Integración Numérica
2023

Prof.: Dr. Juan Ignacio Manassaldi

JTP: Ing. Amalia Rueda

Nociones Generales

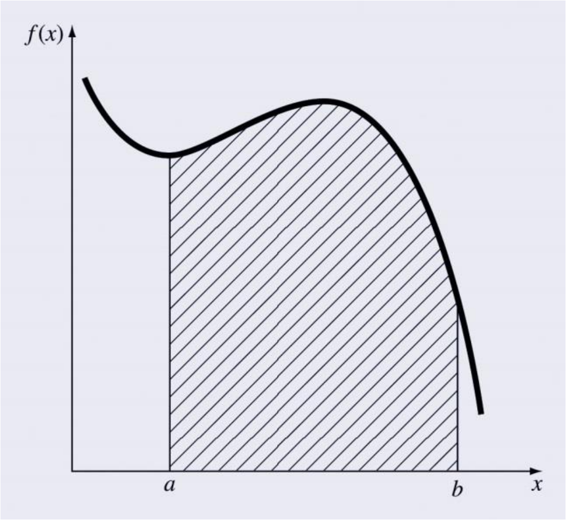
- Introducción
  - ¿Qué es la integración numérica?
  - ¿Cuándo se necesita la integración numérica?
- Aplicaciones de integración en ingeniería y en ciencias
- Fórmulas de Newton-Cotes
  - Regla del Trapecio
  - Reglas de Simpson

¿Qué es la integración numérica?

- Matemáticamente: Una integral definida se representa como:

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

- Esto significa: El valor total o la suma de $f(x)dx$ sobre el dominio $[a\ b]$.

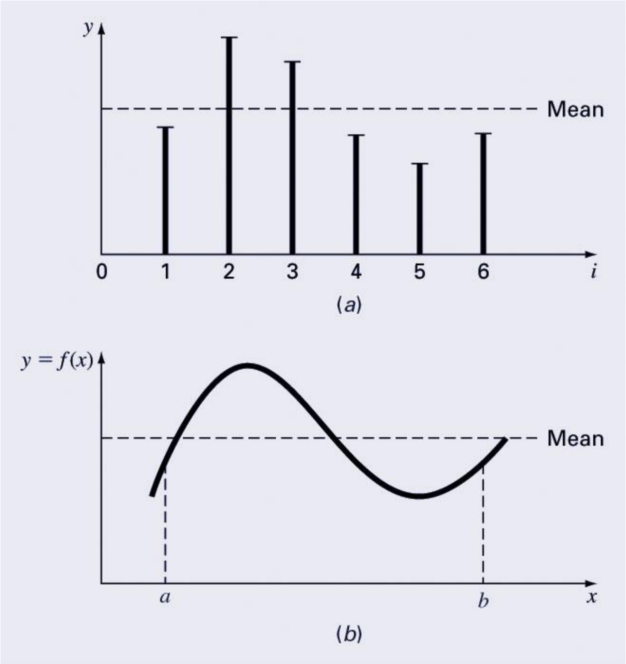


Representación gráfica de la integral de la función f(x).

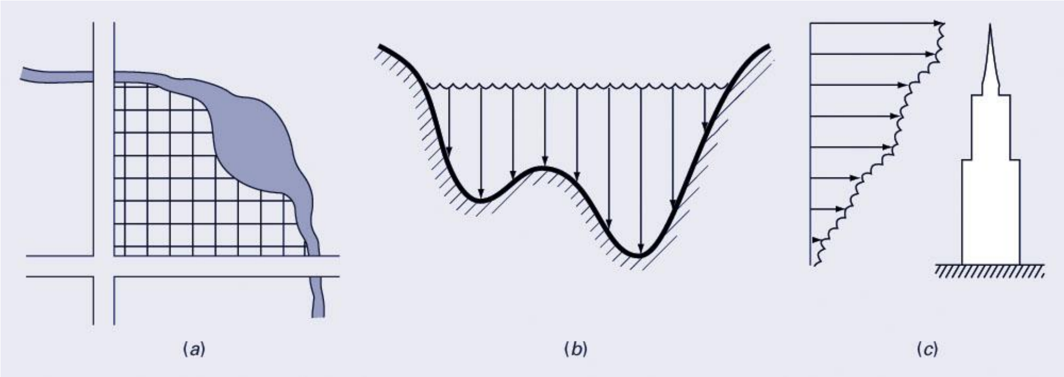
- Representación gráfica: Para funciones que yacen sobre el eje x, la integral corresponde al área debajo de la curva. Para funciones que yacen debajo del eje x, la integral corresponde al área encima de la curva de $f(x)$ entre $x = a$ y $x = b$.

¿Cuándo necesitamos realizar una integración numérica?

- Funciones difíciles o imposibles de integrar analíticamente.
- Sólo se dispone de una tabla de valores discretos de la función.



Ejemplo: valor medio de una función continua.



Ejemplos que relacionan a la integral de una función como el área bajo la curva

Estrategia básica:

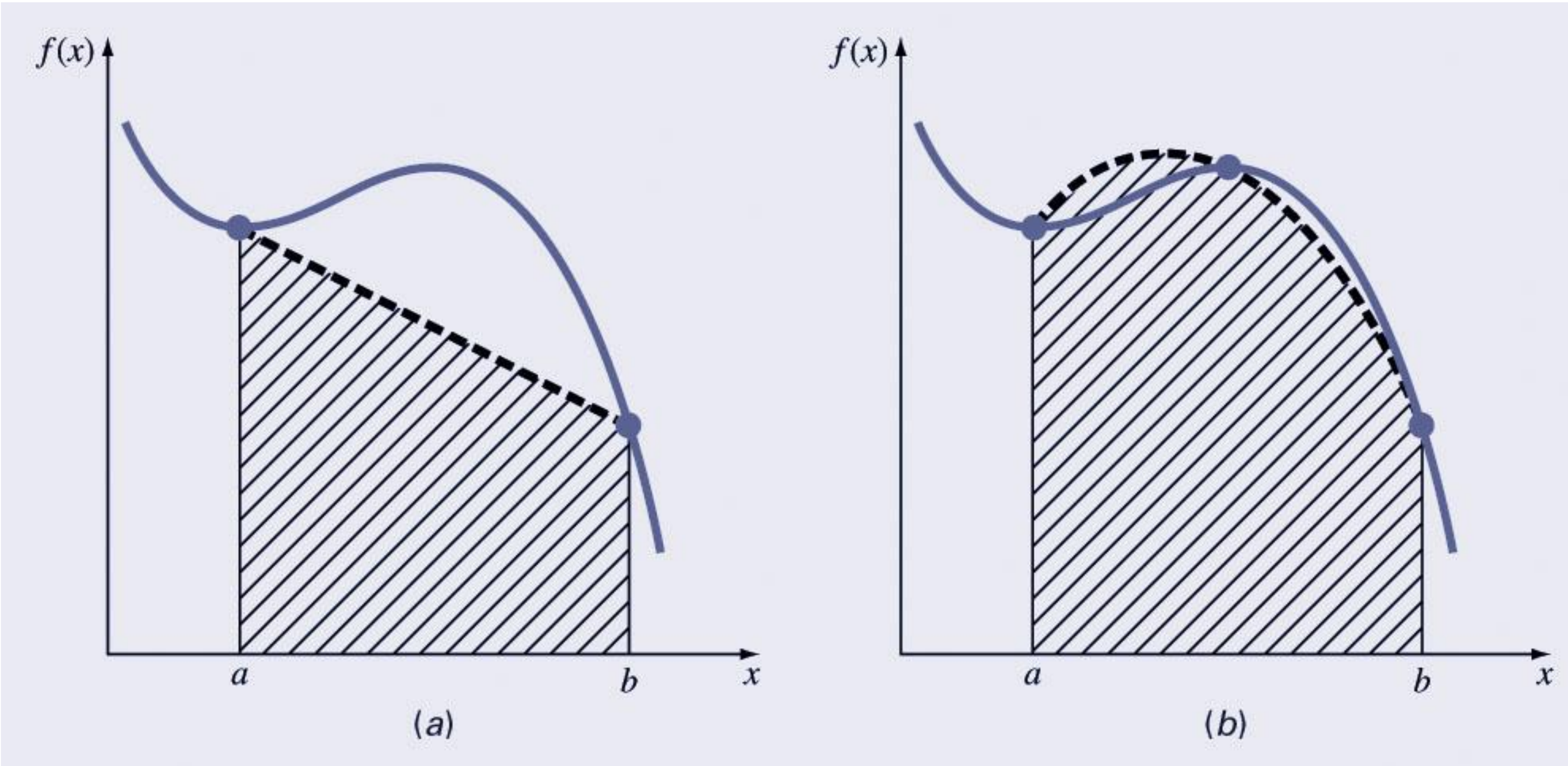
Reemplazar una función complicada (o no integrable) o datos tabulados de una función por un polinomio fácil de integrar.

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

$$f_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \ldots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$$

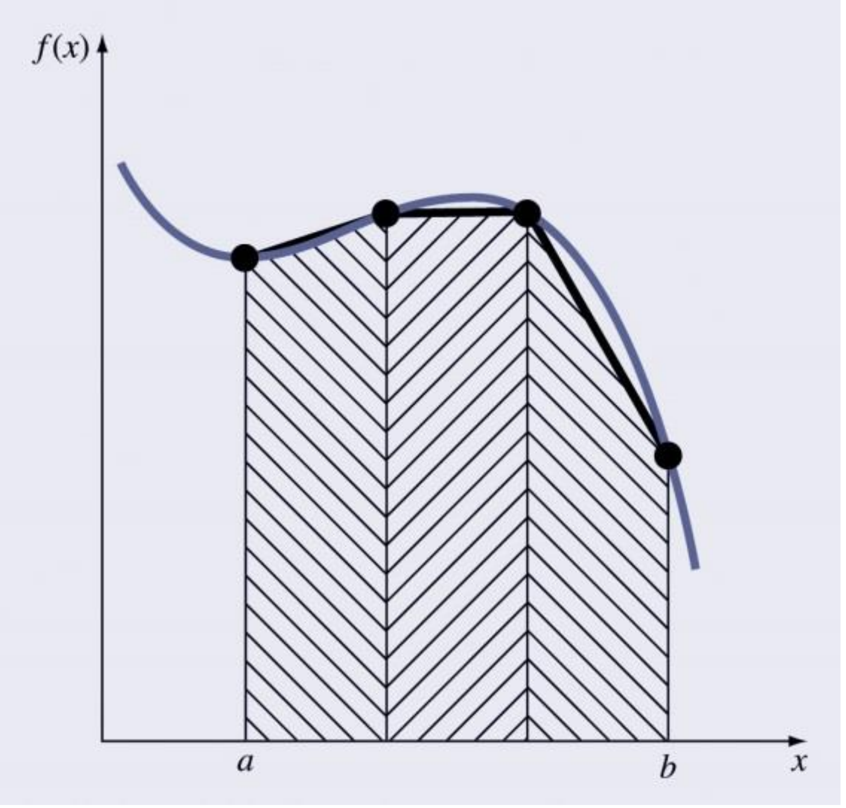
n: Orden del polinomio

Fórmulas de Newton-Cotes



Aproximación de una integral por el área bajo la curva de: (a) una línea recta; (b) una parábola.

Fórmulas de Newton-Cotes

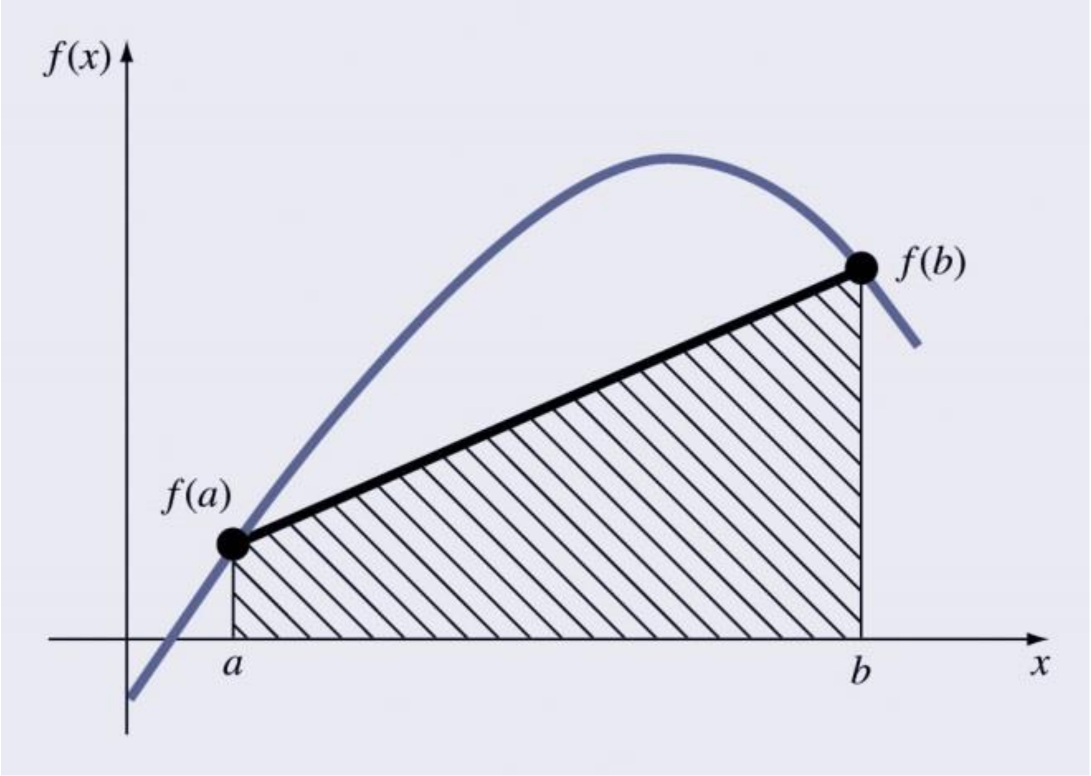


Aproximación de una integral mediante el área bajo tres segmentos de recta.

La Regla del Trapecio (simple)

Estrategia básica:

Reemplazar la función complicada (o no integrable) o datos tabulados por un polinomio o una serie de polinomios de 1er. Orden (lineales).



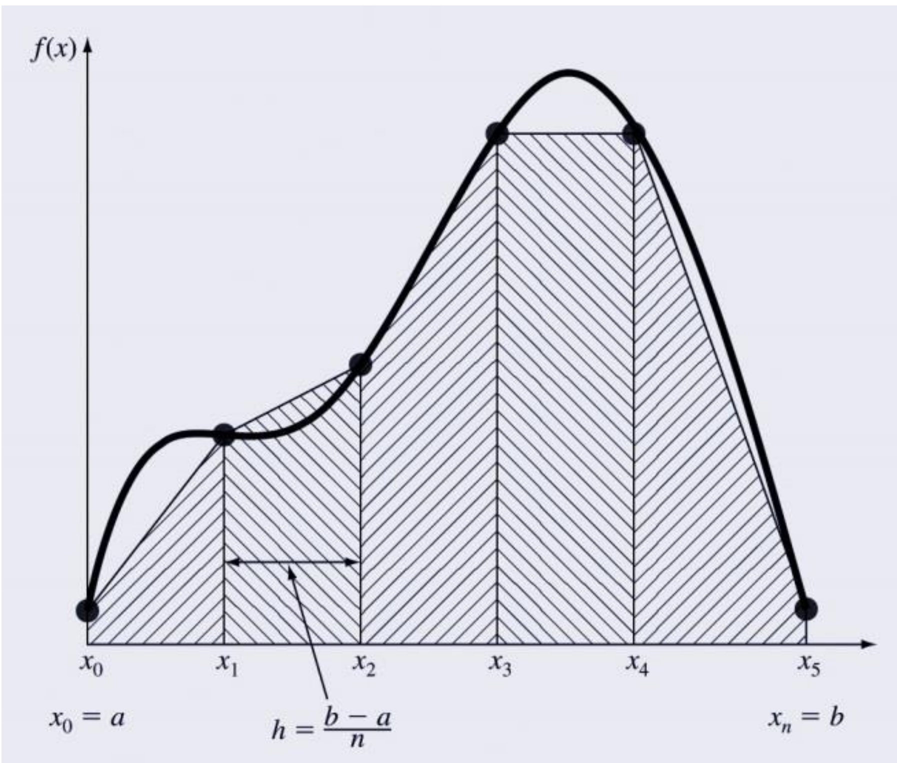
$$I \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}}\underbrace{\frac{f(a)+f(b)}{2}}_{\text{altura promedio}}$$

Fórmula de aplicación simple

La Regla del Trapecio (compuesta)

Estrategia básica:

Reemplazar la función complicada (o no integrable) o datos tabulados con un polinomio o una serie de polinomios de 1er. Orden (lineales).

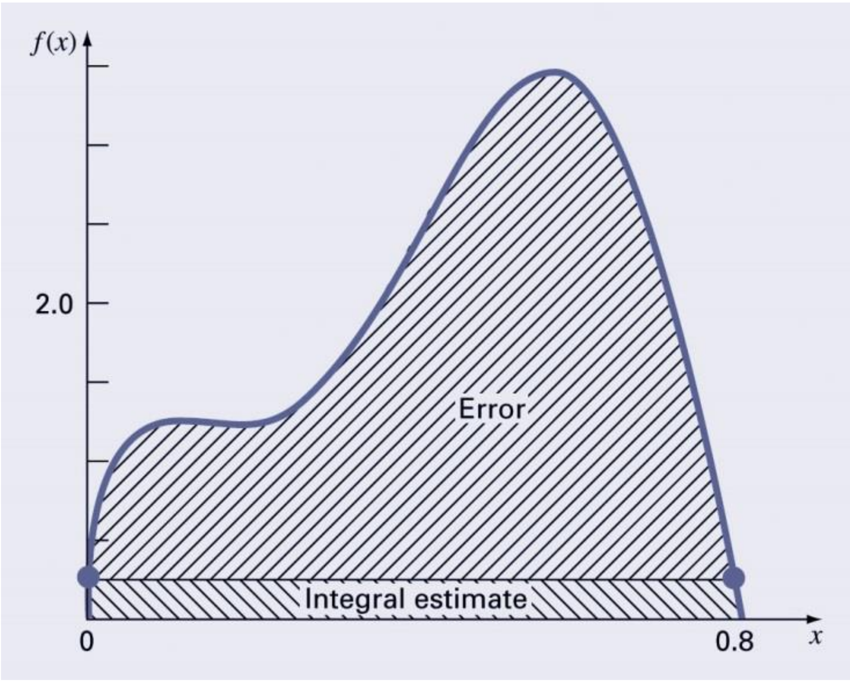


$$I \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n}}_{\text{altura promedio}}$$

Fórmula de aplicación compuesta

Error de la la Regla del Trapecio

Por ser una aproximación, el cálculo de una integral numérica tiene asociado un error.



Error de truncamiento para una aplicación simple de la regla del trapecio.

Para aplicaciones simples, una estimación del error es:

$$E_{trunc} = -\frac{1}{12} f''(\xi)(b-a)^3$$

donde ξ está en algún lugar en el intervalo de [a b].

Si la función es lineal, la regla del trapecio será exacta.
Para funciones con derivadas de segundo orden y de orden superior (es decir, con curvatura), puede ocurrir algún error.

$$E_{trunc} \cong E_{aprox} = -\frac{1}{12} \bar{f}''(b-a)^3 \rightarrow \bar{f}'' = \frac{1}{b-a}\int_a^b f''(x)\,dx$$

Error de la la Regla del Trapecio

Para aplicaciones compuestas:

$$E_{trunc} = \sum_{i=1}^{n} E_{trunc,i} = -\frac{(b-a)^3}{12n^3} \sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)$$

$$E_{aprox} = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} \bar{f}'' \rightarrow \bar{f}'' = \frac{1}{b-a} \int_a^b f''(x)\,dx$$

media o valor promedio de la segunda derivada en todo el intervalo

$$E_{aprox} = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} \bar{f}''$$

Si se duplica el número de paneles, el error se reduce por 4 aproximadamente

Ejemplo

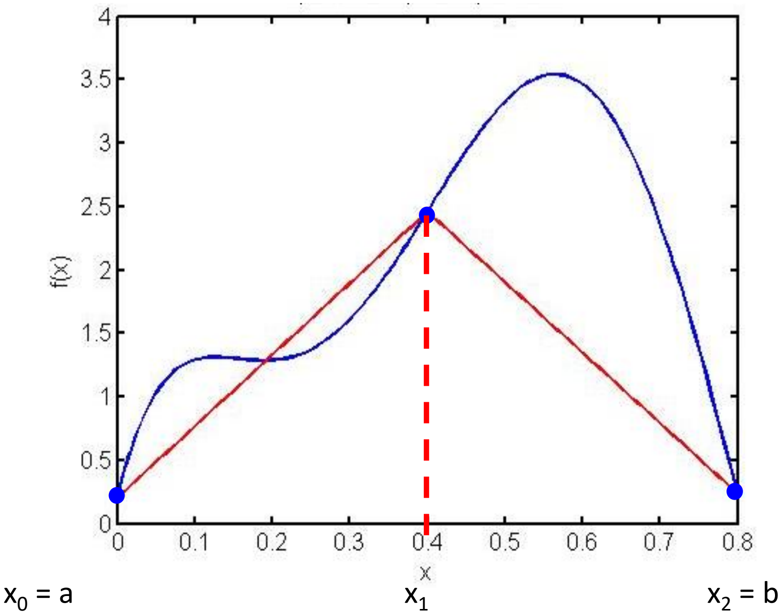
Aplicación Compuesta de la Regla del Trapecio

Utilice la regla del trapecio de 2 paneles para estimar la siguiente integral:

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

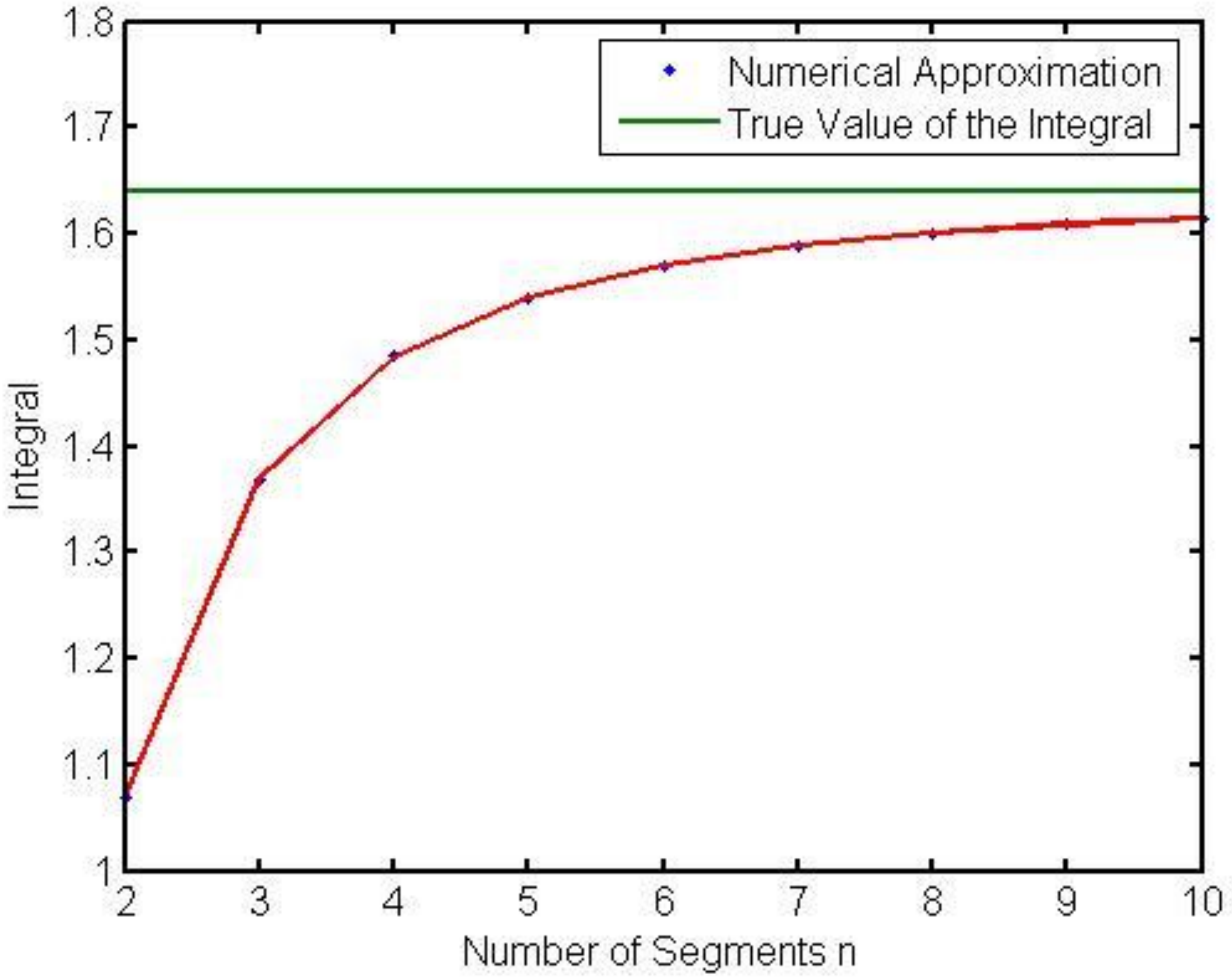
$$I = \int_0^{0.8} f(x)$$

$$I \cong (b-a)\frac{f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n}$$



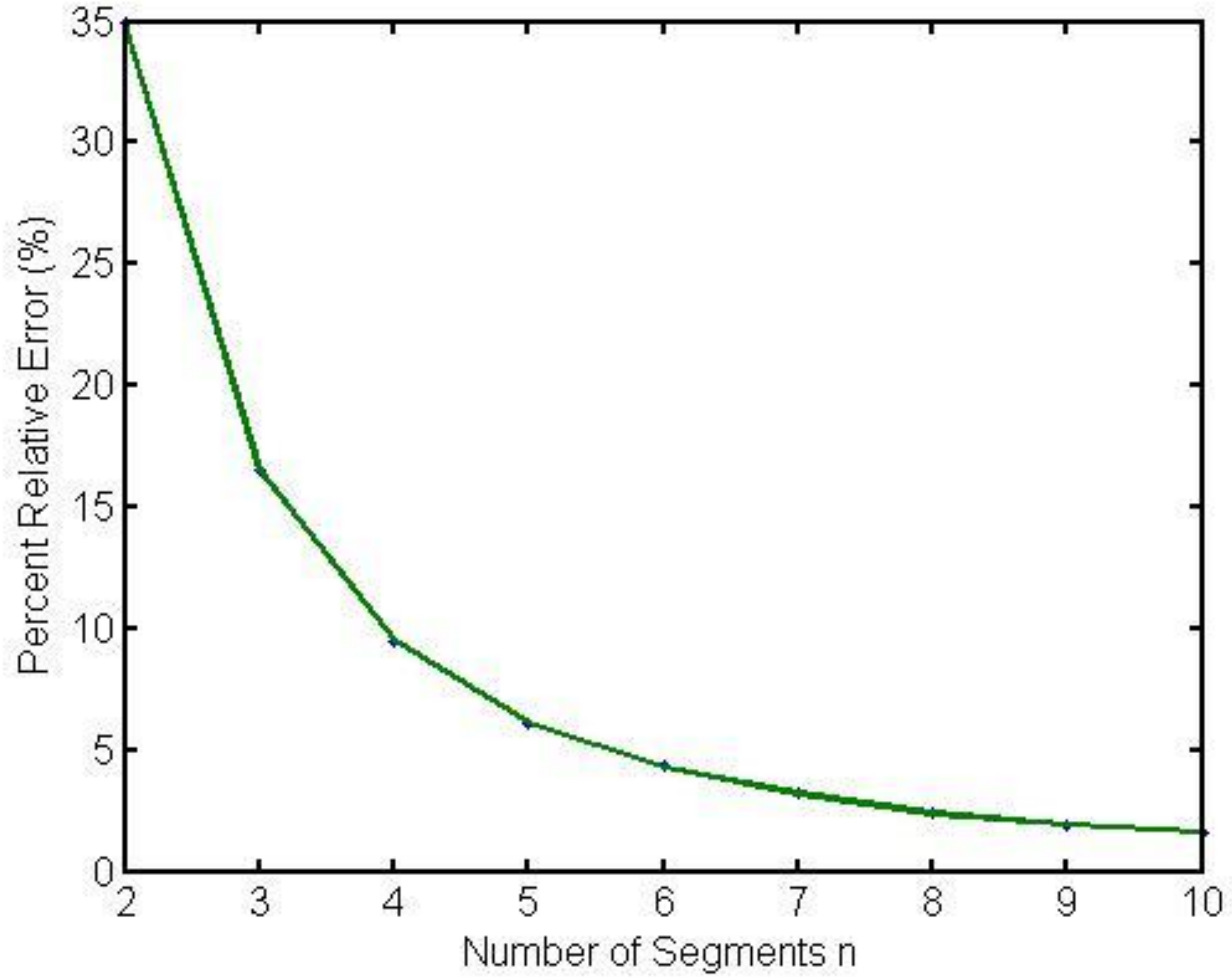
Comparar el resultado con el valor exacto

Resultados

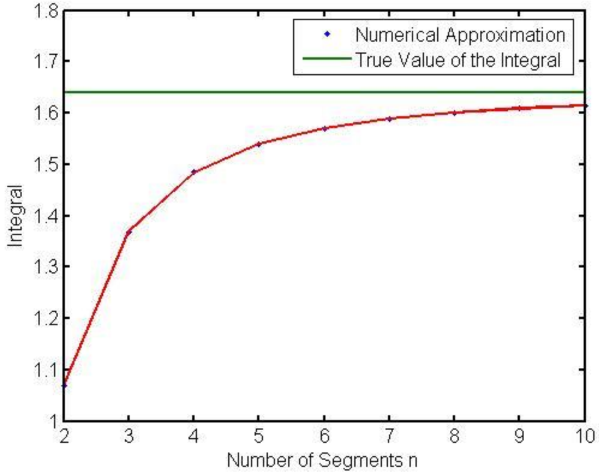


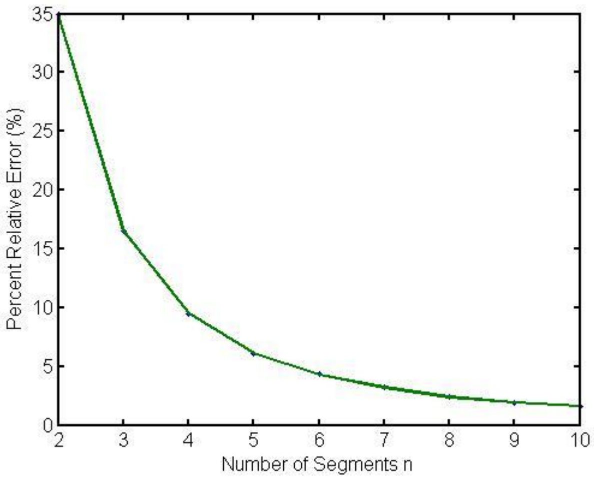
Numerical Approximation
True Value of the Integral
1.8
1.7
1.6
1.5
1.4
1.3
1.2
1.1
1
Integral
2
3
4
5
6
7
8
9
10
Number of Segments n

Resultados


Percent Relative Error (%)
Number of Segments n
35
30
25
20
15
10
5
0
2
3
4
5
6
7
8
9
10

Resultados





n	h	I	ε_t (%)
2	0.4	1.0688	34.9
3	0.2667	1.3695	16.5
4	0.2	1.4848	9.5
5	0.16	1.5399	6.1
6	0.1333	1.5703	4.3
7	0.1143	1.5887	3.2
8	0.1	1.6008	2.4
9	0.0889	1.6091	1.9
10	0.08	1.6150	1.6

```
function I=trapecio(fun, a, b, n)
```

$$I = (b-a)\frac{fun(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} fun(x_i) + fun(b)}{2n}$$

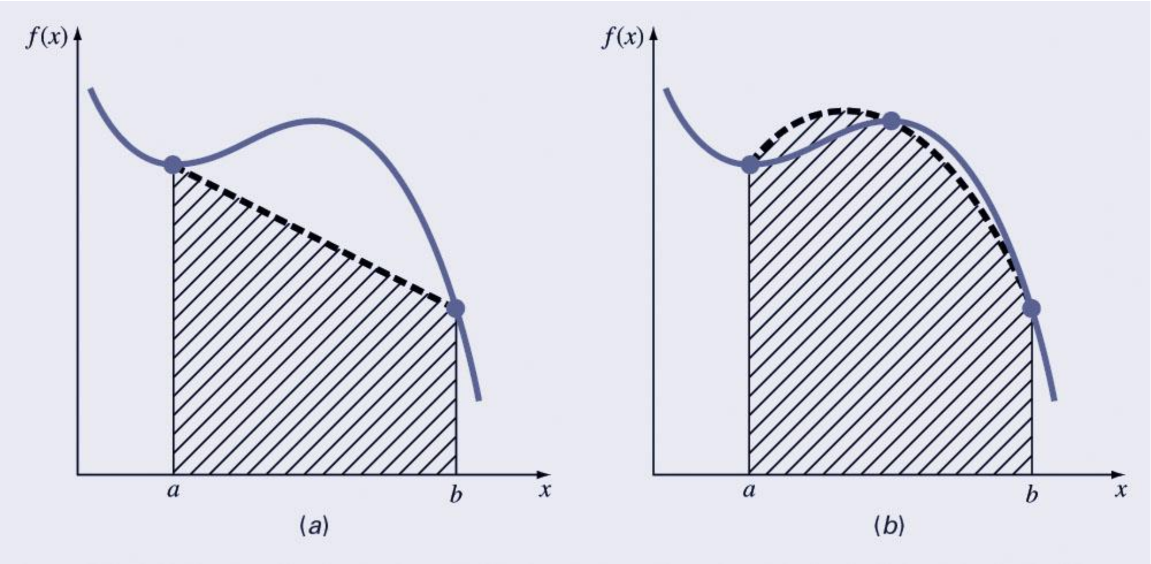
```
endfunction
```

Reglas de Simpson

Estrategia básica:
Utilizan polinomios de orden superior para conectar los puntos. Las fórmulas que resultan de tomar las integrales bajo estos polinomios se llaman reglas de Simpson.

(a) Regla del trapecio

(b) Regla de Simpson



Regla de Simpson 1/3

Estrategia básica:

- Utiliza polinomios de segundo orden.

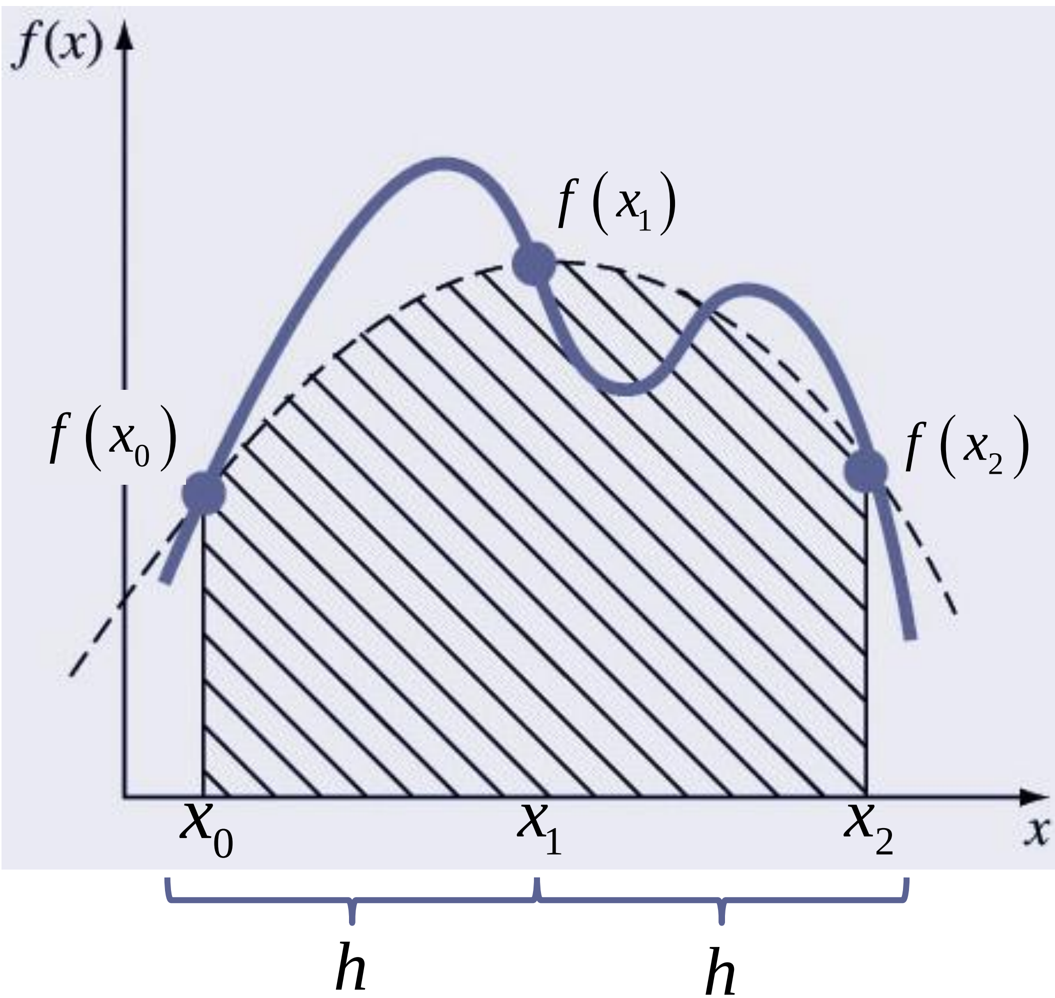
$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b f_2(x)\,dx$$

- f_2 corresponde a una aproximación de segundo orden mediante un polinomio de Lagrange de segundo grado:

$$f_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$

Regla de Simpson 1/3

$$f_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$



$$I \cong \int_a^b f_2(x)\,dx$$

$$\left.\begin{array}{l} x_0 = a \\ x_2 = b \end{array}\right\} x_1 = \frac{(a+b)}{2}$$

$$h = \frac{(b-a)}{2}$$

Regla de Simpson 1/3

$$f_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

Después de la integración y de las manipulaciones algebraicas, se obtiene la siguiente fórmula:

$$\int_{x_0}^{x_2} f_2(x)\,dx=\frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right] \qquad h=\frac{(b-a)}{2}$$

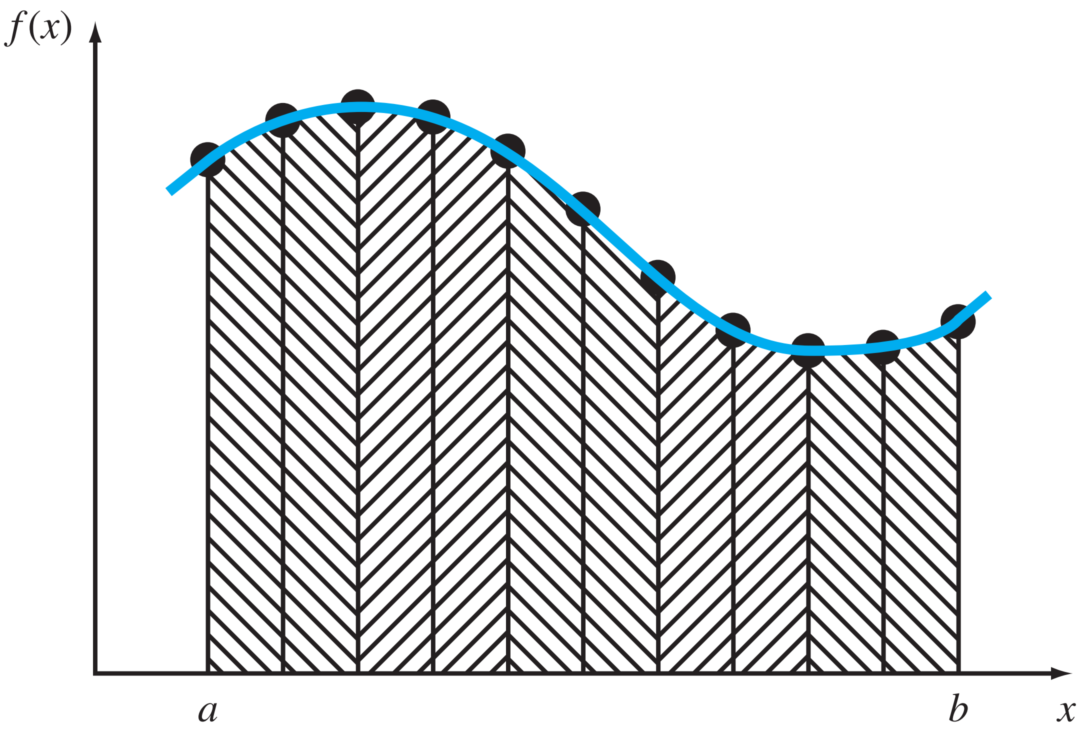
Finalmente:

$$I=\int_a^b f(x)dx\cong\underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}}\underbrace{\frac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6}}_{\text{altura promedio}}$$

donde: $x_0=a;\ x_2=b;\ x_1=\dfrac{(a+b)}{2}$

Regla de Simpson 1/3 compuesta

Así como en la regla del trapecio, la regla de Simpson se mejora al dividir el intervalo de integración en varios segmentos de un mismo tamaño

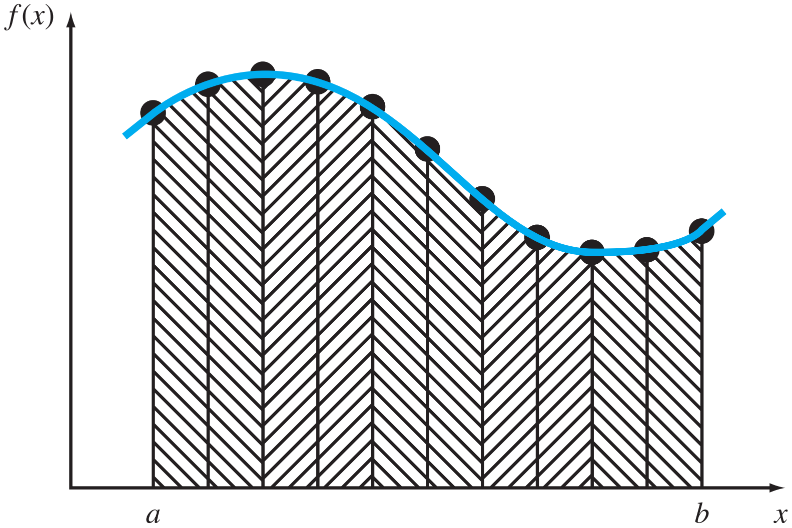


$$h = \frac{(b-a)}{n}$$

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\,dx + \ldots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\,dx$$

Regla de Simpson 1/3 compuesta

$$I \cong (b-a)\frac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6}$$ Simpson simple



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

$$I \cong 2h\frac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6} + 2h\frac{f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)}{6} + \ldots$$

$$\ldots + 2h\frac{f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)}{6}$$

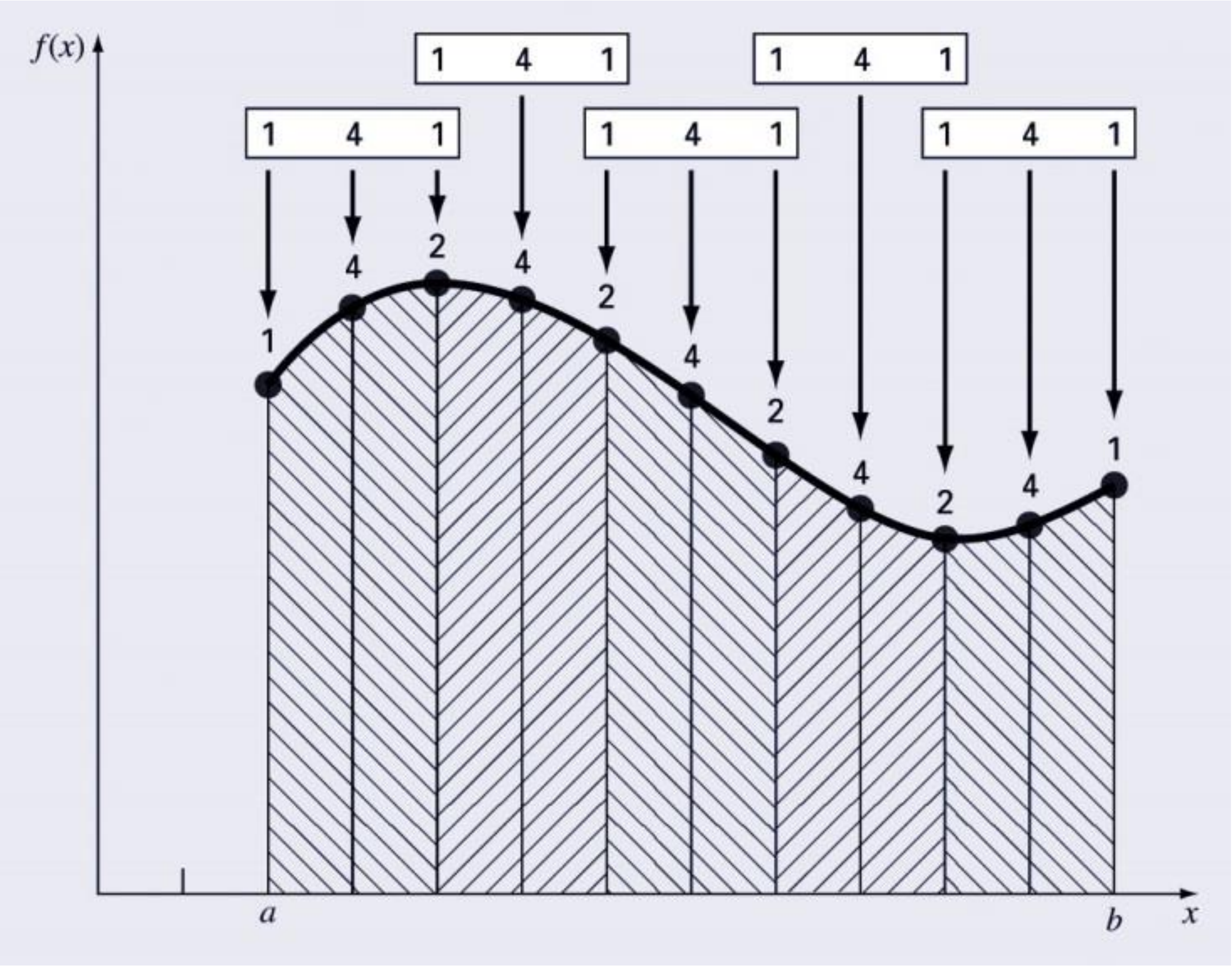
Regla de Simpson 1/3 compuesta

Finalmente:

$$I \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 4\sum\limits_{i=1,3,5,\ldots}^{n-1} f(x_i) + 2\sum\limits_{j=2,4,6,\ldots}^{n-2} f(x_j) + f(x_n)}{3n}}_{\text{altura promedio}}$$

$$\text{donde: } x_0 = a;\ x_n = b;\ h = \frac{(b-a)}{n} \rightarrow x_i = x_{i-1} + h$$

Regla de Simpson 1/3 compuesta



Regla de Simpson 1/3 compuesta.

¡El número de segmentos tiene que ser par!

Error de la la Regla de Simpson 1/3

Para aplicaciones simples:

$$E_{trunc} = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi)$$

- La regla 1/3 de Simpson es más precisa que la regla del trapecio.
- Si f(x) es un polinomio cúbico, $E_{trunc} = 0$.

Para aplicaciones compuestas:

$$E_{trunc} = -\frac{(b-a)^5}{90n^5} \sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i) \rightarrow E_{aprox} = -\frac{(b-a)^5}{180n^4} \bar{f}^{(4)}$$

Ejemplo

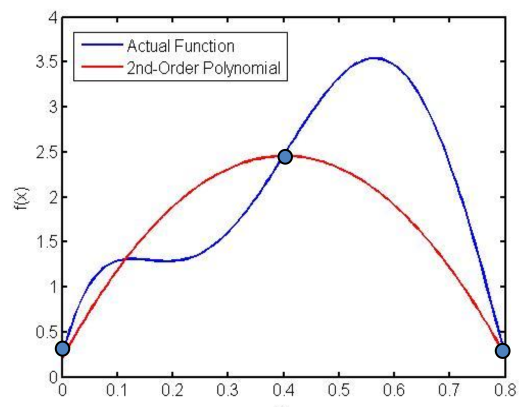
Aplicación Compuesta de la Regla del Trapecio

Utilice la regla del trapecio de 2 paneles para estimar la siguiente integral:

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

$$I = \int_0^{0.8} f(x)$$

$$I \cong (b-a)\frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6}$$



Regla de Simpson’s 1/3 (simple).

Comparar el resultado con el valor exacto y con la regla del trapecio

```
function I=simpson1I3(fun, a, b, n)
```

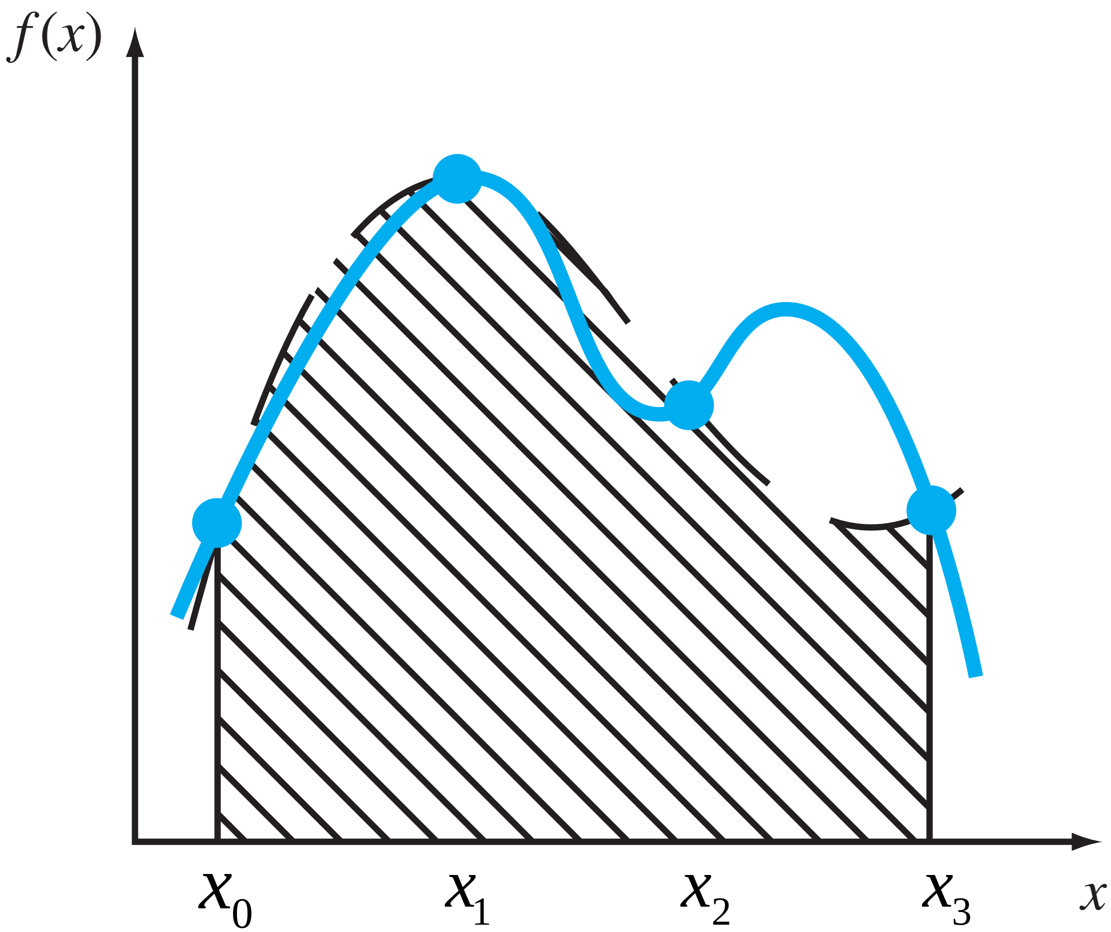
$$I \cong (b-a)\frac{fun(x_0)+4\sum_{i=1,3,5,\ldots}^{n-1} fun(x_i)+2\sum_{j=2,4,6,\ldots}^{n-2} fun(x_j)+fun(x_n)}{3n}$$

```
endfunction
```

Regla de Simpson 3/8

Estrategia básica:

- Utiliza polinomios de tercer orden. $I = \int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b f_3(x)\,dx$



$$h = \frac{(b-a)}{3}$$

Regla de Simpson 3/8

Estrategia básica:

- Utiliza polinomios de tercer orden. $I = \int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b f_3(x)\,dx$
- f_3 corresponde a una aproximación de segundo orden mediante un polinomio de Lagrange de segundo grado:

$$\int_a^b f_3(x)\,dx = \frac{3h}{8}\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3) \right]$$

Finalmente:

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8}}_{\text{altura promedio}}$$

donde: $x_0 = a;\ x_3 = b;\ h = (b-a)/3;\ x_1 = x_0 + h;\ x_2 = x_1 + h$

Implementar en SciLab


```
function I=simpson3l8(fun, a, b)
```

$$I \cong (b-a)\frac{fun(x_0)+3\,fun(x_1)+3\,fun(x_2)+fun(x_3)}{8}$$

```
endfunction
```

Y ampliar a su aplicación compuesta….

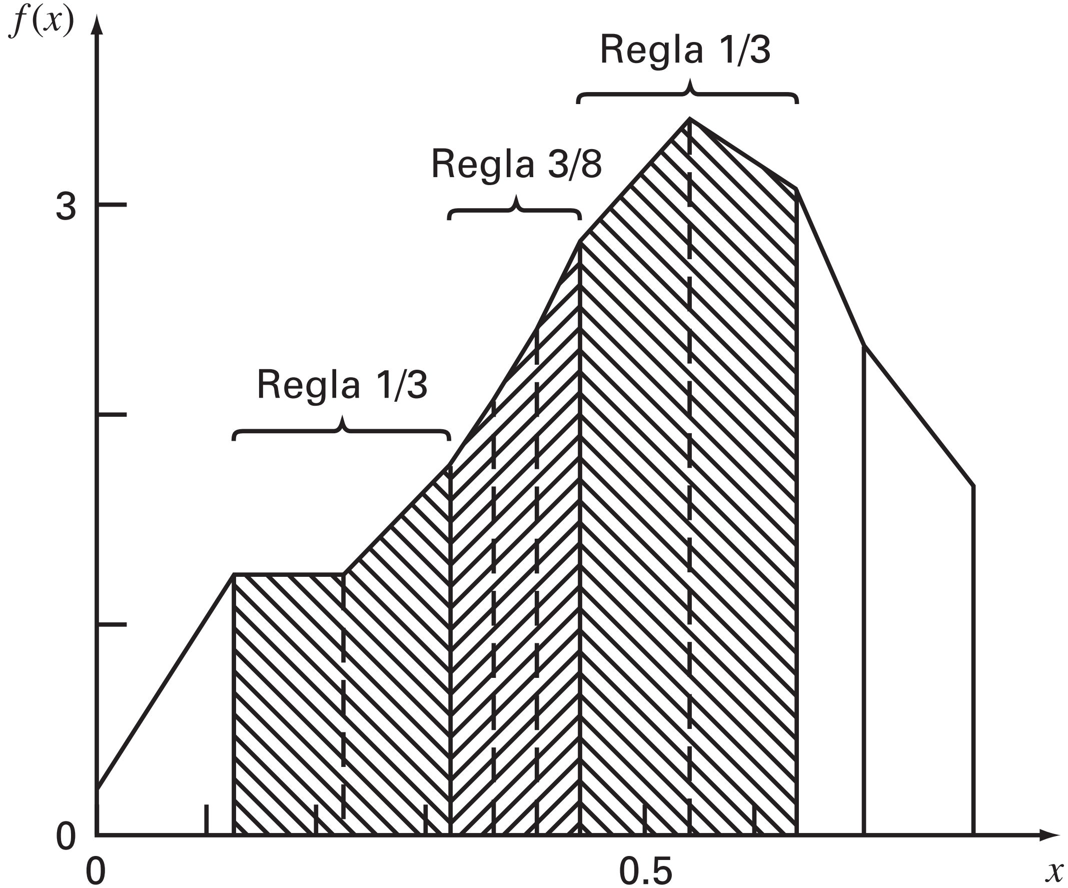
Resumen

Segmentos (n)	Puntos	Nombre	Fórmula	Error de truncamiento
1	2	Regla del trapecio	$(b-a)\dfrac{f(x_0)+f(x_1)}{2}$	$-(1/12)h^3 f''(\xi)$
2	3	Regla de Simpson 1/3	$(b-a)\dfrac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6}$	$-(1/90)h^5 f^{(4)}(\xi)$
3	4	Regla de Simpson 3/8	$(b-a)\dfrac{f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)}{8}$	$-(3/80)h^5 f^{(4)}(\xi)$
4	5	Regla de Boole	$(b-a)\dfrac{7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)}{90}$	$-(8/945)h^7 f^{(6)}(\xi)$
5	6		$(b-a)\dfrac{19f(x_0)+75f(x_1)+50f(x_2)+50f(x_3)+75f(x_4)+19f(x_5)}{288}$	$-(275/12\,096)h^7 f^{(6)}(\xi)$

$$x_0 = a;\; x_n = b;\; h = \frac{(b-a)}{n} \rightarrow x_i = x_{i-1} + h$$

Integración con segmentos desiguales

- Se deben combinar las reglas presentadas.
- De ser imposible se deberá usar la regla del trapecio.



Aplicación

En simulación de procesos químicos, la forma más simple de calcular la entalpía de un líquido corresponde a su entalpía como gas ideal menos su calor de vaporización:

$$H_T^{liq} = \Delta H_f^0 + \int_{298.15}^{T} cp^{IG} dT - \Delta H_v$$

Introducción

- El calor de formación (ΔH_f^0), la capacidad calorífica (Cp^{IG}) y el calor de vaporización (ΔH_v) se obtienen de las llamadas Bases de datos de compuestos puros (PCD - Pure Compound Database).
- Existen numerosas funciones matemáticas que relacionan la capacidad calorífica de un gas ideal con la temperatura.
- Para algunas PCD la función Cp(T) no es integrable analíticamente.
- Para su implementación los simuladores de procesos tienen programados internamente algoritmos de integración numérica.

Aplicación

Estimar cual es la energía necesaria para calentar una corriente de 1 kmol/s de Metanol desde 298.15 K a 320 K:

$$H_T^{liq} = \Delta H_f^0 + \int_{298.15}^{T} cp^{IG} dT - \Delta H_v$$

Donde:

$$cp^{IG} = a + \exp\left(\frac{b}{T} + c + d\,T + eT^2\right)$$

$$\Delta H_v = a\left(1 - T_r\right)^{\left(b + cT_r + d\,T_r^{\,2} + eT_r^{\,3}\right)}$$

$$Q = H_{320}^{liq} - H_{298.15}^{liq} = \left(\Delta H_f^0 + \int_{298.15}^{320} cp^{IG} dT - \Delta H_v^{320}\right) - \left(\Delta H_f^0 + \int_{298.15}^{298.15} cp^{IG} dT - \Delta H_v^{298.15}\right)$$

$$Q = H_{320}^{liq} - H_{298.15}^{liq} = \int_{298.15}^{320} cp^{IG} dT + \left(\Delta H_v^{298.15} - \Delta H_v^{320}\right)$$

Aplicación

$$Q = \int_{298.15}^{320} cp^{IG} dT + \left(\Delta H_v^{298.15} - \Delta H_v^{320} \right)$$

$$cp^{IG} = a + \exp\left(\frac{b}{T} + c + d\,T + eT^2 \right) \left[\frac{J}{kmol\,K} \right] \begin{cases} a = 36313.2 \\ b = -680.458 \\ c = 11.102 \\ d = 0.000756766 \\ e = -2.90264 \times 10^{-7} \end{cases}$$

$$\Delta H_v = A\left(1 - T_r\right)^{\left(B + CT_r + DT_r^2 + ET_r^3\right)} \quad \left[\frac{J}{kmol} \right] \begin{cases} A = 5.8058 \times 10^{7} \\ B = 0.87168 \\ C = -0.81501 \\ D = 0.1695 \\ E = 0.17846 \\ Tc = 512.640\ K \end{cases}$$