

Corso di Analisi Numerica - AN410

Parte 5: formule di quadratura

Roberto Ferretti



- Formule di quadratura interpolatorie: teoria generale
- Formule di Newton–Cotes semplici
- Formule di Newton–Cotes composite
- Formule Gaussianhe

Formule di quadratura interpolatorie: teoria generale

Le *formule di quadratura* (o di *integrazione numerica*) sono algoritmi di approssimazione dell'integrale ottenuti dalla integrazione di una approssimazione della funzione integranda.

- Se la approssimazione è scritta in forma di **combinazione lineare**,

$$f(x) = c_0\phi_0(x) + \cdots + c_n\phi_n(x) + E_n(x)$$

allora l'integrale si scrive

$$\int_a^b f(x)dx = c_0 \int_a^b \phi_0(x)dx + \cdots + c_n \int_a^b \phi_n(x)dx + \int_a^b E_n(x)dx.$$

- L'espressione

$$I_n(f, a, b) = c_0 \int_a^b \phi_0(x) dx + \cdots + c_n \int_a^b \phi_n(x) dx$$

rappresenta l'approssimazione dell'integrale e viene indicata con il nome di **formula di quadratura**

- Se la approssimazione di f è nella forma di **polinomio di Lagrange**, si ha $c_i = f(x_i)$ e $\phi_i(x) = L_i(x)$, e la formula di quadratura si scrive nella forma **interpolatoria**

$$I_n(f, a, b) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$$

con **nodi** x_i e **pesi** $\alpha_i = \int_a^b L_i(x) dx$

I pesi α_i vengono calcolati di regola su un *intervallo di riferimento* $[\bar{a}, \bar{b}]$. Se in corrispondenza di $x \in [a, b]$ si ha $t \in [\bar{a}, \bar{b}]$, la trasformazione che lega x a t è

$$x(t) = a + \frac{b-a}{\bar{b}-\bar{a}}(t-\bar{a})$$

e di conseguenza $x_i = x(t_i)$, e

$$\alpha_i = \int_a^b L_i(x) dx = \frac{b-a}{\bar{b}-\bar{a}} \int_{\bar{a}}^{\bar{b}} L_i(x(t)) dt = \frac{b-a}{\bar{b}-\bar{a}} w_i$$

in cui il valore w_i è il *peso associato al nodo* t_i nell'*intervallo di riferimento*. Tipici esempi sono un intervallo con distanza unitaria tra i nodi nel caso di formule a nodi equidistanti e l'intervallo $[-1, 1]$ per le formule gaussiane.

L'errore di quadratura viene stimato in genere in modo molto tecnico. Una maggiorazione banale se ne può dare a partire dall'errore di approssimazione $E_n(x)$:

$$\left| \int_a^b f(x) dx - I_n(f, a, b) \right| = \left| \int_a^b E_n(x) dx \right| \leq (b - a) \|E_n\|_\infty$$

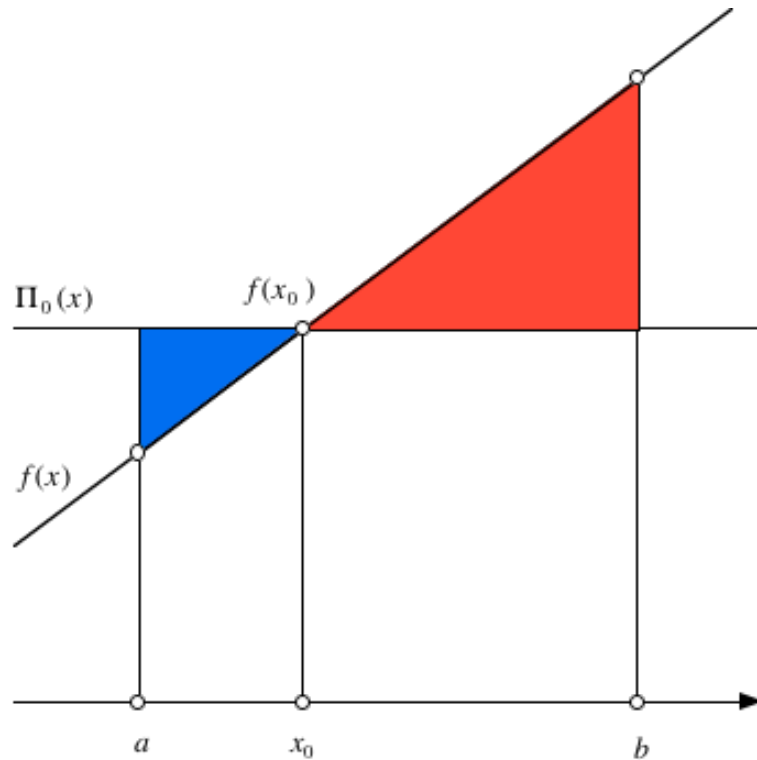
- Questo modo di stimare l'errore non tiene però conto del fatto che l'errore di approssimazione E_n può avere integrale “piccolo” senza essere “piccolo” esso stesso, tipicamente a causa di cancellazioni tra contributi positivi e contributi negativi

Un altro modo (indiretto) di caratterizzare l'accuratezza di una formula di quadratura è tramite il suo *grado di precisione*, il massimo intero m tale che tutti i polinomi grado non superiore ad m siano integrati esattamente:

$$m = \max \left\{ k : \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) = \int_a^b f(x) dx, \quad \forall f \in \mathbb{P}_k \right\}$$

- Se n è il grado del polinomio interpolatore, $E_k \equiv 0$ per $k = 0, \dots, n$, e di conseguenza $m \geq n$.
- E' però possibile che $\int_a^b E_k = 0$ anche se l'errore di interpolazione non è identicamente nullo, e di qui la possibilità di avere $m > n$.

Esempio: $n = 0$



La formula di quadratura è

$$I_0(f, a, b) = (b - a)f(x_0)$$

cioè l'area del rettangolo di base $[a, b]$ e di altezza $f(x_0)$.

- Le costanti sono sempre integrate esattamente ($E_0 \equiv 0$)
- I polinomi di grado 1 sono integrati esattamente a condizione che $x_0 = \frac{a+b}{2}$ ($E_0 \neq 0$, $\int_a^b E_0 = 0$)

La **condizione necessaria e sufficiente** (teorema di Polya) perché una formula di quadratura nella forma

$$I_n(f, a, b) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) \quad (x_i \in [a, b])$$

converga a $\int_a^b f(x)dx$ per ogni $f \in C^0([a, b])$ quando $n \rightarrow \infty$, è che

i) per ogni polinomio fissato $p \in \mathbb{P}_k$, $\lim_{n \rightarrow \infty} I_n(p, a, b) = \int_a^b p(x)dx$

ii) esista una costante $M > 0$ tale che, per ogni n , $\sum_{i=0}^n |\alpha_i| < M$

Se la formula di quadratura è ottenuta dalla **integrazione di un polinomio interpolatore** di grado n :

- la prima ipotesi è sempre soddisfatta (infatti $E_n \equiv 0$ per $n \geq k$)
- poiché le costanti sono sempre interpolate (e quindi integrate) esattamente, si verifica facilmente che $\sum_i \alpha_i = b - a$
- non è invece necessariamente vero che $\sum_i |\alpha_i|$ resti limitata: in particolare, se i nodi sono equidistanti questa sommatoria diverge per $n \rightarrow \infty$

La quantità $\sum_i |\alpha_i|$ è anche legata alla propagazione delle perturbazioni. Supponendo infatti che i valori $f(x_i)$ siano affetti da perturbazioni δ_i , tali che $|\delta_i| \leq \delta$, si ha

$$\sum_{i=0}^n \alpha_i [f(x_i) + \delta_i] = I_n(f, a, b) + \sum_{i=0}^n \alpha_i \delta_i$$

dove il modulo dell'ultimo termine si maggiora come

$$\left| \sum_{i=0}^n \alpha_i \delta_i \right| \leq \delta \sum_{i=0}^n |\alpha_i| \leq \delta M$$

- Se i pesi sono tutti positivi, $M = b - a$, altrimenti le perturbazioni si propagano in misura più forte (situazione che si evita quanto possibile)

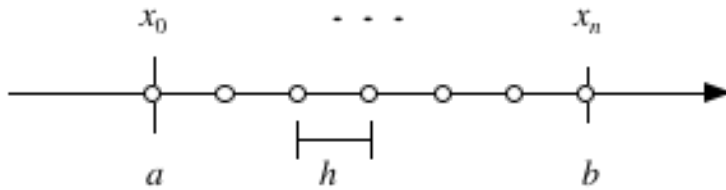
Formule di Newton–Cotes semplici

Queste formule di quadratura sono basate sulla integrazione di un unico polinomio interpolatore di grado n costruito su **nodi equidistanti**.

Si dividono in due sottoclassi:

- Le **formule di Newton–Cotes chiuse** in cui i due nodi estremi x_0 e x_n coincidono con gli estremi dell'intervallo di integrazione
- Le **formule di Newton–Cotes aperte** in cui tutti i nodi sono interni all'intervallo di integrazione

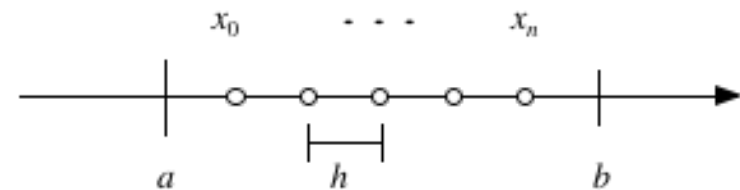
Formule chiuse



$$h = \frac{b - a}{n}$$

$$\begin{cases} x_0 = a \\ \vdots \\ x_k = a + kh \\ \vdots \\ x_n = b \end{cases}$$

Formule aperte



$$h = \frac{b - a}{n + 2}$$

$$\begin{cases} x_0 = a + h \\ \vdots \\ x_k = a + (k + 1)h \\ \vdots \\ x_n = b - h \end{cases}$$

Costruzione delle formule di N–C: si può partire ad esempio da un intervallo di riferimento in cui $t_k = k$, ed in conseguenza nell'intervallo di integrazione effettivo si avrà $\alpha_k = hw_k$.

- Per il grado $n = 0$ la formula può essere solo aperta. L'intervallo di riferimento è $[-1, 1]$, l'unico nodo è $t_0 = 0$, e $L_0(t) \equiv 1$. Si ha

$$w_0 = \int_{-1}^1 L_0(t) dt = 2$$

- Questa formula va sotto il nome di **formula del punto medio**, ed il suo grado di precisione (come abbiamo già detto) è $m = 1$ anche se l'interpolazione è di grado $n = 0$

La situazione in cui $m = n+1$ è del tutto generale nelle formule di N-C di grado pari e più in generale in tutte le formule con nodi simmetrici rispetto al centro dell'intervallo ed in numero dispari. Infatti, se $f \in \mathbb{P}_{n+1}$, l'errore di interpolazione vale

$$E_n(x) = f(x) - \Pi_n(x) = \frac{c_{n+1}}{(n+1)!} \omega_n(x)$$

(in cui c_{n+1} è il valore costante della derivata $f^{(n+1)}$). Si ottiene quindi

$$\int_a^b E_n(x) dx = \frac{c_{n+1}}{(n+1)!} \int_a^b \omega_n(x) dx = 0$$

poiché ω_n è una funzione dispari rispetto al centro dell'intervallo ed ha quindi integrale nullo.

Per il grado $n = 1$ la formula può essere sia chiusa che aperta.

- Per la **formula chiusa** (detta **formula del trapezio**) l'intervallo di riferimento è $[0, 1]$, i due nodi sono $t_0 = 0$ e $t_1 = 1$, la base di Lagrange è costituita dalle funzioni $L_0(t) = 1 - t$ e $L_1(t) = t$. Si ottengono così i pesi

$$w_0 = \int_0^1 L_0(t) dt = \frac{1}{2}, \quad w_1 = \int_0^1 L_1(t) dt = \frac{1}{2} = 1 - w_0$$

- Per la **formula aperta** i nodi e le funzioni di base sono gli stessi, ma l'intervallo di riferimento è $[-1, 2]$. Si ottengono i pesi

$$w_0 = \int_{-1}^2 L_0(t) dt = \frac{3}{2}, \quad w_1 = \int_{-1}^2 L_1(t) dt = \frac{3}{2} = 3 - w_0$$

Formule di N–C chiuse							
n	w_0	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	w_6
1	$1/2$	$1/2$					
2	$1/3$	$4/3$	$1/3$				
3	$3/8$	$9/8$	$9/8$	$3/8$			
4	$28/90$	$128/90$	$48/90$	$128/90$	$28/90$		
5	$95/288$	$375/288$	$250/288$	$250/288$	$375/288$	$95/288$	
6	$41/140$	$216/140$	$27/140$	$272/140$	$27/140$	$216/140$	$41/140$

Formule di N–C aperte				
n	w_0	w_1	w_2	w_3
0	2			
1	$3/2$	$3/2$		
2	$8/3$	$-4/3$	$8/3$	
3	$55/24$	$5/24$	$5/24$	$55/24$

- La **somma dei pesi** uguaglia come sempre l'ampiezza dell'intervallo (questo permette di evitare il calcolo di uno degli integrali)
- Per la **simmetria dei nodi**, anche i pesi sono simmetrici e più precisamente $w_k = w_{n-k}$ (questo permette di restringere il calcolo a metà dei pesi)
- **Pesi negativi** cominciano a comparire dal grado $n = 7$ per le formule **chiuse** e dal grado $n = 2$ per le formule **aperte**
- In tutte le formule di Newton–Cotes si ha $\lim_n \sum_k |w_k| = \infty$

L'errore di quadratura nelle formule di Newton–Cotes vale

$$\int_a^b f(x)dx - I_n(f, a, b) = \begin{cases} \frac{A_n h^{n+2}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) & \text{se } n \text{ è dispari} \\ \frac{B_n h^{n+3}}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\xi) & \text{se } n \text{ è pari} \end{cases}$$

dove $\xi \in (a, b)$ e le costanti A_n, B_n sono date da

$$A_n = \begin{cases} \int_0^n s(s-1)\cdots(s-n)ds < 0 & \text{per formule chiuse} \\ \int_{-1}^{n+1} s(s-1)\cdots(s-n)ds > 0 & \text{per formule aperte} \end{cases}$$

$$B_n = \begin{cases} \int_0^n s^2(s-1)\cdots(s-n)ds < 0 & \text{per formule chiuse} \\ \int_{-1}^{n+1} s^2(s-1)\cdots(s-n)ds > 0 & \text{per formule aperte} \end{cases}$$

- Queste formule di rappresentazione dell'errore di quadratura hanno una **dimostrazione molto tecnica**
- La **mancata limitatezza di $\sum_k |\alpha_k|$** indica che non si ha convergenza per $n \rightarrow \infty$ (cioè le formule di N–C semplici vanno viste come **componenti elementari di formule di integrazione composite**)
- Quando h venga visto come parametro di discretizzazione, le formule di ordine più alto presentano un **maggiore ordine di convergenza**, a patto che la funzione f sia sufficientemente regolare

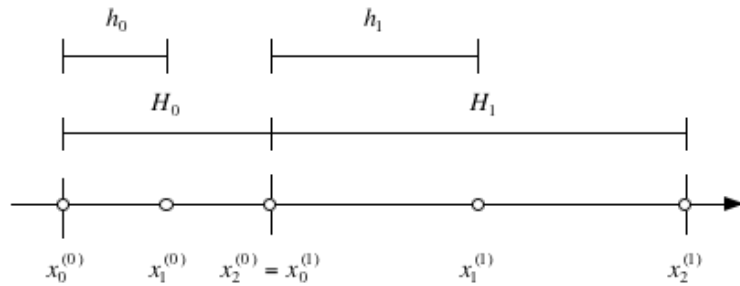
Formule di Newton–Cotes composite

Il fatto che le formule di N–C semplici non convergono per $n \rightarrow \infty$ porta (analogamente al caso dell'interpolazione a nodi equidistanti) a considerare la loro implementazione in forma composita:

$$I_{n,m}(f, a, b) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{k=0}^n \alpha_k^{(j)} f(x_k^{(j)})$$

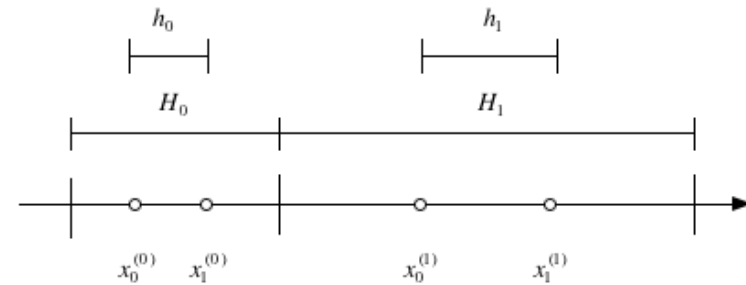
- L'indice j si riferisce al sottointervallo, k al nodo al suo interno, ed inoltre $H_j = b_j - a_j$ (con $\sum_j H_j = b - a$), e $H = \max_j H_j$.
- La situazione considerata è quella di una unica formula di quadratura impiegata su intervalli di ampiezza variabile H_j

Formule chiuse



Formula di Simpson (chiusa, $n = 2$) su due sottointervalli

Formule aperte



Formula aperta di grado $n = 1$ su due sottointervalli

- Si parte da una unica formula di quadratura con pesi w_k
- Il passo tra i nodi dell'intervallo j -simo vale

$$h_j = \frac{H_j}{l}, \quad l = \begin{cases} n & \text{per quadrature chiuse} \\ n + 2 & \text{per quadrature aperte} \end{cases}$$

- I pesi relativi all'intervallo j -simo sono

$$\alpha_k^{(j)} = h_j w_k$$

- La condizione di integrazione esatta delle costanti ha la forma

$$\sum_k \alpha_k^{(j)} = H_j$$

- Si possono accorpare i pesi relativi allo steso nodo

Una situazione tipica è quella di **nodi equidistanti**. In questo caso i sottointervalli hanno ampiezza costante $H_j \equiv H$ ed i nodi si numerano usualmente **in modo consecutivo (con un solo indice)**. Ad esempio:

- Nel caso della **formula dei trapezi composta** si ha $h = H$, $\alpha_k^{(j)} = hw_k$ e si sommano i due pesi relativi ad ogni nodo interno, ottenendo

$$I_{1,m}(f, a, b) = \frac{h}{2} (f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m))$$

- Per la **formula di Simpson composta**, allo stesso modo si ottiene

$$I_{2,m}(f, a, b) = \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{2m-1}) + 4f(x_{2m}) + f(x_{2m+1}))$$

- Le quadrature di Newton–Cotes composite **convergono sotto la sola ipotesi di Riemann–integrabilità** per $H \rightarrow 0$ (la dimostrazione si basa sul fatto che queste quadrature si possono reinterpretare come **combinazioni lineari a somma unitaria di somme integrali di Riemann**)
- Se la **formula semplice** presenta un errore della forma:

$$\int_{a_j}^{b_j} f(x) dx - I_n(f, a_j, b_j) = C_n h_j^{p+1} f^{(p)}(\xi)$$

allora per la **formula composta** si ha la maggiorazione di errore

$$\left| \int_a^b f(x) dx - I_{n,m}(f, a, b) \right| = D_n H^p \|f^{(p)}\|_\infty$$

[indice](#)

Formule Gaussiane

Si tratta di formule di quadratura interpolatorie a nodi non equidistanti costruite in modo da massimizzare il grado di precisione.

- Un esempio semplice di questa idea è dato dalla formula del punto medio in cui il grado di precisione passa da $m = 0$ ad $m = 1$ collocando opportunamente il nodo x_0
- Per questa strada si costruiscono formule a pesi positivi, convergenti per $n \rightarrow \infty$ e con grado di precisione $m = 2n + 1$
- L'intervallo di riferimento normalmente è $[-1, 1]$

Esempio: formula a due nodi simmetrici $\pm a$ in $[-1, 1]$

- Le costanti sono integrate esattamente se $\alpha_0 + \alpha_1 = 2$
- I termini di primo grado sono integrati esattamente se $\alpha_0 = \alpha_1$

- I termini di secondo grado sono integrati esattamente se

$$\int_{-1}^1 x^2 dx = I_1(x^2, -1, 1) \equiv \alpha_0 \cdot (-a)^2 + \alpha_1 \cdot a^2 = 2a^2,$$

il che porta alla scelta $a = 1/\sqrt{3}$

- I termini di terzo grado sono già integrati esattamente per simmetria

Premessa: indichiamo con il nome di *polinomi di Legendre* in $[-1, 1]$ la famiglia di polinomi $\{P_k\}$ tali che $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$, $\deg P_k = k$, e che

$$\int_{-1}^1 P_i(x)P_j(x)dx = 0 \quad \text{se } i \neq j$$

- Questa famiglia si può costruire per **ortogonalizzazione della base naturale** $\{1, x, x^2, \dots\}$, oppure mediante la formula ricorrente

$$P_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1}xP_k(x) - \frac{k}{k+1}P_{k-1}(x)$$

che permette di calcolarli per $k \geq 1$ dati P_0 e P_1 .

- L'insieme $\{P_0, P_1, \dots, P_k\}$ è **una base dello spazio** \mathbb{P}_k

Nelle formule di Gauss–Legendre:

- gli $n + 1$ nodi di quadratura vengono posti in corrispondenza delle radici del polinomio di Legendre P_{n+1} (ovvero il polinomio di errore ω_n coincide a meno di costanti moltiplicative con P_{n+1}). Nella pratica i nodi devono essere a loro volta calcolati in modo approssimato
- I pesi di quadratura sono definiti nella maniera usuale $\alpha_i = \int L_i(x) dx$ (questo integrale può essere valutato esattamente mediante una quadratura che abbia il grado di precisione richiesto, ad esempio una formula gaussiana di grado appena più basso)

n	t_i	w_i
0	0.0	2.0
1	± 0.57735027	1.0
2	± 0.77459667 0.0	0.55555556 0.88888889
3	± 0.86113631 ± 0.33998104	0.34785485 0.65214515
4	± 0.90617985 ± 0.53846931 0.0	0.23692689 0.47862867 0.56888889

Riguardo alla convergenza delle formule di Gauss–Legendre:

- Le formule gaussiane convergono per ogni $f \in C^0([-1, 1])$. La convergenza deriva dalla applicazione del teorema di Polya, poiché la formula è costruita integrando il polinomio di Lagrange, ed inoltre

i) i nodi sono tutti interni a $[-1, 1]$;

ii) i pesi sono tutti positivi, quindi $\sum_k |\alpha_k| = 2$

- Il grado di precisione di una formula gaussiana a $n + 1$ nodi è $m = 2n + 1$ (questo implica anche una stima molto favorevole dell'errore)

Confronto 1: calcolo con una quadratura a cinque nodi dell'integrale

$$\int_0^{\pi} \sin x dx = 2$$

- La formula di N–C semplice di grado 4 dà

$$I_4(\sin x, 0, \pi) = \frac{\pi}{4} \left(\frac{128}{90} \sin \frac{\pi}{4} + \frac{48}{90} \sin \frac{\pi}{2} + \frac{128}{90} \sin \frac{3\pi}{4} \right) \approx 1.998571$$

- In questo caso la accuratezza della quadratura non è sorprendente, visto che la funzione integranda è analitica, e quindi anche la strategia a nodi equidistanti porta ad un polinomio interpolatore convergente

- La formula di N–C composta di grado 1 dà

$$I_{1,4}(\sin x, 0, \pi) = \frac{\pi}{4} \left(\sin \frac{\pi}{4} + \sin \frac{\pi}{2} + \sin \frac{3\pi}{4} \right) \approx 1.896119$$

- La formula di N–C composta di grado 2 dà

$$I_{2,2}(\sin x, 0, \pi) = \frac{\pi}{12} \left(4 \sin \frac{\pi}{4} + 2 \sin \frac{\pi}{2} + 4 \sin \frac{3\pi}{4} \right) \approx 2.004560$$

- La formula di grado 2 ha ovviamente una **accuratezza migliore**, anche perché l'approssimazione di grado 1 presenta un errore sistematico con una funzione concava

- La formula di gauss–Legendre a cinque nodi necessita di riportare preliminarmente nodi e pesi all'intervallo $[0, \pi]$, ottenendo

$$\left\{ \begin{array}{ll} x_0 = 0.147374, & \alpha_0 = 0.372164 \\ x_1 = 0.724971, & \alpha_1 = 0.751829 \\ x_2 = 1.570796, & \alpha_2 = 0.893609 \\ x_3 = 2.416621, & \alpha_3 = 0.751829 \\ x_4 = 2.994219, & \alpha_4 = 0.372164 \end{array} \right.$$

ed il valore risultante della quadratura è (sempre con sei decimali) $I_4(\sin x, 0, \pi) \approx 2.000003$. La grande accuratezza dipende sia dall'elevato grado di precisione che dalla regolarità della funzione integranda.

Confronto 2: calcolo con una quadratura a cinque nodi dell'integrale

$$\int_0^1 \sqrt{x} dx = \frac{2}{3}$$

- La formula di N–C semplice di grado 4 dà

$$I_4(\sqrt{x}, 0, 1) = \frac{1}{4} \left(\frac{128}{90} \cdot \frac{1}{2} + \frac{48}{90} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{128}{90} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{28}{90} \right) \approx 0.657757$$

- In questo caso la accuratezza della quadratura è molto ridotta dalla scarsa regolarità della funzione integranda

- La formula di N–C composta di grado 1 dà

$$I_{1,4}(\sqrt{x}, 0, 1) = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{2} \right) \approx 0.643283$$

- La formula di N–C composta di grado 2 dà

$$I_{2,2}(\sqrt{x}, 0, \pi) = \frac{1}{12} \left(4 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + 4 \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right) \approx 0.656526$$

- Le due formule hanno entrambe **accuratezza comparabile con la formula semplice**. L'approssimazione di grado 1 presenta ancora un errore sistematico dovuto alla concavità della funzione integranda

- Nodi e pesi della **formula di gauss–Legendre a cinque nodi**, riportati all'intervallo $[0, 1]$, sono

$$\left\{ \begin{array}{ll} x_0 = 0.04691, & \alpha_0 = 0.118464 \\ x_1 = 0.230765, & \alpha_1 = 0.239315 \\ x_2 = 0.5, & \alpha_2 = 0.284445 \\ x_3 = 0.769235, & \alpha_3 = 0.239315 \\ x_4 = 0.95309, & \alpha_4 = 0.118464 \end{array} \right.$$

ed il risultato, sempre con sei decimali, è $I_4(\sqrt{x}, 0, 1) \approx 0.667299$.
La formula gaussiana presenta quindi ancora **la migliore accuratezza**,
anche se ridotta dalla **bassa regolarità** della funzione