UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR
DIVISIÓN DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DPTO. TERMODINÁMICA Y FENÓMENOS DE TRANSFERENCIA
MÉTODOS APROXIMADOS EN ING. QUÍMICA
TF-1313

INTEGRALES

Esta guía fue elaborada por:

Prof. Aurelio Stammitti Scarpone

con la ayuda de:

Br. María M. Camacho A.

Queda terminantemente prohibida la reproducción parcial o total de esta guía sin la aprobación del Prof. Aurelio Stammitti Scarpone.

INTEGRALES CON CUADRATURAS GAUSSIANAS

El procedimiento convierte la integral a esta suma:

$$\int_a^b f(x).dx = \sum_{i=1}^{n} \omega_i . f(x_i)$$

donde:

ω_i = factores de peso

x_i = puntos específicos

Al final de todas las demostraciones se llega a una expresión:

$$\int_a^b f(x).dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} F(t).dt = \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} F(t_i).\omega_i = \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} f(x_i).\omega_i$$

De todo esto sólo nos interesa que:

$$\int_a^b f(x).dx = \frac{b-a}{2}.\sum_{i=1}^{n} \omega_i . f(x_i)$$

Recordar:
Esto sólo se puede aplicar si tengo la función explícita.

Ahora debemos determinar los ω_i y los x_i.

Tenemos el cambio de base:

$$x = \frac{(b-a).t + (b+a)}{2}$$

Existe también para valores de 'n' superiores

Existe una tabla de valores ω_i y t_i para distintos valores de n.

n	t_i	ω_i
2	± 0,577350	1
3	0	0,888
	±0,774597	0,555
4	±0,339981	0,652145
	±0,861136	0,347855

Procedimiento de cálculo:

Tengo inicialmente $f(x)$ y un intervalo $[a,b]$

1.- Seleccionar 'n'.

2.- Extraer los valores t_i, ω_i de la tabla.

3.- Aplicar el cambio de base $x = \frac{(b-a).t+(b+a)}{2}$

4.- Evaluar los x_i con los ti usando el cambio de base.

Observación: se tendrán tantos x_i como t_i.

5.- Evaluar los $f(x_i)$.

6.- Hacer la suma $I = \frac{b-a}{2}.\sum_{i=1}^{n} \omega_i.f(x_i)$

Ejemplo:

Hallar: $\int_0^1 e^x.dx \Rightarrow \begin{matrix} f(x)=e^x \\ [a,b]=[0,1] \end{matrix}$

Procedimiento:

1.- Selecciono 'n':

- **Caso 1→ n = 2**

2.- Extraemos los t_i y ω_i de la tabla:

$$\begin{matrix} t_1 = -0,577350 \\ t_2 = +0,577350 \end{matrix} ; \begin{matrix} \omega_1 = 1 \\ \omega_2 = 1 \end{matrix}$$

Siempre se ordenan los ti de menor a mayor.

3.- Aplico el cambio de base

$$x = \frac{(b-a).t+(b+a)}{2} \Rightarrow x = \frac{t+1}{2} \qquad \begin{Bmatrix} x = 0(a) \\ x = 1(b) \end{Bmatrix}$$

4.- Ahora evalúo los x_i para cada t_i

$$\begin{matrix} x_1 = \dfrac{-0,577350+1}{2} \\ x_2 = \dfrac{0,577350+1}{2} \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} x_1 = 0,211325 \\ x_2 = 0,788675 \end{matrix}$$

5.- Calculo los $f(x_i)$.

$$\begin{matrix} f(x_1) = 1,235314 \\ f(x_2) = 2,00479 \end{matrix}$$

Estos son los valores a usar en la suma al final.

6.- Evalúo la suma para n = 2

$$I = \frac{b-a}{2}.\sum_{i=1}^{n}\omega_i.f(x_i) = \frac{b-a}{2}.(\omega_1.f(x_1)+\omega_2.f(x_2))$$

$$I = \frac{1}{2}.\left[(1).(1,235314)+(1).(2,00479)\right] = 1,717897$$

Mientras que la solución analítica daba I $_{\text{analítica}}$ = 1,718282

<u>Observación</u>: el resultado es muy cercano al real y sólo se usaron dos puntos de evaluación.

- **Caso 2→ n = 3**

2.- Extraemos los t_i y ω_i de la tabla:

$$\begin{aligned} t_1 &= -0,774597 \quad \omega_1 = 0,555 \\ t_2 &= 0 \qquad\qquad ;\omega_2 = 0,888 \\ t_3 &= +0,774597 \quad \omega_3 = 0,555 \end{aligned}$$

3.- Aplico el cambio de base

$$x = \frac{(b-a).t+(b+a)}{2} \Rightarrow x = \frac{t+1}{2} \qquad \begin{Bmatrix} x = 0(a) \\ x = 1(b) \end{Bmatrix}$$

4.- Ahora evalúo los x_i para cada t_i

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{-0,774597+1}{2} \\ x_2 &= \frac{0+1}{2} \\ x_3 &= \frac{+0,774597+1}{2} \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} x_1 &= 0,1127015 \\ x_2 &= 0,5 \\ x_3 &= 0,8872985 \end{aligned}$$

5.- Calculo los $f(x_i)$.

$$\begin{aligned} f(x_1) &= 1,1192978 \\ f(x_2) &= 1,6487213 \\ f(x_3) &= 2,42856 \end{aligned}$$

Estos son los valores a usar en la suma al final.

6.- Evalúo la suma para n = 3

$$I = \frac{1}{2}.\left[(0,555).(1,11929978)+(0,888).(1,6487213)+(0,555).(2,42856)\right] = 1,718282$$

Con apenas tres evaluaciones de la función $f(x)$ se logró tener un valor de la integral muy preciso. Esto es lo poderoso del método.

INTEGRALES IMPROPIAS O INDEFINIDAS

Son integrales cuyos límites de integración tienden a infinito o producen una división entre cero u otra indeterminación.

Ejemplos:

$$I_1 = \int_0^{\infty} e^{-x} dx \qquad\qquad I_2 = \int_0^{2} \frac{dx}{\sqrt{x}}$$

Estas integrales pueden reescribirse usando la definición de límite:

$$I_1 = \lim_{a \to \infty} \int_0^{a} e^{-x} dx \qquad\qquad I_2 = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\varepsilon}^{2} \frac{dx}{\sqrt{x}}$$

Caso de I$_1$. Numéricamente, en la computadores no se puede representar el infinito; pero si se puede usar un número muy grande. Entonces, si se usan valores de *a* cada vez más grandes para realizar los cálculos, se llegará a ver la tendencia cuando *a* tiende a infinito y ese será el resultado final.

Caso de I$_2$. El procedimiento es muy similar al anterior, pero en este caso se comienza con un valor de ε muy pequeño para los cálculos y se vuelve a resolver varias veces con valores más pequeños de ε. El resultado es la integral cuando ε tiende a cero.

Veamos unos ejemplos:

<u>Ejemplo 1</u>:

$$\int_0^{\infty} x.e^{-x}.dx = \lim_{a \to \infty} \int_0^{a} x.e^{-x}.dx$$

Tomo *a* = 10

Con ese valor de *a* se puede usar cualquier procedimiento de integración conocido. En este caso el método se va a proceder con Simpson 1/3 y, un número de intervalos de diez.

Antes de empezar a realizar los cálculos, tenemos que ver cuál es el paso de integración:

$$h = \frac{b-a}{N} = \frac{10-0}{10} = 1 \Rightarrow h = 1$$

Luego de que se tiene el paso, se procede a aplicar la fórmula de Simpson 1/3 que en este caso queda de la siguiente manera:

$$I = \frac{1}{3}\left[f_0 + 4.f_1 + 2.f_2 + 4.f_3 + 2.f_4 + 4.f_5 + 2.f_6 + 4.f_7 + 2.f_8 + 4.f_9 + f_{10} \right]$$

Evaluando:

$$I = 0,99950$$

Tomo *a* = 100 ; n = 100

Nuestro paso de integración para estos nuevos parámetros da: h=1

Evaluando: $I = 1,00001$

Tomo *a* = 1000 ; n = 1000

Nuestro paso de integración para estos nuevos parámetros da: h=1

Evaluando: $I = 1,00001$

Tomo *a* = 10.000 ; n = 10.000

Nuestro paso de integración para estos nuevos parámetros da: h=1

Evaluando: $I = 1,00000$

Aquí se ve que el valor de la integral converge a un valor de 1,0000 cuando '*a*' crece por encima de mil (1000).

Ejemplo 2:

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}} = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_\varepsilon^1 \frac{dx}{\sqrt{x}}$$

Aplico Simpson 1/3 y resuelvo para diferentes valores de ε. Los valores obtenidos por este procedimiento se muestran en la tabla que se muestra a continuación:

ε	**I**
1/64	1,84
1/256	1,92
1/2048	1,97
1/4096	1,98

Aquí se observa la tendencia al valor 1,99 si se usan valores aún más pequeños de ε.

INTEGRALES MULTIPLES

Aplican sobre funciones de varias variables y tienen la forma:

$$\int_c^d \int_a^b f(x,y).dx.dy$$

Analíticamente se integra con respecto a una variable (*x* por ejemplo), manteniendo la otra constante, y luego se precede con la siguiente variable.

En forma numérica se sigue el mismo esquema y se puede usar cualquiera de los métodos de integración conocidos, según se tenga la función explícita o una tabla de datos.

El procedimiento es así:

1.- Se define:

$$\int_c^d \int_a^b f(x,y).dx.dy = \int_c^d g(y).dy$$

donde $g(y) = \int_a^b f(x,y)dx$.

Es decir, para cada valor de '*y*' se tendrá un valor diferente de la integral *f*(*x*,*y*) respecto a *x* y eso forma la función *g*(*y*).

Usando Simpson 1/3 con 4 intervalos realizo la integral:

$$\int_c^d g(y).dy = \frac{h_y}{3}\left[g(y_0) + 4.g(y_1) + 2.g(y_2) + 4.g(y_3) + g(y_4)\right]$$

Nótese que se tiene un paso h_y para la integración de la variable *y*.

2.- Se deben evaluar los $g(y_i)$.

Para ello se sabe que: $g(y) = \int_a^b f(x,y)dx$. Entonces, se evalúa para cada y_i usando Simpson 1/3 y 4 intervalos.

$$g(y_0)=\int_a^b f(x,y_0)dx=\frac{h_x}{3}\left[f(x_0,y_0)+4.f(x_1,y_0)+2.f(x_2,y_0)+4.f(x_3,y_0)+f(x_4,y_0)\right]$$

Y se hace lo mismo para los otros y_i.

Nótese aquí que se tiene un h_x para la integración de la variable x. En un principio $h_x \neq h_y$ y pueden escogerse independientemente uno del otro.

<u>*Observación*</u>: el procedimiento anterior puede usarse perfectamente si se tiene una función explícita $z=f(x,y)$ o si se tiene una tabla de datos como 'z' en función de 'x' y 'y'. En el primer caso los pasos h_x y h_y pueden escogerse y en el segundo, están determinados por la tabla de datos.

<u>Ejemplo</u>:

$$I=\int_0^2\int_0^1 (x^2+y^2)\,dxdy \quad \text{con} \quad f(x,y)=x^2+y^2$$

Usamos Simpson 1/3 con 4 intervalos en x y en y.

n = 4 con: $\begin{cases} x: & a=0 \\ & b=1 \\ & h_x=\dfrac{b-a}{n}=\dfrac{1}{4}=0,25 \end{cases}$ $\begin{cases} y: & c=0 \\ & d=2 \\ & h_y=\dfrac{d-c}{n}=\dfrac{2}{4}=0,5 \end{cases}$

Ahora:

$$x_0=0; x_1=0,25; x_2=0,5; x_3=0,750; x_4=1$$

$$y_0=0; y_1=0,5; y_2=1; y_3=1,5; y_4=2$$

Definimos:

$$I=\int_0^2\int_0^1 (x^2+y^2).dx.dy=\int_0^2 g(y).dy$$

Donde $g(y)=\int_0^1 (x^2+y^2).dx$

Entonces,

$$I = \int_0^2 g(y).dy = \frac{h_y}{3}\left[g(y_0) + 4.g(y_1) + 2.g(y_2) + 4.g(y_3) + g(y_4)\right]$$

Ahora se deben evaluar los $g(y_i)$.

y_0 = 0:

$$g(y_0) = \frac{h_x}{3}\left[f(x_0, y_0) + 4.f(x_1, y_0) + 2.f(x_2, y_0) + 4.f(x_3, y_0) + f(x_4, y_0)\right]$$

Evaluando:

$$g(y_0) = \frac{0,25}{3}\left[f(0,0) + 4.f(0,25;0) + 2.f(0,5;0) + 4.f(0,75;0) + f(1,0)\right]$$

$$g(y_0) = g(0) = 0,33333$$

y_1 = 0,5:

$$g(y_0) = \frac{0,25}{3}\left[f(0;0,5) + 4.f(0,25;0,5) + 2.f(0,5;0,5) + 4.f(0,75;0,5) + f(1;0,5)\right]$$

$$g(y_1) = g(0,5) = 0,58333$$

Similarmente:

$$\begin{matrix} y_3 = 1,5 \\ y_4 = 2 \end{matrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{matrix} g(y_3) = g(1,5) = 2,58333 \\ g(y_4) = g(2) = 4,3333 \end{matrix}$$

Finalmente se evalúa la integral en ‘y’ para un h_y = 0,5.

$$I = \frac{0,5}{3}.\left[g(y_0) + 4.g(y_1) + 2.g(y_2) + 4.g(y_3) + g(y_4)\right]$$

$$I = 3,3333$$

1.1 Uso del Método de Cuadratura Gaussiana para resolver Integrales Múltiples

El procedimiento a seguir es el mismo al del esquema anterior:

$$\int_c^d \int_a^b f(x,y).dx.dy = \int_c^d g(y).dy$$

donde $g(y) = \int_a^b f(x,y)dx$.

Ahora, la diferencia es que aquí se evalúa con la definición de Cuadratura Gaussiana:

$$\int_c^d g(y).dy = \frac{d-c}{2}.\sum_{i=1}^{n} \omega_i.g(y_i)$$

Con el siguiente cambio de base:

$$y = \frac{(d-c).t + (d+c)}{2}$$

Para hallar los y_i se sigue el procedimiento de la Cuadratura al igual que para evaluar los $g(y_i)$. Una vez que se tiene $g(y_i)$ se aplica el otro cambio de base para hallar los x_i:

$$x = \frac{(b-a).t + (a+b)}{2}$$

Nótese que aquí que si tomo el mismo 'n' tanto para 'x' como para 'y' tendré exactamente los mismos t_i y ω_i que son genéricos para cualquier caso mientras que los x_i y y_i serán diferentes debido a sus respectivos cambios de base.

Ejemplo:

$$I = \int_0^2 \int_0^1 (x^2 + y^2).dx.dy$$

Aplicando Cuadratura Gaussiana con n = 3.

Definimos nuestro 'x' y 'y':

$$x : a = 0; b = 1$$
$$y : c = 0; d = 2$$

Leo los t_i, ω_i de la tabla que serán los mismos para 'x' y 'y'.

$$t_1 = -0,774597 \quad \omega_1 = 0,555$$
$$t_2 = 0 \quad ; \omega_2 = 0,888$$
$$t_3 = +0,774597 \quad \omega_3 = 0,555$$

Aplicamos los cambios de base:

$$x = \frac{(b-a).t + (a+b)}{2} \Rightarrow x = \frac{t+1}{2}$$
$$y = \frac{(d-c).t + (d+c)}{2} \Rightarrow y = \frac{2.t+2}{2} \Rightarrow y = t+1$$

Evalúo los x_i y y_i:

$$x_1 = 0,112702 \quad \omega_1 = 0,555$$
$$x_2 = 0,5 \quad ; \omega_2 = 0,888$$
$$x_3 = 0,887299 \quad \omega_3 = 0,555$$

Note que los ω_i son los mismos

$$y_1 = 0,225403 \quad \omega_1 = 0,555$$
$$y_2 = 1 \quad ; \omega_2 = 0,888$$
$$y_3 = 1,774597 \quad \omega_3 = 0,555$$

Los t_i usados para evaluar x_i y y_i son los mismos

Ahora, la integral: ($c = 0$; $d = 2$)

$$I = \int_0^2 g(y).dy = \frac{2-0}{2}.\left[g(y_1).\omega_1 + g(y_2).\omega_2 + g(y_3).\omega_3\right]$$

Ahora se evalúan los $g(y_i)$: ($a = 0$; $b = 1$)

$$g(y_1) = \frac{b-a}{2}.\left[f(x_1, y_1).\omega_1 + f(x_2, y_1).\omega_2 + f(x_3, y_1).\omega_3\right]$$

$$= 0,5.\left[(0,063508).(0,555) + (0,30081).(0,888) + (0,838106).(0,555)\right]$$

$$g(y_1) = 0,384141$$

$$g(y_2) = \frac{b-a}{2}.\left[f(x_1, y_2).\omega_1 + f(x_2, y_2).\omega_2 + f(x_3, y_2).\omega_3\right]$$

$$g(y_2) = 1,33333$$

$$g(y_3) = \frac{b-a}{2}.\left[f(x_1, y_3).\omega_1 + f(x_2, y_3).\omega_2 + f(x_3, y_3).\omega_3 \right]$$

$$g(y_3) = 3,48253$$

A continuación se evalúa para '*y*':

$$I = \int_c^d g(y).dy = \frac{d-c}{2}.\sum_{i=1}^{3} g(y_i).\omega_i$$

$$I = \frac{d-c}{2}.\left[g(y_1).\omega_1 + g(y_2).\omega_2 + g(y_3).\omega_3 \right]$$

Evaluando:

$$I = \frac{2-0}{2}.\left[(0,384141).(0,555) + (1,33333).(0,888) + (3,48253).(0,555) \right]$$

$$I = 3,3333$$

Note que el resultado coincide con el del método Simpson 1/3, pero sólo requirieron de tres (3) evaluaciones para cada variable respecto a las cinco (5) de Simpson 1/3 con cuatro (4) intervalos.