CALCOLO NUMERICO

Francesca Mazzia

Dipartimento Interuniversitario di Matematica

Università di Bari

Integrazione

Integrazione

Problema: approssimare integrali definiti del tipo:

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

Scegliamo $n+1$ punti nell'intervallo $[a,b]$ in modo tale che risulti $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$.

Consideriamo il polinomio interpolatore di Lagrange nei punti x_i per approssimare la f:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) + R_n(x)$$

dove $R_n(x)$ è l'errore commesso nell'interpolazione e $\{l_i(x)\}_{i=0}^{n}$ determinano la base di Lagrange. Sostituendo in si ha:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b \left(\sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) + R_n(x) \right) dx \\ &= \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b l_i(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx \\ &= \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + E_n(f),\end{aligned}$$

$$A_i = \int_a^b l_i(x)dx, \qquad \text{per } i = 0, 1, \ldots, n.$$

I punti x_i sono i nodi della formula. Il termine $E_n(f)$ è detto errore della formula di integrazione. Una formula è detta di grado d se risulta esatta per tutti i polinomi di grado minore od uguale a d, cioè se

$$E_n(f) = 0 \qquad \forall f \in P_d.$$

Una prima distinzione tra le varie formule riguarda la scelta dei nodi x_i. Essi possono essere fissati a priori oppure essere scelti in maniera da minimizzare l'errore $E_n(f)$. In ogni caso è comunque possibile costruire, utilizzando $n + 1$ nodi, formule di grado n.

Teorema.
Dati n+1 punti distinti $\{x_i\}_{i=0}^n$, è possibile determinare i coefficienti A_i, per $i = 0, 1, \ldots, n$, in modo tale che $E_n(f) = 0$ per tutti i polinomi f di grado minore od uguale a n.

Dimostrazione.
Sappiamo che l'errore $R_n(x)$ è dato da:

$$R_n(x) = (x - x_0) \ldots (x - x_n) f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x].$$

Se f è un polinomio di grado minore od uguale a n, allora $f[x_0, \ldots, x_n, x] = 0$. Quindi $E_n(f) = 0$ e la formula di quadratura risulta esatta. I coefficienti A_i sono univocamente determinati da

$$A_i = \int_a^b l_i(x) dx, \qquad \text{per } i = 0, 1, \ldots, n.$$

Formule di Newton-Cotes

Queste formule si ottengono scegliendo i nodi equidistanti, cioè:

$$x_i = a + (i-1)h \qquad \text{per } i = 0, 2, \ldots, n,$$

con $h = \dfrac{b-a}{n}$.

Per calcolare gli A_i dobbiamo valutare gli integrali che dipendono dal numero di nodi $n+1$. Le formule di Newton-Cotes più usate si ottengono ponendo $n = 1$ ed $n = 2$.

Formula dei trapezi ($n = 1$).

In questo caso $h = b - a$ e quindi $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Essendo

$$l_0(x) = \frac{x-b}{a-b}, \qquad l_1(x) = \frac{x-a}{b-a}$$

si ha:

$$\int_a^b l_0(x)dx = \int_a^b l_1(x)dx = \frac{b-a}{2}$$

e quindi:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] + E_1(f).$$

Si può dimostrare che se $f \in C^2[a,b]$ allora

$$E_2(f) = -\frac{h^3}{12}f''(\xi), \qquad \text{dove } \xi \in [a,b].$$

Formula di Simpson ($n = 3$).

In questo caso $h = \dfrac{b-a}{2}$ e quindi x_0 e x_2 coincidono con gli estremi dell'intervallo mentre x_1 è il punto medio. Si ha che

$$\int_a^b l_0(x)dx = \int_a^b l_2(x)dx = \frac{h}{3} \quad \text{e} \quad \int_a^b l_1(x)dx = \frac{4}{3}h,$$

da cui:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] + E_3(f).$$

Si può dimostrare che se $f \in C^4[a,b]$, allora:

$$E_3(f) = -\frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi) \qquad \text{dove } \xi \in [a,b].$$

Questa formula è quindi precisa anche per polinomi di grado 3.

Utilizzando le formula dei Trapezi e di Simpson, determiniamo un'approssimazione per il seguente integrale:

$$I = \int_0^{12} \left[e^{\sqrt{x}} \sin(x) + 2x + 6 \right] dx.$$

Indichiamo con I_1l'integrale ottenuto dalla formula dei Trapezi e con I_2 quello ottenuto dalla formula di Simpson. Poichè $f(a) = 6$, $f(b) = 12.858$ e $f\left(\frac{a+b}{2}\right) = 14.764$ si ha:

$$I_1 = 113.15, \qquad \text{e} \qquad I_2 = 155.82,$$

mentre $I = 188.35$.

I_1 è l'area del trapezio di vertici $(a, 0)$, $(a, f(a))$, $(b, 0)$ e $(b, f(b))$. Poichè invece la formula di Simpson calcola esattamente l'integrale di polinomi di grado due, I_2 risulta essere l'area nell'intervallo $[a,\ b]$ definita dalla parabola passante per $(a,\ f(a))$, $\left(\frac{a+b}{2},\ f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right)$, e $(b,\ f(b))$.

Formule composte

Le formule precedenti usano un unico polinomio interpolatore su tutto l'intervallo $[a, b]$. Ciò presenta talvolta degli inconvenienti dovuti essenzialmente al fatto che per n grande il polinomio può presentare delle oscillazioni. Inoltre la formula diventa costosa.

Le formule composte sono ottenute dividendo l'intervallo $[a, b]$ in un certo numero N di sottointervalli uguali, ed applicando in ognuno di questi una formula di quadratura di grado basso. Fissato $h = \frac{b-a}{N}$, e $x_i = a + ih$, per $i = 0, 1, \ldots, N$, si ha:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx,$$

se nel sottointervallo $[x_i, x_{i+1}]$ si usa la formula dei trapezi, si ha:

$$\int_a^b f(x)dx =$$
$$= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{x_{i+1} - x_i}{2} \Big(f(x_i) + f(x_{i+1}) \Big) + E(f)$$
$$= \frac{b-a}{2N} \left(f(a) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(b) \right) + E(f).$$

Nel caso in cui $f''(x)$ sia continua in $[a, b]$, si ottiene:

$$E(f) = -\frac{(b-a)^3}{12N^2} f''(\xi), \qquad \xi \in [a, b].$$

Se nel sottointervallo $[x_i, x_{i+1}]$ si usa la formula di Simpson si ottiene, nel caso in cui $f^{(IV)}(x)$ sia continua in $[a, b]$,

$$\int_a^b f(x)dx =$$
$$= \frac{b-a}{6N}$$
$$\sum_{i=0}^{N-1} \left(f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1}) \right) + E(f)$$
$$= \frac{b-a}{6N} \left(f(a) + \right.$$
$$\left. 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(b) + 4\sum_{i=0}^{N-1} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \right)$$
$$-\frac{(b-a)^5}{180N^4} f^{(IV)}(\xi).$$

Esempio Risolviamo il problema precedente suddividendo l'intervallo $[0, 12]$ in N sottointervalli di ampiezza uguale. Utilizzando la formula dei Trapezi e la formula di Simpson:

N	Trapezi	N	Simpson
10	191.86	5	187.82
20	189.13	10	188.34
30	188.69	15	188.35
40	188.54	20	188.35

Convenendo di considerare come costo del metodo il numero di valutazioni della funzione, il confronto tra i due metodi deve essere fatto a parità di costo. Se N è il numero di sottointervalli, il costo del metodo di Simpson è $2N - 1$, mentre quello dei trapezi è $N + 1$. Quindi si devono confrontare formule in cui N usato dalla formula dei Trapezi sia il doppio del corrispondente valore usato dalla formula di Simpson.

Le funzioni `quad` e `quad8` calcolano l'integrale definito di una funzione f all'interno di un fissato intervallo.

Accettano come dati in input:

$funz$	stringa contenente il nome del file in cui inserire la funzione integranda
a	estremo sinistro dell'intervallo
b	estremo destro dell'intervallo
tol	tolleranza dell'errore desiderata.

Il parametro di tolleranza tol ha come valore di default 10^{-3} e quindi può essere omesso. Hnnoa come dato di output:

q	integrale della funzione f.

Nel caso la funzione $quad$ o $quad8$ non riescano a calcolare il valore dell'integrale con la precisione desiderata, verrà posto $q = \infty$. Vengono richiamate mediante:

```
q = quad('funz', a, b, tol)
q = quad('funz', a, b, tol)
```

Stime dell'errore

Sia I_N l'integrale approssimato utilizzando la formula dei Trapezi composta utilizzando N sottointervalli, $h_N = (b-a)/N$ e sia I_{2N} l'integrale approssimato utilizzando $2N$ sottointervalli, $h_{2N} = (b-a)/N = h_N/2$.

Allora posto

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

si ha

$$I - I_N = -\frac{h_N^2}{12}(b-a)f''(\xi_N)$$

e

$$\begin{aligned} I - I_{2N} = & -\frac{h_{2N}^2}{12}(b-a)f''(\xi_{2N}) \\ = & -\frac{h_N^2}{4 \cdot 12}(b-a)f''(\xi_{2N}) \end{aligned}$$

Se $f''(x)$ è quasi costante in $[a, b]$ allora $f''(\xi_N) \approx f''(\xi_{2N})$ e

$$\frac{I - I_N}{I - I_{2N}} \approx 4$$

quindi

$$I \approx \frac{I_N - 4 * I_{2N}}{3} = I_{2N} + \frac{1}{3}(I_{2N} - I_N)$$

Utilizzando le approssimazioni I_N e I_{2N} otteniamo una stima dell'errore, che può essere utilizzata per verificare se abbiamo calcolato l'integrale con la precisione desiderata.

Formule Adattative

La funzione di cui vogliamo calcolare l'integrale può avere comportamenti diversi all'interno dell'intervallo $[a, b]$, ma se utilizziamo le formule composte il numero di suddicisioni dipende dall'intervallo in cui la funzione varia rapidamente. Un algoritmo efficiente si basa sull'adattare le formule utilizzate alla funzione.

a) Applichiamo una formula di quadratura per calcolare l'integrale su tutto l'intervallo $[a, b]$, se l'errore stimato è inferiore alla tolleranza richiesta τ l'algoritmo termina.

b) Se l'errore stimato è maggiore della tolleranza τ l'intervallo viene diviso in due parti uguali su cui si applica il procedimento descritto in a), utilizzando come tolleranza $\tau/2$.

Condizionamento

Problema

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

perturbiamo la funzione e calcoliamo l'integrale sui dati perturbati

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

quindi

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

e

$$|\delta I| \leq (b-a)\|\delta f\|_\infty$$

Se calcoliamo l'errore relativo

$$\frac{|\delta I|}{|I|} \leq (b-a)\frac{\|f\|_\infty}{|I|}\frac{\|\delta f\|_\infty}{\|f\|_\infty}$$