Integrales

La evaluación de integrales y derivadas es una importante aplicación en física utilizando un computador. La evaluación numérica de las integrales es particularmente crucial ya que estas operaciones ocurren muy regularmente en los cálculos físicos. Algunas pueden ser resueltas analíticamente y otras no, entonces el uso del computador puede ser muy importante.

Métodos fundamentales:

Consideremos un caso simple para evaluar la integral de una función, una variable sobre un rango finito. La regla del trapezoide.

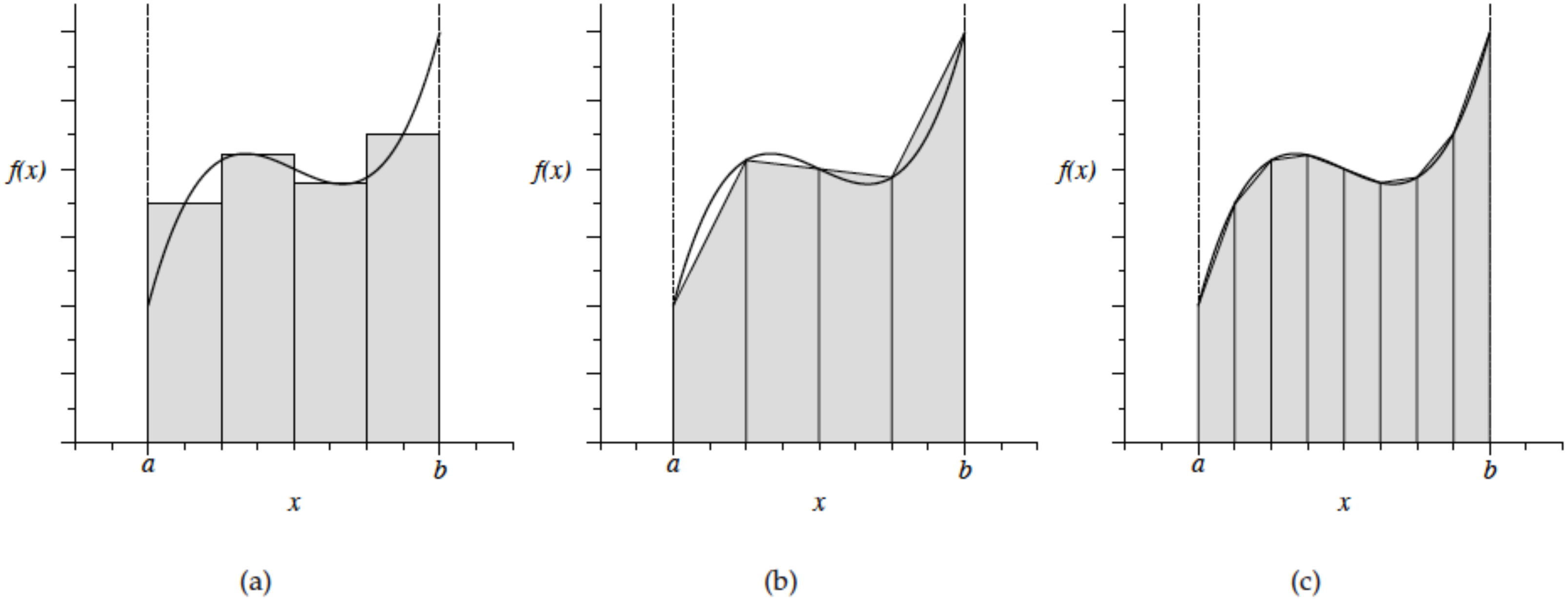


Figure 5.1: Estimating the area under a curve. (a) A simple scheme for estimating the area under a curve by dividing the area into rectangular slices. The gray shaded area approximates the area under the curve, though not very well. (b) The trapezoidal rule approximates the area as a set of trapezoids, and is usually more accurate. (c) With a larger number of slices, the shaded area is a more accurate approximation to the true area under the curve.

Supongamos que tenemos una funcion ***f(x)*** y queremos calcular la integral con respecto a ***x*** desde ***x = a*** hasta ***x = b***, de la forma ***I(a,b):***

$$I(a,b) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x.$$

Esto es equivalente a calcular el área bajo la curva de ***f(x)*** desde ***a*** hasta ***b.*** No existe una forma conocida que calcule cada área de manera exacta en todos los casos en un computador, pero se puede aproximar usando diferentes métodos:

Si usamos el caso de la figura a) se divide el área en secciones rectangulares, pero este no es tan cercano al área bajo la curva.

Una mejor aproximación involucra un poco más de trabajo, la figura b) es dividida en trapezoides en vez de rectángulos. El área bajo los trapezoides es considerablemente mejor aproximación del área bajo la curva, y este método que parece simple, ofrece mejores y adecuados resultados.

Supongamos que dividimos el intervalo entre ***a*** y ***b*** en ***N*** secciones, entonces cada sección tiene tamaño ***h = (b – a)/N.*** Entonces el lado derecho de cada ***k'esima*** sección seria ***a + kh*** y el lado izquierdo seria ***a + kh – h = a + (k – 1)h***. Entonces el área del trapezoide de cada sección seria:

$$A_k = \tfrac{1}{2}h\left[f(a+(k-1)h) + f(a+kh)\right].$$

Esto corresponde a la ***regla del trapezoide.***
Entonces la aproximación para el área bajo de toda la curva es la suma de las áreas de los trapezoides para las ***N*** secciones.

$$\begin{aligned} I(a,b) \simeq \sum_{k=1}^{N} A_k &= \tfrac{1}{2}h \sum_{k=1}^{N}\left[f(a+(k-1)h) + f(a+kh)\right] \\ &= h\left[\tfrac{1}{2}f(a) + f(a+h) + f(a+2h) + \ldots + \tfrac{1}{2}f(b)\right] \\ &= h\left[\tfrac{1}{2}f(a) + \tfrac{1}{2}f(b) + \sum_{k=1}^{N-1} f(a+kh)\right]. \end{aligned}$$

Ejercicio

Use la regla del trapezoide para calcular la integral de: $\mathbf{x^4 - 2x + 1}$ desde $x = 0$ a $x = 2$, con $N = 10$.

Desarrolle esta integral en papel y compare los resultados obtenidos con su algoritmo.

Pruebe la eficacia de su algoritmo aumentando la cantidad de secciones para sumar, ¿que puede decir de los resultados?

Tarea 1:

El archivo: ***velocities.txt*** contiene dos columnas de números, la primera representa el tiempo **t** en segundos y la segunda la velocidad en dirección **x** en m/s, de una particula medida cada un segundo desde **t = 0** a **t = 100**.

Escriba un programa que calcule lo siguiente:

a) Lea los datos y usando la regla trapeziodal, calcule la distancia aproximada recorrida por la particula en la dirección x como función del tiempo.

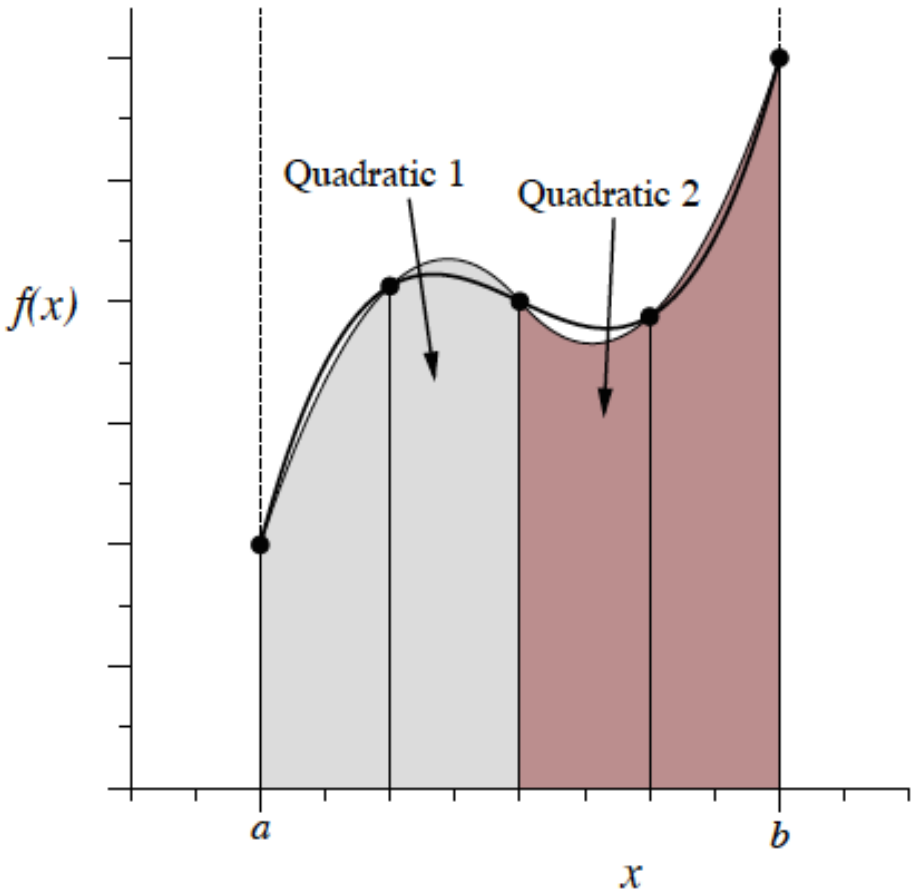
b) En un mismo gráfico, haga un plot de la curva original de velocidad y otra de la distancia recorrida en función del tiempo.

Regla de Simpson

La regla del trapezoide es una manera eficiente para evaluar integrales simples, cuando no se busca una gran exactitud pero da respuesta a problemas físicos simples.

Pero hay casos donde se requiere mayor exactitud, esto con la regla del trapezoide se pude lograr aumentando la cantidad de secciones ***N***, pero esto hace los procesos más lentos y el algoritmo pierde eficacia.

Otro método un poco más sofisticado que el anterior es la regla de Simpson, el cual puede calcular integrales con mayor exactitud y también de manera rápida. Este consiste en acercar curvas cuadráticas la curva de la función. Para especificar la curva cuadrática, se necesitan tres puntos, en donde se toma un par de secciones adyacentes y ajusta una curva cuadrática a través de los tres puntos que marcan los bordes de las secciones.


Quadratic 1
Quadratic 2
f(x)
a
b
x

Integremos ***f(x)*** y el espacio de los puntos adyacentes de secciones ***h.*** Supongamos también que para nuestros propósitos los argumentos de los tres puntos son: ***x = -h, 0*** y ***+h.***
Si ajustamos a una cuadrática $ax^2 + bx + c$ a través de esos puntos, la definición quedaría:

$$f(-h) = ah^2 - bh + c, \qquad f(0) = c, \qquad f(h) = ah^2 + bh + c.$$

resolviendo esta ecuación simultáneamente para ***a,b*** y ***c*** nos queda

$$a = \frac{1}{h^2}\left[\tfrac{1}{2}f(-h) - f(0) + \tfrac{1}{2}f(h)\right], \quad b = \frac{1}{2h}\left[f(h) - f(-h)\right], \quad c = f(0),$$

Y el área bajo la curva de ***f(x)*** entre ***–h*** a ***+ h*** es dada aproximadamente por el área bajo la curva cuadrática:

$$\int_{-h}^{h}(ax^2 + bx + c)\,\mathrm{d}x = \tfrac{2}{3}ah^3 + 2ch = \tfrac{1}{3}h\left[f(-h) + 4f(0) + f(h)\right].$$

Regla de Simpson

Siguiendo la figura, si integramos desde x = a hasta x = b en secciones de tamaño h, entonces los tres puntos que forman el borde del primer par de secciones seria, ***x = a, a + h*** y ***a + 2h,*** el segundo par: **a + 2h, a + 3h, a + 4h**, y así sucesivamente. Mas generalmente los contornos de los k'esimos pares de secciones serían: ***a + (2k – 2)h, a + (2k -1)h,*** y ***a + 2kh.***

Entonces la regla de Simpson entrega el área bajo los k'esimos pares, aproximadamente, como:

$$A_k = \tfrac{1}{3}h\left[f(a+(2k-2)h) + 4f(a+(2k-1)h) + f(a+2kh)\right].$$

Si tenemos N secciones en total, entonces tenemos N/2 pares de secciones y el valor aproximado de la integral nos da la suma:

$$\begin{aligned} I(a,b) &\simeq \sum_{k=1}^{N/2} A_k = \tfrac{1}{3}h \sum_{k=1}^{N/2} \left[f(a+(2k-2)h) + 4f(a+(2k-1)h) + f(a+2kh)\right] \\ &= \tfrac{1}{3}h\left[f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + \ldots + f(b)\right] \\ &= \tfrac{1}{3}h\left[f(a) + f(b) + 4\sum_{k=1}^{N/2} f(a+(2k-1)h) + 2\sum_{k=1}^{N/2-1} f(a+2kh)\right]. \quad (5.9) \end{aligned}$$

NOTA: El numero total de secciones debe ser par.

Ejercicio: De la función conocida $\int_0^2 (x^4 - 2x + 1)\mathrm{d}x$, y sabiendo el valor real, compare utilizando la regla de Simpson y trapezoidal para N = 10, N = 100 y N = 1000. ¿Cual es mejor?

Exercise 5.2:

a) Write a program to calculate an approximate value for the integral $\int_0^2 (x^4 - 2x + 1)\,dx$ from Example 5.1, but using Simpson's rule with 10 slices instead of the trapezoidal rule. You may wish to base your program on the trapezoidal rule program on page 139.

b) Run the program and compare your result to the known correct value of 4.4. What is the fractional error on your calculation?

c) Modify the program to use a hundred slices instead, then a thousand. Note the improvement in the result. How do the results compare with those from Example 5.1 for the trapezoidal rule with the same numbers of slices?

Exercise 5.3: Consider the integral

$$E(x) = \int_0^x e^{-t^2}\,dt.$$

a) Write a program to calculate $E(x)$ for values of x from 0 to 3 in steps of 0.1. Choose for yourself what method you will use for performing the integral and a suitable number of slices.

b) When you are convinced your program is working, extend it further to make a graph of $E(x)$ as a function of x. If you want to remind yourself of how to make a graph, you should consult Section 3.1, starting on page 86.

Note that there is no known way to perform this particular integral analytically, so numerical approaches are the only way forward.