# Práctica 6: Integración numérica.

## 1. Fórmulas de Newton-Cotes.

Se pretende calcular numéricamente integrales de la forma:

$$I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \; , \tag{1}$$

empleando las fórmulas de Newton-Cotes compuestas. Para deducir estas fórmulas se divide el intervalo $[a, b]$ en $n$ segmentos de longitud $h$ y se evalúa la función $f(x)$ en los $n+1$ puntos: $x_0 = a$, $x_1 = a + h$, ..., $x_n = b$. Se consideran a continuación los $m$+1 primeros puntos, $\{x_0, x_1, ...x_m\}$, y se obtiene el polinomio de grado $m$ $P_m^1(x)$ que interpola la función $f(x)$ en estos puntos. Se aproxima la integral en el subintervalo $[x_0, x_m]$ como:

$$\int_{x_0}^{x_m} f(x)\mathrm{d}x \simeq \int_{x_0}^{x_m} P_m^1(x)\mathrm{d}x \tag{2}$$

donde la integral del segundo miembro se evalúa analíticamente. Se repite el proceso para los intervalos $[x_m, x_{2m}]$, $[x_{2m}, x_{3m}]$, etc, hasta completar la integral buscada. En la práctica vamos a aplicar las fórmulas más sencillas y de uso más frecuente:

- La regla **trapezoidal**, obtenida con m=1 (interpolación lineal).

$$I = \frac{h}{2}\left[y_0 + 2\sum_{i=1}^{n-1} y_i + y_n\right] + O(h^2) \tag{3}$$

- La regla de **Simpson**, obtenida con m=2 (interpolación cuadrática).

$$I = \frac{h}{3}\left[y_0 + 4\sum_{i=1}^{n/2} y_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} y_{2i} + y_n\right] + O(h^4) \tag{4}$$

donde $y_i = f(x_i)$

MATLAB dispone del comando **trapz(x,y)** que evalúa la integral empleando la fórmula (3), siendo **x, y** los vectores de componentes $x_i$, $y_i$, respectivamente. Veamos un ejemplo:

Se ha tabulado la capacidad calorífica de un material, $c$, a distintas temperaturas, obteniendo:

| T,$^0$C | $c$, cal/(g $^0$C) |
|---|---|
| -100 | 0.11904 |
| -50 | 0.12486 |
| 0 | 0.13200 |
| 50 | 0.14046 |
| 100 | 0.15024 |
| 150 | 0.16134 |
| 200 | 0.17376 |

**Tabla 1**

Se pretende calcular el calor necesario para elevar la temperatura de una masa $m$=1000g de este material de -100 a 200 $^0$C. Este calor viene dado por la integral:

$$\Delta H = m \int_{-100}^{200} c(t)\mathrm{d}t \tag{5}$$

El procedimiento a seguir en MATLAB es:

**t = [-100 -50 etc];**
**c = [0.11904 0.12486 etc ];**
**cal1=1000*trapz(t,c)**

En la práctica se dispone además del programa **simp.m**, que evalúa integrales mediante el método de Simpson, y que ejecutamos en la forma:

**cal2=1000*simp(t,c)**

Para discutir los resultados obtenidos es útil cubrir la tabla de diferencias de la hoja de resultados, calcular estas diferencias como se explicó en el práctica 5 y contestar la pregunta 2.

## 2. Ejemplo 1: Reacción de fermentación.

Una reacción de fermentación para la producción de antibiótico se sigue midiendo la velocidad de consumo de $O_2$ ($v_1$) y de formación de $CO_2$ ($v_2$) que se indican en la siguiente tabla:

| t, h | $v_1$ (g/h) | $v_2$, (g/h) |
|---|---|---|
| 0 | 15.72 | 15.49 |
| 1 | 15.53 | 16.16 |
| 2 | 15.19 | 15.35 |
| 3 | 16.56 | 15.13 |
| 4 | 16.21 | 14.20 |
| 5 | 17.39 | 14.23 |
| 6 | 17.36 | 14.29 |
| 7 | 17.42 | 12.74 |
| 8 | 17.60 | 14.74 |
| 9 | 17.75 | 13.68 |
| 10 | 18.95 | 14.51 |

**Tabla 2**

Calcular las cantidades totales de $CO_2$ formado y $O_2$ consumido al cabo de 10h. y copiar en la hoja de resultados los valores obtenidos mediante las reglas trapezoidal y de Simpson.

# 3. Ejemplo 2: Difusión no estacionaria de un gas.

En los ejemplos anteriores, el integrando era un conjunto de valores tabulados. Cuando la función a integrar viene expresada analíticamente, la integración se efectúa incrementando el número de segmentos en que éste se divide hasta alcanzar la convergencia deseada. En concreto, MATLAB dispone del comando **quad** que calcula la integral de una función empleando una fórmula similar a (4). La sintaxis del comando es:

**q = quad('fun', a, b, tol)**

donde:

- **fun** es el nombre de la function donde se evalúa la función a integrar.
- **a, b** son los límites del intervalo de integración.
- **tol** es el valor de la tolerancia (el error relativo en la integral) que por defecto es $10^{-3}$.

Consideramos el siguiente ejemplo:

El perfil de composición de un gas difundiéndose de forma no estacionaria a través de un sólido con flujo constante en la superficie, es el siguiente:

$$C(z,t) = \frac{k}{D_e}\left\{2\left(\frac{t}{\pi}\right)^{0,5}\exp\left(\frac{-z^2}{4D_e t}\right) - \left(\frac{z}{D_e}\right)\operatorname{erfc}\left[\frac{z}{2(D_e t)^{0,5}}\right]\right\} \qquad (6)$$

donde $k$ es el flujo constante en la superficie, $D_e$ es la difusividad efectiva del gas en el sólido, $t$ es el tiempo de residencia, $z$ es la distancia desde la superficie y erfc es la función error complementaria:

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\eta^2) \mathrm{d}\eta \tag{7}$$

10 segundos después de haber sido establecido el flujo constante $k$= 1 mol $\mathrm{m}^{-2}\mathrm{s}^{-1}$ se midió en un determinado punto del sólido una concentación de 5.4 mol $\mathrm{m}^{-3}$. Siendo $D_e = 2{,}14 \times 10^{-4} \mathrm{m}^2\mathrm{s}^{-1}$, calcular el punto exacto en que se midió la concentración. Seguir los siguientes pasos:

1. Calcular la función erfc integrando numéricamente la integral de la ecuación (7). Emplear el comando **quad** con tolerancia $10^{-6}$ y comparar con los valores proporcionados por el comando **erfc (x)**, que calcula la misma función. Para ello se precisa escribir una función que evalúe el integrando de la ecuación (7); por ejemplo:

   ```
   function f=ex2(x)
   f=exp(-x.^ 2)
   ```

2. En el archivo **C.m** se ha programado la expresión (6). Representar graficamente esta expresión escribiendo:

   ```
   fplot ('C(z,10, 1, 2.14e-4)', [0,0.001])
   ```

   donde los valores numéricos de los argumentos de la función son los valores de los parámetros $t$, $k$, y $D_e$, respectivamente. De esta representación gráfica se deduce que el valor de la concentración 5.4 $\mathrm{molm}^{-3}$ se alcanza para $z \simeq 0{,}0008$ m

3. La funcion **AmC.m** evalúa $A - C(z,t) = 0$ con $A$ una constante y $C(z,t)$ dado por (6). La aproximación inicial a la solución puede comprobarse con esta nueva función:

   ```
   fplot ('AmC(z,10, 1, 2.14e-4, 5.4)', [0,0.001])
   ```

4. Resolver la ecuación $A - C(z,t) = 0$, aplicando el método de Newton- Raphson, utilizando el programa **nr.m** empleado en la práctica 3.

   ```
   t=10; k=1; De=2.14e-4; A=5.4; x=nr('Amc',0.0008,1e-6,2, t, k, De, A)
   ```

# 4. Resultados.

**NOMBRE Y APELLIDOS:**

1. Copiar los valores calculados para el calor comunicado al material de la seción 1

2. Completar la tabla siguiente (datos de la sección 1):

| $t$ | $c$ | $\Delta c$ | $\Delta^2 c$ | $\Delta^3 c$ |
|---|---|---|---|---|
| -100 | 0.11904 | | | |
| -50 | 0.12486 | | | |
| 0 | 0.13200 | | | |
| 50 | 0.14046 | | | |
| 100 | 0.15024 | | | |
| 150 | 0.16134 | | | |
| 200 | 0.17376 | | | |

¿Qué indica esta tabla con repecto a la precisión de la integración mediante la regla de Simpson?

3. Copiar los resultados del ejemplo de la sección 2.

4. Comparar los valores de erfc(x=1) calculados mediante integración numérica y empleando el comando **erfc**.

5. Obtener el valor de $z$ solución del problema de la sección 3.