



## PRÁCTICA 6. INTEGRACIÓN DE FUNCIONES CON SINGULARIDADES

21 de noviembre de 2021

El objetivo general de esta práctica es el de realizar experiencias con integrales de funciones con singularidades y de integrales impropias. La multitud de casos, situaciones y métodos, nos obliga a restringirnos a casos concretos, sin ningún ánimo de abordar todas las situaciones o ideas posibles.

**Antes de comenzar con los ejercicios 2 y 3 lee los comentarios sobre Octave al final del texto.**

1. Los teoremas sobre el error en los métodos de cuadratura estudiados (trapecio, Simpson o Gauss) requieren un cierto grado de diferenciabilidad del integrando. Cuando perdemos esta hipótesis los métodos puede seguir funcionando, aunque el orden del error puede ser menor que en los casos contemplados por los resultados.

En este ejercicio vamos a intentar estimar el orden del error en estos casos, a través de un ejemplo muy sencillo: aproximar numéricamente la integral

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

El integrando presenta una singularidad en el extremo  $x = 0$ , pues no es ni siquiera derivable en dicho punto. Recordemos los teoremas estudiados que nos dan el orden del error en la forma  $O(h^p)$ , siendo  $h = \frac{b-a}{n}$ , la longitud uniforme de los subintervalos en los que dividimos el intervalo de integración:

- para la regla del trapecio,  $p = 2$ , siempre que  $f$  sea de clase  $\mathcal{C}^2$ ;
- para la regla de Simpson,  $p = 4$ , siempre que  $f$  sea de clase  $\mathcal{C}^4$ ;
- para la cuadratura de Gauss con 5 puntos,  $p = 9$ , siempre que  $f$  sea de clase  $\mathcal{C}^{10}$  (véase el ejercicio 3.16: hay una errata en el enunciado, el orden de la regla compuesta es  $O(h^9)$ , y no  $O(h^{10})$ ).

Las tareas concretas para el ejercicio entonces son:

- a) Aproximar  $\int_0^1 \sqrt{x} dx$  mediante los tres métodos anteriores, dividiendo el intervalo  $[0, 1]$  en  $2^k$  intervalos, para  $k = 1, 2, \dots, 11$ . Debemos obtener en la salida una lista ordenada (en forma de tabla) de los valores de la integral, así como el error real, y el valor del cociente de los errores sucesivos (en forma análoga a como hicimos en el ejemplo 3.10).

Recordemos que si  $E(h)$  denota el error de una regla de cuadratura, el cociente  $E(h)/E(h/2)$  debe estar próximo a  $2^p$  siendo  $p$  el orden del método. De esta forma intentamos hacernos una idea de cuál es el orden de estos métodos cuando aproximamos la integral de  $f(x) = \sqrt{x}$ .

- b) Repetir el apartado anterior para  $\int_0^1 x^{2/3} dx$ . Antes de llevar a cabo esta tarea, ¿podrías predecir si, en este caso, el orden del error será mayor o menor que en el caso anterior?

## 2. Aproximación de una integral impropia

La integral

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}$$

(conocida como integral de Dirichlet) es convergente (aunque no absolutamente convergente), y su convergencia se puede comparar con la de la serie armónica  $\sum \frac{(-1)^{n+1}}{n}$  que es muy, muy lenta. Vamos a presentar y experimentar en este ejercicio con un método de aproximación eficaz.

a) Utiliza el método de integración por partes dos veces para tener las identidades

$$\int_{\pi}^{+\infty} \frac{\sin x}{x} dx = -\frac{1}{\pi} - \int_{\pi}^{+\infty} \frac{\cos x}{x^2} dx = -\frac{1}{\pi} - 2 \int_{\pi}^{+\infty} \frac{\sin x}{x^3} dx$$

b) Haz el cambio de variable  $y = \frac{1}{x}$  en la última de las integrales anteriores para calcularla  $[0, \frac{1}{\pi}]$ .

c) Utilizando la descomposición

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \int_0^{\pi} \frac{\sin x}{x} dx + \int_{\pi}^{+\infty} \frac{\sin x}{x} dx,$$

y las ideas de los apartados anteriores, utiliza las reglas compuestas de Simpson y de Gauss, con 5 y 10 puntos, para aproximar la integral de Dirichlet. Utiliza estos métodos con un número fijo de subintervalos para la integral en  $[0, \pi]$  (relativamente pequeño, p.ej. 4, 5 o 6...) y varios valores mayores para la integral en  $[0, 1/\pi]$ , p.eje. 20, 30, 50... subintervalos.

### 3. Programación del método expuesto en el ejercicio 3.29

El método de aproximación de integrales con singularidades en los extremos del intervalo presentado en el ejercicio 3.29 se denomina a veces el método IMT, pues se debe a los autores Iri, Moriguti y Takasawa, en un artículo publicado en 1970. Recordemos las conclusiones del ejercicio 3.29 (que aquí modifiqué ligeramente): para aproximar la integral  $\int_a^b f(x) dx$ , con la suposición de que  $f(x)$  presenta algún tipo de singularidad en  $a$  y/o en  $b$ , realizamos el cambio de variable  $x = \phi(t)$ , donde

$$\phi(t) = a + \frac{b-a}{\Psi(1)} \Psi(t),$$

donde

$$\Psi(t) = \int_{-1}^t \psi(u) du \quad \text{y} \quad \psi(z) = \exp\left(-\frac{c}{1-z^2}\right).$$

La conclusión del ejercicio es que aproximaremos la integral aplicando la regla del trapecio compuesta a la integral obtenida tras el cambio de variable. Tomando  $n$  subintervalos en el intervalo  $[-1, 1]$ , definimos  $t_j = -1 + j \frac{2}{n}$  para  $j = 0, 1, \dots, n$ . Entonces obtenemos la fórmula de aproximación:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 f(\phi(t)) \phi'(t) dt \approx \frac{2(b-a)}{n\Psi(1)} \sum_{k=1}^{n-1} c_k f(x_k) \quad (1)$$

donde:

$$x_k = \phi(t_k) = a + (b-a) \frac{\Psi(t_k)}{\Psi(1)} \quad \text{y} \quad c_k = \psi(t_k) = \exp\left(-\frac{c}{1-t_k^2}\right)$$

Lo esencial de este método es que los valores de  $\Psi(t_k)/\Psi(1)$  y los coeficientes  $c_k$  se pueden tabular de una vez por todas, pues no dependen de  $f$ . De hecho para aplicar el método basta tabular a priori las cantidades  $\Psi(t_k)/\Psi(1)$  (aparte de conocer  $\Psi(1)$ ).

a) Programa una función `imtTabla(c,n)` que reciba los parámetros  $c$  (el coeficiente de la definición de  $\psi(t)$ , siempre  $c > 0$ ) y  $n$ ; la función debe devolver: el valor de  $\Psi(1)$ , y los vectores de componentes  $t_k$  y  $\Psi(t_k)/\Psi(1)$ , para  $k = 1, \dots, n-1$ . Observa que los valores  $t_0$  y  $t_{n+1}$ , así como  $\Psi(t_0)/\Psi(1)$  y  $\Psi(t_{n+1})/\Psi(1)$  son innecesarios (de hecho estos dos últimos valen 0 y 1, respectivamente).

Para calcular los valores de  $\Psi(1)$  y  $\Psi(t_k)$  utilizaremos el método compuesto de Gauss-Legendre de 10 puntos, descomponiendo cada intervalo  $[t_k, t_{k+1}]$  en 5 subintervalos (y recurriendo a la aditividad de la integral para ir sumando valores calculados progresivamente en los subintervalos).

Guarda la función en `/Biblioteca`.

- b) Programa una función `imt(f,a,b,c,n)` que recibe los argumentos `f` (la función a integrar), `a` y `b` (los extremos del intervalo de integración), `c` y `n` los mismos argumentos descritos en el apartado anterior, y que devuelva la aproximación de la integral dada por la ecuación (1). Naturalmente debes recurrir a la función `imtTabla` del apartado anterior.

Guarda la función en `/Biblioteca`.

- c) Utiliza las funciones programadas para aproximar las siguientes integrales:

$$\int_0^1 \frac{\log x}{1-x^2} dx = -\frac{\pi^2}{8}, \quad \int_0^1 x \log(1-x) dx = -\frac{3}{4}, \quad \int_0^1 \left(\log \frac{1}{x}\right)^{-1/2} dx = \sqrt{\pi}.$$

Toma el valor  $c = 4$  (más tarde, si quieres, puedes experimentar con otros valores).

## Comentarios sobre Octave para esta práctica

Una dificultad que surge en esta práctica es la de la definición de funciones en Octave, puesto que tendremos que definir funciones que en algunos puntos concretos no están definidas. Por ejemplo, la función  $\frac{\sin x}{x}$  habrá que definirla explícitamente como 1 en  $x = 0$  y habrá que evitar, en el ejercicio 3, la división por cero o el cálculo del logaritmos de cero o de números negativos.

### Para el ejercicio 2

Debemos extender la definición de la función  $\frac{\sin x}{x}$  a  $x = 0$ , que debe tomar el valor 1 para que sea continua la extensión.

Hacer esto en Octave no es inmediato, al menos yo no he sabido hacerlo de forma sencilla. Por tanto, mi forma de enfrentar esto es la siguiente: primero defino una función `F(x)` de forma que pueda ser evaluada vectorialmente, pero lo hago mediante un bucle, componente a componente:

```
function y=F(x)
for j=1:length(x)
if (x(j)==0)
y(j)=1;
else
y(j)=sin(x(j))/x(j);
endif
endfor
endfunction
```

Después, a continuación del código anterior, defino una función anónima, `f=@(x) F(x);`, y esta función `f` es la que utilizo en llamadas a las funciones `simpson.m` o `gaussLegendre.m` para aproximación de las integrales.

### Para el ejercicio 3

Aquí el problema se complica un poco, porque debemos evitar el cálculo de algunas funciones no definidas en  $x = 0$  o  $x = 1$  y, aún peor, puede que estas evaluaciones, que producen como resultado un valor de `Inf` o de `NaN`, se hagan sin que lo sepamos a priori. En realidad esto no sería necesario, pero en mis experiencias he observado que algunos valores intermedios calculados (por ejemplo,  $\Psi(t_n)$ , si  $n$  es grande) son tan pequeños que se tratan como ceros. Por cuestiones de redondeo es posible también que internamente se alcance el cálculo del logaritmo en un número negativo, a lo que Octave responde devolviendo un valor complejo.

Entonces, tomaremos las siguientes precauciones:

- Cuando definamos las funciones que incluyen el logaritmo, usaremos siempre `log(abs(x))` (por el intervalo donde integramos,  $x$  debe ser siempre positivo).
- Definiremos las funciones como en la observación anterior: con bucles, y asignando el valor cero en los puntos en los que las funciones no estén definidas. Utilizaremos la misma idea anterior: definirlas con un `function...endfunction` y después llamarlas con una función anónima.

- Podremos utilizar las funciones de Octave: `isinf(a)`, `isnan(a)`, que dan valor `true` si `a` es `Inf` o `Nan`. En ese caso asignamos el valor cero al valor que queramos calcular. Mi experiencia ha sido: utilizar `isnan` en la definición de las funciones a integrar en el apartado *c*) y también en el cálculo de  $f(x_j)$  (dentro de `imt.m`).