

Εργαστήριο 6γ - Αριθμητική Επίλυση Μη Γραμμικών Εξισώσεων

Παραδοτέο

Ημερομηνία Παράδοσης: 23/11/2020

Ακριβείς μετρήσεις της θερμοκρασίας (T) που κυμαίνονται μεταξύ 200-600° K δίνουν την ακόλουθη εμπειρική σχέση για την τάση ατμών¹ (PmmHg) μιας οργανικής αρωματικής ένωσης A

$$\log P = 23.8296 + 3480.3/T - 5.081 \log T \quad (1)$$

Η εξίσωση επιτρέπει τον εύκολο υπολογισμό της τάσης ατμών σε μια δοθείσα θερμοκρασία αλλά η θερμοκρασία στην οποία η οργανική αρωματική ένωση A ασκεί τη δοθείσα τάση ατμών υπολογίζεται επαναληπτικά. Για το λόγο αυτό θεωρούμε τη συνάρτηση

$$f(T) = 23.8296 - \log P + 3480.3/T - 5.081 \log T \quad (2)$$

και την παράγωγο

$$f'(T) = -3480.3/T^2 - 2.207/T \quad (3)$$

Η άσκηση αυτή εξετάζει τη χρήση κάποιων μεθόδων για τον προσδιορισμό του σημείου βρασμού της οργανικής αρωματικής ένωσης A.

Να γραφεί ένα πρόγραμμα σε Matlab για τον προσδιορισμό του σημείου βρασμού της οργανικής αρωματικής ένωσης A (πίεση P=760mmHg) δηλ. για τον υπολογισμό της προσεγγιστικής τιμής T_n^{D-NR} μιας πραγματικής ρίζας ξ της f(T) με τη μέθοδο Newton-Raphson σε συνδυασμό με τη μέθοδο της διχοτόμησης ως ακολούθως:

A) Ξεκινώντας με τη μέθοδο της διχοτόμησης λάβετε ως δεδομένα: το αρχικό διάστημα [a,b], την επιθυμητή ακρίβεια $\epsilon^D = 1/2 * 10^{-2}$ και το μέγιστο επιτρεπτό αριθμό επαναλήψεων M=100. Για το αρχικό διάστημα [a,b], λάβετε τα ακόλουθα ζεύγη τιμών:

[10, 400], [100, 700], [100, 5000], [100, 15000], [700, 15000], [10000, 15000]

Να τυπώσετε για κάθε επανάληψη η την προσεγγιστική τιμή T_n^D της πραγματικής ρίζας ξ

B) Στη συνέχεια να εφαρμοστεί η μέθοδος Newton-Raphson θεωρώντας σαν x_0 το μέσο του τελευταίου διαστήματος που προέκυψε από τη μέθοδο της διχοτόμησης όπου αυτή εφαρμόζεται στα ανωτέρω διαστήματα, με επιθυμητή ακρίβεια $\epsilon^{NR} = 1/2 * 10^{-6}$ και με μέγιστο επιτρεπτό αριθμό επαναλήψεων M=100.

Να τυπώσετε για κάθε επανάληψη η την προσεγγιστική τιμή T_n^{NR} της πραγματικής ρίζας ξ.

Γ) Να υπολογιστεί η τιμή του απόλυτου και του απόλυτου σχετικού σφάλματος για τα A) και B).

Δ) Να μελετηθεί η τάξη σύγκλισης της μεθόδου υπολογίζοντας το λόγο $|e_n|/|e_{n-1}|^p$, $p=2$.

Υπόδειξη: Να φτιαχτεί πινακάκι ανάλογο του παραδείγματος που παρουσιάζεται στη σημειώσεις στην παράγραφο της Newton-Raphson.

Ε) Να γίνει η γραφική παράσταση της συνάρτησης $f(T)$ σε κάθε ένα από τα διαστήματα που αναφέρονται στο ερώτημα Α). Στη γραφική παράσταση να εμφανίζεται το σημείο βρασμού της οργανικής αρωματικής ένωσης.

ΣΤ) Υπολογίστε το χρόνο εκτέλεσης του προγράμματος σας κατά την εφαρμογή των μεθόδων διχοτόμησης και Newton Raphson συνολικά.

Ζ) Σχολιάστε τα αποτελέσματα σύγκλισης και τους χρόνους για τις δύο μεθόδους. Ποια είναι τα αποτελέσματα σύγκλισης? Αναφέρετε τις παρατηρήσεις σας. Εξηγήστε τα αποτελέσματά σας με βάση την θεωρία.

¹ Vapor pressure (Τάση ατμών) <https://www.chem.purdue.edu/gchelp/liquids/vpress.html>

https://el.wikipedia.org/wiki/%CE%A4%CE%AC%CF%83%CE%B7_%CE%B1%CF%84%CE%BC%CF%8E%CE%BD