

## 2. 1 변수 방정식

### Single variable equation

1. 사용 예 (Example)

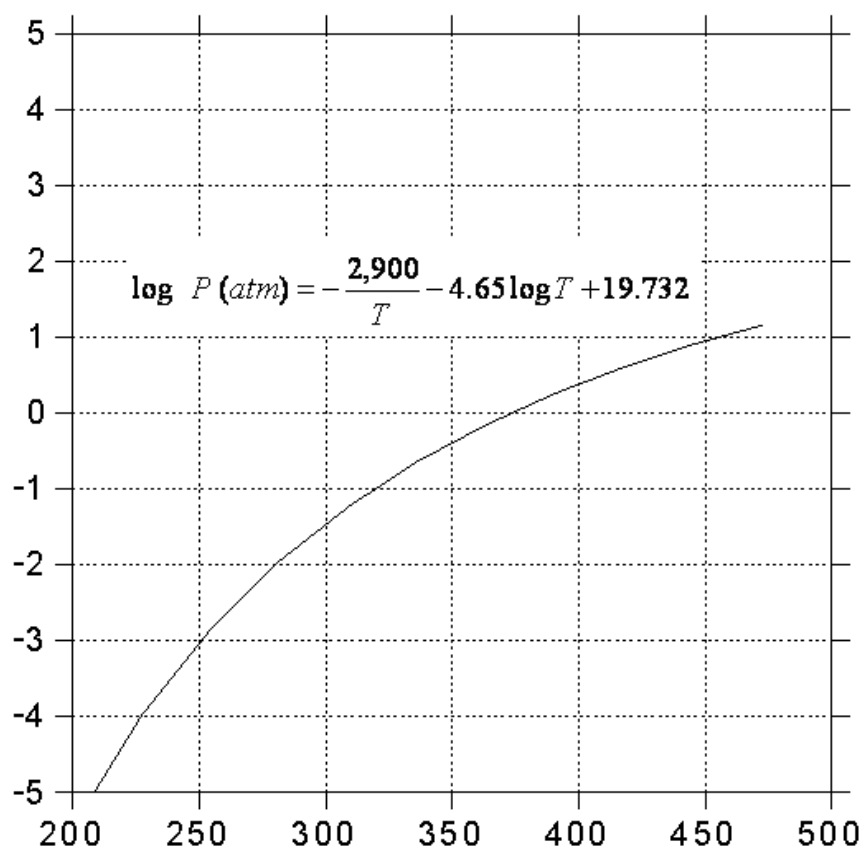
$$\left(\frac{dP}{dT}\right)_{eq} = \frac{\Delta S}{\Delta V} = \frac{\Delta H}{T \Delta V} \approx \frac{\Delta H}{T V_v} = \frac{P \Delta H}{RT^2}$$

$$d \ln P = \frac{\Delta H}{RT^2} dT$$

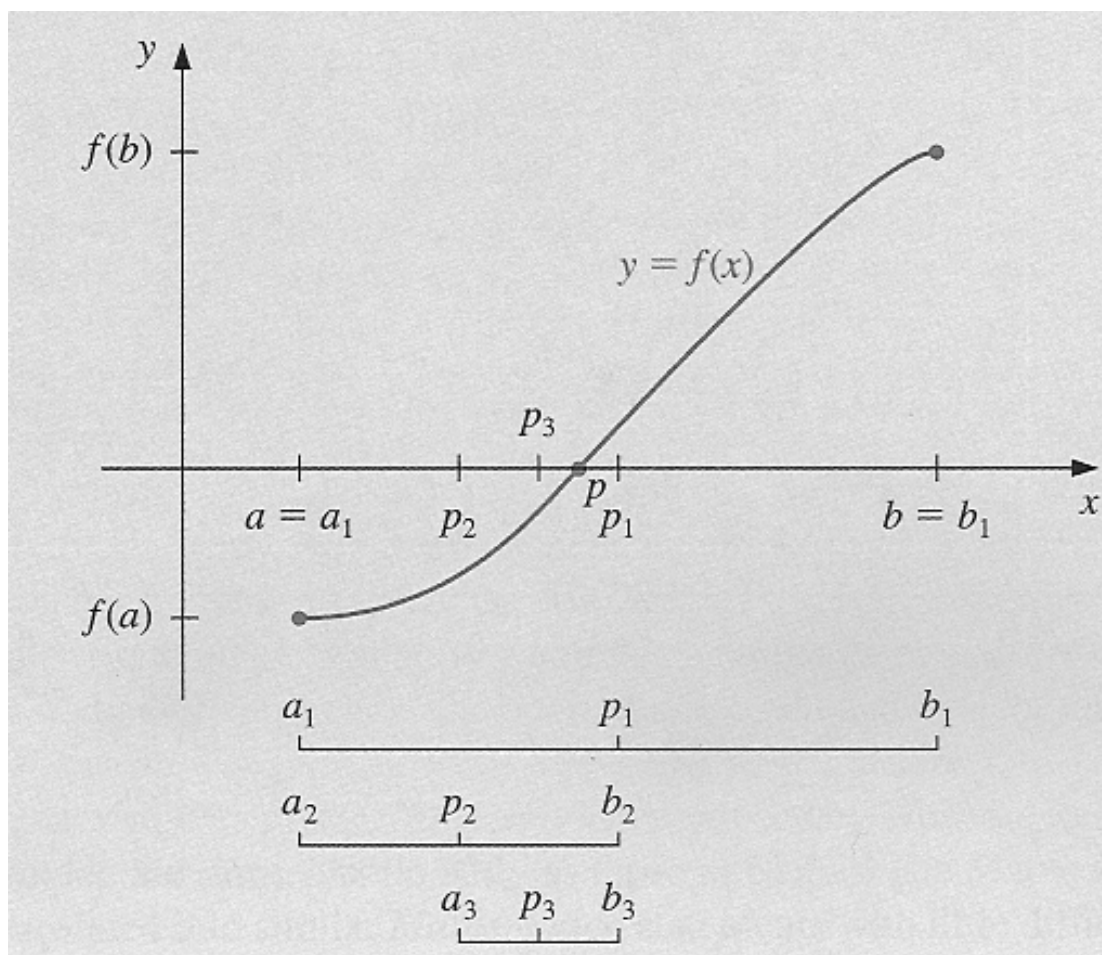
$$\log P (\text{atm}) = -\frac{2,900}{T} - 4.65 \log T + 19.732$$

- 물의 수증기압이 0.5 atm 이 되는 온도를 구하라.

Find the temperature that yields a vapor pressure of 0.5 atm



## 2. Bisection method



```

FUNCTION Bisect(xl,xu,es,imax,xr,iter,ea)
  iter = 0
  fl = f(xl)
  DO
    xrold = xr
    xr = (xl + xu)/2
    fr = f(xr)
    iter = iter + 1
    IF xr ≠ 0 THEN
      ea = ABS((xr-xrold)/xr)*100
    END IF
    test = fl * fr
    IF test < 0 THEN
      xu = xr
    ELSE IF test > 0 THEN
      xl = xr
      fl = fr
    ELSE
      ea = 0
    END IF
    IF ea < es OR iter ≥ imax EXIT
  END DO
  Bisect = xr
END Bisect

```

### 3. Secant method/false Position Method

$$y = f(p_1) + \frac{f(p_1) - f(p_0)}{p_1 - p_0} (x - p_1)$$

$y = 0$  at  $x = p_2$

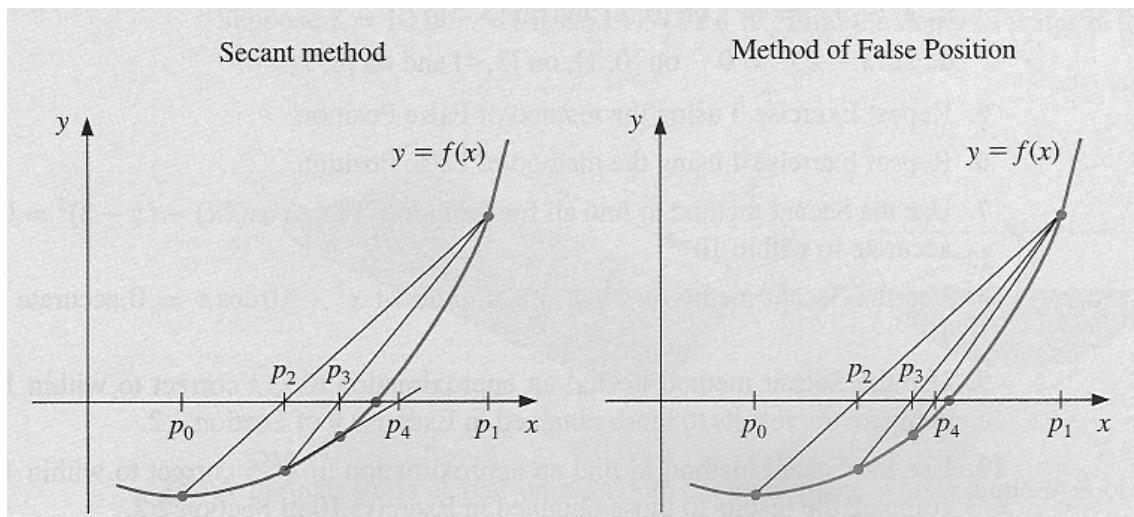
$$p_2 = p_1 - \frac{f(p_1) (p_1 - p_0)}{f(p_1) - f(p_0)}$$

- Secant method

$$p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n) (p_n - p_{n-1})}{f(p_n) - f(p_{n-1})}$$

- False Position method

The same with Secant method but keep  $f(p_n) * f(p_{n+1}) < 0$

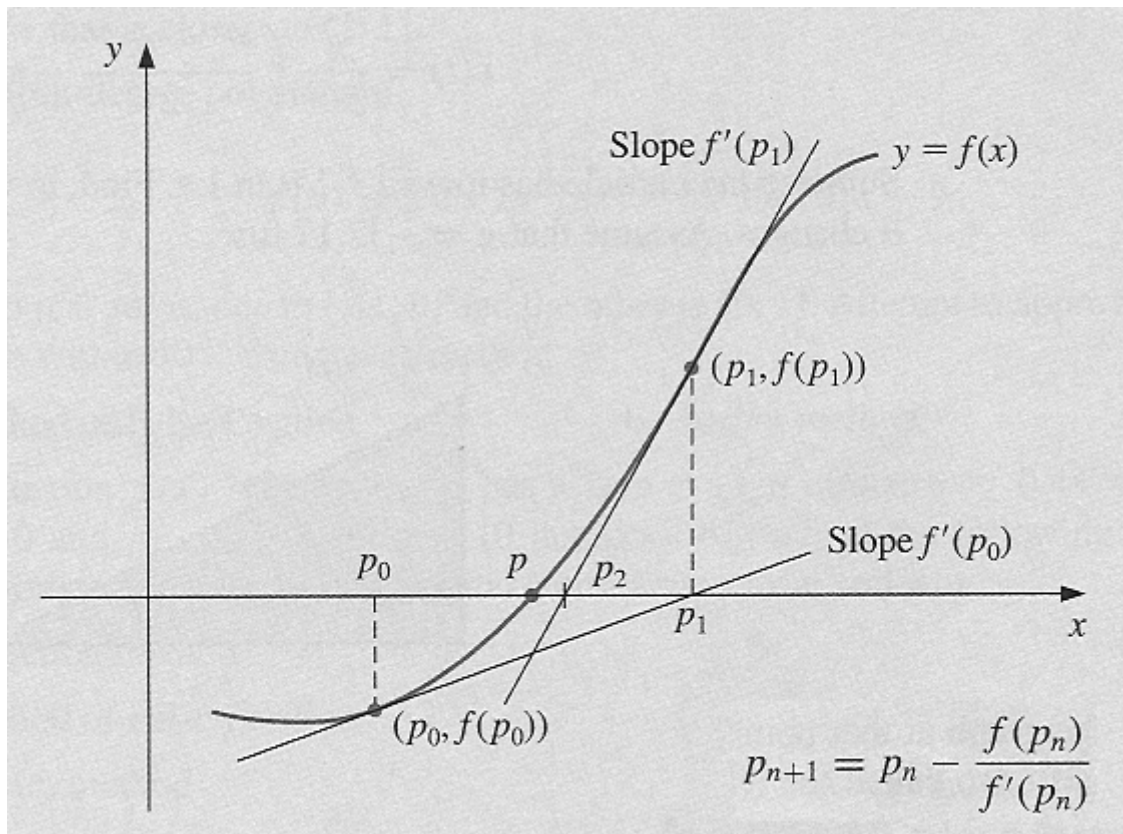


#### 4. Newton's method (Newton-Raphson)

$$y = f(p_0) + f'(p_0) (x - p_0)$$

$$y = 0 \text{ at } x = p_1$$

$$p_1 = p_0 - \frac{f(p_0)}{f'(p_0)}$$



## 5. Other methods

- Fixed Point Iteration

주어진 식을  $x = g(x)$  형태로 변형하고  $x$  계산을 반복

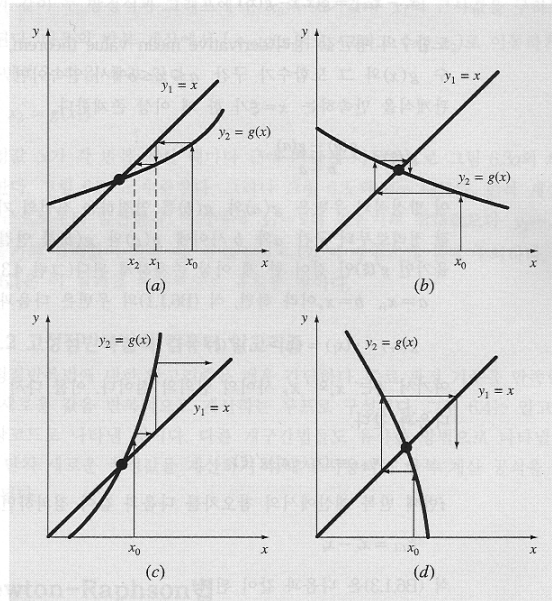
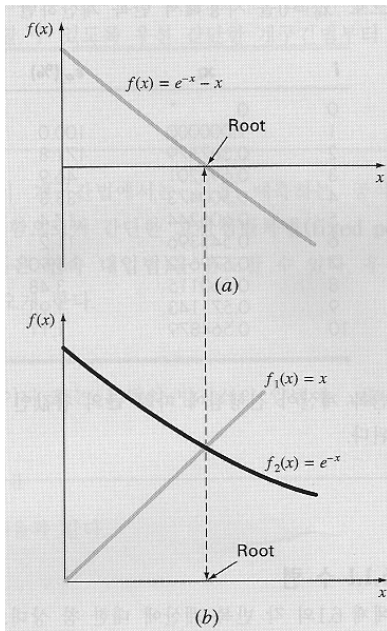


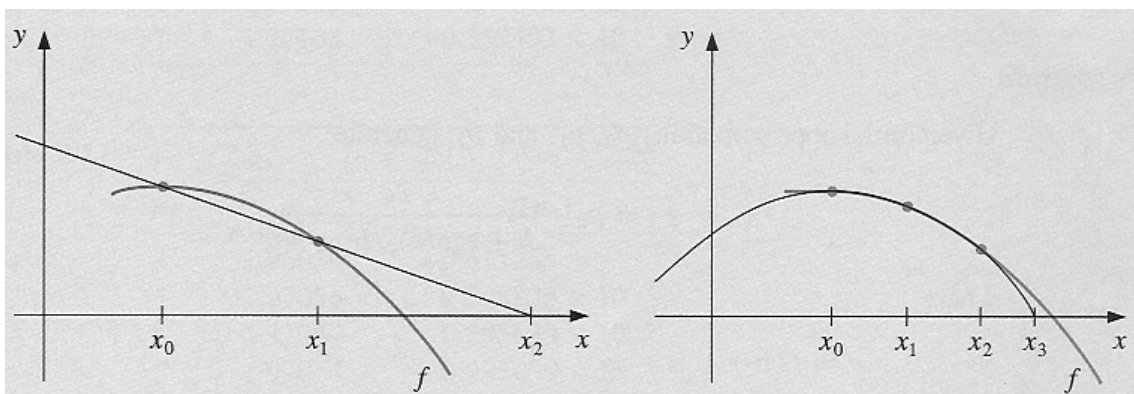
그림 6.3

고정점반복법에서 수렴하거나((a)와 (b)), 발산하는((c)와 (d)) 경우를 그래프로 나타낸 것이다. 그래프 (a)와 (c)는 단조형태라 하고, (b)와 (d)는 진동, 또는 나선형태라고 한다.  $|g'(x)| < 1$ 인 경우 수렴함에 주의하라.

- Müller's Method

Secant method 에서 1 차 곡선 대신 2 차 곡선으로 해에 접근.

$$P(x) = a(x - x_2)^2 + b(x - x_2) + c$$



## 개인 과제물

- Newton-Raphson 법을 포함, 2 개의 방법으로 물의 수증기압이 0.5atm 이 되는 온도를 구하는 프로그램을 완성하고 수렴속도를 비교하시오.

Find the temperature that yields a vapor pressure of 0.5 atm using two different methods including the Newton-Raphson and compare the convergence speed.

$$\log P (\text{atm}) = -\frac{2,900}{T} - 4.65 \log T + 19.732$$

프로그램 수행 중 발생할 수 있는 Error 의 원인을 파악하고 그 대처 방안을 모색할 것.

There can be many types of numerical error during running the code. Clarify the reason for the error and suggest a way to avoid it.