Integrazione Numerica

Sia f una funzione integrabile sull'intervallo $[a, b]$. Il suo integrale

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

può essere difficile da calcolare (può anche non essere valutabile in forma esplicita).

Una formula esplicita che permetta di approssimare $I(f)$ viene detta formula di quadratura o formula d'integrazione numerica.

Un modo naturale di procedere consiste nel prendere $\Pi_n f$, il polinomio interpolatore su $n+1$ nodi distinti $\{x_i\}_{i=0}^n \subset [a, b]$, e calcolare $I(\Pi_n f)$.

Formule di quadratura interpolatorie

$$
\begin{aligned}
I(f) \approx I(\Pi_n f) &= \int_a^b \Pi_n f(x)\, dx \\
&= \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) l_i(x)\, dx \\
&= \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x)\, dx
\end{aligned}
$$

Le formule di quadratura di questo tipo si dicono formule di quadratura interpolatorie.

Rientrano tra le formule del tipo

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

I coefficienti α_i sono detti pesi (o coefficienti) della formula di quadratura. Gli x_i sono detti nodi.

Formule di quadratura interpolatorie

Si definisce grado di esattezza (o di precisione) di una formula di quadratura il massimo intero $r \geq 0$ per il quale

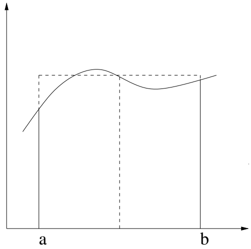
$$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) = I(f)\,, \quad \forall\, f \in \mathbb{P}_r\,.$$

Ogni formula di quadratura interpolatoria che usi $n+1$ nodi distinti ha grado di esattezza $\geq n$.

Errore di quadratura:

$$|E_n(f)| = |I(f) - I(\Pi_n f)| \leq \int_a^b |f(x) - \Pi_n f(x)|\, dx$$

Formula del punto medio



$n = 0$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\, f\left(\frac{a+b}{2}\right) =: I_{PM}(f)\,.$$

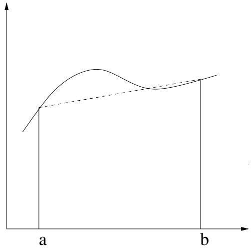
Errore di quadratura:

$$I(f) - I_{PM}(f) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi)\,,$$

$\xi \in [a, b]$.

Grado si esattezza: $r = 1$.

Formula del trapezio



$n = 1$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] =: I_T(f)\,.$$

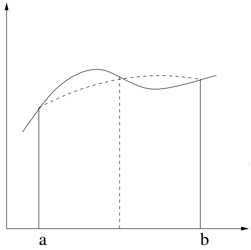
Errore di quadratura:

$$I(f) - I_T(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)\,,$$

$\xi \in [a, b]$.

Grado si esattezza: $r = 1$.

Formule di Cavalieri-Simpson



$n = 2$

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

$$=: I_{CS}(f)\,.$$

Errore di quadratura:

$$I(f) - I_{CS}(f) = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(iv)}(\xi)\,,$$

$\xi \in [a, b]$.

Grado si esattezza: $r = 3$.

Formula di Newton-Cotes

- Le formule di quadratura interpolatorie su nodi equispaziati si chiamano formule di Newton-Cotes.
- Le formule del punto medio, del trapezio e di Cavalieri-Simpson sono esempi di formule di Newton-Cotes.
- Nel caso generale si definiscono

  Formule chiuse se gli estremi dell'intervallo di integrazione sono nodi della formula di quadratura: $x_0 = a$ e $x_n = b$.

  Formule aperte se gli estremi dell'intervallo di integrazione non sono nodi della formula di quadratura: $x_0 = a + h$ e $x_n = b - h$.

Formule composite

Per ottenere una maggiore accuratezza si ricorre all'integrazione composita.

Si divide l'intervallo di integrazione in N sottointervalli $T_j = [z_{j-1}, z_j]$, $j = 1, \ldots, N$, con $H = \frac{b-a}{N}$ e $z_j = a + jH$, $j = 0, \ldots, N$.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{N} \int_{z_{j-1}}^{z_j} f(x)\,dx$$

Si utilizza quindi in ogni sottointervallo una formula interpolatoria.

Formule composite

- Formula del punto medio composita

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} f(x)\,dx$$

$$\approx \sum_{j=1}^N H\,f(m_j) = H \sum_{j=1}^N f(m_j) =: I_{PM}^N(f)$$

$m_j = a + \frac{2j-1}{2} H$, punto medio dell'intervallo T_j.

- Errore di quadratura

$$I(f) - I_{PM}^N(f) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{24} H^3 f''(\xi_j) = \frac{1}{24} H^3 \sum_{j=1}^N f''(\xi_j)$$

$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f''(\xi_j) = f''(\widehat{\xi})$ con $\widehat{\xi} \in [a,b]$ e $H\,N = b-a$,

$$I(f) - I_{PM}^N(f) = \frac{1}{24} H^3 N f''(\widehat{\xi}) = \frac{b-a}{24} H^2 f''(\widehat{\xi}) .$$

L'errore di quadratura è un infinitesimo di ordine 2 in H.

Formule composite

- Formula dei trapezi

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} f(x)\,dx$$

$$\approx \sum_{j=1}^N \frac{H}{2}\,[f(z_{j-1}) + f(z_j)] = \frac{H}{2}\sum_{j=1}^N [f(z_{j-1}) + f(z_j)]$$

$$= \frac{H}{2} f(a) + H \sum_{j=1}^{N-1} f(z_j) + \frac{H}{2} f(b) =: I_T^N(f)$$

- Errore di quadratura

$$I(f) - I_T^N(f) = \sum_{j=1}^N \left(-\frac{1}{12} H^3 f''(\xi_j)\right)$$

$$= -\frac{1}{12} H^3 \sum_{j=1}^N f''(\xi_j) = -\frac{b-a}{12} H^2 f''(\widehat{\xi}).$$

L'errore di quadratura è un infinitesimo di ordine 2 in H.

Formule composite

- Formula di Cavalieri-Simpson composita

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \sum_{j=1}^N \int_{z_{j-1}}^{z_j} f(x)\,dx \\ &\approx \sum_{j=1}^N \frac{H}{6}[f(z_{j-1})+4f(m_j)+f(z_j)] \\ &= \frac{H}{6}\sum_{j=1}^N [f(z_{j-1})+4f(m_j)+f(z_j)] =: I_{CS}^N(f)\end{aligned}$$

- Errore di quadratura

$$I(f)-I_{CS}^N(f) = \sum_{j=1}^N \left(-\frac{1}{90}\left(\frac{H}{2}\right)^5 f^{(iv)}(\xi_j)\right)$$

$$= -\frac{1}{90}\left(\frac{H}{2}\right)^5 \sum_{j=1}^N f^{(iv)}(\xi_j) = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{H}{2}\right)^4 f^{(iv)}(\widehat{\xi})$$

L'errore di quadratura è un infinitesimo di ordine 4 in H.

Formule composite - Stima a posteriori dell'errore

- Esempio: formula dei trapezi

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx I_T^N(f)$$

Sia $H = \frac{b-a}{N}$. Sappiamo che

$$I(f) - I_T^N(f) = -\frac{b-a}{12} H^2 f''(\widehat{\xi})$$

e

$$I(f) - I_T^{2N}(f) = -\frac{b-a}{12} \left(\frac{H}{2}\right)^2 f''(\widehat{\zeta})$$

quindi se $f''(\widehat{\xi}) \approx f''(\widehat{\zeta})$

$$I(f) - I_T^{2N}(f) \approx \frac{1}{4}\left[I(f) - I_T^N(f)\right] .$$

Formule composite - Stima a posteriori dell'errore

$$
\begin{aligned}
I(f) - I_T^{2N}(f) &\approx \tfrac{1}{4}\left[I(f) - I_T^{N}(f)\right] \\
&= \tfrac{1}{4}[I(f) - I_T^{2N}(f) + I_T^{2N}(f) - I_T^{N}(f)]
\end{aligned}
$$

$$
\frac{3}{4}\left[I(f) - I_T^{2N}(f)\right] \approx \frac{1}{4}\left[I_T^{2N}(f) - I_T^{N}(f)\right]
$$

$$
I(f) - I_T^{2N}(f) \approx \frac{1}{3}\left[I_T^{2N}(f) - I_T^{N}(f)\right].
$$

- Se l'errore di quadratura è un infinitesimo di ordine k in H.

$$
I(f) - I^{2N}(f) \approx \frac{1}{2^k - 1}\left[I^{2N}(f) - I^{N}(f)\right].
$$

Formule di Gauss

- Sono formule di quadratura interpolatorie dove i nodi si scelgono in modo di rendere massimo il grado di precisione.
- Il grado di precisione di una formula di quadratura interpolatoria con $n+1$ nodi è maggiore o uguale di n e minore o uguale di $2n+1$.
  Siano $\{x_i\}_{i=0}^n$ i nodi e sia $q(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)^2 \in \mathbb{P}_{2(n+1)}$;

$$\int_a^b q(x)\,dx > 0 \quad \text{ma} \quad \sum_{i=0}^n \alpha_i q(x_i) = 0\,.$$

- La formula di quadratura di Gauss di $n+1$ nodi ha grado di precisione $2n+1$.

Formule di Gauss

Polinomi ortogonali

- I polinomi di Legendre sono polinomi $L_k(x) \in \mathbb{P}_k$ tali che

$$\int_{-1}^{1} L_k(x) L_m(x)\, dx = 0 \text{ se } k \neq m \quad \text{(ortogonalità)}\,.$$

- I nodi della formula di quadratura di Gauss di $n+1$ nodi sono le radici del polinomio $L_{n+1}(x)$. (Si può dimostrare che queste radici sono reali, distinte e tutte appartenenti all'intervallo $(-1, 1)$.)
- I polinomi di Legendre sono definiti in modo ricorsivo da

$$L_0(x) = 1$$

$$L_1(x) = x$$

$$L_{k+1}(x) = \tfrac{2k+1}{k+1} x L_k(x) - \tfrac{k}{k+1} L_{k-1}(x) \quad k = 1, 2, \ldots$$

Formule di Gauss

Per verificare che la formula di Gauss di $n+1$ nodi ha grado di esatteza $2n+1$ dobbiamo vedere che per ogni $p(x) \in \mathbb{P}_{2n+1}$,

$$\int_{-1}^{1} p(x)\, dx = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^G p(x_i^G)\,.$$

Possiamo scrivere

$$p(x) = q(x) L_{n+1}(x) + r(x) \quad \text{con } q(x),\, r(x) \in \mathbb{P}_n\,.$$

e

$$q(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k L_k(x) \quad \text{con } c_k \in \mathbb{R}\,,$$

quindi

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k L_k(x) L_{n+1}(x) + r(x)\,.$$

Formule di Gauss

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} p(x)\,dx \quad &= \quad \sum_{k=0}^{n} c_k \int_{-1}^{1} L_k(x) L_{n+1}(x)\,dx + \int_{-1}^{1} r(x)\,dx \\
&=^{(1)} \quad \int_{-1}^{1} r(x) \\
&=^{(2)} \quad \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^G r(x_i^G) \\
&=^{(3)} \quad \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^G [q(x_i^G) L_{n+1}(x_i^G) + r(x_i^G)] \\
&= \quad \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^G p(x_i^G)
\end{aligned}
$$

(1) per l'ortogonalià dei polinomi di Legendre.
(2) $r(x) \in \mathbb{P}_n$ e questa è una formula di quadratura interpolatoria con $n+1$ nodi.
(3) i nodi $\{x_i^G\}_{i=0}^{n}$ sono le radici di $L_{n+1}(x)$ quindi $L_{n+1}(x_i^G) = 0$.

Formule di Gauss

I nodi e i pesi delle formule di Gauss nell'intervallo $(-1, 1)$ sono tabulati

Numero di nodi	nodi	pesi
2	$-\frac{1}{\sqrt{3}},\ \frac{1}{\sqrt{3}}$	1, 1
3	$-\sqrt{\frac{3}{5}},\ 0,\ \sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9},\ \frac{8}{9},\ \frac{5}{9}$
$\vdots$		

Esempio: formula a due punti

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx 1 \cdot f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + 1 \cdot f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Formule di Gauss

Esempio: formula a due punti

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)\,.$$

In un intervall generico

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b}{2} + t\,\frac{b-a}{2}\right)\,dt \\ &\approx \frac{b-a}{2}[f(\widehat{x}_0) + f(\widehat{x}_1)] := I_G(f)\end{aligned}$$

con

$$\widehat{x}_0 = \frac{a+b}{2} - \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{b-a}{2}\,,\ \text{e}\ \widehat{x}_1 = \frac{a+b}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{b-a}{2}\,.$$

Errore di quadratura

$$I(f) - I_G(f) = \frac{(b-a)^5}{5\cdot 24^3} f^{(iv)}(\xi)\,.$$

Algoritmi di integrazione adattivi

- L'obiettivo è fornire un'approssimazione di $\int_a^b f(x)\,dx$ garantendo che l'errore sia inferiore ad una tolleranza $\epsilon > 0$ prefissata.
- Usando le stime a posteriori dell'errore, è possibile scegliere il passo di integrazione H delle formule composite in modo di garantire la precisione desiderata.
- Ma l'idea dei metodi adattivi è usare una distribuzione non uniforme del passo d'integrazione sull'intervallo $[a, b]$.
- Un algoritmo ottimale adatta in modo automatico la scelta dell'ampieza del passo al comportamento della funzione $f \rightsquigarrow$ H più piccolo dove la funzione presenta variazioni più forti.

Algoritmi di integrazione adattivi

Se devo calcolare $\int_a^b f(x)\,dx$ con errore minore di ϵ, ad un certo punto del calcolo mi troverò a lavorare su un particolare sottointervallo $[\alpha, \beta] \subset [a, b]$ $\rightsquigarrow$ Intervallo attivo.

- avrò già calcolato $\int_a^\alpha f(x)\,dx$ con sufficiente accuratezza.
- a questo punto l'obiettivo sarà calcolare l'integrale tra α e β con sufficiente accuratezza

$$\int_\alpha^\beta f(x)\,dx \quad \rightsquigarrow \quad \epsilon\,\frac{\beta-\alpha}{b-a}\,.$$

- fatto questo mi preocuperò di calcolare $\int_\beta^b f(x)\,dx$ con sufficiente accuratezza.

Algoritmi di integrazione adattivi

Se uso, ad esempio, la formula di Cavalieri-Simpson

$$\int_\alpha^\beta f(x)\,dx \approx I_{CS}^1(f) = \frac{\beta-\alpha}{6}[f(\alpha) + 4f(\tfrac{\alpha+\beta}{2}) + f(\beta)]$$

Per stimare l'errore pero mi serve anche calcolare $I_{CS}^2(f)$.

$$|\int_\alpha^\beta f(x)\,dx - I_{CS}^2(f)| \approx \frac{1}{15}|I_{CS}^2(f) - I_{CS}^1(f)| =: \mathtt{err}$$

- Se $\mathtt{err} < \epsilon\frac{\beta-\alpha}{b-a}$
  - mi tengo come approssimazione di $\int_\alpha^\beta f(x)\,dx$ il valore $I_{CS}^2(f)$,
  - l'intervallo attivo diventa $[\beta, b]$.
- Se $\mathtt{err} \geq \epsilon\frac{\beta-\alpha}{b-a}$
  - mi concentro su un sottointervallo più piccolo; l'intervallo attivo diventa $[\alpha, \frac{\alpha+\beta}{2}]$

Algoritmi di integrazione adattivi

```
function I=adattCS(f,a,b,toll)
alpha=a;
beta=b;
I=0;
while alpha ~=b
  H=(beta-alpha)/2;
  x=[alpha:H/2:beta];
  y=eval(f);
  ICS1=H*(y(1)+4*y(3)+y(5))/3;
  ICS2=H*(y(1)+4*y(2)+2*y(3)+4*y(4)+y(5))/6;
  err=abs(ICS1-ICS2)/10;
  if err < toll*(beta-alpha)/(b-a);
   I=I+ICS2;
   alpha=beta;
   beta=b;
  else
   beta=(alpha+beta)/2;
  end
end
```

Algoritmi di integrazione adattivi

- Inizialmente l'intervallo attivo è tutto l'intervallo $[a, b]$.
- L'algoritmo si ferma quando nel spostare l'intervallo attivo trovo che diventa $\alpha = b$.
- In pratica è più conveniente assumere una stima dell'errore più conservativa $\rightsquigarrow$ `err=abs(ICS1-ICS2)/10`.
- Conviene introdurre un controllo (non presente nell'algoritmo precedente) per evitare che il passo d'integrazione diventi troppo piccolo.
  In caso di eccessiva riduzione è da segnalare la presenza di un eventuale punto di singolarità della funzione.