Scritto n. 2 - 18/07/2016

Esercizio n. 1 – Deconvoluzione

Un segnale cromatografico, acquisito iniettando una miscela di due componenti, presenta due picchi in corrispondenza di tempi di eluizione diversi. Essendo i picchi parzialmente sovrapposti, si deve procedere attraverso deconvoluzione matematica, cioè per fitting di una somma di due funzioni gaussiane che, complessivamente, è del tipo:

$$F(x) = A_1 e^{-\left(\frac{x-B_1}{C_1}\right)^2} + A_2 e^{-\left(\frac{x-B_2}{C_2}\right)^2}$$

Dove i parametri A_1, B_1, C_1, A_2, B_2 e C_2 devono essere determinati per fitting sui dati sperimentali riportati nella tabella seguente:

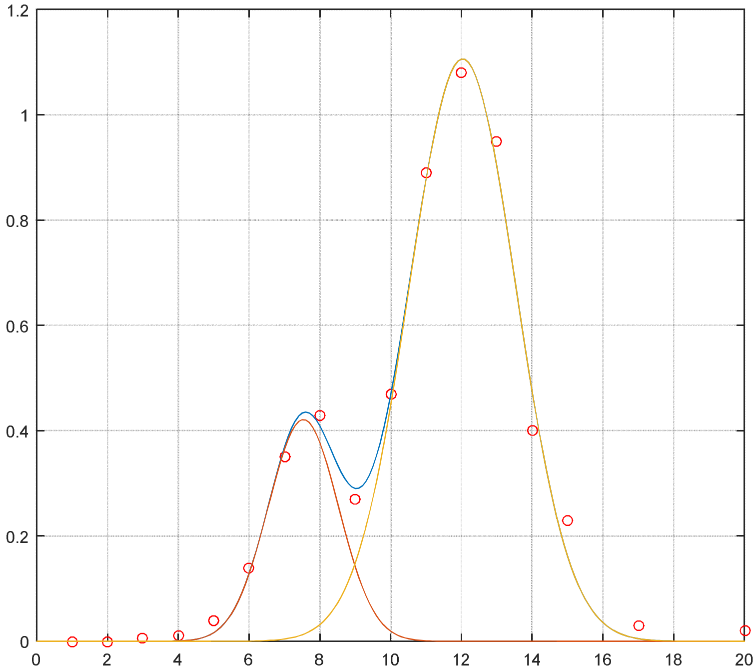
```
x: 1 2 3     4    5    6    7    8    9    10   11   12   13   14  15  17  20
y: 0 0 0.005 0.01 0.04 0.14 0.35 0.43 0.27 0.47 0.89 1.08 0.95 .40 .23 .03 .02
```

Parte 1
Determinare i parametri incogniti nella funzione F(x) che rappresenta il segnale complessivo. Riportare in un grafico i dati sperimentali, la funzione complessiva e le due gaussiane componenti.

Parte 2
Determinare la percentuale in massa dei due componenti attraverso le relazioni:
$w_1=S_1/(S_1 + S_2)$ e $w_2=S_1/(S_1 + S_2)$ con S_1 ed S_2 le aree sottese dalle due gaussiane considerate singolarmente (integrate tra x=0 e x=30).

Output

```
                                         Norm of      First-order
 Iteration  Func-count     f(x)            step          optimality
     0           7       2.26721                            2.61
     1          14     0.0573017         1.07459           0.591
     2          21      0.018711        0.244574          0.0198
     3          28      0.016622        0.126691         0.00836
     4          35     0.0165061       0.0288434         0.00176
     5          42     0.0165029      0.00446953        0.000293
     6          49     0.0165028     0.000870452        5.91e-05
p =
    0.4213    7.5339    1.4054    1.1062   12.0326    2.1397
fval =
    0.0165
w1 =
    0.2001
w2 =
    0.7999
>>
```



Esercizio n. 2 – Derivate parziali

Considerando la funzione di due variabili x e y:

$$f(x,y) = \sin(xy) - 2x^2y^3$$

Valutare l'errore che si commette calcolando le sue derivate parziali in modo approssimato usando una formula a due punti con differenze centrali, in un punto x_0=0.3 e y_0=0.1:

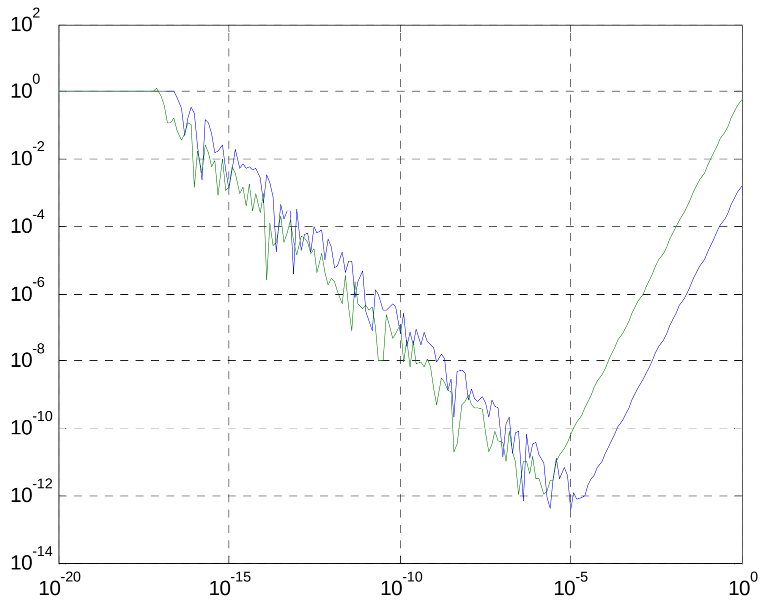
$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}$$

Effettuare il calcolo per diversi valori di h nel range h=1..10^{-20}.
Per il calcolo dell'errore relativo sulle derivate parziali, utilizzare la relazione:

$$err = \left|1 - \frac{d_n}{d_a}\right|$$

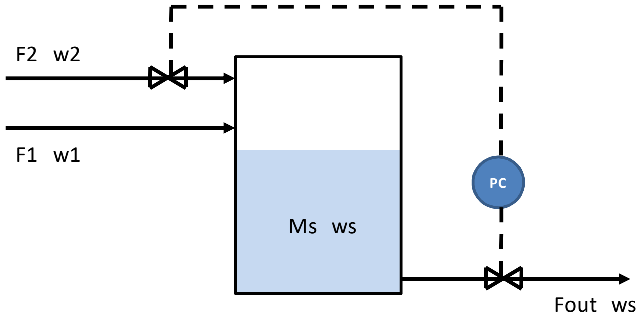
dove d_n e d_a sono, rispettivamente, le derivate numeriche ed analitiche della funzione in esame. Riportare in grafico bilogaritmico gli errori relativi in funzione dell'ampiezza di passo h.

Output



Esercizio n. 3 – Dinamica di un miscelatore continuo

Un miscelatore continuo è rappresentato nello schema in figura.



Le correnti in ingresso F1 ed F2 hanno valore, rispettivamente, di 3 e 4.5 kg/min e la loro composizione in frazione massica è di 0.4 e 0.85 riferite al componente di interesse. Dal miscelatore si vuole ottenere una corrente Fout con una composizione del 60% in peso facendo agire un controllore (PC) su due valvole rappresentate nello schema che agiscono, rispettivamente, aprendo o chiudendo i flussi F2 e Fout.

Nel serbatoio sono contenuti inizialmente 100 kg di miscela con composizione del 30%.

La portata uscente Fout è proporzionale alla massa contenuta nel serbatoio secondo la relazione:

$$Fout = \alpha Ms$$

Con α=0.008.

Per questo sistema è possibile scrivere un bilancio di massa differenziale totale ed uno sul componente:

$$\frac{dMs}{dt} = F_1 + F_2 - Fout$$

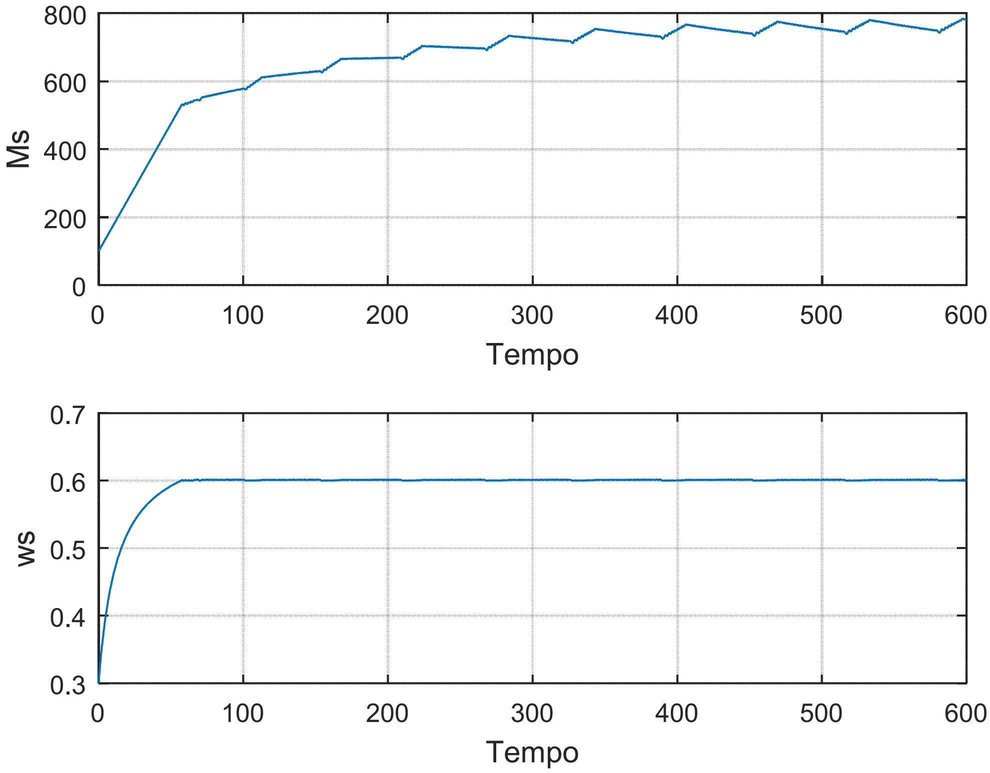
$$\frac{dw_s}{dt} = \frac{F_1 w_1 + F_2 w_2 - F_{out} w_s}{Ms} - \frac{w_s}{Ms}\frac{dMs}{dt}$$

Integrare numericamente queste due equazioni differenziali tra t=0 e t=600 riportando in grafico il profilo di Ms e di w_s in funzione del tempo. Determinare quanto tempo è necessario affinchè il sistema raggiunga una frazione massica pari al valore desiderato del 60%.

Output

```
tt =

   56.1600
```



Esercizio n. 4 – Spline cubiche

Un algoritmo di interpolazione dati molto diffuso è quello delle spline cubiche. Queste sono funzioni che consistono in una interpolazione cubica locale di una serie di dati x-y.

Sono assegnati quindi i seguenti dati sperimentali:

```
x=[0   1       2       3       4        5        6];
y=[0   0.8415  0.9093  0.1411  -0.7568  -0.9589  -0.2794];
```

In ognuno di questi N-1 intervalli x_k-x_{k+1} si può determinare una funzione cubica del tipo:

$$f(x) = a_k x^3 + b_k x^2 + c_k x \ + d_k$$

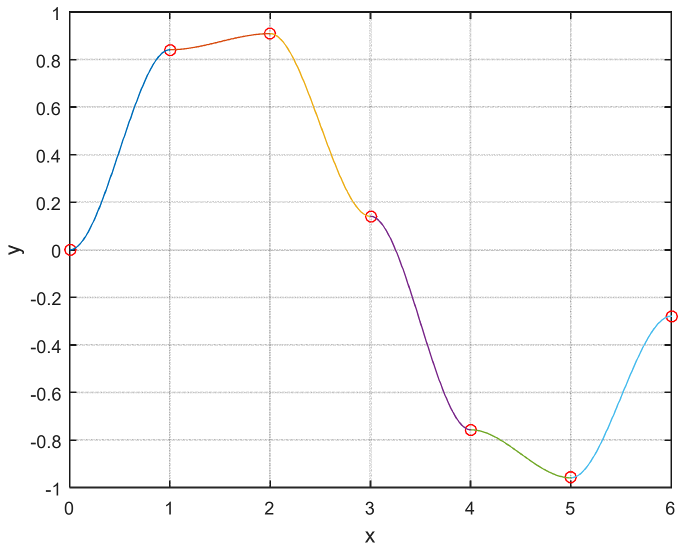
I coefficienti incogniti, in ogni intervallo, si determinano risolvendo il sistema lineare definito in forma matriciale nel modo seguente:

$$Ax = b$$

$$A = \begin{bmatrix} x_k^3 & x_k^2 & x_k & 1 \\ x_{k+1}^3 & x_{k+1}^2 & x_{k+1} & 1 \\ 3x_k^2 & 2x_k & 1 & 0 \\ 3x_{k+1}^2 & 2x_{k+1} & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} f(x_k) \\ f(x_{k+1}) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad x = \begin{bmatrix} a_k \\ b_k \\ c_k \\ d_k \end{bmatrix}$$

Tracciare un grafico con x compreso tra 0 e 6 che riporti i dati sperimentali e quelli calcolati attraverso le spline cubiche.

Output



Esercizio n. 5 – Bilancio su un reattore di combustione

In un reattore di combustione continuo viene alimentato un gas naturale contenente anche una certa aliquota di zolfo. L'analisi del gas uscente dal bruciatore ha fornito la seguente composizione come frazione molare: N_2 0.72; CO_2 0.087; H_2O 0.131; O**2** 0.06; SO**2** 0.002.
Determinare il rapporto C/H del gas alimentato. Calcolare la conversione dell'ossigeno.

Soluzione

GAS		MOL	G
	C	8,7	104,4
	H	26,2	26,2
	S	0,2	6,4
	C/H	**0,332**	
	% W S		**4,67**

ARIA		MOL
	N	144,00
	O	38,28
	CONV O2	**0,843**

$$C + O_2 \rightarrow CO_2$$

$$2H + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$$

$$S + O_2 \rightarrow SO_2$$

	FR MOL	MOL
N2	0,72000	72,00
CO2	0,08700	8,70
H2O	0,13100	13,10
O2	0,06000	6,00
SO2	0,00200	0,20
TOT	1,00000	100,00