Metodi Computazionali della Fisica

Integrazione numerica

Introduzione

Cosa rappresenta un integrale?

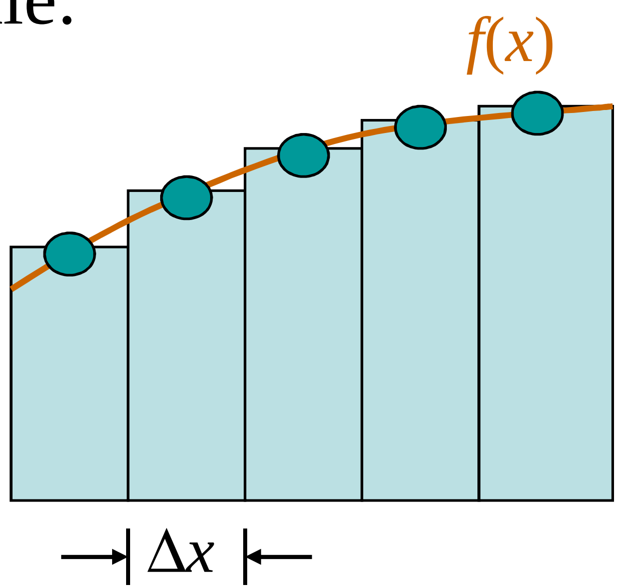
$$\int_a^b f(x)dx = \text{area} \qquad \int_c^d \int_a^b f(x,y)dxdy = \text{volume}$$

Definizione di base di un integrale:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} f(x_k)\Delta x$$

dove $\Delta x = \dfrac{b-a}{n}$

somma di altezze $\times$ basi



Motivazione

- Valutare l'integrale, $I = \int_a^b f(x)dx$ senza calcolarlo analiticamente.

- Necessario quando:
  – L'integrando è troppo complicato per farlo analiticamente

$$\int_0^2 \frac{2+\cos(1+\sqrt{x})}{\sqrt{1+0.5x}} e^{0.5x} dx$$

  – L'integrando non è definito da una funzione ma si ha solo un insieme, di punti (x_i, y_i), i = 1, 2, 3, …,n

Integrale di Riemann

L'integrazione è un *processo di <u>somma</u>*.

Tutte le approssimazioni numeriche di un integrale possono essere rappresentate dalla formula generica

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) + E_t$$

dove w_i sono i pesi, x_i sono i punti campionati, e E_t è l'errore di troncamento

Valida per ogni funzione continua sul dominio chiuso e limitato d'integrazione.

Partizione dell'integrale

La formula più comune d'integrazione numerica è basata su un insieme di punti equispaziati :

Dato $$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx$$

dividiamo $[x_0 , x_n]$ in n ***intervalli*** ($n \geq 1$)

$$\Rightarrow \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx$$

Somme superiori

Per semplicità assumiamo *f(x)>0* nel dominio d'integrazione.

Se all'interno di ogni intervallo è possibile determinare il ***sup*** della funzione

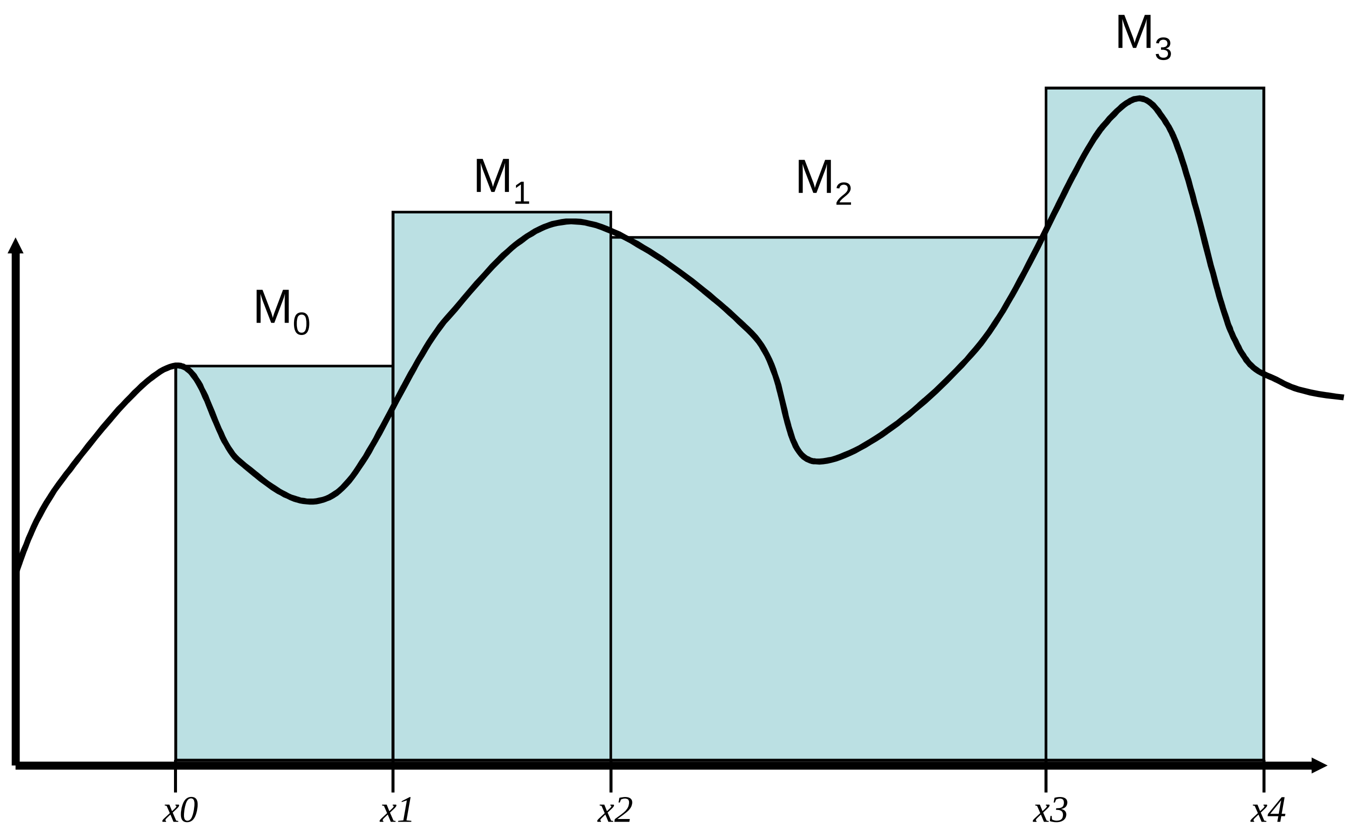
$$\Rightarrow \quad \int_{x_0}^{x_n} f(x) \leq \sum_{i=0}^{n-1} M_i \left(x_{i+1} - x_i \right)$$

dove $$M_i = \sup\left\{ f(x) : x_i \leq x \leq x_{i+1} \right\}$$

Supremo: più piccolo limite superiore

Somme superiori

Graficamente:



Somme inferiori

Analogamente se in ogni intervallo è possibile determinare l'***inf*** della funzione, si ha:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) \geq \sum_{i=0}^{n-1} m_i \left(x_{i+1} - x_i \right)$$

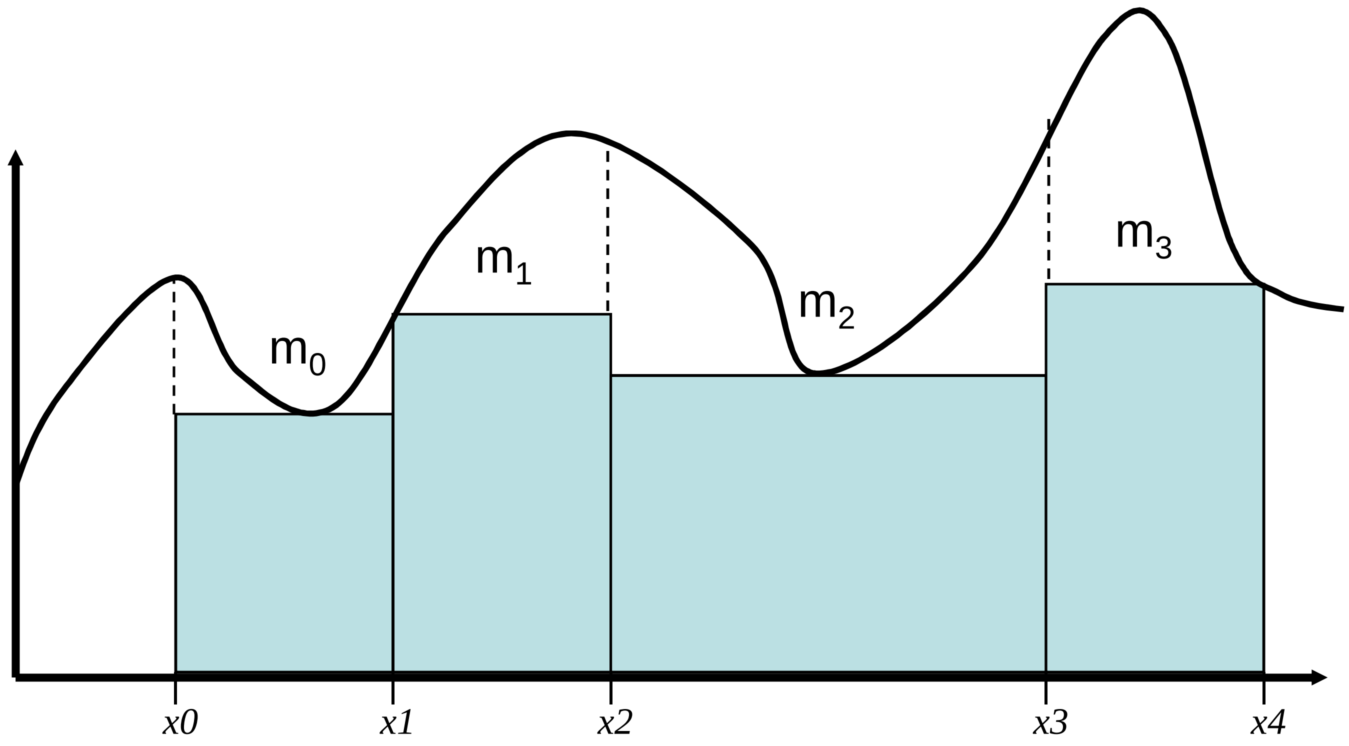
dove

$$m_i = \inf \left\{ f(x) : x_i \leq x \leq x_{i+1} \right\}$$

Infimo: più grande limite inferiore

Somme inferiori

Graficamente



Partizioni più fini

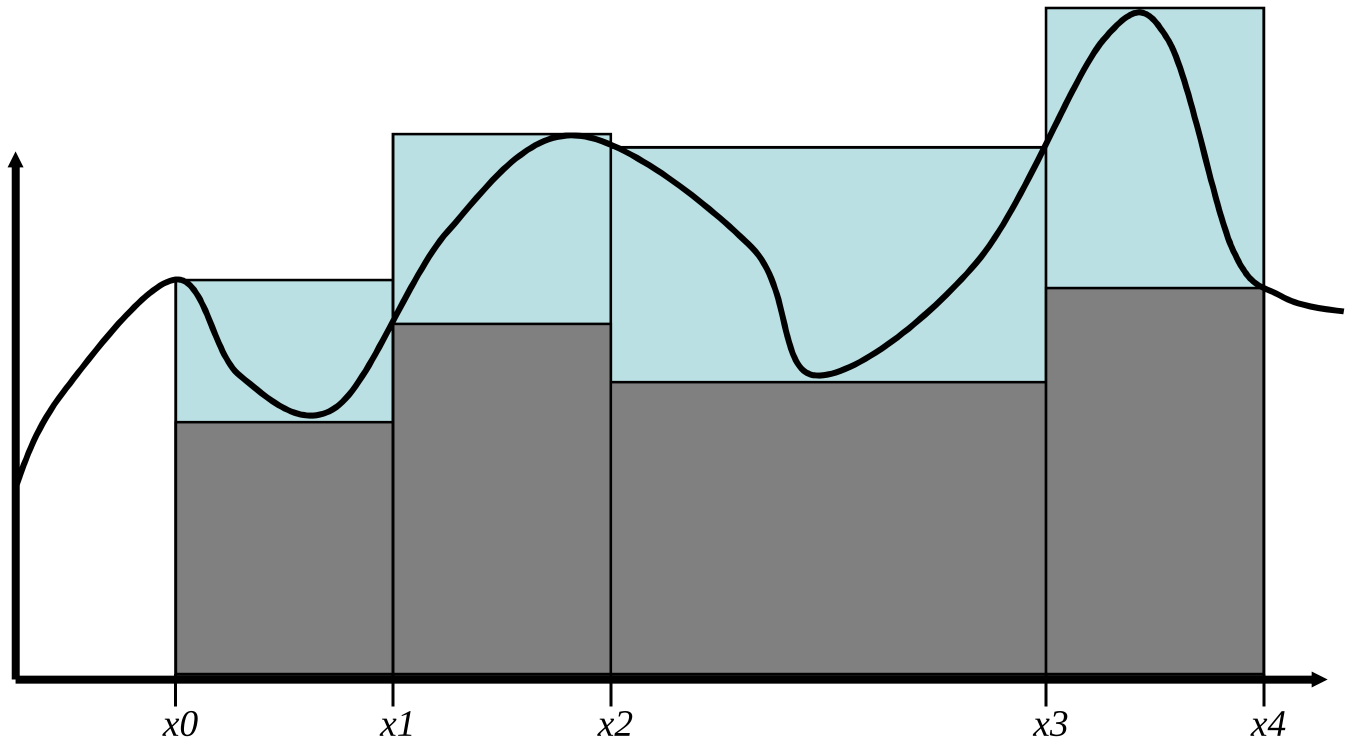
- Per una certa partizione (x_0,..,x_n) si ha:

$$\sum_{i=0}^{n-1} m_i \left(x_{i+1} - x_i \right) \leq \int_{x_0}^{x_1} f(x) \leq \sum_{i=0}^{n-1} M_i \left(x_{i+1} - x_i \right)$$

- Per $n \rightarrow \infty$, si assume che la somma dei limiti superiori e la somma dei limiti inferiori coincidano.
- Questo è vero per molte funzioni che vengono dette Riemann-integrabili.

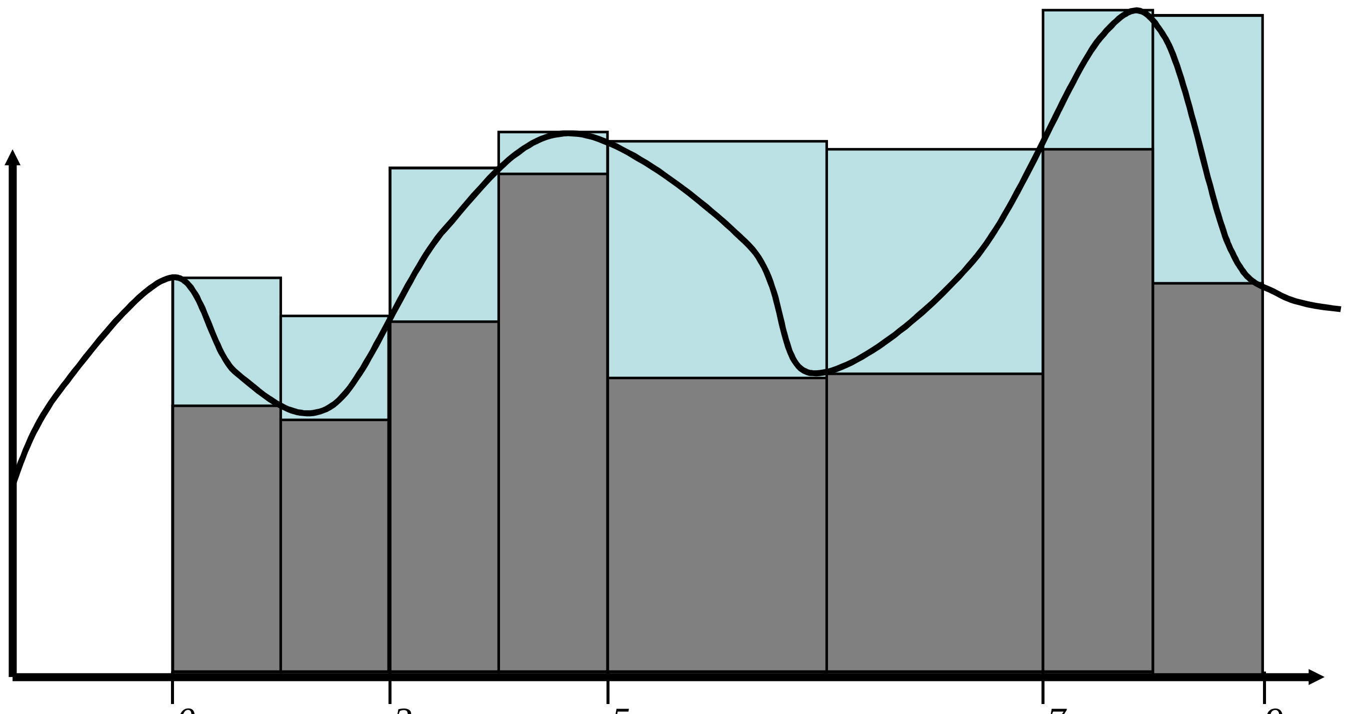
Delimitazione dell'integrale

Graficamente



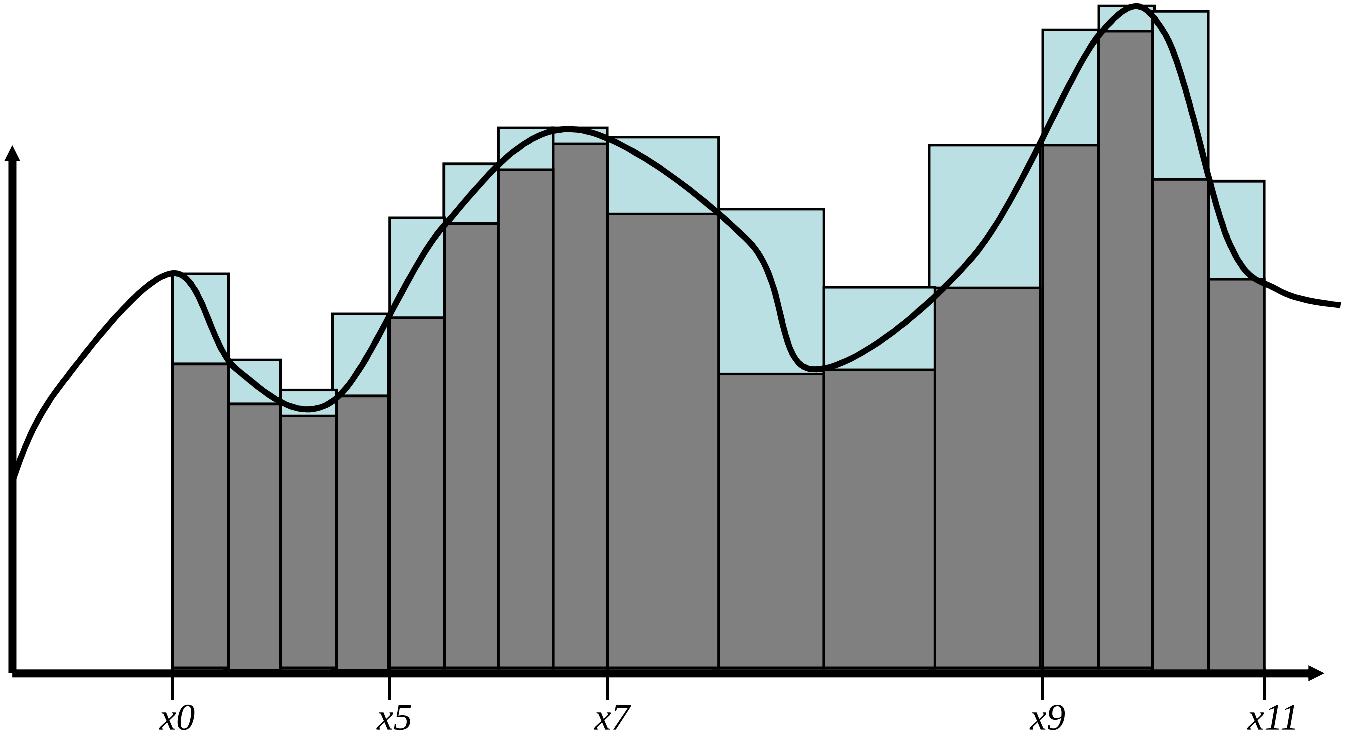
Partizione più fine…

Suddividendo ogni intervallo precedente si avrà:



Ancora più fine…

Suddividendo un’altra volta:



Funzioni monotone

- Le somme superiori ed inferiori sono interessanti ma non molto utili.
  - Riformulano il problema in termini di ricerca di minimi e massimi (globali) su un intervallo.
  - Un problema in generale molto più difficile.
- Le funzioni monotone forniscono comunque un semplice esempio (e.g., *exp(x), tan(x),* …).

Funzioni monotone

- Una *funzione monotona crescente* ha la proprietà che $f(x) \geq f(y)$, per ogni $x>y$ dell'intervallo.

- Una *funzione monotona decrescente* ha la proprietà che $f(x) \leq f(y)$, per ogni $x>y$ dell'intervallo.

Funzioni monotone

La somma superiore per una funzione monotona crescente è quindi semplicemente la somma dei valori di destra: $M_i=f(x_{i+1})$

La somma inferiore usa invece il valore di sinistra: $m_i=f(x_i)$

Approssimazione polinomiale

Invece di cercare il massimo o il minimo della funzione *f(x)* nell'intervallo $[x_i,x_{i+1}]$, si approssima la *f(x)* in quell'intervallo con una funzione nota e semplice da calcolare.

Nel caso di una approssimazione polinomiale,

la *f*(*x*) viene approssimata con *un* polinomio di grado m:

$$p_m(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_m x^m$$

Formule di Newton-Cotes

L'ordine *m* (dei polinomi) può essere lo stesso o differente.

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_{0+m_1}} p_{m_1}(x)dx + \int_{x_{0+m_1}}^{x_{0+m_1+m_2}} p_{m_2}(x)dx + \ldots + \int_{x_{n-m_n}}^{x_n} p_{m_n}(x)dx$$

Scelte diverse di *m* portano a formule diverse:

m	Polinomio	Formula	Errore
1	lineare	Trapezio	$O(h^2)$
2	quadratico	Simpson 1/3	$O(h^4)$
3	cubico	Simpson 3/8	$O(h^4)$

Regola del trapezio

E' il modo piu' semplice per approssimare l'area sottesa da una curva. Si usa un polinomio del primo ordine (una retta)

Dalla formula di Lagrange per l'interpolazione lineare:

$$p_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b-a}(x-a)$$

Si ottiene:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_1(x)dx \equiv T$$

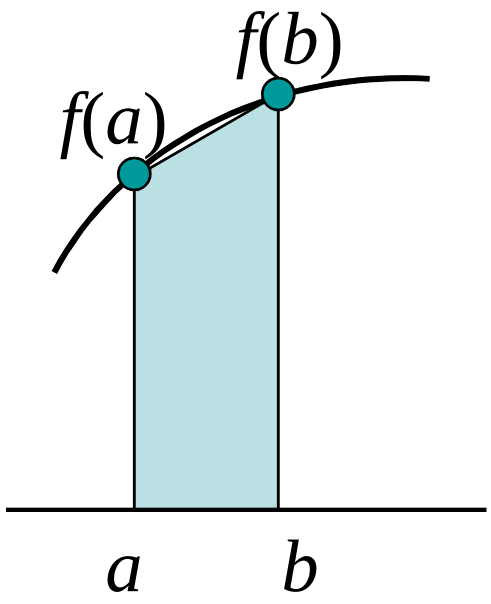
N.B. Con T indichiamo l'approssimazione (con la regola del trapezio) dell'integrale I

Regola del trapezio

$$I \approx T = \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b-a}(x-a) \right] dx$$

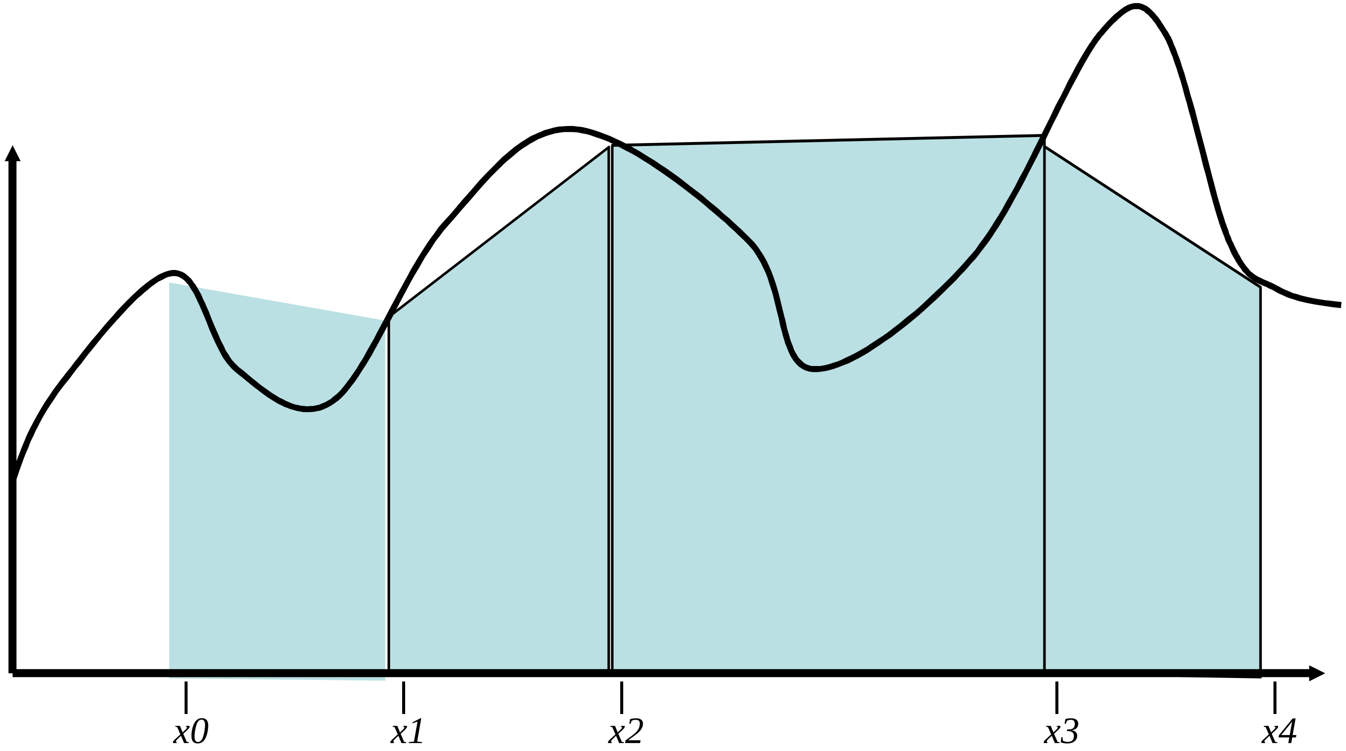
Interpretazione geometrica

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



$$I \approx \mathrm{T} = \text{larghezza} \times \text{altezza media}$$

Regola del trapezio



Errore nella regola del trapezio
(singolo intervallo)

L'errore d'integrazione vale:

$$\left|I - T\right| \equiv E_t = \frac{1}{12}\left|f''(\xi)\right|(b-a)^3 = \frac{1}{12}\left|f''(\xi)\right|h^3 \qquad O(h^3)$$

dove *h* = *b* - *a* e ξ è un punto incognito tale che *a* < ξ < *b.*

(oss) Si ha integrazione esatta se la funzione, *f,* è lineare (f'' = 0)

Esempio

Integrare $f(x) = e^{-x^2}$ da a = 0 a b = 2.

Con la regola del trapezio si ha:

$$I = \int_0^2 e^{-x^2} dx$$

$$\approx \mathrm{T} = \frac{(b-a)}{2}\left[f(a) + f(b)\right] = \frac{(2-0)}{2}\left[f(2) + f(0)\right]$$

$$= 1 \times (e^{-4} + e^{0}) = 1.0183$$

Esempio (cont.)

Errore stimato: $$E_t = \frac{1}{12}\left| f''(\xi)\right| h^3$$

$h = b - a = 2$

$a < \xi < b$

Non conoscendo ξ si usa il valor medio di f'' su (a,b):

$$f''(\xi) \approx \frac{1}{b-a}\int_a^b f''(x)dx$$

In questo caso $f''(x) = (-2+4x^2)e^{-x^2}$ e l'integrale non è immediato

$$E_t \approx E_a = \frac{2^3}{12}\left|\frac{\left[f''(0)+f''(2)\right]}{2}\right| = 0.58$$

$$f''(0) = -2$$
$$f''(2) = 0.2564$$

Regola del trapezio composta

Usiamo *n*+1 punti equispaziati (*n* intervalli).

Ogni intervallo ha lunghezza

$$h = \frac{b-a}{n}$$

Suddividendo i limiti d'integrazione ed espandendo:

$$I = \int_a^{a+h} f(x)dx + \int_{a+h}^{a+2h} f(x)dx + \ldots + \int_{b-h}^{b} f(x)dx$$

Regola del trapezio composta

Sostituendo la regola del trapezio per ogni integrale

$$I = \int_a^{a+h} f(x)\,dx + \int_{a+h}^{a+2h} f(x)\,dx + \quad \ldots \quad + \int_{b-h}^{b} f(x)\,dx$$

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

$$+ \ldots. + \frac{(b-b+h)}{2}\left[f(b-h) + f(b)\right]$$

si ottiene la **formula del trapezio composta**

$$\boxed{I \approx T = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+k\,h) + f(b)\right]}$$

Regola del trapezio composta

La si può vedere come *larghezza* (dell'intervallo) moltiplicata per *l'altezza media*.

$$I \approx T = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+k\,h) + f(b) \right]$$

$$= \underbrace{(b-a)}_{\text{larghezza}} \underbrace{\frac{f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+k\,h) + f(b)}{2n}}_{\text{Altezza media}}$$

Regola del trapezio composta

$$I \approx T = \frac{h}{2} f(a) + h \sum_{k=1}^{n-1} f(a + k\,h) + \frac{h}{2} f(b)$$

N.B. Poichè ogni punto interno viene contato due volte (condiviso da due intervalli contigui) ha un peso pari a *h* mentre i due estremi a e b hanno un peso pari a *h/2*.

E' utile scrivere l'integrale approssimato come una **somma pesata:**

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) w_i$$

dove

$$w_i = \left\{ \frac{h}{2}, h, \ldots, h, \frac{h}{2} \right\}$$

Errore della formula composta

Se f'' esiste ed è continua nell'intervallo [a,b] e se si utilizza la regola del trapezio composta con spaziatura uniforme di larghezza h, allora, per qualche ξ in (a,b), vale

$$\boxed{I - T = E_T = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi) = O(h^2)}$$

Dim:

Lo si dimostra prima per [a,b]=[0,1] e h=1. In questo caso la retta interpolante vale:

$$\boxed{p(x) = f(0) + [f(1) - f(0)]x}$$

Utilizzando la formula dell'errore per un polinomio interpolante di ordine n

$$\varepsilon_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

$$x \in [a,b], \xi \in (a,b)$$

che in questo caso diventa (n=1, x_0 = 0, x_1=1)

$$f(x) - p_1(x) = \frac{1}{2} f''[\xi(x)] x(x-1) \qquad \textbf{(1)}$$

$$\Rightarrow \int_0^1 f(x)dx - \int_0^1 p_1(x)dx = \frac{1}{2} \int_0^1 f''[\xi(x)]\, x(x-1)dx$$

$$\int_0^1 f(x)dx - \int_0^1 p_1(x)dx = \frac{1}{2}\int_0^1 f''[\xi(x)]\, x\,(x-1)\,dx$$

Dalla (1) si può verficare che f'' è continua. Inoltre x (x-1) non cambia segno nell'intervallo [0,1]. Si può quindi applicare il **teorema del valore medio per gli Integrali** il quale dice che c'è un punto x=s per cui vale:

$$\int_0^1 f''[\xi(x)]x(x-1)dx = f''[\xi(s)]\int_0^1 x(x-1)dx = f''(\zeta)\left(-\frac{1}{6}\right)$$

$$\Rightarrow \quad \int_0^1 f(x)dx - \frac{1}{2}\left[f(0)+f(1)\right] = -\frac{1}{12} f''(\zeta)$$

Per un generico intervallo (a,b) basta un semplice cambiamento di variabile:

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\int_0^1 f\left[a+t(b-a)\right]dt = (b-a)\int_0^1 g(t)dt$$

E si può applicare il ragionamento precedente alla funzione g(t) ottenendo:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right] - \frac{(b-a)^3}{12} f''(\zeta)$$

Supponiamo ora di suddividere l'intervallo [a,b] in n sottointervalli di punti $x_0, x_1 \ldots x_n$ di larghezza h. Applicando la formula per il singolo intervallo a ciascun sottointegrale

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_i)+f(x_{i+1})\right] - \frac{h^3}{12} f''(\zeta_i)$$

E sommando i vari termini si ha

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}\left[f(x_i)+f(x_{i+1})\right] - \frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\zeta_i)$$

Usando $h = (b-a)/n$

$$\Rightarrow \quad -\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\zeta_i) = -\frac{(b-a)}{12} h^2 \left[\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\zeta_i)\right] = -\frac{(b-a)}{12} h^2 \overline{f''(\zeta)}$$

Errore della formula composta

L'errore della regola composta è quindi:

$$\boxed{E_a = \frac{(b-a)h^2}{12}\left|\overline{f}''\right| = \frac{(b-a)^3}{12n^2}\left|\overline{f}''\right|} \qquad O(h^2)$$

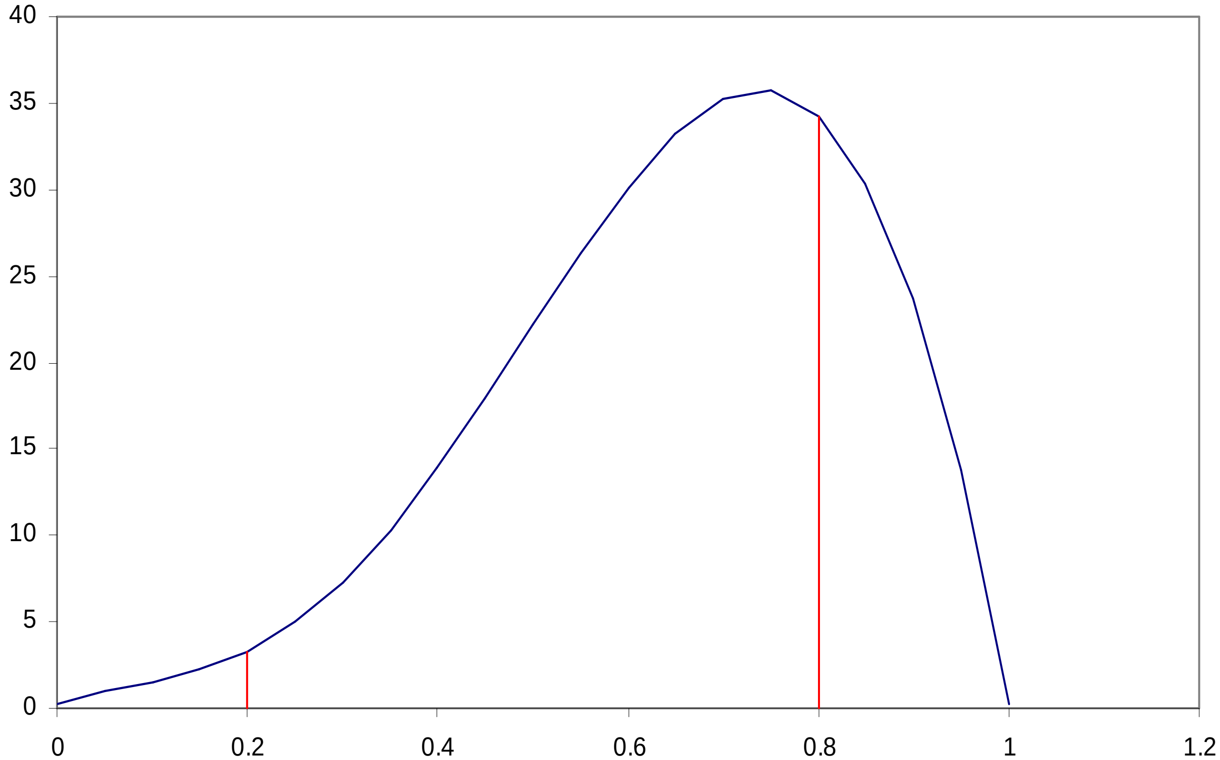
dove, $\overline{f}''$ e' il valor medio della derivata seconda.

- Se si raddoppia n, $h \to h/2$ e $E_a \to E_a/4$
- Notare che l'errore dipende dalla larghezza dell'intervallo su cui si integra.

Esempio

Integrare $f(x) = 0.3 + 20x - 140x^2 + 730x^3 - 810x^4 + 200x^5$

da *a*=0.2 a *b*=0.8



Esempio

Una singola applicazione della regola del trapezio fornisce:

$$I \approx T = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$$

$$= (0.8-0.2)\frac{34.22+3.81}{2} = 11.26$$

con errore

$$E_t = \frac{1}{12}\left|f''(\xi)\right|(b-a)^3 = \ldots\ldots..$$

Esempio (cont.)

Poichè non conosciamo ξ l'approssimiamo con il valor medio di f''

$$f'(x) = 20 - 280x + 2190x^2 - 3240x^3 + 1000x^4$$

$$f''(x) = -280 + 4380x - 9720x^2 + 4000x^3$$

$$\overline{f''}(x) = \frac{\int_{0.2}^{0.8} f''\,dx}{0.8-0.2}$$

$$= \frac{f'(0.8) - f'(0.2)}{0.8-0.2} = -131.6$$

Esempio (cont.)

L'errore vale quindi:

$$E_t = \frac{1}{12}(b-a)^3 \left|\overline{f''}\right|$$

$$= \frac{1}{12}(0.8-0.2)^3 (131.6) = 2.37$$

Usando 3 intervalli.....

(0.2,0.4), (0.4,0.6), (0.6,0.8)   (*n* = 3, *h* = 0.2)

$$I \approx T = (b-a)\frac{f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih)+f(b)}{2n}$$

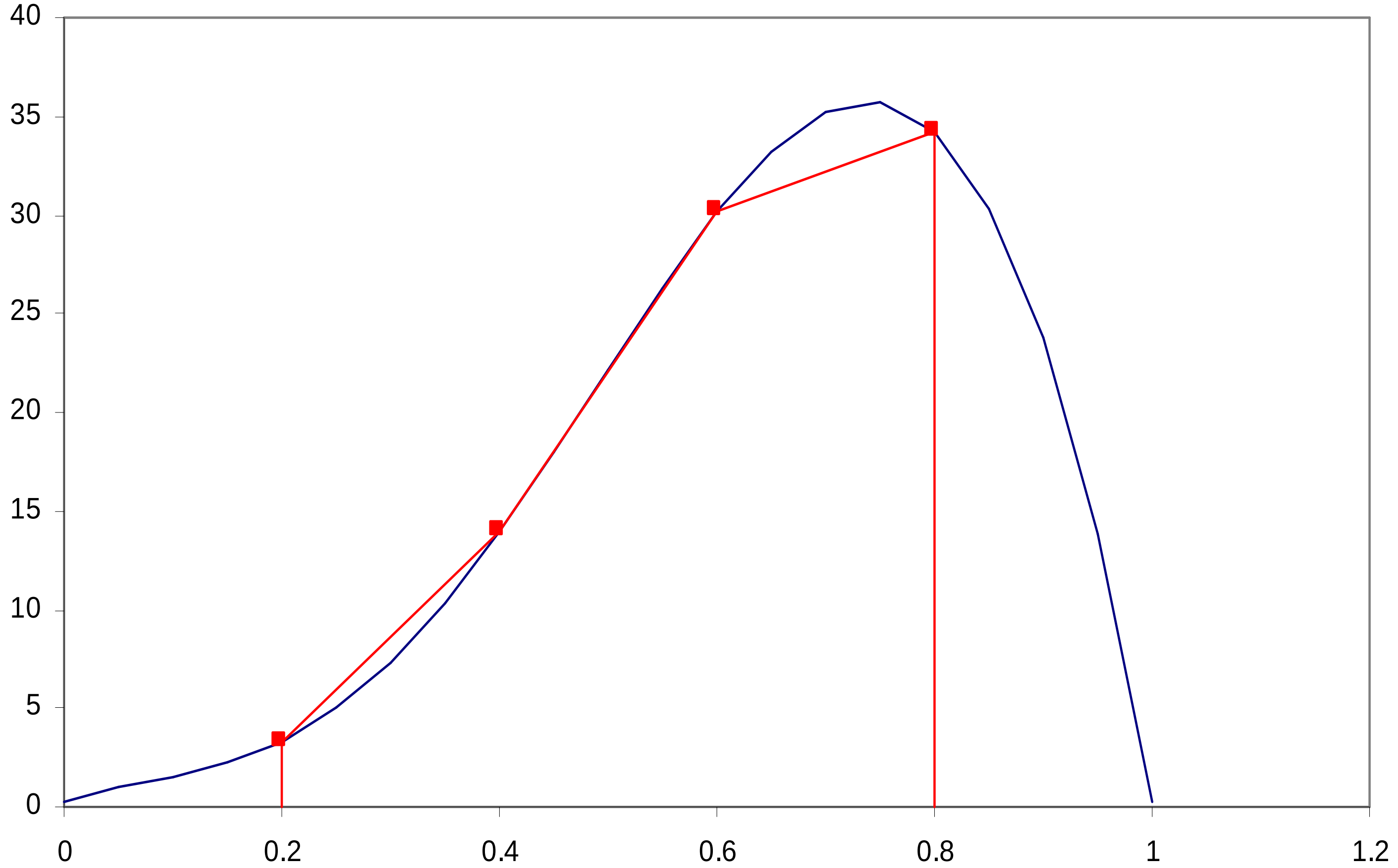
$$= (0.8-0.2)\frac{f(0.2)+2[f(0.4)+f(0.6)]+f(0.8)}{(2)(3)}$$

$$= 0.6\frac{3.31+2(13.93+30.16)+34.22}{6}$$

$$= 12.57$$

N.B. Il valore esatto dell'integrale è 12.82

E_t è ora circa il 2%



Usando 6 intervalli …

Usiamo gli intervalli (0.2,0.3),(0.3,0,4), etc.

(n = 6, h = 0.1)

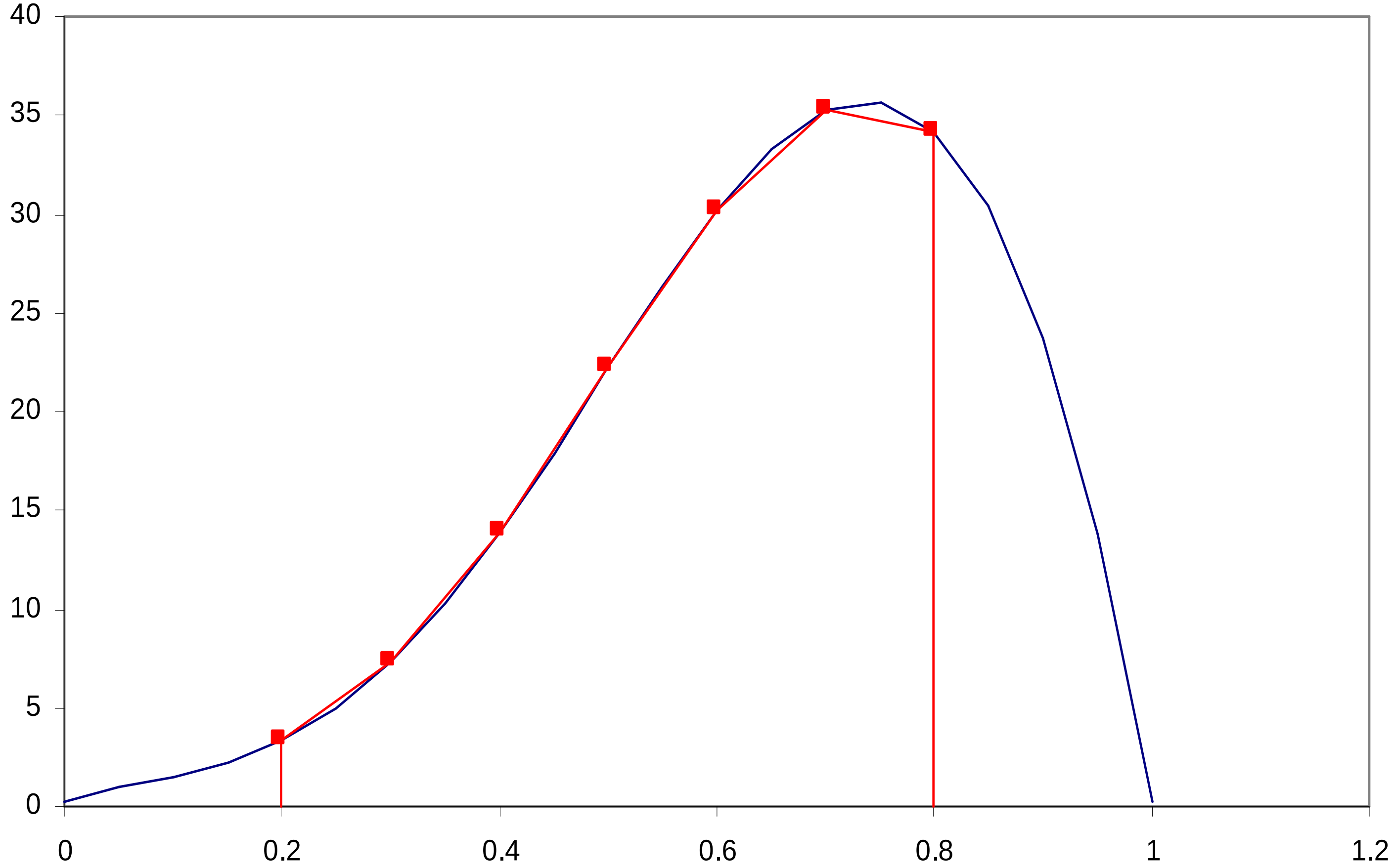
$$I \approx T = (0.8 - 0.2)\frac{f(0.2) + 2[f(0.3) + f(0.4) + f(0.5) + f(0.6) + f(0.7)] + f(0.8)}{(2)(6)}$$

$$= 0.6\frac{3.31 + 2(7.34 + 13.93 + 22.18 + 30.16 + 35.22) + 34.22}{12}$$

$$= 12.76$$

N.B. Valore esatto 12.82

E_t è ora intorno allo 0.5%



Come ridurre l' errore $\boxed{E_a = \frac{(b-a)h^2}{12}\overline{f}'' = \frac{(b-a)^3}{12n^2}\overline{f}''}$?

Per migliorare la stima dell'integrale si possono fare le seguenti cose:

- Aggiungere più intervalli
- Usare un polinomio di ordine superiore
- Usare il metodo di estrapolazione di Richardson per stimare il limite h→0.
  - Il metodo del Trapezio + l'estrapolazione di Richardson è noto come **integrazione di Romberg**.

Aggiungere più intervalli

Se si ha una stima per un valore di *h*, occorre ricalcolare tutto di nuovo per un valore di *h*/2 ?

Partiamo dalla formula per n intervalli ciascuno di larghezza h;

$$\boxed{I_h = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) + f(b) \right]}$$

$$h = \frac{b-a}{n}$$

Aggiungere più intervalli

Se poniamo ora $n \to 2n$ e $h \to h/2$, la formula diventa:

$$I_{\frac{h}{2}} = \frac{h}{4}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{2n-1} f\left(a + i\frac{h}{2}\right) + f(b) \right]$$

$$= \frac{h}{4}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) + 2\sum_{i=0}^{n-1} f\left(a + ih + \frac{h}{2}\right) + f(b) \right]$$

$$= \frac{I_h}{2} + \frac{h}{4}\left[2\sum_{i=0}^{n-1} f\left(a + ih + \frac{h}{2}\right) \right]$$

N.B. Si calcolano solo gli n punti nuovi !!

Si parla di **Regola del trapezio recursiva**.

Integrali bidimensionali

Caso di integrazione bidimensionale.

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 \int_0^1 f(x,y)\,dxdy &\approx \int_0^1 \sum_{i=0}^{n} A_i f\left(\frac{i}{n}, y\right) dy \\
&= \sum_{i=0}^{n} A_i \int_0^1 f\left(\frac{i}{n}, y\right) dy \\
&\approx \sum_{i=0}^{n} A_i \sum_{j=0}^{n} A_j f\left(\frac{i}{n}, \frac{j}{n}\right) \\
&= \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{n} A_i A_j f\left(\frac{i}{n}, \frac{j}{n}\right)
\end{aligned}
$$

Integrali bidimensionali

Con la regola del trapezio si ottiene la seguente matrice di pesi:

1
2
2
2
2
2
1

1	2	2	2	2	2	1
2	4	4	4	4	4	2
2	4	4	4	4	4	2
2	4	4	4	4	4	2
2	4	4	4	4	4	2
2	4	4	4	4	4	2
1	2	2	2	2	2	1

1	2	2	2	2	2	1

$$A_{ij} = \frac{1}{4n^2}\begin{cases} 1 & i \in \{0, n\} & j \in \{0, n\} \\ 2 & i \in [1, \ldots, n-2] & j \in \{1, n-1\} \\ 2 & i \in \{1, n-1\} & j \in [1, \ldots, n-1] \\ 4 & i \in [1, \ldots, n-2] & j \in [1, \ldots, n-2] \end{cases}$$

Integrali bidimensionali

- Se si usano i pesi della regola del trapezio, l'errore è ancora di ordine $O(h^2)$.
- Tuttavia vi sono ora n^2 valutazioni della funzione f.
- Si parla di campioni equispaziati su una regione quadrata.

Integrali multidimensionali

- In generale, per *D* dimensioni, occorre valutare la funzione ***N= n^D*** volte e quindi:

$$O\left(h^2\right)=O\left(n^{-2}\right)=O\left(\left(n^D\right)^{-\frac{2}{D}}\right)=O\left(N^{-\frac{2}{D}}\right)$$

- Se la dimensione è alta, il passaggio $h \rightarrow h/2$ richiede un grande lavoro di calcolo.
  - Vedere piu' avanti il metodo Monte-Carlo.

Polinomi di ordine superiore

Ricordiamo la formula di Newton-Cotes:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_{0+m_1}} p_{m_1}(x)dx + \int_{x_{0+m_1}}^{x_{0+m_1+m_2}} p_{m_2}(x)dx + \ldots + \int_{x_{n-m_n}}^{x_n} p_{m_n}(x)dx$$

m	Polinomio	Formula	Errore
1	lineare	Trapezio	$O(h^2)$
2	quadratico	Simpson 1/3	$O(h^4)$
3	cubico	Simpson 3/8	$O(h^4)$

Simpson 1/3

Interpoliamo ora con un polinomio di secondo grado (occorrono in questo caso 3 punti o 2 intervalli):

$$\left(x_1 = \frac{x_0 + x_2}{2} \right)$$

Inserendo il polinomio nella forma di Lagrange:

$$I \approx S_{1/3} = \int_{x_0}^{x_2} \left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2) \right] dx$$

Ricordiamo che: $x_0 = a, \;\; x_2 = b$

N.B. Con $S_{1/3}$ indichiamo l'approssimazione all'integrale I con la Simpson 1/3.

Simpson 1/3

Richiedendo intervalli equispaziati ($x_1=x_0+h$, $x_2=x_0+2h$) si ha:

$$I \approx S_{1/3} = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0-h)(x-x_0-2h)}{-h(-2h)} f(x_0)dx$$

$$+ \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_0-2h)}{h(-h)} f(x_1)\, dx$$

$$+ \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2h(h)} f(x_2)\, dx$$

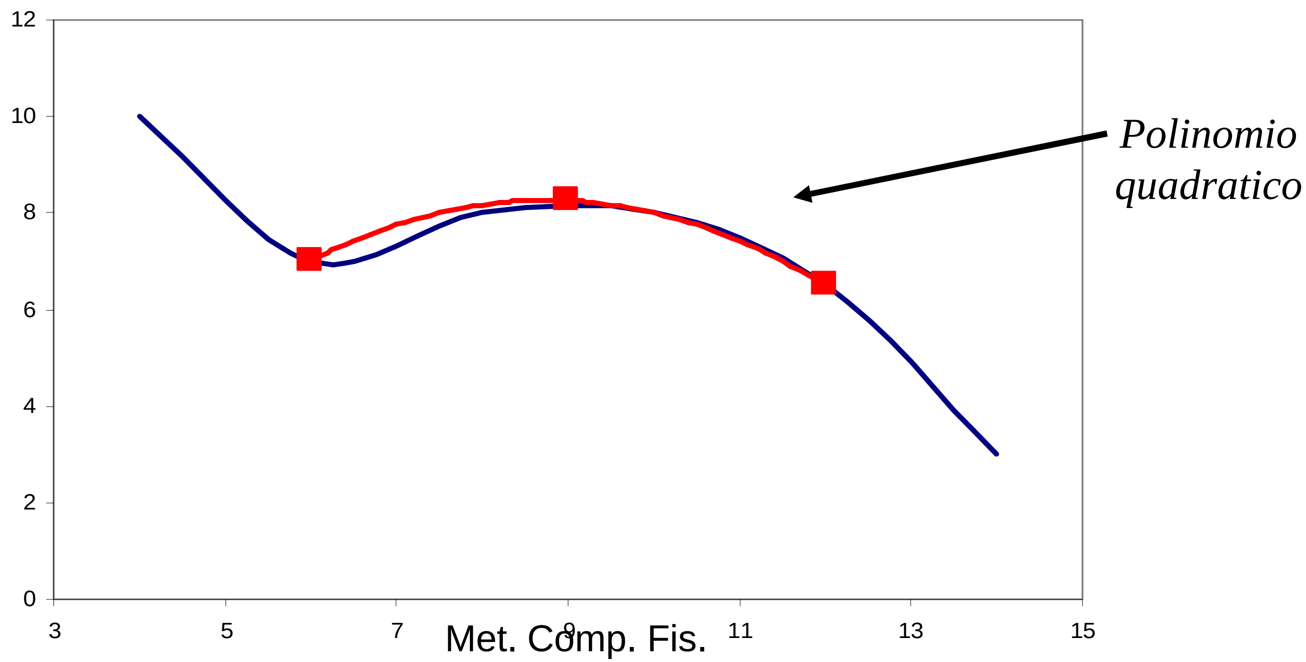
Simpson 1/3

Integrando e semplificando:

$$I \approx S_{1/3} = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]$$

$$h = \frac{b-a}{2}$$

ATTENZIONE !! Ora il singolo intervallo è lungo (b-a)/2 in quanto ci sono due intervalli in partenza !!



Simpson 1/3 (due soli intervalli)

L'errore per la regola 1/3 di Simpson vale:

$$\left|I - S_{1/3}\right| \equiv E_t = \frac{h^5}{90}\left|f^{(IV)}(\xi)\right| = \frac{(b-a)^5}{2880}\left|f^{(IV)}(\xi)\right|$$

$$\Rightarrow \quad E \approx O(h^5) \quad \text{con} \quad h = \frac{(b-a)}{2}$$

N.B. Se si integra una **cubica** il valore che si ottiene è esatto in quanto:

$$f^{(IV)}(\xi) = 0$$

Simpson 1/3 composta

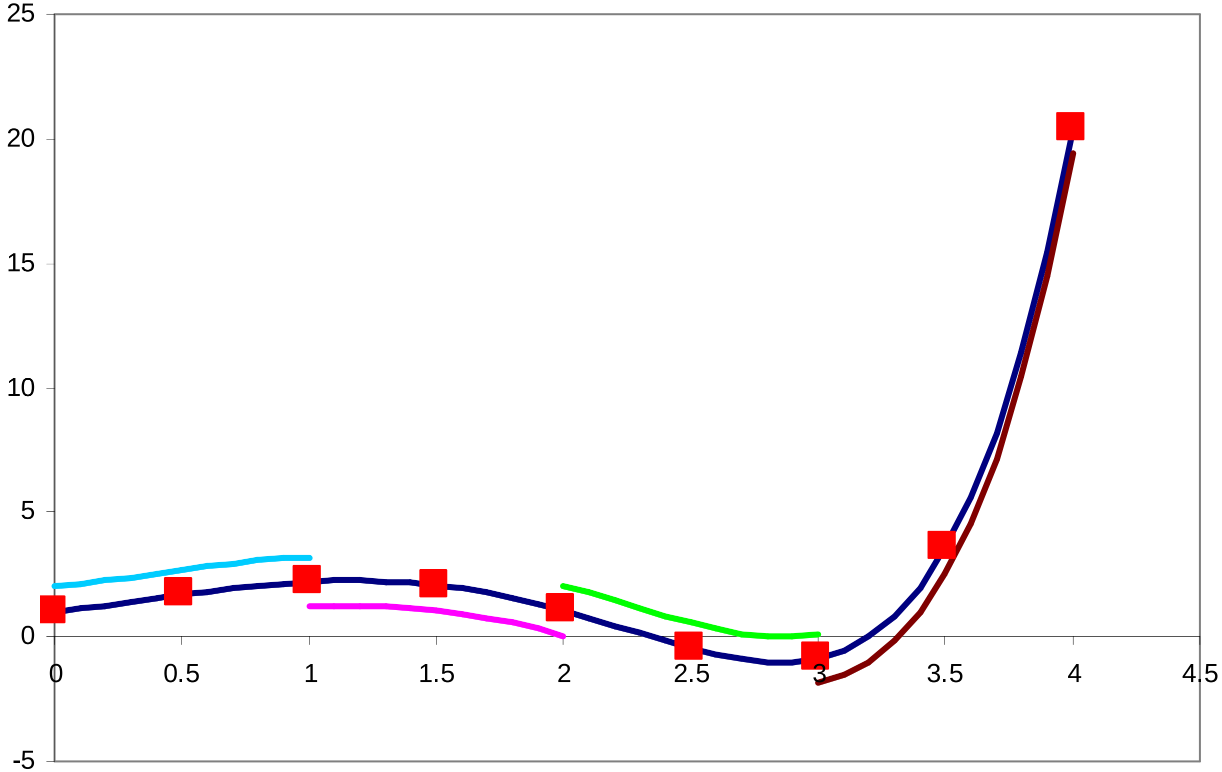
Come per la regola del trapezio si può suddividere l'intervallo (a,b) in n intervalli e applicare la regola 1/3 di Simpson varie volte.

N.B. *Poichè sono necessari un numero dispari di punti (una parabola passa per 3 punti) occorre un numero pari di intervalli.*

3,5,7,….2n+1 punti → 2,4,6,8,10,……2n intervalli

Simpson 1/3 composta

Esempio: 9 punti, 4 sotto-intervalli, 8 segmenti



Simpson 1/3 composta

- Come nella formula composta del trapezio suddividiamo l'integrale in *n*/2 sotto-integrali:

$$I = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \ldots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx$$

- Sostituiamo la regola 1/3 di Simpson per ogni integrale e raccogliamo i termini comuni:

$$I \approx S_{1/3} = (b-a)\frac{f(x_0) + 4\sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{j=2,4,6}^{n-2} f(x_j) + f(x_n)}{3n}$$

$n+1$ punti, un numero dispari

Simpson 1/3 composta

Riscriviamola come:

$$I \approx S_{1/3} = \frac{h}{3} f(x_0) + \frac{4h}{3} \sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i) + \frac{2h}{3} \sum_{i=2,4,6}^{n-2} f(x_i) + \frac{h}{3} f(x_n)$$

N.B. I coefficienti **dispari** hanno peso **4**, quelli **pari** peso **2**.

Come per la regola del trapezio è utile scrivere l'integrale approssimato come una **somma pesata:**

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) w_i$$

dove $$w_i = \left\{ \frac{h}{3}, \frac{4h}{3}, \frac{2h}{3}, \frac{4h}{3} \ldots, \frac{4h}{3}, \frac{h}{3} \right\}$$

Simpson 1/3: stima dell'errore

L'errore può essere stimato dalla formula:

$$\left| I - S_{1/3} \right| \equiv E_a = \frac{nh^5}{180}\overline{f^{(IV)}} = \frac{(b-a)h^4}{180}\overline{f^{(IV)}}$$

$$E_a \approx O(h^4)$$

h=(b-a)/n

$\overline{f^{(IV)}}$ è il valor medio della derivata quarta su (a,b)

Se si raddoppia n, $h \rightarrow h/2$ e $\boldsymbol{E_a \rightarrow E_a/16}$

Nel caso del trapezio era: $h \rightarrow h/2$ e $\boldsymbol{E_a \rightarrow E_a/4}$

Quindi la convergenza è più rapida con Simpson 1/3 !!

$$S_{1/3} = \frac{h}{3} f(x_0) + \frac{4h}{3} \sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i) + \frac{2h}{3} \sum_{i=2,4,6}^{n-2} f(x_i) + \frac{h}{3} f(x_n)$$

```
routine simpson(float func,float a,float b,int n)
float h,s_dispari,s_pari,,s
int j
h← (b-a)/2*n
s_dispari←0
s_pari←0
  for j=1 to n-1 by 1 do
       x←a+h*2*j
       s_pari←s_pari+func(x)
  end for
 for j=1 to n by 1 do
       x←a+h*(2*j-1)
       s_dispari←s_dispari+func(x)
  end for
  s=h*(func(a)+func(b)+2*s_pari+4*s_dispari)/3
  return(s)
```

input

func; funzione da integrare
n: ordine integrazione
a,b: estremi integrazione

output

s: integrale approssimato

Esempio Simpson 1/3 (un intervallo)

Integrare $f(x) = e^{-x^2}$ da a = 0 a b = 2 con Simpson 1/3:

$$h = \frac{b-a}{2} = 1 \qquad x_0 = a = 0 \qquad x_1 = \frac{a+b}{2} = 1 \qquad x_2 = b = 2$$

$$I = \int_0^2 e^{-x^2} dx \approx \frac{1}{3} h \left[f(x_0) + 4 f(x_1) + f(x_2) \right]$$

$$= \frac{1}{3} \left[f(0) + 4 f(1) + f(2) \right]$$

$$= \frac{1}{3} (e^0 + 4e^{-1} + e^{-4}) = 0.82994$$

Esempio (cont.)

Stima dell'errore: $$\left|I - S_{1/3}\right| \equiv E_t = \frac{h^5}{90}\left| f^{(IV)}(\xi)\right|$$

dove *h = (b – a)/2* e *a* < ξ < *b*

Poichè non conosco il valore di ξ si usa il valor medio (media sui 3 punti noti):

$$E_t \approx E_a = -\frac{1^5}{90}\bar{f}^{(4)} = -\frac{1^5}{90}\frac{\left[f^{(4)}(x_0) + f^{(4)}(x_1) + f^{(4)}(x_2)\right]}{3}$$

Secondo esempio

Integrare il polinomio:

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

da a = 0 a b = 0.8

$$h = \frac{b-a}{2} = 0.4 \qquad x_0 = a = 0 \qquad x_1 = \frac{a+b}{2} = 0.4 \qquad x_2 = b = 0.8$$

$$I = \int_0^2 f(x)dx \approx \frac{1}{3}h\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]$$
$$= \frac{(0.4)}{3}\left[f(0) + 4f(0.4) + f(0.8)\right]$$
$$= 1.36746667$$

Valore esatto: 1.64053334

Errore

L'errore vero (essendo noto il valore esatto) vale:

$$E = 1.64053334 - 1.36746667 = 0.27306666$$ 16%

Il valore stimato (se il valore esatto dell'integrale non è disponibile) vale:

$$E_t = \frac{h^5}{90}\left| f^{(IV)}(\xi) \right|$$

dove $a < \xi < b$.

Errore

Calcolando la derivata quarta

$$f^{(IV)}(x) = -21600 + 48000\,x$$

$$E_t \approx E_a = \frac{0.4^5}{90}\left|f^{(IV)}(x_1)\right| = \frac{0.4^5}{90}\left|f^{(IV)}(0.4)\right| = 0.27306667$$

Punto medio dell'intervallo di integrazione

Accordo abbastanza buono con il vero errore !!

Esempio(cont.)

Se si usano 4 segmenti invece di 2:

x = [0.0 0.2 0.4 0.6 0.8]

$$h = \frac{b-a}{n} = 0.2$$

$f(0) = 0.2$ $\quad f(0.2) = 1.288$ $\quad f(0.4) = 2.456$

$f(0.6) = 3.464$ $\quad f(0.8) = 0.232$

$$I \approx S_{1/3} = (b-a)\frac{f(x_0) + 4\sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{j=2,4,6}^{n-2} f(x_j) + f(x_n)}{3n}$$

$$= (0.8-0)\frac{f(0) + 4f(0.2) + 2f(0.4) + 4f(0.6) + f(0.8)}{(3)(4)}$$

$$= 0.8\frac{0.2 + 4(1.288 + 3.464) + 2(2.456) + 0.232}{12}$$

$$= 1.6234667$$

Valore esatto: 1.64053334

Errore

L'errore vero (se è noto il valore esatto di I) vale:

$$E = 1.64053334 - 1.6234667 = 0.01706667 \quad 1\%$$

L'errore stimato (se non è noto il valore esatto) vale:

$$E_t \approx E_a = \frac{0.2^5}{90}\left| f^{(IV)}(x_2) \right| = \frac{0.2^5}{90}\left| f^{(IV)}(0.4) \right| = 0.0085$$

Punto medio

Errore (cont.)

Perchè l'errore reale è due volte quello stimato?

Ricordiamo che:

$$f^{(IV)}(x) = -21600 + 48000x$$

$$\max_{x\in[0,0.8]}\left\{\left|f^{(IV)}(x)\right|\right\} = \left|f^{(IV)}(0)\right| = 21600$$

$$\left|f^{(IV)}(0.4)\right| = 2400$$

Errore (cont.)

Più che il valore di f $^{(IV)}$ nel punto medio si può considerare il max di f$^{(IV)}$ sull'intervallo

$$\left|E_a\right| = \left| -\frac{0.2^5}{90} f^{(4)}(\xi) \right| \le \frac{0.2^5}{90} \left| f^{(4)}(0) \right| = 0.0768$$

Cinque volte quello reale ma almeno si è più sicuri…

Simpson 1/3 in due dimensioni

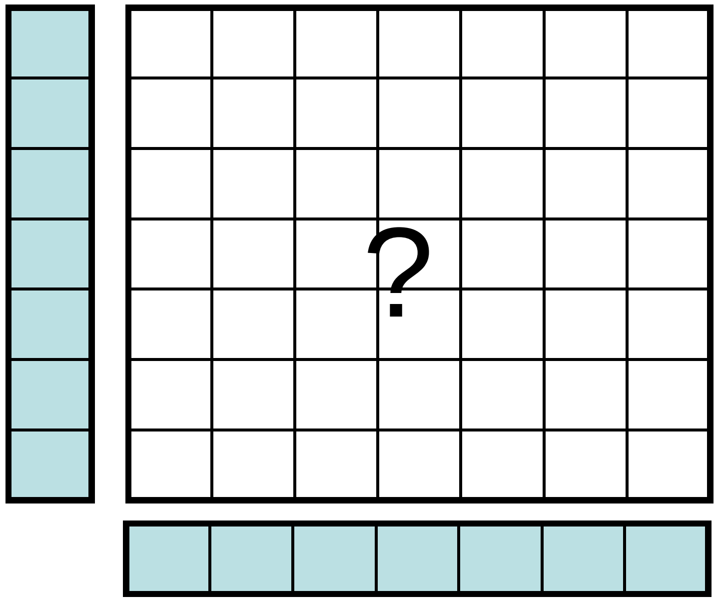
$$\int_0^1\int_0^1 f(x,y)\,dxdy \approx \int_0^1 \sum_{i=0}^{n} A_i f\left(\frac{i}{n},y\right)dy$$

$$= \sum_{i=0}^{n} A_i \int_0^1 f\left(\frac{i}{n},y\right)dy$$

$$\approx \sum_{i=0}^{n} A_i \sum_{j=0}^{n} A_j f\left(\frac{i}{n},\frac{j}{n}\right)$$

$$= \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} A_i A_j f\left(\frac{i}{n},\frac{j}{n}\right)$$

Simpson 1/3 in due dimensioni



Simpson 1/3

La regola 1/3 di Simpson usa un polinomio di ordine 2

- Ha bisogno di 3 punti (2 intervalli)
- Occorre un numero pari di intervalli.

E se il numero di intervalli è dispari ?

Due scelte possibili:

O usare la Simpson 1/3 su tutti i segmenti eccetto l'ultimo (o il primo), ed usare la regola del trapezio sul segmento rimasto.

Si avrà un errore più grande sul segmento dove si usa la regola del trapezio.

…. o usare la **regola di Simpson 3/8**

Regola di Simpson 3/8

La regola di Simpson 3/8 usa un polinomio di ordine 3

– Necessita di 3 intervalli (4 punti)

$$f(x) \approx p_3(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

$$\Rightarrow \quad I = \int_{x_0}^{x_3} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_3} p_3(x)dx \equiv S_{3/8}$$

Regola di Simpson 3/8 (3 intervalli)

I coefficienti *a* si determinano con la forma di Lagrange del polinomio passante per x_0, x_1, x_2, x_3.

Per punti equispaziati si avrà:

$$I \approx S_{3/8} = \frac{3}{8} h \left[f(x_0) + 3 f(x_1) + 3 f(x_2) + f(x_3) \right]$$

dove ora: $h = \dfrac{b-a}{3}$

Regola di Simpson 3/8 composta

Come per la regola del 1/3 di Simpson si può suddividere l'intervallo in n intervalli e applicare la regola 3/8 di Simpson più volte.

N.B. *In questo caso sono necessari un numero di punti multiplo di 4 (una cubica passa per 4 punti) occorre un numero multiplo di 3 di intervalli.*

$$w_i = \left\{ \frac{3h}{8}, \underbrace{\frac{9h}{8}, \frac{9h}{8}}, \frac{3h}{4}, \ldots, \underbrace{\frac{9h}{8}, \frac{9h}{8}}, \frac{3h}{4}, \frac{9h}{8}, \frac{9h}{8}, \frac{3h}{8} \right\}$$

Errore

L'errore è dello stesso ordine della regola 1/3.

- Più valutazioni della f.
- La larghezza dell'intervallo, *h*, è più piccola.

$$E_t = -\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi)$$

$$\Rightarrow \quad E_t \approx O(h^5) \quad \text{con} \quad h = (b-a)/3$$

Integra esattamente una cubica:

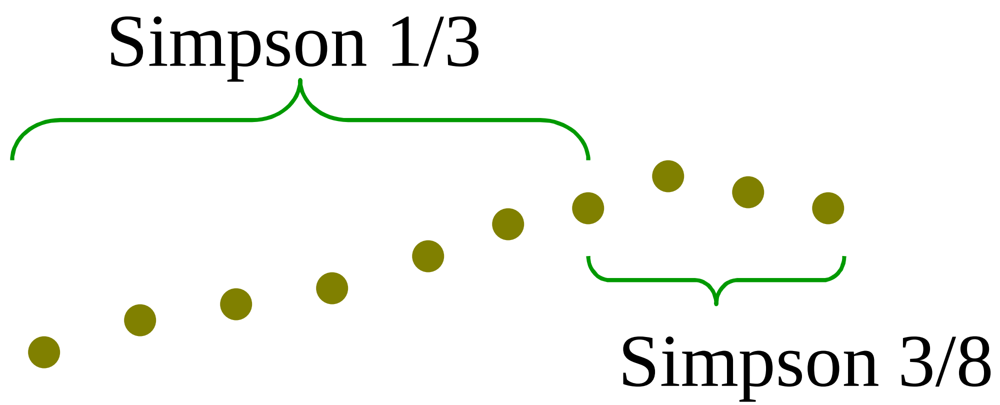
$$\Rightarrow \qquad f^{(IV)}(\xi) = 0$$

Confronto tra metodi

- Le regole 1/3 e 3/8 di Simpson hanno lo stesso ordine di errore $O(h^4)$
  - La regola del trapezio ha errore di ordine $O(h^2)$
- La regola 1/3 di Simpson richiede un **numero pari di segmenti.**
- La regola 3/8 di Simpson richiede **multipli di tre segmenti.**
- Entrambi i metodi richiedono punti **equispaziati.**

Tecniche miste

- n = 10 punti $\Rightarrow$ 9 intervalli
  - Primi 6 intervalli - Simpson 1/3
  - Ultimi 3 intervalli - Simpson 3/8



Errore d'integrazione e di arrotondamento

Si è visto che gli errori sugli algoritmi d'integrazione sono:

$$E_{trap} \propto \overline{f''(\zeta)}\, O\left(\frac{(b-a)^3}{n^2}\right),$$

$$E_{simps} \propto \overline{f^{IV}(\zeta)}\, O\left(\frac{(b-a)^5}{n^4}\right),$$

$$\varepsilon_{trap,simps} = \frac{E_{trap,simps}}{I}$$

Assumiamo che dopo n passi l'errore *relativo* di arrotondamento sia di tipo aleatorio e della forma

$$\varepsilon_{arro} \approx \sqrt{n}\, \varepsilon_m$$

dove ε_m è la precisione della macchina

Errore d'integrazione e di arrotondamento

Vogliamo determinare il valore di *n* che minimizza l'errore totale

$$\varepsilon_{tot} = \varepsilon_{arro} + \varepsilon_{appros}$$

Supponiamo che ciò si verifichi quando i due errori sono uguali;

$$\varepsilon_{arro} = \varepsilon_{appros} = \frac{E_{trap,simp}}{I}$$

Supponiamo per semplicità che

$$\frac{f^{(m)}}{f} \approx 1, \quad b - a = 1 \Rightarrow h = \frac{1}{n}.$$

Errore d'integrazione e di arrotondamento

Per la regola del trapezio si ha quindi:

$$\sqrt{n}\,\varepsilon_m \approx \frac{f''(\xi)(b-a)^3}{f\,n^2} = \frac{1}{n^2},$$

$$\Rightarrow \quad n \approx \frac{1}{(\varepsilon_m)^{2/5}}.$$

Quindi, a seconda della precisione usata si hanno, per la regola del trapezio, i seguenti valori:

$$n = \frac{1}{h} = \begin{cases} (1/10^{-9})^{2/5} = 3981, & \text{per singola precisone,} \\ (1/10^{-15})^{2/5} = 10^6, & \text{per doppia precisone} \end{cases}$$

Errore d'integrazione e di arrotondamento

Per la regola 1/3 di Simpson si ha invece:

$$\sqrt{n}\,\varepsilon_m \approx \frac{f^{iv}(\xi)(b-a)^5}{f\;n^4} = \frac{1}{n^4},$$

$$\Rightarrow \quad n \approx \frac{1}{(\varepsilon_m)^{2/9}}.$$

Quindi, a seconda della precisione usata si hanno, per la regola 1/3 di Simpson, i seguenti valori:

$$n = \frac{1}{h} = \begin{cases} (1/10^{-9})^{2/9} = 100, & \text{per singola precisone,} \\ (1/10^{-15})^{2/9} = 2154\;, & \text{per doppia precisone} \end{cases}$$

Programma riassuntivo in C++

integrazione.cpp

```
#include <iostream>
#include <fstream>
#include <cmath>
double f(double x);

int main(){
    using namespace std;
    int npoints,i;
    double size_int, x, deltaX,v1, v2, v3, v4;
    double w;   // Peso
    double fcalc;
     ofstream out;
    out.open("risultati.out");
    out<<"Risultati integrazione“<<endl;
    out<<"della funzione exp(x) integrata tra -1 e 1“<<endl;
    size_int=1.0;
       //____INPUT_DEI DATI___
        cout << "Inserire i valori di  npoints“<< endl;
        cin >> npoints;
        cout << "npoints = “<< npoints << endl;
        cout <<"------------------------------ “<< endl;
        cout<<"| N  esatto  sum  trap   Simp  |“<< endl;
        cout << "------------------------------ “<<endl;
        npoints = 2 * floor(npoints/2) + 1;
```


Continua ……

```
v1 = exp(1.0)-exp(-1.0); //____RISULTATO ANALITICO____
 deltaX = 2 * size_int/(npoints - 1);  // Larghezza intervallini
  v2 = 0; v3 = 0; v4 = 0;
  x = -size_int;    // Punto iniziale
  for (i = 1; i <= npoints; i++)
  {
      fcalc=f(x);
      w = 1; // SOMMMA FINITA
      v2 += w * fcalc;
       w = 1; // TRAPEZIO
      if(i == 1 || i == npoints){w = 1./2;} // Estremi
      v3 += w* fcalc;
     // SIMPSON 1/3
       w = 2; // Pari
      if(i == 2 * floor(i/2)){w = 4;} //  Dispari
      if(i == 1 || i == npoints){w = 1;} // Estremi
      v4 += w * fcalc;
      x += deltaX;  // Passaggio all'intervallo successivo
  }
  v2 *= deltaX;      v3 *= deltaX;    v4 *= deltaX/3;
  //_____DATA_OUTPUT_____
  cout.precision(10);
  out.precision(10);
  out<<npoints<<" "<<v1<<" "<<v2<<" "<<v3<<" "<<v4<< endl;
  cout<<npoints<<" "<<v1<<" "<<v2<<" "<<v3<<" "<<v4<< endl;
  return(1);
}
double f(double x) {return(exp(x));}
```

Risultati integrazione
della funzione exp(x) integrata tra -1 e 1

| N esatto sum trap   Simp |

----

11 2.35040238729 2.66684797073 2.35823184376 2.35042318068

101 2.35040238729 2.38134234621 2.35048073351 2.35040238938

1001 2.35040238729 2.35348933202 2.35040317076 2.35040238729

10001 2.35040238729 2.35071101125 2.35040239512 2.35040238729

100001 2.35040238729 2.35043324898 2.35040238737 2.35040238729

1000001 2.35040238729 2.35040547341 2.35040238725 2.35040238725

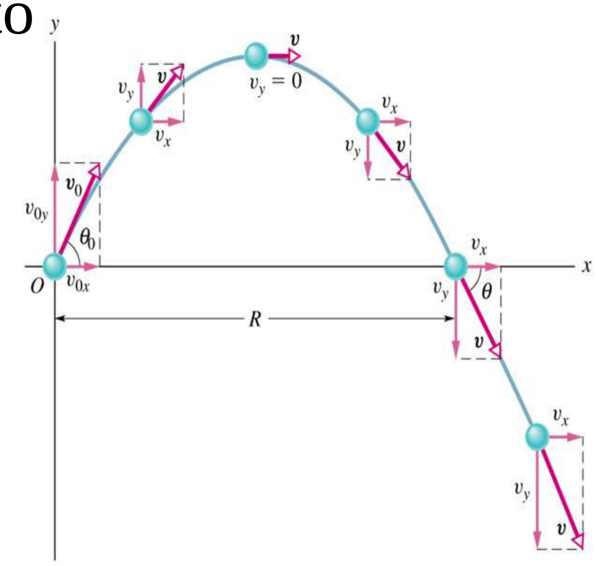
10000001 2.35040238729 2.35040269599 2.35040238737 2.35040238737

Esercizio 1: moto di un proiettile

• riconsiderare il problema del moto di un proiettile in presenza dell'**attrito** (**viscoso**) dell'aria, descritto dall'equazione del moto:

$$m\vec{a} = m\vec{g} - m\gamma\vec{v} \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} x(t) - x_0 = \dfrac{v_{0x}}{\gamma}\left(1 - e^{-\gamma t}\right) \\ y(t) - y_0 = \left(v_{0y} + \dfrac{g}{\gamma}\right)\dfrac{1}{\gamma}\left(1 - e^{-\gamma t}\right) - \dfrac{g}{\gamma}t \end{cases}$$



• **determinare** il **lavoro** compiuto dall'**attrito** con l'aria (assumere *m=1 kg*) usando uno degli ***algoritmi di integrazione*** descritti, e **verificare** il risultato sfruttando il *principio di conservazione dell'energia*.

Esercizio 1: moto di un proiettile

- **FACOLTATIVO:** **determinare** inoltre una ***funzione polinomiale*** che **interpola** la traiettoria, per i due valori di γ considerati.