Integrazione numerica

Matteo Duranti

matteo.duranti@pg.infn.it

(cfr. http://www.fisica.unipg.it/~borromeo/Appunti/FisComp/FisComp2014/pdf/integrali.pdf
https://pomax.github.io/bezierinfo/legendre-gauss.html
http://mathworld.wolfram.com/Legendre-GaussQuadrature.html)

Integrazione numerica

Sicuramente:

- integrali → somme
- infinitesimi → intervalli piccoli

In generale l'idea è quella di suddividere il range di integrazione in *N* intervalli:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{j=0}^N w_j f(x_j) \quad a \le x \le b$$

dove:

- N deve essere il più grande possibile (ma questo "costa" tempo CPU);
- w_i sono dei pesi che dipendono dal singolo intervallo scelto

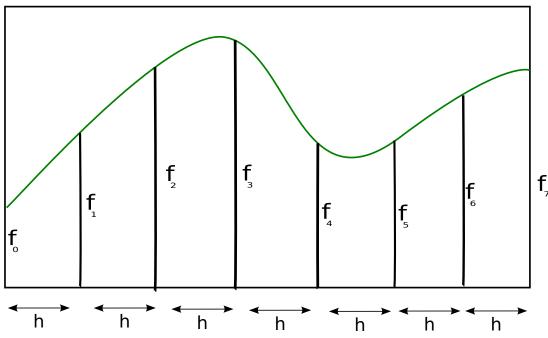
Integrazione a spaziatura fissa

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \longrightarrow x_{j} = a + h \cdot j \qquad 0 \le j \le N \qquad h = \frac{b - a}{N}$$

dove:

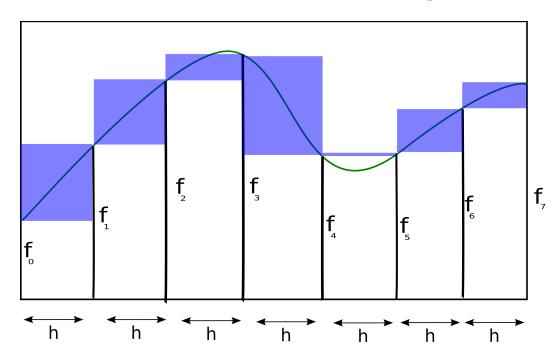
- h è la dimensione dell'intervallino;
- x_j è una posizione "caratteristica" ed univoca dell'intervallino (i.e. il bordo sinistro, ma anche il centro, quello destro, etc... sono scelte valide)

$$\begin{array}{c}
\Rightarrow \\
x_0 = a \\
x_N = b
\end{array}$$



Integrazione a spaziatura fissa: metodo del rettangolo

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{j=0}^N w_j f(x_j)$$



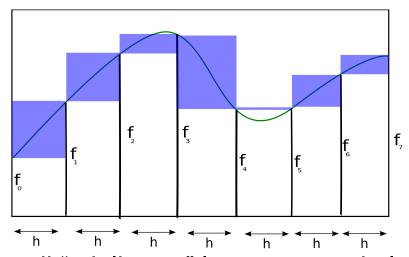
l'area di ogni intervallo viene calcolata come quella del rettangolo definito da h e f(xj):

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = h \sum_{j=0}^{N-1} f(x_{j}) \qquad \int_{a}^{b} f(x) dx = h \sum_{j=1}^{N} f(x_{j})$$

quindi:

$$- w_i = h$$

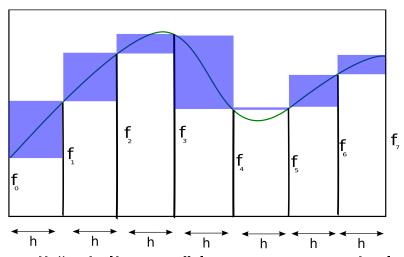
Integrazione a spaziatura fissa: sviluppo in serie di Taylor



Si può anche pensare di "migliorare" la cosa usando la formula di Taylor. Per ogni intervallo $[x_j, x_j+h]$:

$$\int_0^h f(x) dx = \int_0^h \left(f(0) + x \cdot f'(0) + O(x^2) \right) dx$$
$$= h \cdot f(0) + \frac{h^2}{2} f'(0) + O(h^3)$$

Integrazione a spaziatura fissa: sviluppo in serie di Taylor



Si può anche pensare di "migliorare" la cosa usando la formula di Taylor. Per ogni intervallo $[x_j, x_j+h]$:

$$\int_0^h f(x) dx = \int_0^h \left(f(0) + x \cdot f'(0) + O(x^2) \right) dx$$
$$= h \cdot f(0) + \frac{h^2}{2} f'(0) + O(h^3)$$

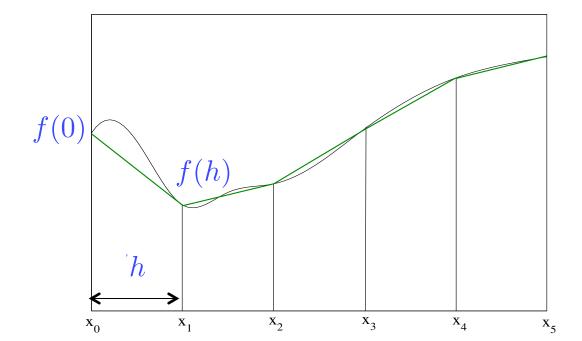
ovviamente questo lo possiamo fare se, oltre a conoscere $f(x_j)$, sappiamo anche f' (x_j) , cioè non è applicabile, ad esempio, se la nostra f(x) è una cosa, essa stessa, numerica:

double func(double x)

Integrazione a spaziatura fissa: sviluppo in serie di Taylor al primo ordine Per ogni intervallo $[x_i, x_i+h]$:

$$\int_0^h f(x) \, dx = \int_0^h \left(f(0) + x \cdot f'(0) + O(x^2) \right) \, dx$$
$$= h \cdot f(0) + \frac{h^2}{2} f'(0) + O(x^3)$$

Fra due generici punti, però, posso sempre "tracciare una lina" e f sarà, banalmente, il coefficiente angolare f'(0) = m = (f(h) - f(0))/h



Integrazione a spaziatura fissa: sviluppo in serie di Taylor al primo ordine Per ogni intervallo $[x_i, x_i+h]$:

$$\int_0^h f(x) \, dx = \int_0^h \left(f(0) + x \cdot f'(0) + O(x^2) \right) \, dx$$
$$= h \cdot f(0) + \frac{h^2}{2} f'(0) + O(x^3)$$

Fra due generici punti, però, posso sempre "tracciare una lina" e f' sarà, banalmente, il coefficiente angolare f'(0) = m = (f(h) - f(0))/h

andando a integrare su 2 intervalli:

$$\int_0^{2h} f(x)dx = \frac{h}{2} \cdot f(0) + h \cdot f(h) + \frac{h}{2} \cdot f(2h)$$

e generalizzando a N (tali da coprire tutto il range [a,b]):

$$\int_0^{Nh} f(x)dx = \frac{h}{2}f(0) + hf(h) + \dots + hf((N-1)h) + \frac{h}{2}f(Nh)$$

Integrazione a spaziatura fissa: sviluppo in serie di Taylor al primo ordine Per ogni intervallo $[x_i, x_i+h]$:

$$\int_0^h f(x) \, dx = \int_0^h \left(f(0) + x \cdot f'(0) + O(x^2) \right) \, dx$$
$$= h \cdot f(0) + \frac{h^2}{2} f'(0) + O(x^3)$$

"interpolando" linearmente e generalizzando a N (tali da coprire tutto il range [a,b]):

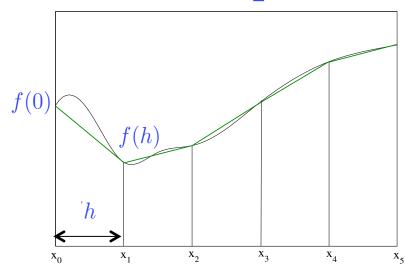
$$\int_0^{Nh} f(x)dx = \frac{h}{2}f(0) + hf(h) + \dots + hf((N-1)h) + \frac{h}{2}f(Nh)$$

che quindi, in generale, significa:

$$\int_{a}^{b} f(x) \, dx = \sum_{j=0}^{N} w_{j} f(x_{j})$$

$$- w_0 = w_5 = h/2$$

$$- w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = h$$

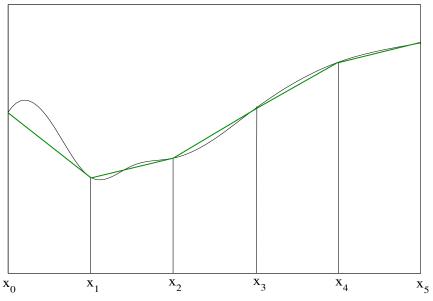


Integrazione a spaziatura fissa: metodo del trapezio

Invece che integrale tanti rettangolini possiamo pensare di fare meglio ed integrare tanti trapezi:

L'area di ogni trapezio sarà:

$$\frac{1}{2} (f_j + f_{j+1}) (x_{j+1} - x_j) = \frac{1}{2} (f_j + f_{j+1}) h$$



e quindi, nell'esempio con N=5, x0=a, x5=b:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx h \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot (f_0 + f_1) + \frac{1}{2} \cdot (f_1 + f_2) + \frac{1}{2} \cdot (f_2 + f_3) + \frac{1}{2} \cdot (f_3 + f_4) + \frac{1}{2} \cdot (f_4 + f_5) \right)$$

Cioè, in generale:

$$- w_0 = w_5 = h/2$$

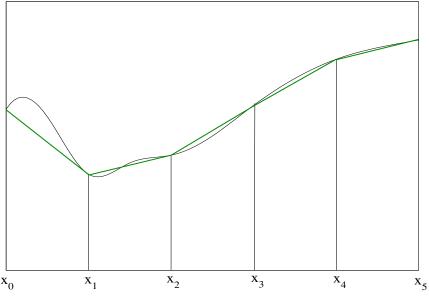
 $- w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = h$

Integrazione a spaziatura fissa: metodo del trapezio

Invece che integrale tanti rettangolini possiamo pensare di fare meglio ed integrare tanti trapezi:

L'area di ogni trapezio sarà:

$$\frac{1}{2} (f_j + f_{j+1}) (x_{j+1} - x_j) = \frac{1}{2} (f_j + f_{j+1}) h$$



e quindi, nell'esempio con N=5, x0=a, x5=b:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx h \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot (f_0 + f_1) + \frac{1}{2} \cdot (f_1 + f_2) + \frac{1}{2} \cdot (f_2 + f_3) + \frac{1}{2} \cdot (f_3 + f_4) + \frac{1}{2} \cdot (f_4 + f_5) \right)$$

Cioè, in generale:

$$- w_0 = w_5 = h/2$$

 $- w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = h$

Equivale a sviluppare in serie di Taylor, fermandosi al primo ordine

Assumiamo che l'integrale, nell'intervallo [xj, xj+2h], possa essere scritto così:

$$\int_0^{2h} f(x) \, dx = Af(0) + Bf(h) + Cf(2h)$$

Sviluppando la f(x) in serie di Taylor ed integrandola:

$$f(x) = f(0) + xf'(0) + \frac{1}{2}x^2f''(0) + \frac{1}{6}x^3f'''(0) + \frac{1}{24}x^4f^{iv}(0)$$

$$\int_0^{2h} f(x) dx = 2hf(0) + \frac{1}{2}(2h)^2f'(0) + \frac{1}{6}(2h)^3f''(0)$$

$$+ \frac{1}{24}(2h)^4f'''(0) + \frac{1}{120}(2h)^5f^{iv}(0) + O(h^6)$$

$$\int_0^{2h} f(x) dx = 2hf(0) + 2h^2f'(0) + \frac{4}{3}h^3f''(0)$$

$$+ \frac{2}{3}h^4f'''(0) + \frac{4}{15}h^5f^{iv}(0) + O(h^6)$$

$$\int_0^{2h} f(x) \, dx = Af(0) + Bf(h) + Cf(2h)$$

Se ora usiamo lo sviluppo per calcolare f(h) e f(2h):

$$= Af(0) + B \left[f(0) + hf'(0) + \frac{h^2}{2} f''(0) + \frac{h^3}{6} f'''(0) + \frac{h^4}{24} f^{iv}(0) \right]$$

$$+ C \left[f(0) + 2hf'(0) + 2h^2 f''(0) + \frac{4}{3} h^3 f'''(0) + \frac{2}{3} h^4 f^{iv}(0) \right]$$

$$= (A + B + C)f(0) + h(B + 2C)f'(0) + h^2 \left[\frac{B}{2} + 2C \right] f''(0)$$

$$+ h^3 \left[\frac{1}{6} B + \frac{4}{3} C \right] f'''(0) + h^4 \left[\frac{1}{24} B + \frac{2}{3} C \right] f^{iv}(0)$$

che dovrà essere uguale a:

$$=2hf(0)+2h^2f'(0)+\frac{4}{3}h^3f''(0)+\frac{2}{3}h^4f'''(0)+\frac{4}{15}h^5f^{iv}(0)+O(h^6)$$

$$\int_0^{2h} f(x) \, dx = Af(0) + Bf(h) + Cf(2h)$$

I coefficienti delle derivate dello stesso ordine dovranno coincidere:

1.
$$A + B + C = 2h$$

2.
$$h(B+2C) = 2h^2$$

3.
$$h^2(\frac{1}{2}B + 2C) = \frac{4}{3}h^3$$

4.
$$h^3(\frac{1}{6}B + \frac{4}{3}C) = \frac{2}{3}h^4$$

5.
$$h^4(\frac{1}{24}B + \frac{2}{3}) = \frac{4}{15}h^5$$

Le prime tre equazioni sono un sistema di 3 equazioni in 3 incognite. Sottraendo *h*/2 volte la seconda dalla terza, si ottiene:

$$C = \frac{h}{3}$$
 $B = 2h - \frac{2}{3} = \frac{4}{3}h$ $A = 2h - \frac{4}{3}h = \frac{1}{3}h$

E le altre due equazioni? Sono soddisfatte?

Prendiamo la quarta:

$$B + 8C = 4h$$
 con $B = \frac{4}{3}h$ e $C = \frac{1}{3}h$

$$\frac{4}{3}h + \frac{8}{3}h = \frac{12}{3}h = 4h$$

è soddisfatta. La quinta, invece, non lo è. Questo significa che

$$\int_0^{2h} f(x) \, dx = Af(0) + Bf(h) + Cf(2h)$$

non è in grado di descrivere una qualsiasi funzione. Ci sarà un errore di ordine h^5

5.
$$h^4(\frac{1}{24}B + \frac{2}{3}) = \frac{4}{15}h^5$$

La formula di Simpson integra, esattamente, i polinomi di grado non superiore al terzo.

Se prendiamo, infatti, x³, che sappiamo integrare "a mano":

$$\int_0^{2h} x^3 dx = \left| \frac{x^4}{4} \right|_0^{2h} = \frac{2^4 h^4}{4} = 4h^4$$

La formula di Simpson ci da esattamente lo stesso valore:

$$\int_0^{2h} f(x) dx = Af(0) + Bf(h) + Cf(2h)$$

$$C = \frac{h}{3} \qquad B = 2h - \frac{2}{3} = \frac{4}{3}h \qquad A = 2h - \frac{4}{3}h = \frac{1}{3}h$$

$$\Rightarrow \frac{1}{3}hf(x=0) + \frac{4}{3}hf(x=h) + \frac{1}{3}hf(x=2h)$$

$$= 0 + \frac{4}{3}h^4 + \frac{8}{3}h^4 = \frac{12}{3}h^4 = 4h^4$$

Nel caso generale dell'intervallo [a, b], diviso in tanti intervalli di ampiezza 2h:

Cioè, in generale:

-
$$w_0$$
 = w_N = 1/3 h
- w_1 = w_3 = ... = w_{N-3} = w_{N-1} = 4/3 h
- w_2 = w_4 = ... = w_{N-4} = w_{N-2} = 2/3 h

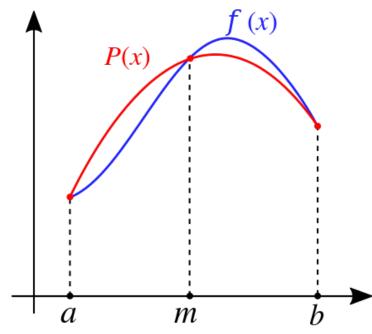
... ed è bene verificare che N sia multiplo di 2 ...

Aver ricondotto l'integrale ad un'espressione con 3 coefficienti liberi, *A*, *B* e *C*

$$\int_0^{2h} f(x) \, dx = Af(0) + Bf(h) + Cf(2h)$$

significa descrivere la f(x), all'interno di ogni intervallo, con una parabola

$$f(x) \approx P(x) = \alpha x^2 + \beta x + \gamma$$



Finora ci siamo limitati a intervalli regolari (spaziatura fissa) e l'unico modo per "migliorare" la precisione era quella di aumentare il grado dello sviluppo di Taylor, per integrare polinomi di ordine crescente.

Usando l'arbitrarietà nelle posizioni x_i , si possono trovare formule esatte.

Consideriamo, per semplicità, solo intervalli [-1, 1]. Ogni intervallo generico [a, b], potrà esservici ricondotto con un cambio di variabile:

$$\int_a^b f(x) dx \qquad x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}y$$

con
$$-1 \le y \le 1$$
, $dx = \frac{b-a}{2} dy$ ottengo

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}y) dy$$

Se suppongo di conoscere i punti x_j dove viene valutata la funzione, posso risalire ai pesi w_j per i quali deve essere moltiplicato $p(x_j)$ per rendere esatto l'integrale. Il sistema di N equazioni in N incognite w_j

$$\int_{-1}^{1} p(x)dx = \sum_{j=1}^{N} w_j \cdot p(x_j)$$

da' una soluzione unica se si conderano i primi N monomi $1, x, x^2, x^3, \ldots, x^{N-1}$ e le loro combinazioni lineari, quindi tutti i polinomi di grado inferiore a N.

Posso allora usare la scelta degli x_j per integrare anche polinomi di grado superiore.

Definisco i polinomi di Legendre $P_n(x)$.

$$P_{0}(x) = 1 P_{1}(x) = x$$

$$nP_{n}(x) = (2n-1)xP_{n-1}(x) - (n-1)P_{n-2}(x)$$

$$n=0$$

$$n=1$$

$$n=2$$

$$n=3$$

$$n=4$$

$$n=5$$

$$n=4$$

$$n=4$$

$$n=5$$

$$n=4$$

$$n=$$

 $2P_2(x) = 3xP_1(x) - P_0(x) = 3x^2 - 1 \Longrightarrow P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$

Se p(x) è un polinomio di grado 2N-1 posso scrivere

$$p(x) = q(x)P_N(x) + r(x)$$

dove q(x) e r(x) sono rispettivamente quoziente e resto, entrambi di grado N-1.

Ne segue in particolare che:

$$\int_{-1}^{1} p(x) dx = \int_{-1}^{1} q(x) P_N(x) dx + \int_{-1}^{1} r(x) dx$$

Sfrutto ora una particolare proprietà dei polinomi di Legendre, quella di essere ortogonali a tutti i polinomi di grado inferiore, cioè

$$\int_{-1}^{1} q(x)P_N(x) dx = 0 \quad \text{se} \quad q(x) \quad \text{è di grado inferiore a}$$

$$\int_{-1}^{1} p(x) dx = \int_{-1}^{1} r(x) dx = \sum_{k=1}^{N} w_k r(x_k)$$

L'integrazione del polinomio di grado 2N-1 è ridotta a quella di un polinomio di grado N-1, che però non conosco.

Uso l'arbitrarietà nello scegliere x_j per liberarmi di r(x)Poiché

$$p(x) = q(x)P_N(x) + r(x)$$

Scelgo per x_j i valori degli N zeri di $P_N(x)$, che esistono e sono reali. Allora, dato che

$$p(x_j) = q(x_j)P_N(x_j) + r(x_j) = r(x_j)$$

trovo

$$\int_{-1}^{1} p(x) dx = \sum_{k=1}^{N} w_k r(x_k) = \sum_{k=1}^{N} w_k p(x_k)$$

- gli $N x_k$ sono gli zeri di $P_N(x) \rightarrow$ tabulati
- si dimostra che anche gli w_k non dipendono da p(x), q(x) e r(x) ma solo da P_N(x) → tabulati

Per una generica funzione f(x) si scriverà:

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx = \sum_{k=1}^{N} w_k f(x_k)$$

Questa formula a N punti è esatta per polinomi fino al grado 2N-1. Integra bene funzioni polinomiali o che assomigliano a polinomi.

Non va usata con funzioni come: e^{-x} ed e^{-x^2}

- gli N x_k sono gli zeri di P_N(x) → tabulati
- si dimostra che anche gli w_k non dipendono da p(x), q(x) e r(x) ma solo da P_N(x) → tabulati

TABLE OF THE ZEROS OF THE LEGENDRE POLYNOMIALS OF ORDER 1-16 AND THE WEIGHT COEFFICIENTS FOR GAUSS' MECHANICAL QUADRATURE FORMULA¹

ARNOLD N. LOWAN, NORMAN DAVIDS AND ARTHUR LEVENSON

Gauss' method of mechanical quadrature has the advantage over most methods of numerical integration in that it requires about half the number of ordinate computations. This is desirable when such computations are very laborious, or when the observations necessary to determine the average value of a continuously varying physical quantity are very costly. Gauss' classical result² states that, for the range (-1, +1), the "best" accuracy with n ordinates is obtained by choosing the corresponding abscissae at the zeros x_1, \dots, x_n of the Legendre polynomials $P_n(x)$. With each x_i is associated a constant a_i such that

(1)
$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \sim a_1 f(x_1) + a_2 f(x_2) + \cdots + a_n f(x_n).$$

The accompanying table computed by the Mathematical Tables Project gives the roots x_i for each $P_n(x)$ up to n=16, and the corresponding weight coefficients a_i , to 15 decimal places.

The first such table, computed by Gauss gave 16 places up to n=7.3 More recently work was done by Nyström,⁴ who gave 7 decimals up to n=10, but for the interval (-1/2, +1/2). B. de F. Bayly has given the roots and coefficients of $P_{12}(x)$ to 13 places.⁵

The Gaussian quadrature formula for evaluating an integral with arbitrary limits (p, q) is given by

Oct 25, 1941

Presented to the Society, October 25, 1941, under the title Tables for Gauss' mechanical quadrature formula; received by the editors December 18, 1941.

¹ The results reported here were obtained in the course of the work done by the Mathematical Tables Project conducted by the Work Projects Administration for New York City under the sponsorship of the National Bureau of Standards, Dr. Lyman J. Briggs, Director.

- gli $N x_k$ sono gli zeri di $P_N(x) \rightarrow$ tabulati
- si dimostra che anche gli w_k non dipendono da p(x), q(x) e r(x) ma solo da P_N(x) → tabulati

Qui un codice Mathematica per calcolare nodi e zeri:

```
symboliclegendre[n_, x_] := Solve[LegendreP[n, x] == 0];
legendreprime[n_, a_] := D[LegendreP[n, x], x] /. x → a;
weights[n_, x_] := 2 / ((1 - x^2) legendreprime[n, x]^2);
(*how many terms should be generated*)
h = 10;
(*what numerical precision is desired?*)
precision = 16;
```

Qui un codice Mathematica per calcolare nodi e zeri:

```
str = OpenWrite["~/Desktop/lgvalues.txt"];
Do
  WriteString[str,
   "\n = ",
   n,
   "\n"
  ];
  WriteString[str,
   "i = \t\t\t weight, w {i} \t\t\t abscissa x {i}\n"
  ];
  Print[
   "\n = ",
  1;
  Print[
   "i \t\t\t weight, w {i} \t\t\t abscissa x {i}"
  nlist = symboliclegendre[n, x];
  xnlist = x /. nlist;
  Do
   WriteString str,
    i,
    ": \t\t\t ",
    ScientificForm[Re[N[weights[n, Part[xnlist, i]], {Infinity, precision}]],
       NumberFormat \rightarrow (#1 <> "*10^(" <> #3 <> ")" &) ] // ToString,
    " \t\t\t ",
    ScientificForm Re[N[Part[xnlist, i], {Infinity, precision}]],
       NumberFormat \rightarrow (#1 <> "*10^(" <> #3 <> ")" &) ] // ToString,
     "\n"
```

Qui un codice Mathematica per calcolare nodi e zeri:

```
Print[
    i,
    ": \t\t\t ",
    Re[N[weights[n, Part[xnlist, i]], {Infinity, precision}]],
    " \t\t\t ",
    Re[N[Part[xnlist, i], {Infinity, precision}]]
    ]
    , {i, Length[xnlist]};
    , {n, 2, h}];
Write[str];
Close[str];
```

E qui il suo output:

```
n = 2
i
                weight, w_{i}
                                              abscissa x_{i}
                 1.0000000000000000
                                                  -0.577350269189626
1:
2:
                 1.0000000000000000
                                                  0.577350269189626
n = 3
i
                 weight, w_{i}
                                              abscissa x_{i}
                                                  0. \times 10^{-16}
                 0.88888888888889
1:
2:
                 0.55555555555556
                                                  -0.774596669241483
3:
                 0.5555555555556
                                                  0.774596669241483
n = 4
i
                 weight, w_{i}
                                              abscissa x_{i}
1:
                 0.652145154862546
                                                  -0.339981043584856
2:
                 0.652145154862546
                                                  0.339981043584856
3:
                 0.347854845137454
                                                  -0.861136311594053
                 0.347854845137454
                                                  0.861136311594053
4:
n = 5
i
                 weight, w_{i}
                                              abscissa x_{i}
                                                  0. \times 10^{-16}
1:
                 0.568888888888889
2:
                 0.478628670499366
                                                  -0.538469310105683
```

E qui il suo output:

```
0.236926885056189
                                                 -0.906179845938664
                0.236926885056189
5:
                                                 0.906179845938664
n = 6
i
                weight, w_{i}
                                             abscissa x_{i}
1:
                0.3607615730481386
                                                  0.6612093864662645
2:
                0.3607615730481386
                                                  -0.6612093864662645
3:
                0.4679139345726910
                                                  -0.2386191860831969
4:
                0.4679139345726910
                                                  0.2386191860831969
5:
                0.1713244923791703
                                                  -0.9324695142031520
                0.1713244923791703
                                                  0.9324695142031520
6:
n = 7
                weight, w_{i}
                                             abscissa x_{i}
i
                                                 0. \times 10^{-16}
1:
                0.417959183673469
2:
                0.3818300505051189
                                                  0.4058451513773972
3:
                0.3818300505051189
                                                  -0.4058451513773972
4:
                0.2797053914892767
                                                  -0.7415311855993944
5:
                0.2797053914892767
                                                  0.7415311855993944
6:
                0.1294849661688697
                                                  -0.9491079123427585
7:
                0.1294849661688697
                                                  0.9491079123427585
```