

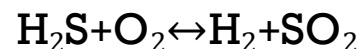
# ΘΕΜΑ 3

Άσκηση εφαρμογής της μεθόδου **Newton Raphson**



# ΘΕΜΑ 3

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:

$$\frac{y_{\text{H}_2} y_{\text{SO}_2}}{10/64 - 64(y_{\text{H}_2\text{S}} y_{\text{O}_2})^2} = 1.51457$$

Γράψτε πρόγραμμα που να χρησιμοποιεί την μέθοδο **Newton-Raphson** για τον υπολογισμό του μείγματος ισορροπίας: δηλαδή υπολογίστε πόσα mole **H<sub>2</sub>S**, **O<sub>2</sub>**, **H<sub>2</sub>**, **SO<sub>2</sub>** απαρτίζουν το μείγμα ισορροπίας.

▪ Υπόδειξη: Υπολογίστε την ποσότητα του **H<sub>2</sub>S** που έχει καταναλωθεί (αντιδράσει) στην περίπτωση που η αντίδραση κινείται δεξιά ή την ποσότητα **H<sub>2</sub>S** που έχει παραχθεί στην περίπτωση που η αντίδραση κινείται αριστερά για να επιτευχθεί ισορροπία στους 600K και 10 atm.

A.	$\text{NH}_2\text{S}$	$\text{NO}_2$	$\text{NH}_2$	$\text{NSO}_2$
	<b>3</b>	<b>2</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
B.	$\text{NH}_2\text{S}$	$\text{NO}_2$	$\text{NH}_2$	$\text{NSO}_2$
	<b>3</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>0</b>

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

- Αρχική κατάσταση μείγματος:

$$N_{\text{H}_2\text{S}} = 5\text{mol}, N_{\text{O}_2} = 3\text{mol}, N_{\text{H}_2} = 0\text{mol}, N_{\text{SO}_2} = 0\text{mol}$$

- $N_{\text{gaseous mixture}} = 8\text{mol}$

- Αρχικά μοριακά κλάσματα:

$$y_{\text{H}_2\text{S}} = 0.625, y_{\text{O}_2} = 0.375$$

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

- Από τη στοιχειομετρία της αντίδρασης έχουμε για κάθε ένα mole αντιδρώντος τη δημιουργία ενός mole προϊόντος
- Είναι αναμενόμενο ότι μετά την αποκατάσταση της ισορροπίας θα ισχύει:

$$2 \leq \text{H}_2\text{S} \leq 5 \text{ \& } 0 \leq \text{O}_2 \leq 3 \text{ mol}$$

και

$$0.25 \leq y_{\text{H}_2\text{S}} \leq 0.625 \text{ \& } 0 \leq y_{\text{O}_2} \leq 0.375 \text{ mol}$$

- Τέλος έχουμε ως δεδομένο ότι ισχύει η σχέση μεταξύ αντιδρώντων – προϊόντων που καθορίζει την ισορροπία:

$$\frac{y_{\text{H}_2} y_{\text{SO}_2}}{10 / 64 - 64 (y_{\text{H}_2\text{S}} y_{\text{O}_2})^2} = 1.51457$$

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

- Έστω ότι δημιουργήθηκαν  $x$  mol προϊόντων
- Από τη στοιχειομετρία της αντίδρασης και τη δεδομένη αρχική ποσότητα αντιδρώντων προκύπτει η τελική κατάσταση ισορροπίας του μείγματος:

$$N_{\text{H}_2\text{S}}=5-x \text{ mol}, N_{\text{O}_2}=3-x \text{ mol},$$
$$N_{\text{H}_2}=x \text{ mol}, N_{\text{SO}_2}=x \text{ mol}$$

- Έτσι τα μοριακά κλάσματα αντιδρώντων και προϊόντων δεδομένου ότι το  $N_{\text{mixture}}=8\text{mol}$  θα είναι:

$$y_{\text{H}_2\text{S}}=(5-x)/8 \text{ mol}, y_{\text{O}_2}=(3-x)/8 \text{ mol},$$
$$y_{\text{H}_2}=x/8 \text{ mol}, y_{\text{SO}_2}=x/8 \text{ mol}$$

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

- Έτσι η σχέση που ισχύει για την ισορροπία στους 600K και 10atm θα γίνει:

$$\frac{x^2}{10 - [(5 - x)(3 - x)]^2} = 1.51457$$

- και ισοδύναμα προκύπτει η πολυωνυμική σχέση 4<sup>ου</sup> βαθμού:

$$1.51457 [(5 - x)(3 - x)]^2 + x^2 - 15.1457 = 0 \quad (\text{εξ. 1})$$

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

- Το πρόβλημα υπολογισμού της ισορροπίας έχει αναχθεί σε πρόβλημα υπολογισμού των ριζών της εξίσωσης (εξ. 1).
- Η επίλυσή της (εξ. 1) με αναλυτικές μεθόδους είναι επίπονη
- Σε πιο πολύπλοκες σχέσεις από αυτήν η επίλυση με **αναλυτικές** μεθόδους είναι αδύνατη γενικά.
- Για τους λόγους αυτούς θα ακολουθήσουμε **αριθμητικές** μεθόδους επίλυσης

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ  
ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ  
ΡΙΖΩΝ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ  $F(X)=0$



# ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΡΙΖΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ

Στην κατηγορία αυτή υπάρχουν πολλές μεθοδολογίες, οι πιο δημοφιλείς είναι:

- Μέθοδος διχοτόμησης (Bolzano),

Βασίζεται στο **θεώρημα ενδιάμεσων τιμών**:

*Αν η  $f$  ανήκει στο  $C[a,b]$  και  $K$  είναι ένας οποιοσδήποτε αριθμός μεταξύ του  $f(a)$  και  $f(b)$ , τότε υπάρχει ένας αριθμός  $c$  που ανήκει στο  $(a,b)$  για το οποίο  $f(c)=K$*

**(+) Συγκλίνει πάντα (-) Είναι γενικά μια αργή μέθοδος**

- Μέθοδος Newton Raphson

Βασίζεται στο **ανάπτυγμα Taylor**:

*Έστω  $y=f(x)$  και ότι  $f(x_0)$  &  $dy/dx_0$  είναι γνωστά, αλλά θέλουμε να γνωρίζουμε την τιμή της  $f(x_1)$  που  $x_1$  έχει κοντινή τιμή στην  $x_0$ . Μπορούμε να προσεγγίσουμε την τιμή της  $f(x_1)$  από την γραμμική σχέση:*

$$f(x_1) \approx f(x_0) + dy/dx_0 (x_1 - x_0)$$

**(+) Είναι πολύ γρήγορη μέθοδος με πολύ μικρό σφάλμα**

**(-) Έχει προβλήματα σταθερότητας και εξαρτάται από τις αρχικές τιμές**

# ΜΕΘΟΔΟΣ NEWTON-RAPHSON

Για να βρούμε τις ρίζες  $\rho=(\rho_1,\rho_2,\dots,\rho_n)$  της εξίσωσης  $f(\mathbf{x})=0$ , η οποία έχει γνωστή παράγωγο  $f'(\mathbf{x}_0)$  σε μια τιμή  $\mathbf{x}_0$  στη γειτονία της ρίζας  $\rho_i$ , από το ανάπτυγμα Taylor πρώτου βαθμού θα έχουμε:

$$f(\rho_i) \approx f(x_0) + f'(x_0)(\rho_i - x_0)$$

Και ισοδύναμα προκύπτει η προσέγγιση  $\mathbf{x}_1$  της  $\rho_i$ :

$$\rho_i \approx x_1 = x_0 + \frac{f(\rho_i) - f(x_0)}{f'(x_0)} \stackrel{f(\rho_i)=0}{=} x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (\text{εξ. 2})$$

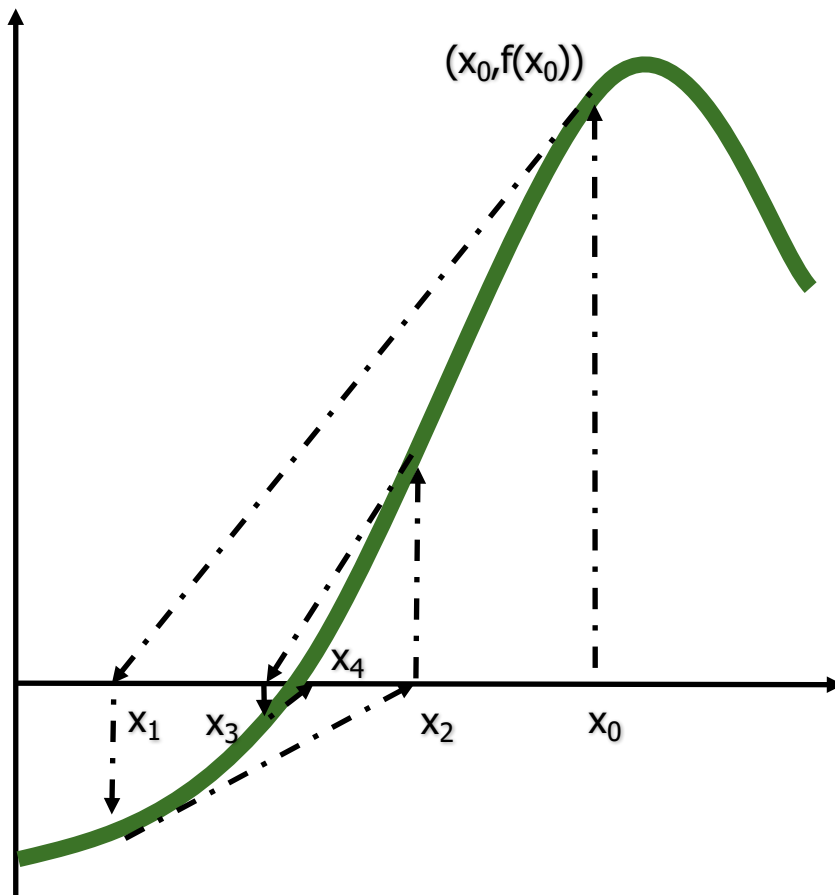
# ΜΕΘΟΔΟΣ NEWTON-RAPHSON

Στη σχέση (εξ. 2) η τιμή  $\mathbf{x}_1$  είναι μια καλύτερη προσέγγιση της ρίζας  $\rho_i$ . Επαναλαμβάνοντας την διαδικασία της (εξ. 2) θεωρώντας ως αρχική τιμή την προσέγγιση  $\mathbf{x}_1$  στη θέση της  $\mathbf{x}_0$ , προκύπτει η επαναληπτική σχέση που ορίζει την μέθοδο Newton-Raphson:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, n = 0, 1, \dots \quad (\text{εξ. 3})$$

Η σχέση αυτή τερματίζεται όταν η εκτίμηση του σφάλματος είναι μικρότερη από μια επιθυμητή τιμή ανοχής:  $|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n| \leq \mathbf{tol}$

# ΓΕΩΜΕΤΡΙΚΗ ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ



Στο σχήμα δεξιά παρατηρούμε την γεωγραφική ερμηνεία της μεθόδου NR. Έστω ένα σημείο  $x_0$ , το οποίο θεωρούμε ως την πρώτη προσέγγιση στη ρίζα. Παίρνοντας την εφαπτομένη της καμπύλης στο σημείο  $[x_0, f(x_0)]$  προσδιορίζουμε ένα νέο σημείο  $x_1$  από την τομή της εφαπτομένης με τον άξονα, κ.ο.κ.

# ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΗΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥ

Σε πραγματικά προβλήματα ο υπολογισμός της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης  $f(\mathbf{x})$  **δεν είναι εφικτός**

- λόγω της **πολυπλοκότητας** των αλγεβρικών πράξεων που απαιτούνται
- σε πραγματικά προβλήματα η εξίσωση  $f(\mathbf{x})$  δύναται να είναι πεπλεγμένη και **να μην είναι δυνατή η ανάλυσή της**.

Για τους λόγους αυτούς η πρώτη παράγωγος  $f'(\mathbf{x})$  μπορεί να προσεγγιστεί από την σχέση του ορισμού της:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

καλύτερα αποτελέσματα μπορούν να επιτευχθούν από τη σχέση:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

# ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΩΝ ΑΡΧΙΚΩΝ ΤΙΜΩΝ

Όπως κάθε μεθοδολογία της αριθμητικής ανάλυσης που εξαρτάται από αρχικές τιμές, έτσι και η μεθοδολογία Newton Raphson για την εύρεση των ριζών εξίσωσης **εξαρτάται ιδιαίτερα από τις αρχικές τιμές.**

Με λανθασμένη εκτίμηση των αρχικών τιμών είναι δυνατόν να οδηγήσει σε

- **μη εύρεση όλων των ριζών της εξίσωσης**
- **άεντες επαναλήψεις χωρίς σύγκλιση.**

Σε πραγματικά προβλήματα η εκτίμηση των αρχικών τιμών γίνεται **βάσει εμπειρίας** ή με τη χρήση μιας **δεύτερης μεθοδολογίας** για τον χονδροειδή υπολογισμό των αρχικών τιμών.

Το πιο συνηθισμένο σε τέτοιες περιπτώσεις είναι η διερεύνηση στο πεδίου ορισμού της συνάρτησης για τον υπολογισμό των αρχικών τιμών με τη **μέθοδο της διχοτόμησης.**

# ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΩΝ ΑΡΧΙΚΩΝ ΤΙΜΩΝ

Σύμφωνα με την αρχή της μεθόδου της διχοτόμησης όταν σε ένα διάστημα  $[a, b]$  ισχύει ότι:

$$f(a)f(b) < 0$$

τότε υπάρχει τουλάχιστον μια ρίζα στο διάστημα  $[a, b]$ .

Βέβαια πρέπει να δοθεί ιδιαίτερη προσοχή στην περίπτωση που στο διάστημα  $[a, b]$  υπάρχουν περισσότερες της μιας ρίζες, οπότε δεν ισχύει και η παραπάνω συνθήκη.

Για το λόγο αυτό σε κάθε πρόβλημα θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη όλες οι παράμετροι του προβλήματος και να συνεκτιμώνται ώστε η επίλυση να προσεγγίζει όσο το δυνατόν περισσότερο στην πραγματικότητα

# ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ NEWTON RAPHSON



# ΨΕΥΤΟΚΩΔΙΚΑΣ NEWTON RAPHSON

INPUT:  $x_0$ ,  $h$ ,  $tol\_root$  (ανοχή στην εύρεση ρίζας),  $tol\_x$  (ανοχή στις τιμές  $x$ ),  $i_{max}$   
(τις τιμές για τις παραπάνω παραμέτρους πρέπει να τις επιλέξετε εσείς)

*STEP1*: SET  $x=x_0$ , SET  $i=0$

*STEP2*: SET  $i=i+1$

CALCULATE  $f(x)$

CALCULATE  $f^-(x)=f(x-h)$

CALCULATE  $f^+(x)=f(x+h)$

CALCULATE  $f'(x)=[f^+(x)-f^-(x)]/2h$

*STEP4*: **if**  $f'(x)=0$  **then** {

**if**  $f(x) \leq tol\_root$  **then goto** 10 //success

**else** SET  $X=X_0+h$

}

*STEP5*: SET  $x_{new}=x-f(x)/f'(x)$

*STEP6*: **if**  $i > i_{max}$  **then exit** //failure

*STEP7*: **if**  $abs(x_{new}-x) \leq tol\_x$  **then goto** STEP10 //success

**else goto** STEP8

*STEP8*: SET  $x=x_{new}$

*STEP9*: **goto** STEP2

*STEP10*: **exit**

OUTPUT:  $x_{root}=x_{new}$

# ΚΩΔΙΚΑΣ ΣΕ ΓΛΩΣΣΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΥ

Οι βασικές αρχές για να δημιουργηθεί ένα πρόγραμμα που θα επιλύει το παραπάνω πρόβλημα είναι:

1. Κατασκευή μιας κεντρικής ρουτίνας εισαγωγής αρχικών τιμών ( $\mathbf{x}$ ,  $h$ ,  $tol$ ).
2. Κατασκευή των **function** που θα υπολογίζουν την τιμή της συνάρτησης και την τιμή της παραγώγου της συνάρτησης
3. Κατασκευή ενός **function** που θα υπολογίζει την εκτίμηση σφάλματος  $tol$
4. Κατασκευή ενός **subroutine** ή **function** το οποίο θα εκτελεί μέχρι  $i_{max}$  **loops** για τον υπολογισμό της νέας τιμής του  $\mathbf{x}$  βάσει του αναγωγικού τύπου της **Newton Raphson**
5. Αν η εκτέλεση ήταν επιτυχής τότε καταγραφή σε αρχείο των αποτελεσμάτων ή ενημέρωση του χρήστη μέσω κατάλληλου διαλόγου. Σε αντίθετη περίπτωση ενημέρωση του χρήστη (αρχείο ή διάλογος) ότι η μεθοδολογία απέτυχε σε τόσους κύκλους.

# ΕΡΩΤΗΜΑ 1

## Αρχικές τιμές:

Η σχέση (εξ. 1) είναι πολυώνυμο 4<sup>ου</sup> βαθμού. Οπότε περιμένουμε να έχει μέχρι και 4 ρίζες, από τις οποίες μόνον η μια θα έχει φυσική σημασία και οι υπόλοιπες θα πρέπει να απορριφθούν.

Δεδομένης της στοιχειομετρίας του προβλήματος η τιμή του  $x$  που θα είναι αποδεκτή είναι εντός του διαστήματος  $[0, 3]$ , δηλαδή από το να αντιδράσει όλο το  $O_2$  (μετατόπιση της ισορροπίας δεξιά) μέχρι να μην αντιδράσει καθόλου (μετατόπιση της ισορροπίας αριστερά).

Έτσι μπορούμε να δώσουμε ως αρχική τιμή είτε το  $x=0$  (δηλαδή ότι δεν αντέδρασε καθόλου), είτε  $x=3$  (δηλαδή ότι αντέδρασε όλο).

# ΕΡΩΤΗΜΑ 1

Αρχική τιμή  $x=0$

Παράμετροι:  $h=0.001$ ,  $tol=1e-5$  και **maximum** αριθμό επαναλήψεων τις 50 φορές.

<b>n</b>	<b>f(x)</b>	<b>f<sup>-</sup>(x)</b>	<b>f<sup>+</sup>(x)</b>	<b>f'(x)</b>	<b>x<sub>n</sub></b>	<b>x<sub>n+1</sub></b>	<b>error</b>
<b>0</b>	325.63255	325.26920	325.99619	-363.49682	0.00000	0.89583	0.89583
<b>1</b>	98.61030	98.77100	98.44978	-160.61340	0.89583	1.50979	0.61396
<b>2</b>	28.10550	28.18100	28.03010	-75.44652	1.50979	1.88232	0.37252
<b>3</b>	6.78783	6.82881	6.74693	-40.94095	1.88232	2.04811	0.16580
<b>4</b>	1.00714	1.03630	0.97804	-29.13072	2.04811	2.08268	0.03457
<b>5</b>	0.03847	0.06542	0.01158	-26.91922	2.08268	2.08411	0.00143
<b>6</b>	0.00006	0.02693	-0.02673	-26.82961	2.08411	2.08412	0.00000

# ΕΡΩΤΗΜΑ 1

Αρχική τιμή:  $x=3$

Παράμετροι:  $h=0.001$ ,  $tol=1e-5$  και maximum αριθμό επαναλήψεων τις 50 φορές.

<b>n</b>	<b>f(x)</b>	<b>f<sup>-</sup>(x)</b>	<b>f<sup>+</sup>(x)</b>	<b>f' (x)</b>	<b>x<sub>n</sub></b>	<b>x<sub>n+1</sub></b>	<b>error</b>
<b>0</b>	-6.14570	-6.15169	-6.13969	5.99999	3.00000	4.02428	1.02428
<b>1</b>	2.56195	2.55405	2.56985	7.90153	4.02428	3.70005	0.32423
<b>2</b>	-0.20103	-0.21009	-0.19198	9.05379	3.70005	3.72225	0.02220
<b>3</b>	-0.00062	-0.00962	0.00838	8.99736	3.72225	3.72232	0.00007
<b>4</b>	0.00000	-0.00900	0.00900	8.99718	3.72232	3.72232	0.00000

# ΕΡΩΤΗΜΑ 1

Έτσι βρέθηκαν δυο λύσεις για τις δυο αρχικές τιμές:

Λύση I: αντέδρασαν  $x=2.08412$  mol, άρα η σύσταση του τελικού μείγματος ισορροπίας στους 600K και 10 atm θα είναι:

$$N_{\text{H}_2\text{S}} = 2.91588 \quad N_{\text{O}_2} = 0.91588 \quad N_{\text{H}_2} = 2.08412 \quad N_{\text{SO}_2} = 2.08412$$

Λύση II: αντέδρασαν  $x=3.72232$  mol, άρα η σύσταση του τελικού μείγματος ισορροπίας στους 600K και 10 atm θα είναι:

$$N_{\text{H}_2\text{S}} = 1.27768 \quad N_{\text{O}_2} = -0.72232 \quad N_{\text{H}_2} = 3.72232 \quad N_{\text{SO}_2} = 3.72232$$

**Η ΛΥΣΗ II ΔΕΝ ΜΠΟΡΕΙ ΝΑ ΕΧΕΙ ΦΥΣΙΚΗ ΣΗΜΑΣΙΑ!**

# ΕΡΩΤΗΜΑ 1

Τέλος για την εύρεση τυχόν άλλων λύσεων θα έπρεπε να γίνει διερεύνηση στο πεδίο τιμών της  $f(x)$

**Ο έλεγχος αυτός χρειάζεται να γίνει μόνον για να δούμε αν υπάρχουν άλλες λύσεις στο διάστημα  $[0, 3]$ , στο οποίο έχουμε βρει την λύση  $x=2.08412$  mol.**

Έτσι μπορούμε να ελέγξουμε τις τιμές της  $f(x)$  για  $x=0$ ,  $x=1$ ,  $x=2$ ,  $x=2.25$ ,  $x=2.50$ ,  $x=2.75$  και  $x=3.00$

<b>x</b>	0.0	1.0	2.0	2.25	2.5	2.75	3.0
<b>f(x)</b>	325.63255	82.78678	2.48543	-3.64036	-6.52918	-7.10398	-6.14570
<b>πρόσημο</b>	+	+	+	-	-	-	-

Από τον έλεγχο αυτό συμπεραίνουμε ότι στο διάστημα  $[0,3]$  υπάρχει μόνον μια ρίζα και αυτή βρίσκεται στο διάστημα  $(2.00, 2.25)$ , οπότε δεν χρειάζεται να δοκιμάσουμε άλλες αρχικές τιμές

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

(ΕΡΩΤΗΜΑ 2)



# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ (ΕΡΩΤΗΜΑ 2)

- Αρχική κατάσταση μείγματος:

$$N_{\text{H}_2\text{S}} = 3\text{mol}, N_{\text{O}_2} = 2\text{mol}, N_{\text{H}_2} = 3\text{mol}, N_{\text{SO}_2} = 0\text{mol}$$

- $N_{\text{gaseous mixture}} = 8\text{mol}$

- Αρχικά μοριακά κλάσματα:

$$y_{\text{H}_2\text{S}} = 0.375, y_{\text{O}_2} = 0.250$$

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ (ΕΡΩΤΗΜΑ 2)

- Από τη στοιχειομετρία της αντίδρασης έχουμε για κάθε ένα mole αντιδρώντος τη δημιουργία ενός mole προϊόντος
- Είναι αναμενόμενο ότι μετά την αποκατάσταση της ισορροπίας θα ισχύει:

$$1 \leq H_2S \leq 3 \text{ \& } 0 \leq O_2 \leq 2 \text{ mol}$$

και

$$0.125 \leq y_{H_2S} \leq 0.375 \text{ \& } 0 \leq y_{O_2} \leq 0.250 \text{ mol}$$

- Τέλος έχουμε ως δεδομένο ότι ισχύει η σχέση μεταξύ αντιδρώντων – προϊόντων που καθορίζει την ισορροπία:

$$\frac{y_{H_2} y_{SO_2}}{10 / 64 - 64 (y_{H_2S} y_{O_2})^2} = 1.51457$$

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ (ΕΡΩΤΗΜΑ 2)

- Έστω ότι δημιουργήθηκαν  $x$  mol προϊόντων και ότι η αντίδραση κινήθηκε προς τα δεξιά.
- Από τη στοιχειομετρία της αντίδρασης και τη δεδομένη αρχική ποσότητα αντιδρώντων προκύπτει η τελική κατάσταση ισορροπίας του μείγματος:

$$N_{\text{H}_2\text{S}} = 3 - x \text{ mol}, N_{\text{O}_2} = 2 - x \text{ mol},$$
$$N_{\text{H}_2} = (3 + x) \text{ mol}, N_{\text{SO}_2} = x \text{ mol}$$

- Έτσι τα μοριακά κλάσματα αντιδρώντων και προϊόντων δεδομένου ότι το  $N_{\text{mixture}} = 8 \text{ mol}$  θα είναι:

$$y_{\text{H}_2\text{S}} = (3 - x) / 8 \text{ mol}, y_{\text{O}_2} = (2 - x) / 8 \text{ mol}, y_{\text{H}_2} = (3 + x) / 8 \text{ mol}, y_{\text{SO}_2} = x / 8 \text{ mol}$$

# ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ (ΕΡΩΤΗΜΑ 2)

- Έτσι η σχέση που ισχύει για την ισορροπία στους 600K και 10atm θα γίνει μετά τις απαλοισφές:

$$\frac{x(3+x)}{10 - [(2-x)(3-x)]^2} = 1.51457$$

- και ισοδύναμα προκύπτει η πολυωνυμική σχέση 4<sup>ου</sup> βαθμού:

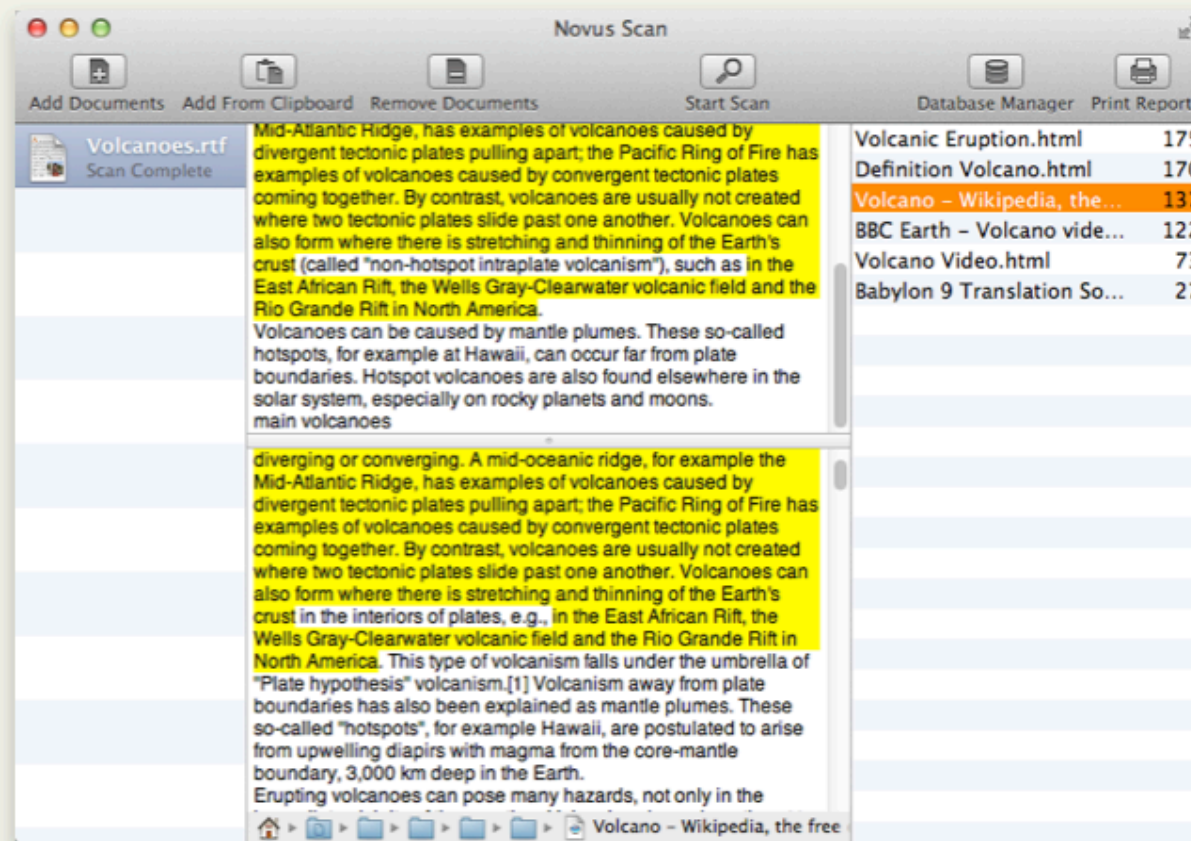
$$1.51457 [(2-x)(3-x)]^2 + x(3+x) - 15.1457 = 0 \quad (\text{εξ. 4})$$

- Στο προηγούμενο ερώτημα η σχέση ήταν:

$$1.51457 [(5-x)(3-x)]^2 + x^2 - 15.1457 = 0$$

## Scan Away

Click a button and the scanning engine compares your document to the contents of your database, looking for matching groups of words.



# ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ - ΔΙΕΥΚΡΙΝΗΣΕΙΣ

- Οποιαδήποτε απορία – διευκρίνηση στο e-mail: [floganis@chemeng.ntua.gr](mailto:floganis@chemeng.ntua.gr)
- Σε οποιαδήποτε επικοινωνία θα σημειώνετε το ονοματεπώνυμό σας, βάζοντας υποχρεωτικά στο θέμα του μηνύματος «3<sup>η</sup> Εργασία ΑΣΧΜ».