▷ Lezione VI

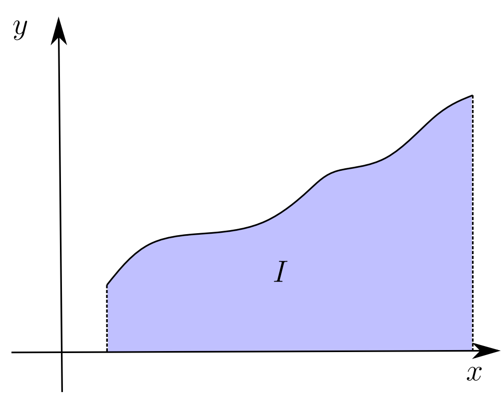
Quadratura

Libro Capitolo 4, sezione 4.3, 4.4

Integrazione (quadratura) numerica

Lo scopo dell'integrazione o quadratura numerica è quello di poter calcolare un'approssimazione dell'integrale di una funzione I_n tale che

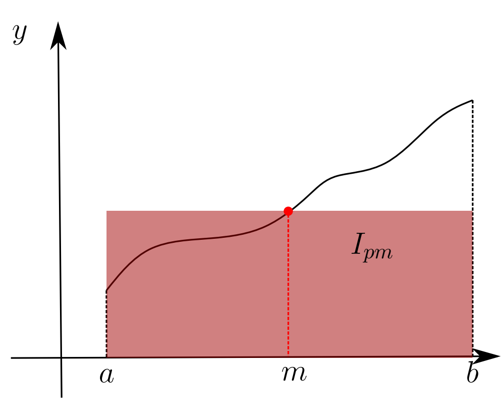
$$I_n \approx I = \int_a^b f(x)dx$$



Una prima possibilità è utilizzare la formula del punto medio, in cui l'integrale viene approssimato da

$$I \approx I_{pm} = (b-a)f(m)$$

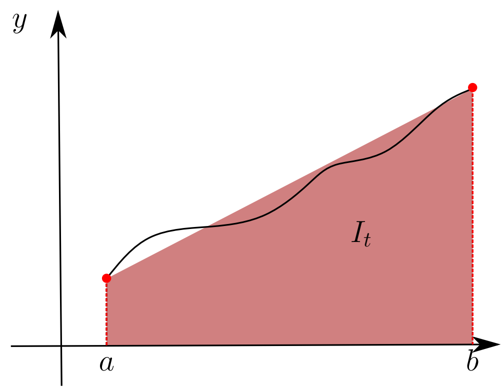
dove m denota il punto medio dell'intervallo di integrazione $[a, b]$, dato da $m = 0.5(a+b)$. Graficamente abbiamo



Un approccio alternativo è dato dalla formula del trapezio, in questo caso I è approssimato utilizzando la seguente espressione

$$I \approx I_t = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right],$$

che, come mostrato in figura, corrisponde all'area di un trapezio di basi $f(a)$, $f(b)$



Un'ulteriore opzione che si puó considerare è data dalla formula di Simpson, in cui approssimiamo I utilizzando il valore della funzione in tre punti, come

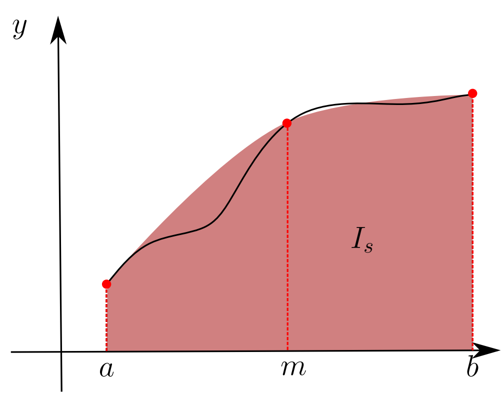
$$I \approx I_s = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(m\right) + f(b)\right],$$

dove $m = 0.5(a+b)$. Tale formula corrisponde all'integrale di una parabola passante per i punti

$$(a, f(a)), \quad \left(m, f\left(m\right)\right), \quad (b, f(b))$$

ed è quindi esatta se la funzione f è una parabola.

Graficamente abbiamo la seguente interpretazione



Un aspetto fondamentale di queste formula di quadratura è poter quantificare l'errore che commettiamo calcolando I_n al posto del vero valore I. Iniziamo dalla formula del punto medio e valutiamo l'errore commesso

$$E_{pm} = I - I_{pm} = \int_b^b f(x)dx - (b-a)f\left(m\right) = \int_a^b \left[f(x) - f\left(m\right)\right]dx$$

Utilizziamo ora l'espansione in serie di Taylor centrata in m, ottenendo

$$f(x) = f(m) + f'(m)(x-m) + \frac{1}{2}f''(\xi(x))(x-m)^2 \quad \text{per} \quad \xi \in [x, m]$$

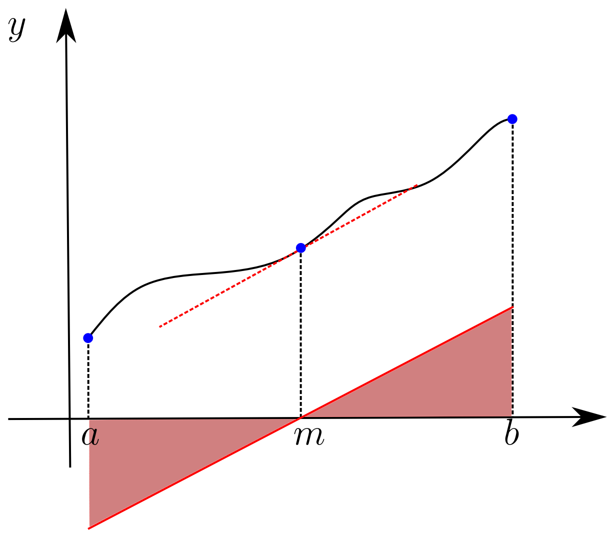
L'errore risulta quindi dato da

$$\int_a^b \left[f'(m)(x-m) + \frac{1}{2} f''(\xi(x))(x-m)^2 \right] dx =$$
$$= \int_a^b f'(m)(x-m)dx + \int_a^b \frac{1}{2} f''(\xi(x))(x-m)^2 dx = I^1 + I^2$$

Analizziamo i due termini I^1 e I^2 separatamente,

$$I^1 = \int_a^b f'(m)(x-m)dx = 0$$

infatti le aree a destra e a sinistra di m si compensano con valori opposti, graficamente abbiamo



Otteniamo quindi che l'errore E è dato unicamente del secondo termine I^2, che sviluppato diviene

$$E_{pm} = I^2 = \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi(x))(x-m)^2 dx = \frac{1}{2} f''(\eta) \int_a^b (x-m)^2 dx$$

dove $\eta \in [a, b]$ e l'ultimo passaggio è garantito dalla seguente formula

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\overline{x}) \int_a^b g(x)dx \quad \text{con} \quad \overline{x} \in [a, b]$$

nel caso in cui $g(x) > 0$ per ogni $x \in [a, b]$. Otteniamo infine che l'errore per la formula del punto medio è dato da

$$E_{pm} = f''(\eta) \frac{(b-a)^3}{24} \quad \Rightarrow \quad |E_{pm}| \leq \frac{(b-a)^3}{24} \max_{x \in I} |f''(x)| \, .$$

È possibile eseguire passaggi analoghi anche per le formule del trapezio e di Simpson, in questi casi otteniamo degli errori E_t e E_s che valgono rispettivamente

$$E_t = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta) \quad \text{e} \quad E_s - \frac{(b-a)^5}{16 \cdot 180} f^{(iv)}(\eta)$$

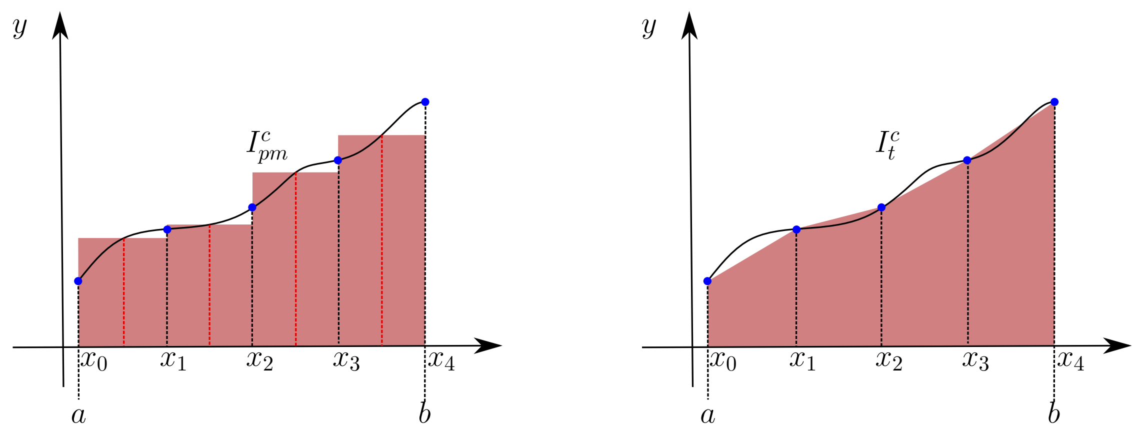
per un punto $\eta \in [a, b]$, per cui otteniamo le stime

$$|E_t| \leq \frac{(b-a)^3}{12} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \quad \text{e} \quad |E_s| \leq \frac{(b-a)^5}{16 \cdot 180} \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(iv)}(x)\right|.$$

Queste formule richiedono che la funzione f abbia regolarità almeno $C^2[a, b]$ per la formula del punto medio e del trapezio e almeno $C^4[a, b]$ per la formula di Simpson.

Integrazione composita

Nell'integrazione composita suddividiamo l'intervallo $[a, b]$ in n sotto-intervalli, dove, per $i = 1, \ldots, n$, ogni intervallo è dato da $I_i = [x_{i-1}, x_i]$ con $x_i = a + iH$ e dove $H = (b-a)/n$. Possiamo quindi applicare una delle formula di quadratura ad ogni intervallo come illustrato in figura



Otteniamo così la formula del punto medio composito in cui il valore dell'integrale è calcolato come

$$I^c_{pm} = H \sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right).$$

La formula dei trapezi composita si ottiene analogamente e risulta

$$I^c_t = \frac{H}{2} \sum_{i=1}^{n} [f(x_{i-1}) + f(x_i)] = \frac{H}{2}[f(a) + f(b)] + H \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)$$

dove la seconda espressione è computazionalmente più efficiente perché evitiamo di ripetere la valutazione della funzione nei punti interni all'intervallo. Infine la formula di Simpson composita risulta data da

$$I^c_s = \frac{H}{6} \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_{i-1}) + 4f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + f(x_i)\right].$$

Definzione 6.1 - ordine di accuratezza

Se una formula di quadratura composita è tale che

$$|E^c| = |I - I^c| \leq cH^p$$

diremo che la formula ha ordine di accuratezza pari a p.

Definzione 6.2 - grado di esattezza

Il grado di esattezza è il massimo grado dei polinomi che sono integrati esattamente da una formula di quadratura. Una formula di quadratura ha grado di esattezza q se

$$I(p) = I_n(p) \quad \forall p \in \mathbb{P}^q.$$

Calcoliamo ora l'errore associato alla formula del punto medio composito, procedendo analogamente a quanto fatto in precedenza.

$$E^c_{pm} = I - I^c_{pm} = \int_a^b f(x)dx - H\sum_{i=1}^n f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) = \sum_{i=1}^n E^i = \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_{i-1})^3}{24} f''(\xi_i)$$

per $x_{i-1} \leq \xi_i \leq x_i$. Avendo intervalli tutti uguali $H = x_i - x_{i-1}$, continuiamo ottenendo

$$E^c_{pm} \leq \sum_{i=1}^n \frac{H^3}{24} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \leq \frac{H^2}{24} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \sum_{i=1}^n H \leq \frac{H^2}{24} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| (b-a).$$

Indicando con c la costante che non dipende da H,

$$c = \frac{b-a}{24} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|,$$

otteniamo quindi che se $f \in C^2(a,b)$ allora l'errore del punto medio composito è dato da $\left|E^c_{pm}\right| \leq cH^2$. Possiamo quindi affermare che la formula del punto medio composita ha ordine di accuratezza 2, e grado di esattezza 1 in quando integra esattamente funzioni lineari, con derivata seconda nulla.

Ripercorrendo dei passaggi simili, possiamo mostrare che l'errore del metodo dei trapezi composito è dato da

$$|E^c_t| \leq \frac{b-a}{12} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| H^2 = cH^2 \quad \text{dove} \quad c = \frac{b-a}{12} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

da cui deduciamo che il metodo dei trapezi ha lo stesso ordine di accuratezza e grado di esattezza del punto medio, e l'unica differenza è nella costante c. Infine anche per la regola di quadratura di Simpson composito è possibile derivare un limite superiore per l'errore commesso che è dato da

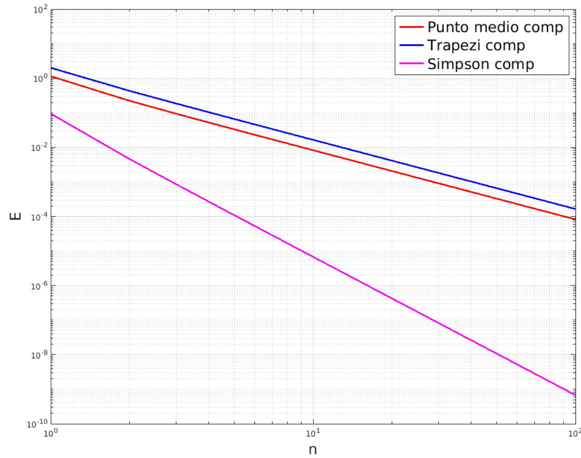
$$|E^c_s| \leq \frac{b-a}{16\cdot 180} \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(iv)}(x)\right| H^4 = cH^4 \quad \text{dove} \quad c = \frac{b-a}{16\cdot 180} \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(iv)}(x)\right|,$$

l'ordine di accuratezza è quindi pari a 4, nel caso in cui la funzione $f \in C^4(a,b)$, e il grado di esattezza è in questo caso 3. Osserviamo in figura l'errore associato alle tre formule per un numero crescente di intervalli. Ricordiamo che, in scala logaritmica, la pendenza della retta corrisponde all'ordine di accuratezza p, perchè:

$$E \sim cH^p \quad \rightarrow \quad E \sim c\left(\frac{b-a}{n}\right)^p = c\left(\frac{n}{b-a}\right)^{-p} \quad \rightarrow \quad \log E \sim \log c - p\log\left(\frac{n}{b-a}\right)$$

o in termine della lunghezza di H dato da

$$E \sim cH^p \quad \rightarrow \quad \log E \sim \log c + p\log H$$



Formule di quadratura interpolatoria

Come visto nelle sezioni precedenti una generica forma di quadratura può essere scritta come

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i), \tag{1.1}$$

ovvero come combinazione lineare della funzione f valutata in $n+1$ nodi di quadratura x_i, per $i = 0, \dots, n$, pesata da coefficienti α_i, detti pesi di quadratura.

Osserviamo che, invece di integrare la funzione esatta f possiamo approssimarla con un polinomio e integrare quest'ultimo, che risulta molto più facilmente integrabile, con regole note. La difficoltà si sposta quindi sul processo di interpolazione e non più di integrazione. Consideriamo quindi la nuova classe di formula di quadratura dette *interpolatorie*. Dati dei polinomi di grado n $\mathcal{L}_i$ come i polinomi di Lagrange, tali che $\mathcal{L}_i(x_i) = 1$, possiamo scrivere l'interpolante di f come $\Pi_n f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\mathcal{L}_i(x)$ e quindi la formula precedente può essere scritta come

$$I_n(f) = \int_a^b \Pi_n f(x)dx = \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\mathcal{L}_i(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b \mathcal{L}_i(x)dx.$$

Possiamo quindi chiamare la quantità indipendente dalla funzione f come

$$\alpha_i = \int_a^b \mathcal{L}_i(x)dx,$$

ottenendo quindi la formula in (1.1).

Esempio 6.1

Calcoliamo, per il caso di grado 1, i due pesi α_0 e α_1

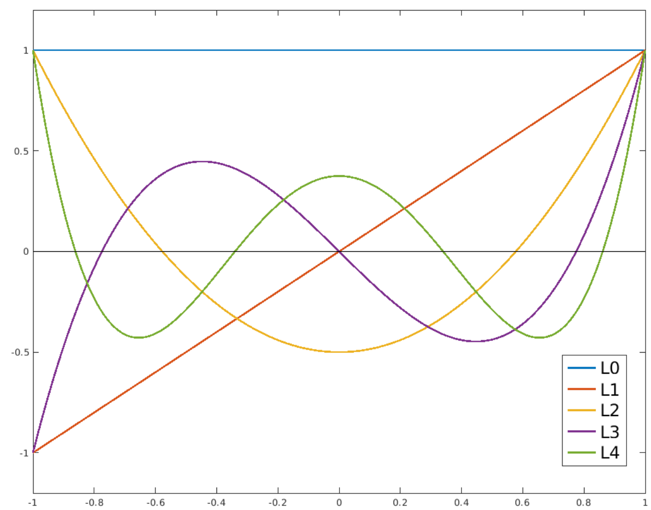
$$\alpha_0 = \int_a^b \mathcal{L}_0(x)dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}dx = \frac{b-a}{2}$$
$$\alpha_1 = \int_a^b \mathcal{L}_1(x)dx = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}dx = \frac{b-a}{2}$$

Abbiamo quindi ottenuto nuovamente la formula del trapezio, ovvero

$$I_t(f) = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1) = \frac{b-a}{2}f(x) + \frac{b-a}{2}f(b) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)].$$

Si può dimostrare che, fra tutte le possibili scelte di formule di quadratura interpolatoria, è possibile trovarne una che garantisca il grado di esattezza massimo, una volta fissato il numero di intervalli n, e quindi il numero di nodi $n+1$. Per semplicità ci focalizziamo sull'intervallo $(-1,1)$, i risultati che seguono possono poi essere mappati da $(-1,1)$ ad (a,b). Introduciamo i polinomi di Legendre di grado $n+1$ in $(-1,1)$. Tali polinomi sono definiti ricorsivamente come

$$L_0(x) = 1 \quad L_1(x) = x \quad L_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1} L_k(x)x - \frac{k}{k+1} L_{k-1}(x).$$



Ad esempio, abbiamo che per $k = 1$ otteniamo il polinomio di Legendre $L_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$. I polinomi di Legendre formano una base per lo spazio dei polinomi di grado n e inoltre hanno la seguente importante proprietà di ortogonalità:

$$\int_{-1}^{1} L_j(x) L_i(x) dx = \begin{cases} \dfrac{2}{2i+1} & \text{se } j = i \\ 0 & \text{se } j \neq i \end{cases}.$$

Grazie alle proprietà di tale base otteniamo che la formula di quadratura

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) \approx \int_{-1}^{1} f(x) dx$$

con $\alpha_i = \int_a^b \mathcal{L}_i(x) dx$ ha grado di esattezza massimo che si può avere, ossia $2n+1$ per n fissato.

Approfondimento 6.1

Per dimostrare tale proprietà ci serviamo del seguente risultato: dato $m > 0$, la formula di quadratura

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) \approx \int_{-1}^{1} f(x) dx$$

ha grado di esattezza pari a $n+m$ se e solo se è di tipo interpolatorio e inoltre se il polinomio nodale

$$w_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

è tale che verifica

$$\int_{-1}^{1} w_{n+1}(x)p(x)dx = 0 \quad \forall p \in \mathbb{P}^{m-1}.$$

Tale teorema fornisce il risultato ottimale che mostra che il massimo valore che può assumere m è $n+1$, ovvero quando il polinomio nodale w_{n+1} è proporzionale ai polinomi di Legendre fino al grado $m-1=n$ ovvero $m=n+1$. Infatti, dalla proprietà di ortogonalità dei polinomi di Legendre implica che il polinomio L_{n+1} è ortogonale a tutti gli L_k con $k \leq n$, ovvero

$$\int_{-1}^{1} L_{n+1}(x)L_k(x)dx = 0 \quad \Rightarrow \quad \int_{-1}^{1} L_{n+1}(x)p_k(x)dx = 0 \qquad \forall k = 0, \dots, n.$$

infatti sussiste la seguente relazione

$$\int_{-1}^{1} L_{n+1}(x)p_k(x)dx = \int_{-1}^{1} L_{n+1}(x)\sum_{i=0}^{k} a_i L_i(x)dx = \sum_{i=0}^{k} a_i \int_{-1}^{1} L_{n+1}(x)L_i(x)dx = 0$$

che risulta effettivamente nullo dalla proprietà degli L_i per $k \leq n$. Quindi il valore massimo di m è assunto quando w_{n+1} è proporzionale a L_{n+1}, ovvero $w_{n+1} = cL_{n+1}$. Dalle proprietà discusse di L_{n+1} otteniamo la relazione

$$\int_{-1}^{1} w_{n+1}(x)p(x)dx = c\int_{-1}^{1} L_{n+1}(x)p(x)dx = 0 \quad \forall p \in \mathbb{P}^{m-1}$$

dove appunto $m-1=n$ ovvero $m=n+1$. Valgono quindi le ipotesi del risultato precedente con $m=n+1$ ed otteniamo che il grado di esattezza massimo che si può avere è dato da $n+m=2n+1$.

Formule di quadratura Gaussiane

Le formule di quadratura Gaussiane sono una classe di formule di quadratura interpolatoria della forma

$$I_G = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i),$$

dove i nodi, nell'intervallo $[-1,1]$, e i pesi sono definiti dagli zeri e dagli α_i dati dai polinomi di Legendre.

$$\begin{aligned} &x_i \text{ gli zeri di } L_{n+1}(x) \\ \alpha_i = &\int_{-1}^{1} \mathcal{L}_i(x)dx = \frac{2}{(1-x_i^2)[L'_{n+1}(x_i)]^2} \end{aligned} \qquad i = 0, \dots, n.$$

Il grado di esattezza per le formule Gaussiane è massimo $2n+1$, come conseguenza del risultato precedente. Se prendo quindi $n+1$ nodi allora posso integrare esattamente polinomi fino al grado $m=2n+1$. Se richiediamo quindi di integrare esattamente un polinomio $p \in \mathbb{P}^5$ allora dovrei usare una formula con $5=2n+1$, ovvero con $n=2$.

Esempio 6.2

Ad esempio, per $n=1$ abbiamo che i nodi sono $x_i \in \{-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}\}$ associati ai pesi $\alpha_i \in \{1,1\}$. Per $n=2$ invece abbiamo $x_i \in \{-\frac{\sqrt{15}}{5}, 0, \frac{\sqrt{15}}{5}\}$ associati a $\alpha_i \in \{\frac{5}{9}, \frac{8}{9}, \frac{5}{9}\}$.