C.d.L. in Chimica e Tecnologie per l'Ambiente e per i Materiali, curriculum Ambiente, Energia, Rifiuti
Laboratorio di Informatica 2. 11. 2011

Equazione di stato di un gas (Problema 2.2/Esercizio 2.2 di Quarteroni-Saleri, pp. 42, 72.) Si vuole determinare il volume V occupato da un gas ad una temperatura T e soggetto ad una pressione p. L'equazione di stato è

$$[p + a(N/V)^2](V - Nb) = kNT,$$

nella quale a e b sono dei coefficienti che dipendono dallo specifico tipo di gas, N è il numero di molecole di gas contenute nel volume V e k è la cosiddetta costante di Boltzmann ($k = R/N_A = 1.3806488 \cdot 10^{-23}$ J K^{-1}, dove R è la costante universale dei gas e N_A è il numero di Avogadro). Dobbiamo quindi risolvere un'equazione non lineare la cui radice è V.

Per l'anidride carbonica (CO_2) i coefficienti a e b valgono rispettivamente $a = 0.401$ Pa m^6 e $b = 42.1 \cdot 10^{-6}$ m^3. Si trovi il volume occupato da 1000 molecole di anidride carbonica poste ad una temperatura $T = 300$ K e ad una pressione $p = 3.5 \cdot 10^7$ Pa utilizzando il metodo di bisezione con una accuratezza pari a $5 \cdot 10^{-7}$. Quindi si eseguano i seguenti passi:

1. Salvare la funzione bisection.m
(`http://www.dm.unibo.it/~achilles/calc/Programmi_CS4a/bisection.m`)
come file di testo con il nome bisection.m (senza l'estensione .txt) in un posto dove Octave la trova (sul desktop). Imparare come si usa la funzione bisection:
`help bisection`

2. Definire la funzione f come funzione inline:
`f = inline ('p * V.^3 + a * N^2 * V - a * b * N^3 - p * N * b * V.^2 - 1.3806488e-23 * N * T * V.^2', 'V', 'a', 'b', 'p', 'N', 'T');`

3. Trovare un intervallo $[a, b]$ contenente la radice cercata mediante un plot della funzione f prendendo V tra 0 e 0.1 metri cubi:
`plot ([0, 0.1], feval(f, [0, 0.1], 0.401, 42.7e-6, 3.5e7, 1000, 300));`

4. Trovare il numero `nmin` di iterazioni necessarie per calcolare V fino alla sesta cifra decimale arrotondata :
`a =       ; b =       ;` % negli spazi vuoti inserire i valori trovati nel punto 3
`tol = 5.e-7;`
`nmin = ceil(log2 ((b - a)/tol)) - 1`

5. Calcolare l'approssimazione z per V, il residuo `res` $= f(z)$ e il numero `iter` di iterazioni eseguite:
`nmax = 100;`   % `nmax` deve essere maggiore di `nmin` del punto 3
`[z, res, iter] = bisection (f, a, b , tol, nmax, 0.401, 42.7e-6, 3.5e7, 1000, 300)`
Confrontare `iter` con `nmin`.

6. Generare output formattato:
`printf ('V = %.6f metri cubi = %.3f litri \n', z, 1000 * z)`

7. Calcolare le tre radici del polinomio $f(V)$ di grado 3 con il comando `roots`.