

F6060 Programování zkouška – termín 27. 6. 2024

1. Trójkąt i pentagram Sierpińskiego

V této úloze budete na základě jednoduchých pravidel konstruovat složité rovinné obrazce fraktální povahy, kterými se ve svých pracech zabýval polský matematik Waclaw Sierpiński (1882-1969). Základem postupu bude pravidelný N -úhelník, jehož vrcholy leží v bodech

$$\mathbf{v}_k = (v_{xk}, v_{yk}) = (\cos \varphi_k, \sin \varphi_k), \quad \varphi_k = \frac{\pi}{2} + \frac{2\pi}{N} k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1.$$

Obrazec bude dán posloupností bodů (x_j, y_j) , $j = 0, 1, 2, 3, \dots$ získávaných jako vážený průměr předchozího bodu posloupnosti a náhodně vybraného vrcholu N -úhelníku. Formální předpis zní

$$x_{j+1} = (1-r)x_j + r v_{xk}, \quad y_{j+1} = (1-r)y_j + r v_{yk},$$

kde k je náhodně vybírané z množiny $\{0, 1, 2, \dots, N-1\}$ pro každé j zvlášť. Parametr r vstupující do váženého průměru se v průběhu iterací nemění. První bod (x_0, y_0) se obvykle volí jako náhodný bod z vnitřku N -úhelníku, my pro jednoduchost vezmeme $(x_0, y_0) = (0, 0)$.

1. Zkonstruuje prvních 100000 členů uvedené posloupnosti bodů pro $N = 3$ a $r = 1/2$. Prvních 100 členů vynechejte a zbývající vykreslete jako body v rovině. Vznikne tím známý Sierpiňského trojúhelník.
2. Zkonstruuje prvních 100000 členů uvedené posloupnosti bodů pro $N = 5$ a $r = (\sqrt{5} - 1)/2$. Prvních 100 členů vynechejte a zbývající vykreslete jako body v rovině. Vznikne tím Sierpiňského pentagram.
3. V posledním úkolu změním pravidlo pro náhodný výběr vrcholu N -úhelníku použitého v rámci váženého průměru. Zatímco dříve byla v každém kroku povolena všechna k z množiny $\{0, 1, 2, \dots, N-1\}$, nyní vybírejte sice opět náhodně, ale vynechávejte vždy to k , které bylo použito v předchozím kroku. Zvolte $N = 5$ a $r = 1/2$ a opět vykreslete obrazec vzniklý z prvních 100000 členů posloupnosti s vynecháním prvních 100.

2. Výroba pálenky

Tradičním postupem při výrobě pálenky je destilace. Kořeny samotné destilační metody oddělování a čištění látek sahají až do starověké Mezopotámie, k výrobě pálenky se ovšem začala používat pravděpodobně později. První jasná zmínka o destilaci alkoholu pochází od arabského chemika Al-Kindiho, který žil v 9. století našeho letopočtu v Iráku. Z arabského světa se destilace alkoholu rozšířila do Evropy, kde zhruba ve čtrnáctém století došlo ke značnému rozvoji výroby pálenky jako léčebného prostředku proti moru. V této úloze se budeme zabývat procesem jednoduché destilace, při které vaříme vodný roztok etanolu (a mnoha dalších látek) a vzniklé páry necháváme kondenzovat. Především půjde o vyčíslení koncentrace etanolu v destilátu v závislosti na jeho koncentraci v destilované směsi.

Zjednodušený kvantitativní popis je možný na základě úvah o rovnováze dvousložkové kapalně směsi etanol-voda a jejích par. Základní rovnicí je rovnice pro var:

$$p_{\text{atm}} = x \gamma_1(t, x) p_1^*(t) + (1-x) \gamma_2(t, x) p_2^*(t). \quad (1)$$

Tato rovnice zachycuje vyrovnání atmosférického tlaku p_{atm} a tlaku par, při kterém nastane intenzivní tvorba bublin. Dva příspěvky na pravé straně jsou parciální tlaky par etanolu a vody, které spolu vytvářejí celkový tlak par. Každý z příspěvků závisí na molárním podílu etanolu $x \in [0, 1]$ a teplotě t . Vstupují do nich: teplotně závislý tlak nasycených par nad čistým etanolem $p_1^*(t)$, vodou $p_2^*(t)$ a tzv. koeficienty aktivity $\gamma_1(t, x)$, $\gamma_2(t, x)$, které závisí na x i t . Pro daný podíl etanolu x dává řešení rovnice (1) teplotu varu t . Za předpokladu ideálnosti plynů je potom molární podíl etanolu v parách určen jeho parciálním tlakem. Po kondenzaci par tedy dostaneme destilát s molárním podílem etanolu

$$y = \frac{x \gamma_1(t, x) p_1^*(t)}{p_{\text{atm}}}. \quad (2)$$

Při výpočtu budeme tlaky nasycených par modelovat vztahem

$$p_i^*(t) = A_i \exp\left(-\frac{B_i}{C_i + t}\right), \quad i = 1, 2, \quad (3)$$

který formuloval francouzský inženýr Louis Charles Antoine v roce 1888. Koeficienty aktivity lze odhadnout například na základě Wilsonova modelu. K tomu je třeba vypočítat hodnoty

$$\Lambda_1 = \kappa \exp\left(-\frac{\alpha_1}{t_0 + t}\right), \quad \Lambda_2 = \frac{1}{\kappa} \exp\left(-\frac{\alpha_2}{t_0 + t}\right), \quad (4)$$

kde κ označuje poměr molárních objemů kapalné vody a etanolu. Pomocí nich pak určíme

$$\beta_1 = x + \Lambda_1(1 - x), \quad \beta_2 = 1 - x + \Lambda_2x, \quad \Lambda = \frac{\Lambda_1}{\beta_1} - \frac{\Lambda_2}{\beta_2}, \quad (5)$$

které následně vstupují do vztahů pro koeficienty aktivity

$$\gamma_1(t, x) = \frac{1}{\beta_1} \exp[\Lambda(1 - x)], \quad \gamma_2(t, x) = \frac{1}{\beta_2} \exp(-\Lambda x), \quad (6)$$

Použijeme následující hodnoty parametrů pro Antoineovu rovnici (3)

$$\begin{aligned} A_1 &= 21.80 \text{ GPa}, & B_1 &= 3803.98^\circ\text{C}, & C_1 &= 231.47^\circ\text{C} & (\text{etanol}) \\ A_2 &= 11.86 \text{ GPa}, & B_2 &= 3816.44^\circ\text{C}, & C_2 &= 227.02^\circ\text{C} & (\text{voda}) \end{aligned}$$

a pro Wilsonův model (4), (5), (6):

$$\alpha_1 = 163.7^\circ\text{C}, \quad \alpha_2 = 480.0^\circ\text{C}, \quad \kappa = 0.308.$$

Modelové parametry jsou založeny na simulaci dostupné na https://checalc.com/solved/binary_vle.html. Teplota t je měřena v $^\circ\text{C}$. Konstanta $t_0 = 273.15^\circ\text{C}$ vystupující v rovnicích (4) slouží pouze k převodu na termodynamickou teplotu. Atmosférický tlak má hodnotu $p_{\text{atm}} = 101.325 \text{ kPa}$.

Vášim úkolem bude sestavit program, který nalezne vztah mezi molárním podílem etanolu v destilované směsi (veličina x) a v obdrženém destilátu (veličina y). Sledujte přitom níže uvedený postup, který se vypořádává s řešením transcendentní rovnice (1) velmi jednoduchým iteračním způsobem. Rovnici přitom řeší vzhledem k x pro pevné t .

Procházejte sadu teplot t z intervalu 78.4°C až 100.0°C (lze zvolit například 100 ekvidistantních hodnot). Pro každou hodnotu teploty t podnikněte následující kroky:

1. Nejprve vypočítejte p_1^* a p_2^* na základě rovnice (3).
2. Jako počáteční odhad γ_1 a γ_2 zvolte $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$.
3. Odhadněte x pomocí vztahu

$$x = \frac{p_{\text{atm}} - \gamma_2 p_2^*}{\gamma_1 p_1^* - \gamma_2 p_2^*} \quad (7)$$

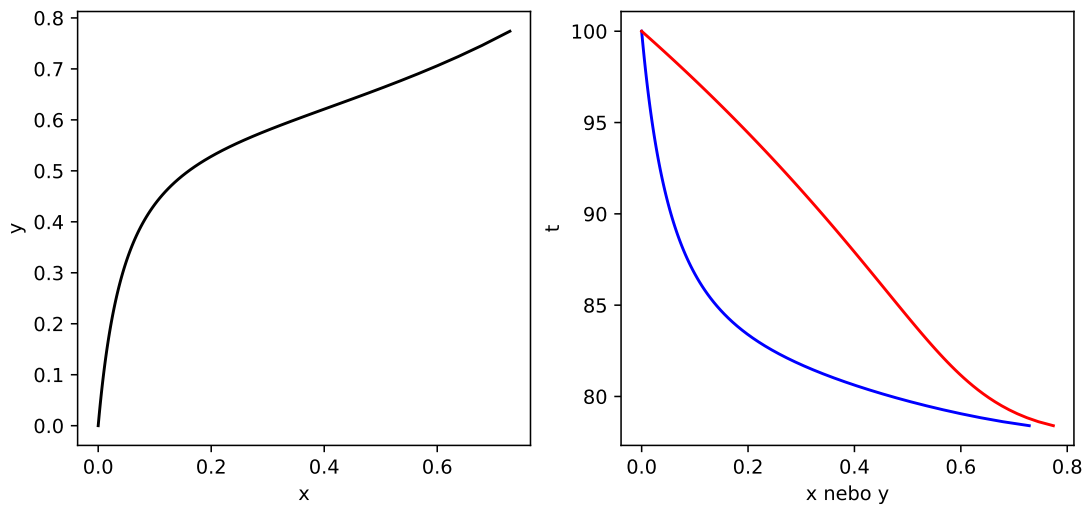
vycházejícího z rovnice (1), do kterého dosadíte aktuální hodnoty.

4. Vypočítejte za použití získaného x hodnoty γ_1 a γ_2 na základě rovnic (4), (5) a (6). Jako nový odhad γ_1 dále poslouží aritmetický průměr právě vypočteného čísla a předchozího odhadu γ_1 . Stejným způsobem aktualizujete hodnotu γ_2 .

Dvojici kroků 3 a 4 mnohokrát opakujte, hodnoty x , γ_1 a γ_2 se tím budou průběžně zpřesňovat. Pro zadané parametry je vyzkoušeno, že po padesáti opakováních jsou již hodnoty dostatečně ustálené a rovnice (1) je splněna s dobrou přesností.

5. Vypočítejte příslušnou hodnotu y z rovnice (2), to jest $y = x\gamma_1 p_1^* / p_{\text{atm}}$.
6. Uchovejte si trojici hodnot t , x , y jako jeden datový bod.

Na konci postupu budete mít sadu trojic hodnot t , x , y , které splňují rovnice (1) a (2). Ze získané sady hodnot vytvořte graf $x - y$, tedy hledanou závislost y na x . Toto bude hlavní výsledek, který graficky zachycuje účinnost destilace. Zajímavé jsou rovněž grafy $x - t$ (křivka teplot varu) a $y - t$ (kondenzační křivka). Následující grafy vám poslouží pro kontrolu:



Poznámka: V úloze počítáme s molárním podílem etanolu. Praktičtější by bylo pracovat s jeho objemovým podílem. Ten je například udáván na prodáváných lihovinách. Přepočítání mezi molárním x_m a objemovým x_V podílem lze přibližně provést podle vztahu $x_V^{-1} - 1 = \kappa(x_m^{-1} - 1)$.