Lezione 4
Quadratura Numerica

http://idefix.mi.infn.it/~palombo/didattica/Lab-TNDS/CorsoLab/LezioniFrontali

Fernando Palombo

Scopo della Quadratura Numerica

Calcolare con metodi numerici un integrale definito di una funzione f(x) in un intervallo [a, b] e stimare l'errore commesso in questo calcolo.

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

Il calcolo approssimato di questo integrale si rende necessario quando:

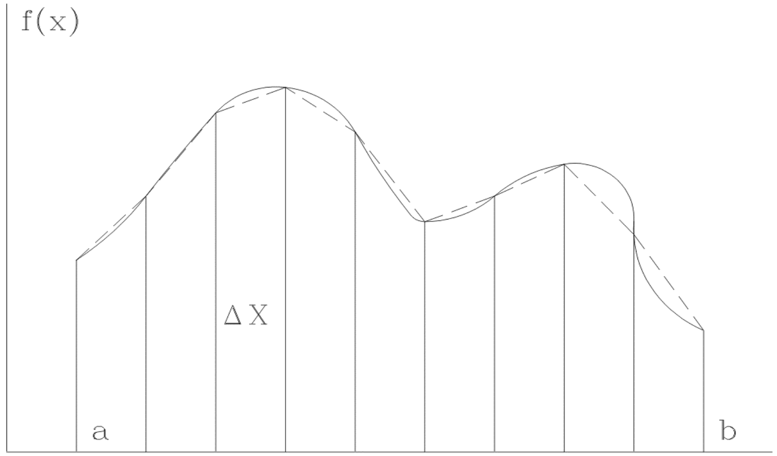
- non si sa calcolarlo in modo analitico (esatto);

- quando non si sa esprimere la primitiva con funzioni elementari;

- quando il calcolo esatto pur possibile è molto complicato. La soluzione numerica spesso oltre che più semplice è anche più precisa;

- quando la funzione integranda è conosciuta in un numero finito di punti (o proviene da misure sperimentali).

Approssimazione Polinomiale



La quadratura numerica si basa quasi sempre sull'approssimazione polinomiale.

Si considerano n+1 punti distinti tra [a, b] e il polinomio interpolatore per gli n+1 nodi

$(a,f(a)), \ldots , (x_i, f(x_i)), \ldots, (b,f(b))$

L'integrale definito tra [a, b] è approssimato dalla formula di quadratura:

$$I(f) \approx Q_n(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i)$$

Gli α_i sono detti pesi. Il loro valore dipende dalla formula di approssimazione adottata.

Se la curva è approssimata in ogni intervallo con una retta, il valore approssimato dell'integrale e è la somma delle aree dei trapezi

Quadratura con Interpolazione Polinomiale

L'interpolazione della funzione f(x) comporta un errore che si riflette in un errore sull'integrale della funzione (f(x):

$E_n(f) = I(f) - Q(f)$ $\qquad$ n = grado del polinomio interpolatore

Se la funzione f(x) fosse un polinomio di grado n, la formula di quadratura darebbe un valore esatto della quadratura.

Noi diciamo che una formula di quadratura ha grado di **precisione (o esattezza) n** se fornisce un risultato esatto quando applicata a polinomi di grado n oppure inferiore ad n

Noi consideriamo qui solo formule semplici (e classiche) in cui i nodi sono equidistanziati

Formule di Quadratura di Newton-Cotes

La caratteristica di queste formule è quella di avere nodi equidistanti sull'asse x. Se l'integrale è esteso all'intervallo chiuso [a, b] i nodi sono scelti cosi:

$x_i = a + ih \quad i = 0,1, \ldots, n \qquad h = (b-a)/n$ passo della quadratura.

La funzione integranda è interpolata nei punti $(x_o, f(x_0)), \ldots, (x_n, f(x_n))$

L'integrale viene approssimato dall'area della superficie sottesa dal polinomio :

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

dove n è il grado del polinomio interpolante

Formule di Quadratura di Newton-Cotes

Noi abbiamo già visto il resto di interpolazione di una funzione f(x). L'errore di quadratura corrispondente si ottiene integrando questo resto su tutto l'intervallo [a, b] di integrazione:

$$E_n(f) = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}dx$$

Questi integrali possono includere gli estremi di integrazione e le formule si dicono chiuse oppure non includere gli estremi e le formule si dicono aperte. Noi consideriamo qui solo formule chiuse di Newton-Cotes.

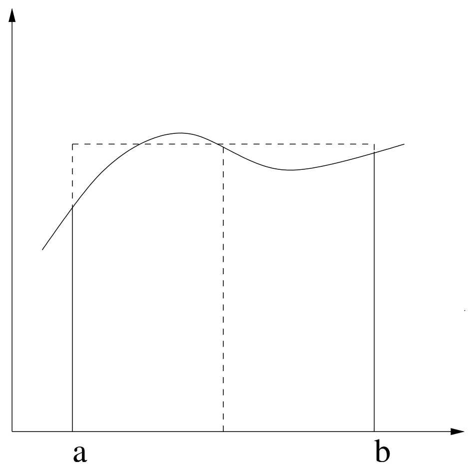
Esistono formule di quadratura del tipo Newton-Cotes con vari gradi di polinomi interpolanti. Sino ad $n = 8$ queste formule hanno anche un nome!

Noi consideriamo le formule con $n = 0$, 1 e 2 . Le formule più usate sono quelle con $n = 1$ e $n = 2$

Formula del Punto Medio

In questo metodo la funzione f(x) è approssimata con una costante (retta parallela all'asse x) e quindi **n=0** . Il valore approssimato dell'integrale è dato da :

$$\mathbf{Q_0(f) = h\, f((a+b)/2)} \quad \text{con } h = b - a$$



Il **grado di precisione** della formula è 1

L'errore commesso nella quadratura è :

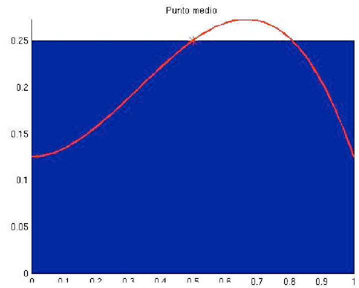
$\mathbf{E_0(f) = h^3 f''(\xi)/24}$ con ξ appartenente ad [a, b]

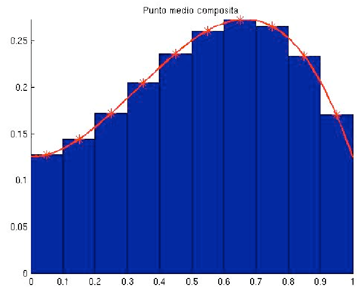
Questo errore può essere ridotto se suddividiamo l'intervallo [a, b] in N sottointervalli uguali e in ognuno di questi applichiamo la formula vista.

Formula del Punto Medio Composta

Se suddividiamo l'intervallo [a, b] in N sottointervalli uguali il nuovo passo costante è $H = (b-a)/N$ e $x_j = a + j H$ con $j = 0, 1, \ldots, N$

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{j=1}^{N} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx$$





$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{N} H f(m_j) = H \sum_{j=1}^{N} f(m_j) = \frac{b-a}{N} \sum_{j=1}^{N} f(m_j)$$

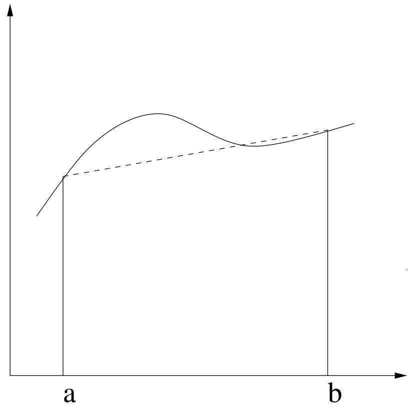
$m_j = a + (2j + 1) H/2$, $j=0,1, \ldots, N-1$, punto medio dell'intervallo j-esimo. Si noti che i pesi non dipendono da f(x) e neanche da a e b ma solo da b-a ed N

In questa formula composta l'errore nella quadratura è:

$$E_0^C = \frac{1}{24} H^3 \sum_{j=1}^{N} f''(\xi_j) = \frac{h^3}{24N^2} f''(\hat{\xi}) \qquad \text{con} \qquad f''(\hat{\xi}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} f''(\xi_j)$$

Formula dei Trapezi (o di Bezout)

In questa formula la funzione è approssimata con un polinomio di primo grado (n=1). I nodi sono i punti (a, f(a)) e (b, f(b)) e la retta approssimante è quella passante per questi due punti .



$$I(f) \approx Q_1(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

$Q_1(f)$ dato dall'area del trapezio. Errore nella quadratura:

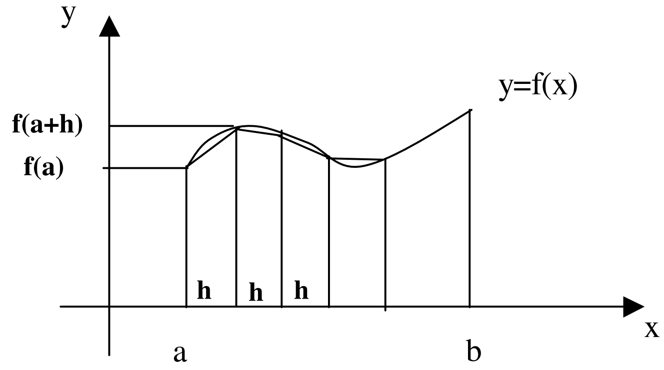
$$E_1(f) = -\frac{h^3}{12}f''(\xi)$$ con ξ appartenente ad [a, b]

Grado di precisione della formula uguale ad 1

Formula dei Trapezi Composta

Anche in questa formula l'errore nella quadratura può essere ridotto suddividendo l'intervallo in N sottointervalli. In questo caso la formula composta si scrive:

$$I(f) \approx Q_1(f) = \frac{b-a}{2N}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{j=1}^{N-1} f(x_j)\right]$$



L'errore di quadratura è:

$$E_1(f) = \sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{1}{12}\frac{(b-a)^3}{N^2} f''(\xi_j)\right) = -\frac{h^3}{12N^2} f''(\hat{\xi}) \qquad f''(\hat{\xi}) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} f''(\xi_j)$$

I pesi anche qui non dipendono dalla funzione ma solo da b-a ed N

Formula di Simpson (o di Cavalieri-Simpson)

In questa formula la funzione è approssimata da un polinomio di secondo grado (n=2) e i nodi sono i punti: (a, f(a)), [(a+b)/2, f((a+b)/2)] e (b, f(b)).

Non immediato decidere quali sono i pesi. Calcoliamoli in modo generale approssimando le funzioni con polinomi di Lagrange. Consideriamo un unico sottointervallo di ampiezza [0, 2h]. L'integrale della funzione in questo sottointervallo è dato da:

$$\int_0^{2h} f(x)dx = \sum_{i=0}^{2} f(x_i)W_i = \sum_{i=0}^{2} f(x_i)\int_0^{2h} L_i(x)dx$$

I pesi sono dunque dati da : $W_i = \int_0^{2h} L_i(x)dx$

ed i nodi hanno ascisse x = 0, x = h e x = 2h

Formula di Simpson (o di Cavalieri-Simpson)

I primi tre polinomi interessati sono:

$$L_0(x) = \frac{(x-h)(x-2h)}{2h^2} = \frac{x^2 - 3xh + 2h^2}{2h^2}$$

$$L_1(x) = \frac{(x-0)(x-2h)}{h^2} = \frac{x^2 - 2xh}{h^2}$$

$$L_2(x) = \frac{(x-0)(x-h)}{2h^2} = \frac{x^2 - xh}{2h^2}$$

I pesi sono perciò:

$$W_0 = \int_0^{2h} L_0(x)dx = \frac{8h^3/3 - 12h^3/2 + 4h^3}{12h^2} = \frac{h}{3}$$

$$W_1 = \int_0^{2h} L_1(x)dx = \frac{8h^3/3 - 8h^3/2}{h^2} = \frac{4h}{3}$$

$$W_2 = \int_0^{2h} L_2(x)dx = \frac{8h^3/3 - 4h^3/2}{h^2} = \frac{h}{3}$$

Formula di Simpson (o di Cavalieri-Simpson)

Notiamo che per ragioni pratiche l'intervallo è stato preso 2h. Se l'intervallo è h allora i pesi sono h/6, 4h/6 e h/6.

Notiamo che la somma dei pesi deve essere uguale ad h, quindi

W3 = 1- (W1 + W2)

La formula di quadratura di Simpson è:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{6}\left[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right]$$

L'errore di quadratura di questa formula è:

$$E_2(f) = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\xi)$$ con ξ appartenente ad [a, b]

Formula di Simpson Composta

La formula di Simpson composta si scrive:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{6N}\left[f(x_0) + 2\sum_{j=1}^{N-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=0}^{N-1} f(x_{2j+1}) + f(x_{2N})\right]$$

dove $x_j = j\,(b-a)/2N$, $j = 0,1, \ldots\ldots, 2N$

L'errore di quadratura per questa formula è:

$$E_2(f) = -\frac{(b-a)^5}{180 \cdot 2^4 N^4} f^{(4)}(\hat{\xi}) \qquad f^{(4)}(\hat{\xi}) = \tfrac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} f^{(4)}(\xi_j)$$

$\hat{\xi} \in [a,b]$

Si noti che l'errore va come la derivata quarta della funzione e quindi la formula dà un valore esatto per polinomi di **terzo grado** anche se il polinomio interpolante è di **grado 2**. La formula di Simpson è **iperefficiente**

Questa è una particolarità di questa formula (e anche per questo molto usata!)

Quadratura di Romberg

Le formule dei trapezi e di Simpson permettono quadrature con errori che sono dell'ordine di h^2 e h^4 indicando con $h = (b-a)/N$

Utilizzando la tecnica di estrapolazione di Richardson vogliamo ottenere una formula con maggiore accuratezza a partire da formule con accuratezza minore come visto per la derivazione numerica.

Consideriamo la formula dei trapezi e supponiamo f(x) abbastanza regolare da ammettere derivate successive (ora almeno quarta). Possiamo perciò pensare di sviluppare l'errore di quadratura in serie di h^2, scrivendo:

$$I = Q(h) + a^{(1)}h^2 + a^{(2)}h^4 + O(h^6) \qquad (1)$$

con $$Q(h) = \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{j=1}^{N-1} f(x_j)\right]$$

dove i coefficienti $a^{(1)}$ e $a^{(2)}$ non dipendono da h

Quadratura di Romberg

Rifacciamo il calcolo prendendo un passo uguale ad h/2:

….. (2)

Dalle relazioni (1) e (2) possiamo eliminare il termine in h^2, ottenendo:

$$I = \left[\frac{2^2 Q(h/2) - Q(h)}{2^2 - 1}\right] + a_1^{(2)} h^4 + O(h^6)$$

Il termine Q tra parentesi quadre approssima l'integrale con un errore dell'ordine di h^4 meglio (di due ordini) della stima fatta con Q(h) e Q(h/2)

$$I(f) \approx \frac{4}{3} I(h/2) - \frac{1}{3} I(h)$$

Quadratura di Romberg

Avendo misurato Q(h) e Q(h/2) possiamo scrivere:

$$I(f) \approx Q(h) + a^{(1)} h^2$$
$$I(f) \approx Q(h/2) + a^{(1)} (h/2)^2$$

Da queste ricaviamo che : $a^{(1)} \approx \dfrac{Q(h) - Q(h/2)}{(h/2)^2 - h^2}$

La conoscenza della stima dell'errore permette, data una certa tolleranza nell'approssimazione dell'integrale, di decidere se bisogna ulteriormente migliorare la quadratura della funzione.

La procedura può essere iterata considerando intervalli h/4, ecc, migliorando ulteriormente l'approssimazione.

Questa formula di quadratura con estrapolazione è detta di Romberg

Algoritmi di Quadratura Adattivi

Nelle formule di quadratura viste il passo dell'integrazione è costante. Fissata una tolleranza ε, si può scegliere un passo sufficientemente piccolo (controllare sempre che non sia troppo piccolo!) da permettere un errore di quadratura al di sotto della tolleranza.

Spesso però il passo di integrazione costante non è ottimale. Ci possono essere regioni di integrazione della funzione dove una quadratura precisa necessita di molti nodi . La funzione può essere fortemente variabile ed il passo va scelto più piccolo . Diversa la situazione dove la funzione varia poco .

È possibile fare in modo che l'algoritmo autonomamente scelga il passo migliore nelle varie zone in relazione al comportamento della funzione.

L'algoritmo in ogni zona di integrazione verifica se il passo è ottimizzato o se bisogna restringerlo, confrontando l'errore di quadratura aspettato con la tolleranza. Per la formula di Simpson il test è : $\frac{(b-a)^5}{180 \cdot 2^4 N^4} f^{(4)}(\hat{\xi}) < \varepsilon$