### **Contents**

4.1	Introdução
4.2	Regra dos Trapézios
	4.2.1 A "fórmula" do erro
	4.2.2 Controlo do erro
4.3	Regra de Simpson         97
	4.3.1 A "fórmula" de erro
	4.3.2 Controlo do erro
4.4	Integrais impróprios
4.5	Integrais singulares
4.6	Cubatura

### **Figures**

## 4.1 Introdução

Uma situação muito corrente tanto na Ciência como na Engenharia é a de a solução de um problema ser dada na forma de um integral que não pode ser calculado em forma cerrada (isto é, analítica) quer porque a integranda tem forma analítica intratável quer porque a integranda é dada sob a forma de uma tábua de valores ou, o que vem a dar no mesmo, é especificada através de um algoritmo que não tem expressão analítica cerrada. Há dois casos completamente diferentes desta situação:

• um é o caso do integral indefinido

$$F_a(x) = \int_a^x f(t) . dt$$

que, do ponto de vista numérico, exige a construção de uma tábua de valores e que consideraremos no Capítulo seguinte como caso particular, e particularmente simples, de integração de uma equação diferencial ordinária;

• o segundo caso é o do integral definido

$$F_a = \int_a^b f(x) . dx$$

que é um número único.

A ideia geral para o cálculo numérico de um integral definido consiste basicamente em substituir a integranda y = f(x) por uma função que a aproxime satisfatoriamente no intervalo [a,b] e que seja dotada de expressão analítica primitivável, g(x), escrevendo

$$\int_{a}^{b} f(x) . dx \cong \int_{a}^{b} g(x) . dx = [G(x)]_{a}^{b}$$

Posto nestes termos, o problema reduz-se ao problema de determinar uma aproximação adequada, g(x), à função y=f(x) no intervalo [a,b]. Uma solução frequentemente apontada que contempla de modo muito simples a questão da integrabilidade consiste em

- 1. definir y = f(x) pelos seus valores em n + 1 pontos do intervalo (a, b);
- 2. dar a g(x) a forma de um polinómio  $p_n(x)$  de grau n e obrigar este a passar pelos n+1 pontos conhecidos.

Deste modo, a solução será exacta para qualquer função  $f(x) = a, a.x, ..., a.x^n$  e, naturalmente, também para qualquer combinação linear destas formas, isto é, para qualquer polinómio de grau igual ou inferior a n. No caso mais geral de uma função y = f(x) qualquer, a solução será apenas aproximada e, frequentemente, apenas grosseiramente aproximada. Encontramonos, assim, perante o problema genérico muito complexo de definir uma aproximação analítica óptima a uma função dada e, naturalmente, antes de mais, de definir em que sentido é que essa função deve ser óptima. Infelizmente, não nos é possível abordar aqui esse problema genérico, pelo que teremos que procurar uma alternativa mais simples, embora com a consciência de que, assim, nos limitamos a soluções relativamente toscas. Essa alternativa será procurada dentro da hipótese de que a divisão do intervalo (a,b) em n subintervalos é suficiente fina para que o problema da qualidade das aproximações

$$g_i(x): x \in (x_{i-1}, x_i)$$

não seja crítico; devido à própria natureza desta hipótese, os métodos que exporemos em seguida aplicam-se apenas ao caso das funções contínuas; no caso das funções com descontinuidades de 1½ espécie (saltos), aplicar-se-ão, em separado, a cada um dos subintervalos resultantes da partição do intervalo original pelo ponto de descontinuidade; no caso das descontinuidades de espécie superior, esses métodos não são, pura e simplesmente, aplicáveis. Por razões de simplicidade, consideraremos apenas o caso da divisão do intervalo original em partes iguais:

$$x_{i+1} - x_i = h$$
  
 $x_0 = a$   
 $y_i = f(x_i)$   
 $\delta y_i = y_{i+1} - y_i$ 

## 4.2 Regra dos Trapézios

Neste método, a ideia central consiste em substituir, em cada intervalo, o arco da curva pela sua corda, calculando em seguida a área sob a poligonal assim definida.

Evidentemente, para o primeiro trapézio é

$$\int_{x_0}^{x_1} y.dx = \frac{h}{2}. [y_1 + y_0]$$

de modo que, para o segundo trapézio será:

$$\int_{x_1}^{x_2} y.dx = \frac{h}{2}. [y_2 + y_1]$$

e assim sucessivamente, até

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} y.dx = \frac{h}{2}. [y_n + y_{n-1}]$$

Somando todos os termos, temos

$$\int_{y_0}^{x_n} y.dx = \frac{h}{2} \cdot [y_0 + 2.y_1 + \dots + 2.y_{n-1} + y_n]$$
(4.1)

#### 4.2.1 A "fórmula"do erro

A estimativa do erro cometido pode fazer-se considerando que y = g(x) é apenas a aproximação de primeira ordem no desenvolvimento de y = f(x) em série de Taylor em torno de  $x_i$ :

$$f(x)_i = f(x_i) + (x - x_i) \cdot f'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2} \cdot f''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{3!} \cdot f'''(x_i) + \cdots$$

Substituindo esta expressão em ambos os membros de

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y.dx = \frac{h}{2}. [y_{i+1} - y_i]$$

obtém-se o seguinte valor para o erro:

$$\varepsilon_i = -\frac{h^3}{12}.f''(x_i) + \cdots$$

ao qual, mediante o uso do teorema da média do cálculo diferencial (teorema de Lagrange), pode dar-se a forma:

$$\varepsilon_i = -\frac{h^3}{12} f''(\xi_i) \qquad (x_i \le \xi_i \le x_{i+1})$$

Somando sobre todos os valores de i, obtemos

$$\varepsilon = -\frac{n \cdot h^{3}}{12} \cdot f''(\xi)$$

$$= -\frac{(x_{n} - x_{0}) \cdot h^{2}}{12} \cdot f''(\xi) \qquad (x_{0} \le \xi_{i} \le x_{n})$$

$$= -\frac{(x_{n} - x_{0})^{3}}{12n^{2}} \cdot f''(\xi)$$
(4.2)

que fornece um majorante para o erro, pelo facto de depender de  $f''(\xi)$ , o máximo da derivada no intervalo.

Esta expressão é importante porque mostra que

- para uma dada amplitude do intervalo, o erro varia com o inverso do quadrado do número de intervalos ou, de outro modo, com o quadrado do passo de integração, pelo que o método dos trapézios se diz de segunda ordem;
- para um dado número de passos de integração (e sob a hipótese muito forte de que o majorante da segunda derivada se mantém), o erro cresce com o cubo da amplitude do intervalo, pelo que, se multiplicarmos o intervalo por k e quisermos manter a precisão, devemos multiplicar o número de passos por  $k^{3/2}$  (o que mostra as sérias dificuldades que teremos se quisermos abordar por este método o problema do integral impróprio).

### Exemplo 4.1 Regra dos Trapézios

Seja o integral

$$I_{\pi/2} = \int_0^{\pi/2} \operatorname{sen}(x) \, dx = 1$$

cujo erro *calculado* pode ser majorado pela expressão (4.2), mas cujo valor *observado* pode ser obtido pela diferença ao resultado da integração analítica. Calculando I pela regra dos trapézios (ver Integral seno.xls), dá:

n	80	40	20	10	5
h	1,963495E-02	3,926991E-02	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01
S	9,999679E-01	9,998715E-01	9,994859E-01	9,979430E-01	9,917618E-01
Erro Calc.	5,046595E-05	2,018638E-04	8,074551E-04	3,229820E-03	1,291928E-02
Erro Obs.	3,212782E-05	1,285138E-04	5,140948E-04	2,057014E-03	8,238231E-03

Vemos que, efectivamente, o erro diminui à medida que aumenta o número de passos da integração. Dado que, neste caso, foi possível estimar f'' com grande rigor, a estimativa do erro encontra-se bastante próxima do erro real.

Seja agora o integral

$$I_{\pi} = \int_0^{\pi} \operatorname{sen}(x) \, .dx = 2$$

que, calculado pela regra dos trapézios, dá:

n	80	40	20	10	5
h	3,926991E-02	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01	6,283185E-01
S	1,999743E+00	1,998972E+00	1,995886E+00	1,983524E+00	1,933766E+00
Erro Calc.	4,037276E-04	1,614910E-03	6,459641E-03	2,583856E-02	1,033543E-01
Erro Obs.	2,570276E-04	1,028190E-03	4,114027E-03	1,647646E-02	6,623440E-02

O erro cometido é oito vezes maior que no caso anterior, como seria de esperar visto que a amplitude do intervalo duplicou.

Seja agora o integral

$$I_{3\pi/2} = \int_0^{3\pi/2} \operatorname{sen}(x) . dx = 1$$

que, calculado pela regra dos trapézios, dá:

		, ,				
	n	80	40	20	10	5
	h	5,890486E-02	1,178097E-01	2,356194E-01	4,712389E-01	9,424778E-01
	S	9,997108E-01	9,988431E-01	9,953693E-01	9,814256E-01	9,248584E-01
E	rro Calc.	1,362581E-03	5,450322E-03	2,180129E-02	8,720515E-02	3,488206E-01
E	rro Obs.	2,891653E-04	1,156862E-03	4,630663E-03	1,857436E-02	7,514159E-02

O erro observado é agora apenas nove vezes maior que o do primeiro exemplo, enquanto poderia esperar-se que fosse  $3^3=27$  vezes maior; trata-se aqui de um típico efeito de compensação parcial dos erros em tramos de curvatura contrária. Pelo contrário, o erro calculado, é, efectivamente, 27 vezes maior, mas absolutamente fictício; torna-se evidente que, se não forem tomadas especiais precauções para garantir a sua validade, a "fórmula" do erro pode, para efeitos práticos, tornar-se absolutamente inútil.

Seja o integral

$$I_{2\pi} = \int_{0}^{2\pi} \operatorname{sen}(x) . dx = 0$$

que, calculado pela regra dos trapézios, dá:

<u> </u>						
n	80	40 20		10	5	
h	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01	6,283185E-01	1,256637E+00	
S	-3,616790E-16	5,911324E-16	1,533436E-16	-7,697835E-17	-1,444196E-17	
Erro Calc.	3,229820E-03	2,583856E-02	2,067085E-01	1,653668E+00	1,322934E+01	
Erro Obs.	3,616790E-16	-5,911324E-16	-1,533436E-16	7,697835E-17	1,444196E-17	

O efeito de compensação dos erros é, aqui, particularmente nítido, como seria de esperar. Um efeito mais surpreendente surge, porém: o aumento do número de passos de integração não aumenta de modo nenhum a precisão dos resultados porque os erros não provêm da aproximação do método em si (truncatura do processo de passagem ao limite, truncatura da série de Taylor) mas apenas dos efeitos de arredondamento do cálculo na máquina.

#### 4.2.2 Controlo do erro

Na impossibilidade de calcular um erro ou, sequer, um seu majorante correspondente à aplicação do método a um dado caso, temos, necessariamente, que procurar um modo de avaliar o erro ou, pelo menos, mantê-lo sob controlo.

Um caminho possível e que é frequente ouvir-se recomendar é o seguinte: utilizar a regra dos trapézios para dois espaçamentos h e h'=h/2 e comparar os resultados; se estes não diferirem significativamente (o nível de significado terá sempre que ser fixado pelo utilizador em face das suas necessidades concretas mas, por razões de realismo, deve sempre ficar razoavelmente longe da precisão da representação dos números na máquina), poderemos razoavelmente esperar que tenhamos já um resultado correcto; no entanto, a experiência mostra que este critério é, mais frequentemente que o que gostaríamos, demasiado optimista; com efeito:

- o erro não depende apenas da amplitude do intervalo e do passo de integração, mas da própria forma da integranda, através do parâmetro incontrolável ξ;
- a fórmula do erro só é válida para valores de *h* "suficientemente pequenos", condição que não podemos saber *a priori* o que significa em cada caso concreto.

Um critério mais exigente, e que responde explicitamente a esta última consideração, parte de três cálculos, correspondentes a h, h' = h/2 e h'' = h/4, a que corresponderão os resultados calculados S, S' e S'', tais que:

$$I = S + \varepsilon = S' + \varepsilon' = S'' + \varepsilon''$$

e em que, de acordo com a fórmula do erro, esperamos que

$$\epsilon \approx 4.\epsilon' \approx 16.\epsilon''$$

de modo que

$$S' - S = \varepsilon - \varepsilon' \approx \frac{3}{4}.\varepsilon$$
$$S'' - S' = \varepsilon' - \varepsilon'' \approx \frac{3}{4}.\varepsilon' \approx \frac{3}{16}.\varepsilon$$

ou

$$\frac{S'-S}{S''-S'} \approx 4 \tag{4.3}$$

Assim, se os números (S'-S) e (S''-S') estiverem entre si na razão aproximada de 4 para 1, isso significa que, provavelmente, os passos de integração se encontram já todos dentro do domínio de validade da fórmula do erro; nestas condições, (S''-S') pode servir como estimador de  $\varepsilon''$  na forma

$$S'' - S' \approx 3\varepsilon'' \tag{4.4}$$

o que nos permitirá estimar se S'' se encontra já dentro da precisão desejada. Como é evidente, pode acontecer que o cumprimento da condição (4.3) exija uma precisão superior àquela em que estamos interessados, o que corresponderia a um certo desperdício de esforço de cálculo, certamente um preço justo a pagar pela segurança.

Para *n* crescente, o cociente (4.3) começa em geral por diminuir até próximo do valor teórico, por efeito da diminuição do erro de truncatura, voltando mais tarde a aumentar, o que testemunha domínio do erro de arredondamento sobre o erro de truncatura. Se, porém, o crescimento se inicia antes de o cociente se ter sequer aproximado do valor teórico, isso indica claramente que o método não é aplicável com a precisão de representação da máquina que estamos a utilizar.

Exemplo 4.2 Cociente de convergência

Apliquemos este raciocínio aos integrais do exemplo anterior (ver Integral\_seno.xls ): Para  $I_{\pi/2}$  temos:

n	80	40	20	10	5
h	1,963495E-02	3,926991E-02	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01
S	9,999679E-01	9,998715E-01	9,994859E-01	9,979430E-01	9,917618E-01
cociente	4,000386E+00	4,001543E+00	4,006184E+00		
ε"	3,212865E-05	1,285270E-04	5,143063E-04		
Erro Obs.	3,212782E-05	1,285138E-04	5,140948E-04	2,057014E-03	8,238231E-03

o que significa que, a partir de n=20, já o passo é suficiente para funcionar como infinitesimal . Por outro lado, observar-se-á que esta nova estimativa do erro é francamente razoável.

Para  $I_{\pi}$  temos:

n	80	40	20	10	5
h	3,926991E-02	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01	6,283185E-01
S	1,999743E+00	1,998972E+00	1,995886E+00	1,983524E+00	1,933766E+00
cociente	4,001543E+00	4,006184E+00	4,024930E+00		
ε"	2,570540E-04	1,028613E-03	4,120812E-03		
Erro Obs.	2,570276E-04	1,028190E-03	4,114027E-03	1,647646E-02	6,623440E-02

o que significa que, também neste caso, n=20 é perfeitamente suficiente.

O mesmo acontece para  $I_{3\pi/2}$ :

		/			
n	80	40	20	10	5
h	5,890486E-02	1,178097E-01	2,356194E-01	4,712389E-01	9,424778E-01
S	9,997108E-01	9,988431E-01	9,953693E-01	9,814256E-01	9,248584E-01
cociente	4,003475E+00	4,013960E+00	4,056830E+00		
ε"	2,892322E-04	1,157934E-03	4,647900E-03		
Erro Obs.	2,891653E-04	1,156862E-03	4,630663E-03	1,857436E-02	7,514159E-02

Para  $I_{2\pi}$ , porém, o cálculo deixa claramente de ser de confiança dado o número ridiculamente baixo de casas significativas que retivemos no resultado:

n	80	40	20	10	5
h	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01	6,283185E-01	1,256637E+00
S	-3,616790E-16	5,911324E-16	1,533436E-16	-7,697835E-17	-1,444196E-17
cociente	-4,594706E-01	5,261029E-01	-2,715173E-01		
ε"	-3,176038E-16	1,459296E-16	7,677398E-17		
Erro Obs.	3,616790E-16	-5,911324E-16	-1,533436E-16	7,697835E-17	1,444196E-17

## 4.3 Regra de Simpson

Um defeito óbvio da regra dos trapézios é o de cometer um erro sistemático em intervalos em que a segunda derivada da integranda mantém sinal constante. Para o evitar e para aumentar, na generalidade, a precisão da aproximação, foi criado um algoritmo novo, a regra de Simpson que, em vez de substituir a curva pelas cordas definidas por cada par de pontos consecutivos, a substitui pelas parábolas definidas por cada trio de pontos consecutivos.

É fácil estabelecer que essa parábola é da forma

$$y = y_i + \frac{x - x_i}{h} \cdot (y_{i+1} - y_i) + \frac{(x - x_i) \cdot (x - x_{i+1})}{2h^2} \cdot (y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i)$$

de onde resulta que

$$\int_{x_{i}}^{x_{i+2}} y.dx =$$

$$= \int_{x_{i}}^{x_{i+2}} \left[ y_{i} + \frac{x - x_{i}}{h} \cdot (y_{i+1} - y_{i}) + \frac{(x - x_{i}) \cdot (x - x_{i+1})}{2h^{2}} \cdot (y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_{i}) \right] \cdot dx =$$

$$= 2h \cdot \left[ y_{i} + y_{i+1} - y_{i} + \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_{i}}{6} \right] = \frac{h}{3} \left[ y_{i} + 4y_{i+1} + y_{i+2} \right]$$

de modo que a soma dá

$$\int_{y_0}^{x_{2n}} y dx = \frac{h}{3} \cdot \left[ y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + \dots + 4y_{2n-3} + 2y_{2n-2} + 4y_{2n-1} + y_{2n} \right]$$
(4.5)

#### 4.3.1 A "fórmula" de erro

Quanto à fórmula do erro, procedendo como anteriormente, obtemos:

$$\varepsilon_i = -\frac{h^5}{90} \cdot f''''(\xi_i) \qquad (x_i \le \xi_i \le x_{i+2})$$

e, somando sobre todos os valores de *i*, obtemos

$$\epsilon = -\frac{n \cdot h^{5}}{90} \cdot f''''(\xi)$$

$$= -\frac{(x_{n} - x_{0}) \cdot h^{4}}{90} \cdot f''''(\xi) \qquad (x_{0} \le \xi_{i} \le x_{2n})$$

$$= -\frac{(x_{n} - x_{0})^{5}}{90n^{4}} \cdot f''''(\xi)$$
(4.6)

de onde resulta que:

- para uma dada amplitude do intervalo, o erro varia com o inverso da quarta potência do número de intervalos ou, de outro modo, com a quarta potência do passo de integração, pelo que o método dos trapézios se diz de *quarta ordem*; dado o facto de a complexidade computacional da fórmula de Simpson ser da mesma ordem da dos trapézios e a melhoria significativa da precisão que ela representa, preferi-la-emos em todos os casos;
- para um dado número de passos de integração (e sob a hipótese muito forte de que o majorante da terceira derivada se mantém), o erro cresce com a quinta potência da amplitude do intervalo, pelo que, se multiplicarmos o intervalo por k e quisermos manter a precisão, devemos multiplicar o número de passos por k<sup>5/4</sup>.

#### 4.3.2 Controlo do erro

Naturalmente, no caso mais corrente de não dispormos de um majorante da quarta derivada, poderemos sempre, como anteriormente, recorrer ao critério

$$\frac{S' - S}{S'' - S'} \approx 16\tag{4.7}$$

com h = h'/2 = h''/4, e, quando ele for cumprido, poderemos estimar

$$S'' - S' \approx 15\epsilon'' \tag{4.8}$$

Exemplo 4.3 Regra de Simpson

Sejam os integrais do exemplo anterior:

,				
n	80	40	20	10
$I_{\pi/2}$	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
$I_{\pi}$	2.00011	2.00001	2.00000	2.00000
$I_{3\pi/2}$	1.00028	1.00002	1.00000	1.00000
$I_{2\pi}$	0	$-2.1 \times 10^{-13}$	$-2.6 \times 10^{-13}$	$-4.1 \times 10^{-12}$

Observa-se, em relação ao exemplo anterior, um notável aumento da precisão, salvo no último integral, em que dominam os erros de arredondamento sobre os de truncatura.

**Exercício 4.1** O leitor calculará  $I_{\pi}$  com a precisão adequada, tanto pelo método dos trapézios como pelo método de Simpson, de modo a poder calcular e comparar os cocientes de convergência e os erros calculados.

**Exercício 4.2** Será o leitor capaz de estabelecer um cociente de convergência para um método de integração de ordem *n* e de estabelecer o correspondente estimador do erro?

\_\_\_\_

**Exercício 4.3** Enumere as dificuldades numéricas do cálculo do cociente de convergência, e quais as suas consequências em termos de utilização? (observe com cuidado o seu comportamento no exemplo 2)

-

## 4.4 Integrais impróprios

Um integral

$$\int_{a}^{b} f(x) . dx$$

diz-se impróprio se um dos limites (ou ambos) não é um número finito. Por razões de simplicidade, limitaremos a nossa discussão ao caso do integral

$$\int_{a}^{\infty} f(x) . dx$$

visto que o caso

$$\int_{-\infty}^{b} f(x) . dx = -\int_{+\infty}^{b} f(-x) . dx = \int_{b}^{+\infty} f(-x) . dx$$

se reduz a este sem qualquer dificuldade.

O integral impróprio diz-se convergente se existir I tal que

$$I = \lim_{b = \infty} \left( \int_{a}^{b} f(x) . dx \right)$$

Se tal limite não existir ou for finito, então o integral diz-se *divergente* e não tem qualquer sentido, quer em termos analíticos quer numéricos. No que segue, suporemos, portanto, que o integral é convergente. Em cada caso particular, porém, o leitor terá que certificar-se previamente, por todos os meios ao seu alcance, da convergência do integral: com efeito, a abordagem por cálculo numérico sem tal certeza expõe-no a sérios riscos; para o efeito, a Análise Matemática fornece critérios e testes de convergência adequados; porém, em situações concretas, o próprio significado físico do integral e a natureza das aproximações e simplificações realizadas ao construir o modelo matemático do real poderão ajudar a determinar a validade de uma hipótese de convergência sem necessidade do recurso a testes analíticos.

O cálculo do integral impróprio, quando convergente, consegue-se, com uma precisão preespecificada, se o representarmos na forma

$$\int_{a}^{\infty} f(x) . dx = \int_{a}^{b} f(x) . dx + \int_{b}^{\infty} f(x) . dx$$

Com efeito, o primeiro integral, qualquer que seja *b* finito, é um integral ordinário e o segundo tende para 0 quando *b* cresce; na prática, o valor de *b* pode ser estabelecido como aquele a partir do qual, dentro da precisão preestabelecida, já se não observa (persistentemente!) variação do resultado; porém, para isso, deve ir-se fazendo variar o passo de integração com a amplitude do intervalo de modo a manter constante o erro, tendo em consideração a ordem do método utilizado.

**Exercício 4.4** Com base no que ficou dito, estabeleça uma estratégia para calcular um integral da forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) . dx$$

supondo que se sabe que é convergente.

## 4.5 Integrais singulares

Quando o intervalo de integração é finito mas a integranda (x) tem um número finito de descontinuidades infinitas (singularidades) nesse intervalo, estamos em presença do que chamamos um integral singular. Dado que é sempre possível (embora nem sempre fácil) partir o intervalo de integração em partes tais que, em cada uma, exista apenas uma singularidade, podemos limitar o nosso estudo ao caso de uma singularidade única . Um artifício adequado para o cálculo de um valor aproximado do integral singular é o *método de Kantorovich* que consiste em extrair da integranda f(x) uma certa função g(x) que

- tenha uma singularidade do mesmo tipo e ordem da de f(x);
- seja integrável analiticamente;
- a diferença f(x) g(x) seja contínua.

Sob estas hipóteses, teremos

$$\int_{a}^{b} f(x) . dx = \int_{a}^{b} g(x) . dx + \int_{a}^{b} (f(x) - g(x)) . dx$$

No presente estudo consideraremos apenas o caso de

· integrais da forma

$$\int_{a}^{b} \frac{f(x)}{(x-x_0)^{\alpha}} dx \qquad a < x_0 < b \qquad 0 < \alpha < 1$$

- sendo f(x) contínuo em (a,b)
- e f(x) dotada de derivadas contínuas em (a,b) até à ordem n+1.

Sob estas condições, podemos escrever f(x) na forma de desenvolvimento em série de Taylor truncado:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} \cdot (x - x_0)^k + \varepsilon(x)$$

com

$$\varepsilon(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot (x - x_0)^{n+1} \qquad a < \xi < b$$

de onde resulta

$$\begin{split} & \int_{a}^{b} \frac{f(x)}{(x - x_{0})^{\alpha}} . dx = \\ & = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_{0})}{k!} . \int_{a}^{b} (x - x_{0})^{k - \alpha} . dx + \int_{a}^{b} \frac{\varepsilon(x)}{(x - x_{0})^{\alpha}} . dx \\ & = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_{0})}{(k + 1 - \alpha)} . \left[ (b - x_{0})^{k + 1 - \alpha} - (a - x_{0})^{k + 1 - \alpha} \right] + \int_{a}^{b} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} . (x - x_{0})^{n+1 - \alpha} . dx \\ & = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_{0})}{(k+1 - \alpha)} . \left[ (b - x_{0})^{k+1 - \alpha} - (a - x_{0})^{k+1 - \alpha} \right] + f^{(n+1)}(\xi) \int_{a}^{b} \frac{(x - x_{0})^{n+1 - \alpha}}{(n+1)!} . dx \end{split}$$

Este último integral é, por força das hipóteses, um integral próprio calculável analiticamente, pelo que o problema está resolvido a menos da incerteza introduzida por  $\xi$ ; para diminuir esta incerteza, podemos reduzir b-a (continuando a impor  $a<\xi< b$ ) a um valor tão pequeno quanto necessário para que a variação de  $f^{n+1}(\xi)$  seja insignificante face à precisão exigida.

Exercício 4.5 Investigue as eventuais dificuldades da aplicação do método de Kantorovich ao

caso de a singularidade ocorrer precisamente em um dos extremos do intervalo de integração. Aplique os resultados a que chegar ao cálculo de

$$\int_{0}^{0.5} x^{-0.5} \cdot (1-x)^{-0.5} \, dx$$

### 4.6 Cubatura

As fórmulas da cubatura aplicam-se ao cálculo de integrais duplos

$$\int_{a}^{A} dx. \int_{b}^{B} f(x, y). dy$$

Uma das mais simples e úteis resulta de aplicar a *regra de Simpson* nos seguintes termos: sendo o domínio de integração *aABb* um rectângulo de lados paralelos aos eixos, partamo-lo em quatro partes iguais pelas medianas dos lados e calculemos os integral interior pela regra de Simpson:

$$\int_{a}^{A} dx. \int_{b}^{B} f(x,y).dy =$$

$$= \int_{a}^{A} \frac{h_{y}}{3}. [f(x,y_{0}) + 4f(x,y_{1}) + f(x,y_{2})].dx$$

$$= \frac{h_{y}}{3}. \left[ \int_{a}^{A} f(x,y_{0}).dx + 4. \int_{a}^{A} f(x,y_{1}).dx + \int_{a}^{A} f(x,y_{2}).dx \right]$$

Aplicando de novo a regra de Simpson a estes integrais, obtemos

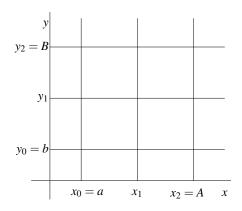


Figura 4.1: Regra de Simpson

$$\begin{split} &\int_{a}^{A} dx. \int_{b}^{B} f(x,y).dy = \\ &= \frac{h_{x}.h_{y}}{9}. \begin{cases} \left[ f\left(x_{0}, y_{0}\right) + 4f\left(x_{1}, y_{0}\right) + f\left(x_{2}, y_{0}\right) \right] + \\ +4. \left[ f\left(x_{0}, y_{1}\right) + 4f\left(x_{1}, y_{1}\right) + f\left(x_{2}, y_{1}\right) \right] + \\ +\left[ f\left(x_{0}, y_{2}\right) + 4f\left(x_{1}, y_{2}\right) + f\left(x_{2}, y_{2}\right) \right] \end{cases} \\ &= \frac{h_{x}.h_{y}}{9}. \begin{cases} \left[ f\left(x_{0}, y_{0}\right) + 4f\left(x_{0}, y_{2}\right) + f\left(x_{2}, y_{0}\right) + f\left(x_{2}, y_{2}\right) \right] + \\ +4. \left[ f\left(x_{1}, y_{0}\right) + 4f\left(x_{0}, y_{1}\right) + f\left(x_{2}, y_{1}\right) + f\left(x_{1}, y_{2}\right) \right] + 16f\left(x_{1}, y_{1}\right) \end{cases} \end{split}$$

com

$$h_x = \frac{A - a}{2} \qquad h_y = \frac{B - b}{2}$$

A fórmula de Simpson da cubatura é, portanto, da forma:

$$\iint f(x,y).dx.dy = \frac{h_x.h_y}{9}.\left[\Sigma_0 + 4\Sigma_1 + 16\Sigma_2\right]$$

em que:

 $\Sigma_0$  = soma dos valores de f nos vértices da malha

 $\Sigma_1$  = soma dos valores de f nos pontos médios dos lados da malha

 $\Sigma_2$  = valor de f no centro da malha

Se o rectângulo de integração é grande, a divisão a meio não chega, de modo que o domínio é divido em  $m \times n$  rectângulos, a cada um dos quais se aplica a fórmula anterior. Se o domínio de integração não é rectangular, considera-se o menor rectângulo que o contém e aplica-se o mesmo método fazendo f=0 fora do domínio.

Exercício 4.6 Desenvolva uma fórmula de Simpson para o integral triplo.