INTEGRAZIONE NUMERICA

Francesca Pelosi

Dipartimento di Matematica, Università di Roma "Tor Vergata"

CALCOLO NUMERICO

a.a. 2008–2009

http://www.mat.uniroma2.it/~pelosi/

INTEGRAZIONE NUMERICA

- Data una f integrabile su $[a,b]$ consideriamo

$$I[f] := \int_a^b f(x)dx$$

  - In alcuni casi non si conosce la primitiva
  - Anche quando si conosce la primitiva questa può essere troppo complicata (mentre f può essere più semplice)

  ES: $\int \frac{1}{1+t^2}dt = \arctan(x)$

  - La funzione da integrare può essere data non in forma analitica, ma per punti

⇒ Si cercano metodi numerici in grado di fornire una approssimazione di un integrale in termini di un numero finito di valori della funzione integranda

⇒ FORMULE DI QUADRATURA

INTEGRAZIONE NUMERICA

- Supponiamo di conoscere (o di poter valutare) la funzione integranda $f(x)$ in punti distinti $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ (scelti o prefissati) in $[a, b]$
  Costruiamo formule del tipo

$$I_{n+1}[f] \simeq \int_a^b f(x)dx, \qquad I_{n+1}[f] := \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

  - $x_i, i = 0, 1, \ldots, n$: nodi della formula di quadratura
  - $w_i, i = 0, 1, \ldots, n$: pesi della formula di quadratura

  Si definisce l'errore di quadratura associato alla formula su $n + 1$ punti:

$$E_{n+1}[f] = I[f] - I_{n+1}[f].$$

INTEGRAZIONE NUMERICA

$\Rightarrow$ IDEA IMMEDIATA: Approssimare $f(x)$ con il polinomio di grado n interpolante la funzione nei nodi $\{x_i,\ i = 0, 1, \ldots, n\}$ (unico se i nodi sono distinti):

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b (\mathcal{L}_n(x) + e_n(x))dx = \int_a^b \mathcal{L}_n(x)dx + \int_a^b e_n(x)dx$$

$\Rightarrow$ dove $\mathcal{L}_n(x)$ è il polinomio inerpolante i punti $(x_0, f(x_0)), \ldots, (x_n, f(x_n))$,
$\Rightarrow$ Formule interpolatorie

- Se rappresentiamo $\mathcal{L}_n(x)$ nella forma di Lagrange

$$\mathcal{L}_n(x; f) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i^{(n)}(x), \quad \text{con } \ell_i^{(n)}(x) = \frac{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (x - x_j)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (x_i - x_j)}, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \mathcal{L}_n(x)dx + \int_a^b e_n(x)dx = \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i^{(n)}(x)dx + \int_a^b e_n(x)dx$$

$$= \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b \ell_i^{(n)}(x)dx + \int_a^b e_n(x)dx$$

FORMULE INTERPOLATORIE

- Da cui si ottiene un approssimazione dell'integrale con la formula di quadratura:
$$\int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b \mathcal{L}_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b \ell_i^{(n)}(x)dx = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

ESEMPIO: Consideriamo i punti $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$ e sostituiamo alla funzione il polinomio di grado 1 (la retta) che passa per i punti dati

$$w_0 = \int_a^b \ell_0^{(1)}(x)dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}dx = \frac{1}{2}\left.\frac{(x-b)^2}{a-b}\right]_a^b = -\frac{1}{2}\frac{(a-b)^2}{a-b} = \frac{b-a}{2}$$

$$w_1 = \int_a^b \ell_1^{(1)}(x)dx = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}dx = \frac{1}{2}\left.\frac{(x-a)^2}{b-a}\right]_a^b = \frac{1}{2}\frac{(b-a)^2}{b-a} = \frac{b-a}{2}$$

Da cui si ottiene la Regola dei Trapezi

$$\int_a^b f(x)dx \simeq I_2[f] = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

FORMULE INTERPOLATORIE

ESEMPIO: Consideriamo i punti $(-h, f(-h))$, $(0, f(0))$ e $(h, f(h))$ e sostituiamo alla funzione il polinomio di grado 2 che passa per i punti dati

$$w_0 = \int_{-h}^{h} \ell_0^{(2)}(x)dx = \int_{-h}^{h} \frac{x(x-h)}{2h^2}dx = \frac{1}{2h^2}\left(\frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{2}x^2 h\right)\Bigg]_{-h}^{h} = \frac{h}{3}$$

$$w_1 = \int_{-h}^{h} \ell_1^{(2)}(x)dx = \int_{-h}^{h} \frac{(x+h)(x-h)}{-h^2}dx = \frac{1}{h^2}\left(-\frac{1}{3}x^3 + h^2 x\right)\Bigg]_{-h}^{h} = \frac{4}{3}h$$

$$w_2 = \int_{-h}^{h} \ell_2^{(2)}(x)dx = \int_{-h}^{h} \frac{x(x+h)}{2h^2}dx = \frac{1}{2h^2}\left(\frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{2}x^2 h\right)\Bigg]_{-h}^{h} = \frac{h}{3}$$

Da cui si ottiene la Regola di Simpson

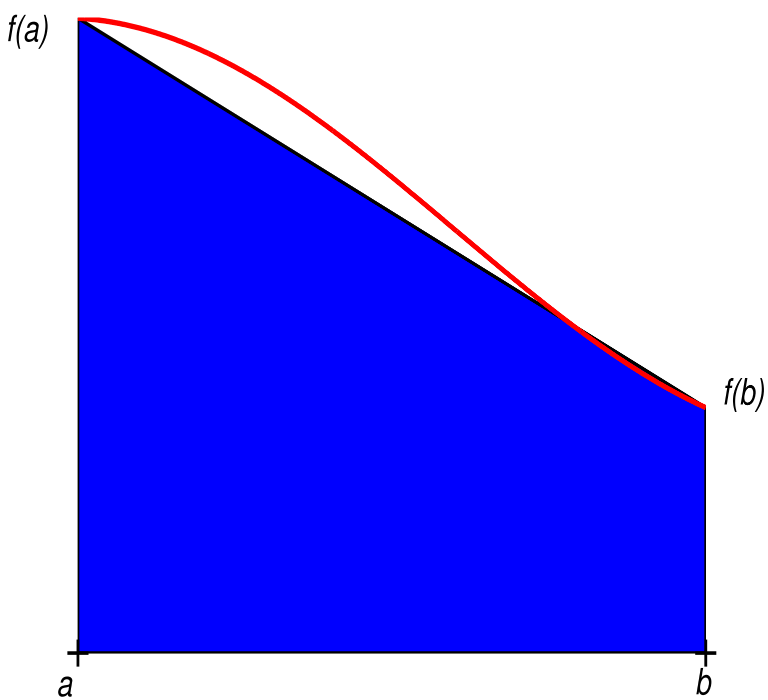
$$\int_{-h}^{h} f(x)dx \simeq I_3[f] = \frac{h}{3}\left[f(-h) + 4f(0) + f(h)\right]$$

e su un generico intervallo $[a, b]$:

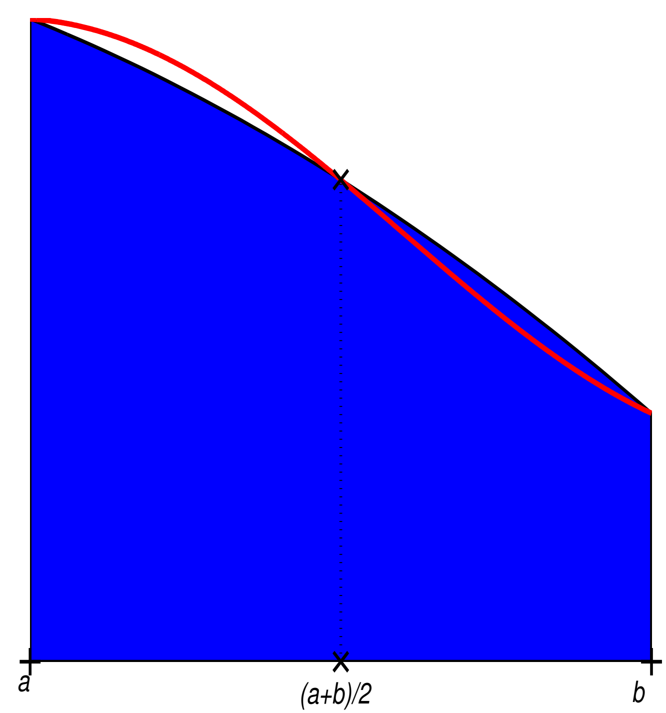
$$\int_{a}^{b} f(x)dx \simeq I_3[f] = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$$

FORMULE INTERPOLATORIE

TRAPEZI



SIMPSON



Grado di precisione

- La precisione di una formula di quadratura è legata alla bontà con cui $I_{n+1}[f]$ approssima $I[f] = \int_a^b f(x)dx$, pertanto in generale è dipendente dalla funzione integranda.
  Si esamina per quale classe di funzioni è esatta (cioè $I_{n+1}[f] = I[f]$)

  DEFINIZIONE: *Una formula di quadratura ha grado di precisione k se è esatta quando la funzione integranda è un polinomio di grado k, ed esiste almeno un polinomio di grado $k+1$ per cui l'errore risulti non nullo*

  (Tale definizione è giustificata dal teorema di Weierstrass.)

- Vale il teorema seguente

  TEOREMA: *Le formule di quadratura interpolatorie costruite su $n+1$ nodi, hanno grado di precisione almeno n.*

  Deriva dall'espressione dell'errore di interpolazione
  $e_n(x) = f(x) - \mathcal{L}_n(x) = \omega_{n+1}(x) f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x]$, tenendo presente che $f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x] = 0$ per $f \in \mathbb{P}_n$.

Grado di precisione

ES: La formula di Simpson ha grado di precisione 3:

- la formula è esatta per
  - $f(x) = x^0$:
    $\int_{-h}^{h} x^0 dx = x]_{-h}^{h} = 2h \Leftrightarrow I_3[x^0] = \frac{h}{3}[f(-h) + 4f(0) + f(h)] = \frac{h}{3}[1 + 4 + 1] = 2h$
  - $f(x) = x^1$
    $\int_{-h}^{h} x^1 dx = \left.\frac{x}{2}^2\right]_{-h}^{h} = 0 \Leftrightarrow I_3[x] = \frac{h}{3}[f(-h)+4f(0)+f(h)] = \frac{h}{3}[-h+h] = 0$
  - $f(x) = x^2$
    $\int_{-h}^{h} x^2 dx = \left.\frac{x}{3}^3\right]_{-h}^{h} = \frac{2}{3}h^3 \Leftrightarrow I_3[x^2] = \frac{h}{3}[f(-h) + 4f(0) + f(h)] = \frac{h}{3}[(-h)^2 + h^2] = \frac{2}{3}h^3$
  - $f(x) = x^3$
    $\int_{-h}^{h} x^3 dx = \left.\frac{x}{4}^4\right]_{-h}^{h} = 0 \Leftrightarrow I_3[x^3] = \frac{h}{3}[f(-h) + 4f(0) + f(h)] = \frac{h}{3}[-h^3 + h^3] = 0$
- mentre non è esatta per $f(x) = x^r$ con $r \geq 4$
  - $\int_{-h}^{h} x^4 dx = \left.\frac{x}{5}^5\right]_{-h}^{h} = \frac{2}{5}h^5 \not\Leftrightarrow I_3[x^4] = \frac{h}{3}[f(-h) + 4f(0) + f(h)] = \frac{h}{3}[(-h)^4 + h^4] = \frac{2}{3}h^5$

Formule di quadratura su nodi equidistanti

- NEWTON-COTES (tipo chiuso) :
  Dato $[a, b]$ posto $h = \frac{b-a}{n}$, consideriamo i punti equispaziati:

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, \ldots, n$$

cerchiamo l'espressione dei pesi delle formula interpolatoria corrispondente:

$$\sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) : \quad w_i = \int_{x_0}^{x_n} \ell_i^{(n)}(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} \frac{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (x - x_j)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (x_i - x_j)} dx$$

utilizziamo il cambiamento di variabili $x = a + th$ da cui $dx = hdt$:

$$w_i = h \int_0^n \frac{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (a + th - (a + jh))}{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (a + ih - (a + jh))} dt = h \int_0^n \frac{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (t - j)h}{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (i - j)h} dt = h\alpha_i$$

Formule di quadratura su nodi equidistanti

- Quindi una formula di Newton-Cotes su $[a, b]$ generico può essere scritta nella forma:

$$I_{n+1}[f] = h \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i), \quad h = \frac{b-a}{n}$$

  dove gli α_i sono pesi in $[0, n]$.

- Poichè gli α_i non dipendono da h ma solo da n, sono stati tabulati su delle tabelle al variare di n (nelle tabelle si sfutta la simmetria centrale degli α_i ovvero $\alpha_i = \alpha_{n-i}$)

n	α_0	α_1	α_2	α_3	Errore
1	$\frac{1}{2}$				$-\frac{1}{12}h^3 f^{(2)}(\eta)$
2	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$			$-\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\eta)$
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$			$-\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\eta)$
4	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$		$-\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\eta)$
5	$\frac{95}{288}$	$\frac{375}{288}$	$\frac{250}{288}$		$-\frac{275}{12096}h^7 f^{(6)}(\eta)$

Errore Formule di quadratura

- Per formule di tipo interpolatorio:

$$E_{n+1} = \int_a^b (f(x) - \mathcal{L}_n(x))dx = \int_a^b e_n(x)dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n)dx$$

- Per formule di Newton-Cotes con $h = \frac{b-a}{n}$:

$$E_{n+1} = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - (a + jh))dx \underset{\substack{x=a+th \\ dx=hdt}}{=}$$

$$= \int_0^n \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \left(\prod_{j=0}^{n} (t-j)h \right) hdt = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \int_0^n f^{(n+1)}(\xi) \prod_{j=0}^{n} (t-j)dt$$

ES: per la formula dei trapezi: $E_2 = -\frac{h^3}{2!} \int_0^1 f^{(2)}(\xi)t(1-t)dt$ dove $t(1-t) \geq 0$in $[0, 1]$.

Errore Formule di quadratura

- Studiando meglio l'integrale si può ottenere il seguente
(se la funzione non cambia segno si può applicare il teorema della media integrale)

TEOREMA: *Data una formula di quadratura di Newton-Cotes sui nodi $x_i = a + ih$, con $h = \frac{b-a}{n}$, $i = 0, \ldots, n$, si ha per l'errore le seguenti espressioni*

- *per n pari e $f \in C^{n+2}[a,b]$:*

$$E_{n+1}[f] = \frac{f^{(n+2)}(\eta)h^{n+3}}{(n+2)!} \int_0^n \prod_{j=0}^{n} t(t-j)dt$$

- *per n dispari e $f \in C^{n+1}[a,b]$:*

$$E_{n+1}[f] = \frac{f^{(n+1)}(\overline{\eta})h^{n+2}}{(n+1)!} \int_0^n \prod_{j=0}^{n} (t-j)dt$$

dove $\eta, \overline{\eta} \in [a,b] = [x_0, x_n]$.

Errore Formule di quadratura

- Le formule di quadratura con n pari (numero dispari di nodi) hanno grado di precisione $n+1$
  - Es: la formula di Simpson $n=2$ ha grado di precisione 3 in quanto l'errore coinvolge la derivata $f^{(4)}(\eta)$ che è nulla per $f \in \mathbb{P}_3$
- Le formule di quadratura con n dispari (numero pari di nodi) hanno grado di precisione n
  - Es: la formula dei Trapezi $n=1$ ha grado di precisione 1, in quanto l'errore coinvolge la derivata $f^{(2)}(\eta)$ che è nulla per $f \in \mathbb{P}_1$

$\Rightarrow$ È più conveniente usare formule con n pari.

Convergenza

- Dal teorema di Weierstrass discende anche il seguente

  TEOREMA: *Sia $\{I_{n+1}[f]\}$ una successione di formule di quadratura tali che $I_{n+1}[f]$ abbia grado di precisione almeno n, ed equilimitate (i.e. $\exists C : \|I_{n+1}\| < C, \forall n$). Allora si ha*

  $$\lim_{n\to\infty} I_{n+1}[f] = I[f]$$

  DIM: Poichè la formula di quadratura ha grado di precisione almeno n si ha che $I_{n+1}[p] = I[p]$, $\forall p \in \mathbb{P}_n$, ne segue

  $$E_{n+1}[f] = I[f] - I_{n+1}[f] = I[f] - I[p] + I_{n+1}[p] - I_{n+1}[f]$$

  $$= I[f-p] - I_{n+1}[f-p] \;\; \Rightarrow |E_{n+1}[f]| \leq (\|I\| + \|I_{n+1}\|)\|f-p\| \leq (\|I\| + C)\|f-p\|$$

  Per il Teorema di Weierstrass $\exists p \in \mathbb{P}_n$ convergente a $f \Rightarrow E_{n+1}[f] \to 0$

  TEOREMA: *Data una famiglia di formule di quadratura interpolatorie $I_{n+1}[f]$ tali che $\exists H$: tale che $\sum_{i=0}^{n} |w_i| < H$. Allora* $\lim_{n\to\infty} E_{n+1}[f] = 0$

- Per formule interpolatorie si ha $\sum_{i=0}^{n} w_i = b - a$ (essendo esatte su $f(x) = 1$ si ha $b - a = \int_a^b dx = I[1] = \sum_{i=0}^{n} w_i \cdot 1$)

Formule Composite (Newton-Cotes)

- Contrariamente a quanto potrebbe sembrare "a prima vista" non conviene usare formule di Newton-Cotes di grado di precisione via via crescente
- I pesi tendono a crescere in modulo e ad essere di segno alterno, dando luogo a rilevanti errori di arrotondamento (per es. errori di cancellazione)
- Per avere la convergenza e contemporaneamente $w_i \geq 0$ conviene considerare n basso e h piccolo, ossia suddividere $[a, b]$ in N sottointervalli $[z_k, z_{k+1}],\ k = 0, \ldots, N$ e su ciascuno applicare una formula di quadratura con basso grado (di precisione)

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{N-1} \int_{z_k}^{z_{k+1}} f(x)dx \simeq \sum_{k=0}^{N-1} I_{n+1}^{(k)}[f]$$

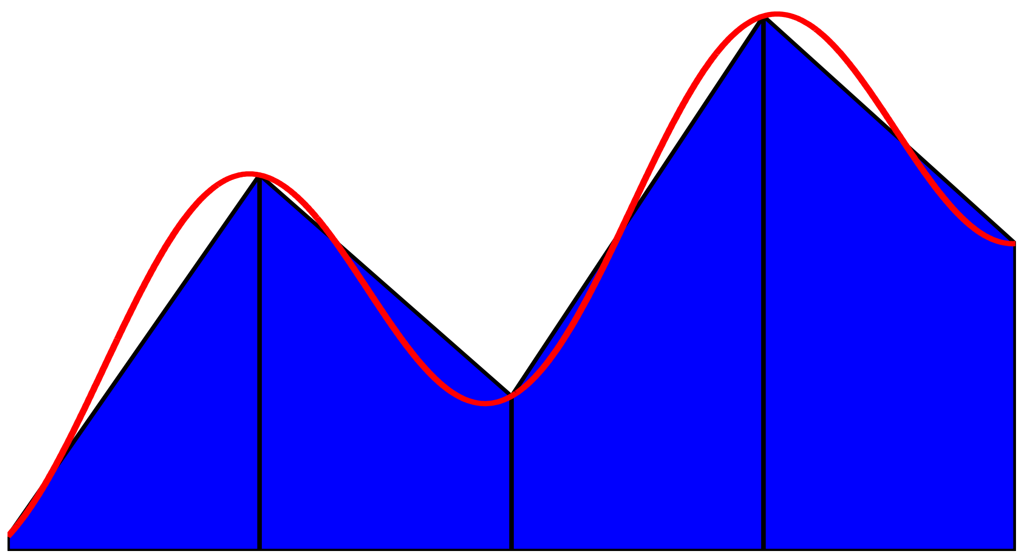
$I_{n+1}^{(k)}$ può essere ad esempio la formula di Newton-Cotes con $n+1$ nodi in $[z_k, z_{k+1}]$

Formula Composita dei Trapezi

- $[z_k, z_{k+1}] = [a + k\frac{b-a}{N}, a + (k+1)\frac{b-a}{N}]$

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{k=0}^{N-1} \frac{(z_{k+1} - z_k)}{2} (f(z_{k+1} - f(z_k))$$

$$\Rightarrow \quad I_T^N[f] := \frac{(b-a)}{2N} \left[f(a) + \sum_{k=1}^{N-1} 2f(z_k) + f(b) \right]$$

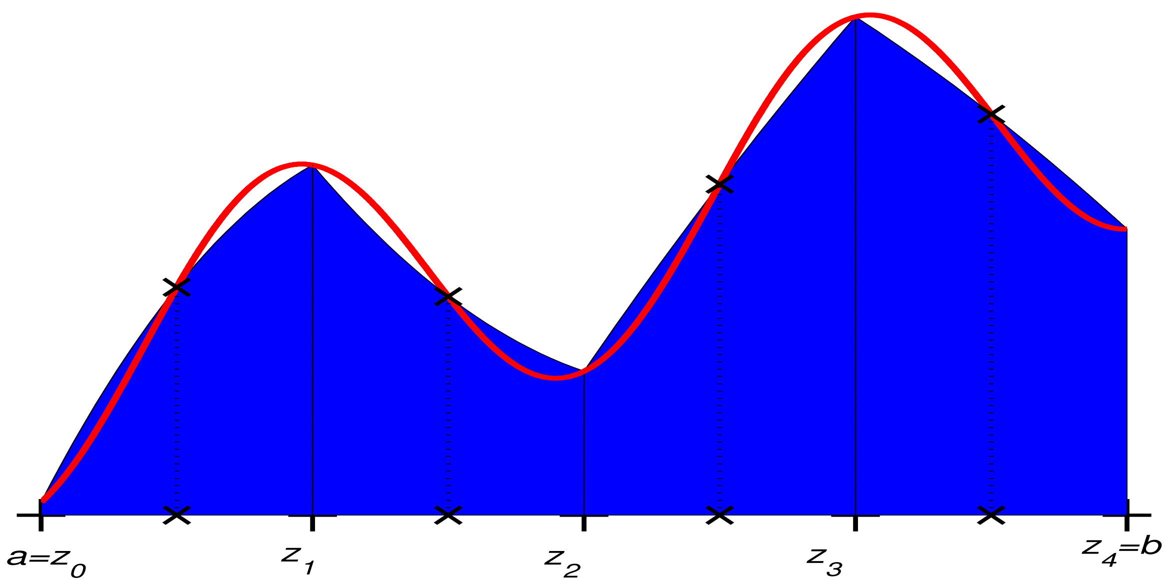


Formula Composita di Simpson

- $[z_k, z_{k+1}] = [a + k\frac{b-a}{N}, a + (k+1)\frac{b-a}{N}]$

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{k=0}^{N-1} \frac{(z_{k+1} - z_k)}{2} \left[\frac{1}{3} f(z_k) + \frac{4}{3} f\left(\frac{z_{k+1} + z_k}{2}\right) + \frac{1}{3} f(z_{k+1})\right]$$

$$\Rightarrow \quad I_S^N[f] := \frac{(b-a)}{6N} \left[f(a) + \sum_{k=1}^{N-1} 2f(z_k) + 4\sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{z_{k+1} + z_k}{2}\right) + f(b)\right]$$



Grado di precisione (Formule composite)

- Il grado di precisione delle formule composite è lo stesso delle corrispondenti formule di Newton-Cotes "semplici"
- Si può facilmente dimostrare che

$$|E_T^N[f]| \leq \frac{(b-a)}{12}\left(\frac{b-a}{N}\right)^2 \|f^{(2)}\|_\infty$$

$$|E_S^N[f]| \leq \frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2N}\right)^4 \|f^{(4)}\|_\infty$$

- Per funzioni sufficientemente regolari si ha quindi

$$\lim_{N\to\infty} |E_{n+1}^N[f]| = 0$$

Implementazione

- In pratica è importante determinare un valore adeguato del numero di suddivisioni dell'intervallo che bisogna fare.
- Si parte da N piccolo e si aumenta iterativamente il numero di suddivisioni, stimando l'errore in modo automatico:

$$|I_{n+1}^{N2}[f] - I_{n+1}^{N1}[f]|$$

- Di solito è conveniente considerare $N2 = 2N1$, per sfruttare le valutazioni di f fatte per costruire $I_{n+1}^{N1}[f]$
- Le formule composite con suddivisione uniforme dell'intervallo di integrazione sono ormai superate, tranne in casi particolari (funzioni periodiche). Si usano formule di tipo adattivo:
  - Quando la funzione integranda presenta delle irregolarità c'è la necessità di addensare nodi nelle vicinanze delle irregolarità
  - L'intervallo viene suddiviso in sottointervalli di ampiezza diversa
  - Si usano molti nodi solo dove necessario
  - Per capire dove infittire la sequenza dei nodi si usano stime dell'errore.