Curso: Métodos Numéricos II
Professor: Creto Augusto Vidal
Semestre: 2020.1
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) $x(s) = \begin{cases} \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\tanh(s) & -\ exponencial\ simples \\ \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(s)\right) & -exponencial\ dupla \end{cases}$

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

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 $\bar{f}(s)$.

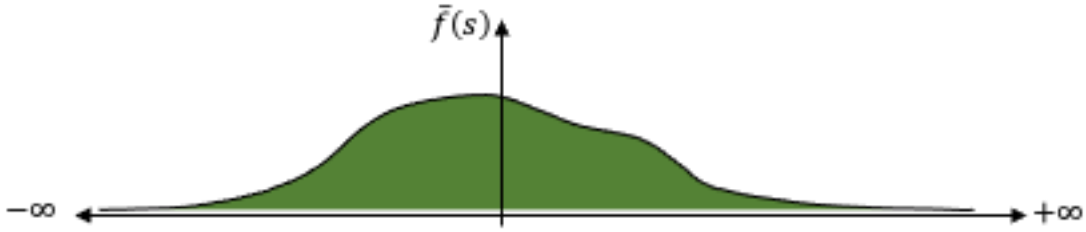

Figura 1: Forma do integrando após a mudança de variável exponencial (simples ou dupla).

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

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

para obter a forma modificada

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

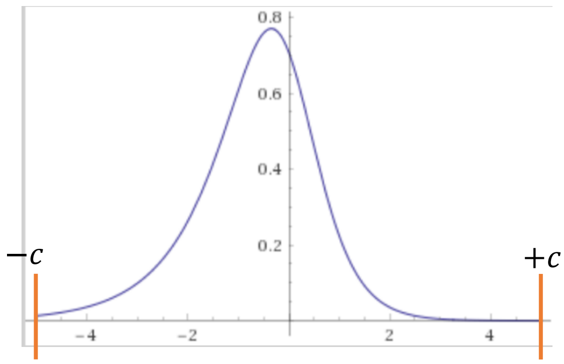

Figura 2: Gráfico de $\bar{f}(s)$ para o exemplo (2) com exponencial simples.

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.

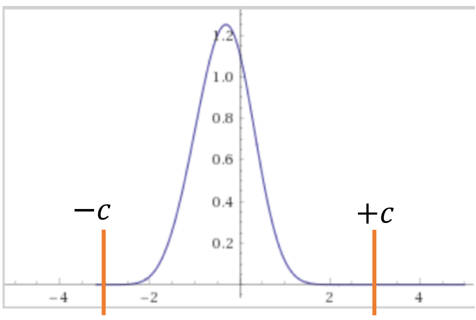

Figura 3: Gráfico de $\bar{f}(s)$ para o exemplo (2) com exponencial dupla.

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

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

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 $c = 3, 4, \dots$ 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,

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

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

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