APPUNTI DI CALCOLO NUMERICO

Integrazione numerica: formule di quadratura

Introduzione

La quadratura numerica riguarda l'approssimazione di integrali definiti $\int_a^b f(x)dx$.

È particolarmente utile nel caso in cui non si conosca una espressione analitica della funzione, ad esempio quando quest'ultima è nota solo in certi punti detti nodi, oppure nel caso in cui non esista una primitiva della funzione o non sia possibile risolvere l'integrale con metodi elementari.

Le formule di quadratura numerica approssimano gli integrali con somme pesate:

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

dove con x_i si indicano i nodi e con w_i si indicano i rispettivi pesi.

Formule interpolatorie

Si parte dall'approssimazione per interpolazione della funzione. Una volta determinato il polinomio interpolante costruito sui nodi a disposizione, lo si integra al posto della funzione.

Consideriamo una funzione $f(x)$. Scriviamone il polinomio interpolante sella forma di Lagrange:

$$p_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i(x)$$

quindi integrando:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b p_{n-1}(x)dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \int_a^b l_i(x)dx\,.$$

Definiamo pesi le quantità $w_i = \int_a^b l_i(x)dx$.

Se i nodi sono equidistanti le formule ottenute si chiamano formule di Newton-Cotes. Inoltre se gli estremi di integrazione a e b sono dei nodi della funzione, allora si parla di formule chiuse altrimenti si dicono formule aperte.

Questo è uno dei modi di determinare i pesi delle formule di quadratura.

Vediamo ora alcune formule particolari:

- con un solo nodo, $n = 1$

formula del rettangolo: $f(x) \cong p_0(x) = f(a) \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \cong (b-a)f(a)$

in questo caso $x_1 = a$ è il nodo e $w_1 = b - a$ è il peso.

formula del punto medio: $f(x) \cong p_0(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \cong (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$

in questo caso $x_1 = \frac{a+b}{2}$ è il nodo e $w_1 = b - a$ è il peso.

Quest'ultima formula ha un comportamento migliore su funzioni lineari rispetto alla prima. In sostanza è molto più precisa.

- con due nodi, $n = 2$

formula del trapezio:

$$f(x) \cong p_1(x) = f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \cong \frac{b-a}{2} f(a) + \frac{b-a}{2} f(b) = [f(a) + f(b)]\frac{b-a}{2}$$

in questo caso $x_1 = a$ e $x_2 = b$ sono i nodi e $w_1 = w_2 = \frac{b-a}{2}$ sono i rispettivi pesi.

- con tre nodi, $n = 3$

formula di Cavalieri–Simpson: siano a e b gli estremi di integrazione, quindi $c = \frac{a+b}{2}$ è il punto medio dell'intervallo di integrazione. Allora

$$\begin{aligned} f(x) &\cong p_2(x) = f(a)\frac{(x-c)(x-b)}{(a-c)(a-b)} + f(c)\frac{(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)} + f(b)\frac{(x-a)(x-c)}{(b-a)(b-c)} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \int_a^b f(x)dx \cong \frac{b-a}{6} f(a) + \frac{4}{6}(b-a)f(c) + \frac{b-a}{6} f(b) \end{aligned}.$$

Si può dimostrare che le formule di quadratura di tipo interpolatorio costruite su nodi simmetrici rispetto al punto medio dell'intervallo di integrazione, hanno i pesi dei vari fattori disposti in modo simmetrico rispetto al punto medio. Inoltre la somma di tutti i pesi è sempre pari all'ampiezza dell'intervallo di integrazione.

Dimostrazione del fatto che la somma dei pesi è sempre pari a $b-a$: consideriamo $f(x)=1$ e cerchiamo un polinomio interpolante su $(x_i, f(x_i))$. Il polinomio interpolante nella forma di Lagrange risulta essere

$$p_{n-1}(x)=\sum_{i=1}^{n} f(x_i)l_i(x).$$

Dato che la funzione di partenza è già un polinomio di grado zero (costante), il polinomio interpolante sarà esattamente la funzione $f(x)=1$ e, per ogni x_i, varrà $f(x_i)=1$. Perciò

$$1=\sum_{i=1}^{n} l_i(x)$$

e integrando su $[a,b]$:

$$\int_a^b 1dx=\int_a^b \sum_{i=1}^{n} l_i(x)dx.$$

Scambiamo ora l'ordine di integrale e sommatoria e risolviamo il primo membro:

$$b-a=\sum_{i=1}^{n}\int_a^b l_i(x)dx.$$

Ricordando che $w_i=\int_a^b l_i(x)dx$, si ottiene il risultato voluto:

$$b-a=\sum_{i=1}^{n} w_i.$$

c.v.d.

Errore di quadratura

Definiamo <u>errore di quadratura</u> la quantità $R_n=\int_a^b f(x)dx-\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$. Inoltre se la formula di quadratura è di tipo interpolatorio si può dimostrare che $R_n=\int_a^b (f(x)-p_{n-1}(x))dx=\int_a^b E_n(x)dx$ dove $E_n(x)$ è l'errore di interpolazione. Se $R_n=0$ la formula di quadratura si dice <u>esatta</u>. Aumentando il numero dei nodi il comportamento dell'errore di quadratura dipende sia dalla funzione $f(x)$ sia dalla scelta dei nodi.

Proprietà: una formula di quadratura di tipo interpolatorio costruita su n nodi è sicuramente <u>esatta</u> se la funzione $f(x)$ è un polinomio di grado minore o uguale a $n-1$. Infatti, in questo caso, si ha $E_n(x) \equiv 0 \quad \forall x \in [a,b]$.

Fissati i nodi, possiamo calcolare i pesi di una formula interpolatoria in un altro modo: imponiamo che la formula di quadratura

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

sia esatta sulla base monomiale $\langle 1, x, x^2, \ldots, x^{n-1} \rangle$ dello spazio dei polinomi di grado $n-1$. Si ottiene un sistema lineare di n equazioni in n incognite:

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 + \ldots + w_n &= \int_a^b 1dx = b - a \\ w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_nx_n &= \int_a^b xdx = \frac{1}{2}\left(b^2 - a^2\right) \\ &\vdots \\ w_1x_1^{n-1} + w_2x_2^{n-1} + \ldots + w_nx_n^{n-1} &= \int_a^b x^{n-1}dx = \frac{1}{n}\left(b^n - a^n\right) \end{aligned}$$

che, una volta risolto, porta a conoscere i pesi $w_1, w_2, \ldots, w_n$.

Da notare che la matrice dei coefficienti di questo sistema è la matrice di Vandermonde trasposta. In particolare tende ad essere molto mal condizionata ed è <u>non singolare</u>. Ciò significa che, essendo invertibile, la soluzione del sistema esiste ed è unica.

Proposizione: le formule di Newton–Cotes costruite su n nodi sono <u>esatte</u> per i polinomi di grado fino a $d = n-1$ se n è pari e fino a $d = n$ se n è dispari.

Questa proposizione spiega il motivo per cui la formula di Cavalieri–Simpson, in cui $n = 3$, integra esattamente i polinomi fino al grado 3 (cubiche), mentre la formula del trapezio, in cui $n = 2$, integra esattamente i polinomi solamente fino al grado 1 (rette).

Convergenza di una formula di quadratura

Una formula di quadratura si definisce <u>convergente</u> se $\lim_{n\to\infty} R_n = 0$, dove R_n è l'errore di quadratura.

Dato che le formule di quadratura si basano sull'interpolazione polinomiale, se l'errore di interpolazione è grande, cioè l'interpolazione è pessima, non c'è alcuna speranza matematica che l'errore di quadratura sia piccolo, cioè che l'approssimazione dell'integrale sia buona.

Il seguente teorema fornisce una condizione sufficiente per definire convergente una formula di quadratura:

Teorema: se la funzione $f \in C[a,b]$ e i pesi soddisfano la condizione $\sum_{i=1}^{n} |w_i| \le K$ con K costante indipendente da n, allora la formula di quadratura è convergente.

Ad esempio, i nodi equidistanti non soddisfano le condizioni poste dal teorema. Allora possiamo dire solamente che non è garantita la convergenza. D'altra parte le formule di Newton–Cotes, all'aumentare del numero dei nodi, non garantiscono un miglioramento dell'interpolazione.

Quadratura composita

Partendo dal ragionamento con cui si è giunti a definire l'interpolazione a tratti, possiamo operare in modo del tutto analogo con le formule di quadratura.

Per prima cosa si sceglie una formula di quadratura base, costruita su r nodi, con r generalmente piccolo.
Successivamente si divide l'intervallo di integrazione in N intervallini $[x_i, x_{i+1}]$ con $a = x_1 < x_2 < \ldots < x_{N+1} = b$.
Si applica ora la proprietà di additività degli integrali:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \, .$$

Ciascun integrale al secondo membro della precedente equazione viene sostituito dalla formula di quadratura base scelta.

In pratica si approssima l'integrale della funzione con l'integrale della funzione interpolante, definita a tratti.

Esempio:

Consideriamo N intervalli ($N+1$ nodi) e applichiamo il metodo appena descritto.

formula del trapezio composita:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \cong \sum_{i=1}^{N} \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \left(f(x_i) + f(x_{i+1}) \right)$$

con nodi equidistanti $\forall i \quad x_{i+1} - x_i = h = \dfrac{b-a}{N}$

$$I_N^{\ T} = \sum_{i=1}^{N} \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) = \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) = \frac{h}{2}\left(f(x_1) + 2\sum_{i=2}^{N} f(x_i) + f(x_{N+1})\right).$$

La stima dell'errore per la formula del trapezio è

$$R_2 = -\frac{(b-a)^2}{12} f''(c)$$

dove $c \in [a,b]$. Perciò la stima dell'integrale è per eccesso o per difetto a seconda della concavità della funzione $f(x)$.

Esempio:

formula di Cavalieri–Simpson composita:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=1}^{N} \frac{x_{i+1} - x_i}{6}\left(f(x_i) + 4 f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1})\right)$$

con nodi equidistanti $\forall i \ \ x_{i+1} - x_i = h = \frac{b-a}{N}$, da cui $x_i = a + (i-1)h$

$$I_N^{\ S} = \frac{h}{6}\sum_{i=1}^{N}\left(f(x_i) + 4 f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + f(x_{i+1})\right) = \frac{h}{6}\left(f(x_1) + 2\sum_{i=2}^{N} f(x_i) + 4\sum_{i=1}^{N} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + f(x_{N+1})\right).$$

Se la funzione è sufficientemente regolare, aumentare il numero di intervallini garantisce la convergenza.

Esempio:

Sia $[a,b] = \left[0, \frac{3}{2}\pi\right]$, $N = 3$, $h = \frac{b-a}{3} = \frac{\frac{3}{2}\pi}{3} = \frac{\pi}{2}$. Calcolare $\int_0^{\frac{3}{2}\pi} \left(x \sin^2 x\right)dx$.

Applicando la formula di Cavalieri–Simpson composita si ottiene

$$I_3^{\ S} = \frac{\pi}{12}\left(f(0) + 4 f\left(\frac{\pi}{4}\right) + 2 f\left(\frac{\pi}{2}\right) + 4 f\left(\frac{3}{4}\pi\right) + 2 f(\pi) + 4 f\left(\frac{5}{4}\pi\right) + f\left(\frac{3}{2}\pi\right)\right) =$$
$$= \frac{\pi}{12}\left(0 + \frac{\pi}{2} + \pi + \frac{3}{2}\pi + 0 + \frac{5}{2}\pi + \frac{3}{2}\pi\right) = \frac{7}{12}\pi^2 .$$

Convergenza della quadratura composita

Le stime dell'errore di quadratura con nodi equidistanti sono le seguenti:

$$R_N{}^T = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(c)$$

dove $c \in (a,b)$, $h = \frac{b-a}{N}$, $f \in C^2[a,b]$ per quanto riguarda la formula del trapezio;

$$R_N{}^S = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(c)$$

dove $c \in (a,b)$, $h = \frac{b-a}{N}$, $f \in C^4[a,b]$ per ciò che concerne la formula di Cavalieri–Simpson.

Se la funzione f ha la regolarità richiesta, si ha:

$$R_N{}^T = O(h^2)$$

per $h \to 0 \Leftrightarrow N \to \infty$;

$$R_N{}^S = O(h^4)$$

per $h \to 0 \Leftrightarrow N \to \infty$.

Quindi la formula di Cavalieri–Simpson risulta migliore perché il suo errore tende a zero più velocemente all'aumentare di N.

In generale, possiamo affermare che all'aumentare del numero di intervallini le stime degli errori di quadratura vanno a zero. Quindi entrambe le formule di quadratura composita sono convergenti.

Formule adattative

Una distribuzione di nodi di tipo adattativo è caratterizzata dal fatto che essi sono addensati nelle zone della funzione in cui è necessario averli più fitti, ad esempio in prossimità di brusche variazioni della funzione stessa. Invece nelle zone in cui la funzione si comporta in modo "tranquillo" i nodi sono molto diradati. In questo modo si ha la possibilità di ripartire fittamente l'intervallo di integrazione nelle zone in cui è necessario, ma allo stesso tempo si riesce a non appesantire troppo il calcolo con partizioni del tutto inutili.