UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Escola de Artes, Ciências e Humanidades

Otacilio Lucas Kobashigawa Amorim

Integrais Não Elementares: Uma Análise Numérica

São Paulo
Junho de 2020

Universidade de São Paulo
Escola de Artes, Ciências e Humanidades

Otacilio Lucas Kobashigawa Amorim

Integrais Não Elementares: Uma Análise Numérica

Monografia a ser apresentada à Escola de Artes, Ciências e Humanidades da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos exigidos para aprovação na disciplina ACH2017 – Projeto Supervisionado ou de Graduação I, do curso de Bacharelado em Sistemas de Informação.

Modalidade: TCC Curto (1 semestre) – individual

Orientador Prof. Dr. Masayuki Oka Hase

São Paulo
Junho de 2020

Resumo

Não é sempre possível representar uma integral em uma soma finita de funções conhecidas, e quando isto acontece é necessário tratar sua integral definida através de meios numéricos. Demonstraremos que algumas funções, de uma única variável, não possuem primitivas elementares, e iremos aproximar suas integrais definidas através da regra dos trapézios, regra de Simpson e método de Monte Carlo.

Palavras-Chave: Integral não elementar, análise numérica, primitiva não elementar.

Sumário

1 Introdução **1**

2 Teoremas de Liouville **4**

2.1 Definições 4

2.2 Teoremas 5

2.3 Exemplos 6

3 Teorema de Chebyshev **12**

3.1 Exemplos 12

4 Cálculo Numérico **15**

4.1 Série de Taylor 15

4.2 Interpolação Polinomial 16

4.3 Regra dos Trapézios 18

4.4 Fórmula de Simpson 19

4.5 Simulações de Monte Carlo 20

5 Aplicação dos Métodos **22**

6 Conclusão **30**

7 Referências **31**

Apêndice A – Pseudocódigo **32**

1 Introdução

Um resultado clássico em Teoria dos Números, mais precisamente no estudo da distribuição de números primos, é o teorema dos números primos no qual é afirmado

$$\pi(x) \sim \mathrm{Li}(x) = \int_2^x \frac{dt}{\ln t},$$

onde $\pi(x)$ retorna a quantidade de números primos menores ou iguais a x [OLVER, 2010]. O símbolo $\sim$ significa que $\pi(x)$ tende assintoticamente para $\mathrm{Li}(x)$, sendo esta integral denominada logarítmica integral de Euler. O integrando de $\mathrm{Li}(x)$ possui a característica de não possuir primitiva elementar, ou seja, não existe uma função elementar f tal que $f' = (\ln x)^{-1}$. Tal fato será demonstrado mais adiante. Dessa forma, não é possível efetuar de forma analítica os valores de $\mathrm{Li}(x)$.

Funções elementares são aquelas que podem ser expressadas através de um número finito de operações (adição, subtração, multiplicação e divisão) combinadas com o uso de funções exponenciais, logarítmicas, algébricas ou suas inversas [RITT, 1948].

Em alguns casos, como no exemplo anterior, nem sempre é possível expressar uma integral definida como funções elementares, logo, seria de interesse tratar tais integrais com ferramentas da Análise Numérica. Retomando o exemplo anterior, para estimar o valor $\pi(x)$ através de $\mathrm{Li}(x)$, seria necessário encontrar a área sob a curva $(\ln t)^{-1}$ entre os pontos $[2, x]$ e, para tal, o uso de algum método de integração numérica se mostraria útil, já que não é possível realizar esta integral definida de forma analítica. Uma maneira de aproximar a integral de interesse seria aproximar a região sob a curva por meio de trapézios. Essa abordagem chama-se regra dos trapézios. Uma outra abordagem é a regra de Simpson, onde se aproxima a região empregando-se de arcos de parábola. Em uma linha diferente das anteriores, está o método de Monte Carlo. Nesta abordagem a região é aproximada por números aleatórios escolhidos dentro do intervalo de integração. Todos estes métodos dependem de um parâmetro, diga-se n, que representa a quantidade de trapézios, número de arcos de parábola ou total de pontos aleatórios dentro da região. Quando este parâmetro cresce, em geral, maior é a precisão da aproximação dada pelo método de Monte Carlo, porém no caso do método dos trapézios e na regra de Simpson, não é apenas suficiente que n tenda a infinito, como veremos mais adiante. É desejado que n seja grande o suficiente a ponto de devolver uma aproximação razoável, porém, é necessário o auxílio de alguma máquina para efetuar as operações algébricas quando o parâmetro escolhido é muito alto.

Há outras funções que não possuem primitiva elementar, sendo relevantes para áreas como Física ou Estatística. Exemplificando, pode-se citar função gamma, função beta, função erro ou a função seno integral [OLVER, 2010]. Nem sempre uma função sem primitiva elementar torna-se impossível de se efetuar de maneira exata quando integrada em um intervalo. Por exemplo, a função seno integral, denotada por $\text{Si}(x)$, que é definida como a integral no intervalo $[0, x]$ da função $\text{sinc}(t) = (\sin t)/t$, apresenta-se convergente quando $x \to \infty$, sendo possível extrair seu valor exato de forma analítica, como será mostrado no capítulo 5. Porém nos casos onde x é finito, temos que recorrer aos métodos de integração numérica.

O objetivo geral deste trabalho é investigar a teoria de integrais não elementares. Em particular, perscrutar os teoremas de Liouville e Chebyshev acerca de integrais indefinidas, implementar métodos de integração numérica mencionados anteriormente e analisar os resultados obtidos.

Nas seções 2 e 3, são apresentados e aplicados os teoremas que mostram critérios para que uma dada função não tenha primitiva elementar. Estes teoremas não serão demonstrados, mas o foco dessas seções é mostrar como utilizá-los nas provas de não-elementaridade e, uma vez demonstrada que uma função não possui primitiva elementar, deve-se recorrer aos métodos numéricos para integrais definidas da mesma. Na seção 4 os métodos de integração numérica mencionados anteriormente são apresentados, para então, na seção seguinte, serem aplicados. Finalmente, na seção 6 comparam-se e analisam-se os resultados.

2 Teoremas de Liouville

As integrais não elementares foram primeiramente estudadas por Joseph Liouville, que mostrou em 1835 que algumas famílias de funções não possuem primitivas elementares.

2.1 Definições

Definição 2.1.1 Uma função $y = f(x)$ é algébrica se satisfaz uma equação polinomial de grau n,

$$p_n(x)y^n + \cdots + p_0 y^0 = 0, \tag{2.1.1}$$

onde $p_0(x), \cdots, p_n(x)$ são polinômios.

Por exemplo, $y = 1/x^{1/n}$ é uma função algébrica de grau n, pois pode ser escrita como

$$xy^n - 1 = 0$$

que pode ser representada por (2.1.1).

Outro exemplo seria a função racional $y = r(x)/q(x)$, onde r, q são polinômios em

x, com q não nulo. Notar que

$$y = \frac{q(x)}{r(x)} \implies$$
$$r(x)y - q(x) = 0,$$

que é algébrica de grau 1.

Definição 2.1.2 Funções elementares são as que podem ser expressadas através de um número finito de operações algébricas sobre funções algébricas, exponenciais ou logarítmicas. Note que as funções trigonométricas possuem representação em forma de funções exponenciais e as trigonométricas inversas possuem forma de logaritmos complexos. O mesmo ocorre com as funções hiperbólicas. Por exemplo,

$$\operatorname{sen} x = \frac{ie^{-ix} - ie^{ix}}{2}, \quad \operatorname{arcsen} x = -i \ln(ix + \sqrt{1 - x^2}).$$

Definição 2.1.3 Uma integral

$$\int f(x)dx = g(x) + C$$

não é elementar quando seu integrando f é elementar, porém g não é. Por exemplo, a função gaussiana e^{-x^2} tem integral não elementar, pois não existe g elementar tal que $g' = f$, como será demonstrado no exemplo 2.4.1.

2.2 Teoremas

O teorema de 1834 de J. Liouville mostra uma forma geral da integral de uma função algébrica caso esta seja elementar [RITT, 1948].

Teorema (Liouville, 1834) *Se $f(x)$ for uma função algébrica e $\int f(x)dx$ for* *elementar, então*

$$\int f(x)\,dx = g(x) + \sum_{i=1}^{n} c_i \, \ln(h_i(x)), \tag{2.2.1}$$

onde $g(x)$ e $h_i(x)$ são funções algébricas e c_i são constantes.

Ver a prova em [RITT, 1948].

Diferenciando (2.2.1), temos

$$f(x) = g'(x) + \sum_{i=1}^{n} c_i \, \ln'(h_i(x)). \tag{2.2.2}$$

A ideia básica por trás deste teorema, é que funções exponenciais, trigonométricas e logaritmos não lineares, não podem estar do lado direito de (2.2.2), pois estas funções permanecem após a diferenciação, assim tornando $f(x)$ uma função não algébrica.

Teorema 2.2.1 (Liouville, 1835) *Sejam $f(x)$ e $g(x)$ funções algébricas com $g(x)$ não constante, $R(x)$ uma função racional e C uma constante arbitrária. Se $\int f(x)e^{g(x)}\,dx$ for elementar, então ela é da forma*

$$\int f(x)e^{g(x)}\,dx = R(x)e^{g(x)} + C.$$

Ver prova em [RITT, 1948].

Iremos usar este teorema de Liouville para mostrar que algumas classes de funções não possuem primitivas elementares.

2.3 Exemplos

Exemplo 2.3.1 A integral

$$\int e^{-x^2} dx$$

não é elementar. Suponha, por absurdo, que e^{-x^2} tem primitiva elementar. Logo, pelo teorema 2.2.1,

$$\int e^{-x^2}dx = R(x)e^{-x^2} + C,$$

onde R é uma função racional. Iremos mostrar que isso leva a uma contradição. Derivando esta identidade e cancelando os fatores e^{-x^2} resulta

$$1 \ = \ R'(x) \ - \ 2xR(x).$$

Agora, suponha $R(x) = P(x)/Q(x)$ com P, Q polinômios primos entre si, ou seja, se existe um α tal que $Q(\alpha) = 0$, então $P(\alpha) \neq 0$. Suponha, também, que a multiplicidade dessa raiz α de $Q(x) = 0$ seja n.

Logo, tem-se

$$1 \ = \ \frac{P'Q \ - \ PQ'}{Q^2} \ - \ 2x\,\frac{P}{Q},$$

de onde segue que

$$Q(Q \ - \ P' \ + \ 2xP) \ = \ -PQ'.$$

Na identidade acima, α é raiz do membro esquerdo de multiplicidade no mínimo n e do lado direito no máximo $n-1$, pois P e Q são coprimos. Então, Q não poder ter raízes, ou seja, deve ser uma constante $Q_0 \neq 0$ pelo fato de ser denominador de uma função racional. Em tal caso, temos

$$\begin{aligned} &Q_0(Q_0 \ - \ P' \ + \ 2xP) \ = \ 0 \implies \\ &P' - 2xP = Q_0. \end{aligned}$$

Se o grau de P for m, então o grau de P' é $m-1$ entanto que o grau de $2xP$ é $m+1$. Logo, o grau mínimo de $P' - 2xP$ seria igual a 1 contradizendo que o membro direito da identidade anterior tem grau zero por ser uma constante. Desta maneira, a primitiva da função e^{-x^2} não pode ser elementar.

É interessante notar que esta integral não se trata de uma integral qualquer. Seu integrando possui a mesma função exponencial da função erro de Gauss, recorrente em probabilidade [OLVER, 2010].

Exemplo 2.3.2 A integral

$$\int \operatorname{sen}(\operatorname{sen} x)\, dx$$

não é elementar. Fazendo $\operatorname{sen} x = u$, e sabendo-se que $\cos x = \pm\sqrt{1-\operatorname{sen}^2 x}$, tem-se

$$\int \operatorname{sen}(\operatorname{sen} x)\, dx = \pm \int \frac{\operatorname{sen} u}{\sqrt{1-u^2}}\, du.$$

O sinal $\pm$ é irrelevante para a demonstração, então toma-se o sinal positivo. Usando a forma exponencial da função seno, tem-se

$$\int \operatorname{sen}(\operatorname{sen} x)\, dx = \frac{i}{2}\int \frac{e^{-iu}-e^{iu}}{\sqrt{1-u^2}}\, du = \frac{i}{2}\left(\int \frac{e^{-iu}}{\sqrt{1-u^2}}\, du - \int \frac{e^{iu}}{\sqrt{1-u^2}}\, du\right).$$

Para concluir a prova, basta mostrar que

$$\int \frac{e^{iu}}{\sqrt{1-u^2}}\, du$$

não é elementar. A integral acima, caso fosse elementar, pelo teorema 2.2.1, seria da forma $R(u)e^{iu}+C$, onde R é uma função racional. Diferenciando e dividindo por e^{iu}, tem-se

$$\frac{1}{\sqrt{1-u^2}} = R' + iR. \tag{2.4.2.1}$$

Escrevendo $R(u) = P(u)/Q(u)$ com P e Q polinômios primos entre si, ou seja, se existe um α tal que $Q(\alpha)=0$, então $P(\alpha)\neq 0$. Suponha, também, que a multiplicidade dessa raiz α de $Q(x) = 0$ seja n. Então,

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{1-u^2}} = R' + iR \implies \\ &Q(Q - \sqrt{1-u^2}P' - i\sqrt{1-u^2}P) = -P\sqrt{1-u^2}Q'.\end{aligned}$$

Do lado esquerdo da última igualdade acima, α é raiz de Q com multiplicidade no mínimo n, mas do lado direito α é raiz de multiplicidade no máximo $n-1$, logo, Q não tem raiz, sendo assim um polinômio constante não nulo, diga-se Q_0. Logo,

$$\begin{aligned}&Q_0(Q_0 - \sqrt{1-u^2}P' - i\sqrt{1-u^2}P) = -P\sqrt{1-u^2}Q_0' \implies \\ &\sqrt{1-u^2}P' + iP\sqrt{1-u^2} = Q_0^2.\end{aligned}$$

Elevando-se ao quadrado a última equação acima, tem-se

$$\begin{aligned}&(1-u^2)(P'^2 + 2iP'P - P^2) = Q_0^4 \implies \\ &\cos^2 x(P'^2 + 2iP'P - P^2) = Q_0^4.\end{aligned}$$

O lado esquerdo acima nunca será igual ao lado direito, que é um polinômio constante, devido ao fator $\cos^2 x$, dessa forma não existe um polinômio racional $R(x)$ que satisfaça (2.4.2.1), implicando

$$\int \operatorname{sen}(\operatorname{sen} x)\, dx$$

não possuir fórmula fechada.

Exemplo 2.3.3 Se

$$\int \frac{e^x}{x} dx$$

fosse elementar, pelo teorema 2.2.1, ter-se-ia,

$$\int \frac{e^x}{x} dx = R(x)e^x + C.$$

Diferenciando e dividindo por e^x e escrevendo $R(x) = P(x)/Q(x)$ com P e Q polinômios primos entre si, ou seja, se existe um α tal que $Q(\alpha) = 0$, então $P(\alpha) \neq 0$. Suponha, também, que a multiplicidade dessa raiz α de $Q(x) = 0$ seja n. Logo,

$$\frac{1}{x} = \frac{P'Q - PQ'}{Q^2} + \frac{P}{Q} \implies$$
$$P'Qx - PQx - Q^2 = PQ'x.$$

Pelo mesmo motivo do exemplo 2.3.1, Q é uma constante não nula, diga-se Q_0. Então, temos

$$P'x + Px = Q_0.$$

Se o grau de P for m, então o grau de P' é $m-1$. Então o grau de Px é $m+1$ e o grau de $P'x$ é m. Não existe uma soma de polinômios de grau $m+1$ e m, tal que o resultado seja uma constante, dessa forma $\exp(x)/x$ não possui primitiva elementar.

Com raciocínio análogo mostra-se que a função exponencial integral, que possui integrando $\exp(-x)/x$, não é elementar, sendo esta função intrinsecamente relacionada com a constante de Euler-Mascheroni [OLVER, 2010].

Exemplo 2.3.4 A integral

$$\int \frac{1}{\ln x} dx$$

não é elementar. Fazendo a substituição $t = \ln x$, tem-se $e^t = x \rightarrow dt = x^{-1}dx$, chegando-se

$$\int \frac{1}{\ln x} dx = \int \frac{e^t}{t} dt.$$

Como o lado direito não é elementar, conforme o exemplo 2.3.3, então o mesmo acontece com o lado esquerdo.

Novamente, esta não se trata de qualquer integral. Quando efetuada no intervalo $[2, x]$ temos a função $\mathrm{Li}(x)$, já definida e mostrada na seção 1, que é importante para Teoria dos Números.

Exemplo 2.3.5 A integral

$$\int \operatorname{sen}(x^2)dx$$

não é elementar. Usando a forma exponencial do seno e por raciocínio análogo da demonstração do exemplo 2.3.1, o resultado segue. Portanto, as integrais de Fresnel definidas como

$$\mathrm{S}(x) = \int_0^x \operatorname{sen}(t^2)dt, \quad \mathrm{C}(x) = \int_0^x \cos(t^2)dt$$

usadas em ótica [OLVER, 2010], não são elementares.

3 Teorema de Chebyshev

Outro resultado sobre integrais não elementares surgiu em 1853, com o teorema de Chebyshev, que mostra que algumas classes de integrais não são elementares sob algumas condições. Iremos enunciar o teorema para então aplicá-lo.

Teorema 3.1 (Chebyshev, 1853) *Sejam $p, q, r \in \mathbb{Q}$ e $a, b \in \mathbb{R}$, tais que a, b, r não são nulos, então*

$$\int x^p(a + bx^r)^q \, dx$$

é elementar se pelo menos um dos seguintes números for inteiro:

$$\frac{p+1}{r},\ q,\ \frac{p+1}{r} + q.$$

Ver prova em [RITT, 1948].

3.1 Exemplos

Exemplo 3.1.1 Seja $y = f(x)$ uma função definida em $\mathbb{R}$, onde $f'(x)$ exista em $[a, b]$. Para calcular o comprimento de arco de f utliza-se a expressão

$$\int_a^b \sqrt{1 + \left(\frac{d}{dx} f(x)\right)^2} \, dx. \tag{3.1.1}$$

A integral

$$\int \sqrt{1-x^4}\,dx,$$

pelo teorema de Chebyshev, não é elementar, bastando fazer $p=0, a=1, b=-1, r=4$ e $q=1/2$ no teorema 3.1 para obter

$$\frac{p+1}{r}=\frac{1}{4}, \quad q=\frac{1}{2}, \quad \frac{p+1}{r}+q=\frac{3}{4}.$$

Seja $\alpha \in (-1,1)$ um número real. O comprimento de arco de $\sqrt{1-x^4}$, utilizando a expressão (3.1.1), é dado por

$$\begin{aligned} g(\alpha) &= \int_{-1}^{\alpha} \sqrt{1+\left(\frac{d}{dx}\sqrt{1-x^4}\right)^2}\ dx. \\ &= \int_{-1}^{\alpha} \sqrt{1+\frac{4x^6}{1-x^4}}\ dx \\ &= \int_{-1}^{\alpha} (1-x^4+4x^6)^{1/2}(1-x^4)^{-1/2}\ dx. \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

Observe que em (3.1.2), na sua forma indefinida, ao integrar por partes, sempre será preciso integrar o termo $(1-x^4)^{-r}$, com r racional positivo, e sabe-se que tal integral não admite representação elementar, bastando utilizar o teorema 3.1 para verificar tal propriedade. Ou seja, para efetuar o comprimento de arco de $\sqrt{1-x^4}$ é necessário métodos numéricos.

Exemplo 3.1.2 A integral

$$\int \sqrt{\operatorname{sen} x}\,dx$$

não é elementar. Na identidade $\cos x = \pm\sqrt{1-\operatorname{sen} x^2}$ fazendo $u=\operatorname{sen} x$ e considerando o valor positivo da raiz, tem-se

$$\int \sqrt{\operatorname{sen} x}\,dx = \int u^{1/2}(1-u^2)^{-1/2}\,du,$$

que pelo teorema de Chebyshev não é elementar.

Exemplo 3.1.3 Podemos mostrar que outra função relevante, sob algumas condições, não possui integral indefinida elementar. Considere a função Beta definida como

$$B(r,t) = \int_0^1 x^{r-1}(1-x)^{t-1}dx, \quad \mathrm{Re}(r,t) > 1.$$

Usando o teorema de Chebyshev, resulta que pelo menos uma dos seguintes números, t ou r, precisa ser inteiro para que a integral indefinida seja elementar.

4 Cálculo Numérico

Como visto, o fato de algumas famílias de integrais serem não elementares impede o cálculo de integrais definidas de forma analítica. Desta forma, podemos usar meios numéricos. Por exemplo, aproximando o integrando por uma série de polinômios, que são sempre funções contínuas, ou aproximar a integral desejada pela soma da área delimitada por trapézios ou arcos de parábola.

4.1 Série de Taylor

As séries de Taylor constituem uma possível ferramenta para calcular integrais não elementares de forma numérica. Como exemplo, considere o valor especial da função seno integral $\mathrm{Si}(t)$, definida como a integral de $(\sin x)/x$ no intervalo $(0, t)$, com $t > 0$ [OLVER,2010], efetuada em $t = 1$:

$$\mathrm{Si}(1) = \int_0^1 \frac{\sin x}{x}\, dx.$$

Para efetuar a integral acima, podemos usar a série de Maclaurin para a função $\operatorname{sen} x/x$ onde se obtém

$$\frac{\operatorname{sen} x}{x} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n+1)!}.$$

Dado que neste caso a série acima converge uniformemente, a identidade pode ser integrada termo a termo, de onde resulta

$$\int \frac{\operatorname{sen} x}{x} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)(2n+1)!}.$$

Como esta representação da primitiva de $(\operatorname{sen} x)/x$ é uma série infinita, trata-se de uma função não elementar. Agora podemos calcular Si(1) utilizando a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}\int_0^1 \frac{\operatorname{sen} x}{x} &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)(2n+1)!}\Bigg|_0^1 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)(2n+1)!}.\end{aligned}$$

Porém, este método apresenta algumas complicações, uma vez que para cada função dada é preciso efetuar uma série diferente e, para tal exercício, é necessário achar a n-ésima derivada dessa função.

4.2 Interpolação Polinomial

Em análise numérica, interpolação é um método de construir um novo conjunto de dados a partir de um conjunto discreto já conhecido. Tenta-se aproximar os valores no conjunto através de uma função. Quando esta função se trata de um polinômio, a interpolação chama-se interpolação polinomial. Por exemplo, considere $n+1$ pontos $(x_0, f(x_0)), \cdots, (x_n, f(x_n))$, gerados por uma função $f(x)$. Sendo f uma função desconhecida podemos aproximá-la por um polinômio p de grau menor ou igual a n. Neste caso, p é chamado de polinômio interpolador de f em relação aos pontos $(x_0, f(x_0), \cdots, (x_n, f(x_n))$, onde p é único. Suponha que se queira realizar uma interpolação destes pontos com um polinômio p de grau n. Neste caso, escolhe-se $p(x_j) = f(x_j)$ para $0 \leq j \leq n$, onde os coeficientes $a_0, \cdots, a_n$ de $p(x) = a_0 + \cdots + a_n x^n$

são determinados ao resolver o sistema [HUMES, 1984].

$$\begin{aligned}
p(x_0) &= a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n = f(x_0) \\
p(x_1) &= a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n = f(x_1) \\
&\vdots \\
p(x_n) &= a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n = f(x_n)
\end{aligned}$$

Exemplo 4.2.1 Considere a função $f(x) = e^x$, onde se sabe que $f(1) \approx 2.7182, f(1.5) \approx 4.4816$ e $f(2) \approx 7.3890$ e deseja-se aproximar f na região [1,2]. Com estes três pontos pode-se usar polinômio interpolador de grau menor ou igual a dois. Suponha que se queira realizar uma interpolação com um polinômio $p_2(x)$ de grau 2. O polinômio é dado por $p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$, onde os coeficientes são encontrados na solução do seguinte sistema

$$\begin{aligned}
p(1) &= a_0 + a_1 + a_2 = 2.7182 \\
p(1.5) &= a_0 + 1.5a_1 + 1.5^2 a_2 = 4.4816 \\
p(2) &= a_0 + 2a_1 + 2^2 a_2 = 7.3890.
\end{aligned}$$

Daí, tem-se, $a_0 = 2.6234, a_1 = -2.1932$ e $a_2 = 2.2880$, logo, $p_2(x) = 2.6234 - 2.1932x + 2.2880x^2$. Dessa forma, por exemplo, pode-se aproximar $e^{1.25} = 3.4903...$ por $p_2(1.25) = 3.4569$.

Seja f uma função contínua com $n+1$ derivadas contínuas no intervalo I e $x_0, \cdots, x_n$, $n+1$ pontos pertencentes a I, tal que $x_{n-1} \neq x_n$ para todo n positivo. Seja $p_n(x)$ o polinômio interpolador de f com relação a $(x_0, f(x_0), \cdots, (x_n, f(x_n))$. É possível estimar a função $\text{erro}(x) = f(x) - p_n(x)$ como [HUMES, 1984]

$$|\text{erro}(x)| \leq \frac{|(x-x_0)\cdot ... \cdot (x-x_n)|}{(n+1)!} \text{máx}_{z\in I}|f^{(n+1)}(z)|.$$

Como exemplo, considere o conjunto $x_j = \{1, 1.5, 2\}$, $j = 0, 1, 2$ e a função $f(x) =$

e^x, como visto agora há pouco. Podemos estimar o erro para $f(1.25)$ da seguinte forma,

$$|\text{erro}(1.25)| \leq \frac{|(1.25-1)(1.25-1.5)(1.25-2)|}{(2+1)!} \text{máx}_{z \in I} |f^{(2+1)}(z)| \approx 0.0577.$$

De fato, $|e^{1.25} - p_2(1.25)| = 0.033... < |\text{erro}(1.25)|$.

4.3 Regra dos Trapézios

Dada uma função não negativa $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, sua área delimitado no intervalo $[a, b]$ pode ser aproximada por um trapézio de base $f(b) + f(a)$ e altura $b - a$. Dessa forma, tem-se,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2}(f(a) + f(b)).$$

O erro da aproximação é a diferença entre o valor exato da integral e sua forma aproximada pela área do trapézio:

$$\text{erro} = \int_a^b f(x)dx - \frac{(b-a)}{2}(f(a) + f(b)).$$

Ao invés de usar um único trapézio, é possível usar n trapézios, bastando dividir o intervalo de integração $[a, b]$, n vezes. Dessa forma, para um n grande e um tamanho pequeno de cada subdivisão da partição, aumenta-se a precisão da integral definida. Cada trapézio tem altura $h = (b - a)/n$ e bases $f(x_j)$ e $f(x_{j+1})$, onde $x_j = a + jh$ com $j = 0, 1, \cdots, n$. Logo, ao somar as n áreas dos trapézios, obtém-se

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2n}(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)).$$

Pode-se mostrar que o erro E neste método de integração é limitado por [HUMES, 1984]

$$|E| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2}\text{máx}_{x\in[a,b]}|f''(x)|.$$

Note que no método do trapézio usamos funções polinomiais lineares para aproximar uma curva f. Além disso, o erro deste método tem ordem de grandeza n^{-2}.

4.4 Fórmula de Simpson

Na regra do trapézio é usado um polinômio interpolador de grau 1. Podemos usar um polinômio interpolador de grau 2. Dada uma função $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, para integração no intervalo $[a, b]$, define-se o ponto central $(m, f(m))$, onde $m = (b-a)/2$, tal que o polinômio interpolador de segundo grau passe por $(a, f(a)), (m, f(m))$ e $(b, f(b))$. A fórmula de Simpson é dada por [HUMES, 1984]

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{3}(f(a) + 4f(m) + f(b)).$$

O erro da fórmula de Simpson é dado por [HUMES, 1984]

$$|E| \leq \frac{(b-a)^5}{2880}\text{máx}_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|.$$

Pode-se usar a fórmula de Simpson com n parábolas, dessa forma, divide-se o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos, obtendo-se

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{2n-2}) + 2f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})) \\ &= \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4\sum_{j=1}^{n} f(x_{2j-1}) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_{2j}) + f(x_{2n})\right),\end{aligned}$$

onde $h = (b-a)/2n$ e $x_j = a + jh$ com $j = 1, \cdots, 2n$. Dessa forma, para um n grande e um tamanho pequeno de cada subdivisão da partição, aumenta-se a precisão da integral definida. O erro E dessa aproximação pode ser estimado como [HUMES, 1984]

$$|E| \leq \frac{(b-a)^5}{2880n^4} \text{máx}_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|.$$

Ou seja, sendo a ordem de grandeza igual a n^{-4}, a regra de Simpson possui uma melhor aproximação do que o método dos trapézios.

4.5 Simulações de Monte Carlo

Uma outra maneira de aproximar uma integral definida é utilizando a aproximação de Monte Carlo. Considere uma variável aleatória contínua X, que tenha uma função densidade $f(x)$, onde $f(x) > 0$, para todo x dentro de um conjunto S. Então, o valor esperado de $g(X)$ é dado por

$$\mathrm{E}(g(X)) = \int_{x\in S} g(x)f(x)dx.$$

Pela lei dos grandes números, o valor $\mathrm{E}(g(X))$ é aproximado pela média simples das amostras $x_1, \cdots, x_n$ de X, ou seja,

$$\mathrm{E}(g(X)) \approx \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} g(x_j).$$

Agora, considere uma função $h(x)$, cuja integral

$$\int_a^b h(x)dx$$

deseja-se efetuar. A variável aleatória X, entre a e b, tem função densidade

$f(x) = 1/(b-a)$ para uma distribuição uniforme. Dessa forma, temos

$$\begin{aligned}\int_a^b h(x)dx &= (b-a)\int_a^b h(x)f(x)dx \\ &= (b-a)\mathrm{E}(h(X)) \\ &\approx \frac{(b-a)}{n}\sum_{j=1}^{n} h(x_j).\end{aligned}$$

Pode-se gerar os valores x_j através de um método pseudo-aleatório para aproximar uma integral definida,tal que sendo maior a quantidade de valores aleatórios gerados, maior será a aproximação. É possível demonstrar que o erro dessa aproximação é da ordem $n^{-1/2}$ [KRAUTH, 2006], mostrando-se o pior dos métodos vistos.

5 Aplicação dos Métodos

Neste capítulo implementamos os algoritmos descritos na seção 4. Os exemplos 5.1 e 5.2 podem ser efetuados facilmente de forma analítica, mas estão aqui para monitorar a validade dos algoritmos implementados, para então serem usados nas integrais não elementares. Serão consideradas integrais impróprias com limites de integração que tendem ao infinito ou que o integrando tenha uma singularidade no intervalo de integração, com o objetivo de mostrar as limitações dos métodos de integração, porém as demais integrais indefinidas apresentam resultados satisfatórios. Note que para a aproximação de Monte Carlo, sendo gerado números aleatórios a cada teste, a saída sempre vai ser diferente, mesmo que a função integrada seja a mesma. Em todos exemplos abaixo, os dígitos em vermelho correspondem à discrepância entre a aproximação e o resultado exato. Além disso, o n presente na tabela denota o número de trapézios, parábolas e pontos utilizados na regra dos trapézios, fórmula de Simpson e no método de Monte Carlo, respectivamente. A performance dos métodos numéricos foi avaliada com os "valores exatos" determinados pelo *software* Mathematica. Pseudocódigos dos algoritmos utilizados estão no apêndice.

Exemplo 5.1 Considere a função $f(x) = x^2$, onde $x \in \mathbb{R}$. Sabe-se que

$$\int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3}$$

Tem-se as seguintes aproximações para a integral acima,

n	Trapézio	Simpson	Monte Carlo
10^2	0.3333500000	0.3333333333	0.3346500455
10^3	0.3333334999	0.3333333333	0.3372384539
10^4	0.3333333349	0.3333333333	0.3392615823
10^5	0.3333333333	0.3333333333	0.3325448144

Note que o método de Simpson apresenta-se exato, pois se usa um arco de parábola para aproximar x^2. Além disso, o método dos trapézios procura aumentar sua precisão quando n cresce, mas o método de Monte Carlo parece exigir n maiores dos apresentados na tabela.

Exemplo 5.2 Considere a função $f(x) = \sqrt{1-x^2}$, onde $x \in \mathbb{R}$ é bem definido no intervalo [-1,1]. Esta função representa um semicírculo de raio 1 e centro na origem, logo,

$$4\int_0^1 \sqrt{1-x^2}dx = \pi \approx 3.141592654.$$

Usando a integral acima temos as seguintes aproximações para π,

n	Trapézio	Simpson	Monte Carlo
10^2	3.1404170317	3.1414302491	3.21258921241
10^3	3.1415554669	3.1415875189	3.13946375437
10^4	3.1415914776	3.1415924912	3.14895982129
10^5	3.1415926164	3.1415926484	3.14102257894

Apesar da regra de Simpson possuir menor erro ao método do trapézio, para $n = 10^5$ a constante π é aproximada corretamente até 7 casas decimais em ambos métodos de integração numérica baseados em interpolações polinomiais. Conforme n aumenta o método do trapézio a regra de Simpson aumentam sua precisão, mas o método de Monte Carlo melhora a aproximação de uma forma mais lenta.

Exemplo 5.3 A função logarítmica integral é definida como [OLVER, 2010]

$$\mathrm{Li}(x) := \int_2^x \frac{dt}{\ln t},$$

onde $2 \leq x \in \mathbb{R}$. Esta função é de interesse para teoria do números, uma vez que o teorema dos números primos afirma que $\pi(x) \sim \mathrm{Li}(x)$, onde $\pi(x)$ é quantidade de números primos menores ou iguais a x. Considere, por exemplo, a seguinte tabela para $\mathrm{Li}(x)$

n	x	Trapézio	Simpson	Monte Carlo
10^2	10^6	85146.9354	80749.4118	78363.6011
10^3	10^6	79245.0308	78581.3572	78435.3980
10^4	10^6	78680.3000	78618.0878	78598.1044
10^5	10^6	78629.8812	78626.2520	78609.6327

Ou seja, existem cerca de 78626 números primos menores ou iguais a 1 000 000, seguindo a integração usando a regra de Simpson com $n = 10^5$. Determinado pelo Mathematica, o valor de $\pi(10^6)$ é igual a 78498, logo, o erro da aproximação dada é de $\approx 0.2\%$.

Os exemplos 5.4 e 5.5 tratam integrais não elementares impróprias, mas que serão transformadas em próprias, onde é possível notar uma aproximação satisfatória.

Exemplo 5.4 A integral gaussiana é definida como a integral no eixo real da função gaussiana $\exp(-x^2)$,

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \approx 1.7724538509055,$$

onde o integrando não possui singularidades neste intervalo.

Iremos transformar a integral gaussiana em uma integral própria para obter uma aproximação para $\sqrt{\pi}$. A função erro de Gauss é dada por [OLVER, 2010]

$$\mathrm{erf}(t) = \int_0^t \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} dx$$

e admite o seguinte limite,

$$\lim_{t \to \infty} \mathrm{erf}(t) = 1.$$

Para provar a igualdade acima, primeiro definimos uma função real $f(x)$ como

$$f(x) := \int_0^\infty \frac{e^{-x^2(1+y^2)}}{1+y^2} dy.$$

Diferenciando sob o sinal da integral, com relação a x, temos

$$\begin{aligned} f'(x) &= \int_0^\infty -2x(1+y^2)\frac{e^{-x^2(1+y^2)}}{1+y^2} dy \\ &= -2xe^{-x^2} \int_0^\infty e^{-x^2y^2} dy \end{aligned}$$

e fazendo a substituição $u = xy \implies dy = du/x$, tem-se

$$f'(x) = -2e^{-x^2} \int_0^\infty e^{-u^2} du$$

e integrando no intervalo $[0, \infty)$ com relação a x, de ambos os lados, temos

$$\int_0^\infty f'(x)\, dx = -2 \int_0^\infty e^{-x^2} dx \int_0^\infty e^{-u^2} du.$$

Note que as duas integrais do lado direito acima são as mesmas. Suponha que ambas convergem para uma constante I. Dessa forma,

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty f'(x)\, dx = -2I^2 \\ &\lim_{b\to\infty} \arctan b - \arctan 0 = 2I^2 \\ &I = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \end{aligned}$$

Como visto, mesmo que a integral gaussiana não seja elementar é possível efetuá-la de forma analítica no intervalo $[0, \infty)$. É interessante reescrever a integral da função gaussiana efetuada no intervalo $[0, \infty)$ de modo que a mesma seja imprópria em um valor finito. Por exemplo, na integral do lado esquerdo abaixo, podemos realizar a substituição $x = 1/t \implies dx = -dt/t^2$, para obter

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-x^2}dx &= \int_0^1 e^{-x^2}dx + \int_1^\infty e^{-x^2}dx\\ &= \int_0^1 e^{-x^2}dx + \int_0^1 \frac{e^{-1/t^2}}{t^2}dt.\end{aligned}$$

Agora, observe que,

$$\lim_{t\to 0^+} \frac{e^{-1/t^2}}{t^2}dt = 0,$$

dessa forma resulta que o integrando torna-se nulo quando $x = 0$. Portanto, a integral de $\exp(-x^2)$ no intervalo $[0, \infty)$ pode ser representada por uma integral em intervalo limitado. Pela seguinte igualdade

$$\int_0^1 \left(e^{-x^2} + \frac{e^{-1/x^2}}{x^2}\right) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

podemos estimar $\sqrt{\pi}$.

n	Trapézio	Simpson	Monte Carlo
10^2	1.772441588012221	1.7724538509668302	1.773477050448824
10^3	1.772453728279010	1.7724538509055268	1.771349737371275
10^4	1.772453849679254	1.7724538509055208	1.772467986270592
10^5	1.772453850893232	1.7724538509055379	1.772240480954352

Como esperado, a regra de Simpson atribui a melhor aproximação, enquanto o método de Monte Carlo, a pior.

Exemplo 5.5 A forma indefinida da função seno integral,

$$\mathrm{Si}(x) := \int_0^x \frac{\operatorname{sen} t}{t}dt$$

não é elementar, bastando usar a forma exponencial de $\operatorname{sen} x$ e seguir o mesmo raciocínio da demonstração do exemplo 2.3.1. O integrando admite valor 1 quando $t \to 0$, fato oriundo do limite fundamental trigonométrico, assim a singularidade do integrando desaparece. Temos as seguintes aproximações para $\mathrm{Si}(1) \approx 0.94608307036718$.

n	Trapézio	Simpson	Monte Carlo
10^2	0.9460805606257324	0.9460830703677980	0.9275165644257950
10^3	0.9460830452697915	0.9460830703671835	0.9425667264475059
10^4	0.9460830701162104	0.9460830703671849	0.9455504681511974
10^5	0.9460830703646711	0.9460830703671829	0.9460285554594569

Neste caso há uma discrepância de três casas decimais entre os resultados advindos do método do trapézio e a regra de Simpson, sendo a aproximação pelo método de Monte Carlo a pior pelo fato de exigir n maiores.

Agora nos exemplos restantes, iremos tratar de integrais impróprias, ou que o integrando possua singularidade no intervalo de integração, e vemos que a qualidade da aproximação é bem menor do que nos exemplos anteriores.

Exemplo 5.6 Retomemos à função seno integral. A mesma admite o seguinte limite $\lim_{x\to\infty} \mathrm{Si}(x) = \pi/2$. Para provar tal afirmação, primeiro define-se uma função

$$f(y) = \int_0^\infty \frac{\operatorname{sen} x}{x} e^{-xy}\, dx,$$

onde $f(0) = \lim_{x\to\infty} \mathrm{Si}(x)$. Note que $\lim_{a\to\infty} f(a) = 0$. Derivando f sob o sinal da integral com relação a y, temos

$$f'(y) = -\int_0^\infty \operatorname{sen} x\, e^{-xy}\, dx$$

e, na integral abaixo,

$$\int \operatorname{sen} x\, e^{-xy}\, dx$$

integrando por partes duas vezes com relação a x, tem-se

$$\int \operatorname{sen} x\, e^{-xy}\, dx = -\frac{e^{-xy}(\cos x + y \operatorname{sen} x)}{1+y^2},$$

o que implica

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} \operatorname{sen} x \, e^{-xy} \, dx &= \frac{1}{1+y^2} \\ &= -f'(y).\end{aligned}$$

Logo, tem-se a seguinte igualdade $f'(y) = -1/(1+y^2)$ e a integrando no intervalo $[0, \infty)$, obtém-se

$$\begin{aligned}&\int_0^{\infty} f'(y) \, dy = -\int_0^{\infty} \frac{1}{1+y^2} \, dy \implies \\ &\lim_{a \to \infty} f(a) - f(0) = -\left(\lim_{b \to \infty} \arctan b - \arctan 0 \right) \\ &0 - f(0) = -\frac{\pi}{2} + 0 \\ &f(0) = \frac{\pi}{2}.\end{aligned}$$

Portanto, temos a seguinte igualdade

$$2 \lim_{x \to \infty} \operatorname{Si}(x) = \pi,$$

onde obtemos outro caso onde a integral não elementar pode ser efetuada analiticamente em um intervalo. Pode-se usar os métodos de integração para aproximar a constante π novamente. Dessa forma, considere a seguinte aproximação,

$$2 \int_0^{10^4} \frac{\operatorname{sen} x}{x} dx \approx \pi.$$

Na seguinte tabela,

n	Trapézio	Simpson	Monte Carlo
10^2	97.35460059525249	30.333104559231987	24.209080574424025
10^3	9.424496467245534	1.0464417908780874	2.3520176549731455
10^4	3.141766951105238	3.1417831589080514	8.540636571131829
10^5	3.141782932058044	3.1417830907785134	3.093244795248555

n é demasiado pequeno para as aproximações serem satisfatórias. Mesmo que 10^4 ou $n = 10^5$ produza aproximações razoáveis nos exemplos anteriores, neste caso, o mesmo não acontece. Realizar transformação semelhante ao exemplo anterior não é trivial. Em geral, lidar com integrais indefinidas no infinito precisa de um tratamento mais delicado.

Exemplo 5.7 Sejam α e x números reais definidos em $(-1, 1)$. O comprimento de arco da curva $\sqrt{1-x^4}$ é dado por

$$g(\alpha) = \int_{-1}^{\alpha} \sqrt{1 + \left(\frac{d}{dx}\sqrt{1-x^4}\right)^2}\, dx = \int_{-1}^{\alpha} \sqrt{1 + \frac{4x^6}{1-x^4}}\, dt.$$

Portanto, o comprimento de arco no intervalo $(-1, 0]$ pode ser aproximado da seguinte forma,

$$g(0) \approx \int_{-0.99999}^{0} \sqrt{1 + \frac{4x^6}{1-x^4}}\, dt = 1.67678806505793...$$

Usando esta aproximação, resulta em

n	Trapézio	Simpson	Monte Carlo
10^2	3.1120826595241162	2.114663707776645	1.587933788705070
10^3	1.0932447952485550	1.665209915767827	1.674127740626899
10^4	1.6767369000757326	1.671078800795031	1.698438085308343
10^5	1.6705889165590486	1.675973393289641	1.690834430310719

Foi notado que, para o método dos trapézios, quando o limite inferior de integração é da forma $-0.\underbrace{9\cdots9}_{\text{m}}$, tem-se uma maior precisão quando $n = 10^{m-1}$. Além disto, apesar da diferença da ordem de grandeza dos erros de cada método de integração, para os valores de n da tabela, não há discrepância significativa entre as aproximações.

6 Conclusão

Os teoremas de Liouville e Chebyshev, embora limitados, não perdem a beleza, de modo que são, de fato, resultados fortes, pois usando-os é possível *demonstrar* que algumas classes de funções não possui integrais em termos elementares.

Os erros da regra dos trapézios, método de Simpson e Monte Carlo são, respectivamente, da ordem n^{-2}, n^{-4} e $n^{-1/2}$. No caso de integrais não elementares onde o integrando seja bem definido em todo intervalo de integração, o método dos trapézios e Simpson possui aproximação razoável para $n = 10^5$, sendo o segundo melhor que o primeiro, enquanto o método de Monte Carlo para o mesmo n oferece uma aproximação significativamente menor. Em geral, no caso de integrais impróprias é necessário maior cuidado e estes métodos não são uma boa escolha neste cenário. Desta forma, seria interessante explorar métodos de integração para integrais impróprias, uma vez que boa parte de funções notáveis são representadas como uma integral imprópria no infinito de uma função sem primitiva elementar, como a função digamma ou zeta, para mencionar algumas.

7 Referências

A. P. Humes, L. K. Yoshida, I. S. H. Melo, W. T. Martins, Noções de Cálculo Numérico, Martins McGrawHill do Brasil, 1984.

F.W. Olver, NIST Handbook of Mathematical Functions, Cambridge University Press, New York, 2010

J. F. Ritt, Integration In Finite Terms Liouville's Theory of Elementary Methods, Columbia University Press, New York, 1948.

W. Krauth Statistical Mechanics Algorithms and Computations, Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Superieure, Paris, 2006

APÊNDICE A – Pseudocódigo

Abaixo estão presentes os pseudocódigos usados para gerar os dados das tabelas da seção 5.

Regra dos trapézios

entrada:
    uma função f e um intervalo de integração a, b
$h \leftarrow (b - a)/n$
área $\leftarrow 0.5(f(a) + f(b))$
para $j = 1, 2, \ldots, n$ **faça**
    $x \leftarrow a + j * h$
    área $\leftarrow$ área $+ f(x)$
retorne área $* h$
saída:
    a integral definida de f no intervalo a, b

Regra de Simpson

entrada:
    uma função f e um intervalo de integração a, b
$h \leftarrow (b - a)/2n$
área $\leftarrow 0.5(f(a) + f(b))$
para $j = 1, 2, \ldots, 2n$ **faça**
    $x \leftarrow a + j * h$
    Se j mod $2 = 0$ **faça**
        área $\leftarrow$ área $+ 2 * f(x)$
    Senão
        área $\leftarrow$ área $+ 4 * f(x)$
retorne área $* h/3$
saída:
    uma aproximação para a integral definida de f no intervalo a, b

Monte Carlo

entrada:
    uma função f e um intervalo de integração a, b
área $\leftarrow 0$
para $j = 1, 2, \ldots, n$ **faça**
    $x \leftarrow$ número aleatório em (a,b)
    área $\leftarrow$ área $+ f(x)$
retorne área $* 1/n$
saída:
    uma aproximação para a integral definida de f no intervalo a, b