# Curso: Métodos Numéricos II
# Professor: Creto Augusto Vidal
# Semestre: 2021.1
# Aula # 14

**1. Objetivo:** Utilizar as estratégias de mudança de variável por funções exponenciais para resolver problemas especiais em que o integrando apresenta **singularidade** em um dos limites de integração, mas, ainda assim, a integral existe.

## 2. Redefinição do problema.

Após as mudanças de variável apresentadas na Aula# 13, o problema de integral definida em que o integrando apresenta singularidade em um dos limites de integração ou em ambos os limites de integração foi transformado para integral com limites infinitos (veja equação (1)).

O problema a ser resolvido é

(1) $I = \int_a^b f(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x(s))\frac{dx(s)}{ds}ds = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(s)ds.$ ,

onde

i) $a$ ou $b$ ou ambos ($a$ e $b$) são pontos de singularidade, isto é, pontos onde $\lim\limits_{x\to x_{\text{sing}}} f(x) = +\infty$ ou $\lim\limits_{x\to x_{\text{sing}}} f(x) = -\infty$, mas mesmo assim $I$ é finito.

ii) $\bar{f}(s) = f(x(s))\frac{dx(s)}{ds}$

ii.1) $x(s) = \begin{cases} \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\tanh(s) & - \textit{exponencial simples} \\ \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right) & - \textit{exponencial dupla} \end{cases}$

ii.2) $\frac{dx(s)}{ds} = \begin{cases} \frac{b-a}{2}\frac{1}{(\cosh(s))^2} & - \textit{exponencial simples} \\ \frac{b-a}{2}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] & - \textit{exponencial dupla} \end{cases}$

## 3. Solução do problema depois da mudança de variável.

Com a mudança de variável, o integrando ficou com a forma mostrada na Figura 1. Agora, é necessário calcular, com boa acurácia, a área debaixo do gráfico de $\bar{f}(s)$.

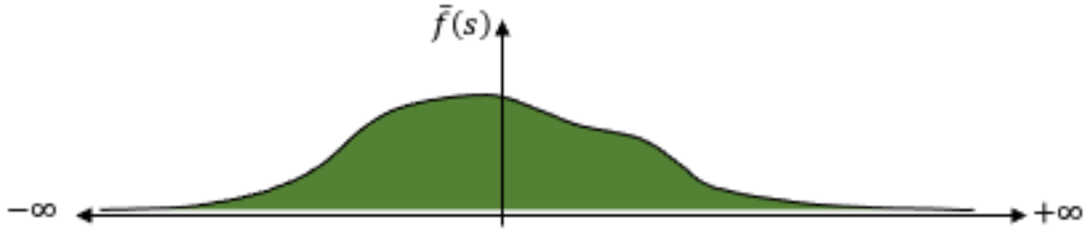


Figura 1: Forma do integrando após a mudança de variável exponencial (simples ou dupla).

Assim, pode-se tentar resolver o problema das seguintes maneiras:

**Solução 1**: Transformar o problema de forma a resolvê-lo pela quadratura de Gauss-Hermite.

(2) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(s)ds = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2}\left(e^{s^2}\bar{f}(s)\right)ds = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2}\left(\bar{\bar{f}}(s)\right)ds \approx \sum_{k=1}^{n} w_k \bar{\bar{f}}(s_k),$

onde

(3) $\bar{\bar{f}}(s) = e^{s^2}\bar{f}(s).$

**Solução 2**: Transformar o problema de forma a resolvê-lo por Newton-Cotes ou Gauss-Legendre.

(4) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(s)ds \approx \int_{-c}^{+c} \bar{f}(s)ds \approx \sum_{k=1}^{n} w_k \bar{f}(s_k),$

### *3.1 Solução 1 aplicada ao exemplo da Aula #13*

#### *3.1.1 Mudança de variável por exponencial simples*

Na Aula#13, essa mudança de variável já foi ilustrada, resultando na forma final

(5) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}(1+\tanh(s))}}\frac{1}{(\cosh(s))^2}ds = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}}\frac{1}{(\cosh(s))^2}ds$

Para transformar a equação (5) na forma de Gauss-Hermite, o problema não pode ser alterado. Assim, multiplica-se o integrando por 1, isto é, por

(6) $1 = \frac{e^{-s^2}}{e^{-s^2}} = e^{-s^2}e^{+s^2}$

para obter a forma modificada

(7) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}}\frac{1}{(\cosh(s))^2}ds = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2}\left(e^{+s^2}\frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}}\frac{1}{(\cosh(s))^2}\right)ds.$

A equação (7) está na forma de Gauss-Hermite em que a função a ser utilizada é

(8) $\bar{\bar{f}}(s) = e^{s^2}\frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}}\frac{1}{(\cosh(s))^2}.$

Sabendo-se que a solução aproximada por quadratura de Gauss-Hermite é escrita como

(9) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2}\left(\bar{\bar{f}}(s)\right)ds \approx \sum_{k=1}^{n} w_k \bar{\bar{f}}(s_k),$

escolhe-se o número $n$ e utilizam-se os valores de $w_k$ e $s_k$ correspondentes.

Neste exemplo, apenas para ilustrar o processo, $n = 2$. Assim

(10) $$\begin{array}{lll} s_1 = -\frac{1}{2}\sqrt{2} & \text{e} & w_1 = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \\ s_2 = +\frac{1}{2}\sqrt{2} & \text{e} & w_2 = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \end{array}.$$

Substituindo-se a equação (8) em (9), e, em seguida, os valores da equação (10), tem-se

(11) $$\begin{aligned} I &= \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2}\left(e^{s^2}\frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}}\frac{1}{(\cosh(s))^2}\right)ds \\ &\approx \sum_{k=1}^{n} w_k\left(e^{(s_k)^2}\frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s_k))}}\frac{1}{(\cosh(s_k))^2}\right) \end{aligned}$$

Expandindo o somatório para $n$ igual a 2, tem-se

$$
\begin{aligned}
I &= \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2}\left(e^{s^2}\frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}}\frac{1}{(\cosh(s))^2}\right)ds \\
&\approx \sum_{k=1}^{2} w_k\left(e^{(s_k)^2}\frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s_k))}}\frac{1}{(\cosh(s_k))^2}\right) \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{\pi}.\left(e^{\left(-\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)^2}\frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\left(-\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)\right)\right)}}\frac{1}{\left(\cosh\left(\left(-\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)\right)\right)^2}\right) \qquad (12)\\
&+ \frac{1}{2}\sqrt{\pi}.\left(e^{\left(+\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)^2}\frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\left(+\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)\right)\right)}}\frac{1}{\left(\cosh\left(\left(+\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)\right)\right)^2}\right) \\
&= 1.55217799
\end{aligned}
$$

Para valores maiores de $n$ o procedimento é análogo. A Tabela 1 mostra os resultados para vários valores de $n$.

Tabela 1: Resultados para vários valores de $n$ pela Quadratura de Gauss-Hermite

| $n$ | $I$ |
|---|---|
| 2 | 1.55217799 |
| 3 | 1.72459307 |
| 4 | 1.81023965 |
| 5 | 1.86628196 |
| 10 | 1.96471343 |
| 20 | 1.99460090 |
| 100 | 1.99999796 |

Na aula anterior, foi mostrado que, usando-se Newton-Cotes aberta com polinômio de substituição de grau 6 (significa 7 pontos por partição) e N= 100.000 partições, isto é, com 700.000 pontos, o resultado da integral foi $I = 1.999262$. Assim, com apenas 100 pontos, o resultado da Quadratura de Gauss-Hermite aplicada sobre o problema transformado pela mudança de variável com exponencial simples é de $I = 1.99999796$.

*3.1.2 Mudança de variável por exponencial dupla*

Na Aula#13, essa mudança de variável já foi ilustrada, resultando na forma final

$$
\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}}\frac{1}{2}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]ds \qquad (13)\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]ds
\end{aligned}
$$

Para transformar a equação (13) na forma de Gauss-Hermite, o problema não pode ser alterado. Assim, multiplica-se o integrando por 1, isto é, por

$$(14)\quad 1 = \frac{e^{-s^2}}{e^{-s^2}} = e^{-s^2}e^{+s^2}$$

para obter a forma modificada

$$
\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] ds \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2} \left( e^{+s^2} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]\right) ds.
\end{aligned} \tag{15}
$$

A equação (15) está na forma de Gauss-Hermite em que a função a ser utilizada é

$$
\bar{\bar{f}}(s) = e^{s^2} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]. \tag{16}
$$

Sabendo-se que a solução aproximada por quadratura de Gauss-Hermite é escrita como

$$
I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2} \left(\bar{\bar{f}}(s)\right) ds \approx \sum_{k=1}^{n} w_k \bar{\bar{f}}(s_k), \tag{17}
$$

escolhe-se o número $n$ e utilizam-se os valores de $w_k$ e $s_k$ correspondentes.

Neste exemplo, apenas para ilustrar o processo, $n = 2$. Assim

$$
\begin{aligned}
s_1 &= -\tfrac{1}{2}\sqrt{2} \quad \text{e} \quad w_1 = \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi} \\
s_2 &= +\tfrac{1}{2}\sqrt{2} \quad \text{e} \quad w_2 = \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi}.
\end{aligned} \tag{18}
$$

Substituindo-se a equação (16) em (17), e, em seguida, os valores da equação (18), tem-se

$$
\begin{aligned}
I &= \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2} \left( e^{s^2} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]\right) ds \\
&\approx \sum_{k=1}^{n} w_k \left( e^{(s_k)^2} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s_k)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s_k)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s_k)\right)\right)^2}\right]\right)
\end{aligned} \tag{19}
$$

Expandindo o somatório para $n$ igual a 2, tem-se

$$
\begin{aligned}
I &= \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2} \left( e^{s^2} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]\right) ds \\
&\approx \sum_{k=1}^{2} w_k \left( e^{(s_k)^2} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s_k)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s_k)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s_k)\right)\right)^2}\right]\right) \\
&= \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi}.\left( e^{\left(-\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)^2} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh\left(-\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh\left(-\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh\left(-\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)\right)\right)^2}\right]\right) \\
&+ \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi}.\left( e^{\left(+\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)^2} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh\left(+\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh\left(+\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh\left(+\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)\right)\right)^2}\right]\right) \\
&= 1.97987105
\end{aligned} \tag{20}
$$

Para outros valores de $n$ o procedimento é análogo. A Tabela 2 mostra os resultados para vários valores de $n$, tanto para a exponencial simples (Tabela 1) quanto para a exponencial dupla.

Tabela 2: Resultados para vários valores de $n$ pela Quadratura de Gauss-Hermite

| | Exponencial Simples | | Exponencial Dupla |
|---|---|---|---|
| $n$ | I | $n$ | $I$ |
| 2 | 1.55217799 | 2 | 1.97987105 |
| 3 | 1.72459307 | 3 | 2.03115359 |
| 4 | 1.81023965 | 4 | 1.99147161 |
| 5 | 1.86628196 | 5 | 1.99951358 |
| 10 | 1.96471343 | 10 | 1.99994150 |
| 20 | 1.99460090 | 20 | 1.99999975 |
| 100 | 1.99999796 | 30 | 1.99999999 |

Na aula anterior, foi mostrado que, usando-se Newton-Cotes aberta com polinômio de substituição de grau 6 (significa 7 pontos por partição) e N= 100.000 partições, isto é, com 700.000 pontos, o resultado da integral foi $I = 1.999262$. Assim, com apenas 30 pontos, o resultado da Quadratura de Gauss-Hermite aplicada sobre o problema transformado pela mudança de variável com exponencial simples é de $I = 1.99999999$.

Note que a mudança de variável com exponencial dupla concentra a **área útil** da integral mais próximo da origem, ou seja, o decaimento para zero é mais rápido do que na exponencial simples.

***3.2 Solução 2 aplicada ao exemplo da Aula #13***

*3.2.1 Mudança de variável por exponencial simples*

Na Aula#13, essa mudança de variável já foi ilustrada, resultando na forma final

(21) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}(1+\tanh(s))}} \frac{1}{(\cosh(s))^2} ds = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}} \frac{1}{(\cosh(s))^2} ds$

O gráfico do integrando na equação (21) é mostrado na Figura 2 a seguir.

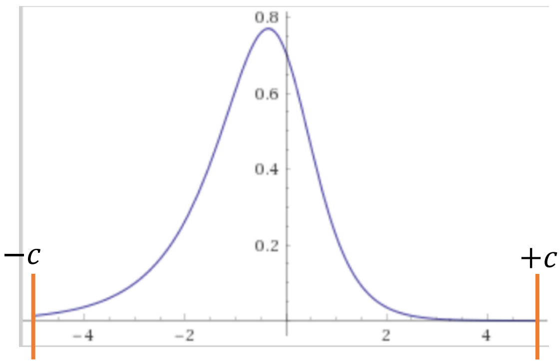


Figura 2: Gráfico de $\bar{f}(s)$ para o exemplo (2) com exponencial simples.

Na solução 2, deseja-se obter uma aproximação do problema, transformando a integral com limites infinitos por uma integral com limites finitos de forma que

(22) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}(1+\tanh(s))}} \frac{1}{(\cosh(s))^2} ds = \int_{-c}^{+c} \frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}} \frac{1}{(\cosh(s))^2} ds$

tenha uma boa acurácia. O problema, então, resume-se a escolher bem o valor dos limites $[-c, +c]$ de forma que a área que fica fora desse intervalo seja muito próxima de zero.

Neste exemplo, inspecionando-se a Figura 2, pode-se esperar que $[-c, +c] = [-5, +5]$ seja uma boa escolha. Cabe agora, calcular bem a área do gráfico nesse intervalo.

Porém, quando o resultado for obtido, vai bater a dúvida: “Será que o valor de $c = 5$ foi uma boa escolha?”.

Para ter certeza, escolha um valor de $c = 6, 7, \ldots$ e verifique se o resultado da integral muda muito ou não.

Para ilustrar o processo, o problema será resolvido para dois valores de $c$ (5 e 6). Assim,

(23) $I \approx \int_{-5}^{+5} \frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}} \frac{1}{(\cosh(s))^2} ds \approx 1.98647901$ e

(24) $I \approx \int_{-6}^{+6} \frac{1}{\sqrt{2(1+\tanh(s))}} \frac{1}{(\cosh(s))^2} ds \approx 1.99503637$

Na Tabela 3, são exibidos os valores da integral para vários valores de $c$

Tabela 3: Resultados para vários valores de $c$

| **c** | **I** |
|---|---|
| 5 | 1.98647901 |
| 6 | 1.99503637 |
| 7 | 1.99817540 |
| 8 | 1.99932896 |
| 9 | 1.99975317 |
| 20 | 1.99999674 |

*3.2.2 Mudança de variável por exponencial dupla*

Na Aula#13, essa mudança de variável já foi ilustrada, resultando na forma final

(25) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}} \left[\frac{\pi}{2} \frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] ds$

O gráfico do integrando na equação (25) é mostrado na Figura 3 a seguir.

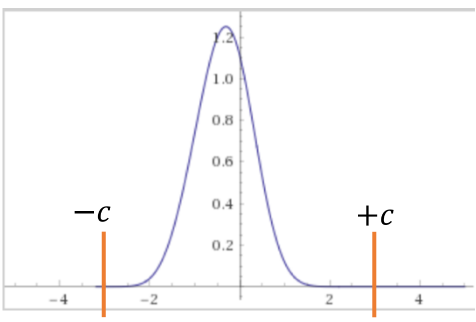


Figura 3: Gráfico de $\bar{f}(s)$ para o exemplo (2) com exponencial dupla.

Na solução 2, deseja-se obter uma aproximação do problema, transformando a integral com limites infinitos por uma integral com limites finitos de forma que

$$(22)\quad \begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] ds \\ &\approx \int_{-c}^{+c} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] ds \end{aligned}$$

tenha uma boa acurácia. O problema, então, resume-se a escolher bem o valor dos limites $[-c,+c]$ de forma que a área que fica fora desse intervalo seja muito próxima de zero.

Neste exemplo, inspecionando-se a Figura 3, pode-se esperar que $[-c,+c]=[-3,+3]$ seja uma boa escolha. Cabe agora, calcular bem a área do gráfico nesse intervalo.

Porém, quando o resultado for obtido, vai bater a dúvida: “Será que o valor de $c=3$ foi uma boa escolha?”.

Para ter certeza, escolha um valor de $c=3,4,\ldots$ e verifique se o resultado da integral muda muito ou não.

Para ilustrar o processo, o problema será resolvido para dois valores de $c$ (3 e 4). Assim,

$$(23)\quad I \approx \int_{-3}^{+3} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] ds \approx 1.99999971 \quad \text{e}$$

$$(24)\quad I \approx \int_{-3.5}^{+3.5} \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] ds \approx 1.99999999$$

Observações importantíssimas:

1) Aqui, a escolha de $c$ tem que ser feita com bastante cautela.

O problema é que na função $\frac{dx(s)}{ds}$ vão aparecer valores de $\boldsymbol{e^{e^s}}$**.** Assim, se $s$ passar de um certo valor, esse cálculo excederá o limite de representação de ponto flutuante do computador.

No exemplo assim, $c=4$ não foi possível. Assim, o valor de $c=3.5$ foi usado e deu um resultado excelente.

2) Na implementação desses métodos (Solução 2), o loop mais externo controla os resultados sucessivos obtidos com valores crescentes de $c$.

Internamente, qualquer método (Fórmulas de Newton-Cotes Fechada ou Aberta, ou Quadratura de Gauss-Legendre) pode ser chamado especificando a tolerância desejada para o cálculo acurado da integral no intervalo $[-c,+c]$.

Lembre-se que a tolerância usada para o cálculo da integral é muito importante no resultado final. Não adianta ter um valor de $c$ adequado se o cálculo da integral no intervalo $[-c,+c]$ for ruim.

**Tarefa: Seguindo o roteiro desta Aula e as explicações da Aula#13, implemente as estratégias de solução 2 com exponencial simples e dupla. Teste sua implementação nos seguintes problemas.**

**1)** $\boldsymbol{I=\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\sqrt[3]{x^2}}=6}$ **2)** $\boldsymbol{I=\int_{-2}^{0}\frac{dx}{\sqrt{4-x^2}}=\frac{\pi}{2}}$