0.0000830153104758
64	885.856621387	885.856606844	885.85660846	$5.17736182432 \times 10^{-6}$
128	885.856614115	885.856613206	885.856613307	$3.23240020195 \times 10^{-7}$
256	885.856613661	885.856613604	885.85661361	$2.04817967478 \times 10^{-8}$
512	885.856613633	885.856613629	885.856613629	$1.24214633675 \times 10^{-9}$
1024	885.856613631	885.856613631	885.856613631	$1.16921437361 \times 10^{-10}$

Tab. 5: $f(x) = 4\,\cosh(x/4) - \sin(x)/x,\ a = 1,\ b = 6\,\pi$. Regras compostas de Simpson-Milne e associada $M(f)$.

Exemplo 4.3.

Usando o mesmo procedimento do exemplo anterior, para aproximar o integral[3]

$$I(f) = \int_1^{6\,\pi} \left(4\,\cosh\left(\frac{x}{4}\right) - \frac{\sin(x)}{x}\right)\, dx,$$

obtemos os resultados que constam da tabela Tab. 5. Aqui verifica-se um comportamento monótono decrescente da regra de Simpson composta, para uma sucessão crescente de valores de $n \geq 2$, por oposição à monotonia crescente da regra de Milne, encaixando assim o valor exacto de $I(f)$. Note-se que o erro exacto do último valor calculado com a regra associada, $M_{1024}(f)$, vale aproximadamente $7.9 * 10^{-11}$, pelo que este erro está bem estimado através da fórmula (23), conforme se pode observar através do último valor na quinta coluna da tabela.

Agradecimento

São devidos agradecimentos ao referee anónimo cujas sugestões e observações muito contribuíram para a melhoria da apresentação e conteúdo do original deste trabalho.

[3] O comando Integrate do *Mathematica dá como resposta*
$-16\sinh(1/4) + 16\sinh(3\pi/2) + SinIntegral[1] - SinIntegral[6\,\pi]$.

5 Código *Mathematica*

```
(* regra dos trapézios *)
Trapezios[f_, a_, b_] := (b - a)/2 (f[a] + f[b]);

(* regra dos trapézios composta para n subintervalos *)
Trapezios[f_, a_, b_, n_] := (h = (b - a)/n;
   Total[Map[Trapezios[f, #[[1]], #[[2]]] &,
     Partition[Range[a, b, h], 2, 1]]]);

(* regra do ponto médio *)
PontoMedio[f_, a_, b_] := (b - a) f[(a + b)/2];

(* regra do ponto médio  composta para n subintervalos *)
PontoMedio[f_, a_, b_, n_] := (h = (b - a)/n;
   Total[Map[PontoMedio[f, #[[1]], #[[2]]] &,
     Partition[Range[a, b, h], 2, 1]]]);

(* Notar que a regra associada ao par (trapézios, ponto médio)  *)
(* é a regra de Simpson *)

(* regra de Simpson *)
Simpson[f_, a_, b_] := Block[{h},
   h = (b - a)/2;
   h/3 (f[a] + 4 f[a + h] + f[b])];

(* regra de Simpson composta para n subintervalos *)
Simpson[f_, a_, b_, n_ /; EvenQ[n]] := Block[{h},
   h = (b - a)/n;
   Total[Map[Simpson[f, #[[1]], #[[2]]] &,
     Partition[Range[a, b, h], 2, 1]]]];

(* regra de Milne *)
Milne[f_, a_, b_] := Block[{h},
   h = (b - a)/4;
   4 h/3 (2 f[a + h] - f[a + 2 h] + 2 f[a + 3 h])];

(* regra de Milne composta com n subintervalos *)
Milne[f_, a_, b_, n_ /; EvenQ[n]] := Block[{h},
   h = (b - a)/n;
```

```
   Total[Map[Milne[f, #[[1]], #[[2]]] &,
     Partition[Range[a, b, h], 2, 1]]]];

(* regra M(f) associada ao par de companheiras (Simpson,Milne) *)
M[f_, a_, b_] := Block[{q, s},
   q = Milne[f, a, b];
   s = Simpson[f, a, b];
   (8 q + s)/9];

(* regra M(f) composta com n subintervalos *)
M[f_, a_, b_, n_] := Block[{h},
   h = (b - a)/n;
   Total[Map[M[f, #[[1]], #[[2]]] &,
     Partition[Range[a, b, h], 2, 1]]]];

(* calculo diferença dividida de lista : *)
d[{xi_}] := f[xi];
d[x_List] := (d[Rest[x]] - d[Most[x]])/(Last[x] - First[x]);

(* estimativa de erro para a regra associada M(f) *)
(* de Simpson-Milne *)
ErroM[f_, a_, b_] := Block[{dif1, dif2},
    dif1 = d[RandomReal[{a, b}, 5]];;
   dif2 = d[RandomReal[{a, b}, 5]];
   (b - a)^5  1/1080 ( 7 dif1 - dif2 )];

(* estimativa de erro para  M(f) composta com n subintervalos *)
(* de Simpson-Milne *)
ErroM[f_, a_, b_, n_] := Block[{h},
   h = (b - a)/n;
   Total[Map[ErroM[f, #[[1]], #[[2]]] &,
     Partition[Range[a, b, h], 2, 1]]]];
```

Referências

[1] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, Dover, 1972.

(disponível em http://people.math.sfu.ca/~cbm/aands/intro.htm#006).

[2] K. E. Atkinson, *An Introduction to Numerical Analysis*, John Wiley and Sons, New York, 2nd ed., 1989.

[3] H. Brass, K. Petras, *Quadrature Theory, the theory of numerical integration on a compact interval*, American Mathematical Society, Providence, 2011.

[4] R. L. Burden, J. D. Faires, *Numerical Analysis*, Brooks/Cole, Boston, 2011.

[5] S. D. Conte, C. de Boor, *Elementary Numerical Analysis, An Algorithmic Approach*, McGraw-Hill inc, New York, 1980.

[6] G. Dahlquist, A. Bjorck, *Numerical methods in Scientific Computing*, Vol. I, SIAM, Philadelphia, 2008.

[7] H. Engels, *Numerical quadrature and cubature*, Academic Press, London, 1980.

[8] P. J. Davis, P. Rabinowitz *Methods of Numerical Integration*, Academic Press, Orlando, 1984.

[9] W. Gautschi, *Numerical Analysis, An Introduction*, Birkhauser, Boston, 1997.

[10] M. M. Graça, Quadrature as a least-squares and minimax problem, *Int. J. Numerical Methods and Applications*, 10, 1-28, 2013.

[11] R. W. Hamming *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, New York, 1973.

[12] R. Kress, *Numerical Analysis*, Springer, Berlin, 1998.

[13] V. I. Krylov, *Approximate Calculation of Integrals*, Dover Pub., New York, 2005.

[14] A. R. Krommer, C. W. Ueberhuber, *Computacional Integration*, SIAM, Philadelphia, 1998.

[15] W. E. Milne, *Numerical Calculus: Approximations, interpolation, finite differences, numerical integration and curve fitting*, Princeton University Press, 1954 (reeditado em 2016).

[16] L. M. Milne-Thomson, *Calculus of Finite Differences*, MacMillan Co., London, 1933.

[17] I. Newton, *Treatise of the Quadrature of Curves*, in *Sir Isaac Newton's Two Treatises of The Quadrature of Curves, and Analysis by Equations of an infinite Number of Terms*, by John Stewart, James Bettenham, London, 1745.

[18] S. Nikolski, *Fórmulas de Cuadratura*, Editorial MIR, Moscú, 1990 (versão em espanhol).

[19] J. Stoer, R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer, New York, 1980.

[20] E. Suli, D. Mayers, *An Introduction to Numerical Analysis*, Cambridge University Press, New York, 2003.

[21] S. Wolfram, *The Mathematica Book*, Wolfram Media, fifth ed., 2003.