CAPITOLO VI

FORMULE DI QUADRATURA

In questo capitolo verranno presentate delle formule, dette **formule di quadratura**, per l'approssimazione numerica degli integrali definiti del tipo $\int_a^b w(x)f(x)dx$ dove la funzione w(x), detta **funzione peso**, gode delle proprietà:

1) $w(x)\geq 0 \quad \forall x\in[a,b]$
2) $\int_a^b w(x)x^r dx < \infty \quad \forall r\in N$
3) $\int_c^d w(x)dx \neq 0 \quad \forall\ c\neq d;$ con $c,d \in[a,b]$.

Considereremo formule di quadratura del tipo:

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \tag{6.1}$$

dove le costanti A_i sono dette **pesi** ed i punti x_i sono detti **nodi** della formula. Formule di questo tipo possono sempre essere ottenute attraverso l'integrazione di una formula di interpolazione di Lagrange per la funzione f(x).

Si ha infatti, per ogni punto x di [a,b]:

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

moltiplicando entrambi i membri per w(x) ed integrando su [a,b] si ottiene:

$$\begin{aligned}\int_a^b w(x)f(x)dx &= \int_a^b w(x)\sum_{i=0}^{n}\ell_i(x)f(x_i) + \int_a^b w(x)err(x)dx\\ &=\sum_{i=0}^{n}\int_a^b w(x)\ell_i(x)f(x_i)dx + \int_a^b w(x)err(x)dx\\ &=\sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b w(x)\ell_i(x)dx\right)f(x_i) + \int_a^b w(x)err(x)dx\\ &=\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)+E\end{aligned}$$

dove $A_i = \int_a^b w(x)\ell_i(x)dx$ ed $E=\int_a^b w(x)err(x)dx$ è il **resto** della formula.

Le formule così ottenute sono chiamate **formule di quadratura lagrangiana**. In esse i pesi sono automaticamente determinati dalla scelta dei nodi, ed il resto, determinato dall'integrale dell'errore di interpolazione, dipende dalla regolarità della funzione integranda e dalla posizione dei nodi stessi.

Poichè le formule di interpolazione di Lagrange su $n+1$ nodi sono esatte per tutti i polinomi di grado $\leq n$, tali risultano anche le formule di quadratura lagrangiana, il cui resto è dato dall'integrale dell'errore di interpolazione moltiplicato per $w(x)$. In linea di principio, poichè un integrale può essere nullo senza che la funzione integranda sia identicamente nulla, c'è la possibilità che la formula di quadratura (6.1) sia esatta anche per polinomi di grado più elevato. Diremo che una formula di quadratura (6.1) ha **ordine polinomiale** uguale a p se p è il massimo grado dei polinomi per i quali la formula è esatta. In ogni caso la formula lagrangiana ha ordine polinomiale almeno p per ogni scelta dei nodi.

Ulteriori cenni sui polinomi ortogonali.

Sia $\{\Phi_i(x)\}_{i\in N}$, con $\Phi_i(x) \in \Pi_i$, un sistema di polinomi ortogonali rispetto al prodotto scalare:

$$\langle f,g \rangle := \int_a^b w(x)f(x)g(x)dx \qquad (6.2)$$

dove $w(x)$ è una funzione peso.

Ogni polinomio del sistema è definito a meno di una costante moltiplicativa, quindi possiamo sempre assumere per semplicità, che $\Phi_n(x)$ sia *monico* per ogni n. Un sistema di polinomi ortogonali è caratterizzato dalla seguente proprietà.

Caratterizzazione dei sistemi di polinomi ortogonali.
Un sistema di polinomi $\{\Phi_i(x)\}_{i\in N}$, *con* $\Phi_i(x) \in \Pi_i$, *è un sistema ortogonale se e solo se, per ogni* n, $\Phi_n(x)$ *è ortogonale a tutti i polinomi algebrici di grado inferiore*.

Dim. Poichè il sistema $\{\Phi_i(x)\}_{i\in N}$, è ortogonale, ogni $\Phi_n(x)$ è ortogonale a tutti gli altri polinomi del sistema, in particolare ai $\Phi_k(x)$ con $k<n$ e quindi ad ogni loro combinazione linare, cioè ad ogni polinimio di grado $<k$.

Viceversa se, per ogni n, $\Phi_n(x)$ è ortogonale a tutti i polinomi algebrici di grado inferiore, allora $\forall i\neq j$ si ha $\Phi_i(x)\perp\Phi_j(x)$.

Per le radici dei polinomi ortogonali, vale il seguente teorema.

Teorema 6.1. *Per ogni* n*, il polinomio* $\Phi_n(x)$ *ammette* n *radici reali, distinte ed interne all'intervallo* [a,b].

Dim. Per il polinomio $\Phi_n(x)$, con n>0, si ha:

$$\int_a^b w(x)\Phi_n(x)dx = \langle \Phi_n, 1 \rangle = 0 .$$

Ciò significa che $w(x)\Phi_n(x)$, e quindi $\Phi_n(x)$, non può avere segno costante in [a,b] o, in altre parole, che $\Phi_n(x)$ ammette almeno una radice interna ad [a,b] e di molteplicità dispari. Supponiamo che le radici interne ad [a,b] di molteplicità dispari siano $x_1, \dots x_r$ con r<n. Poichè per il polinomio $q(x) := (x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_r)$ il prodotto $\Phi_n(x)q(x)$ ha segno costante, ≤0 oppure ≥0 in tutto [a,b], dovrà essere

$$\int_a^b w(x)\Phi_n(x)(x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_r)dx = \langle \Phi_n, q \rangle \neq 0$$

Ciò e' assurdo perche q(x) ha grado inferiore ad n e quindi è ortogonale a $\Phi_n(x)$. Le radici di $\Phi_n(x)$ interne ad [a,b] non possono quindi essere in numero inferiore ad n, e allora sono esattamente n.

<u>*Formule di quadratura gaussiana.*</u>

Come abbiamo osservato in precedenza, le formule lagrangiane su n+1 nodi hanno ordine polinomiale almeno n per ogni scelta dei nodi. E' possibile scegliere i nodi in modo che l'ordine sia più alto?. Se ciò è possibile, qual'è il massimo ordine polinomiale raggiungibile?.

A questo proposito vale il seguente teorema.

Teorema 6.2. *Per ogni funzione peso* w(x)*, la formula di quadratura* (6.1) *ha ordine polinomiale* 2n+1 *se e solo se i nodi sono gli zeri del polinomio* $\Phi_{n+1}(x)$ *appartenemte al sistema di polinomi ortogonali rispetto al prodotto scalare* (6.2).

Dim. Dato il carattere lagrangiano della formula, il resto è dato da:

$$E = \int_a^b w(x)\left(f(x) - \sum_{i=0}^{n} \ell_i(x) f(x_i) \right) dx .$$

Supponiamo che i nodi siano gli zeri di $\Phi_{n+1}(x)$ e quindi $\Phi_{n+1}(x)=c(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)$.

Sia f(x) un arbitrario polinomio di grado 2n+1, dimostriamo che E=0.

Poichè l'interpolante $\sum_{i=0}^{n} \ell_i(x) f(x_i)$ è un polinomio di grado n, il termine f(x)-$\sum_{i=0}^{n} \ell_i(x) f(x_i)$ è un polinomio di grado 2n+1 che si annulla sui nodi. Esso è quindi del tipo

$$f(x)-\sum_{i=0}^{n} \ell_i(x) f(x_i) = q_n(x)(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n) = q_n(x)\Phi_{n+1}(x)$$

con $q_n(x)$ polinomio arbitrario di grado n. Si ha quindi

$$E = \int_a^b w(x)\, q_n(x)\Phi_{n+1}(x)dx=0.$$

Viceversa, supponiamo che la formula abbia ordine polinomiale 2n+1. Allora è esatta per ogni polinomio del tipo $q_n(x)(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)$, dove x_i i=0,...,n sono i nodi, e $q_n(x)$ è un polinomio arbitrario di grado n:

$$E = \int_a^b w(x)\, q_n(x)(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)dx=0.$$

Per l'arbitrarietà di $q_n(x)$ e per la proprietà caratteristica dei sistemi ortogonali, il polinomio $(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)$ coincide necessariamente con $\Phi_{n+1}(x)$.

Infine è evidente che l'ordine polinomiale non può superare 2n+1. Infatti se la formula fosse esatta per tutti i polinomi di grado 2n+2, i nodi dovrebbero essere, per la prima parte del teorema, gli zeri di $\Phi_{n+1}(x)$. In tal caso, per l'integrale $\int_a^b w(x)\, \Phi_{n+1}^2(x)dx$, la formula fornirebbe il valore nullo e non il valore esatto che è >0.

Definizione. *Le formule di quadratura lagrangiana su* n *nodi che raggiungono l' ordine polinomiale* 2n+1 *sono dette* **formule di quadratura gaussiana.**

Alcune formule di quadratura gaussiana.

Nel caso w(x)=1 e [a,b]=[-1,1] i polinomi ortogonali sono noti come **Polinomi di Legendre**, sono indicati con $P_n(x)$ e sono calcolabili attraverso la relazione ricorsiva:

$$P_{n+1} = \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x), \quad P_0(x)=1,\ P_1=x$$

Le corrispondenti formule per il calcolo di $\int_{-1}^{1} f(x)dx$ sono dette **formule di Gauss-Legendre**.

Per i primi valori di n, gli n+1 nodi e pesi sono forniti dalla seguente tabella:

n	nodi x_i	pesi A_i
0	0	2
1	± 0.577350	1
2	0	8/9
	± 0.774597	5/9
3	± 0.339981	0.652145
	± 0.861136	0.347855
4	0	0.568889
	± 0.538469	0.478929
	± 0.906180	0.236927

Analogamente nel caso $w(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ e $[a,b]=[-1,1]$ si ottengono i **Polinomi di Chebyshev** che già conosciamo.

Le corrispondenti formule per il calcolo di $\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx$ sono dette **formule di Gauss-Chebyshev**.

Come già sappiamo, per ogni n gli n+1 nodi sono dati dalla formula

$$x_i = \cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi \qquad i=0,1,...,n,$$

mentre i pesi sono:

$$A_i = \frac{\pi}{(n+1)} \qquad i=0,1,...,n.$$

Nel caso $w(x)=e^{-x}$ e $[a,b]=[0,+\infty]$, il prodotto scalare (6.2) è ben definito per ogni coppia di polinomi algebrici, ed i polinomi ortogonali sono noti come **Polinomi di Laguerre.** Essi sono indicati con $L_n(x)$ e sono esprimibili attraverso la relazione ricorsiva:

$$L_{n+1} = (2n+1-x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x), \quad L_0(x)=1,\ L_1=1-x$$

Le corrispondenti formule per il calcolo di $\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x)dx$ sono dette **formule di Gauss-Laguerre**. Per i primi valori di n i nodi ed i pesi sono forniti dalla seguente tabella:

n	nodi x_i	pesi A_i
0	1	1
1	0.585786	0.853553
	3.414214	0.146447
2	0.415775	0.711093
	2.294280	0.278518
	6.289945	0.010389
3	0.322548	0.603154
	1.745761	0.357419
	4.536620	0.038888
	9.395071	0.000539
4	0.263560	0.521756
	1.413403	0.398667
	3.596426	0.075942
	7.085810	0.003612
	12.640801	0.000023

Esistono sistemi di polinomi ortogonali e corrispondenti formule di quadratura gaussiana per molti tipi di funzione peso. Comunque, in generale, ogni integrale può essere espresso nella forma $\int_a^b f(x)dx$ ed essere approssimato con le formule di Gauss-Legendre attraverso il cambio di variabile:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b+t(b-a)}{2}\right)dt\,.$$

Convergenza delle formule di quadratura

Teorema 6.3. *Se i pesi* A_i *di una formula di quadratura soddisfano la condizione*

$$\sum_{i=0}^{n} |A_i| \le M \qquad \textit{per ogni } n,$$

allora la formula converge per ogni funzione continua f(x), *cioè:*

$$\lim_{n\to+\infty}\left(\int_a^b w(x)f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)\right) = 0.$$

Più precisamente, se la formula ha ordine polinomiale m(n) *l'errore è infinitesimo come* $E_{m(n)}(f)$.

Dim. Sia $p^*_{m(n)}(x)$ il polinomio di miglior approssimazione per f(x) in $\Pi_{m(n)}$. Poichè la formula è esatta per il polinomio $p^*_{m(n)}(x)$, l'errore è dato da:

$$\int_a^b w(x)f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

$$= \int_a^b w(x)\left(f(x) - p^*_{m(n)}(x)\right)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i\left(f(x_i) - p^*_{m(n)}(x_i)\right)$$

$$\le \int_a^b w(x)\left|f(x) - p^*_{m(n)}(x)\right|dx + \sum_{i=0}^{n} |A_i|\left|f(x_i) - p^*_{m(n)}(x_i)\right|$$

$$\le E_{m(n)}(f)\int_a^b w(x)dx + E_{m(n)}(f)\sum_{i=0}^{n}|A_i| \le E_{m(n)}(f)\left(\int_a^b w(x)dx + M\right).$$

Corollario 6.4. *Se i pesi* A_i *di una formula di quadratura sono non negativi,*

$$A_i \ge 0$$

allora la formula converge.

Dim. Poichè ogni formula di quadratura ha ordine polinomiale almeno 0, essa è esatta per la funzione costante f(x)=1. Allora

$$\int_a^b w(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i$$

e l'ipotesi del teorema di convergenza è verificata per $M=\int_a^b w(x)dx$.

Corollario 6.5. *Le formule di quadratura gaussiane sono convergenti.*

Dim. E' sufficiente dimostrare che i pesi $A_k = \int_a^b w(x)\ell_k(x)dx$ sono positivi. Ciò è verificato immediatamente applicando la formula di quadratura stessa all'integrale $\int_a^b w(x)\ell_k^2(x)dx$. Poichè la funzione integranda è un polinomio di grado 2n e la formula ha ordine polinomiale 2n+1, si ha:

$$0 < \int_a^b w(x)\ell_k^2(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i l_k^2(x_i) = A_k.$$

Formule di Newton-Cotes

Se i nodi sono equidistanti, le formule prendono il nome di **formule di Newton-Côtes** ed i pesi assumono una forma particolarmente semplice. Infatti fissato un intero n, i nodi si possono esprimere con:

$$x_i=x_0+ih \qquad i=0,1,...,n \qquad \text{dove } x_0=a, \ x_n=b \ \text{ ed } \ h=\frac{b-a}{n}$$

mentre il generico punto x dell'intervallo [a,b] si può esprimere attraverso il seguente cambio di variabile:

$$x=x_0+mh \qquad \text{dove } m\in[0,n].$$

Di conseguenza si ha:

$$x-x_i=(m-i)h \qquad \forall m\in[0,n] \text{ e per ogni indice i.}$$

ed i coefficienti di Lagrange nella variabile m assumono la forma :

$$\ell_i(m) = \frac{(m-0)(m-1)...(m-(i-1))(m-(i+1)...(m-n)}{(i-0)(i-1)...2\cdot 1\cdot(-1)(-2)...(i-n)} \qquad i=0,...,n$$

Si osservi che essi non dipendono né dalla posizione dei nodi né dalla loro distanza h, ma unicamente dal loro numero.

Con il precedente cambio di variabile i pesi diventano:

$$A_i = \int_a^b \ell_i(x)dx = \int_0^n \ell_i(m)h\,dm = h\,W_i \qquad i=0,...,n$$

dove i numeri $W_i = \int_0^n \ell_i(m)dm$ sono detti **numeri di Côtes** e dipendono anch'essi soltanto dal numero di nodi.

La formula di quadratura (6.1) assume quindi la forma:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i).$$

o, equivalentemente:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n}\sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i).$$

Per i primi valori di n, si trovano i seguenti numeri di Côtes:

n	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4
0	1				
1	1/2	1/2			
2	1/3	4/3	1/3		
3	3/8	9/8	9/8	3/8	
4	14/45	64/45	24/45	64/45	14/45

Si osservi che per i numeri di Côtes vale la seguente proprietà di simmetria.

Teorema 6.6. *Per ogni* n *si ha* $W_i=W_{n-i}$.

Dim. La dimostrazione si basa sul fatto che $\ell_i(m) = \ell_{n-i}(n-m)$, cioè sul fatto che $\ell_i(m)$ è la riflessione di $\ell_{n-i}(m)$ rispetto al centro dell'intervallo [0,n] ed hanno quindi lo stesso integrale.

Errore delle formule di quadratura di Newton-Côtes.

Già sappiamo che, qualunque sia l'insieme di nodi, la formula lagrangiana $\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ ha ordine polinomiale almeno n. Osserviamo però che per n ($\neq$0) pari, le formule di Newton-Côtes hanno ordine polinomiale che sale a n+1. A tale scopo osserviamo che la formula è esatta, oltre che per i polinomi di grado fino ad n, anche per il polinomio $p(x)=(x-x_{n/2})^{n+1}$.

Infatti tale polinomio è dispari rispetto al punto centrale $x_{n/2}$ e quindi il suo integrale è nullo. D'altra parte anche la formula di quadratura è nulla per la simmetria dei numeri di Côtes ($W_i=W_{n-i}$) e dei nodi rispetto al nodo centrale $x_{n/2}$. In conclusione si ha:

$$\int_a^b (x-x_{n/2})^{n+1}dx = h\sum_{i=0}^{n} W_i (x_i - x_{n/2})^{n+1} = 0$$

Poichè ogni polinomio q(x) di grado n+1 si può esprimere come combinazione lineare di $(x-x_{n/2})^{n+1}$ e di un opportuno polinomio di grado n, la formula di quadratura risulta esatta anche per q(x). L'ultima affermazione è una ovvia conseguenza della linearità dell'integrale e della formula di quadratura rispetto alla funzione integranda, cioè:

$$\int_a^b (\alpha f(x)+\beta g(x))dx = \alpha\int_a^b f(x)dx + \beta\int_a^b g(x)dx$$

e

$$\sum_{i=0}^{n} A_i(\alpha f(x_i)+\beta g(x_i)) = \alpha\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + \beta\sum_{i=0}^{n} A_i g(x_i)$$

Per quanto riguarda l'errore, vale il seguente teorema:

Teorema 6.7. *Per ogni intero* n*, esiste una costante* c *tale che l'errore della formula di Newton-Côtes di ordine polinomiale* s *è dato da*

$$\int_a^b f(x)dx - h\sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i) = c(b-a)^{s+2} f^{(s+1)}(\xi) \qquad (6.3)$$

per ogni funzione $f(x)\in C^{s+1}$ *e per ogni intervallo* [a,b].

Poichè la costante c non dipende nè da f, nè da h, nè dall'intervallo [a,b], essa può essere facilmente determinata applicando la formula (6.3) alla funzione $f(x)=x^{s+1}$ su un intervallo qualunque che, per semplicità di calcolo, fisseremo in [0,n]. In tale modo i nodi sono dati dagli interi 0,1,..,n ed il passo è h=1.

A titolo di esempio consideriamo il caso n=1 per il quale la formula è:

$$\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]$$

In questo caso i 2 nodi sono a=0 e b=1. La formula di quadratura è di ordine s=n=1 e, applicata alla funzione x^2 fornisce il valore 1/2. D'altra parte il valore dell'integrale è 1/3 e quindi la relazione (6.3) diventa:

$$1/3 - 1/2 = 2c$$

che fornisce il valore c=-1/12.

Ricapitolando, per i primi valori di n si ottiene la seguente tabella:

n	formula	s	errore
0	$hf(x_0)$	0	$\frac{1}{2} f^{(1)}(\xi)(b-a)^2$
1	$h/2[f(x_0)+f(x_1)]$	1	$-\frac{1}{12} f^{(2)}(\xi)(b-a)^3$
2	$h/3[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)]$	3	$-\frac{1}{2880} f^{(4)}(\xi)(b-a)^5$
3	$h/8[3f(x_0)+9f(x_1)+9f(x_2)+3f(x_3)]$	3	$-\frac{1}{6480} f^{(4)}(\xi)(b-a)^5$
4	$h/45[14f(x_0)+64f(x_1)+24f(x_2)+64f(x_3)+14f(x_4)]$	5	$-\frac{1}{1935360} f^{(6)}(\xi)(b-a)^7$

Analogamente a quanto abbiamo visto per l'interpolazione sui nodi equidistanti, anche nelle formule di quadratura di Newton-Côtes la convergenza può venir a mancare al crescere di n. In particolare i numeri di Côtes <u>non</u> sono definitivamente positivi al crescere di n ed il teorema 6.3 non si applica.

Si consideri per esempio l'integrale

$$\int_{-5}^{5} \frac{1}{1+x^2} dx = 2\text{arctang}(5) = 2.7468$$

per il quale si trovano le seguenti approssimazioni divergenti

n	formula di N-C
1	0.3856
2	6.7949
3	2.0814
4	2.3740
5	2.3077
6	3.8704

Formule composte:

Dall'espressione dell'errore delle precedenti formule di Newton-Côtes, si vede che, fissato n, l'errore è infinitesimo quando l'ampiezza b-a dell'intervallo d'integrazione tende a zero. Più precisamente l'errore è un infinitesimo di ordine n+2 oppure n+3 a seconda che n sia dispari o pari. In altre parole l'errore tende a zero molto più rapidamente di quanto tenda a zero l'ampiezza b-a dell'intervallo di integrazione. Ciò suggerisce l'idea di scomporre l'intervallo di integrazione in tanti sottointervalli e su ciascuno di essi applicare una formula di Newton-Côtes con n costante.

Sia dunque n l'ordine della formula di Newton-Côtes che voglio usare e sia m un intero arbitrario. Consideriamo il passo $h=\frac{b-a}{n \cdot m}$ e l'insieme di nodi equidistanti $x_i=a+ih$ $i=0,...,nm$ per i quali risulta $x_0=a$ ed $x_{nm}=b$. In corrispondenza a questa distribuzione di nodi, consideriamo la seguente scomposizione dell'integrale in m integrali su sottointervalli di ampiezza $nh=\frac{b-a}{m}$:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx + \int_{x_n}^{x_{2n}} f(x)dx + ... + \int_{x_{(m-1)n}}^{x_{nm}} f(x)dx \, .$$

Ciascun integrale della decomposizione è esteso ad un intervallo $I_k = \left[x_{(k-1)n}, x_{kn}\right]$ che contiene n+1 nodi equidistanti ed è quindi approssimabile con una formula di Newton-Côtes di ordine n:

$$\int_{x_{(k-1)n}}^{x_{kn}} f(x)dx \approx h\sum_{i=0}^{n} W_i f(x_{(k-1)n+i}) = h\left(W_0 f(x_{(k-1)n}) + W_1 f(x_{(k-1)n+1}) + ... + W_n f(x_{kn})\right)$$

con un errore, che indicheremo con E_k, dato da: $c\left(\frac{b-a}{m}\right)^{s+2} f^{(s+1)}(\xi_k)$

L'espressione che si ottiene sommando i termini di tutte le formule è detta **formula di quadratura composta** e l'errore risultante è dato dalla somma degli errori su tutti gli m integrali della decomposizione.

Analizziamo in particolare il caso n=1 ed n=2.

<u>*Formula dei trapezi.*</u>

Sia n=1. In questo caso il passo è $h=\frac{b-a}{m}$, e la formula di Newton-Côtes per il k-esimo integrale della decomposizione è

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left(f(x_{k-1}) + f(x_k)\right) \qquad k=1,...,m$$

Sommando tali formule per k=1,...,m si ottiene la seguente formula composta detta **formula dei trapezi**.

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + ... + f(x_{m-1}) + \frac{f(x_m)}{2}\right)$$

L'errore globale è a sua volta dato dalla somma degli errori parziali $\sum_{k=1}^{m} E_k$. Esso dipende dal numero m di suddivisioni di (a,b) e, tenuto conto che l'ampiezza di ciascun intervallo di integrazione è $\frac{b-a}{m}$, si ha:

$$E(m)=\sum_{k=1}^{m} E_k = \sum_{k=1}^{m}\left(-\frac{1}{12} f''(\xi_k)\left(\frac{b-a}{m}\right)^3\right) = -\frac{1}{12}\left(\frac{b-a}{m}\right)^3 \sum_{k=1}^{m} f''(\xi_k)$$

Poichè $\sum_{k=1}^{m} f''(\xi_k)=mf''(\eta)$ per un opportuno punto $\eta\in(a,b)$, l'errore globale è:

$$E(m)=-\frac{1}{12}\frac{(b-a)^3}{m^2}f''(\eta).$$

Si osservi che l'errore è un infinitesimo di ordine 2 rispetto ad m e quindi la formula è convergente al crescere del numero di nodi. Raddoppiando il numero di suddivisioni, l'errore è ridotto per un fattore R(m) che asistoticamente converge a 4:

$$R(m)=\frac{E(m)}{E(2m)}\to 4$$

Formula di Cavalieri-Simpson.

Nel caso n=2 il passo è $h=\frac{b-a}{n\cdot m}$, e la formula di Newton-Côtes per il k-esimo integrale della decomposizione è

$$\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx\approx \frac{h}{3}\left(f(x_{2k-2})+4f(x_{2k-1})+f(x_{2k})\right) \qquad k=1,...,m$$

Sommando tali formule per k=1,...,m si ottiene la seguente formula composta detta **formula di Cavalieri-Simpson**.

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{h}{3}\left(f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+.....+4f(x_{2m-1})+f(x_{2m})\right)$$

Tenuto conto che l'ampiezza di ciascun intervallo di integrazione è sempre $\frac{b-a}{m}$, si ha:

$$E(m)=\sum_{k=1}^{m}E_k=\sum_{k=1}^{m}\left(-\frac{1}{2880}f^{iv}(\xi_k)\left(\frac{b-a}{m}\right)^5\right)=-\frac{1}{2880}\left(\frac{b-a}{m}\right)^5\sum_{k=1}^{m}f''(\xi_k)$$

Analogamente al caso precedente si ha $\sum_{k=1}^{m} f^{iv}(\xi_k)=mf^{iv}(\eta)$ per un opportuno punto $\eta\in(a,b)$. In questo caso l'errore globale è:

$$E(m)=-\frac{1}{2880}\frac{(b-a)^5}{m^4}f^{iv}(\eta).$$

Questa volta l'errore è un infinitesimo di ordine 4 rispetto ad m e quindi la formula è convergente con velocità di convergenza superiore a quella dei trapezi. Raddoppiando il numero m di suddivisioni, l'errore si riduce asintoticamente di un fattore 16:

$$R(m)=\frac{E(m)}{E(2m)}\to 16$$

Un esempio numerico:

Un confronto corretto tra le due formule deve essere fatto a parità di numero di nodi, cioè di valutazioni della funzione integranda f(x). Per la formula dei trapezi, il numero di nodi è m+1, mentre per la formula di Cavalieri-Simpson è 2m+1.

Nella tabella successiva sono riportati i valori relativi all'esempio già trattato:

$$\int_{-5}^{5}\frac{1}{1+x^2}dx = 2\arctan g(5) = 2.7468....$$

Come si vede dai risultati numerici, questo integrale è particolarmente ostico da calcolare. Infatti entrambe le formule forniscono dei buoni valori approssimati soltanto per un numero di nodi abbastanza elevato.

	Formula Trapezi				Cavalieri Simpson			
# nodi	m	valore	errore	fattore	m	valore	errore	fattore
3	2	5.1823	2.44		1	6.7949	4.04	
5	4	3.2858	0.53	4.53	2	2.6503	-0.09	-41.9
9	8	2.7845	3.7(-2)	14.3	4	2.6174	-0.13	.745
17	16	2.7461	-6.8(-4)	-54.6	8	2.7333	-0.01	9.59
33	32	2.7466	-2.41(-4)	2.86	16	2.7467	-9.08(-5)	148.4
65	64	2.7467	-6.02(-5)	3.9977	32	2.7468	-4.55(-8)	1996
129	128	2.7468	-1.50(-5)	3.99948	64	2.7468	-2.61(-9)	17.45
257	256	2.7468	-3.76(-6)	3.99987	128	2.7468	-1.63(-10)	15.991
513	512	2.7468	-9.40(-7)	3.999967	256	2.7468	-1.02(-11)	15.9955

Principio di estrapolazione di Richardson.

Sia $I(f)$ un **funzionale lineare**, cioè un operatore lineare che trasforma la funzione f in un numero reale. Esempi di funzionali lineari sono:

1. $I(f)=\int_a^b f(x)dx$
2. $I(f)=\int_a^b w(x)f(x)dx$
3. $I(f)=f(a)$
4. $I(f)=f'(a)$
5. $I(f)=\int_a^b w(x)f(x)dx + f(c)$.

Supponiamo che il funzionale lineare sia approssimato da una formula F(h) dipendente da un parametro h. Per esempio

1. $\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{i=0}^{n} W_i f(a+ih)$ (formula di Newton-Côtes)

1.' $\int_a^b f(x)dx \approx h\left(\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + f(a+2h) + ... + f(a+(n-1)h) + \frac{f(b)}{2}\right)$

(formula dei trapezi)

4. $f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h}$ (differenza divisa prima).

Supponiamo inoltre che l'errore, di ordine p, si possa sviluppare nel seguente modo:

$$I(f) - F(h) = 0(h^p) = ch^p + 0(h^s) \qquad s>p \tag{6.4}$$

con c *indipendente* da h.

Consideriamo ancora due degli esempi precedenti. Per essi si ha:

1. $\int_a^b f(x)dx - h\sum_{i=0}^{n} W_i f(a+ih) = c(b-a)^{s+2} f^{(s+1)}(\xi) = c(nh)^{s+2} f^{(s+1)}(\xi) =$

$= c(nh)^{s+2}\left(f^{(s+1)}(a) + (\xi-a)f^{(s+2)}(\eta)\right) = dh^{(s+2)} + 0(h^{(s+3)})$

4. $f'(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h} = -\frac{h}{2}f''(a) - \frac{h^2}{6}f'''(a+\theta h) = dh + 0(h^2)$

dove le costanti d non dipendono da h.

Disponendo di una stima dell' errore nella forma (6.4), si può applicare la formula F(h) per due valori diversi del parametro, diciamo h ed $\frac{h}{2}$, ed ottenere:

$$\mathrm{I}(f) - F(h) = ch^p + 0(h^s)$$

$$\mathrm{I}(f) - F\left(\frac{h}{2}\right) = c\left(\frac{h}{2}\right)^p + 0'(h^s). \qquad (6.5)$$

Sottraendo le due espressioni si ottiene la seguente stima dell'errore:

$$c\left(\frac{h}{2}\right)^p = \frac{F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h)}{2^p - 1} + 0''(h^s)$$

che, sostituita in (6.5), da luogo alla relazione:

$$\mathrm{I}(f) = F\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h)}{2^p - 1} + 0'''(h^s).$$

La nuova formula così ottenuta:

$$F_1(h) := F\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h)}{2^p - 1}$$

approssima il funzionale $\mathrm{I}(f)$ con ordine s. Si noti che $F_1(h)$ è ottenuta da $F(h)$ ed $F\left(\frac{h}{2}\right)$ senza ulteriori valutazioni della funzione f(x).

Il procedimento appena descritto prende il nome di **processo di estrapolazione di Richardson**. Esso si applica ad ogni valore di h e quindi da una successione di valori $F\left(\frac{h}{2^m}\right)$, m=0,1,... ottenuti dimezzando ricorsivamente il passo h, si può ottene una nuova successione

$$F_1\left(\frac{h}{2^m}\right) = F\left(\frac{h}{2^{m-1}}\right) + \frac{F\left(\frac{h}{2^{m-1}}\right) - F\left(\frac{h}{2^m}\right)}{2^p - 1}, \qquad m=0,1,...$$

che converge al funzionale $\mathrm{I}(f)$ con ordine s.

L'incremento dell'ordine che si ottiene con il procedimento di estrapolazione di Richardson è dato dalla differenza tra l'ordine p del **termine principale d'errore** ch^p e l'ordine s del **termine secondario d'errore** $0(h^s)$

Converrà quindi utilizzare formule per le quali la differenza s-p è alta. A tale proposito osserviamo che nei due esempi considerati (1 e 4) l'incremento è 1. D'altra parte per il funzionale 4 possiamo ottenere facilmente altre formule approssimanti, per esempio la seguente *differenza centrale*:

4'. $$f'(a) = \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!}f^{(3)}(a) - \frac{h^4}{5!}f^{(5)}(a) - \frac{h^6}{7!}f^{(7)}(a) - \ldots$$

che, oltre ad essere di ordine 2, ha l'errore secondario di ordine 4 a sua vosta sviluppabile in termini successivi di errore i cui ordini crescono di due in due.
Anche per la regola dei trapezi si ha un risultato analogo dovuto ad **Eulero e Mac Laurin**:

$$\int_a^b f(x)dx = h\left(\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + f(a+2h) + \ldots + f(a+(n-1)h) + \frac{f(b)}{2}\right) + $$
$$+c_2h^2 + c_4h^4 + \ldots + c_{2r}h^{2r} + \ldots..$$

dove le costanti c_i non dipendono da h.

E' facile vedere che se l'errore ammette uno sviluppo in serie del tipo:

$$I(f) - F(h) = c_0h^{p_0} + c_1h^{p_1} + \ldots + c_kh^{p_k} + \ldots$$

con c_k indipendenti da h e $p_0<p_1<\ldots<p_k<\ldots$, allora la formula di estrapolazione $F_1(h)$ ammette il seguente sviluppo dell'errore:

$$I(f) - F_1(h) = d_1h^{p_1} + d_2h^{p_2} + \ldots + d_kh^{p_k} + \ldots$$

con d_k indipendente da h per ogni k.
Allora per ogni coppia di valori estrapolati $F_1(h)$ ed $F_1\left(\frac{h}{2}\right)$ si può ottenere una seconda estrapolazione:

$$F_2(h) := F_1\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{F_1\left(\frac{h}{2}\right) - F_1(h)}{2^{p_1} - 1}$$

il cui errore è:

$$I(f) - F_2(h) = e_2h^{p_2} + e_3h^{p_3} + \ldots + e_kh^{p_k} + \ldots$$

con e_k indipendente da h per ogni k.

In generale le estrapolazioni successive sono ottenute dalla seguente formula ricorsiva:

$$F_{k+1}(h):=F_k\left(\frac{h}{2}\right)+\frac{F_k\left(\frac{h}{2}\right)-F_k(h)}{2^{p_k}-1}$$

il cui errore è ancora del tipo:

$$I(f)-F_{k+1}(h)=e_{k+1}h^{p_{k+1}}+e_{k+2}h^{p_{k+2}}+...+e_{k+i}h^{p_{k+i}}+...$$

Assegnato un valore iniziale h_0 del parametro, si può costruire la seguente tabella per le formule F_0 (=F), F_1,..., F_k ...

Tabella di estrapolazione di Richardson				
$h=\frac{h_0}{m}$	$F_0(\frac{h_0}{m})$	$F_1(\frac{h_0}{m})$	$F_2(\frac{h_0}{m})$	......
m=1	$F_0(h)$			
m=2	$F_0(\frac{h_0}{2})$	$F_1(h)$		
m=4	$F_0(\frac{h_0}{4})$	$F_1(\frac{h_0}{2})$	$F_2(h)$	
m=8	$F_0(\frac{h_0}{8})$	$F_1(\frac{h_0}{4})$	$F_2(\frac{h_0}{2})$	.....
....	.....	......	......	....

Si osservi che le formule $F_0(\frac{h_0}{2^i})$ i=0,1,... della prima colonna formano una successione convergente ad $I(f)$ con errore infinitesimo di ordine p_0, mentre le formule $F_1(\frac{h_0}{2^i})$ i=1, 2,... della seconda colonna hanno un errore infinitesimo di ordine p_1, e così di seguito per le colonne successive. Ciò significa che per m sufficientemente grande, e quindi per un passo h sufficientemente piccolo, la formula estrapolata sarà migliore, ma ciò può non essere vero per piccoli valori di m.

Supponiamo infatti che l'errore di una formula sia dato da ch^p e l'errore della sua estrapolazione sia dato da dh^s con s>p e le costanti c e d indipendenti da h. Se d>>c non è detto che sia $ch^p > dh^s$ per ogni h. Viceversa, per h sufficientemente piccolo la disuguaglianza $ch^p>dh^s$ è certamente verificata perchè dh^s è un infinitesimo più "veloce" di ch^p.

Se la formula F(h) è data dalla regola dei trapezi, il procedimento di estrapolazione successiva appena descritto prende il nome di **quadratura di Romberg**.

Nella seguente tabella sono riportati i valori della quadratura di Romberg per il calcolo dell'integrale:

$$I(f) = \int_1^3 \frac{1}{x} dx \qquad (=1.098612289....)$$

$h=\frac{2}{m}$	$F_0(h)$, rapp(h)	$F_1(h)$, rapp(h)	$F_2(h)$, rapp(h)	$F_3(h)$
m=1	1.333333			
m=2	1.166667 3.3	1.111112		
m=4	1.116667 3.71	1.100000 11.4	1.099259	
m=8	1.103211 3.90	1.098726 12.0	1.098639 45	1.098629
m=16	1.099768 3.975	1.098620 15.1	1.098613	1.098612
m=32	1.098902 3.991	1.098613	1.098612	1.098612
m=64	1.098685	1.098612	1.098612	1.098612
m=128	1.098630	1.098612	1.098612	1.098612

In questo caso le estrapolazioni successive, a passo fissato, forniscono risultati migliori. In particolare si osservi che attraverso l'estrapolazione $F_3(h)$ si possono ottenere 6 cifre decimali esatte con m=16 (cioè con 17 valutazioni della funzione integranda), contro la formula $F_0(h)$ per la quale m=128 fornisce appena 4 cifre esatte.

Si costruisca e si commenti la tabella relativa all'integrale

$$\int_{-5}^{5} \frac{1}{1+x^2} dx = 2\arctan g(5) = 2.7468...$$

Alla luce delle osservazioni e dei risultati precedenti, ci si chiede per quali valori del passo h si può avere la certezza che la k-esima estrapolazione fornisce un risultato effettivamente migliore della (k-1)-esima. Ciò accade essenzialmente quando il termine secondario di errore è trascurabile rispetto al termine principale d'errore.
Per semplicità di esposizione consideriamo il caso della quadratura di Romberg per la quale valgono le stime:

$$I(f) - F_0(h) = ch^2 + dh^4 + ...$$

$$I(f) - F_0\left(\frac{h}{2}\right) = c\left(\frac{h}{2}\right)^2 + d\left(\frac{h}{2}\right)^4 ...$$

$$I(f) - F_0\left(\frac{h}{4}\right) = c\left(\frac{h}{4}\right)^2 + d\left(\frac{h}{4}\right)^4 ...$$

e quindi:

$$- F_0(h) + F_0\left(\frac{h}{2}\right) = ch^2(3/4)+dh^4(15/16)+...$$
$$- F_0\left(\frac{h}{2}\right) + F_0\left(\frac{h}{4}\right)) = c\left(\frac{h}{2}\right)^2(3/4)+d\left(\frac{h}{2}\right)^4(15/16)+...$$

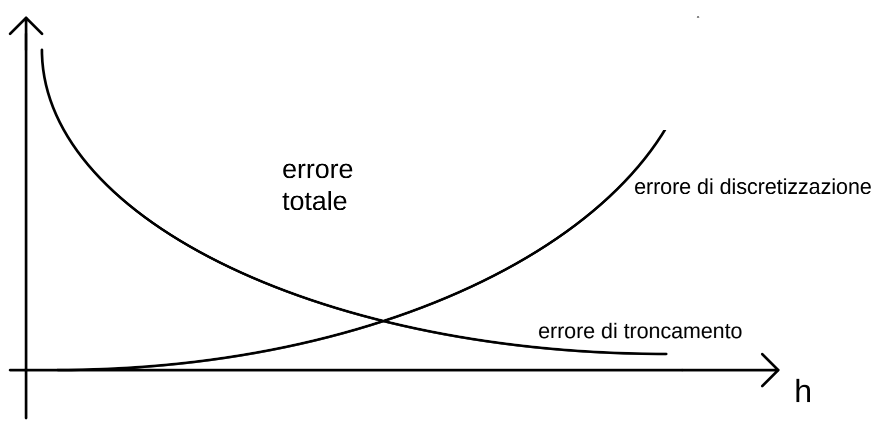
Se dh^4 è trascurabile rispetto a ch^2, anche $dh^4(15/16)$ è trascurabile rispetto a $ch^2(3/4)$ e, a maggior ragione, $d\left(\frac{h}{2}\right)^4(15/16)$ rispetto a $c\left(\frac{h}{2}\right)^2(3/4)$.

Si ottiene quindi la seguente approssimazione:

$$\text{rapp}(h)=\frac{F_0(h)-F_0\left(\frac{h}{2}\right)}{F_0\left(\frac{h}{2}\right)-F_0\left(\frac{h}{4}\right)} \approx \frac{c\left(\frac{h}{2}\right)^2}{c\left(\frac{h}{4}\right)^2}=4$$

Viceversa è facile vedere che se rapp(h)≈4 allora dh^4 è trascurabile rispetto a ch^2e quindi l'estrapolazione garantisce un risultato migliore.

L'estrapolazione di Richardson non è soltanto uno strumento molto potente per ridurre il numero di chiamate della funzione in oggetto ma, in generale, per ridurre il numero totale di operazioni e quindi per ridurre la propagazione dell'errore di arrotondamento. In taluni casi l'errore di arrotondamento influenza il risultato prima che l'errore di discretizzazione della formula sia sceso al disotto della tolleranza voluta. Le due componenti d'errore per l'approssimazione del funzionale hanno, infatti, il seguente comportamento qualitativo:



Formule di quadratura "adattativa".

Abbiamo visto in precedenza che l'impiego di due formule F(h) ed F(h/2) può consentire una stima dell'errore. Nel procedimento di estrapolazione di Richardson abbiamo fatto un uso *passivo* di questa proprietà. In questo paragrafo verrà presentato un procedimento di integrazione che fa un uso *attivo* della stima dell'errore consentendo il calcolo approssimato dell'integrale a meno di un errore prefissato.
Ripartito l'intervallo d'integrazione (a,b) in tanti sottointervalli I_i è noto che

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_i \int_{I_i} f(x)dx$$

Se ogni integrale $\int_{I_i} f(x)dx$ è calcolato con un errore $\leq$TOL mis(I_i), dove TOL è una assegnata *tolleranza per unità di passo*, allora l'errore totale è maggiorato da TOL$\sum_i$mis(I_i)=TOL(b-a).

Adottata quindi una formula di quadratura, per esempio la formula dei trapezi

$$\int_{I_k} f(x)dx = \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left(f(x_{k-1}) + f(x_k)\right),$$

si tratta di individuare un intervallo I_k, sufficientemente piccolo, sul quale l'errore calcolato con la formula (6.5) soddisfa il test di tolleranza: errore $\leq$TOL mis(I_k). Ciò si può fare, in modo sistematico, a partire dall'integrale esteso a tutto l'intervallo (a,b) dimezzando successivamente l'intervallo di integrazione.