Fórmules de Newton-Cotes compostes

A la vista de les fórmules que tenim i on observem que si $[a,b]$ és gran l'error també ho és, volem obtenir ara fórmules millorades. Ho farem simplement subdividint $[a,b]$ en intervals més petits i aplicar una regla d'integració a cada subinterval i sumar-les. Així obtenim les anomenades fórmules de Newton-Cotes compostes.

Veiem 2 exemples

Fórmula de trapezis composta

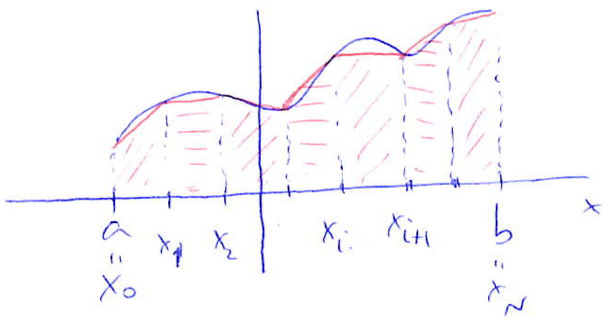
Subdividim $[a,b]$ en N trossos, de manera que ara

$x_i = a+ih$, $i=0,\dots,N$, $h=\frac{b-a}{N}$.

A $[x_i, x_{i+1}]$ tenim ... $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \approx I_i = \frac{h}{2}\left[f(x_i)+f(x_{i+1})\right]$

llavors

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{N-1} I_i = \frac{h}{2}\left[f(a)+2f(a+h)+2f(a+2h)+\dots+2f(b-h)+f(b)\right] =: T_N(f)$$



Error?

En un subinterval tenim

$$I_i - \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = \frac{h^3}{12} f''(c_i), \quad c_i \in (x_i, x_{i+1})$$

Suposant $f \in \mathcal{C}^2[a,b]$ i sumant els errors obtenim l'error global

$$T_N(f) - \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{N-1}\left(I_i - \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx\right) = \frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{N-1} f''(c_i) =$$

$$= \frac{h^2}{12}\,\frac{b-a}{N}\sum_{i=0}^{N-1} f''(c_i)$$

Com que

$$\min_{c_i\in[a,b]} f''(c_i) \le \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} f''(c_i) \le \max_{c_i\in[a,b]} f''(c_i)$$

i f'' s'contínua en $[a,b]$, existeix $c \in [\min c_i, \max c_i] \subset (a,b)$ tq

$$f''(c) = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} f''(c_i)$$

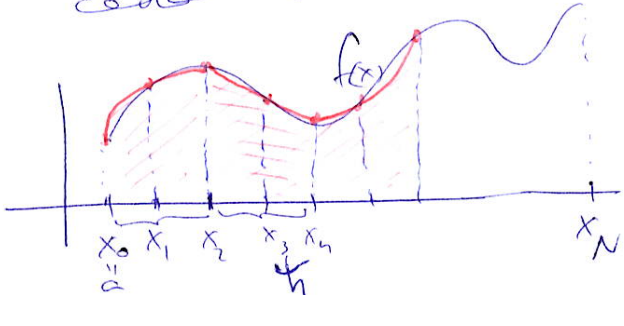
i per tant

$$\boxed{T_N(f) - \int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{12}h^2 f''(c), \qquad c\in(a,b)}$$

Així doncs tenim una fórmula amb error $O(h^2)$, de manera que disminuint la h (fent créixer la N) podem aconseguir en principi errors tan petits com vulguem.

<u>Fórmula composta de Simpson</u>

Suposem ara $\underline{N \text{ parell}}$ i apliquem la fórmula de Simpson a cada "subinterval" $[x_{2i}, x_{2i+1}, x_{2i+2}]$, $i=0,1,\dots,\frac{N}{2}-1$



$h = \frac{b-a}{N}$ i suposem $f \in \mathcal{C}^4([a,b])$

Ara

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)\,dx \approx I_i = \frac{h}{3}\left[f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})\right]$$

$$I_i - \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)\,dx = \frac{h^5}{90} f^{(4)}(c_i) \qquad c_i \in (x_{2i}, x_{2i+2})$$

Llavors prenem

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} I_i = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + \dots + 2f(b-2h) + 4f(b-h) + f(b)\right] := S_N(f)}$$

Error?

$$S_N(f) - \int_a^b f(x)\,dx = \frac{h^5}{90} \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} f^{(4)}(c_i) \underset{h=\frac{b-a}{N}}{=} \frac{h^4}{90}\,\frac{b-a}{2}\,\frac{2}{N} \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} f^{(4)}(c_i) =$$

$$= \frac{h^4}{180}(b-a)\, f^{(4)}(c) \qquad c \in (a,b)$$

Observem que ara tenim un error d'ordre h^4. Així podem tenir una bona aproximació de la integral amb h prou petit (N prou gran).

Exemple

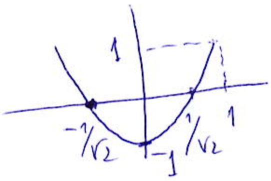
Calculem $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ amb un error menor que 10^{-4}

– Amb Trapezis composta: volem determinar el h (o $N=\frac{1-0}{h}$) adequat:

De l'error $\frac{(1-0)\cdot h^2}{12} f''(c)$, trobem una fita de $f''(x)$ a $[0,1]$

$$f(x)=e^{-x^2}, \quad f'(x)=-2x\,e^{-x^2}, \quad f''(x)=(4x^2-2)e^{-x^2}$$

$$|f''(x)| \underset{\substack{\uparrow \\ e^{-x^2}\le 1 \text{ a } [0,1]}}{\le} |4x^2-2| = 2\,|2x^2-1| \le 2 \quad \forall x\in[0,1]$$



Per tant $\left|\frac{h^2 f''(c)}{12}\right| = \frac{h^2|f''(c)|}{12} \le \frac{h^2}{12}\cdot 2 = \frac{h^2}{6}$

Imposem $\frac{(1-0)^2}{N^2 6} < 10^{-4} \Longrightarrow N > 40{,}8$. Prenem $N=41$.

Obtenim

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \approx 0{,}7467996\ldots$$

(el valor exacte és $0{,}74682413\ldots$ de manera que l'error és $2{,}4\times10^{-5} < 10^{-4}$ OK!)

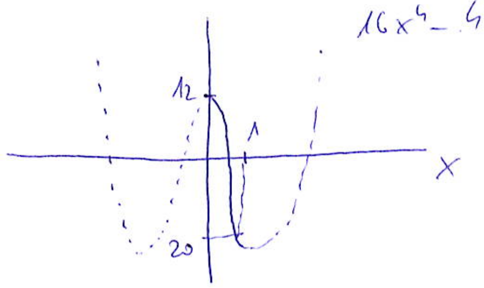
– Amb Simpson composta, l'error ara és $\frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(c)$.

Fitem primer $f^{(4)}(x)$ a $[0,1]$:

$$f'''(x) = (-8x^3+12x)e^{-x^2}, \quad f^{(4)}(x) = (16x^4-48x^2+12)e^{-x^2}$$

$$|f^{(4)}(x)| \underset{\substack{\uparrow \\ e^{-x^2}\le 1 \text{ a } [0,1]}}{\le} |16x^4-48x^2+12| \le 20 \text{ a } [0,1]$$

$16x^4 - 48x^2 + 12$



Ara imposem

$$\left| \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(c) \right| = \frac{h^4}{180} |f^{(4)}(c)| \leq \frac{1}{N^4 180} 20 < 10^{-4} \Rightarrow$$

$\Rightarrow N > 5{,}7$. Prenem $N = 6$.

Calculant obtenim $\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0{,}74683039\ldots$ que té un error de 6×10^{-6} clarament menor del que havíem demostrat. Això passa perquè la fitació de $f^{(4)}(c)$ és massa pessimista.

Fórmula d'Euler-McLaurin

Definim els nombres de Bernoulli com els nombres B_n que compleixen

$$\frac{x}{e^x-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} x^n$$

o també com

$$B_0 = 1, \quad B_1 = -\frac{1}{2}, \quad B_j = -\sum_{l=0}^{j-1} \binom{j}{l} \frac{B_l}{j+1-l}, \quad j \geq 2$$

Els primers són

$B_0 = 1$, $B_1 = -\frac{1}{2}$, $B_2 = \frac{1}{6}$, $B_3 = 0$, $B_4 = -\frac{1}{30}$, $B_5 = 0$, $B_6 = \frac{1}{42}$, $B_7 = 0$,

$B_8 = -\frac{1}{30}$, $B_9 = 0$, $B_{10} = \frac{5}{66}$

Es pot provar que
- $B_{2r+1} = 0, \quad r \geq 1$
- $B_{2k} \cdot B_{2k+2} < 0 \quad \forall k.$

Teorema

Si $f \in \mathcal{C}^{2k+2}([a,b])$, $N \in \mathbb{N}$, $h = \frac{b-a}{N}$ llavors

$$T_N(f) - \int_a^b f(x)\,dx = \underbrace{\frac{B_2}{2!} h^2 [f'(b) - f'(a)] + \frac{B_4}{4!} h^4 [f'''(b) - f'''(a)] + \dots + \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)]}_{A_{2k}} +$$

$$+ \underbrace{\frac{B_{2k+2}}{(2k+2)!} h^{2k+2} (b-a) f^{(2k+2)}(c)}_{=: R_{2k}}, \quad c \in (a,b)$$

on $T_N(f) = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2f(a+h) + \dots + 2f(b-h) + f(b)\right]$

ès a dir
$$T_N(f) - \int_a^b f(x)\,dx = A_{2k} + R_{2k}$$

Prova (veure ref. Aubanell, Benseny, Delshams)

Comentari Aquesta fórmula ens permet afegir termes a la regla dels trapezis composta per tal d'obtenir mètodes més precisos.

Exemple
Prenem
$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq T_N(f) - \frac{h^2}{12}\left(f'(b) - f'(a)\right) = I_{gr}$$

llavors
$$I_{gr} - \int_a^b f(x)\,dx = \frac{B_4}{4!} h^4 (b-a) f^{(4)}(c) = R_2$$

d'ordre h^4 similar al mètode de Simpson.

Exemple concret d'aplicació: $\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$ amb un error $< 10^{-4}$

Havíem vist $|f^4(x)| \leq 20 \quad \forall x \in [0,1]$

$$|R_2| \leq \frac{1}{30} \cdot \frac{1}{24} \frac{(1-0)^4}{N^4} (1-0)\, 20 \underset{\substack{\uparrow \\ \text{imposem}}}{<} 10^{-4} \to N > 4{,}08$$

Prenem $N = 5$ (versus $N = 41$ que havíem vist abans)

llavors $h = 0{,}2$, $f'(0) = 0$, $f'(1) = -2e^{-1}$ i

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx \simeq I_{gr} = 0{,}7468287\dots \quad \text{amb un error} \sim 3\times10^{-6}$$

Integrals impròpies

Caldrà aplicar diferents tècniques segons com sigui la funció i/o l'interval. Veiem ara dos exemples.

(i) Eliminació de les singularitats.

1., Canvi de variable:

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} e^x dx = \left| \begin{array}{l} x = t^2 \\ \sqrt{x} = t \\ \frac{1}{2\sqrt{x}} dx = dt \end{array} \right| = 2\int_0^1 e^{t^2} dt$$

que ja es pot integrar sense problemes

2. Integració per parts:

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} e^x dx = \left| \begin{array}{ll} u = e^x & du = e^x dx \\ dv = \frac{1}{\sqrt{x}} dx & v = 2\sqrt{x} \end{array} \right| =$$

$$= 2e^x\sqrt{x}\Big|_0^1 - 2\int_0^1 \sqrt{x} e^x dx = 2e - \int_0^1 \sqrt{x} e^x dx$$

i procedim sense problemes.

(ii) Integral en un interval infinit

1. Volem calcular $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ però calcularem $\int_{R_1}^{R_2} f(x) dx$

i controlarem $\int_{-\infty}^{R_1} f(x)\,dx$ i $\int_{R_2}^{\infty} f(x)\,dx$

Exemple

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \int_{-\infty}^{-4} + \int_{-4}^{4} + \int_{4}^{\infty} = \int_{-4}^{4} + 2\int_{4}^{\infty} =$$

$$= I_{apr} + Error + 2\int_{4}^{\infty}$$

$$2\int_{4}^{\infty} e^{-x^2}dx = \left| \begin{array}{l} t = x^2 \\ x = \sqrt{t} \\ 2x\,dx = dt \end{array} \right| = \int_{16}^{\infty} e^{-t}\frac{1}{\sqrt{t}}\,dt \underset{\uparrow}{<} \frac{1}{\sqrt{16}}\int_{16}^{\infty} e^{-t}dt =$$

$\frac{1}{\sqrt{t}}$ és decreixent

$$= \frac{1}{4}\lim_{M\to\infty}\int_{16}^{M} e^{-t}dt = \frac{1}{4}\lim_{M\to\infty}(-e^{-t})\Big|_{16}^{M} =$$

$$= \frac{1}{4}\left[\lim_{M\to\infty}(-e^{-M}) + e^{-16}\right] = \frac{1}{4}e^{-16} < TOL \; (*)$$

Llavors $\left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx - I_{apr} \right| = \left| Error + 2\int_{4}^{\infty} e^{-x^2}dx \right| \leq$

$$\leq |Error| + TOL$$

NOTA: Podríem canviar el 4 de la descomposició al principi per a i trobar a adequada a (*) fixada la TOL.

$$\frac{1}{\sqrt{a}}e^{-a^2} = \frac{1}{\sqrt{a}\,e^{a^2}} < TOL$$

2. Desenvolupant en sèrie de potències negatives:

$$\int_0^\infty (1+x^2)^{-4/3}\,dx = \int_0^\infty x^{-8/3}\,(1+x^{-2})^{-4/3}\,dx =$$

$$(1+x^2)^{-4/3} = \left[x^{+2}(x^{-2}+1)\right]^{-4/3}$$

$$= \int_0^\infty x^{-8/3}\left(1-\frac{4}{3}x^{-2}+\frac{14}{9}x^{-4}+\dots\right)dx = \underbrace{\int_0^R S\,dx}_{\substack{\text{interval}\\ \text{finit}\\ \int \text{sèrie}}} + \underbrace{\int_R^\infty S\,dx}_{\substack{\text{cal una fita}\\ \text{amb } R \text{ adequat}}}$$

$$\int_R^\infty S\,dx = \int_R^\infty x^{-8/3}\left(1-\frac{4}{3}x^{-2}+\frac{14}{9}x^{-4}-\frac{140}{81}x^{-6}+\dots\right)dx =$$

$$= R^{-5/3}\underbrace{\left(\frac{3}{5}-\frac{4}{11}R^{-2}+\frac{14}{61}R^{-4}\dots\right)}$$

amb R adequada tindrem una sèrie alternada convergent. Tallem a un cert terme i prenem la suma finita com aproximació de la sèrie, i l'error serà menor que el 1er terme menyspreat.