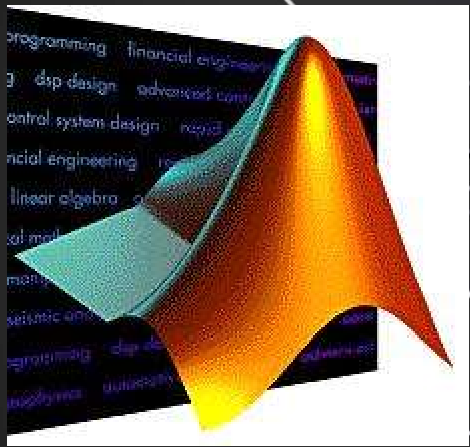
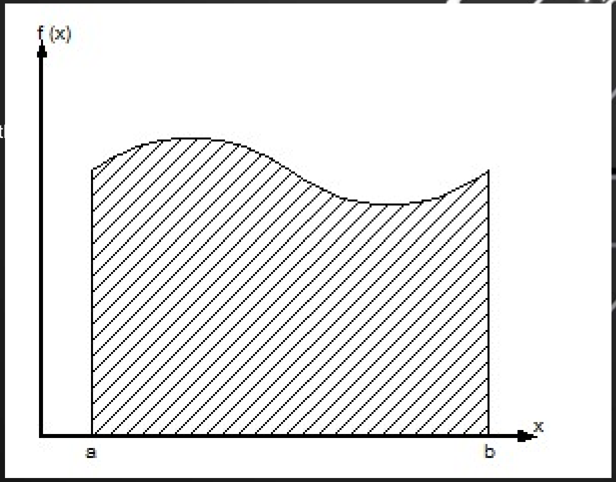
NUMERICAL INTEGRATION



Secara matematis integrasi dinyatakan oleh :

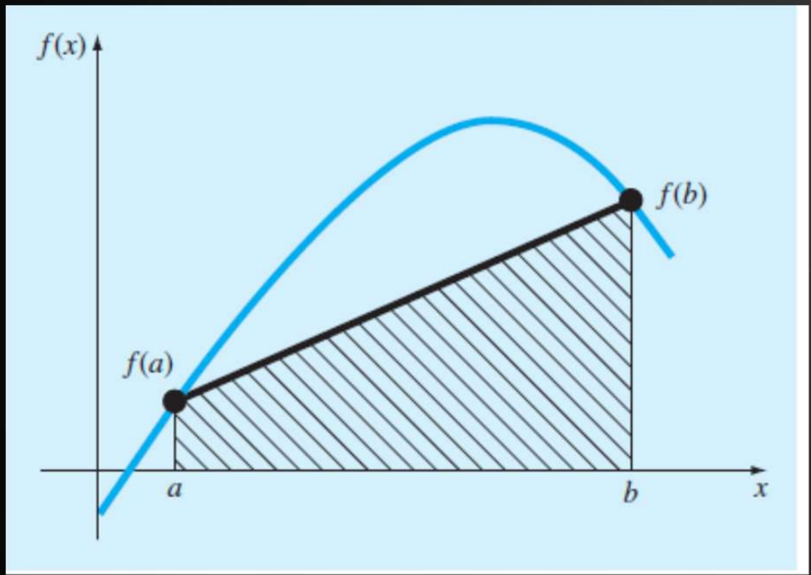
$$I = \int_a^b f(x)\, dx$$

which stands for the integral of the function f (x) with respect to t
between the limits x = a to x = b.



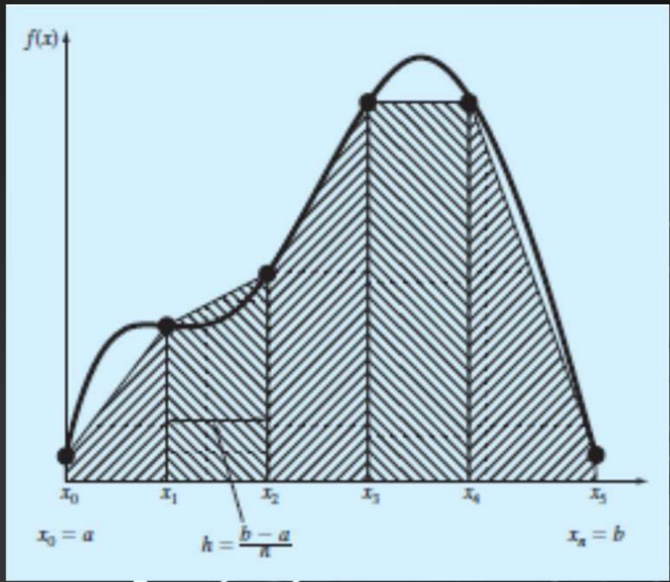
THE TRAPEZOIDAL RULE

Geometrically, the trapezoidal rule is equivalent to approximating the area of the trapezoid under the straight line connecting *f (a)* and *f (b)* in Fig. Recall from geometry that the formula for computing the area of a trapezoid is the height times the average of the bases. In our case, the concept is the same but the trapezoid is on its side. Therefore, the integral estimate can be represented as



$$I = \text{width} \times \text{average height}$$

The Composite Trapezoidal Rule



$$I = \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{\Delta x}{2}\left(f(a)+f(x_1)\right)+\frac{\Delta x}{2}\left(f(x_1)+f(x_2)\right)+\ldots\ldots+\frac{\Delta x}{2}\left(f(x_{n-1})+f(b)\right)$$

$$=\frac{\Delta x}{2}\left[f(a)+2f(x_1)+2f(x_2)+\ldots\ldots+2f(x_{n-1})+f(b)\right]$$

$$=\frac{(b-a)}{2n}\left[f(a)+2f(x_1)+2f(x_2)+\ldots\ldots+2f(x_{n-1})+f(b)\right]$$

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

Example

Find the integral of

from a = 0 to b = 0.8

a. One segment trapezoidal rule
b. Four segment trapezoidal rule
c. Eight segment trapezoidal rule

Compare with the exact value.

MATLAB M-file: trap

Function trapz

```
z = trapz(x,y)
```

to find value of integral y from x used trapezoidal rule.

x and y are array the same size.

Soal 1a

Find the integral

$$y = x^2$$

For x from 1 to 2

Exact value y = 7/3 = 2.3333

function trapz

```
x = linspace(1,2,5);
y = x.^2;
z = trapz(x,y)
```

Try with the different n

SIMPSON'S RULES

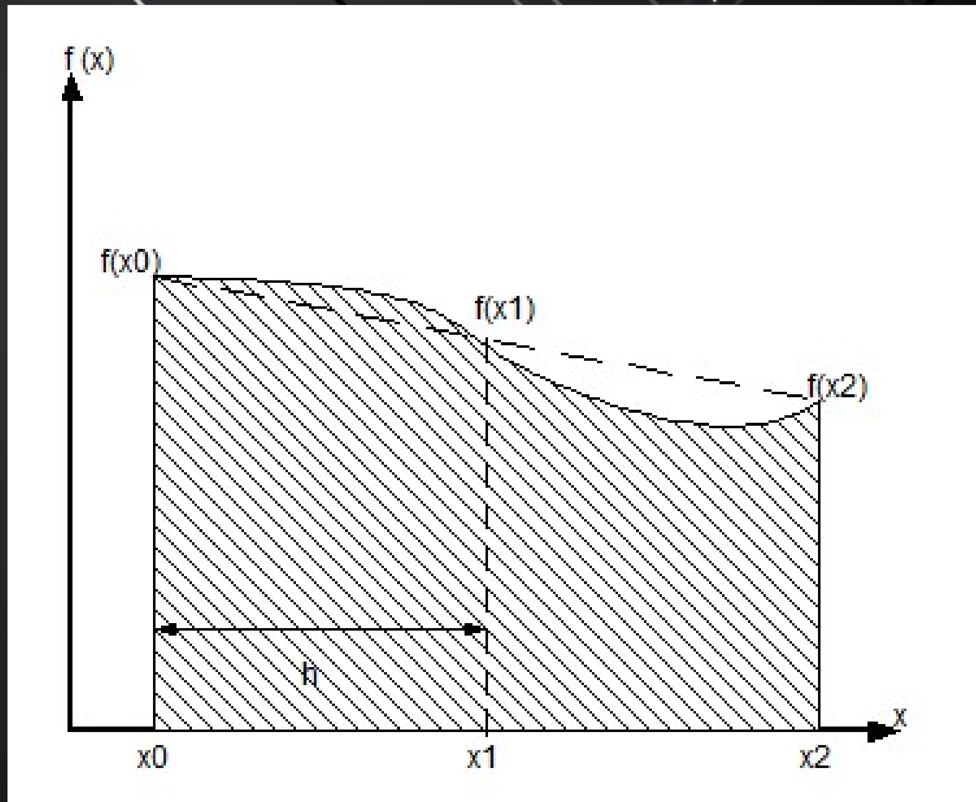
another way to obtain a more accurate estimate of an integral is to use higher-order polynomials to connect the points.

If there are two points equally spaced between *f (a)* and *f (b),* the four points can be connected with a third-order polynomial

The formulas that result from taking the integrals under these polynomials are called *Simpson's rules.*

Simpson’s 1/3 Rule

$$\int_{x0}^{x1} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right)$$



Aplikasi aturan Simpson pada seluruh pasangan interval dalam kisaran x_0 sampai x_n

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) + \frac{h}{3}(f_2 + 4f_3 + f_4) + \ldots\ldots + \frac{h}{3}(f_{2n-2} + 4fx_{2n-1} + f_{2n})$$

$$= \frac{h}{3}\left[f_0 + 4(f_1 + f_3 + \ldots\ldots + f_{2n-1}) + 2(f_2 + f_4 + \ldots\ldots + f_{2n-2}) + f_{2n}\right]$$

Untuk menggambarkan penggunaan aturan Simpson, fungsi simp1 yang kita buat sendiri.

Function utk aturan simson

```
function q = simp1(func,a,b,m)
if (m/2)~= floor(m/2)
   disp('m harus genap ')
end

h = (b-a)/m;
x = [a:h:b];
y = feval(func,x);

v = 2*ones(m+1,1);
v2 = 2*ones(m/2,1);
v(2:2:m) = v(2:2:m) + v2;
v(1) = 1;
v(m+1) = 1;

q = y*v;
q = q*h/3;
```

Tentukan integral

$$y = x^2$$

untuk x dari 1 sampai 2 dengan fungsi simp1

```
function fv = f43(x)
fv = x.^2;
```

```
n = 2; i = 1;
t = clock;
disp(' n   nilai integral')
while n<51200
   simpval=simp1(‘exm1',1,2,n);
   fprintf('%3.0f%14.9f\n',n,simpval);
   n=2*n; i=i+1;
end
fprintf('\nwaktu = %4.2f detik',
etime(clock,t));
```

KUADRATUR GAUSS

Aturan trapesium dan aturan Simpson mempunyai karakteristik perkiraan integral yang didasarkan pada harga-harga fungsi berspasi genap.

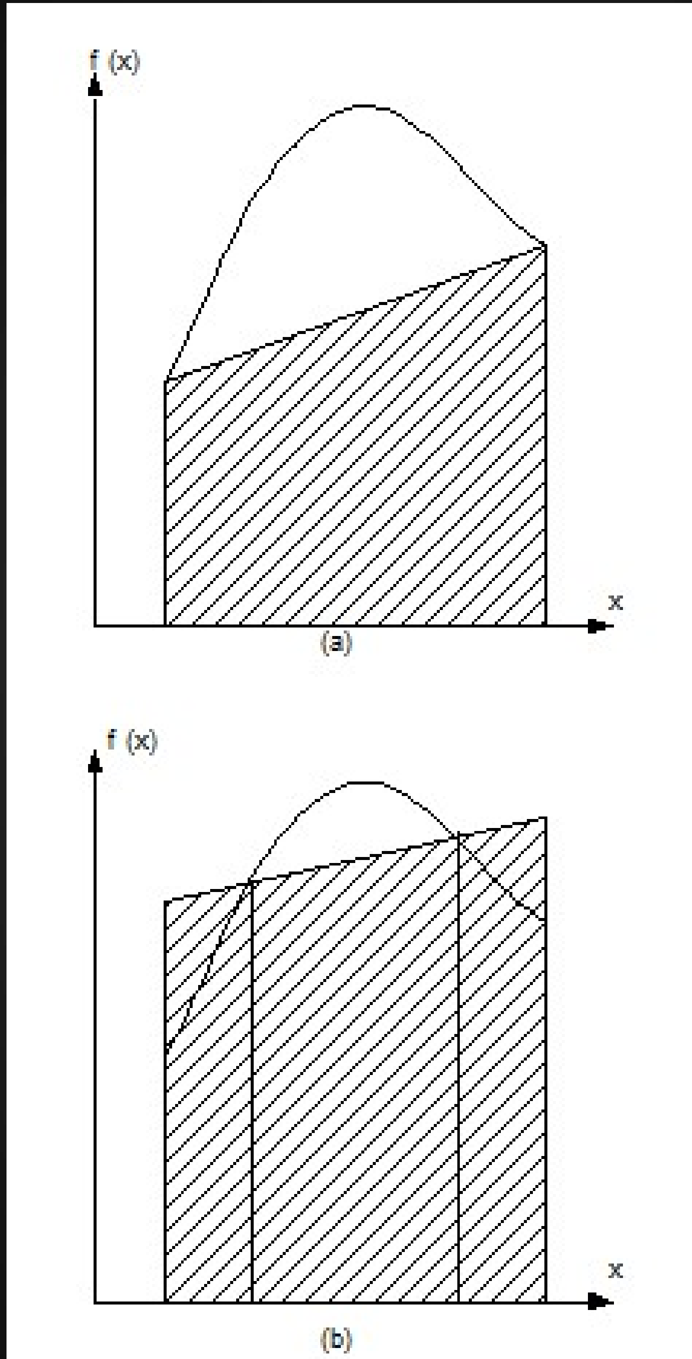
Konsekuensinya letak titik-titik basis yang dipakai dalam persamaan ini sebelumnya telah ditentukan atau tetap.

Misalnya aturan trapesium didasarkan kepada pengambilan luas di bawah garis lurus yang menghubungkan harga-harga fungsi pada kedua ujung interval integrasi. Akibatnya kesalahan yang ditimbulkan cukup besar

Misalkan kendala titik-titik basis yang tetap ini diperbaiki dengan menentukan dua titik pada tertentu kurva.

Dengan menempatkan titik-titik ini dengan bijaksana, dapat dibuat suatu garis lurus yang mengimbangi kesalahan positif dan negatif, sehingga perkiraan integral dapat diperbaiki.

Kuadratur Gauss adalah suatu teknik untuk melaksanakan strategi ini.


f (x)
x
(a)
f (x)
x
(b)

Integral dinyatakan dengan

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} c_i f(x_i) \qquad \text{....(4.5)}$$

untuk n = 2, kita harus menentukan 4 parameter yaitu c_1, c_2, x_1, dan x_2.

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2)$$

Aturan integrasi akan tepat untuk fungsi polinomial 1, x, x^2, dan x^3.

$f(x) = 1$	memberikan	$\int_{-1}^{1} 1\,dx$	$= 2$	$= c_1 + c_2$
$f(x) = x$	memberikan	$\int_{-1}^{1} x\,dx$	$= 0$	$= c_1x_1 + c_2x_2$
$f(x) = x^2$	memberikan	$\int_{-1}^{1} x^2\,dx$	$= 2/3$	$= c_1x_1^2 + c_2x_2^2$
$f(x) = x^3$	memberikan	$\int_{-1}^{1} x^3\,dx$	$= 0$	$= c_1x_1^3 + c_2x_2^3$

Tabel 4.1. Faktor Bobot c dan Argumen Fungsi x untuk Kuadratur Gauss

Titik	Faktor Bobot		Argumen Fungsi	
2	c1 =	1,000000000	x1 =	-0,577350269
	c2 =	1,000000000	x2 =	0,577350269
3	c1 =	0,555555556	x1 =	-0,774596669
	c2 =	0,888888889	x2 =	0
	c3 =	0,555555556	x3 =	0,774596669
4	c1 =	0,347854845	x1 =	-0,861136312
	c2 =	0,652145155	x2 =	-0,339981044
	c3 =	0,652145155	x3 =	0,339981044
	c4 =	0,347854845	x4 =	0,861136312
5	c1 =	0,236926885	x1 =	-0,906179846
	c2 =	0,478628670	x2 =	-0,538469310
	c3 =	0,568888889	x3 =	0
	c4 =	0,478628670	x4 =	0,538469310
	c5 =	0,236926885	x5 =	0,906179846
6	c1 =	0,171324492	x1 =	-0,932469514
	c2 =	0,360761573	x2 =	-0,661209386
	c3 =	0,467913935	x3 =	-0,238619186
	c4 =	0,467913935	x4 =	0,238619186
	c5 =	0,360761573	x5 =	0,661209386
	c6 =	0,171324492	x6 =	0,932469514

fungsi quad/quad8

Berdasarkan konsep integral dengan metode kuadratur Gauss

Penggunaan fungsi quad/quad8 seperti pada penggunaan fungsi fzero

z = quad('function', a, b)

dengan function adalah nama fungsi yang ingin diintegralkan

a adalah batas bawah

b adalah batas atas

quad8 lebih teliti daripada quad

Soal 1b

Tentukan integral

$$y = x^2$$

untuk x dari 1 sampai 2 dengan fungsi quad

Secara analitis y = 7/3 = 2.3333
fungsi quad pada Matlab

```
function y = metodequad(x)
         y = x.^2
```

---

z=quad('metodequad',1,2)

Soal 2

Suatu campuran gas mempunyai kapasitas panas

$$Cp = 7{,}053 + 1{,}2242.10^{-3}\,T - 2{,}6124.10^{-7}\,T^2$$

T dalam ^oF dan Cp dalam Btu/lbmol ^oF. Tentukan **panas yang dilepaskan** untuk menurunkan temperatur campuran gas panas tersebut dari 550 ^oF menjadi 200 ^oF.

$$q = \int_{To}^{T} Cp \quad dT$$

lanjutan

```
function q = panas(T)
q = 7.053 + 1.2242*10^-3.*T - ...
2.6124*10^-7.*T.^2;
--------------------
kalor=quad8('panas',550,200)
_____________________
T = linspace(550,200,100);
q = 7.053 + 1.2242*10^-3.*T - ...
2.6124*10^-7.*T.^2;
kalor = trapz(T,q)
```

Soal 3

Suatu proses dengan katalis porous mempunyai kecepatan reaksi

$$-\frac{dC}{dt} = 0{,}7\eta C^2 \qquad \eta = \frac{1{,}0357 + 0{,}3173\phi}{1 + 0{,}4172\phi}$$

$$\phi = 12\sqrt{C}$$

Tentukan waktu yang dibutuhkan untuk menurunkan konsentrasi dari C = 2 mol/gr katalis menjadi 1 mol/g katalis.

lanjutan

```
Co = 2;
Cn = 1;
C = linspace(Cn,Co,101) ;
phi = 12*sqrt(C);
eta = (1.0357+0.3173*phi)./(1+0.4172*phi);
x=1./(0.7.*eta.*C.^2);% karena kondisi batas dibalik,
                      % tanda negatif hilang
t = trapz(C,x);
```

Suatu campuran gas mempunyai kapasitas panas

$$Cp = 7{,}053 + 1{,}2242.10^{-3}\ T - 2{,}6124.10^{-7}\ T^2$$

T dalam °F dan Cp dalam Btu/lbmol °F. Jika **panas yang dilepaskan** untuk menurunkan temperatur campuran gas panas tersebut dari 550 °F adalah 2616 Btu/lbmol gas sampai temperatur berapakah campuran gas tersebut dapat didinginkan.

$$q = \int_{To}^{T} Cp \quad dt$$

Sampai berapakah campuran gas tersebut dapat didinginkan ?

```
function fq=contoh46(Tn)
q = -2616;      % BTU/lbmol
To = 550;       % oF
%   Integral secara numeris aturan trapesium
T=linspace(Tn,To,1000);
cp=-(7.053+1.2242.*10^-3.*T-2.6124.*10^-7.*T.^2);
qtebak=trapz(T,cp);
fq=qtebak-q;
```

Fungsi tersebut dapat dijalankan dari jendela *command*

```
>> T = fzero('contoh46',150)
T =
```

- 199.9225

Reaktor plug flow beroperasi adiabatik digunakan untuk reaksi fase cair : A → produk

Gambar 4.6. Reaktor Plug flow adiabatik

Rekasi orde 2 eksotermis. Perubahan entalpi reaksi, ΔH_R konstan. Hubungan tetapan kecepatan reaksi (k) dengan temperatur (T) mengikuti persamaan :

$$k = A.\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

Diketahui F_v = 200 L/menit; C_{Ao} = 5 gmol/L; ρ = 1,1 kg/L; C_p = 0,8 kcal/kg/K; A = 3,12E+08 L/gmol/menit; E = 18.600 cal/gmol; ΔH_R = -15 kal/gmol; R = 1,987 cal/gmol/K; dan volum reaktor, Vol = 8000 L. Ingin dicari temperatur masuk T_o yang memberikan konversi keluar x_{out} = 0,8.

Dari neraca massa

$$V = \frac{F_v}{C_{Ao}} \int_{xin}^{xout} \frac{1}{k(1-x)^2} dx$$

$$k = A.\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

Dari neraca panas

$$T = T_o - \frac{C_{Ao} \Delta H_R}{\rho C_p} x$$

```
function FV=contoh47(To)
Fv=200;        % laju alir volum, L/menit
Cao=5;         % konsentrasi umpan, gmol/L
rho=1.1;       % densitas, kg/L
Cp=0.8;        % kapasitas panas, kcal/kg/K
A=3.12*10^8;   % konstanta Arrhenius, L/gmol/menit
E=18600;       % konstanta Arrhenius, cal/gmol
Hr=-15;        % panas reaksi, kcal/gmol
R=1.987;       % konstanta gas ideal, cal/gmol/K
Vol=8000;      % volume reaktor, L
xin=0;         % konversi masuk reaktor
xout=0.8;      % konversi keluar reaktor

        x=linspace(xin,xout,1000);
        T=To-Cao*Hr/rho/Cp*x   ;
        k=A*exp(-E/R./T);
        eq=1./k./(1-x).^2;
        V=Fv/Cao*trapz(x,eq);
        FV=Vol-V;
```

```
>> Totebakan=300;
>> To=fzero('contoh47',Totebakan)

To =

          360.2898
```

Butir-butir padatan A dengan densitas ρ = 2 g/mL, jari-jari awal Ro =2 cm, berjumlah Nb = 40.000, dimasukkan dalam W g solven. Padatan A melarut dengan panas pelarutan λ =100 cal/g. Kelarutan A dalam solven sebagai fungsi suhu mengikuti persamaan

$$x_S = \exp\left(8{,}8053 - \frac{3333}{T}\right)$$

Waktu yang diperlukan padatan untuk melarut dinyatakan dengan persamaan

$$t = \frac{\rho}{k_X}\int_0^{Ro}\frac{dr}{(x_S - x)}$$

Persamaan-persamaan lainnya yang diperlukan,

$$x = (mo - m) / W$$

$$m = 4\Pi\, r^3\, \rho\, Nb / 3$$

$$T = To + \frac{\lambda\,(mo - m)}{(W + m)\,Cp}\,x$$

Jika diketahui W = 100.000 g, kx = 0,01 g/(cm^2.dtk) dan To = 350 K, Tentukan waktu (t) yang diperlukan padatan A untuk melarut.

Reaktor batch beroperasi secara adiabatis untuk reaksi fasa cair order 2 : A → B. Perubahan entalpi reaksi ΔH_R, volume reaktor V_R, dan kapasitas panas larutan C_p dianggap tetap. Waktu bongkar pasang t_p. Umpan masuk pada suhu T_F dan konsentrasi A C_{Ao}. Reaksi dihentikan pada konversi x_R. Konversi A mula-mula x_{Ro}.

Persamaan-persamaan yang dipakai adalah :

$$t_R = \frac{1}{C_{Ao}} \int_{x_{in}}^{x_{out}} \frac{1}{k.(1 - x_A)^2} dx_A$$

$$k = A.\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

$$T = T_F - \frac{C_{Ao}\,\Delta H_R}{\rho.Cp} x_A$$

$$B = V_R \frac{C_{Ao}.x_R}{(t_R + t_p)}$$

Data-data yang diketahui adalah V_R = 10.000 L; C_{Ao} = 1 gmol/L; ρ = 1,0 kcal/(kg.K); A = 10^7 L/(gmol.mnt); E = 14 kcal/gmol; ΔH_R = - 6 kcal/gmol; R = 0,001987 kcal/(gmol.K); T_F = 350 K; t_p = 120 mnt; x_{Ro} = 0; Cp = 1 kcal/kg K.

Tentukan t jika xr = 0.7

Reaksi fasa cair bolak-balik eksotermis : A ↔ B dijalankan dalam reaktor batch adiabatis. Volum campuran dapat dianggap tetap. Suhu awal reaktor To. Panas reaksi λ kal/gmol, kapasitas panas campuran Cp cal/(g.K). Konsentrasi A mula-mula C_{Ao} gmol/L dan konversi awal x_o. Konversi akhir yang diinginkan x_N.

Waktu reaksi dinyatakan dengan persamaan,

$$t = \int_{x_o}^{x_N} \frac{dx}{k\left[(1-x)-K.x\right]}$$

$$k = A.\exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \qquad K = \alpha.\exp\left(\frac{\beta}{T}\right)$$

$$T = T_o + \frac{\lambda.C_{Ao}}{\rho.Cp}(x - x_o)$$

Data-data yang diketahui adalah : A = 25; E = 10.000; R = 1,987; α = 1750; β = -5.000; ρ = 1100; Cp = 1,2; C_{Ao} = 1; x_o = 0; x_N = 0,3; λ = -8.000.

Tentukan t jika To = 750