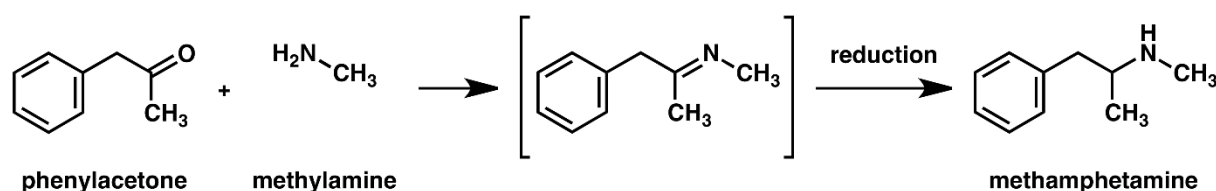


Znajdowanie miejsc zerowych funkcji metodą Netwona

Porażka! To zbyt mało powiedziane by opisać rezultat pierwszego testu pułapki na zombie. Najwidoczniej ktoś nie dopilnowała dziedziczenia zmiennych i pułapka została źle wyregulowana a teraz samorzutnie zamienia zombie w kalafiory!!! I nikt nie ma pojęcia jak ją zatrzymać! Wojsko ma podjąć próbę bombardowania by nie dopuścić do zastąpienia jednej apokalipsy drugą. W międzyczasie nie masz za wiele do roboty i postanawiasz pomóc swojemu znajomemu chemikowi Walterowi w jego pracy nad produkcją różnego rodzaju substancji rozrywkowych.

Ponieważ nie jesteście chemikami, próbuje wyjaśnić wam problem najprościej jak się da: Wykorzystywany przez niebo sposób syntezy metaamfetaminy przedstawia poniższa reakcja chemiczna:



dla ułatwienia opiszmy ją jako $A + B \rightarrow C \rightarrow D$, dla naszych obliczeń możemy uprościć je nawet do: $A + B \rightarrow D$, nie pytajcie jak. Wystarczy, że można. Walter potrzebuje waszej pomocy w obliczaniu stężenia równowagowego składników po reakcji.

Chcąc obliczyć stężenie równowagowe substancji po przeprowadzonej syntezie należy rozwiązać poniższą stałą równowagi:

$$K = \frac{[D]}{[A][B]}$$

gdzie $[A]$, $[B]$, $[D]$ to wykorzystywany przez chemików sposób zapisywania stężenia danej substancji, a K to po prostu stała reakcji. Jeżeli początkowe stężenie substancji A i B wynosiło odpowiednio $[A]_0$ i $[B]_0$ powyższe równanie możemy zapisać jako:

$$f([D]) = \frac{[D]}{([A]_0 - [D])([B]_0 - [D])} - K$$

Aby obliczyć stężenie równowagowe wystarczy po prostu znaleźć miejsce zerowe tej funkcji. Przyjmij, że stężenie początkowe składnika A i B były sobie równe.

Zadanie do wykonania

1. Napisz program do obliczania miejsca zerowego funkcji metodą Newtona. Do pierwszego obliczenia, przyjmij początkowe stężenie składnika A i B jako $2 \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$, początkową wartość $[D] = 1$ i stałą reakcji $K = 0.25 \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$. Warunkiem końca iteracji będzie krok metody mniejszy od 10^{-6} .
2. Przygotuj program, który obliczy stężenia równowagowe dla $[A]_0 = [B]_0 = c_0$ w zakresie od 2 do 10 $[\text{mol}/\text{dm}^3]$. Program powinien wypisywać dane, które posłużą do utworzenia wykresu $[D] = [D](c_0)$ i $[B] = [B](c_0)$.
3. Z przyczyn chemiczno-technicznych, otrzymaną mieszturę najłatwiej będzie oczyścić w przypadku, gdy stężenie $[D] = [B]$. Dla jakiej wartości c_0 uda się to uzyskać?
4. Dla $c_0 = 2$ przygotuj tabelę, w której zawrą się: położenia kolejnych przybliżeń; krok metody; wartość funkcji; oraz wartość jej pierwszej pochodnej. Wyżej wspomniane obliczenia i tabele wykonaj dla różnych początkowych wartości $[D]$ w zakresie od 0 do 2. Jak będzie zależęć ilość wymaganych operacji i przebieg działania metody w zależności od wybranego miejsca początkowego?

Metoda Newtona

Metoda Newtona pozwala na iteracyjne znalezienie kolejnych przybliżeń miejsca zerowego funkcji jednej zmiennej za pomocą wyrażenia:

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

gdzie x_{i+1} to kolejne przybliżenia miejsca zerowego.

W naszym przypadku, obliczenia będziemy wykonywać tak długo, aż krok funkcji: $|x_{i+1} - x_i| > 10^{-6}$.

Pochodną funkcji w punkcie x możemy wyliczyć za pomocą iloczynu różnicowego w przód:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

gdzie h to krok iloczynu. Z przyczyn technicznych warto by ten krok był mniejszy od granicznego kroku metody Newtona. Z moich testów wynika, że 10 razy mniejszy od granicznego kroku będzie OK.