

Metody numeryczne

Szymon Gołaś

Paweł Kwiatkowski

Zadanie

IPP Adam Piechna, materiały (odręczne szkice) doc. dr inż. Jerzy Pułaczewski

Znana jest wartość ciśnienia (ciśnienie atmosferyczne) oraz skład mieszaniny benzenu i toluenu (50/50). Znaleźć temperaturę wrzenia oraz skład par mieszaniny.

$$P = xP_1^s + (1 - x)P_2^s$$

$$y = \frac{xP_1^s}{P}$$

Porównać metody bisekcji, N-R i falsi.

Równanie Antoine'a dla toluenu (zakres temperatur 303 – 343 [K])

$$\log_{10}(P_1^s) = A - (B / (T + C))$$

$$A=4.08245 \quad B=1346.382 \quad C=-53.508)$$

Równanie Antoine'a dla benzenu

$$\log_{10}(P_2^s) = A - (B / (T + C))$$

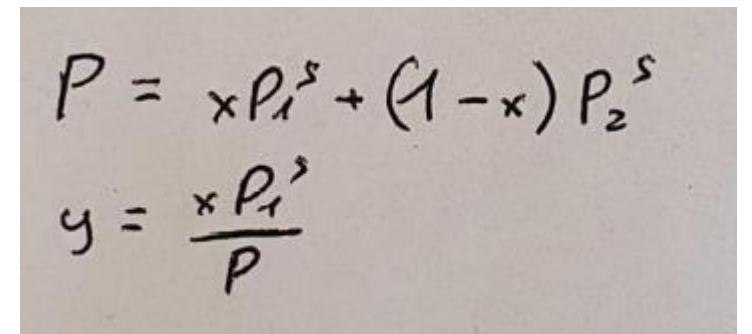
$$A=6.87987 \quad B=1196.76 \quad C=219.161)$$

Wzory

$$\log_{10}(P^s_1) = A - (B / (T + C)) \quad \text{Równanie Antoine'a}$$

$$P = \sum_{i=1}^n x_i^l P_i^* \quad \text{Równanie Raoult'a}$$

$$p = \sum_{i=1}^k p_i \quad \text{Równanie Daltona}$$



Handwritten equations on a piece of paper:

$$P = x P_1^s + (1 - x) P_2^s$$
$$y = \frac{x P_1^s}{P}$$

Założenia

- Ciecze: benzen i toluen
- Mieszanina ciekła w stosunku 50/50 ($x=0,5$)
- Ciśnienie $P=1$ bar
- Zakres temperatur (353-383)K

- Benzen A,B,C

A	B	C
4.72583	1660.652	-1.461
- Toluen A,B,C

4.07827	1343.943	-53.773
---------	----------	---------

(współczynniki dla ciśnienia w barach)

- Pary są gazami doskonałymi

Reprezentacja

$$\log_{10}(P^s_1) = A - (B / (T + C))$$

- Benzen A,B,C

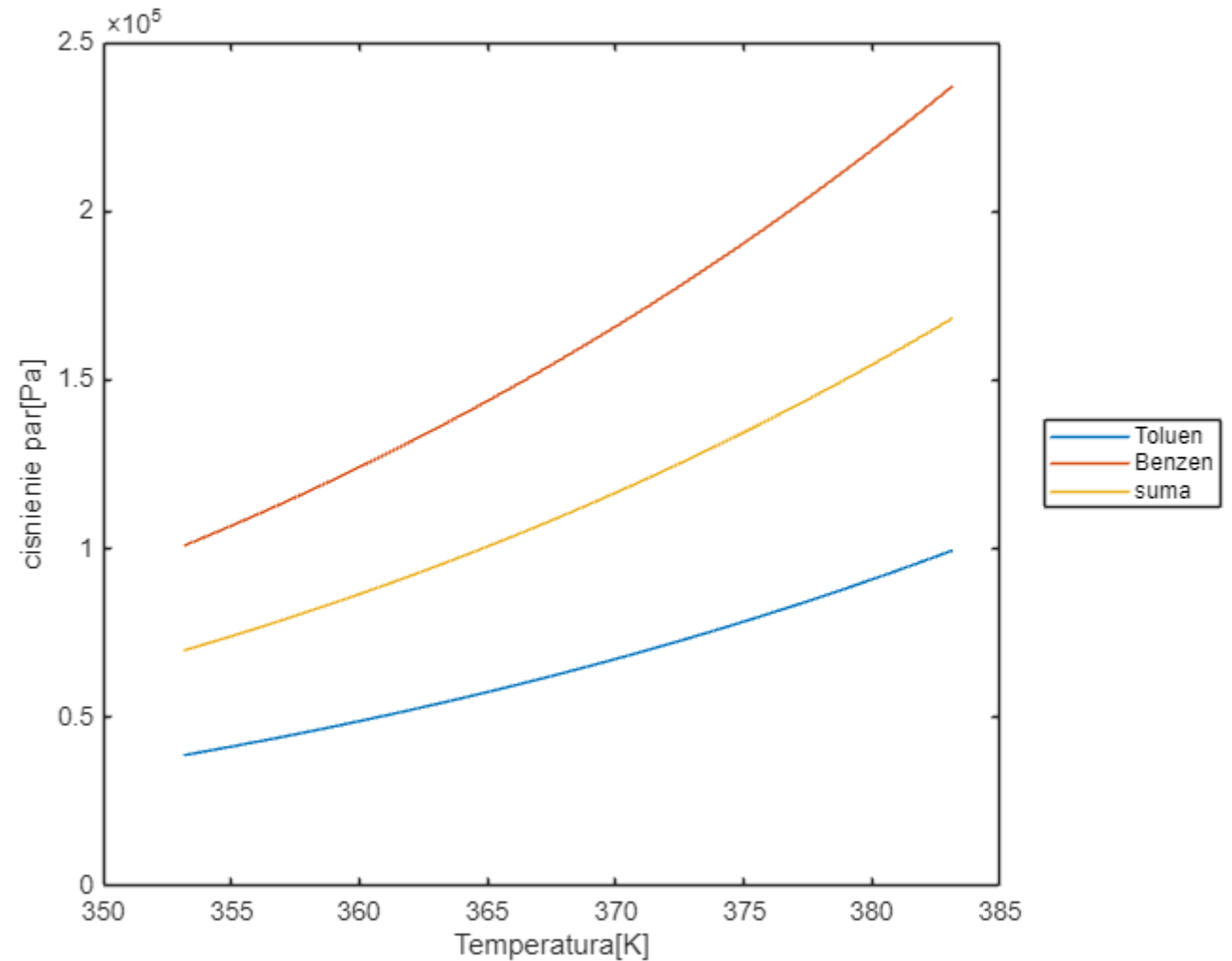
A	B	C
4.72583	1660.652	-1.461

- Toluen A,B,C

4.07827	1343.943	-53.773
---------	----------	---------

- Zakres temperatur (353-383)K

$$P = \sum_{i=1}^n x_i^l P_i^*$$



Wyznaczanie T wrzenia

$$P = xP_1^s + (1 - x)P_2^s$$

$$\log_{10}(P_1^s) = A - (B / (T + C))$$

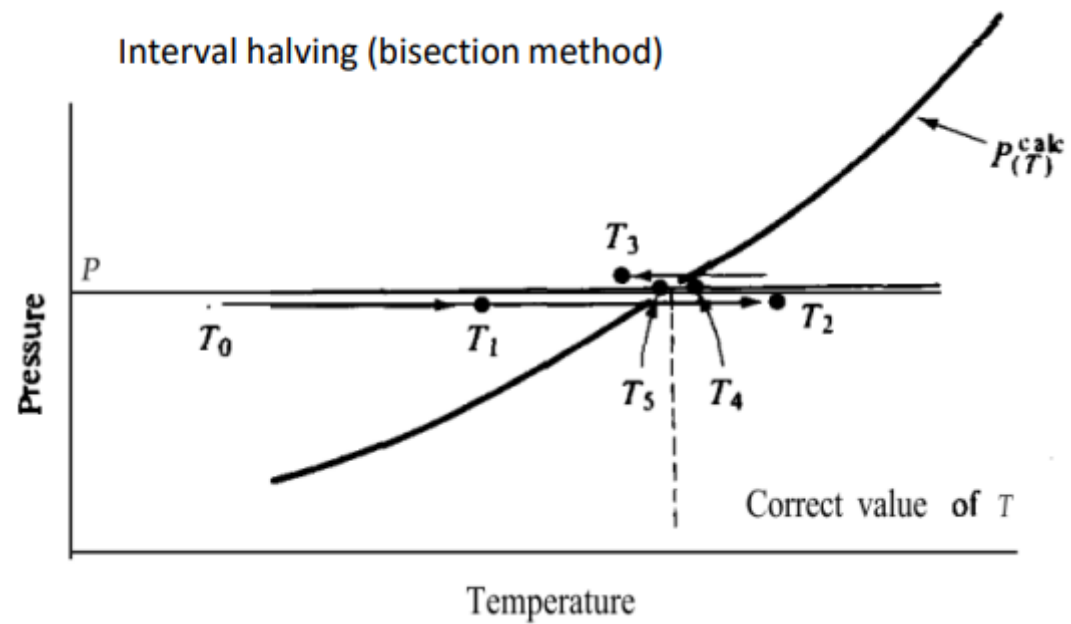
- Ciśnienie $P=1$ bar

Metody numeryczne

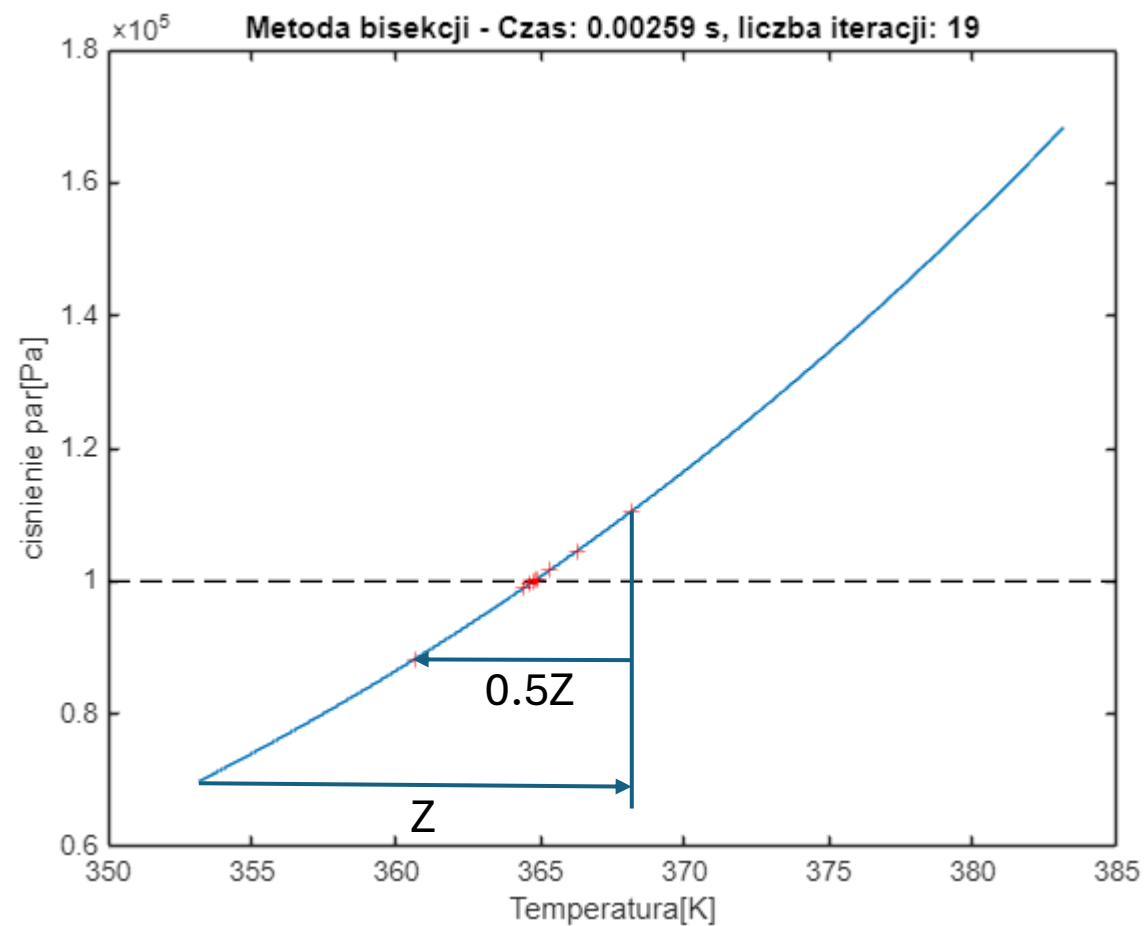
- Bisekcja
- Metoda Newtona-Raphsona
- Regula Falsi

Warunkami początkowymi dla metod jest cały zadany zakres temperatur i dokładność wyznaczenia ciśnienia 0,01 Pa

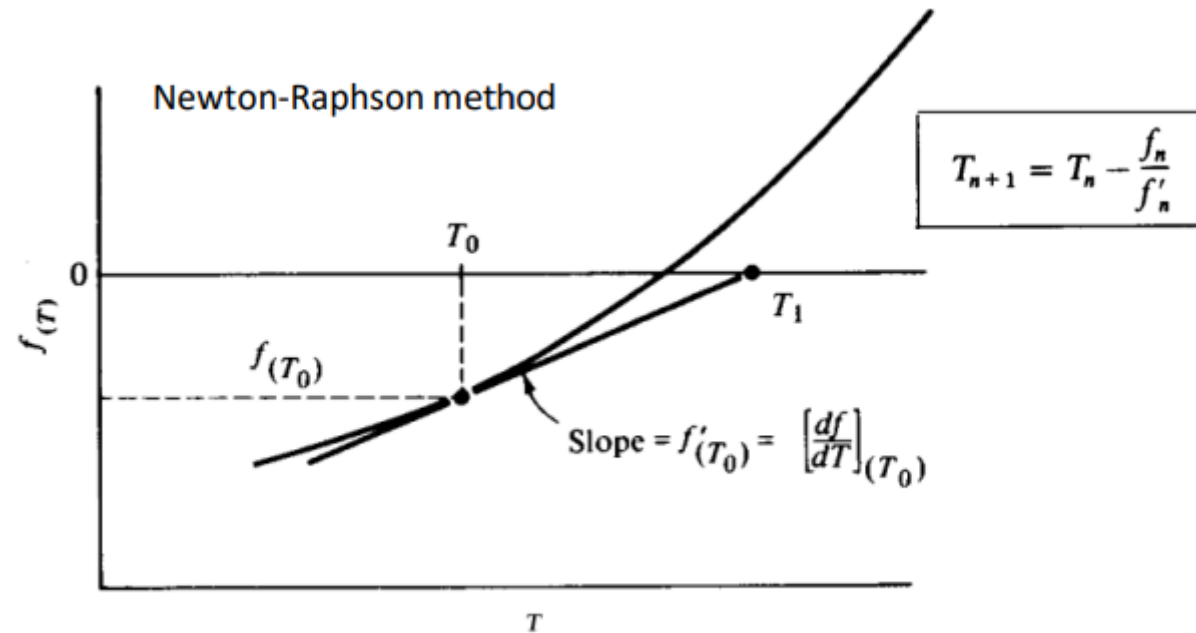
Bisekcja



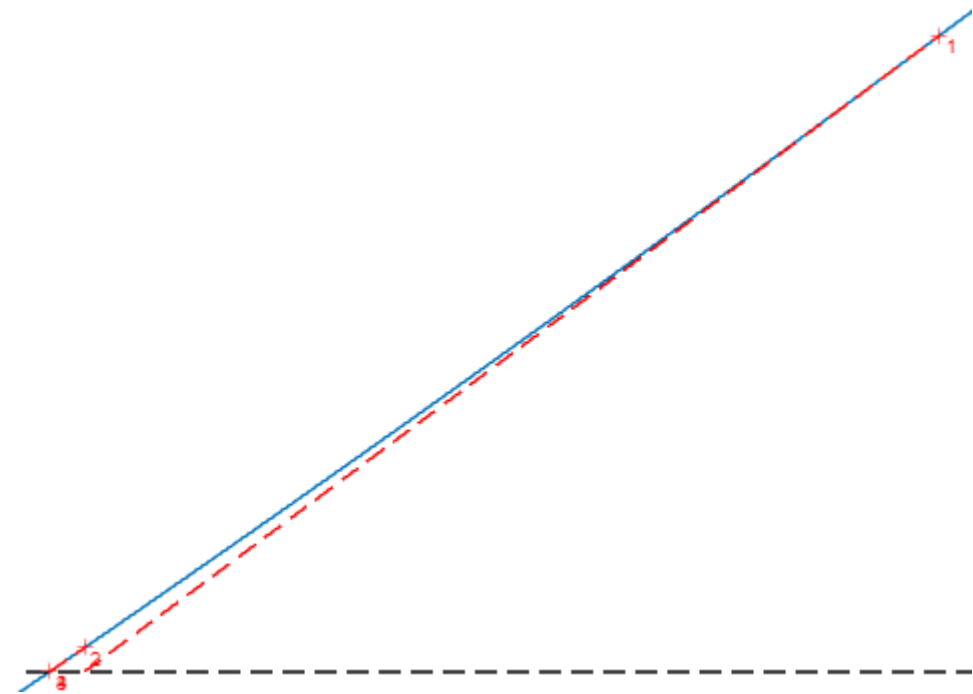
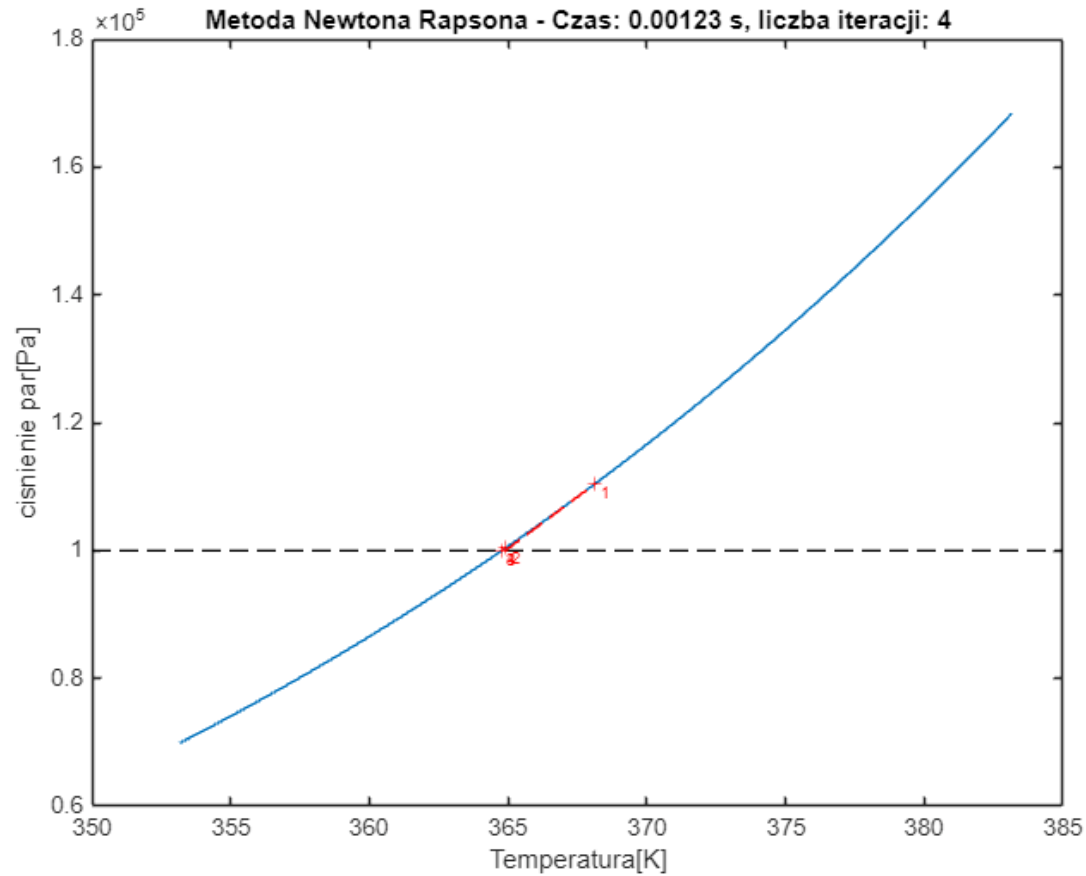
Bisekcja C.D.



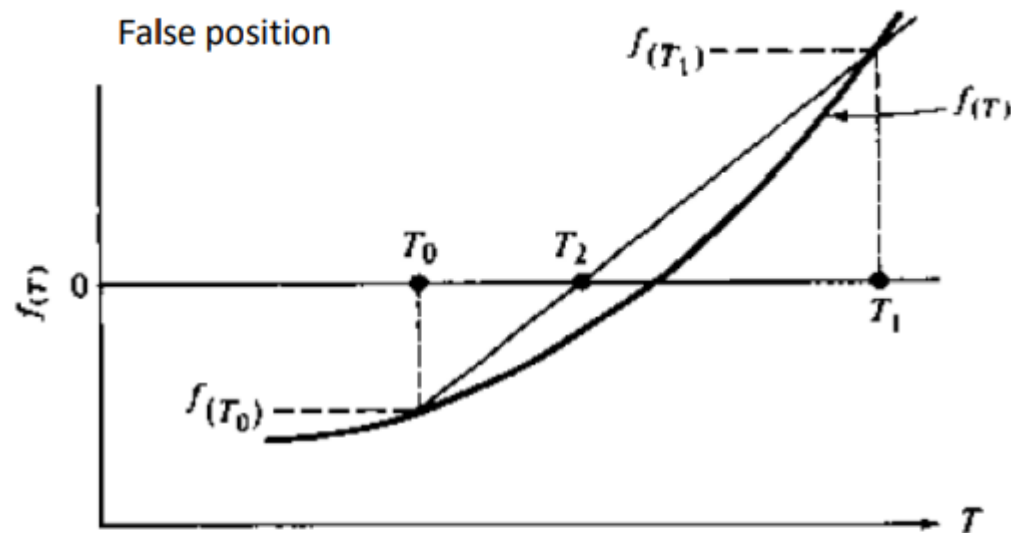
Metoda Newtona-Raphsona



Metoda Newtona-Raphsona C.D.



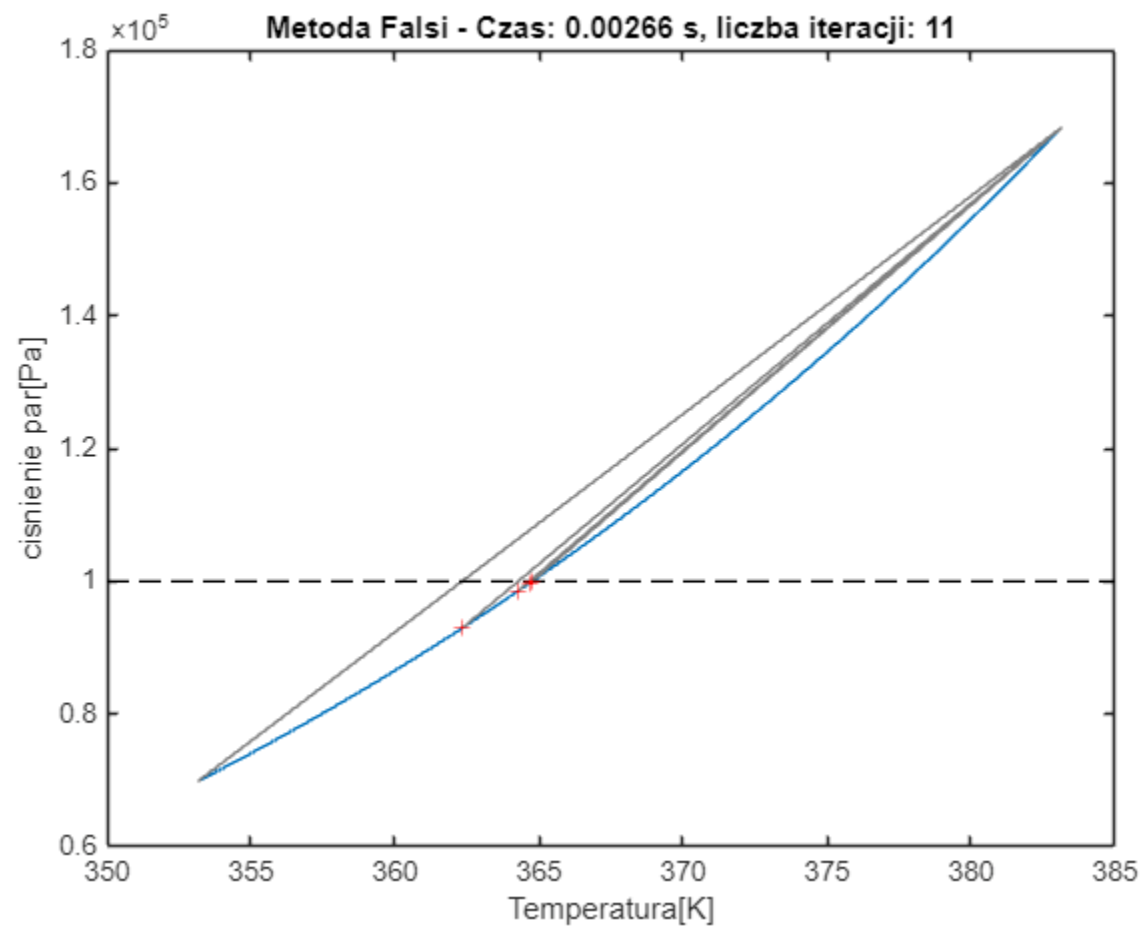
Regula Falsi



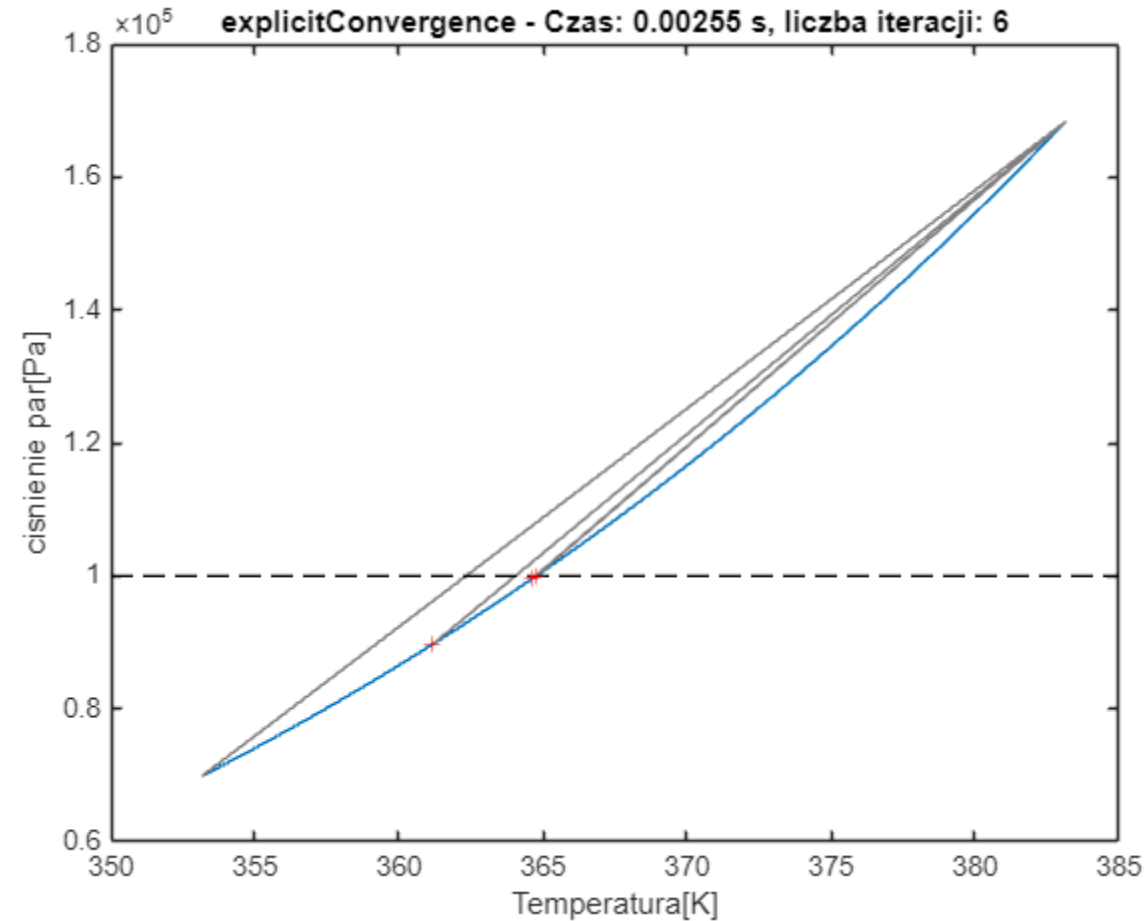
$$\frac{T_2 - T_0}{f(T_0)} = \frac{T_1 - T_2}{f(T_1)}$$

$$T_2 = T_1 - \frac{f(T_1)(T_1 - T_0)}{f(T_1) - f(T_0)}$$

Regula Falsi C.D.



Reguła Falsi ze współczynnikiem Wyrażnej zbieżności



Otrzymane wyniki

Temperatura wrzenia mieszanki: 364.771K
zawartość toluenu w parach: 28.5661%
zawartość benzenu w parach: 71.4339%

Porównanie

	Iteracje	Czas
• Bisekcja	19	2,59ms
• N-R	4	1,23ms
• Regula Falsi	11	2,66ms
• Regula Falsi z wsp W.Z.	6	2,55ms

Wszystkie metody doprowadziły do tego samego wyniku

Porównanie dla przedziału (300-400)K

	Iteracje	Czas
• Bisekcja	22	2,55ms
• N-R	5	0,96ms
• Regula Falsi	18	2,41ms
• Regula Falsi z wsp W.Z.	12	2,59ms

Wszystkie metody doprowadziły do tego samego wyniku

Źródła

- Materiały z wykładu dr inż. Adama Piechny
- <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C108883&Mask=4&Type=ANTOINE&Plot=on>
- <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C71432&Mask=4&Type=ANTOINE&Plot=on>