

Metody numeryczne w fizyce

Laboratorium 3

*W pliku mnf_103.zip znajdziesz skrypty ilustrujące definiowanie funkcji w Matlabie oraz wykorzystanie uchwytów do funkcji (**function_handle**) na przykładzie funkcji **ezplot**.*

1. Zapoznaj się z dokumentacją funkcji **fzero**. Wykorzystując tę funkcję wyznacz miejsca zerowe przykładowych funkcji (zwróć uwagę, że funkcje mogą mieć więcej niż jedno miejsce zerowe).
2. W definicji wybranej przykładowej funkcji z zad. 1 dodaj polecenia, które spowodują zaznaczenie na wykresie punktu o współrzędnych będących: argumentem wywołania funkcji oraz wartością funkcji i zatrzymają działanie programu (funkcja **pause**). W ten sposób prześledź działanie funkcji **fzero**. Skomentuj obserwacje.
3. W dokumentacji funkcji **fzero** zwróć uwagę na zwracaną wartość **exitflag**. Zaproponuj przykładowe uruchomienia funkcji **fzero**, które pozwolą zademonstrować różne sposoby zakończenia jej działania.

Własne implementacje algorytmów

4. Zaimplementuj funkcję wyznaczającą miejsce zerowe metodą bisekcji, która przyjmuje jako argumenty uchwyt do funkcji oraz dwuelementowy wektor oznaczający przedział początkowy. Przeanalizuj możliwe kryteria determinujące dokładność wyznaczenia miejsca zerowego.
5. Zaimplementuj funkcję wyznaczającą miejsce zerowe metodą siecznych, która przyjmuje jako argumenty uchwyt do funkcji oraz dwuelementowy wektor oznaczający przedział początkowy. Przeanalizuj możliwe kryteria determinujące dokładność wyznaczenia miejsca zerowego.
6. Zaimplementuj funkcję wyznaczającą miejsce zerowe metodą Newtona, która przyjmuje jako argumenty uchwyty do dwóch funkcji (obliczającej wartość wyrażenia oraz pochodną wyrażenia) oraz skalar oznaczający punkt początkowy. Przeanalizuj możliwe kryteria determinujące dokładność wyznaczenia miejsca zerowego.
7. Wykorzystując funkcję **fzero** oraz własne implementacje algorytmów wyznacz miejsce zerowe wielomianu z zadania 5 listy 2. Przetestuj działanie w zależności od postaci wielomianu i wartości punktu/przedziału początkowego.

Równanie van der Waalsa wiąże ze sobą ciśnienie (P), objętość (V) oraz temperaturę (T) dla N moli gazu rzeczywistego:

$$\left(P + \frac{N^2 a}{V^2} \right) (V - Nb) = NRT,$$

gdzie a i b są stałymi dla danego gazu.

8. Wykorzystując funkcję **fzero** oraz własne implementacje algorytmów wyznaczania miejsc zerowych wyznacz objętość gazu przy zadanych parametrach:

- $P = 1,0133 \cdot 10^5 \text{ [N} \cdot \text{m}^{-2}\text{]},$
- $T = 303 \text{ [K]},$
- $a = 0,3640 \cdot 10^{-12} \text{ [J} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-2}\text{]},$
- $b = 42,67 \cdot 10^{-6} \text{ [m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}\text{]},$
- $N = 0,22722 \text{ [mol]}.$

Przykład zaczerpnięty z P. Krzyżanowski, Obliczenia inżynierskie i naukowe, PWN 2011, powtórzony za Ł. Ponikiewski, Prawa gazowe, Politechnika Gdańska ([link](#)).

Karol Tarnowski
Wrocław, 2022