Curso: Métodos Numéricos II
Professor: Creto Augusto Vidal
Semestre: 2021.1
Aula # 13

1. Objetivo: Desenvolver estratégias para resolver problemas especiais em que o integrando apresenta **singularidade** em um dos limites de integração, mas, ainda assim, a integral existe.

2. Definição do problema e análise preliminar.

O problema a ser resolvido é

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

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

Exemplo:

(2) $I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = 2$. Aqui, o limite inferior (zero) é um ponto de singularidade pois, $\lim_{x \to 0+} \left(\frac{1}{\sqrt{x}}\right) = +\infty$.

O gráfico de $f(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$ no intervalo de integração é mostrado na Figura 1.

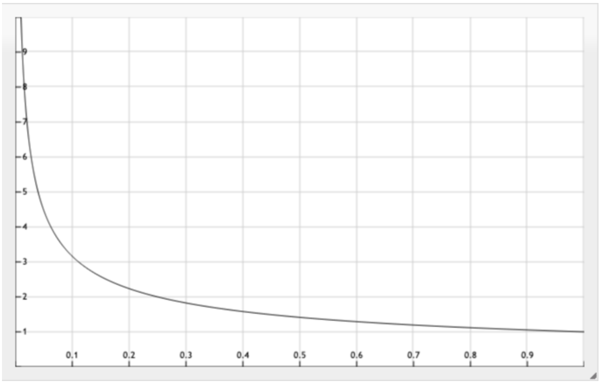

Figura 1: Gráfico de $f(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$ no intervalo [0, 1].

Veja que, à medida que x vai se aproximando de 0 (zero), o valor de $f(x)$ vai ficando extremamente grande. Assim, qualquer tentativa de resolver o problema mostrado na equação (2) usando fórmulas de **Newton-Cotes** da abordagem **Fechada** vai falhar. Isso acontece por conta da divisão por zero que ocorre quando $f(x)$ for calculada no ponto de interpolação inicial (ponto de singularidade), isto é,

$f(x_i) = f(0) = \frac{1}{\sqrt{0}} = \frac{1}{0} = \text{NAN}.$

Se fórmulas de **Newton-Cotes Abertas** forem usadas para resolver esse problema, o ponto de singularidade não é usado e, portanto, uma solução é obtida. Por exemplo, usando a regra do trapézio aberta sem subdivisões (N=1) o resultado é $I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx \approx 1.478398$ e, usando N=100.000 (cem mil partições) o resultado é $I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx \approx 1.998310$.

Como pode ser observado, realmente o processo não falha, mas a convergência para um valor aceitável exige um número absurdo de partições.

Note que, até mesmo uma **fórmula aberta** com polinômio de substituição de **grau 6** com N = 100.000 daria um resultado $I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx \approx 1.999262$, que é apenas um **pouco melhor**, mas exige um **esforço computacional enorme**.

Usar Quadraturas de Gauss-Legendre também não causará problemas já que as raízes dos polinômios de Legendre estão no interior do intervalo de integração e, portanto, a função não será calculada no ponto de singularidade. Os resultados melhoram, mas, ainda assim, não são uma maravilha. Por exemplo, Gauss-Legendre com 2 (dois) pontos e N=1000 daria um resultado igual a $I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx \approx 1.98894$.

Essa baixa acurácia é causada pelo crescimento ilimitado (singularidade) próximo ao ponto $x = 0$ (que é o limite inferior de integração). Assim, estratégias diferentes para melhorar a acurácia da solução são apresentadas a seguir.

3. Estratégias exponenciais simples e dupla.

3.1 Discussão preliminar de como resolver o problema da acurácia

As estratégias apresentadas nesta seção são inspiradas no dinossauro Dino (Figura 2).

Figura 2: Dinossauro Dino.

Sim, será feita uma mudança de variável na integral mostrada na equação (1) de modo que o gráfico do novo integrando fique parecido com o dinossauro Dino adormecido (Figura 3).

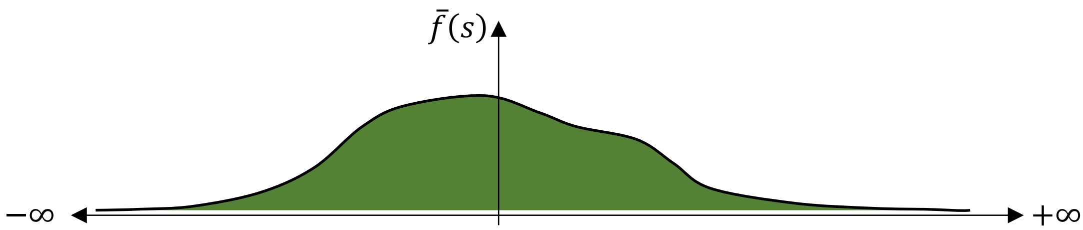

Figura 3: Dinossauro Dino adormecido (**faça um esforço de imaginação!**!).

A mudança de variável é a seguinte:

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

Lembre-se de que, na Quadratura de Gauss-Legendre, uma mudança de variável parecida foi realizada para que o intervalo [a, b] na variável x fosse mapeado pelo intervalo [-1, 1] na variável s. Aqui a relação entre x e s vai ser feita de tal forma que $s = -\infty$ é mapeada em $x = a$, e $s = +\infty$ é mapeada em $x = b$, isto é, $a = x(-\infty)$ e $b = x(+\infty)$.

A equação de $x(s)$ definirá as duas estratégias seguintes:

1) exponencial simples e

2) exponencial dupla.

3.2 Mudança de variável

Para a mudança de variável, precisam-se definir $x(s)$ e $\frac{dx(s)}{ds}$ (veja a equação (3)). Assim,

- **Para a exponencial simples**

(4) $x(s) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\tanh(s)$ e

(5) $\frac{dx(s)}{ds} = \frac{b-a}{2}(\text{sech}(s))^2 = \frac{b-a}{2}\frac{1}{(\cosh(s))^2}$.

- **Para a exponencial dupla**

(6) $x(s) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)$ e

(7) $\frac{dx(s)}{ds} = \frac{b-a}{2}\left[\frac{\pi}{2}\cosh(s)\left(\text{sech}\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2\right] = \frac{b-a}{2}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]$

Em termos de programação das duas técnicas os ingredientes já estão todos no lugar, ou seja, o problema original na equação (1) foi trocado pelo problema da equação (3) repetido na equação (8) abaixo

(8) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(s)ds$

onde

(9) $\bar{f}(s) = f(x(s))\frac{dx(s)}{ds}\begin{cases} = & (eq.(4)) \times (eq.(5)) \quad \text{para exponencial simples, ou} \\ = & (eq.(6)) \times (eq.(7)) \quad \text{para exponencial dupla.} \end{cases}$

Uma possibilidade de resolver o problema (8), sabendo que o integrando é uma função composta de s, é tentar colocá-lo na forma da integração de Gauss-Hermite, isto é,

(10) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2}\left(e^{s^2}\bar{f}(s)\right)ds = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2}\left(\bar{\bar{f}}(s)\right)ds,$

onde

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

Observação: Para que a integral (8) tenha um valor finito, o integrando tem que ter a forma da Figura 3 (Dino adormecido). **Ainda não foi mostrado que a mudança de variável proposta realmente faz com que a função tenha essa forma**.

Antes de fazer isso de maneira formal, o exemplo (2) será trabalhado com as duas estratégias: exponencial simples e exponencial dupla.

3.3 Mudança de variável aplicada ao exemplo (2)

3.3.1 Exponencial simples

(12) $I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(s)ds = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{x(s)}}\frac{dx(s)}{ds}ds = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{x(s)}}\frac{1-0}{2}\frac{1}{(\cosh(s))^2}ds$

A forma final do problema fica

(13) $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\tanh(s)\right)}}\frac{1-0}{2}\frac{1}{(\cosh(s))^2}ds = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}(1+\tanh(s))}}\frac{1}{(\cosh(s))^2}ds$

O gráfico do integrando na equação (13) é mostrado na Figura 4 a seguir.

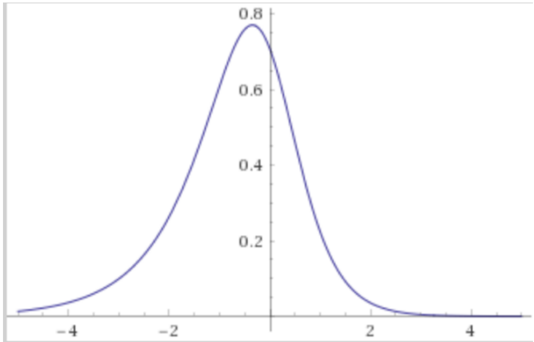

Figura 4: Gráfico de $\bar{f}(s)$ para o exemplo (2) com exponencial simples.

Veja que, de fato, $\bar{f}(s)$ do exemplo (Figura 4), usando a substituição de x com as fórmulas da exponencial simples mostradas nas equações (4) e (5), tem a forma do Dino adormecido mostrada na Figura 3, ou seja, o gráfico tende a zero quando s é bem pequeno ou bem grande. Neste exemplo, com $s = \pm 5$, $\bar{f}(s)$ já está visivelmente bem próxima de zero.

3.3.2 Exponencial dupla

(14) $I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(s) ds = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{x(s)}} \frac{dx(s)}{ds} ds = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{x(s)}} \frac{1-0}{2} \left[\frac{\pi}{2} \frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2} \right] ds$

A forma final do problema fica

(15)
$$
\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{0+1}{2} + \frac{1-0}{2}\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}} \frac{1-0}{2} \left[\frac{\pi}{2} \frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2} \right] ds \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)}} \frac{1}{2} \left[\frac{\pi}{2} \frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2} \right] ds
\end{aligned}
$$

O gráfico do integrando na equação (15) é mostrado na Figura 5 a seguir.

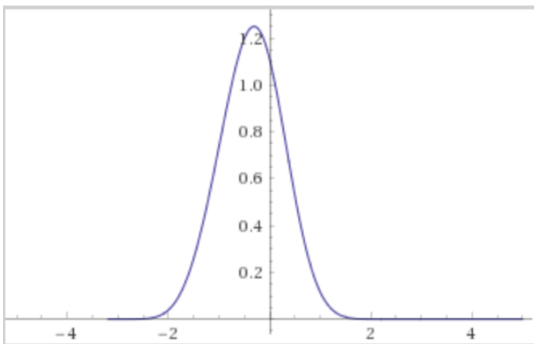

Figura 5: Gráfico de $\bar{f}(s)$ para o exemplo (2) com exponencial dupla.

Veja que, de fato, $\bar{f}(s)$ do exemplo (Figura 5), usando a substituição de x com as fórmulas da exponencial dupla mostradas nas equações (6) e (7), tem a forma do Dino adormecido mostrada na Figura 3, ou seja, o gráfico tende a zero quando s é bem pequeno ou bem grande. Neste exemplo, com $s = \pm 2.5$, $\bar{f}(s)$ já está visivelmente bem próxima de zero.

Agora, será analisado formalmente por que essas mudanças de variável fazem o integrando ter a forma do Dino adormecido mostrada na Figura 3.

3.4 Análise dos efeitos das mudanças de variável

Primeiramente, serão analisados os efeitos dos mapeamentos entre x e s sobre os limites de integração.

3.4.1 Mudanças dos limites de integração

A seguir, são analisados os gráficos das funções $x(s)$ nos dois casos, exponencial simples e exponencial dupla. Porém, antes de qualquer coisa, observe as

funções hiperbólicas que aparecem em $x(s)$:

(16) $\sinh(s) = \frac{1}{2}(e^s - e^{-s});$

(17) $\cosh(s) = \frac{1}{2}(e^s + e^{-s});$

(18) $\left(\sinh(s)\right)^2 - \left(\cosh(s)\right)^2 = \frac{1}{4}(e^s - e^{-s})^2 - \frac{1}{4}(e^s + e^{-s})^2 = 1$

(19) $\tanh(s) = \frac{\sinh(s)}{\cosh(s)} = \frac{\frac{1}{2}(e^s - e^{-s})}{\frac{1}{2}(e^s + e^{-s})} = \frac{e^s - e^{-s}}{e^s + e^{-s}};$

(20) $\mathrm{sech}(s) = \frac{1}{\cosh(s)} = \frac{2}{(e^s + e^{-s})};$

(21) $\mathrm{cosech}(s) = \frac{1}{\sinh(s)} = \frac{2}{(e^s - e^{-s})}$

(22) $\frac{d}{ds}\left(\sinh(s)\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{d}{ds}e^s - \frac{d}{ds}e^{-s}\right) = \frac{1}{2}(e^s + e^{-s}) \overset{eq.(17)}{\widehat{=}} \cosh(s)$

(23) $\frac{d}{ds}\left(\cosh(s)\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{d}{ds}e^s + \frac{d}{ds}e^{-s}\right) = \frac{1}{2}(e^s - e^{-s}) \overset{eq.(16)}{\widehat{=}} \sinh(s)$

(24) $\frac{d}{ds}\left(\tanh(s)\right) = \frac{d}{ds}\left(\frac{\sinh(s)}{\cosh(s)}\right) = \frac{\cosh(s)\cosh(s) - \sinh(s)\sinh(s)}{\left(\cosh(s)\right)^2} \overset{eq.(18)}{\widehat{=}} \frac{1}{\left(\cosh(s)\right)^2} \overset{eq.(20)}{\widehat{=}} \left(\mathrm{sech}(s)\right)^2$

3.4.1.1 Gáfico de $x(s)$ na exponencial simples

(25) $x(s) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\tanh(s) = \frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2}\frac{e^s - e^{-s}}{e^s + e^{-s}} \overset{Fig.6}{\Longrightarrow} \begin{cases} s \to -\infty & \Rightarrow \quad x(s) \to \frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2} = a \\ s = 0 & \Rightarrow \quad x(s) = \frac{a+b}{2} \\ s \to +\infty & \Rightarrow \quad x(s) \to \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} = b \end{cases}$

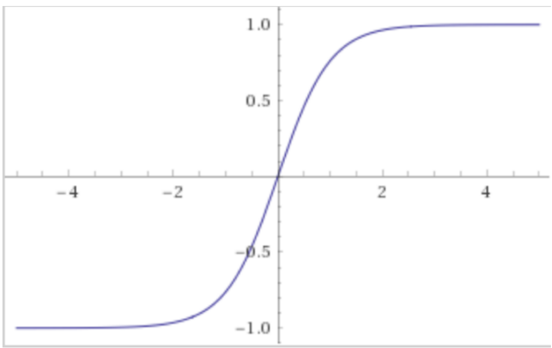

Figura 6: Gráfico de $\tanh(s) = \frac{e^s - e^{-s}}{e^s + e^{-s}}$

Assim, pela equação (25), notam-se as correspondências dos limites de integração na variável x, ou seja, a e b com os limites na variável s, $-\infty$ e $+\infty$ respectivamente.

Outra observação importante é que, na mudança de variável, **a função $f(x)$ não sofre escala vertical**, mas, simplesmente, **sofre uma escala horizontal** de forma que o intervalo $[a, b]$ é esticado para $[-\infty, +\infty]$. Assim, no exemplo (2), a parte $f(x(s))$ do novo integrando tem o mesmo gráfico mostrado na Figura 1, sendo que o ponto de singularidade está em $-\infty$.

Então, se o gráfico de $f(x(s))$ tem a mesma forma do gráfico de $f(x)$, como é que o novo integrando tem a forma do Dino adormecido da Figura 3?

A resposta a essa pergunta, vem da análise da segunda parte do novo integrando, ou seja, $\frac{dx(s)}{ds}$.

No caso da exponencial simples, pela equação (5), escreve-se

$$\frac{dx(s)}{ds} = \frac{b-a}{2}\frac{1}{(\cosh(s))^2} = \frac{b-a}{2}\frac{1}{\left(\frac{1}{2}(e^s+e^{-s})\right)^2} = \frac{b-a}{2}\frac{4}{e^{2s}+2+e^{-2s}}$$

(26)
$$\overset{Fig.7}{\Longrightarrow} \begin{cases} s \to -\infty & \Rightarrow \quad \frac{dx(s)}{ds} \to \frac{b-a}{2}\lim\limits_{s\to-\infty}\frac{4}{e^{2s}+2+e^{-2s}} = 0 \\ s \to +\infty & \Rightarrow \quad \frac{dx(s)}{ds} \to \frac{b-a}{2}\lim\limits_{s\to+\infty}\frac{4}{e^{2s}+2+e^{-2s}} = 0 \end{cases}$$

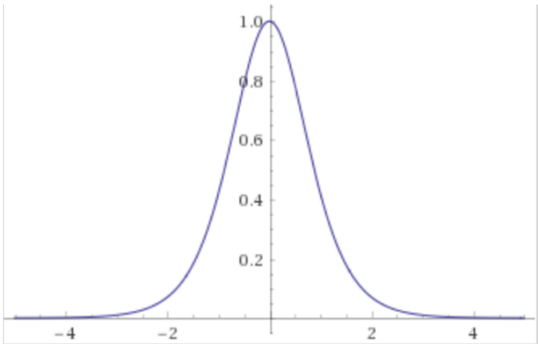

Figura 7: Gráfico de $\frac{1}{(\cosh(s))^2} = \frac{4}{e^{2s}+2+e^{-2s}}$

A equação (26) e o gráfico mostrado na Figura 7 indicam que o gráfico da função $f(x(s))$ será multiplicado, ponto a ponto, por $\frac{b-a}{2}$ vezes o gráfico da Figura 7, definindo a forma final do integrando como a forma do Dino adormecido mostrada na Figura 3.

3.4.1.2 Gáfico de $x(s)$ na exponencial dupla

(27) $x(s) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right) \overset{Fig.8}{\Longrightarrow} \begin{cases} s \to -\infty & \Rightarrow \quad x(s) \to \frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2} = a \\ s = 0 & \Rightarrow \quad x(s) = \frac{a+b}{2} \\ s \to +\infty & \Rightarrow \quad x(s) \to \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} = b \end{cases}$

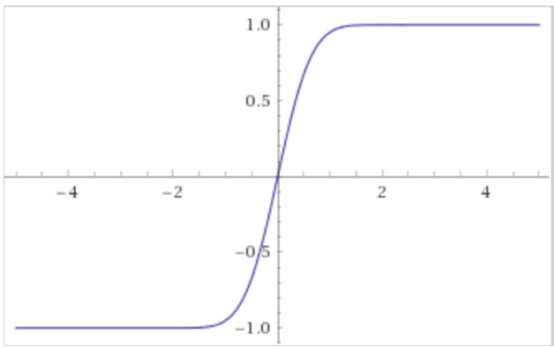

Figura 8: Gráfico de $\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)$

Assim, pela equação (27), notam-se as correspondências dos limites de integração na variável x, ou seja, a e b com os limites na variável s, $-\infty$ e $+\infty$ respectivamente.

É importante enfatizar novamente que, na mudança de variável, **a função $f(x)$ não sofre escala vertical**, mas, simplesmente, **sofre uma escala horizontal** de forma que o intervalo $[a, b]$ é esticado para $[-\infty, +\infty]$. Assim, no exemplo (2), a parte $f(x(s))$ do novo integrando tem o mesmo gráfico mostrado na Figura 1, sendo que o ponto de singularidade está em $-\infty$.

Então, se o gráfico de $f(x(s))$ tem a mesma forma do gráfico de $f(x)$, para que o novo integrando tenha a forma do Dino adormecido da Figura 3, é preciso que a parte $\frac{dx(s)}{ds}$ force $f(x(s))$ para zero à medida que s vai diminuindo para $-\infty$ e aumentando para $+\infty$.

No caso da exponencial dupla, pela equação (7), escreve-se

(28)
$$\frac{dx(s)}{ds} = \frac{b-a}{2}\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]$$
$$\xRightarrow{Fig.9} \begin{cases} s \to -\infty & \Rightarrow \dfrac{dx(s)}{ds} \to \dfrac{b-a}{2}\lim\limits_{s\to-\infty}\left[\dfrac{\pi}{2}\dfrac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] = 0 \\ s \to +\infty & \Rightarrow \dfrac{dx(s)}{ds} \to \dfrac{b-a}{2}\lim\limits_{s\to+\infty}\left[\dfrac{\pi}{2}\dfrac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right] = 0 \end{cases}$$

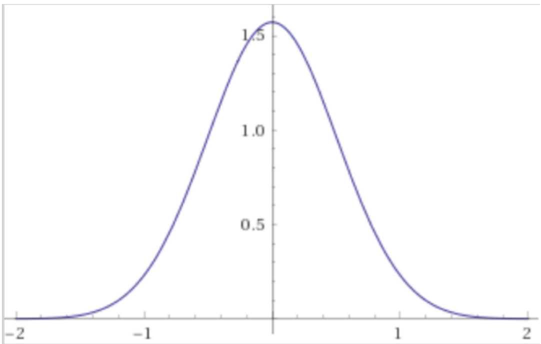

Figura 9: Gráfico de $\left[\frac{\pi}{2}\frac{\cosh(s)}{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right)\right)^2}\right]$

A equação (28) e o gráfico mostrado na Figura 9 indicam que o gráfico da função $f(x(s))$ será multiplicado, ponto a ponto, por $\frac{b-a}{2}$ vezes o gráfico da Figura 9, definindo a forma final do integrando como a forma do Dino adormecido mostrada na Figura 3.

4. Solução do problema depois da mudança de variável.

Com a mudança de variável, o integrando ficou com a forma do Dino adormecido mostrada na Figura 3. 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.

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

onde

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

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

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

Na próxima aula, as soluções propostas nesta seção serão detalhadas.