Nebojte se složitých rovnic

Michal H. Kolář[*]   Vladimír Palivec[†]

Praktický průvodce fyzikálního chemika numerickým řešením nelineárních rovnic s jednou neznámou. (Už rozumíte, proč jsme tohle v nadpisu opravdu nemohli použít?)

verze 1.0

Obsah

[*]Ústav Maxe Plancka pro biofyzikální chemii, Gotinky, Spolková republika Německo
[†]Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, Praha

1 Úvod a motivace

Fyzikální chemie je vědní obor, který, podobně jako jiné přírodovědné obory, používá matematický aparát k zodpovídání otázek na pomezí fyziky a chemie. Matematika je vhodný nástroj, nikoli podstata fyzikální chemie. Jistě by šlo měřit teplotu i bez použití matematiky; o tělese pouhým dotykem zjistíme, zda je teplejší nebo chladnější než jiné těleso. Avšak se znalostí čísel a operací s nimi se nám otevírá široká paleta popisu teploty, se znalostí diferenciálního počtu jsme schopni jednoznačně mluvit o teplotních změnách a rychlostech těchto změn atp.

Mezi matematikou a přírodními vědami je však jeden zásadní rozdíl. Zatímco matematika je věda přesná, v níž musí vše do sebe naprosto dokonale zapadat, fyzikální chemie se spokojí i s nepřesným řešením. Vždyť i sebelepší měření neurčí hodnotu fyzikální veličiny zcela přesně. Uveďme příklad: Hledáme řešení (tzv. kořeny) kvadratické rovnice R1

$$x^2 - 3x - 5 = 0. \tag{R1}$$

Rovnice má dva kořeny: $x_1 = (3 + \sqrt{29})/2$ a $x_2 = (3 - \sqrt{29})/2$. Jelikož je číslo 29 prvočíslem, je jeho odmocnina iracionální číslo, tj. má nekonečný a neperiodický desetinný rozvoj, anebo jinak, nelze ji vyjádřit jako podíl dvou přirozených čísel. Rychlý výpočet kalkulačkou poskytne $x_1 = 4,1925824$ a $x_2 = -1,1925824$. Trochu lepší kalkulačka nebo počítačový program poskytnou s přesností na 1000 desetinných míst hodnotu (druhý kořen rovnice si dovolíme vynechat)

$x_1 =$
4,1925824035 6725201562 5355245770 1647781475 6008082239
4418840194 3350083229 8141382934 6438316890 8399177422
0935241089 6972880303 8443107009 9077781347 6608364104
4622643358 6126309260 7340617995 0065262240 0814519435
2263913471 9356847036 9700515844 3597955128 3886298254
1905709747 7920969904 1317448470 8766306701 8208180615
5444371382 7477756182 3970182941 2775911367 2206265037
8958562099 3020629655 1179228059 9027239770 9406563126
5536467549 5053443668 5835302906 2337083996 5194270690
6187123954 3977273716 0074613440 0568023211 6035505868
9307699277 9285510408 5880880190 5197540055 6324181392
2214040765 7246107060 5659218170 5381981068 6861441141
8969240574 6214576734 6004245653 8995686984 8544548595
4167307029 9897203214 4328698646 2055761488 6119066278

0185895365 6250678663 1816165257 9363933254 9392164950
7210268628 1482849295 8622491960 9219895024 9846636850
4354960334 1536628401 3871220461 5878577098 0356964367
6742668524 0903947640 4786459344 3068341447 5345126833
4702279016 3052849279 9719076037 2204926219 0745700486
5127604929 7840840964 8188742048 7031956547 6397620263.

Běžně bychom brali tato čísla jako správná řešení výše zmíněné kvadratické rovnice, ale buďme na chvíli pedanti a uvědomme si, že oba výsledky z kalkulačky, ba i z počítače jsou pouze přibližná (tj. zaokrouhlená) řešení. Na druhou stranu, a to je důležité, pokud by x byl např. rozměr v jednotkách metrů, hodnota 4,1925824 m by byla nejspíše dostačující,[1] protože jen málo měřidel umí určit délku tak přesně.

Mnoho rovnic umíme řešit pomocí sady „dovolených“ matematických úprav, případně pomocí vzorců, které si buď pamatujeme, nebo je máme napsané na taháku. Kvadratická rovnice R2

$$2x^2 - 6x - 10 = 0 \tag{R2}$$

je jaksi jiná než R1, avšak má stejné dva kořeny. Je nabíledni, že všechny koeficienty rovnice R2 jsou přesně dvojnásobné vůči koeficientům v rovnici R1 (R2 je dvojnásobkem R1).

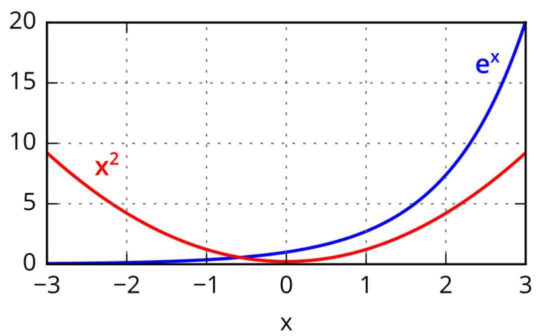
Není těžké uvěřit, že existují rovnice, jejichž kořeny nelze jednoduše vyjádřit tzv. analyticky. Tím máme na mysli, že nelze řešení vyjádřit formou „$x = \ldots$“. Příkladem nechť je rovnice R3.[2]

$$e^x = x^2 \tag{R3}$$

Cílem tohoto textu je osvětlit, proč rovnice, která nemá (středoškolákovi dostupné) analytické řešení, není bezcenná. Text je návodem, jak řešit tímto způsobem komplikované rovnice s jednou neznámou. Postupně si v textu ukážeme, jak dojít k přibližnému „řešení“. Uvozovky jsou zde na místě, neboť se nejedná o skutečné řešení rovnice, ale jen o jeho přibližnou hodnotu. Ta, jak již bylo zmíněno, udělá fyzikálnímu chemikovi stejnou radost, jako řešení přesné.

[1] Což neplatí např. u měření Avogadrovy konstanty, při němž byl určen průměr kilogramové křemíkové koule s přesností několika desetin nanometru.

[2] Pravda to je pouze v rozsahu středoškolské matematiky. Zvídavý čtenář může dohledat klíčové sousloví Lambertova W-funkce.



Obrázek O1: Grafy funkcí e^x a x^2. Hodnota x, ve které se grafy kříží, je řešením rovnice $e^x = x^2$.

2 Využití grafů funkcí

Všimněme si nyní souvislosti mezi funkcemi a rovnicemi. Funkce jsou matematická přiřazení čísel ze dvou množin; *funkce* přiřazuje každému číslu z definičního oboru právě jedno číslo z oboru hodnot. Naproti tomu *rovnice* dává do souvislosti dvě funkce, jednu na levé a další na pravé straně od znaménka „=“, přičemž nás obvykle zajímá, která čísla z definičních oborů obou funkcí poskytují tatáž čísla z oborů hodnot. Číslům, která požadavku vyhovují, říkáme kořeny rovnice, neboli řešení rovnice.

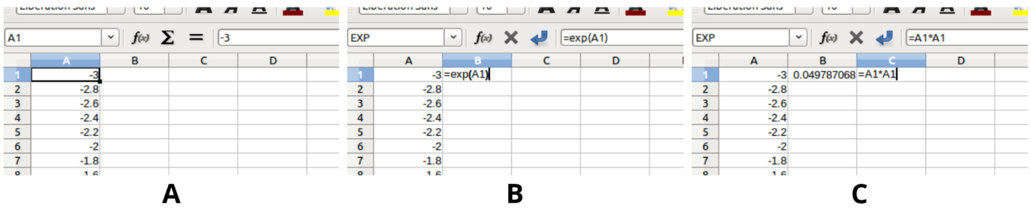
Rozveďme příklad rovnice R3. Funkci na levé straně rovnice označíme $f(x) = e^x$ a funkci na pravé straně rovnice pojmenujme $g(x) = x^2$. Umíme-li sestrojit grafy funkcí $f(x)$ a $g(x)$, kořen rovnice získáme dohledáním hodnoty x, ve které se oba grafy protínají (obrázek O1). Poznamenejme, že hodnot může být v závislosti na tvaru rovnice víc, stejně jako nemusí existovat ani jedna.[3]

Sestrojit graf funkce na papíře nemusí být jednoduché, proto je užitečné vzít si na pomoc počítačový program, tzv. tabulkový procesor. Nabízí se např. Microsoft Excel, nebo jeho volně šiřitelná obdoba Libre Office Calc.[4] Ten budeme používat i v tomto přípravném textu, majíce na paměti značnou podobnost obou programových balíků. Proto by ani uživatel začátečník neměl mít s provedením výpočtů v MS Excel žádné problémy.[5]

[3]Zkuste sestrojit grafy e^x a $-x^2$ a dohledat kořeny rovnice $e^x = -x^2$.

[4]Dostupné v češtině zdarma pro několik operační systémů na `https://cs.libreoffice.org`. Jinou alternativou je online služba `https://drive.google.com`.

[5]Na internetu je množství návodů, jak s balíkem MS Office pracovat. Např. `http://www.jaknaoffice.cz`.



Obrázek O2: Zadávání hodnot v tabulkovém procesoru Libre Office Calc.

Otevřeme si nový dokument. Do sloupce A budeme zapisovat hodnoty x. Sloupce B a C budou obsahovat vzorce pro výpočet funkcí $f(x)$ a $g(x)$.

1. Zapišme hodnoty x v intervalu mezi $-3,0$ a $3,0$ s krokem $0,2$ do sloupce A (obrázek O2).

2. Do buňky B1 zapišme vztah pro výpočet $f(x)$ „=exp(A1)“ (bez uvozovek), ve kterém jsme využili funkce exp() implementované v balíku Libre Office.

3. Do buňky C1 zapišme vztah pro výpočet $g(x)$ „=A1*A1“. Připomeňme, že násobení se v takovýchto programech vyjadřuje hvězdičkou *.

4. Vypočtěme $f(x)$ pro všechna x.

5. Vypočtěme $g(x)$ pro všechna x.

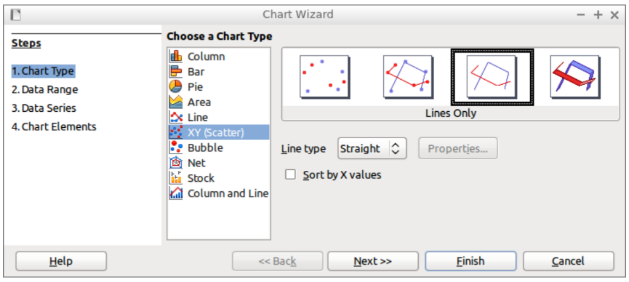
Označíme-li myší všechny hodnoty (včetně hodnot x), můžeme sestrojit graf pomocí nabídky Vložit/Graf. Objeví se nové okno, ve kterém vybereme typ grafu „XY (bodový)“ a v pravé části okna vybereme zobrazení s rovnými spojnicemi (obrázek O3). Kliknutím na „Dokončit“ přeskočíme další nastavení a rovnou vytvoříme graf (obrázek O4A).

V grafu by měly být dvě křivky – exponenciála a parabola. Jejich průsečík, řešení rovnice R3, leží někde mezi -1 a $-0,5$, tedy okolo $-0,75$. Můžeme proto prohlásit, že přibližnou hodnotou řešení rovnice R3 je $-0,75$.

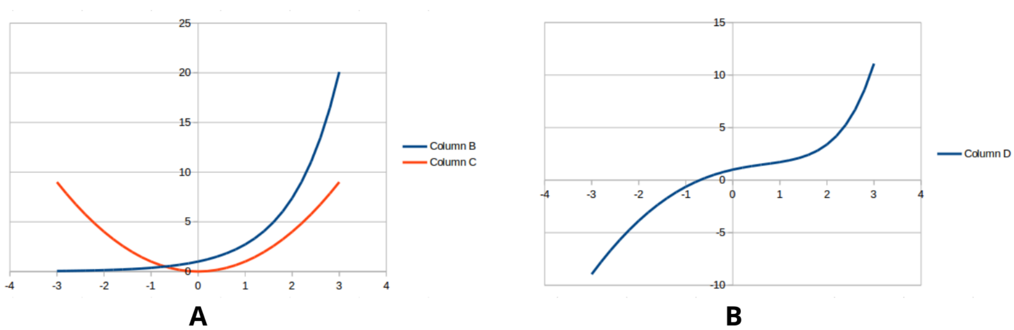
S ohledem na následující kapitoly v tomto textu je vhodné si uvědomit, že každá rovnice se dá vyjádřit ve tvaru, kde na pravé straně je 0. Rovnice R3 je proto ekvivalentní rovnici R4.

$$e^x - x^2 = 0 \tag{R4}$$

Rovnice dává do souvislosti opět dvě funkce, na každé straně od znaménka „=“ jednu, přičemž na pravé straně je funkce konstantní $m(x) = 0$. V



Obrázek O3: Dialogové okno pro tvorbu grafů v tabulkovém procesoru Libre Office Calc.



Obrázek O4: Grafy vytvořené v tabulkovém editoru Libre Office Calc.

počítačovém dokumentu můžeme snadno vypočítat hodnoty funkce $n(x) = e^x - x^2$ do sloupce D. Do buňky D1 zapíšeme „=exp(A1) - A1*A1“ a výpočet provedeme i pro všechna ostatní x. Myší označíme hodnoty x a (se stisknutým Ctrl) i hodnoty ve sloupci D. Graf sestrojíme obdobně jako v předchozím případě (obrázek O4B). Řešením rovnice R4 (a potažmo i R3) je hodnota x, ve které graf protíná přímku $y = 0$. V tomto bodě je totiž funkční hodnota rovna nule, jak požaduje rovnice R4.

Stojí za povšimnutí, že odhad řešení R4 můžeme získat i bez vykreslování grafu přímo z tabulky hodnot. Přibližné řešení totiž bude ležet mezi hodnotami x, mezi kterými ve sloupci D dochází ke změně znaménka. Jinými slovy pomyslný graf v tomto intervalu protíná osu x. V našem dokumentu tedy řešení rovnice R4 leží mezi $x = -0{,}8$ a $x = -0{,}6$. Co takhle vypočítat hodnoty funkce $n(x)$ v tomto intervalu, avšak s krokem $0{,}01$? Poslouží nám třeba sloupce G a H. Mezi kterými dvěma x se mění znaménko funkce $n(x)$? Pokud jste až do této chvíle postupovali jako my, potom potvrdíte, že řešení R4 leží mezi $-0{,}71$ a $-0{,}70$. Postupným „zjemňováním“ intervalu lze získat řešení R4 s libovolnou, avšak konečnou, přesností. No není to skvělé?

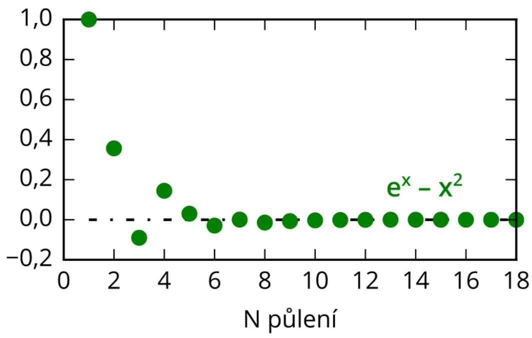
3 Metoda půlení intervalů

Lze tento postup nějak zautomatizovat? A co dělat, když při sobě nemám počítač, ale jen „hloupou“ kalkulačku? Pomůže nám tzv. metoda půlení intervalů. Pokusme se ji nyní použít na dohledání přibližné hodnoty řešení rovnice, která má na pravé straně 0, tedy např. rovnice R4. Na začátku potřebujeme dvě čísla, označíme je $x_{1?}$ a $x_{2?}$, která leží blízko přesnému řešení. Že se jedná o zkusmé hodnoty zdůrazňujeme otazníkem. Dále budeme vyžadovat, aby funkční hodnoty v těchto bodech měly opačná znaménka. Ze zkušenosti s grafickým zobrazením víme, že řešení leží mezi $x_{1?} = -1{,}0$ a $x_{2?} = -0{,}5$ (obrázek O4B).

V dalším kroku vypočítáme funkční hodnoty ve zvolených bodech a taky v bodě $x_{3?}$, který je aritmetickým průměrem oněch bodů. Fakticky interval $\langle x_{1?}, x_{2?} \rangle$ třetím bodem rozpůlíme. Dostaneme

$$
\begin{aligned}
x_{1?} &= -1{,}0 & n(x_{1?}) &= -0{,}632 \\
x_{2?} &= -0{,}5 & n(x_{2?}) &= 0{,}357 \\
x_{3?} &= -0{,}75 & n(x_{3?}) &= -0{,}090.
\end{aligned}
$$

Protože řešení R4 leží v průsečíku grafu $n(x)$ a $m(x) = 0$ (obrázek O4B), z vypočítaných hodnot ve třech zkusmých bodech vyplývá, že průsečík leží



Obrázek O5: Hodnota funkce $e^x - x^2$ v závislosti na počtu půlení intervalů. Správné řešení 0 je vyznačeno čerchovanou čarou.

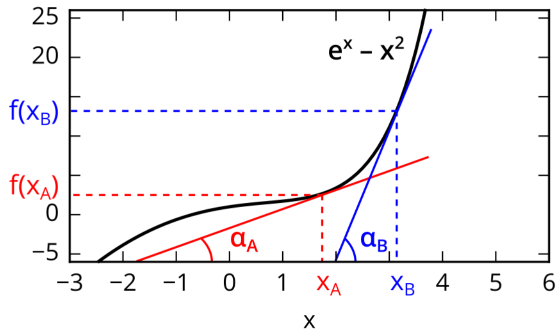
mezi $-0,75$ a $-0,5$. V dalším kroku tedy rozpůlíme tento interval, ve kterém funkce $n(x)$ mění znaménko. Dostaneme $x_{4?} = -0,625$ a $n(x_{4?}) = 0,145$ a dovodíme, že řešení existuje mezi $-0,75$ a $-0,625$. Takto můžeme pokračovat, až dosáhneme požadované přesnosti přibližného řešení, nebo až nás přestane počítání s kalkulačkou bavit. Metodu půlení intervalů můžeme chápat taky jako pokus dostat se půlícím bodem co nejblíž k přesnému řešení rovnice. A vskutku, každým půlením je funkční hodnota v půlícím bodě blíže nule, jak ozřejmuje obrázek O5.

4 Metoda tečen

Na podobném principu, tedy na hledání průsečíků s přímkou $y = 0$, které se postupně přibližují přesnému řešení, je založena i metoda tečen. Ta se někdy nazývá Newtonova nebo Newtonova-Raphsonova metoda. Rádi bychom upozornili, že metoda tečen představuje maximum, které řešitel chemické olympiády může upotřebit. Středoškolsky vzdělaného fyzikálního chemika obvykle nezajímá řešení elegantní, nýbrž efektivní ve smyslu vysokého poměru kvality výsledku a vynaložené úsilí. Z tohoto pohledu je výhodnější držet se tabulkového procesoru eventuálně metody půlení intervalů a metodu tečen uvádíme jen pro její zajímavost.

K představení metody tečen je potřeba zavést pojem derivace funkce $f(x)$. My pojem derivace zavedeme velmi hrubě a dovolíme si odkázat laskavého čtenáře na jiné texty, které se tématu derivací věnují obšírněji.[6] Je-li zadaná

[6]Jako vhodný začátek může sloužit studijní text k Fyzikální olympiádě: Jarešová, Volf – Diferenciální počet ve fyzice, dostupný online `http://fyzikalniolympiada.cz/texty/matematika/difpoc.pdf`.



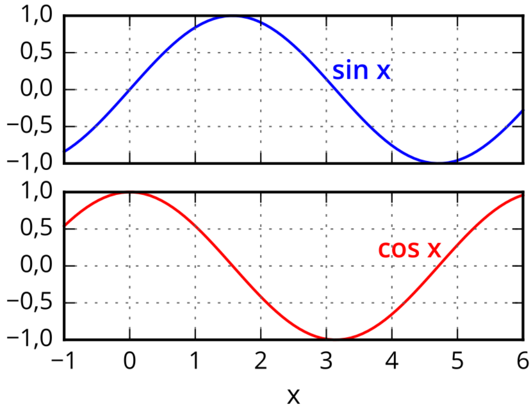
Obrázek O6: Závislost úhlu α, který svírá tečna s osou x, na bodu, v němž je tečna sestrojena.

funkce $f(x)$ „slušně vychovaná“,[7] můžeme v každém jejím bodě definovat její derivaci, která vyjadřuje, jak prudce funkce $f(x)$ roste nebo klesá. Nutno zdůraznit, že strmost funkce $f(x)$ je také závislá na proměnné x: pro různá x může být strmost $f(x)$ rozdílná. Derivaci funkce $f(x)$ označujeme $f'(x)$. Dá se např. ukázat, že derivace funkce v daném bodě je rovna tangens α, kde α je úhel, který svírá tečna v daném bodě s osou x. Tg α se též nazývá směrnice tečny. Obrázek O6 ukazuje tečny ve dvou různých bodech. Z obrázku je také zřejmé, že derivace v bodě x_B je větší než v bodě x_A: okolo bodu x_B je graf funkce strmější než v okolí bodu x_A.

Pro derivování a počítání s derivacemi platí několik pravidel, která bez důkazu uvádíme níže:

$$
\begin{aligned}
f(x) &= C & f'(x) &= 0, \text{ kde C je konstanta}\\
f(x) &= x^n & f'(x) &= nx^{n-1}\\
f(x) &= \sin x & f'(x) &= \cos x\\
f(x) &= \cos x & f'(x) &= -\sin x\\
f(x) &= \ln x & f'(x) &= 1/x\\
f(x) &= e^x & f'(x) &= e^x
\end{aligned}
$$

[7] Formálně musí být funkce $f(x)$ spojitá a mít ve svých bodech vlastní limity. Neformálně musí být možné graf funkce nakreslit jedním tahem a nesmí obsahovat špičky.



Obrázek O7: Funkce sinus (sin x) a kosinus (cos x).

$$[C \cdot f(x)]' = C \cdot f'(x), \text{ kde C je konstanta}$$
$$[f(x) + g(x)]' = f'(x) + g'(x)$$
$$[f(x) \cdot g(x)]' = f'(x) \cdot g(x) + f(x) \cdot g'(x)$$
$$[f(g(x))]' = f'(g(x)) \cdot g'(x)$$

Bez souvislosti k fyzikálně-chemickým úlohám si komentář zaslouží dvě funkce. Jak známo, $\sin x$ je funkce periodická: periodicky roste a klesá s periodou 2π, a proto by nemělo překvapit, že její derivace je taktéž funkce periodická, a to $\cos x$ (obrázek O7). Všimněte si, že v místech, kde $\sin x$ nabývá maxima nebo minima, je strmost $\sin x$ nula (úhel, který svírá tečna v těchto bodech s osou x je nulový). Stejně tak je v těchto bodech i hodnota $\cos x$ rovna nule. Druhou zajímavou funkcí je e^x.[8] Derivováním e^x dostaneme opět e^x, což znamená, že funkční hodnota v bodě x je přímo rovna směrnici tečny v daném bodě.

Ale zpět k řešení rovnice R4. Pro odhad přibližné hodnoty řešení zvolíme zkusmý bod $x_{1?} = 1,5$.[9] V tomto bodě spočítáme funkční hodnotu $f(x_{1?})$ a její derivaci $f'(x_{1?})$. Tečna protíná přímku $y = 0$ v bodě $x_{2?}$ a vytváří pravoúhlý trojúhelník (obrázek O8). Pro bod $x_{2?}$ platí

[8]Ta je oproti $\sin x$ z hlediska fyzikální chemie mnohem důležitější. Funkce e^x se vyskytuje např. v rovnicích radioaktivních rozpadů, nebo obecněji v popisu chemických reakcí 1. řádu.

[9]Zkusmý bod by měl být dostatečně blízko přesnému řešení. My z důvodu názornosti volíme trochu vzdálenější bod než v metodě půlení intervalů.

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{f(x_{1?})}{x_{1?} - x_{2?}}.$$

Ze vztahu mezi derivací a úhlem tečny potom

$$\operatorname{tg}\alpha = f'(x_{1?}),$$

a tedy

$$x_{2?} = x_{1?} - \frac{f(x_{1?})}{f'(x_{1?})}.$$

Zbývá vypočítat hodnotu derivace v bodě $x_{1?}$. Nejdříve zderivujeme funkci $n(x) = e^x - x^2$, kde využijeme pravidla shrnutá výše.

$$\begin{aligned} n'(x) &= (e^x - x^2)' = \\ &= (e^x)' + (-1 \cdot x^2)' = \\ &= e^x - 1 \cdot (x^2)' = \\ &= e^x - 2x \end{aligned}$$

Dosazením $x_{1?} = 1,5$ dostaneme $x_{2?} = -0,006$.

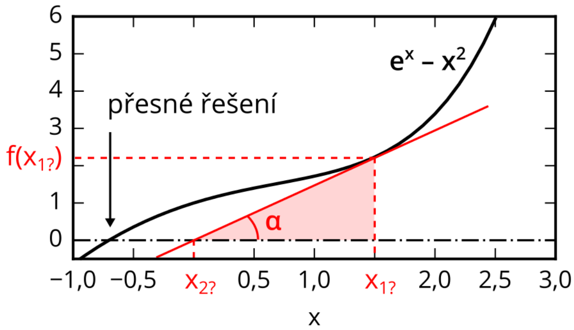
$$x_{2?} = 1,5 - \frac{e^{1,5} - 1,5^2}{e^{1,5} - 2 \cdot 1,5} = -0,006$$

Bod $x_{2?}$ se nachází blíž přesnému řešení rovnice R4, které je na obrázku O8 zachyceno průsečíkem grafu funkce a funkce $m(x) = 0$.

V dalším kroku sestrojíme tečnu v bodě $x_{2?}$, dohledáme její průsečík s osou x, který použijeme v dalším kroku metody. Tímto způsobem můžeme pokračovat až do chvíle, kdy se dva následující průsečíky s přímkou $y = 0$, nebo funkční hodnoty v těchto bodech, liší o méně než předem vybraný práh. Ve srovnání s metodou půlení intervalů dosáhneme obvykle výsledku pomocí menšího počtu kroků. V případě rovnice R4 a zvolené přesnosti na 4 desetinná místa tedy v 6 krocích metodou tečen a v 18 krocích metodou půlení intervalů.

5 Aplikace ve fyzikální chemii

Uvedeme jeden příklad, jak numerické metody použít k řešení fyzikálně-chemických problémů. Začneme stavovou rovnicí plynu. Dle J. D. van der



Obrázek O8: První krok v metodě tečen. První zkusmý bod $x_{1?}$, v něm sestrojená tečna k funkci $e^x - x^2$ (červeně) a její průsečík s přímkou $y = 0$ (čerchovaně) definují trojúhelník (růžově) využitý k výpočtu bodu $x_{2?}$.

Waalse[10] platí pro tlak p a molární objem V_m reálného plynu následující vztah, tzv. van der Waalsova (vdW) stavová rovnice.

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}, \tag{R5}$$

kde R je univerzální plynová konstanta, T termodynamická teplota, a a a b jsou parametry rovnice, které se vztahují ke studovanému plynu.

Otázka může znít, jaký je molární objem oxidu uhličitého při teplotě $T = 373\,\mathrm{K}$ a tlaku $p = 5{,}07\,\mathrm{MPa}$. Parametry pro oxid uhličitý jsou následující $a = 0{,}365\ \mathrm{J\,m^3\,mol^{-2}}$, $b = 4{,}28 \cdot 10^{-5}\ \mathrm{m^3\,mol^{-1}}$. Rovnici R5 lze upravit do tvaru

$$V_m^3 - \left(\frac{RT}{p} + b\right) V_m^2 + \frac{a}{p} V_m - \frac{ab}{p} = 0. \tag{R6}$$

Z rovnice R6 je patrné, že se jedná o rovnici kubickou vzhledem k molárnímu objemu V_m. Ačkoli existují způsoby, jak si s kubickou rovnicí poradit analyticky,[11] my zkusíme vypočítat její kořeny numericky pomocí metody půlení intervalů. Kubická rovnice může mít nula až tři reálné kořeny, proto je důležité mít rozumný odhad prvních dvou zkusmých bodů. K tomu nám poslouží molární objem vypočítaný pomocí stavové rovnice ideálního plynu:

$$p = \frac{RT}{V_{m,id}} \tag{R7}$$

[10] nizozemský fyzik (1837–1923), nositel Nobelovy ceny za fyziku (1910)

[11] Viz Cardanovy vzorce.

Dosazením dostaneme přibližně $V_{m,id} = 6,11 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{m}^3$, z čehož odhadneme, že by řešení vdW rovnice R6 mohlo existovat v intervalu mezi $V_{m,1?} = 10^{-3}\,\mathrm{m}^3$ a $V_{m,2?} = 10^{-4}\,\mathrm{m}^3$. Vypočteme hodnoty pro krajní body počátečního intervalu a také pro půlící bod. Levou stranu rovnice R6 označíme LS.

$$\begin{aligned}
V_{m,1?} &= 10^{-3}\,\mathrm{m}^3 & LS(V_{m,1?}) &= 4,14450 \cdot 10^{-10} \\
V_{m,2?} &= 10^{-4}\,\mathrm{m}^3 & LS(V_{m,2?}) &= -1,4266 \cdot 10^{-12} \\
V_{m,3?} &= 5,5 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{m}^3 & LS(V_{m,3?}) &= 4,91490 \cdot 10^{-12}
\end{aligned}$$

Neměla by nás znepokojit velmi malá čísla levé strany rovnice, která pro nezkušené oko mohou být dostatečně blízko požadované nule. Musíme si však uvědomit, že rozdíly molárních objemů jsou v řádech 10^{-4} m^3, neboli ve stovkách ml, což je patrně přesnost nedostačující.

Dovodíme, že řešení leží mezi $V_{m,2?}$ a $V_{m,3?}$, z nichž následně vypočteme aritmetický průměr $V_{m,4?}$ a levou stranu rovnice.

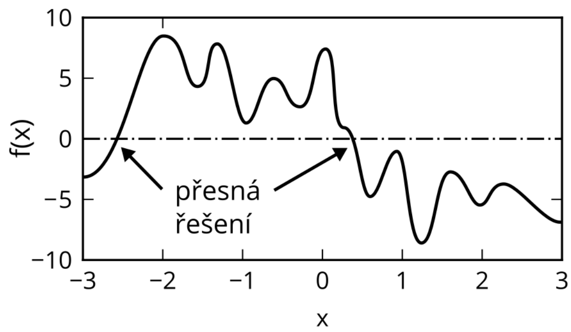
$$V_{m,4?} = 3,25 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{m}^3 \qquad LS(V_{m,4?}) = -1,44832 \cdot 10^{-11}$$

Po deseti opakováních dojdeme k výsledku $V_m = 529$ ml. Tato hodnota se od ideálního chování odchyluje přibližně o 13%. To můžeme považovat za významnou odchylku a prohlásit, že oxidu uhličitý se za daných podmínek nechová ideálně. Připomeňme, že reálné plyny mají blízko ideálnímu chování pouze za vysokých teplot a nízkých tlaků.

6 Závěrečné poznámky

Mohlo by se zdát, že numerický přístup k rovnicím pomocí metody tečen nebo půlení intervalů přemůže všechny nesnáze s jejich řešením. Není tomu bohužel tak. S komplikovaností rovnic rostou i nároky na počáteční odhady řešení a špatná volba může snadno vést k neúspěchu. Neúspěch si můžeme představit např. jako situaci, kdy se nové body nepřibližují skutečnému řešení, nebo se k němu přibližují jen velmi pomalu. Říkáme, že metoda špatně konverguje (obrázek O9). Jiným druhem problémů je konvergence k jinému řešení, než je požadováno/předpokládáno.

Doplňme ještě, že na internetu je dostupná řada aplikací, které poskytují numerická řešení. Často implementují některou z předkládaných metod.



Obrázek O9: Funkce $f(x)$, jejíž rovnici $f(x) = 0$ bude kvůli špatné konvergenci obtížné numericky řešit metodou tečen nebo půlení intervalů.

Za povšimnutí stojí především (z našeho pohledu velmi mocná) služba na `http://www.wolframalpha.com`, se kterou vám stejně jako s úlohami Chemické olympiády přejeme spoustu zábavy.

Poděkování

Zde si dovolíme poděkovat vybraným účastníkům Letního odborného soustředění v Běstvině, kteří si po kultovní noční hře Labyrint místo spánku raději vyslechli přednášku o numerických řešeních rovnic a svým nadšením a dotazy pomohli zformovat tento text. Významné díky patří též Petru Slavíčkovi za pečlivé přečtení nulté verze textu.

Errata