

Osnovna numerična orodja

Kemijsko inženirstvo 2

Iskanje ničel funkcij

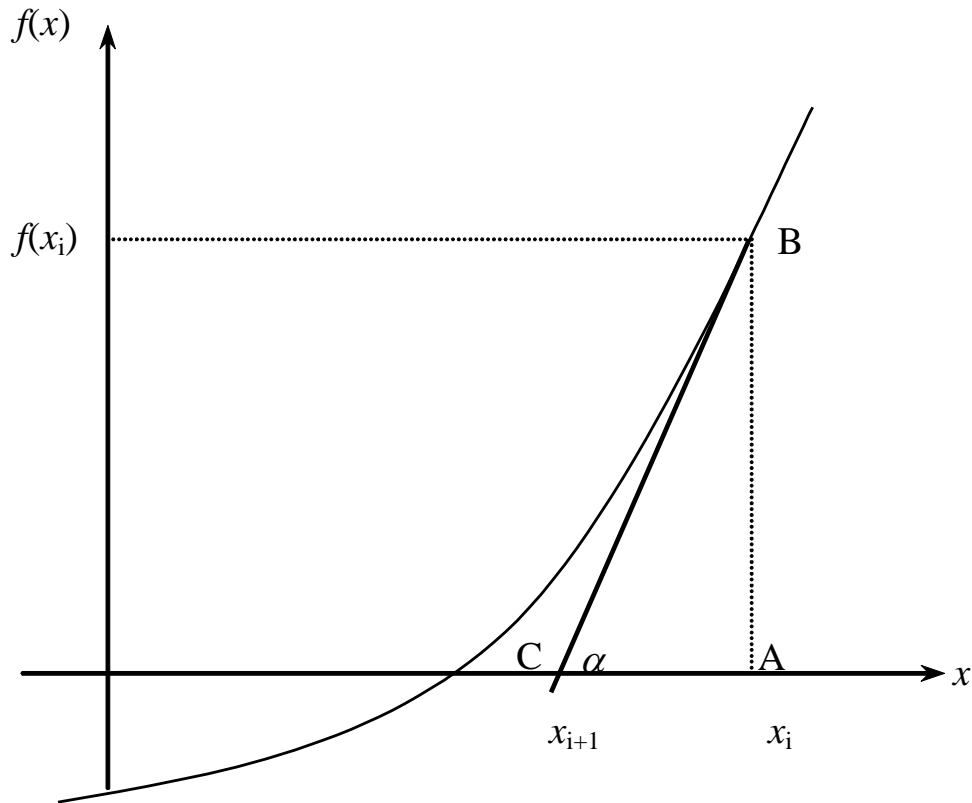
(Vir: Plazl in Lakner: Uvod v
modeliranje procesov)

Iskanje ničel (korenov) funkcij

- Newton-ova metoda
- Sekantna metoda
- Bisekcijska metoda



Newton-ova metoda

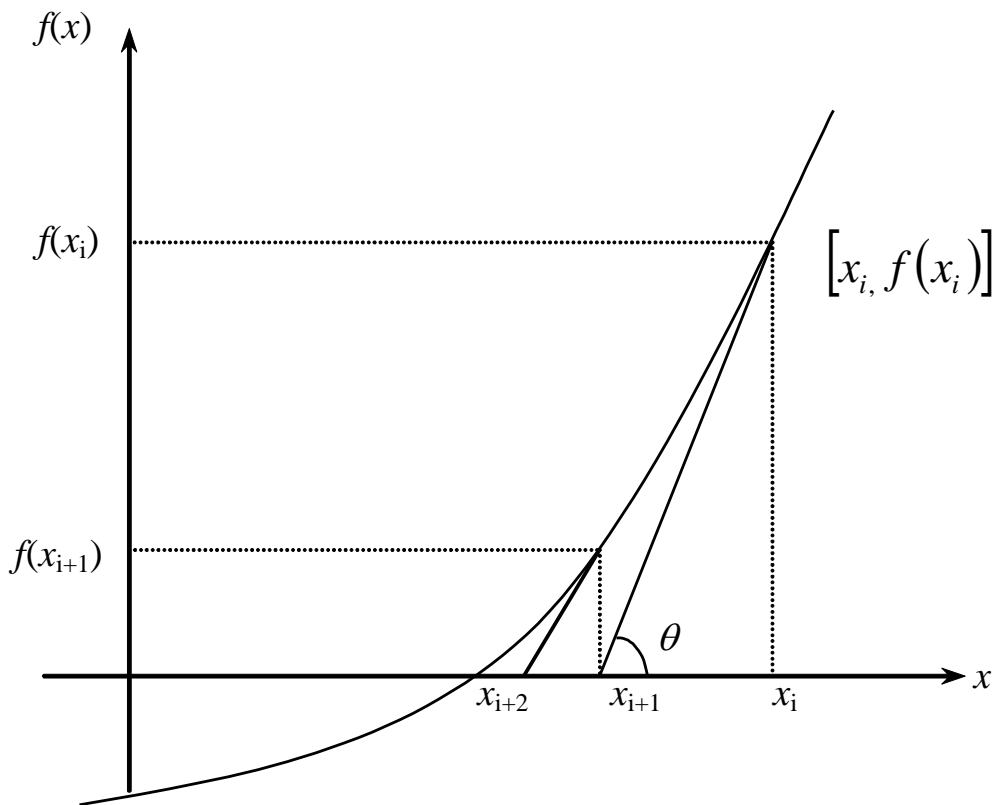


$$\tan(\alpha) = \frac{AB}{AC}$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i)}{x_i - x_{i+1}}$$

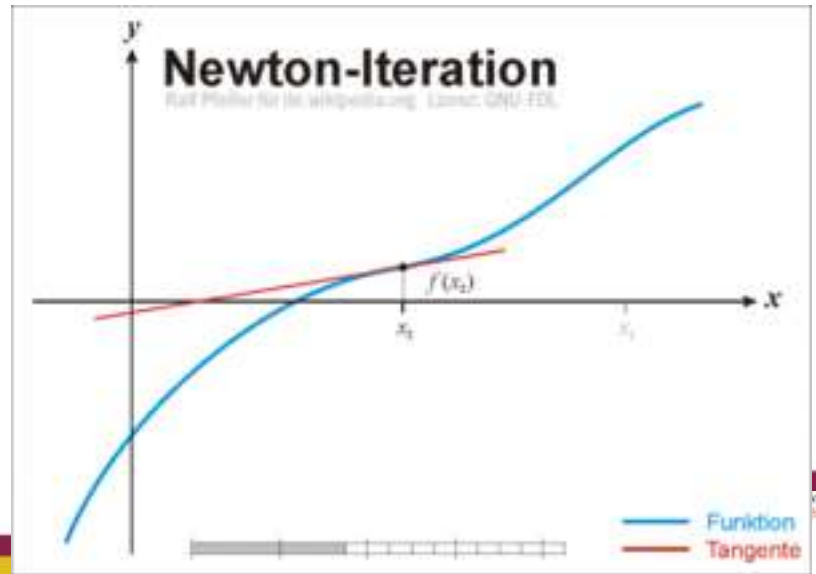
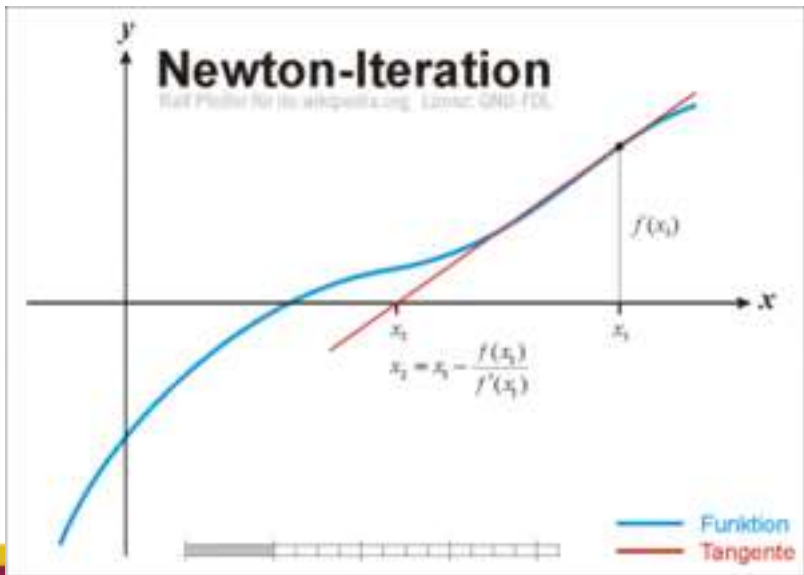
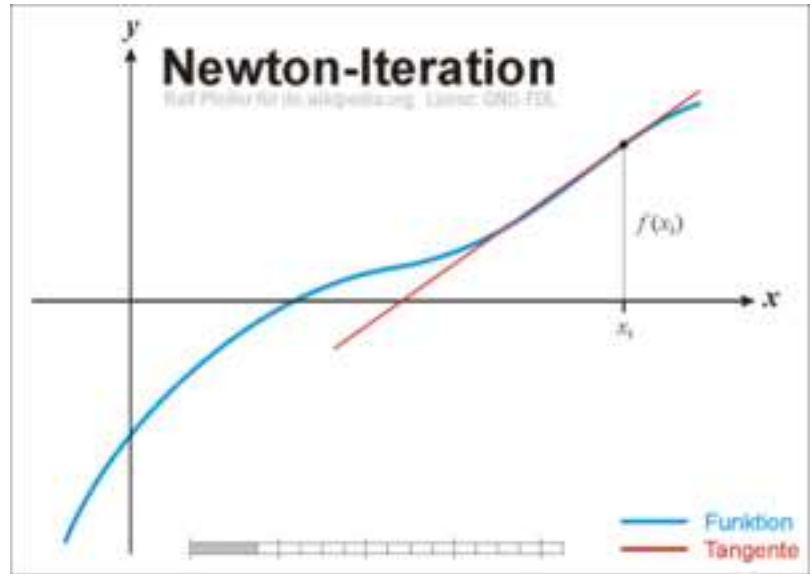
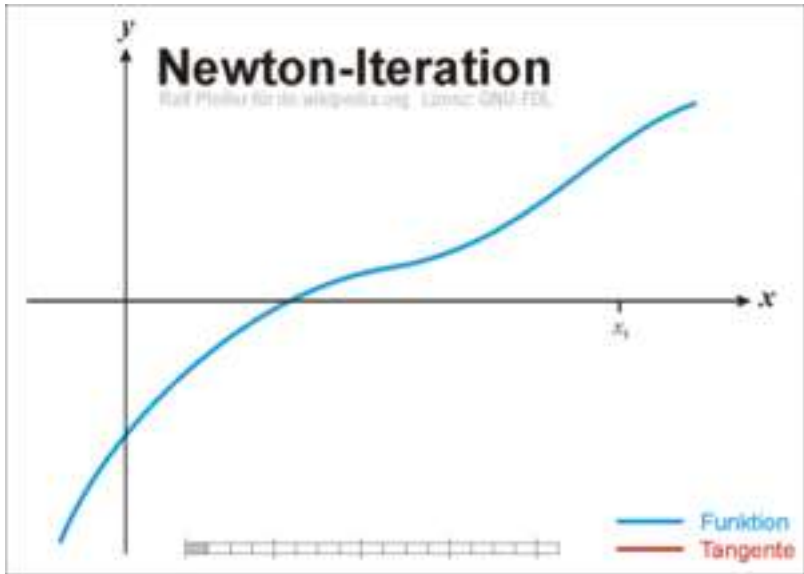
$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

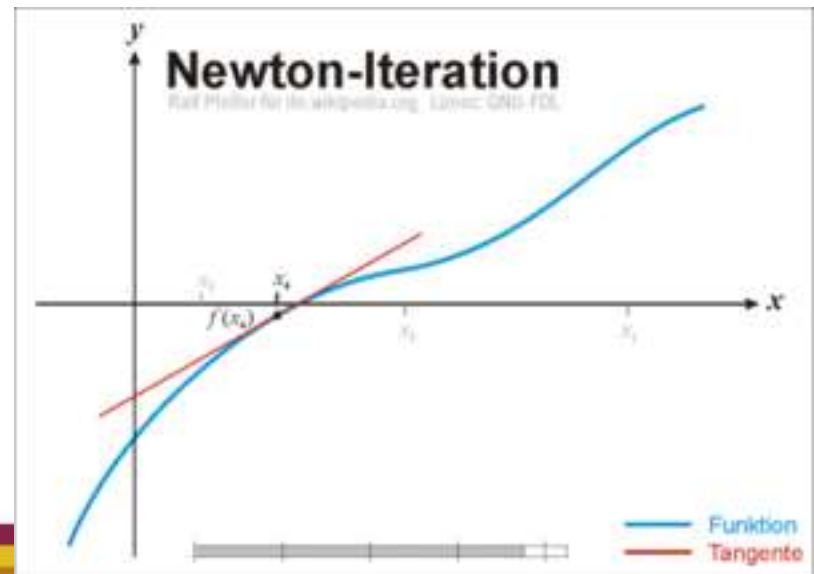
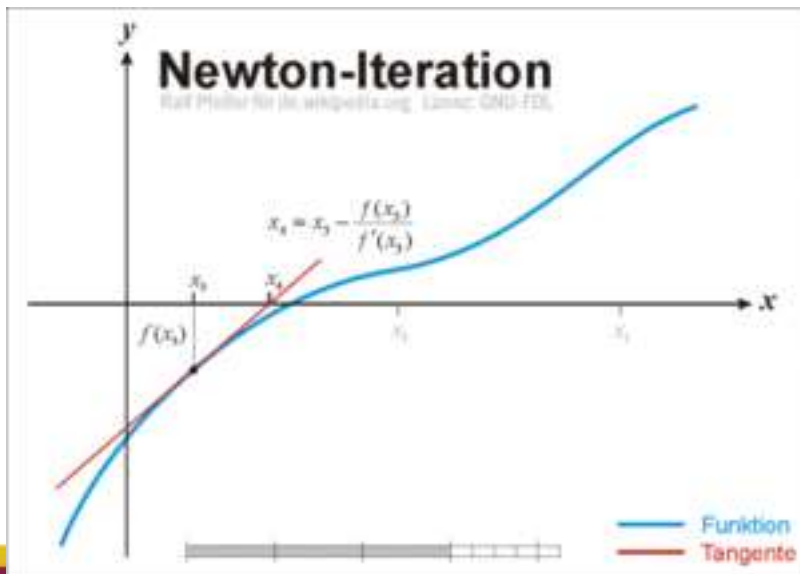
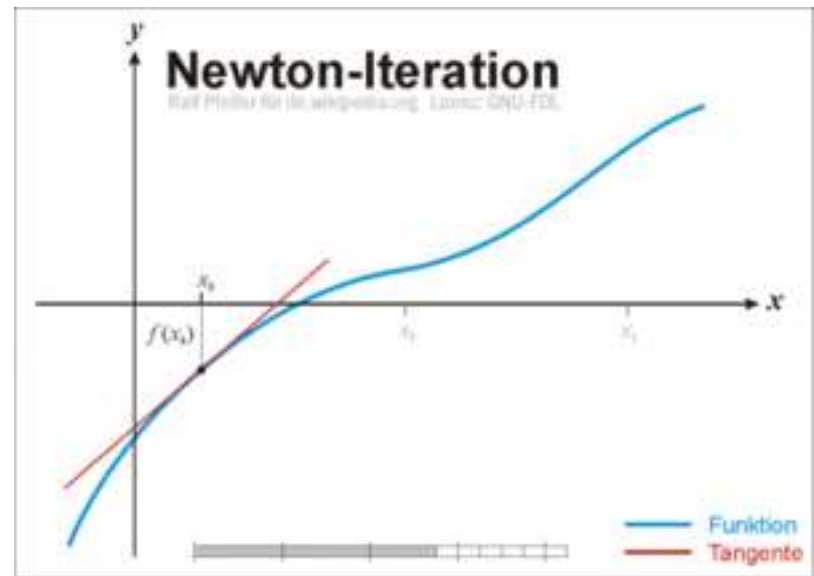
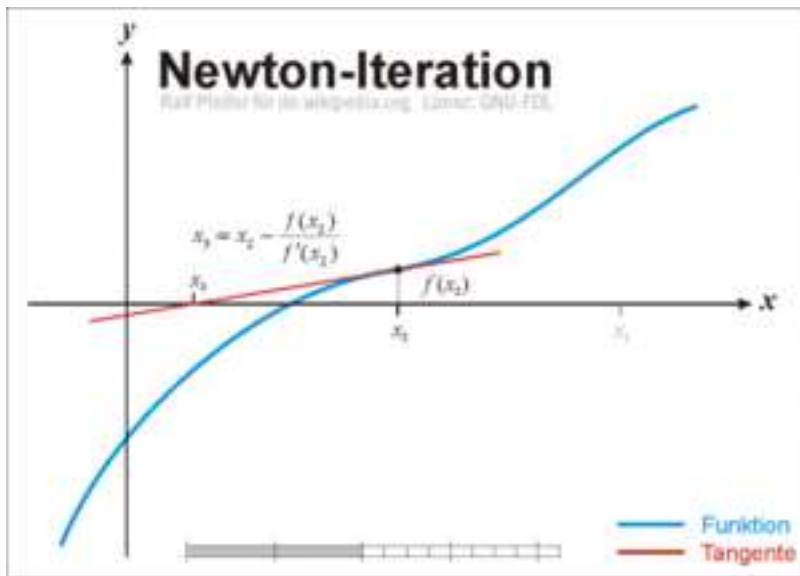


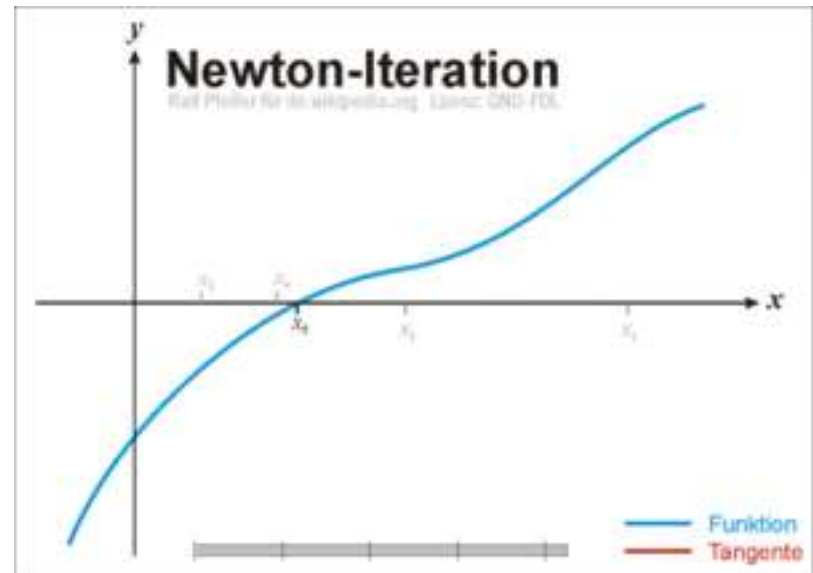
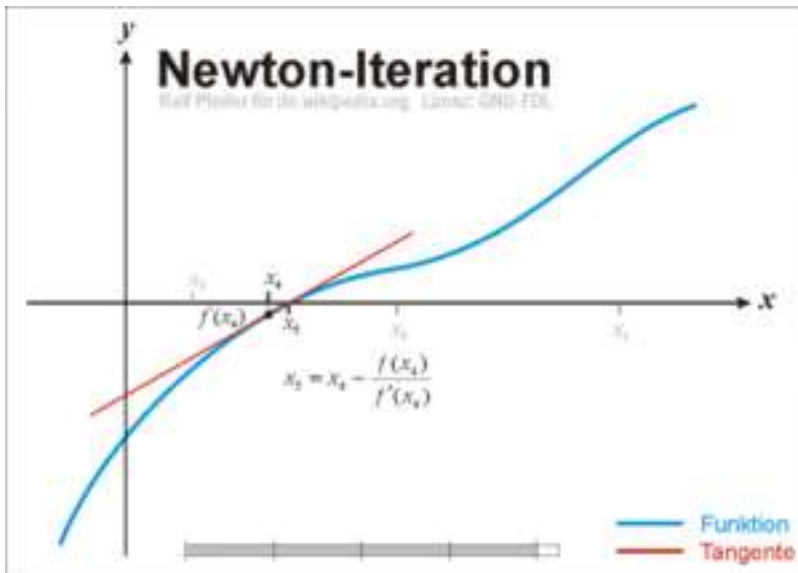


$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$









Postopek

1. Določimo odvod funkcije $\rightarrow f'(x)$
2. Izberemo začetni približek rešitve, x_i , da bi določil naslednjo vrednost, x_{i+1}

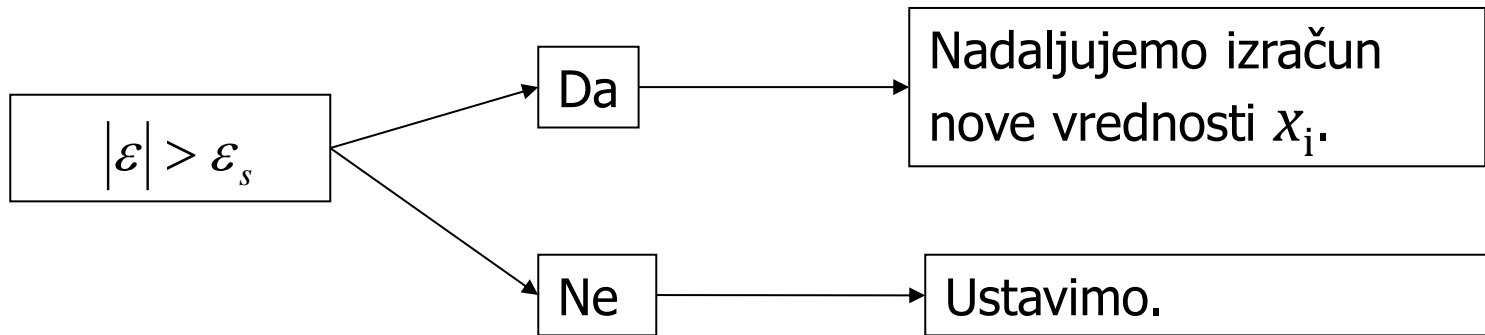
$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

3. Poiščemo absolutno vrednost relativne napake približka $|\mathcal{E}|$

$$|\mathcal{E}| = \left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right| \times 100$$



4. Preverimo, ali je $|\mathcal{E}|$ manjši ali enak predpisani dopuščeni napaki.



Primer: Obnašanje realnega plina

- Stisljivost, z :

$$z = PV/RT \quad (\text{za idealni plin velja } z = 1)$$

predstavlja koristen podatek o obnašanju plina in odklonu od idealnosti.

- Z izračunom specifične prostornine resničnega plina po Beattie-Bridgeman-ovi enačbi stanja določimo stisljivost za **metan** pri 0° C in 200° C za tlake: 1, 2, 5, 10, 20, 40, 60, 80, 100, 120, 140, 160, 180 ter 200 atm. Rezultate primerjajmo z izmerjenimi vrednostmi.
- Podatki za metan (P (atm), V (L/gmol), 1 gmol metana \approx 16 g, T (K), $R \approx 0,08205 \text{ L atm/gmol K}$).



Enačba stanja (Beattie-Bridgeman)

$$P = \frac{RT}{V} + \frac{\beta}{V^2} + \frac{\gamma}{V^3} + \frac{\delta}{V^4}$$

$$\beta = RTB_0 - A_0 - \frac{Rc}{T^2}$$

$$\gamma = -RTB_0b + A_0a - \frac{RcB_0}{T^2}$$

$$\delta = \frac{RB_0bc}{T^2}$$

Metan

A_0	2.2769
B_0	0.05587
a	0.01855
b	-0.01587
c	$12.83 \cdot 10^4$

Problem:

Kako izračunati prostornino resničnega plina pri določenem tlaku in temperaturi?



Reševanje enačbe stanja

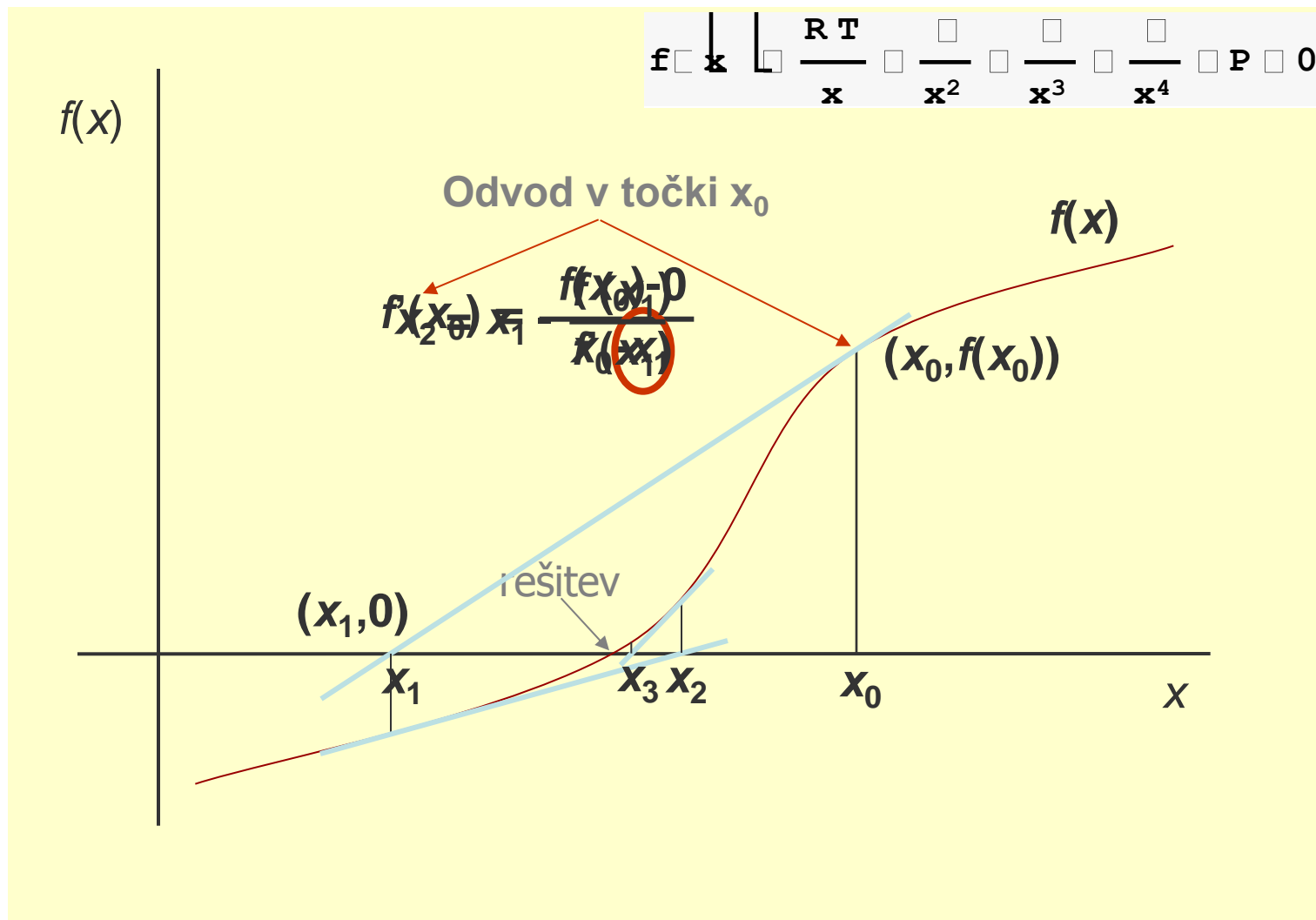
- Analitična rešitev

(... s pomočjo izbranega računskega orodja)

```
Solve |  $P = \frac{RT}{V} + \frac{a}{V^2} + \frac{b}{V^3} + \frac{c}{V^4}, V$ 
```

- Numerična rešitev (Newton-Raphson-ova metoda)

Grafičen prikaz Newton-Raphson-ove metode



Newton-ova metoda (Newton-Raphson)

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{f(\mathbf{x}_k)}{f'(\mathbf{x}_k)}$$

$(\mathbf{x}_k, f(\mathbf{x}_k))$

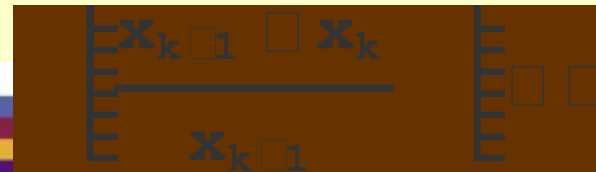
naklon = $f'(\mathbf{x}_k)$

$$\frac{f(\mathbf{x}_k) - 0}{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}} = f'(\mathbf{x}_k)$$

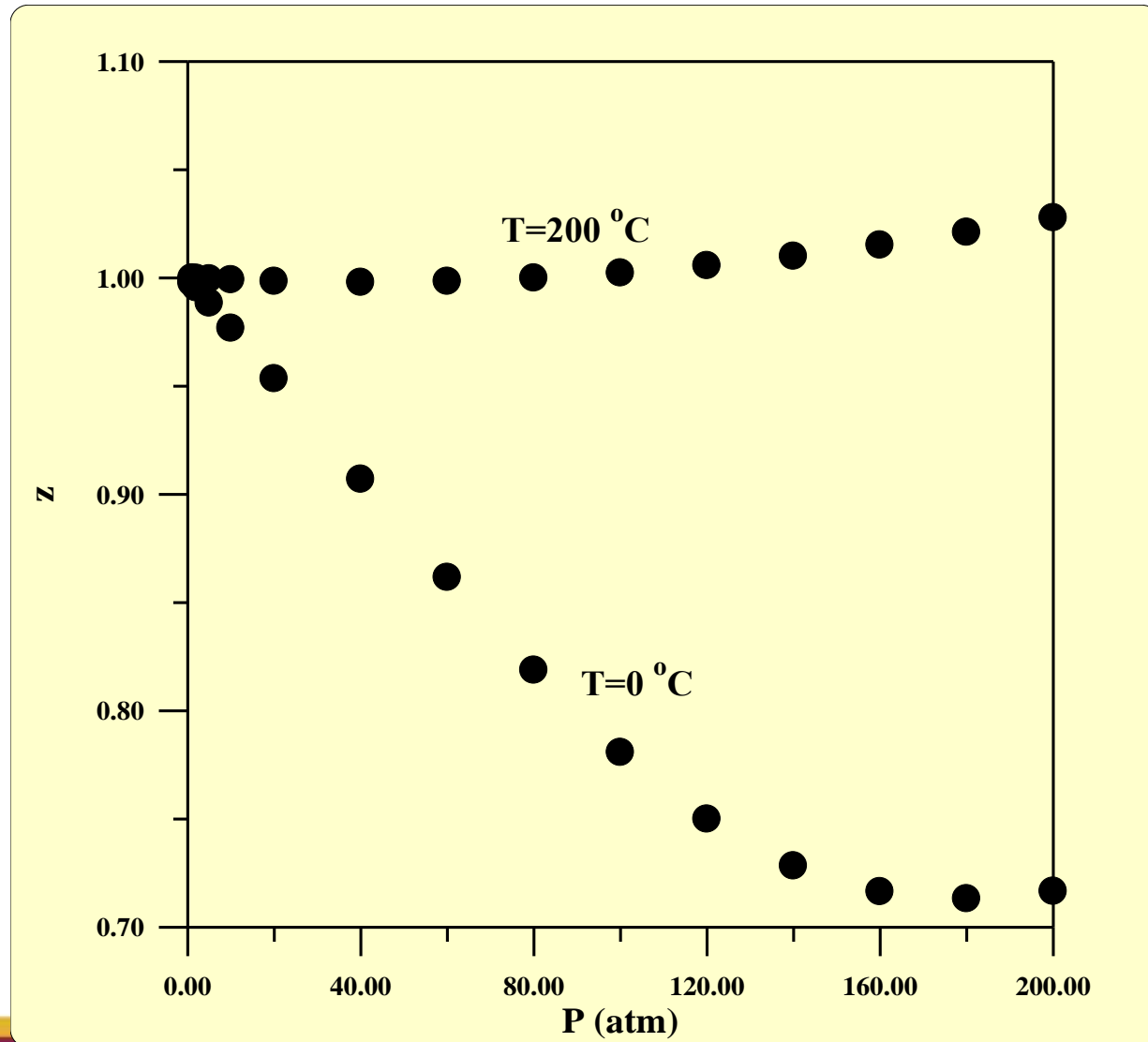
\mathbf{x}_{k+1}

\mathbf{x}_k

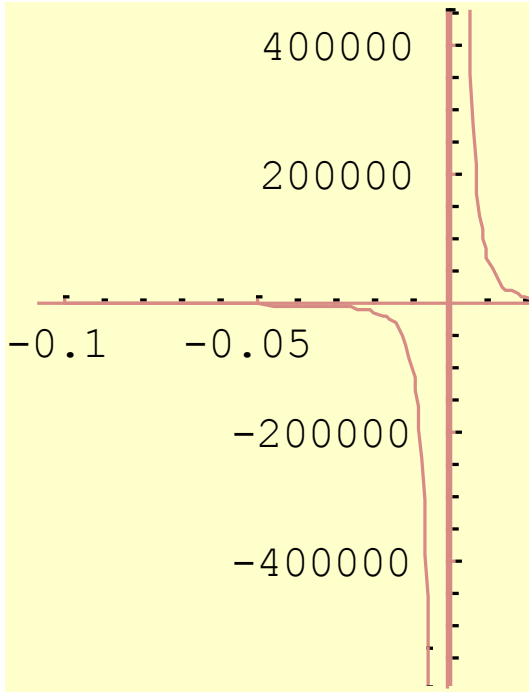
...ponavljamo, dokler



Stisljivost metana pri 0 °C in 200 °C

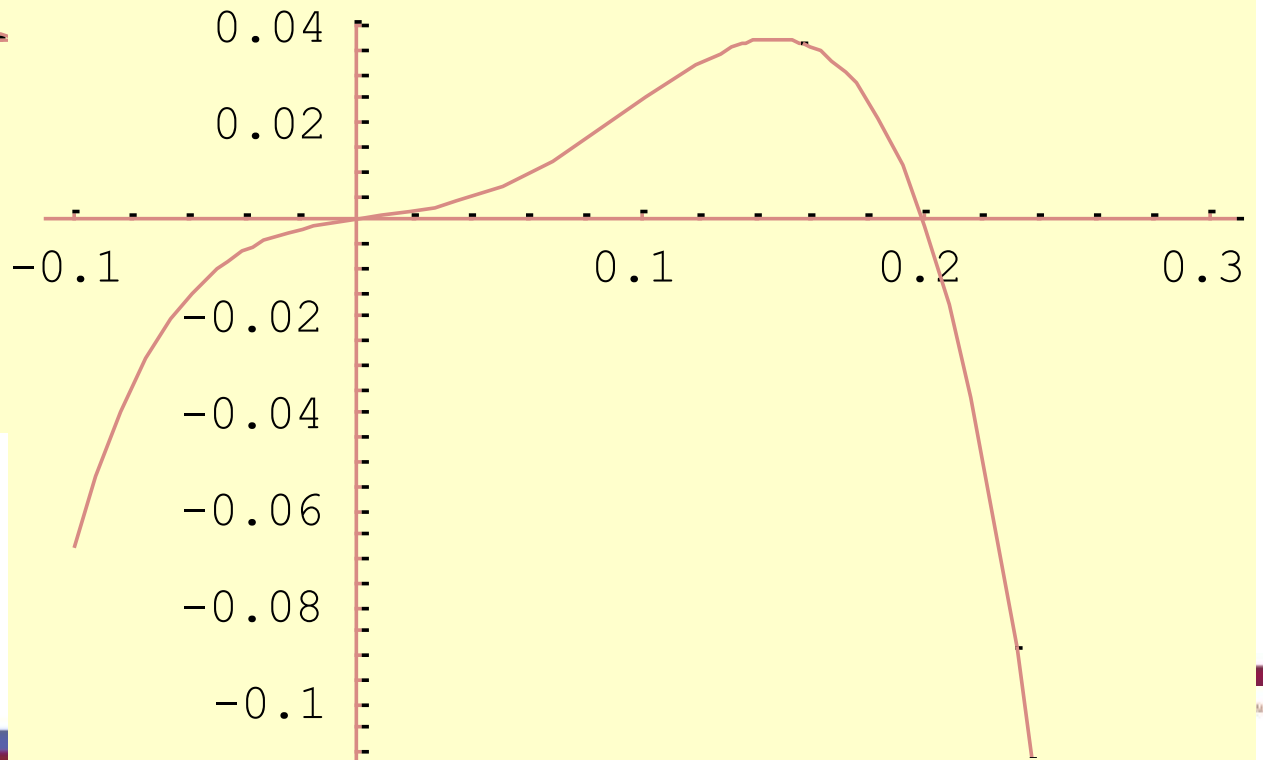


$$f \sim \frac{RT}{V} - \frac{RT}{V^2} + \frac{RT}{V^3} - \frac{RT}{V^4} + P$$

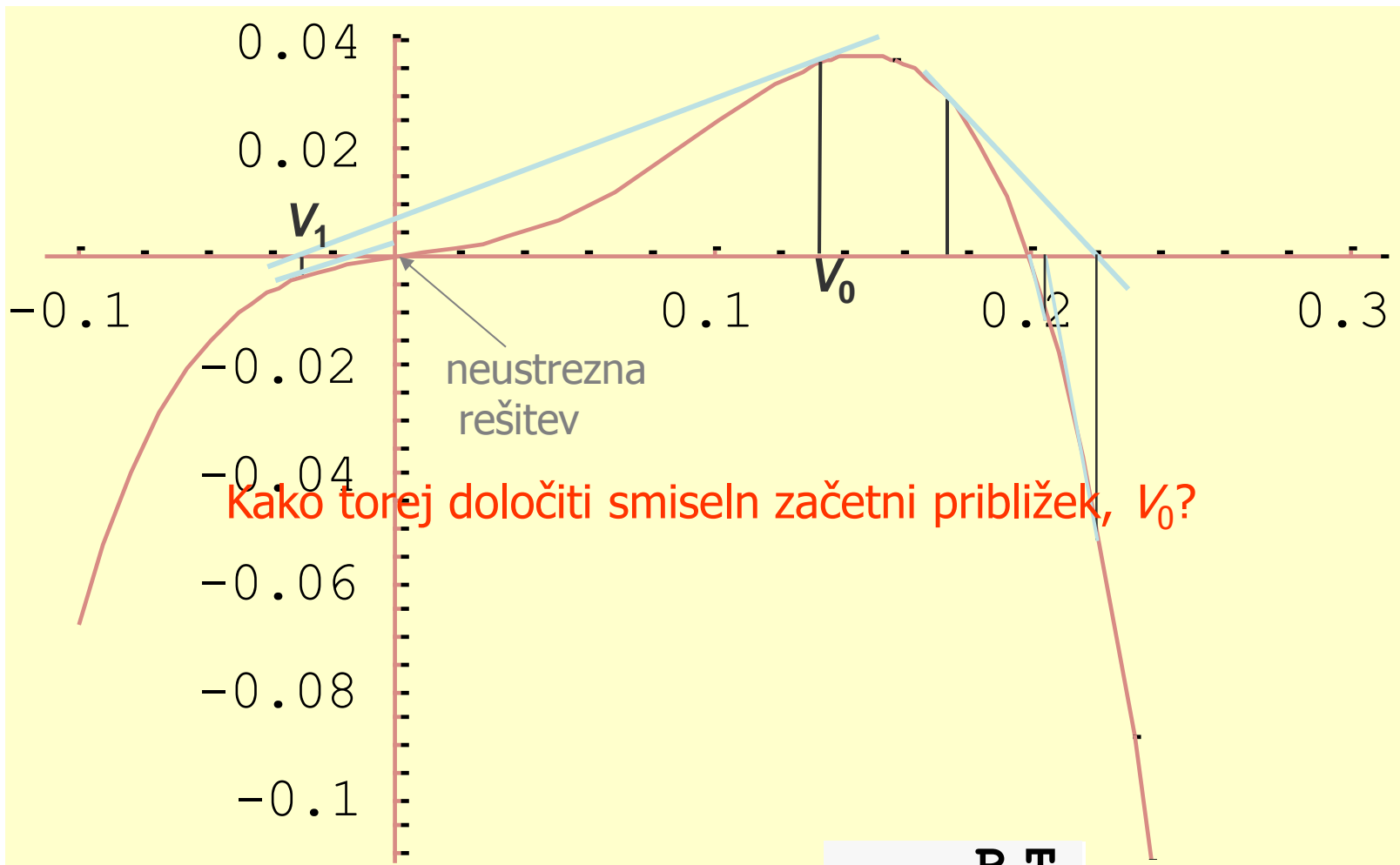


$$f_1 \sim \frac{RT}{V^3} - \frac{RT}{V^2} + \frac{RT}{V} - P$$

Leitwert verschwindet?



$$f_1 \quad \sqrt{\quad} \quad \square \quad R T V^3 \quad \square \quad V^2 \quad \square \quad V \quad \square \quad \square \quad P V^4$$



V našem primeru je smiselna izbira: $V_0 \square \frac{R T}{P}$



Iskanje ničel (korenov) funkcij

- Newton-ova metoda
- Sekantna metoda
- Bisekcijska metoda

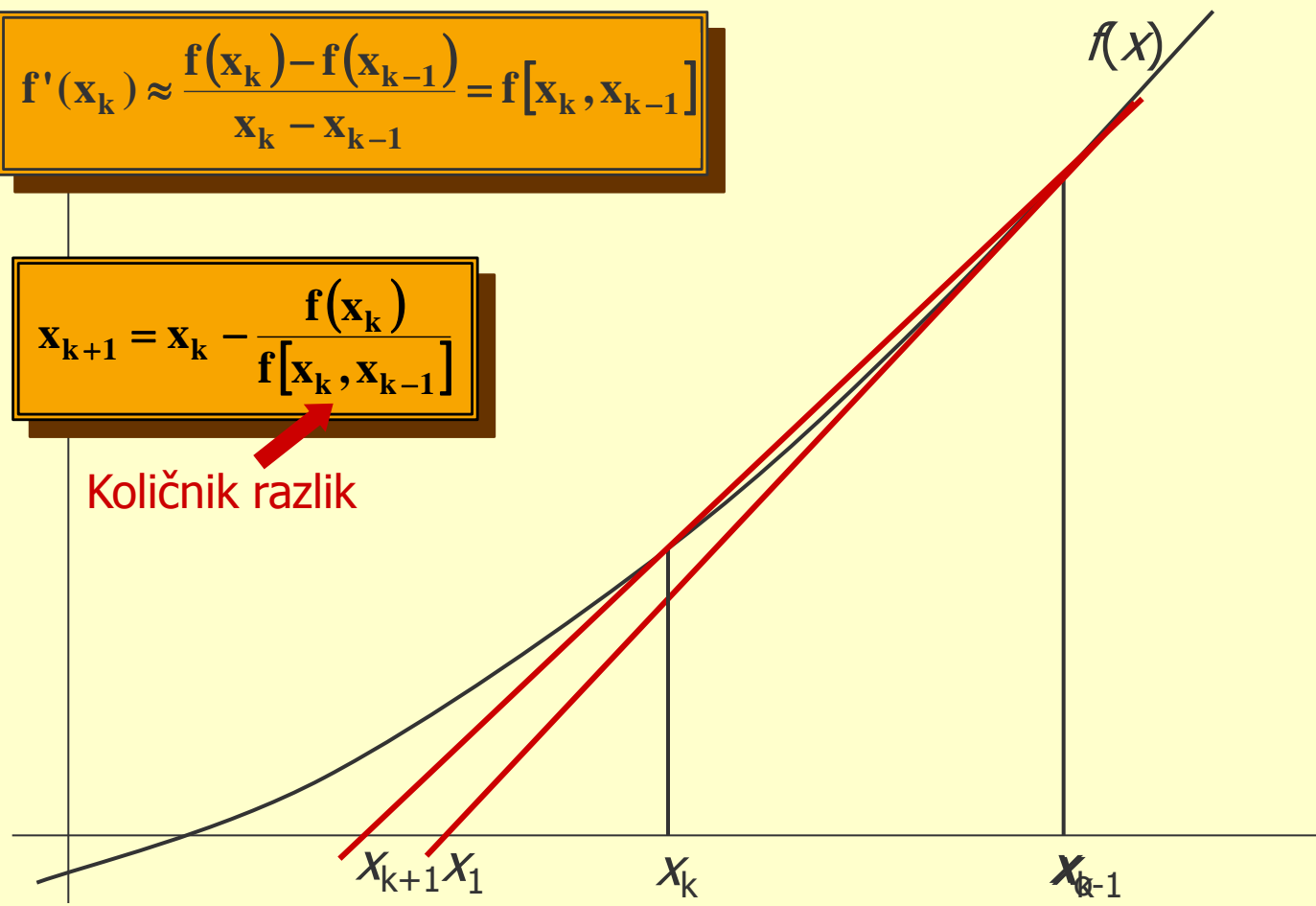


Sekantna metoda

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}} = f[x_k, x_{k-1}]$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f[x_k, x_{k-1}]}$$

Količnik razlik



- Primer

- uporabimo sekantno metodo za iskanje ničel naslednje funkcije

$$\mathbf{f(x) = x^2 - 3}$$

Za začetni vrednosti vzemimo $x_0 = 1$ in $x_1 = 2$. Rešitev:

$$\sqrt{3} = 1.7320508575\dots$$

Iskanje ničel (korenov) funkcij

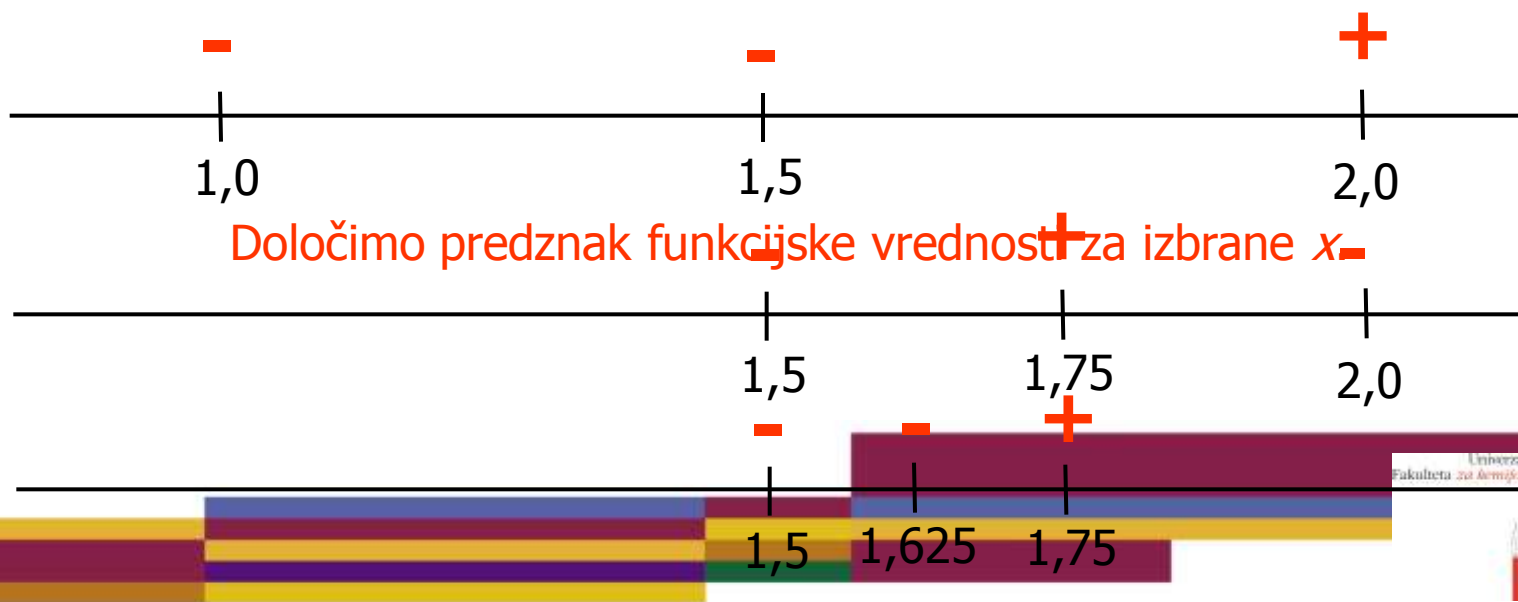
- Newton-ova metoda
- Sekantna metoda
- Bisekcijska metoda



Bisekcijska metoda

- Naravna in učinkovita metoda iskanja ničel. Osnovna ideja metode bisekcije je uporaba ne-numeričnega iskanja ničel.
- Postopek reševanja na primeru (začetni vrednosti $x_0 = 1$ in $x_1 = 2$):

$$f(x) = x^2 - 3$$



- Postopek bisekcije:

```
fa:=f(a); fb:=f(b);  
c:=a+0.5*(b-a);  
while a<c<b do  
    fc:=f(c);  
    if sign(fc) = sign(fa) then  
        a:=c; fa:=fc  
    else  
        b:=c; fb:=fc  
    end if;  
    c:=a+0.5*(b-a)  
end while
```



Primer

- Poiščimo ničle naslednje enačbe:

$$x = e^{-x}$$

