INTEGRAZIONE NUMERICA

Introduzione

Le procedure numeriche per approssimare l'integrale definito:

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx \qquad\qquad [a,b]\in\Re$$

date da:

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

sono note come *formule di quadratura numerica*. Gli n+1 punti distinti x_i ed i coefficienti a_i sono detti, rispettivamente, *nodi* e *pesi* della quadratura. Il problema consiste nel determinare x_i ed a_i in modo che:

$$Q_n(f)\approx I(f)$$

per una ampia classe di funzioni. Se $p_n(x)\in \mathrm{P}_n$ è un polinomio interpolante la $f(x)$ nei punti x_i, la formula:

$$Q_n(f)=\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)=\int_a^b p_n(x)dx$$

si dice *formula di quadratura interpolatoria*. I nodi e i pesi sono scelti in modo da minimizzare l'errore:

$$E_n(f)=I(f)-Q_n(f)$$

Una misura di tale errore è data dal *grado di precisione o ordine polinomiale*. Un modo pratico per calcolarlo è determinare una classe di funzioni per la quale la formula risulti esatta. Generalmente tale classe è quella dei polinomi, per cui <u>una formula si dice esatta di grado *k* se risulta esatta per $\forall p\in \mathrm{P}_k$.</u>

Un modo generale per costruire formule di quadratura con grado di precisione fissato è il *metodo dei coefficienti indeterminati*, che consiste nel determinare i nodi e i pesi imponendo che la formula sia esatta per polinomi del grado dato dall'ordine polinomiale. Se i nodi sono fissati, i pesi si trovano risolvendo il sistema lineare:

$$\sum_{i=0}^{n} a_i x_i^r = \int_a^b x^r dx \quad 0 \le r \le n$$

Se i nodi non sono fissati, il sistema è non lineare. Ciò, come vedremo, darà luogo alle formule col più alto grado di precisione possibile.

1. Formule di quadratura interpolatorie

Siano dati n+1 punti di interpolazione $x_0, x_1, ..., x_n$, con $x_i \neq x_j$ per $i \neq j$, $i, j = 0,...,n$ e costruiamo il polinomio di interpolazione $p_n(x) \in P_n$ per $f(x) \in C[a,b]$, ovvero tale che:

$$f(x_j) = p_n(x_j)$$

Per la formula di quadratura interpolatoria possiamo scrivere:

$$Q_n(f) \equiv \int_a^b p_n(x)dx \qquad (1)$$

Consideriamo il polinomio di interpolazione di Lagrange:

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} L_{nj}(x) f(x_j) \qquad (2)$$

Sostituendo nella (1) otteniamo:

$$Q_n(f) \equiv \int_a^b \sum_{j=0}^{n} L_{nj}(x) f(x_j) dx = \sum_{j=0}^{n} \int_a^b L_{nj}(x) f(x_j) dx = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \int_a^b L_{nj}(x) dx$$

essendo gli $f(x_j)$ delle costanti. Se poniamo $a_{nj} = \int_a^b L_{nj}(x)dx$, la relazione sopra diventa:

$$Q_n(f) = \sum_{j=0}^{n} a_{nj} f(x_j)$$

Gli $L_{nj}(x)$ sono i polinomi fondamentali di Lagrange e valgono:

$$L_{nj}(x) = \frac{w_n(x)}{(x - x_j) w_n'(x_j)} \qquad j = 0,\dots,n \qquad \text{dove } w_n(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$$

Ogni formula di quadratura interpolatoria che usi n+1 nodi ha, per costruzione, grado di precisione almeno n. Le formule più naturali sono quelle con i nodi ugualmente spaziati in [a,b]. Tali formule sono le formule di Newton-Cotes.

2. Regola del trapezio

Nell'intervallo finito [a,b] consideriamo $n+1$ nodi equidistanti $x_0,\dots,x_n$:

$$x_i = x_0 + ih \qquad \text{con} \qquad x_0 = a\ ,\ x_n = b \qquad \text{e} \qquad h = \frac{b-a}{n} \qquad i = 0,\dots,n$$

La formula di Newton-Cotes a due punti, $x_0 = a$ e $x_1 = b$, è detta *regola del trapezio*.

Ricaviamo la regola del trapezio per il generico intervallo [-h,h] centrato in 0, per poi estenderla all'intervallo [a,b]. Nel primo caso applichiamo la definizione di quadratura interpolatoria, nel secondo il metodo dei coefficienti indeterminati.

Posto $x_0 = -h$ e $x_1 = h$, per la *(2)* del paragrafo precedente segue che il polinomio:

$$p(x) \in \mathrm{P}_1(x): \quad p(x_i) = f(x_i) \qquad i = 0,1$$

è dato da:

$$p(x) = L_{10}(x) f(x_0) + L_{11}(x) f(x_1) = L_{10}(x) f(-h) + L_{11}(x) f(h) \qquad (3)$$

Calcoliamo i due polinomi fondamentali di Lagrange:

a) $$L_{10}(x) = \frac{w_1(x)}{(x - x_0) w_1'(x_0)} = \frac{w_1(x)}{(x+h) w_1'(-h)} = \frac{(x+h)(x-h)}{(x+h)(-2h)} = \frac{h-x}{2h}$$

b) $$L_{11}(x) = \frac{w_1(x)}{(x - x_1) w_1'(x_1)} = \frac{w_1(x)}{(x-h) w_1'(h)} = \frac{(x+h)(x-h)}{(x-h)(2h)} = \frac{h+x}{2h}$$

Sostituendo nella (3) otteniamo:

$$p_1(x)=\frac{h-x}{2h}f(-h)+\frac{h+x}{2h}f(h)$$

Per la *(1)* del paragrafo precedente, possiamo scrivere, dunque:

$$Q_1(f)\equiv\int_{-h}^{h}p_1(x)dx=\int_{-h}^{h}\left[\frac{h-x}{2h}f(-h)+\frac{h+x}{2h}f(h)\right]dx=hf(-h)+hf(h)=h\left[f(-h)+f(h)\right]$$

Estendiamo adesso la formula all'intervallo [*a*,*b*] utilizzando il metodo dei coefficienti indeterminati. Dovendo considerare solo gli estremi dell'intervallo, si avrà n=1. In questo caso possiamo scrivere, quindi:

$$Q_1(f)=\sum_{i=0}^{1}a_i f(x_i)=a_0 f(x_0)+a_1 f(x_1) \qquad (4)$$

Imponiamo che il grado di precisione sia 1. Sia $f(x)=1,x$ otteniamo rispettivamente:

$$\sum_{i=0}^{1}a_i=a_0+a_1=\int_a^b 1dx=b-a \qquad \Rightarrow \qquad a_0+a_1=b-a$$

(5)

$$\sum_{i=0}^{1}a_i f(x_i)=aa_0+ba_1=\int_a^b xdx=\frac{b^2-a^2}{2} \qquad \Rightarrow$$

$$aa_0+ba_1=\frac{b^2-a^2}{2} \qquad (6)$$

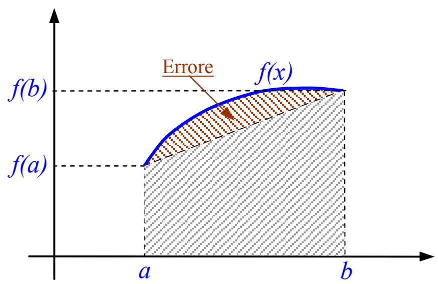
Risolvendo il sistema formato dalle equazioni *(5)* e *(6)* si ottiene:

$$a_0=a_1=\frac{b-a}{2}$$

Sostituendo nella *(4)* i valori appena trovati si ha, pertanto:

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

Geometricamente questa formula può essere così rappresentata:



Per ricavare l'errore, ricordiamo che se $f \in C^{n+1}[a,b]$, l'errore di interpolazione è dato dalla relazione:

$$e(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x)$$

per cui:

$$e_n = \int_a^b \left[f(x) - p_n(x)\right] dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x) dx \qquad (7)$$

Ponendo:

$$M_{n+1} = \max_{a \le x \le b} \left| f^{(n+1)}(x) \right|$$

operiamo una maggiorazione sul lato destro della *(7)*, per cui sostituendo in essa tale valore otteniamo:

$$e_n \le M_{n+1} \int_a^b \frac{w(x)}{(n+1)!} dx$$

Nella regola del trapezio, come detto, n=1 inoltre per tale valore $w(x) = (x - x_0)(x - x_1)$ cioè $w(x) = (x-a)(x-b)$, per cui possiamo scrivere:

$$e_T = \int_a^b f''(\xi)\frac{(x-a)(x-b)}{2}dx$$

essendo e_T l'errore per la regola del trapezio. Ricordiamo che, per il *teorema del valor medio* sugli integrali:

se $g, h \in C[a,b]$ e $g(x)$ non cambia segno in [a,b] $\Rightarrow$

$\exists \eta \in [a,b] : \int_a^b g(x)h(x)dx = h(\eta)\int_a^b g(x)dx$

Ponendo $g(x) = (x-a)(x-b)$ e $h(x) = f''(\xi_x)$ (dove il pedice *x* evidenzia che ξ dipende da *x*) si ha:

$$e_T = \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

E' facile verificare che il grado di precisione è 1.

3. Regola di Simpson

La formula di Newton-Cotes a tre punti è detta *regola di Simpson*. Poniamo $x_0 = -h$, $x_1 = 0$ e $x_2 = h$ ed imponiamo che:

$$Q_2(f) = \sum_{i=0}^{2} a_i f(x_i) \equiv \int_{-h}^{h} f(x)dx \qquad \textit{(8)}$$

Per $f(x) = 1, x, x^2$ otteniamo, rispettivamente, le tre equazioni seguenti:

$$a_0 + a_1 + a_2 = \int_{-h}^{h} 1dx = 2h$$

$$-a_0h + a_2h = \int_{-h}^{h} xdx = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} a_0 + a_1 + a_2 = 2h \\ -a_0h + a_2h = 0 \\ a_0h^2 + a_2h^2 = \frac{2}{3}h^3 \end{cases}$$

$$a_0h^2 + a_2h^2 = \int_{-h}^{h} x^2dx = \frac{2}{3}h^3$$

Risolvendo il sistema precedente, si ottiene: $a_0 = a_2 = \frac{h}{3}$ e $a_1 = \frac{4}{3}h$. Sostituendo nella *(8)* si ha:

$$Q_2(f) = \frac{h}{3}\left[f(-h) + 4f(0) + f(h)\right]$$

Estendendo la formula all'intervallo [*a*,*b*] si ha:

$$Q_2(f) = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$$

Si può facilmente verificare che il grado di precisione è pari a 3, pertanto sfruttando tale risultato è possibile determinare l'errore. Infatti, dal momento che $(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$ cambia segno in [*a*,*b*], non si può procedere come per la regola del trapezio. In questo caso, invece, si definisce il polinomio $p_3(x) \in \mathrm{P}_3$ hermitiano con le seguenti condizioni:

$$p_3(a) = f(a),$$
$$p_3\left(\frac{a+b}{2}\right) = f\left(\frac{a+b}{2}\right),$$
$$p_3(b) = f(b)$$
$$p_3'\left(\frac{a+b}{2}\right) = f'\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

e inoltre: $Q_2(f) = I(p_3)$. Poiché il grado di precisione è 3, l'errore sarà dato da:

$$f(x) - p_3(x) = \frac{f^{IV}(\xi)}{4!}(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)$$

a cui è possibile applicare il *teorema del valore medio*. Sostituendo i valori determinati in precedenza, si ottiene:

$$e_s = -\frac{f^{IV}(\eta)}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5$$

Per estendere il tutto alle formule di Newton-Cotes generiche, si può far uso del seguente:

Teorema

Sia $f \in C^{n+2}[a,b]$, e siano $x_i \in [a,b]$, $x_i = x_0 + ih$ con $i = 0,...,n$, n+1 nodi. Sia, infine, $h = \frac{b-a}{n}$. Allora l'errore di integrazione E_n di una formula di Newton-Cotes chiusa è dato dalle relazioni:

a) n pari: $E_n = \frac{M_n}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\xi) h^{n+3}$

dove: $M_n = \int_0^n t\pi_{n+1}(t)dt$

b) n dispari: $E_n = \frac{K_n}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\eta) h^{n+2}$

dove: $K_n = \int_0^n \pi_{n+1}(t)dt$

con: $\pi_{n+1} = \Pi_{i=0}^{n}(t-i), \quad \xi, \eta \in (a,b).$

Pertanto l'errore di integrazione delle formule di Newton-Cotes dipende da *n*. In particolare:

- se *n* è dispari, allora il grado di precisione è *n*;
- se *n* è pari, allora il grado di precisione è *n*+1.

Esempi

Consideriamo la regola del trapezio, la regola di Simpson e la regola generale di Newton-Cotes:

- *regola del trapezio*: 2 nodi $\Rightarrow n = 1$, $errore \propto h^3$, grado di precisione = 1;
- *regola di Simpson*: 3 nodi $\Rightarrow n = 2$, $errore \propto h^5$, grado di precisione = 3;

- *regola generale N-C*: n+1 nodi, $errore \propto h^{2n+1}$, grado di precisione: n (se n è dispari), n+1 (se n è pari).

Per aumentare la precisione si hanno due alternative:

i) aumentare il numero di nodi, in modo che $Q_n(f)$ sia l'integrale di un polinomio interpolante di alto grado (*quadrature gaussiane*);

ii) dividere [a,b] in sottointervalli utilizzando in essi formule di bassa precisione, quindi sommare i risultati (*regole di quadratura composte*).

4. Regole di quadratura composte

Consideriamo l'intervallo [a,b] e suddividiamolo in n sottointervalli. Per una tale suddivisione possiamo scrivere:

$$Q_n(f) = \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$$

Applichiamo la regola del trapezio al sottointervallo $[x_j, x_{j+1}]$. Sia $h = \frac{b-a}{n}$ e $x_j = a + jh$ per $j = 0,\dots,n$; si ha:

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

Estendendo il risultato ottenuto per un singolo sottointervallo a tutto l'intervallo [a,b], otteniamo:

$$T_n(f) = h\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_n)\right] - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{f''(\eta_j)}{12}h^3 \quad \textit{(10)}$$

Per semplificare l'espressione dell'errore, utilizziamo il seguente:

lemma

Sia $g(x) \in C[a,b]$ e consideriamo $\{ a_j \}_{j=0}^{n-1}$, con $a_j \in \Re$, costanti tutte dello stesso segno.

Siano poi $x_j \in [a,b]$ per $j = 0,...,n-1$. Allora:

$$\exists \eta \in [a,b] : \sum_{j=0}^{n-1} a_j g(x_j) = g(\eta) \sum_{j=0}^{n-1} a_j$$

Identificando $f''(\eta)$ con $g(x)$ e a_j con $-\frac{h^3}{12}$ ed applicando il lemma, si ha:

$$e_n^T = -f''(\eta) \sum_j \frac{h^3}{12} = -f''(\eta) \frac{h^3}{12} n = -f''(\eta) \frac{b-a}{12} h^2$$

Indicando con $\sum''$ la sommatoria dimezzata agli estremi e sostituendo nella *(10)*, otteniamo la *formula del trapezio composta*:

$$T_n(f) = h \sum_{j=0}^{n}{}'' f(x_j) - f''(\eta) \frac{b-a}{12} h^2$$

In modo del tutto analogo, si ricava la *formula di Simpson composta* data da:

$$S_n(f) = \frac{h}{6}[f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + 4\sum_{j=1}^{n} f(x_j - h/2)] - f^{IV}(\eta) \frac{b-a}{2880} h^4$$

5. *Teorema sui pesi*

Nelle formule di Newton-Cotes il calcolo dei pesi è indipendente dalla spaziatura *h*, pertanto essi possono essere tabulati. E' possibile verificare che, per *n* grande, i pesi aumentano in modulo mentre il segno varia. Ciò rende instabili tali formule dal punto di vista della propagazione degli errori. Inoltre un aumento del grado di precisione, ovvero dei nodi della quadratura, non implica necessariamente la convergenza della quadratura all'integrale, quando la funzione non è polinomiale. Il seguente teorema mostra sotto quali condizioni l'aumento dei punti di integrazione porti alla convergenza della quadratura all'integrale.

Teorema

Sia $f \in C[a,b]$, $Q_n(f) = \sum_{j=0}^{n} a_j^{(n)} f(x_j^{(n)})$ dove $a_j^{(n)}$ e $x_j^{(n)}$ sono i pesi ed i nodi della quadratura interpolatoria dipendenti da *n*.

Se $\exists k > 0 : \sum_{j=0}^{n} \left| a_j^{(n)} \right| \le k \quad \forall n \in \mathbb{N} \Rightarrow \lim_{n\to\infty} Q_n(f) = I(f) \qquad \forall f \in C[a,b]$

Dimostrazione.

Per il teorema di Weierstrass si ha:

$$\forall \varepsilon > 0 \ \exists q_N(x) \in \mathrm{P}_N : \ \left\| f - q_N \right\|_\infty \le \varepsilon \quad \text{dove } N \text{ e' funzione di } \varepsilon .$$

Poiché la quadratura è interpolatoria, possiamo scrivere:

$$Q_n(q_N) = I(q_N) \qquad\qquad n \ge N$$

Scegliendo $n \ge N$, quindi, abbiamo:

$$\left| I(f) - Q_n(f) \right| = \left| I(f) - I(q_N) + Q_n(q_N) - Q_n(f) \right| \le \left| I(f) - I(q_N) \right| + \left| Q_n(q_N) - Q_n(f) \right|$$

(11)

avendo applicato la disuguaglianza triangolare. I due addendi nel lato destro della *(11)* possono essere maggiorati, tenendo conto delle ipotesi e del teorema di Weierstrass, come segue:

a) $\left| I(f) - I(q_N) \right| \le \left\| f - q_N \right\|_\infty (b-a) \le (b-a)\varepsilon$

b) $\left|Q_n(q_N) - Q_n(f)\right| = \left|\sum_{j=0}^{n} a_j^{(n)} \left[q_N(x_j^{(n)}) - f(x_j^{(n)})\right]\right| \le \|f - q_N\|_\infty \sum_{j=0}^{n} \left|a_j^{(n)}\right| \le k\varepsilon$

Applicando le maggiorazioni indicate ai punti *a)* e *b)* alla relazione *(11)* si ottiene, infine:

$$\left|I(f) - Q_n(f)\right| \le \left[k + (b-a)\right] \varepsilon = \bar{\varepsilon}$$

E' possibile dimostrare che vale anche il viceversa.

Se gli $a_j^{(n)}$ sono tutti strettamente positivi, allora la convergenza è garantita. Infatti, poiché il polinomio $p_0(x) = 1$ è integrato esattamente, si ha:

$$0 < I(1) = \int_a^b dx = Q_n(1) = \sum_{j=0}^{n} a_j^{(n)}$$

Quindi, se tutti i pesi sono positivi:

$$\sum_{j=0}^{n} \left|a_j^{(n)}\right| = \sum_{j=0}^{n} a_j^{(n)} = \int_a^b dx$$

Un vantaggio delle formule con pesi positivi è che hanno buone proprietà di arrotondamento, poiché gli errori tendono a cancellarsi. Inoltre l'errore è minimizzato se i pesi sono quasi uguali. Un'idea è, quindi, quella di determinare formule con pesi uguali e nodi fissati, imponendo un grado di precisione dato. Un'altra possibilità è data dalle formule di quadratura gaussiane, in cui sia i nodi che i pesi sono indeterminati.