

Quadratura

1 Formule di quadratura interpolatorie

Sia f una funzione reale definita su un intervallo $[a, b]$. Il problema che si vuole studiare è quello della approssimazione dell'integrale

$$S = \int_a^b f(x) dx. \quad (1)$$

Nel caso in cui la f sia una funzione continua, il teorema fondamentale del calcolo integrale assicura l'esistenza su $[a, b]$ di una funzione F , *primitiva* della f , tale che

$$S = F(b) - F(a).$$

Non sempre però la F è esprimibile in termini di funzioni elementari, e anche quando questo è possibile, il calcolo di $F(a)$ e $F(b)$ può essere difficoltoso. Per questo è importante disporre di tecniche numeriche per il calcolo approssimato della (1). Con le formule di *integrazione approssimata* (dette anche formule di *quadratura*) è possibile trattare, oltre al caso delle funzioni continue su un intervallo limitato, anche i casi di funzioni con singolarità o di funzioni su intervalli illimitati o di funzioni i cui valori sono noti solo in un insieme discreto di punti.

Le formule di quadratura che consideriamo qui sono le cosiddette formule *interpolatorie* che si ottengono sostituendo alla f un polinomio p : l'integrale di p fornisce l'approssimazione di S . Queste formule hanno la forma

$$S_{n+1} = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad (2)$$

dove gli $n + 1$ punti $x_i \in [a, b]$ per $i = 0, \dots, n$, sono i *nod*i della formula e i numeri w_i , $i = 0, \dots, n$, sono i *coefficienti* (o *pesi*) della formula. Posto

$$\pi_n(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n),$$

si considera il polinomio di interpolazione di Lagrange

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i), \quad \text{dove} \quad L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \frac{\pi_n(x)}{(x - x_i) \pi_n'(x_i)}.$$

Risulta allora

$$S_{n+1} = \int_a^b p_n(x) dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i) dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad (3)$$

dove

$$w_i = \frac{1}{\pi'_n(x_i)} \int_a^b \frac{\pi_n(x)}{x - x_i} dx, \quad i = 0, \dots, n. \quad (4)$$

Una interessante proprietà delle formule di quadratura interpolatorie è che se i nodi sono disposti in modo simmetrico rispetto al punto di mezzo dell'intervallo $[a, b]$, cioè $x_i + x_{n-i} = a + b$ per $i = 0, \dots, n$, allora i coefficienti relativi a nodi simmetrici sono uguali fra loro, cioè $w_i = w_{n-i}$ per $i = 0, \dots, n$. Si ha infatti

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - (a + b - x_{n-j})}{(a + b - x_{n-i}) - (a + b - x_{n-j})} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{(a + b - x) - x_{n-j}}{x_{n-i} - x_{n-j}},$$

e ponendo $k = n - j$, risulta

$$L_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq n-i}}^n \frac{(a + b - x) - x_k}{x_{n-i} - x_k} = L_{n-i}(a + b - x).$$

Quindi

$$w_i = \int_a^b L_i(x) dx = \int_a^b L_{n-i}(a + b - x) dx,$$

e con la trasformazione di variabile $y = a + b - x$, risulta

$$w_i = - \int_b^a L_{n-i}(y) dy = \int_a^b L_{n-i}(y) dy = w_{n-i}.$$

La quantità

$$r_{n+1} = S - S_{n+1},$$

che rappresenta l'errore analitico assoluto, è detta *resto* della formula di quadratura. Si dice che la formula di quadratura (2) ha *grado di precisione* k se risulta $r_{n+1} = 0$ quando $f(x) = x^j$, per $j = 0, \dots, k$, e $r_{n+1} \neq 0$ quando $f(x) = x^{k+1}$. Per la linearità dell'operatore integrale, una formula con grado di precisione k dà il risultato esatto ($r_{n+1} = 0$) quando è applicata ad una funzione che sia un polinomio di grado minore o uguale a k .

Fissati gli $n + 1$ nodi distinti x_0, \dots, x_n , i coefficienti di formule di quadratura (2) possono essere ricavati anche con il metodo dei coefficienti indeterminati, imponendo la condizione che la formula cercata abbia grado di precisione k , cioè che sia tale che

$$\sum_{i=0}^n w_i x_i^j = \int_a^b x^j dx = \frac{b^{j+1} - a^{j+1}}{j + 1}, \quad j = 0, \dots, k.$$

I coefficienti w_i sono quindi soluzione di un sistema lineare la cui matrice dei coefficienti ha gli elementi x_i^j per $i = 0, \dots, n$, $j = 0, \dots, k$. Se $k = n$, la matrice risulta una matrice di Vandermonde e poiché gli x_i sono distinti, la matrice è non singolare, e quindi, comunque siano stati scelti i nodi x_i , esiste sempre una e una sola formula di precisione almeno n costruita con quei nodi.

A differenza di quanto accade per i polinomi di interpolazione, per le formule di quadratura interpolatorie si può dare un semplice teorema di *convergenza* al crescere del numero dei nodi.

Teorema 1 Sia $f \in C[a, b]$ e sia S_{n+1} una successione di formule di quadratura interpolatorie, con

$$S_{n+1} = \sum_{i=0}^n w_i^{(n)} f(x_i^{(n)}),$$

tali che esista una costante H per cui $\sum_{i=0}^n |w_i^{(n)}| < H$ per ogni n , allora

$$\lim_{n \rightarrow \infty} r_{n+1} = 0.$$

Dim. Per ogni $\epsilon > 0$ per il teorema di Weierstrass esiste un polinomio p tale che

$$|f(x) - p(x)| \leq \epsilon, \quad \text{per ogni } x \in [a, b]. \quad (5)$$

Si ha

$$r_{n+1} = \int_a^b f(x) dx - S_{n+1} = \int_a^b (f(x) - p(x)) dx + \int_a^b p(x) dx - \sum_{i=0}^n w_i^{(n)} f(x_i^{(n)}). \quad (6)$$

Se m è il grado di p , per tutti gli $n \geq m$ la formula di quadratura S_{n+1} ha grado di precisione almeno m , per cui si ha

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i^{(n)} p(x_i^{(n)}),$$

e, sostituendo nella (6), è

$$r_{n+1} = \int_a^b [f(x) - p(x)] dx + \sum_{i=0}^n w_i^{(n)} [p(x_i^{(n)}) - f(x_i^{(n)})].$$

Passando ai moduli, per la (5) è

$$|r_{n+1}| \leq \epsilon \left(\int_a^b dx + \sum_{i=0}^n |w_i^{(n)}| \right),$$

e quindi per ogni $n \geq m$ vale $|r_{n+1}| \leq \epsilon(b - a + H)$, da cui la tesi. \square

Dal teorema 1 risulta perciò che esistono successioni doppie $\{x_i^{(n)}, w_i^{(n)}\}_{(i,n) \in \mathbf{N}}$ di nodi distinti e di pesi, tali che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n w_i^{(n)} f(x_i^{(n)}) = \int_a^b f(x) dx$$

per ogni $f \in C[a, b]$. Dal punto di vista computazionale sarebbe molto più conveniente se una simile proprietà di convergenza valesse anche per successioni di nodi e pesi dipendenti da un solo indice. Questo però non è vero, in quanto non esiste alcuna successione $\{x_i, w_i\}_{i \in \mathbf{N}}$ per cui sia

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) = \int_a^b f(x) dx$$

per ogni $f \in C[a, b]$.

Importante conseguenza del teorema 1 è che ogni successione S_{n+1} di formule di quadratura a coefficienti positivi è convergente. Infatti poiché la formula ha grado di precisione almeno 0, applicando la (2) alla funzione $f(x) = 1$, si ha

$$\sum_{i=0}^n |w_i| = \sum_{i=0}^n w_i = \int_a^b dx = b - a.$$

Dalla teoria dell'interpolazione è noto che se $f \in C^{n+1}[a, b]$ e i nodi x_i sono tutti distinti, il resto $r(x) = f(x) - p_n(x)$ del polinomio di interpolazione p_n di grado al più n della f verifica la relazione

$$r(x) = \pi_n(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad \text{con } \xi = \xi(x) \in (a, b). \quad (7)$$

Quindi per la (7) il resto della formula di quadratura interpolatoria risulta

$$r_{n+1} = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b \pi_n(x) f^{(n+1)}(\xi) dx, \quad \xi = \xi(x) \in (a, b). \quad (8)$$

Se la f è essa stessa un polinomio di grado j , il resto del polinomio di interpolazione è nullo per $j \leq n$, mentre per $j > n$ esso è esprimibile nella forma $\pi_n(x) p_{j-n-1}(x)$, dove $p_{j-n-1}(x)$ è un polinomio di grado $j - n - 1$. In particolare, se $f(x) = x^j$ allora il polinomio $p_{j-n-1}(x)$ ha primo coefficiente uguale a 1 e

$$r_{n+1} = \begin{cases} 0 & \text{se } j \leq n, \\ \int_a^b \pi_n(x) p_{j-n-1}(x) dx & \text{se } j > n. \end{cases} \quad (9)$$

Teorema 2 *Il massimo grado di precisione di una formula interpolatoria S_{n+1} è $2n+1$. Una tale formula può essere costruita solamente scegliendo come nodi gli $n+1$ zeri dell' $(n+1)$ -esimo polinomio ortogonale, rispetto alla funzione peso $\omega(x) \equiv 1$, nell'intervallo $[a, b]$.*

Dim. Sia k il grado di precisione della formula di quadratura, per cui $r_{n+1} = 0$ per $f(x) = x^j$, $j = 0, \dots, k$. Se $k > n$, dalla (9) si ha

$$\int_a^b \pi_n(x) p_{j-n-1}(x) dx = 0, \quad \text{per } j = n+1, \dots, k, \quad (10)$$

cioè il polinomio $\pi_n(x)$ risulta ortogonale, nell'intervallo $[a, b]$, ai polinomi $p_r(x)$, $r = 0, \dots, k-n-1$, che sono linearmente indipendenti. Perciò $\pi_n(x)$ risulta ortogonale a tutti i polinomi di grado r minore o uguale a $k-n-1$. Poiché $\pi_n(x)$ ha grado $n+1$, il massimo valore che $k-n-1$ può assumere è n , e quindi il massimo valore di k per cui può valere la (10) è $2n+1$. Il polinomio $\pi_n(x)$ deve coincidere, a meno di un fattore γ costante, con l' $(n+1)$ -esimo polinomio ortogonale nell'intervallo $[a, b]$. Quindi gli zeri di $\pi_n(x)$, cioè i nodi x_0, \dots, x_n , devono coincidere con gli zeri di $p_{n+1}(x)$. \square

Il teorema seguente mostra come le formule ad alto grado di precisione abbiano coefficienti positivi e quindi godano della proprietà della convergenza.

Teorema 3 *I coefficienti di una formula interpolatoria S_{n+1} , avente grado di precisione almeno $2n$, sono tutti positivi.*

Dim. Siano x_0, \dots, x_n i nodi della formula di quadratura interpolatoria S_{n+1} . Per $i = 0, \dots, n$ si consideri il polinomio di grado n

$$q_i(x) = \prod_{\substack{r=0 \\ r \neq i}}^n (x - x_r).$$

Poiché la formula S_{n+1} ha grado di precisione almeno $2n$, essa integra esattamente i polinomi $q_i^2(x)$, $i = 0, \dots, n$, di grado $2n$, cioè

$$\sum_{j=0}^n w_j q_i^2(x_j) = \int_a^b q_i^2(x) dx, \quad i = 0, \dots, n.$$

Poiché

$$q_i^2(x_j) = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j, \\ \prod_{\substack{r=0 \\ r \neq i}}^n (x_i - x_r)^2 & \text{se } j = i, \end{cases}$$

ne segue che

$$w_i \prod_{\substack{r=0 \\ r \neq i}}^n (x_i - x_r)^2 = \int_a^b q_i^2(x) dx, \quad i = 0, \dots, n,$$

e quindi $w_i > 0$ per $i = 0, \dots, n$. \square

Tra le formule di quadratura interpolatorie sono importanti:

a) le formule *newtoniane* o *di Newton-Cotes*, che si ottengono scegliendo i nodi x_i equidistanti nell'intervallo $[a, b]$. Queste formule hanno grado di precisione n oppure $n + 1$, ma hanno lo svantaggio che per $n \geq 8$ i coefficienti non sono tutti dello stesso segno.

b) le formule *gaussiane*, in cui i nodi x_0, \dots, x_n vengono ricavati in modo da massimizzare il grado di precisione che risulta $2n + 1$. Rispetto alle formule newtoniane, le formule gaussiane, oltre all'elevato grado di precisione, presentano il vantaggio di avere coefficienti sempre positivi.

2 Formule newtoniane

Posto $h = (b - a)/n$, siano $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$, i nodi, equidistanti di passo h nell'intervallo $[a, b]$, sui quali si costruisce la formula di quadratura interpolatoria S_{n+1} , detta *formula di Newton-Cotes degli $n + 1$ punti*.

Per $n = 1$, posto $h = b - a$, $x_0 = a$ e $x_1 = b$, si ha dalla (4)

$$w_0 = \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx = \frac{h}{2}, \quad w_1 = w_0,$$

da cui si ottiene la formula di quadratura dei *due punti*

$$S_2 = \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)]. \quad (11)$$

L'integrale (1) è approssimato con quello dell'area del trapezio di basi $f(a)$ e $f(b)$ e altezza h .

Per $n = 2$, posto $h = (b - a)/2$, $x_0 = a$, $x_1 = (a + b)/2$ e $x_2 = b$, si ha dalla (4)

$$w_0 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} dx = \frac{h}{3}, \quad w_1 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} dx = \frac{4h}{3},$$

e $w_2 = w_0$, da cui si ottiene la formula di quadratura dei *tre punti*

$$S_3 = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]. \quad (12)$$

Poiché le formule di Newton-Cotes sono interpolatorie, per esse vale l'espressione (8) del resto. Inoltre, poiché i punti x_0, \dots, x_n sono equidistanti, si può dimostrare che il resto assume un'espressione più semplice della (8).

Teorema 4 *Sia S_{n+1} una formula di Newton-Cotes, allora*

a) *se n è pari e $f \in C^{n+2}[a, b]$, allora esiste un punto $\xi \in (a, b)$ tale che*

$$r_{n+1} = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_a^b x \pi_n(x) dx, \quad (13)$$

b) se n è dispari e $f \in C^{n+1}[a, b]$, allora esiste un punto $\xi \in (a, b)$ tale che

$$r_{n+1} = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_a^b \pi_n(x) dx. \quad (14)$$

Quindi le formule di Newton-Cotes hanno grado di precisione $n+1$ se n è pari e n se n è dispari, cioè due formule corrispondenti ad n pari e al successivo $n+1$ dispari hanno lo stesso grado di precisione. Per questa ragione per $n > 1$ è più conveniente usare formule con n pari.

Nella figura 1 sono riportati i coefficienti w_i , $i = 0, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$ (da moltiplicare per h) e i resti delle formule di Newton-Cotes. Per la simmetria delle formule è $w_i = w_{n-i}$. Non si riportano le formule di Newton-Cotes per $n \geq 8$ che hanno dei

n	w_0/h	w_1/h	w_2/h	w_3/h	resto
1	$\frac{1}{2}$				$-\frac{1}{12} h^3 f''(\xi)$
2	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$			$-\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi)$
4	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$		$-\frac{8}{945} h^7 f^{(6)}(\xi)$
6	$\frac{41}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{272}{140}$	$-\frac{9}{1400} h^9 f^{(8)}(\xi)$

Figure 1: - Coefficienti e resti delle formule di Newton-Cotes.

coefficienti negativi e quindi non verificano le ipotesi del teorema 1. Esistono infatti delle funzioni, anche derivabili per ogni ordine, per cui la successione dei resti delle formule di Newton-Cotes diverge al crescere di n .

Esempio Per approssimare l'integrale

$$S = \int_0^1 e^{-x^2} dx,$$

con un resto in modulo non superiore a $\epsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$, si determina una maggiorazione del modulo del resto per diversi valori di n . Si ha

per $n = 1$

$$f''(x) = 2(2x^2 - 1)e^{-x^2},$$

$$\max_{x \in (0,1)} |f''(x)| = 2, \quad h = 1, \quad |r_2| \leq \frac{1}{6}$$

per $n = 2$

$$f^{(4)}(x) = 4(4x^4 - 12x^2 + 3)e^{-x^2}, \quad \max_{x \in (0,1)} |f^{(4)}(x)| = 12, \quad h = \frac{1}{2}, \quad |r_3| \leq \frac{1}{240}$$

per $n = 4$

$$f^{(6)}(x) = 8(8x^6 - 60x^4 + 90x^2 - 15)e^{-x^2}, \quad \max_{x \in (0,1)} |f^{(6)}(x)| = 120, \quad h = \frac{1}{4}, \quad |r_5| \leq \frac{1}{16128}$$

Poiché $|r_5| < 0.5 \cdot 10^{-3}$, utilizzando la formula di Newton-Cotes con $n = 4$, per la quale sono richieste 5 valutazioni della funzione, si ottiene un valore che approssima S per meno di ϵ . Risulta

$$S_5 = \frac{1}{180} [14 + 64 e^{-1/16} + 24 e^{-1/4} + 64 e^{-9/16} + 14 e^{-1}] = 0.7468337,$$

e dato che $S = 0.7468241$, l'errore effettivamente generato è di circa $0.958 \cdot 10^{-5}$.

Nella figura 2 sono riportati i moduli degli errori relativi effettivamente generati dal calcolatore quando si utilizzano le formule di Newton-Cotes per valori di n compresi tra 1 e 10. Si può notare che all'aumentare di n vi è una iniziale diminuzione

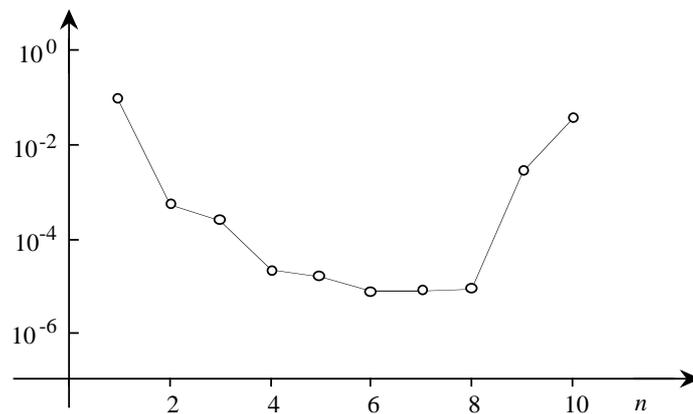


Figure 2: - Errore relativo nel calcolo delle formule di Newton-Cotes per l'approssimazione di $\int_0^1 e^{-x^2} dx$.

dell'errore, dovuta ad una diminuzione del resto, fino a $n = 8$, mentre per $n > 8$ l'errore cresce rapidamente. Poiché la funzione in esame è analitica su tutto il piano complesso, è assicurata la convergenza dei resti, quindi la crescita degli errori per $n > 8$ è dovuta alla instabilità numerica delle formule, nelle quali sono presenti dei coefficienti negativi di modulo crescente al crescere di n . Infatti S è minore di 1, mentre per $n = 10$ risulta

$$\sum_{i=0}^n w_i = 10h, \quad \sum_{i=0}^n |w_i| \approx 10^7 h,$$

e quindi si verificano elevati errori di cancellazione.

Il procedimento seguito nell'esempio precedente per la determinazione della formula di Newton-Cotes che approssima l'integrale dato con un resto limitato in modulo da una quantità prefissata, non viene in generale utilizzato nella pratica. Si preferisce sfruttare la proprietà di additività degli integrali secondo una tecnica detta di *composizione*, suddividendo l'intervallo $[a, b]$ in un numero N opportuno di sottointervalli, su ciascuno dei quali l'integrale viene approssimato con una formula di Newton-Cotes a basso numero di punti.

Non è necessario che i sottointervalli abbiano tutti la stessa lunghezza, ma per semplicità consideriamo prima questo caso, fissando in $[a, b]$ i punti equidistanti z_k , $k = 0, \dots, N$, con $a = z_0$, $b = z_N$. Quindi

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=0}^{N-1} \int_{z_k}^{z_{k+1}} f(x) dx,$$

da cui si ottiene la formula di quadratura

$$J_{n+1}^{(N)} = \sum_{k=0}^{N-1} S_{n+1}^{(k)}, \quad (15)$$

dove $S_{n+1}^{(k)}$ è la formula di Newton-Cotes S_{n+1} della f nell'intervallo $[z_k, z_{k+1}]$.

Per $n = 1$ si applica la (11) ad ogni sottointervallo $[z_k, z_{k+1}]$ di ampiezza $h = (b - a)/N$, cioè

$$S_2^{(k)} = \frac{b-a}{2N} [f(z_k) + f(z_{k+1})].$$

Per la (15) è

$$\begin{aligned} J_2^{(N)} &= \frac{b-a}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} [f(z_k) + f(z_{k+1})] \\ &= \frac{b-a}{2N} [f(z_0) + f(z_1) + f(z_1) + f(z_2) + \dots + f(z_{N-1}) + f(z_N)], \end{aligned}$$

da cui si ha la formula *dei trapezi*

$$J_2^{(N)} = \frac{b-a}{2N} \left[f(z_0) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} f(z_k) + f(z_N) \right].$$

L'interpretazione geometrica di tale formula è illustrata dalla figura 3.

Per $n = 2$ si applica la (12) ad ogni sottointervallo $[z_k, z_{k+1}]$ di ampiezza $h = (b - a)/(2N)$

$$S_3^{(k)} = \frac{b-a}{6N} \left[f(z_k) + 4f\left(\frac{z_k + z_{k+1}}{2}\right) + f(z_{k+1}) \right].$$

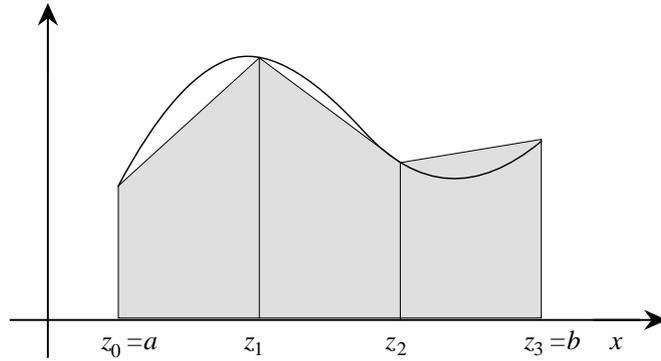


Figure 3: - Formula dei trapezi.

Per la (15) è

$$J_3^{(N)} = \frac{b-a}{6N} \sum_{k=0}^{N-1} \left[f(z_k) + 4f\left(\frac{z_k + z_{k+1}}{2}\right) + f(z_{k+1}) \right],$$

da cui si ha la formula di *Cavalieri-Simpson*

$$J_3^{(N)} = \frac{b-a}{6N} \left[f(z_0) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} f(z_k) + 4 \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{z_k + z_{k+1}}{2}\right) + f(z_N) \right].$$

Per $n > 2$ si può procedere in modo analogo.

Le formule $J_2^{(N)}$ e $J_3^{(N)}$ hanno lo stesso grado di precisione delle corrispondenti formule di Newton-Cotes. Infatti, per $n = 1$ il resto di $S_2^{(k)}$ è

$$r_2^{(k)} = -\frac{h^3}{12} f''(\xi_k), \quad \text{dove } h = z_{k+1} - z_k, \quad \xi_k \in (z_k, z_{k+1}),$$

per cui il resto della formula dei trapezi è dato da

$$R_2^{(N)} = \sum_{k=0}^{N-1} r_2^{(k)} = -\frac{h^3}{12} \sum_{k=0}^{N-1} f^{(s)}(\xi_k) = -\frac{(b-a)^3}{12 N^2} f''(\xi), \quad \xi \in (a, b). \quad (16)$$

In modo analogo, il resto della formula di Cavalieri-Simpson è dato da

$$R_3^{(N)} = -\frac{(b-a)^5}{2880 N^4} f^{(4)}(\xi). \quad (17)$$

Se $|f''(x)|$ è limitata in $[a, b]$, è $\lim_{N \rightarrow \infty} |R_2^{(N)}| = 0$, per cui, fissato $\epsilon > 0$, è possibile determinare N tale che $|R_2^{(N)}| \leq \epsilon$. Analogamente, se $|f^{(4)}(x)|$ è limitata in $[a, b]$, è possibile determinare N tale che $|R_3^{(N)}| \leq \epsilon$.

Esempio Si vuole determinare il numero N di sottointervalli in cui dividere l'intervallo $[0, 1]$ in modo che l'integrale

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

sia approssimato con la formula dei trapezi con un resto minore in modulo di $0.5 \cdot 10^{-3}$. Poiché $\max_{x \in [0,1]} |f''(x)| = 2$, dalla (16) risulta

$$|R_2^{(N)}| \leq \frac{1}{6 N^2}.$$

Imponendo che $6 N^2 \geq 2 \cdot 10^3$, ne segue che l'approssimazione richiesta può essere ottenuta con $N \geq 19$. Risulta $J_2^{(19)} = 0.7466516$, con un errore di circa $0.173 \cdot 10^{-3}$.

Con la formula di Cavalieri-Simpson, essendo $\max_{x \in [0,1]} |f^{(4)}(x)| = 12$, dalla (17) risulta

$$|R_3^{(N)}| \leq \frac{1}{240 N^4}.$$

Imponendo che $240 N^4 \geq 2 \cdot 10^3$, ne segue che l'approssimazione richiesta può essere ottenuta con $N \geq 2$. Risulta $J_3^{(2)} = 0.7468553$, con un errore di circa $0.312 \cdot 10^{-4}$. Nel primo caso occorrono 20 valutazioni della f , nel secondo caso ne bastano 5.

Naturalmente il valore di ϵ non può essere scelto in modo del tutto arbitrario in quanto, oltre all'errore analitico

$$\epsilon_{an} = - \frac{R_{n+1}^{(N)}}{S}$$

del procedimento di integrazione approssimata, si deve considerare l'errore di arrotondamento commesso nel calcolo della formula stessa di integrazione. Questo errore dipende sia dalla precisione con cui vengono calcolati i valori della funzione nei nodi, sia dal numero dei termini che vengono sommati. Per questo motivo, è opportuno scegliere ϵ in modo che l'errore analitico non sia inferiore all'errore algoritmico e comunque che non risulti inferiore alla precisione di macchina usata nei calcoli.

Nella figura 4 sono riportati gli errori relativi effettivamente generati, al crescere di N , dalle formule dei trapezi (linea con i pallini) e di Cavalieri-Simpson (linea con i quadratini neri) per il calcolo di

$$\int_0^1 \sin x dx.$$

Per $N \leq 65$ per la formula dei trapezi e per $N \leq 6$ per la formula di Cavalieri-Simpson l'errore analitico prevale su quello di arrotondamento, mentre per valori più grandi di N l'errore totale si mantiene più o meno costante attorno ad un valore determinato dalla sola precisione di macchina (circa 10^{-6}) con tendenza ad aumentare con N .

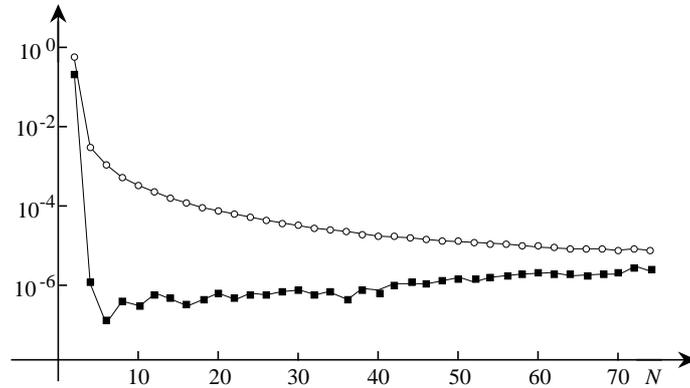


Figure 4: - Errori relativi nel calcolo di $\int_0^1 \sin x \, dx$ con le formule dei trapezi e di Cavalieri-Simpson.

L'uso delle (16) e (17) per determinare un valore adeguato di N si basa sull'espressione del resto della formula e richiede lo studio preliminare, che può essere pesante, di una derivata opportuna della f . È possibile anche dare una stima del resto in modo automatico, confrontando fra loro le approssimazioni dell'integrale ottenute con due diversi valori di N . Di solito si confrontano i valori ottenuti per N e per $2N$, in modo da poter sfruttare nel secondo calcolo i valori della funzione già utilizzati per il primo. Per il metodo dei trapezi dalla (16) si ha

$$S - J_2^{(N)} = \frac{\delta_N}{N^2}, \quad S - J_2^{(2N)} = \frac{\delta_{2N}}{4N^2},$$

in cui δ_N e δ_{2N} differiscono per la presenza del fattore $f''(\xi)$, che viene calcolato in punti generalmente diversi nei due casi. Nell'ipotesi che $f''(x)$ vari di poco al variare di x , si può supporre che $\delta_N \approx \delta_{2N} = \delta$, per cui

$$J_2^{(2N)} - J_2^{(N)} \approx \frac{3\delta}{4N^2},$$

e si ottiene la seguente stima del resto

$$S - J_2^{(2N)} \approx \frac{J_2^{(2N)} - J_2^{(N)}}{3}.$$

Si può quindi procedere con successivi raddoppi di N fino a quando

$$\left| \frac{J_2^{(2N)} - J_2^{(N)}}{3} \right| < \epsilon, \quad (18)$$

e correggere l'ultimo valore così ottenuto, assumendo

$$J_2^{(2N)} + \frac{J_2^{(2N)} - J_2^{(N)}}{3} = \frac{4J_2^{(2N)} - J_2^{(N)}}{3} \quad (19)$$

come approssimazione dell'integrale. Questo procedimento va sotto il nome di *estrapolazione di Richardson*. Naturalmente non vi è alcuna garanzia che l'errore dell'approssimazione sia effettivamente minore di ϵ , vista l'ipotesi che è stata fatta su $f''(x)$. Questa tecnica di stimare l'errore e di correggere il valore ottenuto è stata poi perfezionata nello schema di Romberg per la quadratura automatica.

Esempio Si applica l'estrapolazione di Richardson al calcolo di

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

con la formula dei trapezi. Partendo con il valore $N = 2$ si ottiene

N	$J^{(N)}$
2	0.7313700
4	0.7429838
8	0.7458653
16	0.7465825

Per $N = 8$ risulta verificata la condizione (18) con $\epsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$ e si assume il valore 0.7468214 ottenuto con la (19) come approssimazione dell'integrale. In realtà l'errore effettivo è di circa $0.273 \cdot 10^{-5}$. Confrontando con i risultati dell'esempio precedente, si nota come con l'estrapolazione di Richardson si sia potuta ottenere un'approssimazione migliore con un minor numero di valutazioni della f .

Procedendo in modo analogo con la formula di Cavalieri-Simpson si ottiene

N	$J^{(N)}$
2	0.7468553
4	0.7468255

Per $N = 2$ risulta verificata la condizione (18) con $\epsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$ e si assume il valore 0.7468235 ottenuto con la (19), come approssimazione dell'integrale. In realtà l'errore effettivo è di circa $0.633 \cdot 10^{-6}$.

Se la funzione f non è sufficientemente regolare, per cui la (16) o la (17) non sono applicabili, vi può essere ugualmente convergenza a zero del resto.

Esempio Si applica la formula di Cavalieri-Simpson al calcolo dei due integrali

$$\int_0^1 \sqrt{x} dx \quad \text{e} \quad \int_{0.1}^{1.1} \sqrt{x} dx,$$

con valori crescenti di N e si indicano con $err_N^{(1)}$ e $err_N^{(2)}$ gli errori assoluti effettivamente generati nel calcolo del primo e del secondo integrale, si ha

N	$err_N^{(1)}$	$err_N^{(2)}$
2	$0.101 \cdot 10^{-1}$	$0.671 \cdot 10^{-3}$
4	$0.359 \cdot 10^{-2}$	$0.832 \cdot 10^{-4}$
8	$0.127 \cdot 10^{-2}$	$0.900 \cdot 10^{-5}$
16	$0.449 \cdot 10^{-3}$	
32	$0.161 \cdot 10^{-3}$	
64	$0.599 \cdot 10^{-4}$	

La convergenza nel primo caso è molto più lenta che nel secondo, e questo dipende dalla singolarità delle derivate della f nel punto 0.

Nel caso in cui i nodi x_i , $i = 0, \dots, N$ non sono equidistanti, ad esempio nel caso di funzioni f note in un insieme assegnato di punti, è ancora possibile applicare con piccole modifiche le formule di quadratura studiate. In particolare, per la formula dei trapezi, posto $h_i = x_{i+1} - x_i$, si ha

$$J_2^{(N)} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h_i}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})].$$

Una formula più precisa si ottiene integrando la spline cubica che approssima la f

$$S_{N+1} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h_i}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] - \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h_i^3}{24} (\mu_i + \mu_{i+1}),$$

in cui μ_i , $i = 0, \dots, N$ sono i momenti della spline. Se i punti x_i sono equidistanti di passo h e sono noti anche i valori $f'(a)$ e $f'(b)$, si può usare la formula di Eulero-Maclaurin ottenuta usando la spline completa

$$S_{N+1} = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{N-1} [f(x_i) + f(x_{i+1})] - \frac{h^2}{12} [f'(b) - f'(a)],$$

il cui resto è maggiorato da

$$|r_{N+1}| \leq \frac{7}{8} M_4 \frac{(b-a)^5}{N^4}, \quad M_4 = \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|.$$

Esempio Se si calcola

$$\int_{1/\pi}^{5\pi} \sin \frac{1}{x} dx,$$

usando la formula dei trapezi con i nodi $x_i = (i+1)/\pi$ per $i = 0, \dots, 4$ e $x_i = (i-4)\pi$ per $i = 5, \dots, 9$, si ottiene il valore 3.282565, affetto da un errore di circa $0.316 \cdot 10^{-2}$. Integrando invece la spline cubica costruita sugli stessi nodi si ottiene il valore 3.250903, che è affetto da un errore di circa $0.547 \cdot 10^{-4}$.

3 Formule gaussiane

Le formule gaussiane sono formule interpolatorie ad alto grado di precisione. La formula interpolatoria S_{n+1} costruita sugli zeri x_0, \dots, x_n dell'($n+1$)-esimo polinomio ortogonale p_{n+1} sull'intervallo $[a, b]$ rispetto al peso $\omega(x) \equiv 1$, è detta *formula gaussiana* e ha, per il teorema 2, grado di precisione $2n+1$ (cioè il massimo possibile) e coefficienti positivi, per il teorema 3. Ciò per il teorema 1 assicura la convergenza di queste formule.

Poiché la teoria dei polinomi ortogonali viene di solito svolta nel caso più generale dell'ortogonalità rispetto a una funzione peso $\omega(x) \geq 0$, si generalizza il problema dell'approssimazione di integrali della forma (1) a integrali della forma

$$S = \int_a^b \omega(x) f(x) dx. \quad (20)$$

Le formule che si ottengono assumono di volta in volta il nome della classe di polinomi ortogonali usati per costruirle. Per queste formule valgono risultati analoghi ai teoremi 2 e 3 (anche le dimostrazioni sono analoghe).

Teorema 5 *Fissata una funzione peso $\omega(x) \geq 0$ sull'intervallo $[a, b]$, la formula di quadratura gaussiana pesata S_{n+1} , costruita scegliendo come nodi gli $n+1$ zeri del $(n+1)$ -esimo polinomio p_{n+1} ortogonale su $[a, b]$ rispetto al peso ω , ha grado di precisione $2n+1$ e coefficienti positivi.*

I coefficienti delle formule gaussiane possono essere dati in forma esplicita, come risulta dal seguente teorema.

Teorema 6 *I coefficienti della formula gaussiana pesata S_{n+1} sono dati da*

$$w_i = \frac{a_{n+1} h_n}{a_n p'_{n+1}(x_i) p_n(x_i)}, \quad i = 0, \dots, n, \quad (21)$$

dove p_n è l' n -esimo polinomio ortogonale su $[a, b]$ rispetto al peso $\omega(x)$, a_n è il suo primo coefficiente e h_n è la costante di normalizzazione.

Dim. Poiché

$$p_{n+1}(x) = a_{n+1} \pi_n(x), \quad (22)$$

per la (4) i coefficienti di S_{n+1} sono dati da

$$w_i = \frac{1}{p'_{n+1}(x_i)} \int_a^b \omega(x) \frac{p_{n+1}(x)}{x - x_i} dx, \quad i = 0, \dots, n. \quad (23)$$

Ponendo $\xi = x_i$ nella formula di Christoffel-Darboux

$$(x - \xi) \sum_{i=0}^n \frac{1}{h_i} p_i(x) p_i(\xi) = \frac{a_n}{a_{n+1} h_n} [p_{n+1}(x) p_n(\xi) - p_{n+1}(\xi) p_n(x)] \quad (24)$$

si ha

$$\frac{a_n}{a_{n+1}h_n} \frac{1}{x-x_i} [p_{n+1}(x)p_n(x_i) - p_{n+1}(x_i)p_n(x)] = \sum_{j=0}^n \frac{1}{h_j} p_j(x)p_j(x_i),$$

e poiché $p_{n+1}(x_i) = 0$, integrando si ha

$$\frac{a_n}{a_{n+1}h_n} p_n(x_i) \int_a^b \omega(x) \frac{p_{n+1}(x)}{x-x_i} dx = \sum_{j=0}^n \frac{1}{h_j} p_j(x_i) \int_a^b \omega(x) p_j(x) dx. \quad (25)$$

I polinomi p_j sono ortogonali su $[a, b]$, quindi

$$\int_a^b \omega(x) p_j(x) dx = (p_j, 1) = 0, \quad \text{per } j \geq 1,$$

e per $j = 0$ è $p_0(x) = p_0(x_i) = a_0$ e

$$\frac{1}{h_0} p_0(x_i) \int_a^b \omega(x) p_0(x) dx = \frac{1}{h_0} (p_0, p_0) = 1.$$

Sostituendo nella (25), si ha

$$\int_a^b \omega(x) \frac{p_{n+1}(x)}{x-x_i} dx = \frac{h_n a_{n+1}}{a_n p_n(x_i)},$$

e dalla (23) segue la (21). \square

Teorema 7 Se $f \in C^{2n+2}[a, b]$, il resto r_{n+1} della formula gaussiana S_{n+1} è

$$r_{n+1} = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega(x) \pi_n^2(x) dx = \frac{h_{n+1}}{(2n+2)! a_{n+1}^2} f^{(2n+2)}(\xi), \quad \xi \in (a, b). \quad (26)$$

Dim. Sia q il polinomio osculatore di Hermite sui nodi x_i , $i = 0, \dots, n$, cioè il polinomio di grado al più $2n+1$ che soddisfa le condizioni

$$q(x_i) = f(x_i), \quad q'(x_i) = f'(x_i), \quad i = 0, \dots, n.$$

Se $f \in C^{2n+2}[a, b]$, si può dimostrare che esiste un punto $\eta = \eta(x) \in (a, b)$ tale che il resto $r(x) = f(x) - q(x)$ è dato da

$$r(x) = \pi_n^2(x) \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}, \quad (27)$$

in cui la $f^{(2n+2)}(\eta)$ è una funzione continua della x . La formula di quadratura S_{n+1} ha grado di precisione $2n+1$, quindi

$$\int_a^b \omega(x) q(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i q(x_i)$$

e, poiché $q(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$, dalla

$$S = \int_a^b \omega(x) f(x) dx = \int_a^b \omega(x) q(x) dx + \int_a^b \omega(x) r(x) dx.$$

segue che

$$S = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + \int_a^b \omega(x) r(x) dx.$$

Perciò per la (27) il resto della formula di quadratura S_{n+1} è

$$r_{n+1} = \int_a^b \omega(x) r(x) dx = \frac{1}{(2n+2)!} \int_a^b \omega(x) \pi_n^2(x) f^{(2n+2)}(\eta) dx.$$

Poiché la funzione $\omega(x) \pi_n^2(x)$ non cambia segno e la $f^{(2n+2)}(\eta)$ è continua nella x , esiste $\xi \in (a, b)$ tale che

$$r_{n+1} = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega(x) \pi_n^2(x) dx.$$

Dalla (22) si ha

$$\int_a^b \omega(x) \pi_n^2(x) dx = \frac{1}{a_{n+1}^2} \int_a^b \omega(x) p_{n+1}^2(x) dx = \frac{h_{n+1}}{a_{n+1}^2},$$

da cui segue la (26). \square

3.1 Formule di Gauss-Legendre

Se $a = -1$ e $b = 1$ e $\omega(x) \equiv 1$, i polinomi ortogonali usati per costruire le formule gaussiane sono i polinomi di Legendre. Le formule di quadratura che si ottengono sono dette di *Gauss-Legendre*. Poiché l' n -esimo polinomio di Legendre P_n ha primo coefficiente

$$a_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}$$

e costante di normalizzazione

$$h_n = \frac{2}{2n+1},$$

i coefficienti della formula di Gauss-Legendre S_{n+1} per la (21) sono

$$w_i = \frac{2}{(n+1)P'_{n+1}(x_i)P_n(x_i)}, \quad i = 0, \dots, n, \quad (28)$$

e il resto per la (26) è

$$r_{n+1} = \frac{2^{2n+3} [(n+1)!]^4}{[(2n+2)!]^3 (2n+3)} f^{(2n+2)}(\xi). \quad (29)$$

Per $n = 0$, l' $(n + 1)$ -esimo polinomio di Legendre è

$$P_1(x) = x,$$

che si annulla nel punto $x_0 = 0$. Dalla (28), poiché

$$P_1'(x_0)P_0(x_0) = 1,$$

si ha

$$w_0 = 2,$$

per cui la corrispondente formula di Gauss-Legendre è data da

$$S_1 = 2f(0) \tag{30}$$

ed ha grado di precisione 1.

Per $n = 1$, l' $(n + 1)$ -esimo polinomio di Legendre è

$$P_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1),$$

che si annulla nei punti $x_0 = -1/\sqrt{3}$ e $x_1 = 1/\sqrt{3}$. Dalla (28), poiché

$$P_2'(x_0)P_1(x_0) = P_2'(x_1)P_1(x_1) = 1,$$

si ha

$$w_0 = w_1 = 1,$$

per cui la corrispondente formula di Gauss-Legendre è data da

$$S_2 = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \tag{31}$$

ed ha grado di precisione 3 (cioè quanto la formula di Newton-Cotes (12), che però richiede il calcolo della f in tre punti).

Per $n = 2$, l' $(n + 1)$ -esimo polinomio di Legendre è

$$P_3(x) = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x)$$

che si annulla nei punti $x_0 = -\sqrt{3/5}$, $x_1 = 0$ e $x_2 = \sqrt{3/5}$. Dalla (28), poiché

$$P_3'(x_0)P_2(x_0) = P_3'(x_2)P_2(x_2) = \frac{6}{5}, \quad P_3'(x_1)P_2(x_1) = \frac{3}{4},$$

si ha

$$w_0 = w_2 = \frac{5}{9}, \quad w_1 = \frac{8}{9},$$

per cui la corrispondente formula di Gauss-Legendre è data da

$$S_3 = \frac{1}{9} \left[5f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + 8f(0) + 5f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) \right] \quad (32)$$

ed ha grado di precisione 5 (cioè quanto la formula di Newton-Cotes che richiede il calcolo della f in 5 punti).

Per valori di n più elevati gli zeri x_i , $i = 0, \dots, n$, di P_{n+1} vengono calcolati con metodi iterativi. Se la precisione con cui questi zeri vengono determinati non è sufficiente, anche i coefficienti delle formule ne risentono, per cui si può produrre un'elevata propagazione degli errori di arrotondamento. È però possibile calcolare contemporaneamente gli x_i e i w_i mediante gli autovalori e gli autovettori di una matrice tridiagonale simmetrica (ved. il paragrafo 3.5).

Nella tabella di figura 5 sono riportati i nodi, i coefficienti e i resti delle formule di Gauss-Legendre S_{n+1} per $n = 0, \dots, 4$.

n	x_i	$w_i = w_{n-i}$	r_{n+1}
0	0	2	$0.333 f''(\xi)$
1	± 0.5773502692	1	$0.741 \cdot 10^{-2} f^{(4)}(\xi)$
2	± 0.7745966692 0	0.5555555556 0.8888888889	$0.635 \cdot 10^{-4} f^{(6)}(\xi)$
3	± 0.8611363116 ± 0.3399810436	0.3478548451 0.6521451549	$0.288 \cdot 10^{-6} f^{(8)}(\xi)$
4	± 0.9061798459 ± 0.5384693101 0	0.2369268851 0.4786286705 0.5688888889	$0.808 \cdot 10^{-9} f^{(10)}(\xi)$

Figure 5: - Nodi, coefficienti e resti delle formule di Gauss-Legendre S_{n+1} , per $n = 0, \dots, 4$.

Esempio Per applicare le formule di Gauss-Legendre all'integrale

$$S = \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

occorre fare la trasformazione di variabile $x = (t + 1)/2$ con cui si ottiene

$$S = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 g(t) dt, \quad \text{con } g(t) = \exp\left(-\frac{(t+1)^2}{4}\right).$$

Il problema è quindi ricondotto all'approssimazione di quest'ultimo integrale, con un resto in modulo non superiore a $\epsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$. Notando che

$$\max_{t \in [-1,1]} |g^{(k)}(t)| = 2^{-k} \max_{x \in [0,1]} |f^{(k)}(x)|,$$

si ha che

$$\max_{t \in [-1,1]} |g^{(6)}(t)| = \frac{15}{8}.$$

Perciò per $n = 2$ il resto della formula di Gauss-Legendre è

$$|r_3| \approx 0.635 \cdot 10^{-4} |g^{(6)}(\xi)| < \epsilon,$$

e si ottiene

$$\frac{1}{2} S_3 = \frac{1}{18} \left[5 \exp\left(-\frac{2}{5} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{5}}\right) + 8 \exp\left(-\frac{1}{4}\right) + 5 \exp\left(-\frac{2}{5} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{5}}\right) \right] = 0.746815.$$

L'errore assoluto effettivamente generato è

$$\left| S - \frac{1}{2} S_3 \right| \approx 0.963 \cdot 10^{-5}.$$

Quindi con una formula gaussiana con tre valutazioni della funzione integranda si è ottenuto un risultato con un errore dello stesso ordine di quello ottenuto in un esempio precedente con una formula newtoniana che richiede 5 valutazioni della f .

Nella figura 6 sono riportati i moduli degli errori relativi da cui sono affetti i risultati ottenuti applicando alla funzione f la formula di Gauss-Legendre per valori di n compresi tra 1 e 10. Si confronti con la figura 2 che riporta i corrispondenti errori per le formule newtoniane.

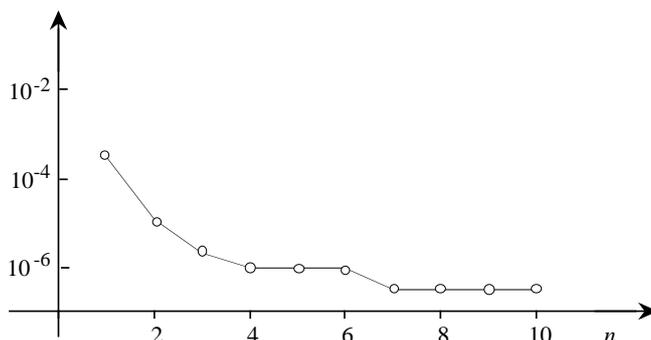


Figure 6: - Errore relativo nel calcolo di $S = \int_0^1 e^{-x^2} dx$ con le formule di Gauss-Legendre.

Una tecnica di composizione, analoga a quella descritta nel paragrafo 2, è valida anche nel caso delle formule gaussiane. Come per la (15) la formula gaussiana

composta è data da

$$G_{n+1}^{(N)} = \sum_{k=0}^{N-1} S_{n+1}^{(k)},$$

dove $S_{n+1}^{(k)}$ è la formula gaussiana S_{n+1} applicata alla f nell'intervallo $[z_k, z_{k+1}]$.
Posto

$$h = \frac{b-a}{2N}, \quad z_k = a + 2kh, \quad k = 0, \dots, N,$$

la trasformazione di variabile

$$x = ht + \frac{z_k + z_{k+1}}{2}$$

riconduce il calcolo dell'integrale dall'intervallo $[z_k, z_{k+1}]$ all'intervallo $[-1, 1]$.
Quindi

$$G_{n+1}^{(N)} = h \sum_{j=0}^n w_j \sum_{k=0}^{N-1} f\left(ht_j + \frac{z_k + z_{k+1}}{2}\right),$$

dove t_j , $j = 0, \dots, n$, sono gli zeri dell' $(n+1)$ -esimo polinomio ortogonale. Dalla (29) si ha

$$R_{n+1}^{(N)} = \sum_{k=0}^{N-1} \gamma_{n+1} h^{2n+3} f^{(2n+2)}(\xi_k), \quad \gamma_{n+1} = \frac{2^{2n+3} [(n+1)!]^4}{[(2n+2)!]^3 (2n+3)},$$

dove $\xi_k \in (z_k, z_{k+1})$, e quindi esiste un punto $\xi \in (a, b)$ tale che

$$R_{n+1}^{(N)} = \gamma_{n+1} h^{2n+3} N f^{(2n+2)}(\xi) = \gamma_{n+1} \frac{(b-a)^{2n+3}}{2^{2n+3} N^{2n+2}} f^{(2n+2)}(\xi).$$

Ad esempio, dalla formula di Gauss-Legendre (30) si ottiene la formula composta

$$G_1^{(N)} = \frac{b-a}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{z_k + z_{k+1}}{2}\right), \quad (\text{formula dei punti di mezzo})$$

la cui interpretazione geometrica è illustrata nella figura 7. Dalla formula di Gauss-Legendre (31) si ottiene la formula composta

$$G_2^{(N)} = \frac{b-a}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \left[f\left(z_k + \frac{3-\sqrt{3}}{3} h\right) + f\left(z_k + \frac{3+\sqrt{3}}{3} h\right) \right]. \quad (33)$$

I corrispondenti resti sono

$$R_1^{(N)} = \frac{(b-a)^3}{24N^2} f''(\xi),$$

$$R_2^{(N)} = \frac{(b-a)^5}{4320N^4} f^{(4)}(\xi).$$

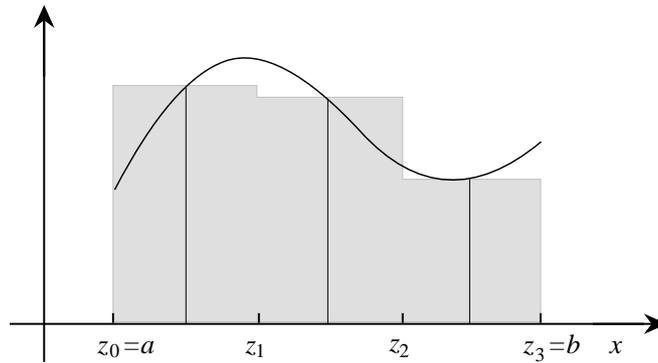


Figure 7: - Formula dei punti di mezzo.

Quindi non vi sono differenze rilevanti fra questi resti e quelli delle formule di Newton-Cotes composte dati in (16) e (17). Anche il numero di valutazioni di funzione richieste da queste formule è all'incirca lo stesso di quelle richieste dalle formule dei trapezi e di Cavalieri-Simpson.

Confrontando tra loro le formule newtoniane e quelle qui ottenute si nota che i nodi di una formula gaussiana S_{n+1} per $n \geq 1$ non sono un sottoinsieme dei nodi di alcuna formula gaussiana S_{m+1} , con $m > n$. Questo fatto rappresenta un notevole inconveniente per le formule gaussiane, in quanto è impossibile applicare la formula gaussiana S_{n+k} con $k > 1$, utilizzando i valori della funzione precedentemente calcolati per applicare la formula S_{n+1} , cosa che invece è possibile fare con le formule newtoniane.

3.2 Formule di Gauss-Chebyshev

Se $a = -1$ e $b = 1$ la formula gaussiana pesata rispetto al peso $\omega(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ è la formula di Gauss-Chebyshev e consente di approssimare integrali del tipo

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx,$$

scegliendo come nodi gli zeri del polinomio T_{n+1} di Chebyshev di prima specie

$$x_i = \cos \theta_i, \quad \theta_i = \frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)}, \quad i = 0, \dots, n. \quad (34)$$

Poiché l' n -esimo polinomio di Chebyshev T_n ha primo coefficiente $a_n = 2^{n-1}$ per $n \geq 1$ e $a_0 = 1$ e costante di normalizzazione $h_n = \pi/2$ per $n \geq 1$ e $h_0 = \pi$, per la (21) i coefficienti della formula di Gauss-Chebyshev S_{n+1} sono

$$\begin{cases} w_0 = \pi & \text{per } n = 0, \\ w_i = \frac{\pi}{T'_{n+1}(x_i)T_n(x_i)}, \quad i = 0, \dots, n, & \text{per } n \geq 1. \end{cases} \quad (35)$$

Ponendo $x = \cos \theta$, si ha $T_n(x) = \cos n\theta$,

$$T'_{n+1}(x) = \frac{d}{dx} T_{n+1}(x) = \frac{d}{d\theta} T_{n+1}(\cos \theta) \frac{d\theta}{dx} = (n+1) \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta}.$$

Poiché per $i = 0, \dots, n$ è $\cos(n+1)\theta_i = 0$, risulta

$$\cos n\theta_i \cos \theta_i = \sin n\theta_i \sin \theta_i, \quad (36)$$

e quindi

$$\begin{aligned} T'_{n+1}(x_i)T_n(x_i) &= (n+1) \frac{\sin(n+1)\theta_i \cos n\theta_i}{\sin \theta_i} \\ &= (n+1) \frac{\sin \theta_i \cos^2 n\theta_i + \cos \theta_i \sin n\theta_i \cos n\theta_i}{\sin \theta_i}, \end{aligned}$$

e per la (36) è

$$T'_{n+1}(x_i)T_n(x_i) = (n+1)(\cos^2 n\theta_i + \sin^2 n\theta_i) = n+1.$$

Sostituendo nella (35) si ha allora per $n \geq 1$ che

$$w_i = \frac{\pi}{n+1}, \quad i = 0, \dots, n.$$

Le formule di Gauss-Chebyshev sono perciò date da

$$S_{n+1} = \frac{\pi}{n+1} \sum_{i=0}^n f(x_i),$$

dove i nodi x_i sono dati dalla (34). Per quanto riguarda il resto, dalla (26) si ha che

$$r_{n+1} = \frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi). \quad (37)$$

Per $n = 0$ si ha $x_0 = 0$; la corrispondente formula di Gauss-Chebyshev è

$$S_1 = \pi f(0),$$

ed ha grado di precisione 1. Per $n = 1$ è $x_0 = -x_1 = -1/\sqrt{2}$; la corrispondente formula di Gauss-Chebyshev è

$$S_2 = \frac{\pi}{2} \left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right],$$

ed ha grado di precisione 3.

Esempio Si applicano le formule di Gauss-Chebyshev al calcolo dell'integrale

$$S = \int_{-1}^1 \frac{\cos x}{\sqrt{1-x^2}} dx,$$

richiedendo che il resto sia minore in modulo di $\epsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$. Poiché $f(x) = \cos x$ e per ogni k è $|f^{(k)}(x)| \leq 1$, dalla (37) si ha che per $n = 2$ è $|r_{n+1}| \leq \epsilon$ e la formula da usare è

$$\begin{aligned} S_3 &= \frac{\pi}{3} \sum_{i=0}^2 \cos x_i = \frac{\pi}{3} \left[\cos \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \right) + \cos 0 + \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right] \\ &= \frac{\pi}{3} \left[1 + 2 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right] = 2.404070. \end{aligned}$$

Poiché $S = 2.403939$, l'errore assoluto è di circa $0.131 \cdot 10^{-3}$.

3.3 Formule di Gauss-Laguerre

Le formule gaussiane pesate possono essere usate anche per approssimare integrali su un intervallo infinito. Se $a = 0$ e $b = \infty$, la formula gaussiana pesata rispetto al peso $\omega(x) = e^{-x}$ è la formula di Gauss-Laguerre e consente di approssimare integrali del tipo

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx,$$

scegliendo come nodi gli zeri x_i , $i = 0, \dots, n$, del polinomio L_{n+1} di Laguerre. I coefficienti sono dati da

$$w_i = -\frac{1}{(n+1)L'_{n+1}(x_i)L_n(x_i)},$$

il resto per la (26) è dato da

$$r_{n+1} = \frac{((n+1)!)^2}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi). \quad (38)$$

Per $n = 0$ si ha $L_1(x) = -(x-1)$ e quindi

$$x_0 = 1, \quad L'_1(x_0) = -1, \quad L_0(x_0) = 1,$$

per cui $w_0 = 1$. La corrispondente formula di Gauss-Laguerre è

$$S_1 = f(1)$$

ed ha grado di precisione 1. Per $n = 1$ si ha

$$L_2(x) = \frac{1}{2} (x^2 - 4x + 2),$$

da cui

$$\begin{aligned} x_0 &= 2 - \sqrt{2}, & x_1 &= 2 + \sqrt{2}, & L'_2(x_0) &= -\sqrt{2} = -L'_2(x_1), \\ L_1(x_0) &= \sqrt{2} - 1, & L_1(x_1) &= -\sqrt{2} - 1, \end{aligned}$$

e quindi

$$w_0 = \frac{1}{4} (2 + \sqrt{2}), \quad w_1 = \frac{1}{4} (2 - \sqrt{2}).$$

La corrispondente formula di Gauss-Laguerre è

$$S_2 = \frac{1}{4} [(2 + \sqrt{2})f(2 - \sqrt{2}) + (2 - \sqrt{2})f(2 + \sqrt{2})]$$

ed ha grado di precisione 3. Nella tabella di figura 8 sono riportati i nodi, i coefficienti e i resti delle formule di Gauss-Laguerre S_{n+1} , per $n = 0, \dots, 4$.

n	x_i	w_i	r_{n+1}
0	1	1	0.500 $f''(\xi)$
1	0.5857864376 3.414213562	0.8535533906 0.1464466094	0.167 $f^{(4)}(\xi)$
2	0.4157745568 2.29428036 6.289945083	0.7110930099 0.2785177336 0.103892565 10^{-1}	0.500 $10^{-1} f^{(6)}(\xi)$
3	0.3225476896 1.745761101 4.536620297 9.395070912	0.6031541043 0.3574186924 0.3888790852 10^{-1} 0.5392947056 10^{-3}	0.143 $10^{-1} f^{(8)}(\xi)$
4	0.2635603197 1.413403059 3.596425771 7.085810006 12.64080084	0.5217556106 0.3986668111 0.7594244968 10^{-1} 0.3611758680 10^{-2} 0.2336997239 10^{-4}	0.397 $10^{-2} f^{(10)}(\xi)$

Figure 8: - Nodi, coefficienti e resti delle formule di Gauss-Laguerre S_{n+1} , per $n = 0, \dots, 4$.

Esempio Si applicano le formule di Gauss-Laguerre al calcolo dell'integrale

$$S = \int_0^\infty e^{-x} \cos x \, dx,$$

richiedendo che il resto sia minore in modulo di $\epsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$. Poiché $f(x) = \cos x$ e per ogni k è $|f^{(k)}(x)| \leq 1$, dalla (38) si ha che per $n = 6$ è $|r_{n+1}| \leq \epsilon$. Il valore ottenuto è $S_7 = 0.5000424$, e poiché $S = 0.5$, l'errore assoluto è di circa $0.424 \cdot 10^{-4}$.

3.4 Formule di Gauss-Hermite

Se $a = -\infty$ e $b = +\infty$, la formula gaussiana pesata rispetto al peso $\omega(x) = e^{-x^2}$ è la formula di Gauss-Hermite e consente di approssimare integrali del tipo

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx,$$

scegliendo come nodi gli zeri $x_i, i = 0, \dots, n$, del polinomio $H_{n+1}(x)$ di Hermite. I coefficienti sono dati da

$$w_i = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{H'_{n+1}(x_i) H_n(x_i)},$$

il resto è dato da

$$r_{n+1} = \frac{(n+1)! \sqrt{\pi}}{2^{n+1} (2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi). \quad (39)$$

Per $n = 0$ si ha $H_1(x) = 2x$ e quindi

$$x_0 = 0, \quad H'_1(x_0) = 2, \quad H_0(x_0) = 1,$$

per cui $w_0 = \sqrt{\pi}$. La corrispondente formula di Gauss-Hermite è

$$S_1 = \sqrt{\pi} f(0)$$

ed ha grado di precisione 1. Per $n = 1$ si ha $H_2(x) = 4x^2 - 2$, da cui

$$x_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}} = -x_1, \quad H'_2(x_0) = -H'_2(x_1) = -\frac{8}{\sqrt{2}}, \quad H_1(x_0) = -H_1(x_1) = -\frac{2}{\sqrt{2}},$$

e quindi

$$w_0 = w_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

La corrispondente formula di Gauss-Hermite è

$$S_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right]$$

ed ha grado di precisione 3. Nella tabella di figura 9 sono riportati i nodi, i coefficienti e i resti delle formule di Gauss-Hermite S_{n+1} per $n = 0, \dots, 4$.

Esempio Si applicano le formule di Gauss-Hermite al calcolo dell'integrale

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \cos x dx,$$

richiedendo che il resto sia minore in modulo di $\epsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$. Poiché $f(x) = \cos x$ e per ogni k è $|f^{(k)}(x)| \leq 1$, dalla (39) si ha che per $n = 3$ è $|r_{n+1}| \leq \epsilon$. Il valore ottenuto è $S_4 = 1.380329$, e poiché $S = \sqrt{\pi} e^{-1/4} = 1.380388$, l'errore assoluto è di circa $0.594 \cdot 10^{-4}$.

n	x_i	$w_i = w_{n-i}$	r_{n+1}
0	0	1.772453851	0.443 $f''(\xi)$
1	± 0.7071067812	0.8862269255	0.369 $10^{-1} f^{(4)}(\xi)$
2	± 1.224744871 0	0.2954089752 1.181635901	0.185 $10^{-2} f^{(6)}(\xi)$
3	± 1.650680124 ± 0.5246476233	0.8131283545 10^{-1} 0.8049140900	0.659 $10^{-4} f^{(8)}(\xi)$
4	± 2.02018287 ± 0.9585724646 0	0.1995324206 10^{-1} 0.3936193232 0.9453087205	0.183 $10^{-5} f^{(10)}(\xi)$

Figure 9: - Nodi, coefficienti e resti delle formule di Gauss-Hermite S_{n+1} , per $n = 0, \dots, 4$.

3.5 Calcolo dei nodi e dei coefficienti tramite matrici tridiagonali simmetriche

A parte il caso delle formule basate sui polinomi di Chebyshev, il calcolo dei nodi e dei coefficienti delle formule gaussiane risulta computazionalmente meno pesante se si sfruttano le relazioni che li legano agli autovalori e autovettori di opportune matrici tridiagonali simmetriche.

Teorema 8 Sia $p_j(x)$, $j \geq 0$, una successione di polinomi ortogonali soddisfacenti la relazione ricorrente a tre termini

$$p_{j+1}(x) = (A_j x + B_j)p_j(x) - C_j p_{j-1}(x), \quad j \geq 1,$$

dove, indicati con a_j e b_j rispettivamente i coefficienti dei termini di grado j e $j-1$ e con h_j la costante di normalizzazione di $p_j(x)$, è

$$A_j = \frac{a_{j+1}}{a_j}, \quad B_j = \frac{a_{j+1}}{a_j} \left(\frac{b_{j+1}}{a_{j+1}} - \frac{b_j}{a_j} \right), \quad C_j = \frac{a_{j+1} a_{j-1} h_j}{a_j^2 h_{j-1}}.$$

Gli zeri x_i , $i = 0, \dots, n$, di $p_{n+1}(x)$ sono gli autovalori della matrice

$$J = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \beta_n & \\ & & & \beta_n & \alpha_{n+1} \end{bmatrix}, \quad \text{dove} \quad \begin{cases} \alpha_j = \frac{b_{j-1}}{a_{j-1}} - \frac{b_j}{a_j}, \\ \beta_j = \frac{a_{j-1}}{a_j} \sqrt{\frac{h_j}{h_{j-1}}}. \end{cases}$$

Indicata con z_i la prima componente dell'autovettore ortonormalizzato di J corrispondente all'autovalore x_i , è $w_i = z_i^2 h_0/a_0^2$.

Dim. Dalla relazione a tre termini si ha

$$\frac{1}{A_j} p_{j+1}(x) = \left(x + \frac{B_j}{A_j}\right) p_j(x) - \frac{C_j}{A_j} p_{j-1}(x),$$

da cui

$$\beta_{j+1} \sqrt{\frac{h_j}{h_{j+1}}} p_{j+1}(x) = (x - \alpha_{j+1}) p_j(x) - \beta_j \sqrt{\frac{h_j}{h_{j-1}}} p_{j-1}(x).$$

Quindi i polinomi normalizzati $q_j(x) = p_j(x)/\sqrt{h_j}$ soddisfano la relazione

$$\beta_j q_{j-1}(x) + \alpha_{j+1} q_j(x) + \beta_{j+1} q_{j+1}(x) = x q_j(x), \quad \text{per } j \geq 0,$$

dove $q_{-1}(x) = 0$. Indicato con $\mathbf{q}(x)$ il vettore $\mathbf{q}(x) = [q_0(x), q_1(x), \dots, q_n(x)]^T$, risulta

$$J \mathbf{q}(x) = x \mathbf{q}(x) - \beta_{n+1} \frac{p_{n+1}(x)}{\sqrt{h_{n+1}}} \mathbf{e}_{n+1},$$

dove \mathbf{e}_{n+1} è l' $(n+1)$ -esimo vettore canonico. Se x_i è uno zero di $p_{n+1}(x)$ si ha

$$J \mathbf{q}(x_i) = x_i \mathbf{q}(x_i),$$

e quindi x_i è autovalore di J e il vettore $\mathbf{y}^{(i)} = \mathbf{q}(x_i)$, la cui prima componente è $y_i = p_0(x_i)/\sqrt{h_0} = a_0/\sqrt{h_0}$, è l'autovettore corrispondente.

Poiché $p_{n+1}(x_i) = 0$, è $p_{n+1}(x_i)p_n(x) = p_{n+1}(x_i)p_n(x_i)$ e dalla formula di Christoffel-Darboux (24) con $\xi = x_i$ si ha

$$\sum_{j=0}^n \frac{p_j(x)p_j(x_i)}{h_j} = \frac{a_n}{a_{n+1}h_n} \frac{p_{n+1}(x)p_n(x_i) - p_{n+1}(x_i)p_n(x)}{x - x_i}.$$

Passando al limite per $x \rightarrow x_i$ risulta

$$\|\mathbf{y}^{(i)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^n q_j^2(x_i) = \frac{a_n}{a_{n+1}h_n} p'_{n+1}(x_i)p_n(x_i) = \frac{1}{w_i}.$$

Sia ora $\mathbf{z}^{(i)}$ l'autovettore ortonormalizzato di J corrispondente all'autovalore x_i , quindi la sua prima componente è

$$z_i = \frac{y_i}{\|\mathbf{y}^{(i)}\|_2} = \frac{a_0}{\sqrt{h_0}} \sqrt{w_i}.$$

Ne segue che $w_i = z_i^2 \frac{h_0}{a_0^2}$. \square

Quindi è possibile calcolare gli zeri dell'\$(n + 1)\$-esimo polinomio ortogonale, cioè i nodi della formula gaussiana \$S_{n+1}\$, per mezzo degli autovalori della matrice tridiagonale simmetrica \$J\$, i cui elementi sono

per i polinomi di Legendre \$\alpha_j = 0\$, \$\beta_j = \frac{j}{\sqrt{4j^2 - 1}}\$,

per i polinomi di Chebyshev di 1^a specie \$\alpha_j = 0\$, \$\beta_1 = \sqrt{\frac{1}{2}}\$, \$\beta_j = \frac{1}{2}\$ per \$j \geq 2\$,

per i polinomi di Chebyshev di 2^a specie \$\alpha_j = 0\$, \$\beta_j = \frac{1}{2}\$,

per i polinomi di Laguerre \$\alpha_j = 2j - 1\$, \$\beta_j = -j\$,

per i polinomi di Hermite \$\alpha_j = 0\$, \$\beta_j = \frac{\sqrt{2j}}{2}\$.

Per trovare i corrispondenti pesi \$w_i\$ basta calcolare le prime componenti degli autovettori normalizzati.

Ad esempio, nel caso delle formule di Gauss-Laguerre per \$n = 6\$ si ha

$$J = \begin{bmatrix} 1 & -1 & & & & & \\ -1 & 3 & -2 & & & & \\ & -2 & 5 & -3 & & & \\ & & -3 & 7 & -4 & & \\ & & & -4 & 9 & -5 & \\ & & & & -5 & 11 & -6 \\ & & & & & -6 & 13 \end{bmatrix},$$

da cui si ottengono gli autovalori

$$x_0 = 0.193044, \quad x_1 = 1.02666, \quad x_2 = 2.56788, \quad x_3 = 4.90033, \\ x_4 = 8.18215, \quad x_5 = 12.7342, \quad x_6 = 19.3957$$

Per i polinomi di Laguerre è \$a_0 = 1\$ e \$h_0 = 1\$, quindi i coefficienti \$w_i\$ sono i quadrati delle prime componenti degli autovettori ortonormalizzati

$$w_0 = 0.409319, \quad w_1 = 0.4218313, \quad w_2 = 0.147126, \quad w_3 = 0.0206335, \\ w_4 = 0.00107401, \quad w_5 = 0.0000158655, \quad w_6 = 0.317032 \cdot 10^{-7}.$$