

ZADANIA

(II rok chemii podstawowej i chemii z informatyką – 2010/2011)

1. Dane są trzy parametry obarczone szacowanymi błędami maksymalnymi:

$$a = 88 \pm 3$$

$$b = 44 \pm 2$$

$$c = 110 \pm 4$$

Oblicz maksymalne błędy bezwzględne i względne wyrażeń: $(a-b)/c$, $a*b/c$.

2. Wyznaczono stężenia 2 substratów i 2 produktów reakcji $A + B \rightarrow C + D$. Uzyskano następujące wyniki: $[A] = 0,25 \pm 0,01$; $[B] = 0,60 \pm 0,03$; $[C] = 0,75 \pm 0,03$; $[D] = 0,40 \pm 0,02$.

Oblicz wartość oraz błąd względny i bezwzględny stałej równowagi K danej wzorem:

$$K = ([C]*[D]) / ([A]*[B])$$

3. Wykonaj 2 kroki poszukiwania metodą Newtona miejsca zerowego wielomianu:

$$W_2(x) = 3x^2 + x - 10$$

przyjmując jako punkt startowy $x_0 = -4$.

4. Wykonaj 3 kroki poszukiwania metodą bisekcji miejsca zerowego wielomianu:

$$W_2(x) = 2x^2 + x - 6$$

w przedziale $[-7, 1]$.

5. Korzystając z metody siecznych oblicz miejsce zerowe wielomianu:

$$W(x) = x^4 - 16$$

przyjmując jako punkty startowe $x_0 = 1,7$ i $x_1 = 1,8$. Zakończ obliczenia, gdy bezwzględna wartość funkcji będzie mniejsza od 0,02.

6. Oblicz całkę oznaczoną z funkcji $f(x) = 2 - x^4$ w przedziale $x \in \langle -2, +2 \rangle$ analitycznie i metodą Simpsona. W obliczeniach numerycznych przyjmij długości kroku $h = 2$ i 1 . Korzystając z metody ekstrapolacji Richardsona oblicz poprawiony wynik numeryczny. Metoda Simpsona daje błąd rzędu h^4 .

7. Oblicz całkę oznaczoną z funkcji $f(x) = 2 - x^2$ długości kroku $h = 2$ i 1 . Korzystając z metody ekstrapolacji Richardsona w przedziale $x \in \langle -1, +1 \rangle$ analitycznie i metodą trapezów. W obliczeniach numerycznych przyjmij oblicz poprawiony wynik numeryczny. Metoda trapezów daje błąd rzędu h^2 .

8. Oblicz całkę oznaczoną z funkcji $f(x) = 1 + \cos(x)$ w przedziale $x \in \langle -\pi/2, +\pi/2 \rangle$ analitycznie, metodą trapezów i metodą Simpsona. W obliczeniach numerycznych przyjmij długość kroku $h = \pi/2$. Skomentuj wyniki.

	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0
F(x)	0,0	1,5625	9,0	27,5625	64,0

9. Metodą różnic centralnych dla kroków $h = 0,5$ i $1,0$ oszacuj w punkcie $x = 2,0$ wartości pierwszej pochodnej funkcji stabilizowanej w powyższej tabeli. Korzystając z metody ekstrapolacji Richardsona oblicz poprawiony wynik numeryczny wiedząc, że metoda różnic centralnych daje błąd rzędu h^2 .

10. Zależność między y i x dana jest równaniem różniczkowym

$$\frac{dy}{dx} = 2x + 1$$

Oblicz numerycznie wartość y dla $x = 3$, jeżeli $y = 1$ dla $x = 0$. Obliczenia prowadź z krokiem $\Delta x = 1$.

11. Macierz ortogonalna \mathbf{Q} i macierz \mathbf{A} mają postać:

$$\mathbf{Q} = 0,5 \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 \\ 1 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 1 \\ 3 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Oblicz macierz \mathbf{B} przekształconą przez podobieństwo z macierzy \mathbf{A} przy pomocy macierzy \mathbf{Q} . ($\mathbf{B} = \mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q}$)

12. Oblicz elementy macierzy \mathbf{x} danej wzorem:

$$x = (\mathbf{J}^T * \mathbf{J})^{-1} * \mathbf{J}^T * y \quad \text{gdzie} \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 0 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad y = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

13. Oblicz poprzez rozwinięcie w szereg Taylora do członów drugiego rzędu wartość funkcji $e^{\cos(x)}$ w punkcie $1,0$, jeżeli znana jest wartość funkcji i odpowiednich pochodnych w punkcie $\pi/3$.

Odpowiedzi:

Zad.1`.

	x	Dx	dk1/dx	dk2/dx
A		88	3 0.009091	0.4
B		44	2 0.009091	0.8
C		110	4 0.003636	0.32

$k1=(a-b)/c=$	0.4	$k2=(a*b)/c$	=	35.2
Dk1=	0.06	Dk2=		4.08
rk1=	0.15	rk2=		0.115909

Zad.2.

	x	Dx	dk/dx
A	0.25	0.01	8
B	0.6	0.03	3.333333
C	0.75	0.03	2.666667
D	0.4	0.02	5

$(c*d)/(a*b)$	
=	2
Dk=	0.36
rk=	0.18

Zad.3.

x	f(x)	f'(x)
-4	34	-23
-2.5217391	6.5557656	-14.1304
-2.0577926	0.645739	-11.3468
-2.0008831	0.0097161	-11.0053
-2.0000002	2.338E-06	-11

Zad.4.

a	b	f(a)	f'(b)	p	f(p)
-7	1	85	-3	-3	9
-3	1	9	-3	-1	-5
-3	-1	9	-5	-2	0

Zad.5.

x	f(x)	est f'(x)
1.7	-7.6479	
1.8	-5.5024	21.455
2.0564624	1.8847578	28.80406
1.9910286	-0.285158	33.16203
1.9996276	-0.011915	31.77642
2.0000025	8.05E-05	31.99112
2	-2.25E-08	32.00006

$$f(x) = x^4 - 16$$

Zad.6.

Całki	Simpson	
h=2	S=	-13.3333
h=1	S=	-5.33333
ekstrapol	S(ekstr)=	-4.8

x	f(x)	f(x) = 2-x^4
---	------	--------------

-2	-14
-1	1
0	2
1	1
2	-14

Zad.7.

Całki trapez
h=2 T= 2
h=1 T= 3
ekstrapol T(ekstr)= 3.333333

x	f(x)	f(x)= 2-x^2
-1	1	
0	2	
1	1	

Zad.8.

Całki trapez Simpson
h=PI/2 T= 4.712389 S= 5.235988

x	f(x)	f(x)= 1+cosx
-1.5707963	1	
0	2	
1.5707963	1	

Zad.9.

x	f(x)
1	0
1.5	1.5625
2	9
2.5	27.5625
3	64

Pochodne

h=1 P= 32
h=0.5 P= 26
ekstrapol T(ekstr)= 24

Zad.10.

i	xi	yi	dy/dx(i)	dy/dx=2x+1 deltax= 1
0	0	1	1	
1	1	2	3	
2	2	5	5	
3	3	10	7	
4	4	17	9	

Zad.11.

Q=	0.5	0.5	0.5	0.5
	0.5	0.5	-0.5	-0.5
	0.5	-0.5	-0.5	0.5
	0.5	-0.5	0.5	-0.5
A=	0	1	0	3
	1	0	3	0

$$\begin{array}{r}
 \begin{matrix} 0 & 3 & 0 & 1 \\ 3 & 0 & 1 & 0 \end{matrix} \\
 Q(T)*A= \begin{matrix} 2 & 2 & 2 & 2 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ -2 & 2 & -2 & 2 \end{matrix} \\
 Q(T)*A*Q= \begin{matrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4 \end{matrix}
 \end{array}$$

Zad.12.

$$\begin{array}{l}
 J= \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 0 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad y= \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} \quad J(T)*J= \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 9 \end{bmatrix}
 \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 J(T)= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad J(T)*y= \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix} \quad \det(JT*J) = 5
 \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 (J(T)*J)-1= \begin{bmatrix} 1.8 & -0.4 \\ -0.4 & 0.2 \end{bmatrix} \quad ((J(T)*J)-1)*J(T)*y= \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}
 \end{array}$$

Zad.13.

$$\begin{array}{l}
 f(x)= \exp(\cos(x)) \\
 f'(x)= (-)\sin(x)*\exp(\cos(x)) \\
 f''(x)= (-)\cos(x)*\exp(\cos(x))+\sin(x)*\sin(x)*\exp(\cos(x))
 \end{array}$$

i	a=pi/3	1.047198	1/i!	x=1		
0	f(a)=	1.648721	1	1	1.648721	
1	f'(a)=	-1.42783	1	-0.0472	0.06739	
2	f''(a)=	0.41218	0.5	0.002228	0.000459	1.716571

dokładna **1.716526**