

Matemática Computacional :: Quadratura

maria irene falcão

Mestrado em Matemática e Computação

3. Quadratura Numérica

3.1 Quadratura: background

3.1.1 Regras de Newton-Cotes

Consideremos o problema de estimar o valor de um certo integral

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

o qual supomos existir, e suponhamos que tal é feito usando uma regra de quadratura da forma

$$I \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i). \quad (3.1)$$

Os pontos x_i são chamados **abscissas** (ou **pontos de quadratura**) da regra de quadratura e os coeficientes w_i são chamados **pesos** dessa regra. Ao erro resultante da substituição do integral pelo valor dado pela regra, chamamos **erro de quadratura** da regra em questão.¹

Diz-se que uma regra de quadratura tem **precisão** m (ou é de grau m) se for exata para todos os polinómios de grau não superior a m e existir, pelo menos, um polinómio de grau $m + 1$ que não é integrado exatamente por essa fórmula.

As **regras de quadratura de Newton-Cotes (fechadas)** são regras do tipo (3.1), nas quais:

- se consideram para abscissas os n pontos igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$,

$$x_i = a + (i - 1)h; \quad i = 1, \dots, n; \quad h = \frac{b - a}{n - 1}; \quad (3.2)$$

- os pesos w_i são determinados substituindo a função integranda f pelo polinómio P_{n-1} de grau não superior a $n - 1$ que interpola f nas n abscissas x_i .

Exercício 3.1 *Mostre que os pesos w_i da regra de Newton-Cotes com n abscissas x_1, \dots, x_n são dados por*

$$w_i = \int_a^b L_i(x)dx; \quad i = 1, \dots, n,$$

onde $L_i(x)$ são os polinómios de Lagrange relativos às abscissas x_1, \dots, x_n .

¹Referimo-nos, aqui, ao erro de truncatura, não considerando os eventuais erros de arredondamento cometidos ao efetuar os cálculos.

Exercício 3.2 Mostre que a precisão de uma regra de quadratura de Newton-Cotes com n abscissas x_1, \dots, x_n é, no máximo, $2n - 1$.

Exercício 3.3 Mostre que a regra de quadratura de Newton-Cotes para $n = 2$ é dada por

$$Q_2[f] = \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_2)].$$

Esta regra é conhecida pelo nome do **regra do trapézio**. Interprete geometricamente esta regra e apresente uma justificação para esta designação.

Apresentamos, de seguida, uma tabela com os pesos e a expressão do erro de quadratura² das fórmulas de Newton-Cotes fechadas para $n = 2, \dots, 9$. Para simplificar a tabela, consideramos as fórmulas escritas na forma

$$Q_n(f) = C_n h [w_1 f_1 + \dots + w_n f_n]$$

e indicamos, em cada caso, o valor de C_n e dos coeficientes $w_i; i = 1, \dots, \lfloor (n+1)/2 \rfloor$; os restantes coeficientes w_i podem ser obtidos por simetria, isto é, $w_{n+1-i} = w_i$. Indicamos também o nome por que são conhecidas algumas dessas regras.

Fórmulas de Newton-Cotes

n	C_n	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	$E_n(f)$	Nome
2	$\frac{1}{2}$	1					$-\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\eta)$	Trapézio
3	$\frac{1}{3}$	1	4				$-\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta)$	Simpson
4	$\frac{3}{8}$	1	3				$-\frac{3h^5}{180} f^{(4)}(\eta)$	Três oitavos
5	$\frac{2}{45}$	7	32	12			$-\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\eta)$	Milne
6	$\frac{5}{288}$	19	75	50			$-\frac{275h^7}{12\,096} f^{(6)}(\eta)$	—
7	$\frac{1}{140}$	41	216	27	272		$-\frac{9h^9}{180} f^{(8)}(\eta)$	Weddle
8	$\frac{7}{17\,280}$	751	3577	1323	2989		$-\frac{8\,183h^9}{518\,400} f^{(8)}(\eta)$	—
9	$\frac{4}{14175}$	989	5888	-928	10496	-4540	$-\frac{2368h^{11}}{467\,775} f^{(10)}(\eta)$	—

3.1.2 Regras compostas

As regras de Newton-Cotes para valores de n elevado têm pesos negativos e positivos, sendo sujeitas a problemas de instabilidade, pelo que são raramente utilizadas. Em vez disso, poderá recorrer-se ao uso de regras compostas. A ideia das regras compostas é subdividir o intervalo de integração $[a, b]$ num certo número de subintervalos e aplicar as regras simples em subintervalos. Temos, em particular os seguintes resultados.

Teorema 3.1 (Regra do Trapézio Composta)

²Supondo que a função integranda é suficientemente diferenciável em $[a, b]$.

Seja $f \in C^2[a, b]$ e sejam $x_i = a + (i - 1)h$; $i = 1, \dots, N + 1$, com $h = \frac{b-a}{N}$. Então, tem-se

$$\int_a^b f(x)dx = T_N(f) + E_{T_N}(f), \quad (3.3)$$

onde

$$T_N(f) := \frac{h}{2} [f_1 + 2(f_2 + \dots + f_N) + f_{N+1}] \quad \text{e} \quad E_{T_N}(f) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f^{(2)}(\eta). \quad (3.4)$$

Teorema 3.2 (Regra de Simpson composta)

Seja $f \in C^4[a, b]$ e sejam $x_i = a + (i - 1)h$; $i = 1, \dots, 2m + 1$, com $h = (b - a)/2m$. Então,

$$\int_a^b f(x)dx = S_{2m}(f) + E_{S_{2m}}(f), \quad (3.5)$$

onde

$$S_{2m}(f) := \frac{h}{3} [f_1 + 4(f_2 + \dots + f_{2m}) + 2(f_3 + \dots + f_{2m-1}) + f_{2m+1}] \quad (3.6)$$

e

$$E_{S_{2m}}(f) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\eta). \quad (3.7)$$

3.1.3 Exercícios

Exercício 3.4

a) Deduza a chamada *Regra do Ponto Médio*,

$$\int_a^b f(x)dx = h f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{h^3}{24} f''(\xi), \quad \xi \in (a, b), \quad (3.8)$$

onde $h = b - a$ e se supõe $f \in C^2[a, b]$.

b) Interprete geometricamente a regra anterior.

c) A partir da regra (3.8), deduza a Regra do Ponto Médio Composta

$$\int_a^b f(x)dx = h \sum_{i=1}^N f_{i+\frac{1}{2}} + \frac{h^2}{24} (b-a) f''(\eta),$$

onde $x_{i+\frac{1}{2}} = a + (2i - 1)\frac{h}{2}$, $i = 1, \dots, N$, $h = \frac{b-a}{N}$, $f_{i+\frac{1}{2}} := f(x_{i+\frac{1}{2}})$ e $\eta \in (a, b)$.

d) Use a regra definida na alínea anterior, com $N = 10$, para estimar o valor de $I = \int_0^1 (1 + e^{-x} \sin 4x) dx$.

Exercício 3.5 Considere o integral

$$I = \int_1^6 (2 + \sin(2\sqrt{x})) dx.$$

- a) Obtenha aproximações para I , usando a regra do trapézio composta com N subintervalos, T_N , para os seguintes valores sucessivos de N : 10, 20, 40, 80 e 160.
- b) Sabendo que o valor do integral (com 10 c.d.) é $I = 8.1834792077$, calcule $|E_{T_N}|$ para os sucessivos valores de N e diga se os resultados confirmam a ordem de aproximação $\mathcal{O}(h^2)$ ($h = (b - a)/N$) da regra do trapézio composta.

Exercício 3.6

- a) Estabeleça a seguinte estimativa³ para o erro da regra do trapézio com N subintervalos (N par):

$$|E_{T_N}(f)| \approx \left| \frac{T_N(f) - T_{N/2}(f)}{3} \right|. \quad (3.9)$$

- b) Considere o integral

$$I = \int_{-0.1}^{0.1} \cos x dx.$$

Estime o valor de I usando T_4 e T_8 e obtenha, então, uma estimativa para $|E_{T_8}|$. Compare essa estimativa com o erro efetivamente cometido.

Exercício 3.7 Seja S_N um valor aproximado para o integral $I = \int_a^b f(x)dx$ obtido usando a regra de Simpson composta com N subintervalos (N múltiplo de 4) e seja $E_{S_N}(f)$ o respectivo erro de truncatura. Estabeleça a seguinte estimativa⁴ para o erro:

$$|E_{S_N}(f)| \approx \left| \frac{S_N(f) - S_{N/2}(f)}{15} \right|. \quad (3.10)$$

Exercício 3.8 Obtenha informação sobre a função `integral` do Matlab e utilize-a para estimar os integrais cujo cálculo é requerido nas alíneas seguintes.

- a) A função erro, `erf`, é definida por

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt.$$

Determine uma estimativa para $\operatorname{erf}(0.5)$.

Use a função pré-definida `erf` para estimar novamente o valor $\operatorname{erf}(0.5)$, comparando com o valor obtido por integração.

- b) Tendo em conta que a área do círculo unitário é $A = \pi$, deduza que

$$\frac{\pi}{4} = \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx.$$

Obtenha uma estimativa para π , usando o integral anterior.

³Assuma que $f \in C^{(2)}[a, b]$ e que $f^{(2)}$ não varia muito no intervalo $[a, b]$.

⁴Assuma que $f \in C^{(4)}[a, b]$ e que $f^{(4)}$ não varia muito no intervalo $[a, b]$.

3.2 Quadratura Gaussiana

As regras de quadratura de Newton-Cotes são da forma

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) \quad (3.11)$$

onde as abcissas x_i são igualmente espaçadas em $[a, b]$ e onde os pesos A_i são dadas por $\int_a^b L_i(x)dx$ (cf Exercício 3.1). Tais fórmulas são, como vimos, exatas para polinómios de grau $\leq n$ (ou, sendo n par, exatas para polinómios de grau $\leq n+1$). É, no entanto, possível, obter regras do tipo (3.11) exatas para polinómios de grau $2n+1$, escolhendo as abcissas **apropriadamente**. Esta é a ideia básica das regras de quadratura Gaussiana.

Exemplo 3.1 Suponhamos, sem perda de generalidade, que $[a, b] = [-1, 1]$ ⁵ e que pretendemos encontrar uma regra de quadratura do tipo

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \quad (3.12)$$

que seja exata para polinómios de grau ≤ 3 . Como a integração é um processo linear, a fórmula (3.12) será exata para polinómios de grau ≤ 3 se e só se integrar exatamente os polinómios $1, x, x^2$ e x^3 . Ter-se-á, então

$$\int_{-1}^1 1dx = A_0 + A_1; \quad \int_{-1}^1 xdx = A_0 x_0 + A_1 x_1; \quad \int_{-1}^1 x^2 dx = A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2; \quad \int_{-1}^1 x^3 dx = A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3,$$

donde se obtêm as seguintes equações

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \frac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0 \end{cases}$$

Facilmente se verifica que $A_0 = A_1 = 1$ e $x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$, $x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$ é solução deste sistema não linear. Temos, então, que a seguinte regra de quadratura

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

é exata para polinómios de grau ≤ 3 . □

O processo descrito para obter a regra anterior pode generalizar-se: para obter uma regra de quadratura da forma

$$I = \int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + \dots + A_n f(x_n)$$

⁵Ver Exercício 3.2.

que seja exata para polinómios de grau $\leq 2n + 1$, deveremos resolver as seguintes $2n + 2$ equações não lineares

$$\sum_{j=0}^n A_j x_j^k = \alpha_k; k = 0, \dots, 2n + 1,$$

onde

$$\alpha_k = \int_{-1}^1 x^k dx = \begin{cases} \frac{2}{k+1} & \text{se } k \text{ par} \\ 0 & \text{se } k \text{ ímpar} \end{cases}$$

Se tais equações tiverem solução (real) e se encontrarmos a sua solução, obteremos os pesos A_i e as abcissas x_i que procuramos. Esta abordagem algébrica de obter estas regras de quadratura não é, no entanto, a mais adequada. Vamos, assim, procurar deduzi-las por um processo analítico, o qual terá ainda a vantagem de determinar uma fórmula para o erro de quadratura associado a cada uma das regras.

Recordemos a fórmula de interpolação de Hermite (simples) nos pontos x_0, \dots, x_n :

$$f(x) = \sum_{i=0}^n h_i(x) f(x_i) + \sum_{i=0}^n \tilde{h}_i(x) f'(x_i) + e_{2n+1}(x) \quad (3.13)$$

onde

$$h_i(x) = (1 - 2L'_i(x_i)(x - x_i)) L_i^2(x); \quad \tilde{h}_i(x) = (x - x_i) L_i^2(x),$$

$$e_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i)^2.$$

Teremos, então, integrando (3.13) entre -1 e 1 :

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + \sum_{i=0}^n B_i f'(x_i) + \mathcal{E}_{2n+1}(f) \quad (3.14)$$

onde

$$A_i = \int_{-1}^1 h_i(x) dx, \quad B_i = \int_{-1}^1 \tilde{h}_i(x) dx,$$

$$\mathcal{E}_{2n+1}(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_{-1}^1 \prod_{i=0}^n (x - x_i)^2 dx$$

(**Nota:** Na determinação da expressão do erro, usámos o Teorema do valor médio para integrais.)

Analisando a expressão de $\mathcal{E}_{2n+1}(f)$, é imediato concluir que a fórmula (3.14) será exata para polinómios de grau $\leq 2n + 1$, para qualquer escolha das abcissas x_i . Se for possível escolher as abcissas por forma que os pesos B_i (associados aos valores das derivadas de f) se anulem, então o nosso problema estará resolvido. Mas,

$$B_i = \int_{-1}^1 (x - x_i) L_i^2(x) dx = \frac{1}{K_i} \int_{-1}^1 \Pi_{n+1}(x) L_i(x) dx$$

onde

$$\Pi_{n+1}(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n) \quad \text{e} \quad K_i = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j).$$

Como $L_i(x)$ é um polinómio de grau n , segue-se de imediato que uma condição **suficiente** para que $B_i = 0$; $i = 0, \dots, n$, é que o polinómio $\Pi_{n+1}(x)$ satisfaça

$$\int_{-1}^1 \Pi_{n+1}(x) q_n(x) dx = 0 \quad (3.15)$$

para todo o polinómio q_n de grau $\leq n$.

Prova-se que a condição anterior será satisfeita se considerarmos para x_0, \dots, x_n os zeros de um determinado polinómio: o chamado **polinómio ortogonal de Legendre de grau $n + 1$** , cuja expressão explícita é

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{[n/2]} (-1)^m \binom{n}{m} \binom{2n-2m}{n} x^{n-2m}.$$

Nota 3.1 Os polinómios ortogonais de Legendre formam uma sequência $\{P_n\}$ de polinómios com as seguintes características:

- (i) cada polinómio P_n é de grau exatamente igual a n ;
- (ii) polinómios distintos são “ortogonais”, no seguinte sentido $\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = 0$, ($m \neq n$).

Pode provar-se facilmente que o polinómio de Legendre de grau $n + 1$ é ortogonal a todos os polinómios de grau não superior a n ; além disso, é também possível mostrar que os $n + 1$ zeros de P_{n+1} são reais, distintos e pertencentes ao intervalo $[-1, 1]$.

Conclusão: a fórmula de quadratura

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) \quad (3.16)$$

em que as abcissas x_i são os $n + 1$ zeros do polinómio ortogonal de Legendre de grau $n + 1$ e em que os pesos A_i são dados por

$$A_i = \int_{-1}^1 h_i(x) dx = \int_{-1}^1 (1 - 2L'_i(x_i)(x - x_i)) L_i^2(x) dx \quad (3.17)$$

é exata para polinómios de grau $\leq 2n + 1$.⁶

Nota 3.2 Note-se que, sendo as abcissas x_i os zeros do polinómio de Legendre de grau $n + 1$, então a expressão dos pesos dada por (3.17) simplifica-se, uma vez que se tem

$$\begin{aligned} A_i &= \int_{-1}^1 (1 - 2L'_i(x_i)(x - x_i)) L_i^2(x) dx \\ &= \int_{-1}^1 L_i^2(x) dx - 2L'_i(x_i) \int_{-1}^1 \Pi_{n+1}(x) L_i(x) dx = \int_{-1}^1 L_i^2(x) dx. \end{aligned} \quad (3.18)$$

⁶Pode provar-se que esta escolha das abcissas e pesos é a única para a qual um fórmula do tipo (3.16) é exata para quaisquer polinómios de grau $\leq 2n + 1$.

A fórmula (3.16) em que as abcissas são os $n + 1$ zeros do polinómio de Legendre de grau $n + 1$ e em que os pesos são dados por (3.18) é chamada **Fórmula de Gauss-Legendre** com $n + 1$ pontos. Os pesos e abcissas das fórmulas de Gauss-Legendre para n com interesse prático encontram-se tabelados⁷. Segue-se uma tabela para os quatro primeiros valores de n .

Abcissas e pesos das fórmulas de Gauss-Legendre ($n + 1$ pontos)

n	x_i	A_i
1	± 0.5773503	1.00000000
2	0.0000000 ± 0.7745967	0.8888889 0.5555556
3	± 0.3399810 ± 0.8611363	0.6521452 0.3478548
4	0.0000000 ± 0.5384693 ± 0.9061798	0.5688889 0.4786287 0.2369269

Exemplo 3.2

- a) Mostre que, através de uma mudança de variável, definida por $t = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x$, se obtém

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

- b) Deduza a seguinte regra de quadratura para estimar o valor do integral

$$\int_a^b f(t)dt \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^n A_i f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x_i\right),$$

onde A_i e x_i são, respetivamente, os pesos e as abcissas da fórmula de quadratura de Gauss-Legendre com $n + 1$ pontos.

- c) Utilize a fórmula de Gauss-Legendre com três pontos para estimar o valor do integral

$$I = \int_1^5 t^5 dt.$$

Compare a estimativa obtida com o valor exato do integral e comente.

□

⁷Veja, e.g. Stroud, A.H. e Secrest, D., *Gaussian Quadrature Formulae*, Prentice-Hall (1966).

3.3 Quadratura Adaptativa

As regras de quadratura adaptativas têm como base o uso de regras compostas, mas neste caso, as amplitudes dos subintervalos são “adaptadas” de acordo com o comportamento local da função integranda.

Dada uma função f e uma tolerância ε para o erro, o objetivo das regras adaptativas é calcular uma aproximação \tilde{I} para $I = \int_a^b f(x) dx$ tal que

$$|\tilde{I} - I| < \varepsilon.$$

\tilde{I} é obtido aplicando uma regra composta ao intervalo $[a, b]$, dividido em N subintervalos “adaptados” $[x_i, x_{i+1}]$, de forma que o erro ε_i em cada aproximação de

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

é tal que

$$\varepsilon_i < \frac{x_{i+1} - x_i}{b - a} \varepsilon.$$

(de modo que $\sum_{i=0}^{N-1} \varepsilon_i < \varepsilon$).

3.3.1 Regra de Simpson Adaptativa

Dada uma função f e uma tolerância ε , pretende obter-se uma aproximação \tilde{I} para

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

baseada na regra de Simpson composta e tal que

$$|\tilde{I} - I| < \varepsilon.$$

Consideremos que o intervalo $[a, b]$ foi inicialmente dividido em N subintervalos⁸ (de igual amplitude),

$$[x_i, x_{i+1}]; i = 0, \dots, N-1; x_0 = a, x_N = b.$$

A regra de Simpson adaptativa consiste em aplicar a cada um dos subintervalos a regra de Simpson e verificar se o erro ε_i satisfaz

$$\varepsilon_i < \frac{x_{i+1} - x_i}{b - a} \varepsilon.$$

Em caso negativo, deve dividir-se cada subintervalo tantas vezes quantas as necessárias para o critério ser satisfeito.

⁸O caso mais simples de considerar é $N = 1$

Algoritmo: Aplicar a cada um dos subintervalos iniciais

$$[x_i, x_{i+1}]; \quad i = 0, \dots, N-1; \quad x_0 = a, \quad x_N = b,$$

o seguinte procedimento:

① Dividir o intervalo em dois subintervalos de igual amplitude $[y_1, y_2]$ e $[y_2, y_3]$ e para cada um deles obter uma aproximação para

$$\int_{y_i}^{y_{i+1}} f(x) dx, \quad i = 1, 2,$$

usando $S(h)$ e $S(\frac{h}{2})$, sendo $h = y_{i+1} - y_i$.

② Usar, para cada um dos dois subintervalos obtidos em ①, a estimativa

$$|E_S(\frac{h}{2})| \approx \frac{1}{15} |S(\frac{h}{2}) - S(h)| =: \mathcal{E}.$$

③ Se $\mathcal{E} > \frac{h}{b-a} \varepsilon$, voltar a ①.

④ Se $\mathcal{E} < \frac{h}{b-a} \varepsilon$, aceitar o valor $S(\frac{h}{2})$ como aproximação para o valor do integral no subintervalo considerado.

⑤ A aproximação para I obtém-se somando todas as aproximações obtidas em ④.

Exemplo 3.3 Usar a regra de Simpson adaptativa para obter uma aproximação, com erro inferior a $\varepsilon = 0.0005$, para o valor do integral ⁹

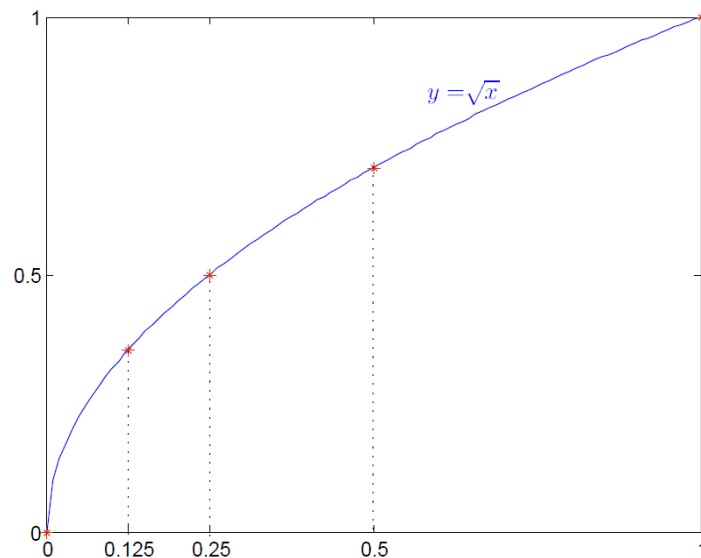
$$I = \int_0^1 \sqrt{x} dx.$$

Intervalo	$S(h)$	$S(\frac{h}{2})$	\mathcal{E}	$\frac{h}{b-a} \varepsilon$
$[0, \frac{1}{2}]$	0.22559223	0.23211709	$4.35E-4$	$2.50E-4$
$[\frac{1}{2}, 1]$	0.43093403	0.43096219	$1.88E-6$	$2.50E-4$
$[0, \frac{1}{4}]$	0.07975890	0.08206578	$1.54E-4$	$1.25E-4$
$[\frac{1}{4}, \frac{1}{2}]$	0.15235819	0.15236814	$6.64E-7$	$1.25E-4$
$[0, \frac{1}{8}]$	0.02819903	0.15236814	$5.44E-5$	$6.25E-5$
$[\frac{1}{8}, \frac{1}{4}]$	0.05386675	0.05387027	$2.35E-7$	$6.25E-5$

⁹Note que $I = \frac{2}{3} = 0.666666 \dots$

$$\tilde{I} = 0.66621524$$

$$|I - \tilde{I}| < 4.52E - 4$$



3.4 Integrais impróprios

A aplicação das regras de quadratura que acabámos de estudar não é imediata quando a função integranda tem singularidades ou quando o intervalo de integração é infinito. Além disso, as fórmulas do erro não são válidas se a função integranda não tiver a suavidade exigida. Vejamos alguma técnicas que nos permitem lidar com alguns desses casos.

3.4.1 Integrandas com singularidades

Se a função f tem singularidades nos pontos $\alpha_1, \dots, \alpha_m$, então poderemos sempre começar por partir o intervalo de integração na forma

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^{\alpha_1} f(x)dx + \sum_{i=1}^{m-1} \int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} f(x)dx + \int_{\alpha_m}^b f(x)dx,$$

de modo a que as singularidades se situem sempre em extremos de intervalos de integração.

Singularidades removíveis

Se $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ são singularidades removíveis, então a cada um dos integrais do segundo membro poderá aplicar-se uma das regras de quadratura referidas, sendo os valores da função nos extremos α_i substituídos pelo limite lateral adequado.

Exemplo 3.4 Consideremos o integral $I = \int_0^1 f(x)dx$, onde

$$f(x) = \frac{1}{e^{\frac{1}{x}} + e^{-\frac{1}{x}}} dx.$$

Então, f não está definida em $x = 0$, é contínua em $(0, 1]$ e $\lim_{x \rightarrow 0^+} f(x) = 0$. Poderemos, assim aplicar uma regra de quadratura no intervalo $[0, 1]$, usando $f(0) := \lim_{x \rightarrow 0^+} f(x) = 0$.

Singularidades essenciais

Naturalmente, temos apenas de estudar o caso do cálculo de um integral da forma $\int_a^b f(x)dx$ quando f tem uma singularidade essencial em a ou em b .¹⁰

Integração por partes

Vamos supor que a singularidade está em a e que o integral a calcular está reescrito na forma

$$I = \int_a^b w(x)g(x)dx,$$

com w uma função com uma singularidade essencial em a , sendo g regular; por exemplo, suponhamos que pretendemos calcular

$$I = \int_0^1 x^{-\frac{1}{2}} \cos x dx$$

Por vezes, como acontece neste exemplo, o problema pode ser resolvido usando integração por partes.

No caso deste exemplo, viria

$$I = \left[2x^{\frac{1}{2}} \cos x \right]_0^1 + 2 \int_0^1 x^{\frac{1}{2}} \sin x dx = 2 \cos 1 + 2 \int_0^1 x^{\frac{1}{2}} \sin x dx$$

e o problema, estaria, em princípio, resolvido. No entanto, deve notar-se que a função $f(x) = x^{\frac{1}{2}} \sin x$ pertence a $C^1(0, 1]$, tendo a sua segunda derivada uma descontinuidade essencial em $x = 0$. (Isto significa, em particular, que não poderemos recorrer às fórmulas do erro, as quais pressupõem uma maior suavidade da função integranda.) Poderíamos, se desejássemos, recorrer novamente a uma integração por partes

$$I = 2 \cos 1 + \left[\frac{4}{3} x^{\frac{3}{2}} \sin x \right]_0^1 - \frac{4}{3} \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} \cos x dx = 2 \cos 1 + \frac{4}{3} \sin 1 - \frac{4}{3} \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} \cos x dx$$

e assim sucessivamente, tantas vezes quantas as necessárias.

¹⁰Se α_i e α_{i+1} forem ambas singularidades essenciais, poder-se-á sempre considerar a possibilidade de partir $\int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} f(x)dx = \int_{\alpha_i}^{\alpha} f(x)dx + \int_{\alpha}^{\alpha_{i+1}} f(x)dx$, para um qualquer ponto $\alpha \in (\alpha_i, \alpha_{i+1})$, tendo-se apenas integrais com singularidades num dos extremos.

Mudança de variável

Por vezes, uma mudança de variável permite eliminar a singularidade. Isto pode ser feito, por exemplo, quando $f(x) \sim c(x-a)^\gamma, \gamma > -1$.¹¹ Nesse caso, pode usar-se a mudança de variável definida por

$$x = a + t^\beta, \quad \text{com } \beta = \frac{2}{\gamma + 1}.$$

Exemplo 3.5 Suponhamos que pretendemos calcular

$$I = \int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt[3]{x}} dx.$$

Usando a expansão de $\exp(x)$ em série de Taylor, vemos que

$$\frac{e^x}{\sqrt[3]{x}} = \frac{1 + x + x^2/2 + \dots}{\sqrt[3]{x}} = x^{-1/3} + x^{2/3} + \dots$$

pelo que $f(x) \sim x^{-1/3}$. Assim, $\gamma = -1/3$ e $\beta = 3$. Fazendo a mudança de variável definida por $x = t^3$, vem

$$I = \int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt[3]{x}} dx = \int_0^1 3t e^{t^3} dt,$$

cujo cálculo não oferece dificuldade. □

Exercício 3.9 Aplique esta técnica ao cálculo do exemplo anterior.

Exemplo 3.6 Outro exemplo em que poderá usar-se uma mudança de variável é o caso em que se pretende determinar um integral da forma

$$I = \int_0^1 \ln x f(x) dx,$$

com f regular. Neste caso, pode efetuar-se uma mudança de variável definida por $x = t^2$, vindo

$$I = 4 \int_0^1 t \ln t f(t^2) dt$$

Como $\lim_{t \rightarrow 0^+} t \ln t = 0$, caímos no caso em que a função integranda tem apenas uma singularidade removível. □

3.4.2 Intervalos Infinitos

Mudança de variável

Uma forma possível de transformar um intervalo de integração infinito num intervalo finito será através de uma mudança de variável. Por exemplo, se $I = \int_0^\infty f(x) dx$ com f regular, a mudança de variável definida por $x = -\ln t$ conduzirá ao integral

$$I = \int_0^1 f(-\ln(t)) \frac{1}{t} dt.$$

Se a função $\frac{f(-\ln t)}{t}$ for regular, o problema estará resolvido.

¹¹Note-se que, se $f(x) \sim (x-a)^\gamma$, com $\gamma \leq -1$, então o integral não existe.

Exemplo 3.7 No caso do integral

$$I = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x}}{1 + e^{-x}} dx,$$

fazendo $x = -\ln t$, vem

$$I = \int_0^1 \frac{1}{1+t} dt.$$

Truncatura do intervalo

Outra técnica simples para calcular $I = \int_a^{\infty} f(x)dx$ consiste em escrever

$$I = \int_a^c f(x)dx + \int_c^{\infty} f(x)dx$$

e, com escolha apropriada de c que garanta que $|\int_c^{\infty} f(x)dx|$ seja “suficientemente pequeno”, aproximar I por $\int_a^c f(x)dx$.

Exemplo 3.8 Seja

$$I = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^x + x^2} dx$$

Note-se que $\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{e^x + x^2} = 0$ e que $\frac{1}{e^x + x^2} < \frac{1}{e^x}$. Então, tem-se

$$I = \int_0^c \frac{1}{e^x + x^2} dx + \int_c^{\infty} \frac{1}{e^x + x^2} dx$$

e

$$\int_c^{\infty} \frac{1}{e^x + x^2} dx < \int_c^{\infty} \frac{1}{e^x} dx = e^{-c}.$$

Para $c = 15$ (p.ex.) tem-se $e^{-c} \approx 3.06 \times 10^{-7}$. Escrevemos, então

$$I = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^x + x^2} dx \approx \int_0^{15} \frac{1}{e^x + x^2} dx$$

(cometendo-se um erro que será aproximadamente igual a 3.06×10^{-7}). □

Exercício 3.10 Calcule, efetuando a mudança de variável definida por $\frac{1}{x} = t$, o valor do integral

$$\int_1^{\infty} \frac{1}{x^2} \cos\left(\frac{1}{x^2}\right) dx$$

e estime o erro.

Exercício 3.11 Calcule

$$I = \int_0^{\infty} \frac{x}{e^{2x} + 1} dx$$

com um erro inferior a 10^{-3} .

3.5 Trabalhos

Trabalho 1. [Regra do Trapézio Corrigida]

Pode estabelecer-se a seguinte regra de quadratura, conhecida por *Regra do Trapézio Corrigida*

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} (f(a) + f(b)) + \frac{h^2}{12} (f'(a) - f'(b)) + \frac{h^5}{720} f^{(4)}(\xi), \quad (3.19)$$

onde $h = b - a$, $\xi \in (a, b)$ e, naturalmente, se supõe que $f \in C^4[a, b]$.

a) Deduza, a partir da regra (3.19), a chamada *Regra do Trapézio Corrigida Composta*:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} [f_1 + 2(f_2 + \dots + f_N) + f_{N+1}] + \frac{h^2}{12} (f'(a) - f'(b)) + \frac{(b-a)h^4}{720} f^{(4)}(\eta), \quad (3.20)$$

onde $x_i = a + (i-1)h$; $i = 1, \dots, N+1$; $h = \frac{b-a}{N}$, $f_i := f(x_i)$ e $\eta \in (a, b)$.

b) Mostre que, se f é periódica de período $b - a$ e $f \in C^4[a, b]$, então

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} [f_1 + 2(f_2 + \dots + f_N) + f_{N+1}] + \frac{(b-a)h^4}{720} f^{(4)}(\eta)$$

e deduza que a regra do trapézio composta é especialmente adaptada à integração, entre a e b , deste tipo de funções.

c) Se $TC_N(f)$ designa o valor dado pela regra do trapézio corrigida composta, com N subintervalos (N par), e $E_{TC_N}(f)$ o respetivo erro, estabeleça a seguinte estimativa

$$|E_{TC_N}(f)| \approx \left| \frac{TC_N(f) - TC_{N/2}(f)}{15} \right|. \quad (3.21)$$

d) Escreva uma função $[integral, erro] = \text{regTrapezioCorr}(f, a, b, N)$ para calcular uma aproximação para o valor de um integral $I = \int_a^b f(x)dx$, usando a regra do trapézio corrigida composta com N subintervalos (N par) e estimar o respetivo erro pelo uso da fórmula (3.21).

e) Considere o integral $I = \int_0^1 e^{-x}dx$. Calcule

$$\log_2 \frac{|E_{TC_N}(f)|}{|E_{TC_{N/2}}(f)|}$$

para $N = 10, 20, 40, 80$ e diga se os resultados confirmam a ordem de convergência da regra do trapézio composta corrigida.

Trabalho 2. [Tabela de Romberg]

Seja $T_N := T_N(f)$ a aproximação para $I = \int_a^b f(x)dx$ obtida usando a regra do trapézio composta com N subintervalos e seja $h = (b-a)/N$. Pode provar-se que, se $f \in C^{2M+2}[a, b]$, então

$$I - T_N = c_1 h^2 + c_2 h^4 + \dots + c_M h^{2M} + \mathcal{O}(h^{2M+2}), \quad (3.22)$$

com as constantes c_i independentes de h . Tem-se, então, se usarmos $2N$ subintervalos:

$$I - T_{2N} = \frac{1}{4}c_1h^2 + \frac{1}{16}c_2h^4 + \dots + \frac{1}{4^M}c_Mh^{2M} + \mathcal{O}(h^{2M+2}). \quad (3.23)$$

Multiplicando (3.23) por 4 e subtraindo de (3.22), vem

$$I - \frac{4T_{2N} - T_N}{3} = d_2h^4 + d_3h^6 + \dots + d_Mh^{2M} + \mathcal{O}(h^{2M+2}). \quad (3.24)$$

Denotando por T_{2N}^1 o valor

$$T_{2N}^1 := \frac{4T_{2N} - T_N}{3}$$

temos

$$I - T_{2N}^1 = d_2h^4 + d_3h^6 + \dots + d_Mh^{2M} + \mathcal{O}(h^{2M+2}). \quad (3.25)$$

Virá, então, usando $4N$ intervalos,

$$I - T_{4N}^1 = \frac{1}{16}d_2h^4 + \frac{1}{128}d_3h^6 + \dots + \frac{1}{4^M}d_Mh^{2M} + \mathcal{O}(h^{2M+2}). \quad (3.26)$$

Multiplicando esta equação por 16 e subtraindo de (3.25), vem

$$I - T_{4N}^2 = e_3h^6 + \dots + e_Mh^{2M} + \mathcal{O}(h^{2M+2}), \quad (3.27)$$

onde usámos a notação

$$T_{4N}^2 := \frac{16T_{4N}^1 - T_{2N}^1}{15}.$$

Este processo pode, naturalmente, continuar, dependendo apenas da suavidade de f . Introduzindo a notação $T_N^0 := T_N(f)$ obter-se-ão, então, aproximações para I , dadas por

$$T_{2^k N}^j := \frac{4^j T_{2^k N}^{j-1} - T_{2^{k-1} N}^{j-1}}{4^j - 1}; j = 1, 2, \dots, M; k = j, j+1, \dots, M.$$

Tem-se

$$|I - T_{2^k N}^j| = \mathcal{O}\left(\left(\frac{b-a}{2^k N}\right)^{2j+2}\right); j = 1, 2, \dots, M; k = j, j+1, \dots, M.$$

É costume visualizar estas aproximações para I como entradas numa tabela triangular, chamada [Tabela de Romberg](#):

$$\begin{array}{ccccccc} T_N^0 & \equiv & T_N & & & & \\ T_{2N}^0 & \equiv & T_{2N} & & T_{2N}^1 & & \\ T_{4N}^0 & \equiv & T_{4N} & & T_{4N}^1 & & T_{4N}^2 \\ \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ T_{2^M N}^0 & \equiv & T_{2^M N} & & T_{2^M N}^1 & & T_{2^M N}^2 \quad \cdots \quad T_{2^M N}^M \end{array}$$

- a) Escreva uma função $TR = \text{tabRomberg}(f, a, b, N, M)$ destinada a construir uma tabela de Romberg relativa ao cálculo de aproximações para $I = \int_a^b f(x)dx$. O valor de N é o número de intervalos inicial da regra do trapézio composta e $M + 1$ é o número de colunas da tabela. A tabela será armazenada numa matriz TR , triangular inferior.
- b) Seja $I = \int_0^1 e^{2x} dx$. Determine a tabela de Romberg para o cálculo de I , considerando $N = 1$ e $M = 5$.
- c) Obtenha uma tabela com os erros em cada uma das aproximações para I e efetue os cálculos necessários para verificar (numericamente) se estão de acordo com as ordens teoricamente previstas.

Trabalho 3. [Regra de Simpson adaptativa]

- a) Escreva uma função $integral = \text{regSimpsonAdapt}(f, a, b, tol)$ para calcular uma aproximação para $I = \int_a^b f(x)dx$ com tolerância tol , usando a regra de Simpson adaptativa. A sua função deverá ser usada recursivamente (isto é, deverá invocar-se a ela própria) e deve fazer uso da função **erroSimpson** para calcular (em cada intervalo) os dois integrais necessários à obtenção da estimativa para o erro.
 - b) Considere o cálculo de $I = \int_{-1}^1 \frac{1}{1+25x^2} dx$. Usando a função **regSimpsonAdapt**, determine uma estimativa para I com precisão de 4 casas decimais.
 - c) Esboce o gráfico de $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$ no intervalo $[-1, 1]$ e marque sobre ele os pontos usados na obtenção da estimativa da alínea anterior, isto é, obtenha um gráfico semelhante ao apresentado na figura seguinte.
- Nota:** Para poder armazenar os pontos usados, poderá ter de definir uma variável global.
- d) Para obter uma aproximação para I , seria razoável usar uma regra de quadratura de Newton-Cotes fechada com n grande? Porquê?

Trabalho 4. [Visualização das regras de Newton-Cotes]

Crie uma aplicação que utilize diferentes regras de quadratura de Newton-Cotes para ilustrar geometricamente as aproximações obtidas para o integral de uma função contínua $f(x)$ num intervalo $[a, b]$. Esta aplicação deve:

1. calcular e desenhar as aproximações do integral utilizando cada uma das regras de quadratura;
2. mostrar o gráfico da função $f(x)$ e destacar as áreas aproximadas pelas figuras geométricas correspondentes (trapézios, parábolas, etc.);
3. permitir o ajuste do número de subintervalos n para analisar o impacto da subdivisão na precisão da aproximação.