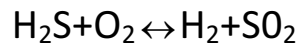


3^η Εργασία - Μέθοδος Newton-Raphson

Η ακόλουθη αντίδραση πραγματοποιείται σε έναν αντιδραστήρα αέριας φάσης:



Όταν το σύστημα φτάσει σε ισορροπία στους 600K και 10 atm, τα μοριακά κλάσματα στο παραγόμενο αέριο μίγμα ικανοποιούν την ακόλουθη σχέση:

$$\frac{y_{\text{H}_2} y_{\text{SO}_2}}{y_{\text{H}_2\text{S}} y_{\text{O}_2}} = 0.08$$

1. Γράψτε πρόγραμμα σε FORTRAN ή Matlab που να χρησιμοποιεί την **μέθοδο Newton-Raphson** για τον υπολογισμό της ποσότητας του H_2S που έχει καταναλωθεί (αντιδράσει) όταν το σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία στους 600K και 10 atm και οι αρχικές ποσότητες σε moles των αερίων που συμμετέχουν στην αντίδραση είναι (a=τα δύο τελευταία ψηφία του κωδικού αριθμού του φοιτητή):

$N_{\text{H}_2\text{S}}$	N_{O_2}	N_{H_2}	N_{SO_2}
2-0.02*a	1	0	0

Θα πρέπει:

- να αναφέρετε μέσα στο κείμενό σας το ονοματεπώνυμο και τον κωδικό σας
- ο κώδικας να έχει όλες τις παραμέτρους και να τρέχει **χωρίς να λαμβάνει δεδομένα από τον χρήστη**).
- να τρέξετε το πρόγραμμά σας και ότι προκύπτει (από αρχείο ή εκτύπωση στην οθόνη) να το ενσωματώσετε στην εργασία σας
- στον κώδικα απαραίτητα να **εξηγήτε με σχόλια** τον τρόπο σκέψης σας και την λειτουργία που επιτελούν οι κύριες γραμμές
- να αποθηκεύετε σε μια μεταβλητή τον αύξοντα αριθμό του βήματος, την τιμή που υπολογίζεται για την λύση και το σφάλμα που έχετε, $\text{abs}(x_{\text{new}} - x)$

2. Χρησιμοποιήστε τον κώδικα του ερωτήματος 1, υπολογίστε τι θα γίνεται όταν οι αρχικές ποσότητες σε moles των αερίων που συμμετέχουν στην αντίδραση είναι:

$N_{\text{H}_2\text{S}}$	N_{O_2}	N_{H_2}	N_{SO_2}
2-0.02*a	1	1	0

Σχολιάστε τυχόν διαφορές στα αποτελέσματα των δυο ερωτημάτων.

Παρατηρήσεις

1. Η εργασία είναι αυστηρά ατομική.
2. **Απορίες-Παράδοση λυμένων ασκήσεων:** Για απορίες να απευθύνεστε στον Δρ. Φίλιππο Δογάνη, Γραφείο Η1.401 (στον διπλανό διάδρομο από το Υπολογιστικό Κέντρο) ή με e-mail στην διεύθυνση: fdoganis@chemeng.ntua.gr, βάζοντας υποχρεωτικά στο θέμα του μηνύματος «3^η Εργασία ΑΣΧΜ». Η παράδοση των εργασιών θα γίνεται **μόνο μέσω του συστήματος υποβολής εργασιών** <http://weblab.chemeng.ntua.gr/submission.htm> στην επιλογή **Υπολογιστικά Θέματα**.
3. **Προσοχή:** Να υποβάλετε συνολικά ένα αρχείο **κειμένου PDF**.
4. Στο κείμενο της εργασίας να αναφέρετε το όνομα και τον κωδικό σας.
5. Στο αρχείο αυτό **απαραίτητα να εξηγείτε με σχόλια** τον τρόπο σκέψης σας **σε κάθε γραμμή**. Επίσης, να φαίνονται οι αριθμητικές τιμές που υπολογίζονται (κάντε copy-paste ή βάλτε screenshot με Print Screen). Θα πρέπει να δείχνετε όλα τα αποτελέσματα και **να μην χρειάζεται κάποιος να τρέξει τον κώδικά σας**.
6. **Προθεσμία παράδοσης εργασίας: 29/5/2017 12:00 το μεσημέρι.**