

B419111 이운성.

4.1 (c) 이문제의 특이점에 대해서 논하시오.

이문제는 $x_e=1$ 일때는 `solve_ivp`의 Method 지정치인 RK45로는 풀리지 않는다.
따라서, Method = 'LSODA'로 방법을 바꾸면 수치해를 구할 수 있다.

<4.2문제를 풀기앞서, 그이유에 대해서 찾아보았다.>

미분방정식은 미분방정식은 stiff equation 과 non-stiff equation 으로 나뉜다. stiff equation 은 step size 를 매우 작게하지않으면, 수치해를 풀기 힘든 미분방정식을 말한다. 일반적으로 stiff equation 은 급격한 값의 변화를 일으키는 항을 가지고 있다고 한다.

4.1 과 4.2 은 초기값 또는 미분방정식에 따라서 stiff equation 이기 때문에, RK45 방법으로 풀지 못한다.

scipy 의 solve_ivp reference'를 찾아보면, 다음과 같은 설명이 있다.

"Runge-Kutta('RK23', 'RK45', 'DOP853')은 non-stiff problems 에 사용되어야하고, 'Radau'와 'BDF'는 stiff problem 에 사용되어야한다." 라고한다.

'RK45'로 solve_ivp 를 실행시켰을 때, 반복횟수가 높거나 실패하는 경우에는 'Radau', 'BDF', 'LSODA'를 사용하라고 공식문서에서 권고하고 있다.

1. https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.solve_ivp.html

4.2 문제도 'RK45'로는 풀리지않기 때문에, 'Radau' 방법으로 미분방정식을 풀었다.

4.2 에 대한 해답과 별개로 정말로 'Radau' 방법으로 적절한 해를 찾는지 알고싶어서, 문제의 근간이 되는 ROBERTSON problem 에 대해서 검색하여, 책에서 로그스케일로 그려놓은 그래프와 파이썬을 통해 내가 그린 그래프를 문제 풀기 앞서서 비교해보았다.

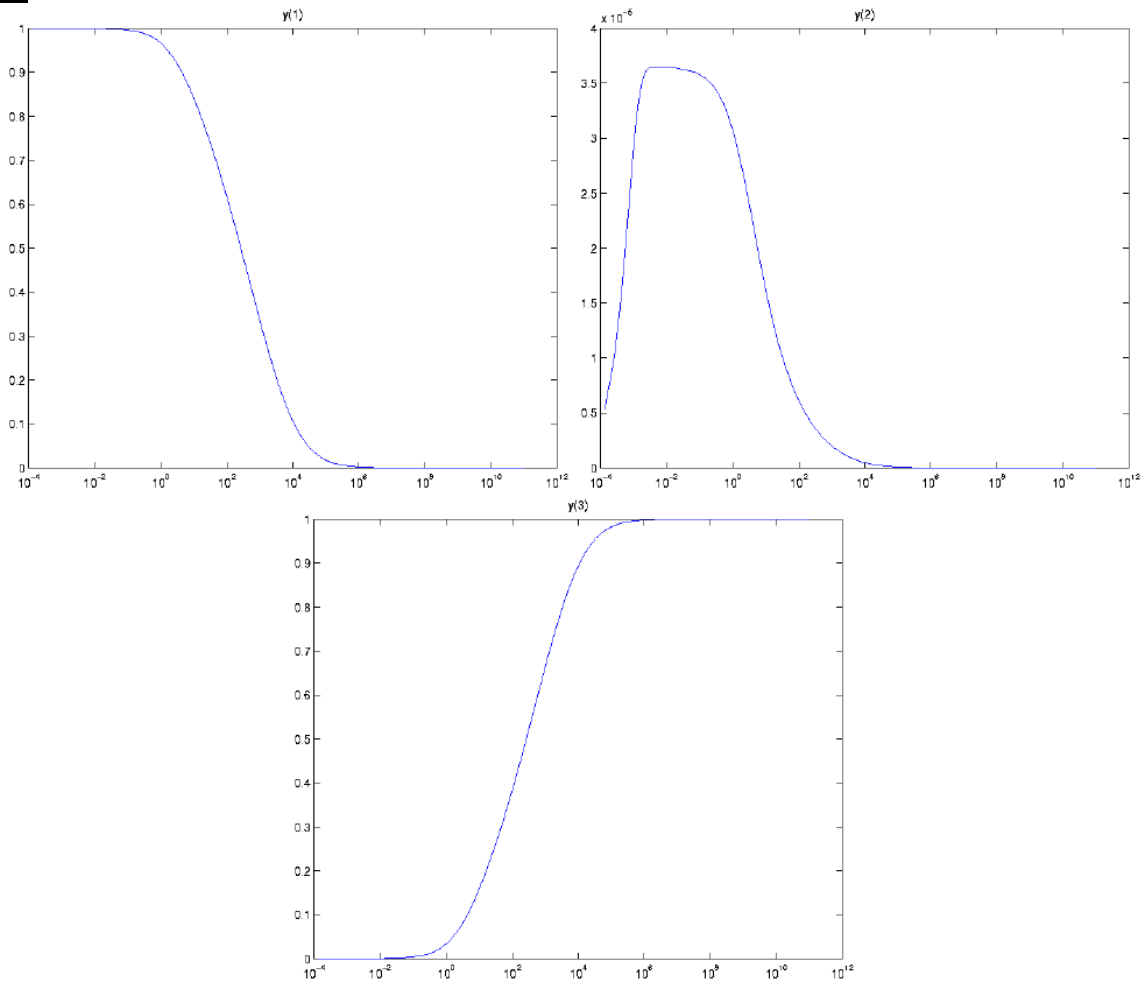


Figure1. ROBERTSON problem 의 로그스케일 그래프

Figure1 에서 좌측 상단부터 CA, CB, CC 의 농도를 x 축을 로그스케일로하여 그린 그래프이다.

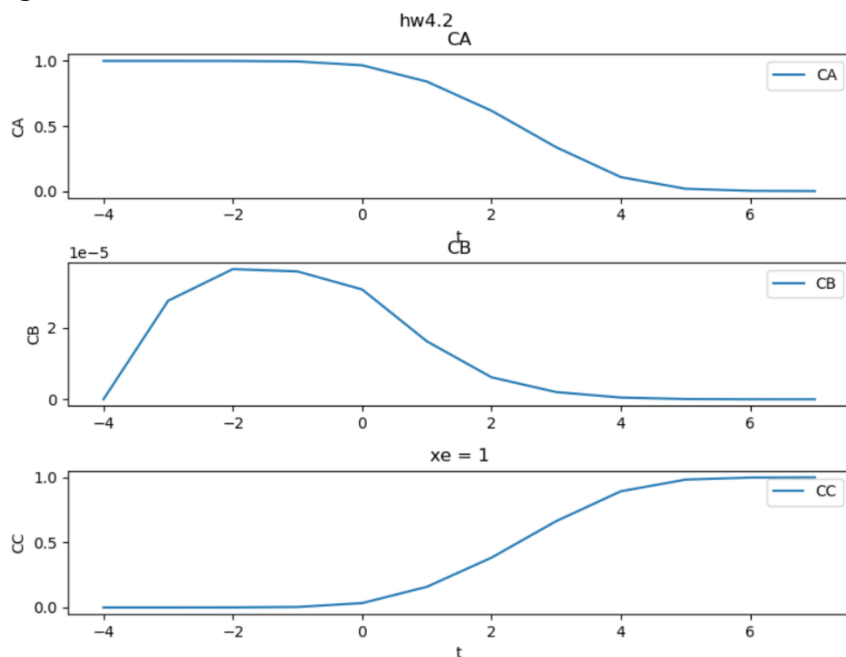


Figure2. 과제에서 주어진 문제를 'Radau'법으로 풀고, 로그스케일 그래프로 그림

두 그래프의 개형이 대략적으로 일치하는 것을 확인하였고, 'Radau'법에 확신을 갖고 문제에 접근할 수 있었다.

4.3

(a) (1)식의 ψ 를 구하여라

ψ 는 상수, t 값에 관계없이 동일하다.

(3)식에서 $\frac{dC_B}{dt} = r_1 - r_2 - r_3$ 는 준정상상태에 의해 $r_1 - r_2 - r_3 = 0 \dots ①$

$t=0$ 일때, ①식은 $k_1 C_{A(0)} - k_2 C_{B(0)} C_{C(0)} - k_3 \{C_{B(0)}\}^2 = 0 \dots ②$

$C_{A(0)}=1, C_{B(0)}=\psi, C_{C(0)}=0$ 이므로, ②번식은

$$\psi^2 = \frac{k_1}{k_3} \dots ③$$

$$\psi = \sqrt{\frac{0.04}{3 \times 10^7}} = 3.6515 \times 10^{-5}$$

(소수점 5번째 자리에서 반올림함)

(c) 화학 반응식은 $A \rightleftharpoons B + C$ 였고, 4.2에서 A는 줄고, C는 증가하는 그래프를 구했었다.

준정상상태로 값을 구해 그래프를 그려보니, t 가 $0 \sim 2$ 사이에서는

A와 C의 그래프가 많이 일치하지만, 그이후에는 A의 농도와 C의 농도 모두 증가하는 그래프가 그려졌다.

따라서, 준정상상태로 근사시켜서 미분방정식을 풀면 특정발위($0 \leq t \leq 2$)에서만 실제해와 근접한 값을 얻는다는 것을 알 수 있다.

(d)

	횟수(배수)		계산시간(배수)	
	hw4.3(준정상상태)	hw4.2	hw4.3(준정상상태)	hw4.3(준정상상태)
"Radau"	3.6 배		5.3 배	
"LSODA"	4.8 배		3.5 배	
"BDF"	2.8 배		2.0 배	

solve_ivp의 다양한 방법을 시도하여, hw4.3를 기준으로 hw4.2의 nfev 횟수와 시간의 배수를 구하였다. 각각 3번씩 실행하여 평균값을 계산하였다. 두 값이 일정한 비율로 증가하지 않기 때문에, 비례하지 않지만, 양의 상관관계를 가진다.