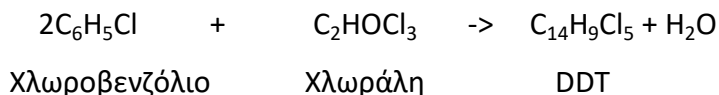


Υπολογιστική Εργασία - Γραμμική Παλινδρόμηση

Το DDT, ένα εντομοκτόνο επιβλαβές για ψάρια, πουλιά και ανθρώπους, παράγεται από την ακόλουθη αντίδραση:



Στο πλαίσιο πειράματος σε ένα ερευνητικό εργαστήριο, αντιδρούν 1351 g χλωροβενζολίου με 515.8 g χλωράλης.

1. Ποιο αντιδραστήριο είναι το περιοριστικό αντιδρών; Ποιο αντιδραστήριο είναι σε περίσσεια και πόσο % είναι η περίσσεια;
2. Πόσο DDT (σε g) παράγεται στην περίπτωση που η μετατροπή της αντίδρασης είναι 1.00 (100%);
3. Εάν το παραγόμενο DDT είναι 283.6 g, ποια είναι η μετατροπή της αντίδρασης και ποια η απόδοση της διεργασίας σε (g DDT/g C_2HOCl_3) και (mol DDT/mol C_2HOCl_3);
4. Είναι χρήσιμο να γνωρίζουμε πόσο γρήγορα μειώνεται η συγκέντρωση που παρουσιάζεται σε ένα πληθυσμό που ζει σε μια περιοχή στην περίπτωση που έχει συμβεί κάποιο περιστατικό μόλυνσης.

Στον παρακάτω Πίνακα δίνονται στοιχεία για τη σχέση ανάμεσα στο χρόνο που μεσολάβησε από την έκθεση ενός πληθυσμού σολομών στη λίμνη Μίσιγκαν (ΗΠΑ) και τη συγκέντρωση που ανιχνεύθηκε στα ψάρια αυτά.

Χρόνος (Έτος από την έκθεση)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Συγκέντρωση DDT (ppm)	19.19	13.00	11.31	9.96	8.42	7.50	5.65	6.34	4.58	6.91
Χρόνος (Έτος από την έκθεση)	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Συγκέντρωση DDT (ppm)	4.74	3.22	2.74	2.22	1.10	1.44	1.39	1.16	0.98	0.85

Elements of environmental chemistry, Hites, R. A, 2007, Wiley.

Τα παραπάνω δεδομένα να τα χρησιμοποιήσετε αφού τα τροποποιήσετε σύμφωνα με την παρακάτω σχέση, θέτοντας την ημέρα, και το μήνα γέννησής σας ίσο με τις αντίστοιχες μεταβλητές:

$$C_{ddt}(i) = C_{ddt}(i) * (1 + 0.001 * (1 + month/12 + day/31) * rand)$$

- a. Να σχεδιάσετε σε διάγραμμα τη σχέση ανάμεσα στο Χρόνο και τη Συγκέντρωση DDT (ppm).
- b. Να εφαρμόσετε τη μέθοδο των ελάχιστων τετραγώνων στα δεδομένα αυτά για να βρείτε τη γραμμική προσέγγιση της σχέσης μεταξύ τους. Να παραθέσετε τα δεδομένα που έχετε υπολογίσει και να αναφέρετε την εξίσωση που υπολογίσατε και το R^2 .

- c. Επαναλάβετε τη διαδικασία χρησιμοποιώντας λογαρίθμηση. Να παραθέσετε τα δεδομένα που έχετε υπολογίσει και να αναφέρετε την εξίσωση που υπολογίσατε και το R^2 .
- d. Ορίζουμε τον χρόνο ημιζωής μιας ουσίας ως:

Το χρονικό διάστημα που απαιτείται ώστε το 50% της ουσίας να είναι παρόν σε κάποιο άτομο, πληθυσμό ή οικοσύστημα προκειμένου να αποδομηθεί και να εξαφανισθεί διά της φυσικής οδού. Συχνά ο όρος χρησιμοποιείται για να περιγράψει την εξαφάνιση δυνητικώς επιβλαβών ουσιών όπως οι χημικές τοξίνες

(<https://www.efsa.europa.eu/el/glossary/half-life>).

Θεωρήστε ότι ο χρόνος ημιζωής του DDT στους οργανισμούς που αναφέρθηκαν εκφράζεται από την παρακάτω σχέση:

$$C(t) = C_0 e^{-\lambda t}$$

C_0 η αρχική συγκέντρωση

$C(t)$ η συγκέντρωση σε χρόνο t

λ η σταθερά του ρυθμού απομάκρυνσης της ουσίας

Να υπολογίσετε το χρόνο ημιζωής του DDT χρησιμοποιώντας τη σχέση που έχετε εξάγει στο ερώτημα 4c.

Διευκρινίσεις

1. Η εργασία είναι ατομική. Οι εργασίες ελέγχονται ηλεκτρονικά για πιθανή αντιγραφή και στην περίπτωση πιστοποίησης μερικής ή ολικής αντιγραφής οι εργασίες όλων των εμπλεκομένων μηδενίζονται.
2. Θα βαθμολογηθούν μόνο εργασίες που έχουν γραφεί με **χρήση υπολογιστή**. Για τους υπολογισμούς να χρησιμοποιήσετε Matlab ή Octave. Τον κώδικά σας θα τον βάζετε στο αρχείο σε μορφή κειμένου, όχι ως εικόνα.
3. Απορίες
Για απορίες να απευθύνεστε στον κ. Φίλιππο Δογάνη με e-mail στην διεύθυνση: fdoganis@chemeng.ntua.gr, βάζοντας **υποχρεωτικά στο θέμα του μηνύματος «EXM: Υπολογιστική Εργασία»**.
4. Μορφή Εργασίας
Να υποβάλετε συνολικά 1 αρχείο **κειμένου PDF**, το οποίο να συμπεριλαμβάνει το κείμενό σας, τον κώδικα και τα αποτελέσματα (PDF μπορείτε να παράγετε από τις εφαρμογές ή από δωρεάν εργαλεία στο διαδίκτυο).
5. Παράδοση εργασίας
 - a. Όσοι έχουν ακαδημαϊκό κωδικό, θα αναρτήσουν την εργασία τους στην ιστοσελίδα του μαθήματος στο Helios: <https://helios.ntua.gr/course/view.php?id=1287&lang=el>
 - b. Όσοι δεν έχουν ακαδημαϊκό κωδικό (δεν έχει ολοκληρωθεί η εγγραφή στη Σχολή), θα αναρτήσουν την εργασία τους στο παρακάτω link: <https://www.chemeng.ntua.gr/submission/exm.php> στην επιλογή «**1: Υπολογιστικά Θέματα**».

Εάν το μέγεθος του αρχείου pdf είναι μεγαλύτερο από 20 Mb για την περίπτωση a και 5 Mb για την περίπτωση b, το αρχείο δεν μπορεί να αναρτηθεί και θα πρέπει να χρησιμοποιήσετε κάποιο από τα online tool που ελαττώνουν το μέγεθος του αρχείου, π.χ.: <https://smallpdf.com/compress-pdf>

6. Στο κείμενο της εργασίας να αναφέρετε:

- το ονοματεπώνυμο
- τον αριθμό μητρώου

Στο αρχείο να δείχνετε ανά ερώτημα:

- τον **κώδικα** που σας ζητείται (ο κώδικας να έχει όλες τις παραμέτρους και να τρέχει **χωρίς να λαμβάνει δεδομένα από τον χρήστη, δηλαδή χωρίς input**).
- **απαραίτητα να εξηγείτε με σχόλια** τον τρόπο σκέψης σας και την λειτουργία που επιτελούν οι κύριες γραμμές (αναλυτικά αλλά όχι περισσότερο από 1 σειρά ανά γραμμή κώδικα).
- να εμφανίζετε όλες τις αριθμητικές τιμές για όλες τις μεταβλητές που υπολογίζονται με εντολές εκτύπωσης μέσα από το πρόγραμμα, ώστε να φαίνεται η πορεία των υπολογισμών, όχι μόνο το τελικό αποτέλεσμα κάθε φορά, ώστε να μην χρειάζεται να τρέξει κάποιος τον κώδικα για να δει τα αποτελέσματά σας.

7. Προθεσμία παράδοσης εργασίας: **Τετάρτη 13/12/2023.**

Βιβλιογραφία

1. Πληροφορίες επιστημονικού χαρακτήρα για το DDT
 - a. Βάση δεδομένων χημικών ουσιών ChEMBL https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL416898/
 - b. Γενικές πληροφορίες και Ιστορικό http://195.134.76.37/chemicals/chem_ddt.htm
 - c. Απεικόνιση της τριδιάστατης δομής <https://molview.org/?cid=3036>
2. Πληροφορίες για το DDT στα μέσα κοινωνικής δικτύωσης
 - a. https://www.youtube.com/results?search_query=ddt+pesticide
 - b. <https://www.tiktok.com/search?q=DDT%20pesticide&t=1700749303537>