Δίνεται η εξίσωση της τάσεως ατμών ενός στερεού $\ln\frac{P_s}{1\,\text{atm}} = 5 - \frac{1000\,\text{K}}{T} - 0.3\ln\frac{T}{1\,\text{K}}$.
Να προσδιορισθεί το κανονικό εξαχνώσεως.
<u>Λύση:</u>
Ζητείται η θερμοκρασία στην οποία η τάση ατμών είναι ίση με 1 atm.
Αντικαθιστούμε την τιμή της P_s και λύνουμε ως προς θερμοκρασία. Μπορούμε να διευκολυνθούμε αν χρησιμοποιήσουμε σύμβολα αντί για τους αριθμούς, δηλ. θέτουμε A = 5, B= 1000 K, C = 3, οπότε έχουμε:

$0 = A - \frac{B}{T} - C\ln T$ Η εξίσωση αυτή μπορεί να λυθεί μόνο με προσεγγιστικές, επαναληπτικές μεθόδους. Αν θεωρήσουμε ότι ο όρος ClnT είναι μικρός σε σχέση με τους άλλους δύο, μπορεί να «λυθεί» η εξίσωση ως προς T διατηρώντας το ClnT μέσα στην λύση και βελτιώνοντας συνεχώς την λύση από το αποτέλεσμα των πράξεων.

Συγκεκριμένα: $T = \frac{B}{A - C\ln T}$ (1)

Η πρώτη προεσεγγιστική λύση δίνεται αγνοώντας τον όρο του ClnT, οπότε

$$T = \frac{1000\,\text{K}}{5} = 200\,\text{K}$$

Αντικαθιστώντας την τιμή αυτή στην (Εξ. 1), προκύπτει νεά τιμή:

$T = \frac{1000\,\text{K}}{5 - 0.3\ln 200} = 293.212\,\text{K}$ και από αυτήν:

$T = \frac{1000\,\text{K}}{5 - 0.3\ln 293.212} = 303.423\,\text{K}$ και με νεά αντικατάσταση

$T = \frac{1000\,\text{K}}{5 - 0.3\ln 303.423} = 304.371\,\text{K}$ και μετά

$T = \frac{1000\,\text{K}}{5 - 0.3\ln 304.371} = 304.458\,\text{K}$ ή μετά

$T = \frac{1000\,\text{K}}{5 - 0.3\ln 304.458} = 304.466\,\text{K}$ και τέλος (καθότι συγκλίνει η τιμή)

$T = \frac{1000\,\text{K}}{5 - 0.3\ln 304.466} = 304.467\,\text{K}$

Άλλη μέθοδος διαδοχικών προσεγγίσεων βασίζεται στην σειρά Taylor και ονομάζεται μέθοδος Newton-Raphson.

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x\ ) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x\ )^2 + \frac{1}{6}f'''(x_0)(x - x\ )^3 + \ldots$$

Διατηρώντας μόνο τους 2 πρώτους όρους του αθροίσματος επιδιώκουμε να βρούμε την τιμή του x με την οποία f(x)=0. Επομένως έχουμε:

$$0 = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \Rightarrow x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Εισάγουμε στην τελευταία σχέση δοκιμαστική τιμή του x_0 και προκύπτει νέα τιμή για την μεταβλητή, την οποία επανεισάγουμε στην ίδια σχέση και παρακολουθούμε την σύγκλιση των διαδοχικών τιμών.

Στο συγκεκριμένο πρόβλημα $f(x) = f(T) = A - \frac{B}{T} - C\ln T$, άρα

$$f'(T)=\frac{df(T)}{dT}=\frac{B}{T^2}-\frac{C}{T}$$ και συνολικά $$T=T_0-\frac{A-\frac{B}{T}-C\ln T}{\frac{B}{T^2}-\frac{C}{T}}.$$

Αν δοκιμάσουμε την τιμή $T_0 = 100$ K, η τελευταία σχέση δίνει διαδοχικά τις τιμές T = 165.789, 239.98, 290.32, 303.779, 304.465, 304.467, 304.467 K, δηλ. συγκλίνει και αυτή στην τιμή T = 304.5 K.

Αν επαναλάβουμε την διαδικασία με αρχική τιμή T = 500 K, οι διαδοχικές τιμές του T είναι: 166, 240, 290, 303.787, 304.465, 304.467 K.

6/5/2010