Esercizio 9A: Decorso di Una reazione a Catena

Il decorso temporale di una reazione a catena del tipo una molecole A si converte in una molecola B che a sua volta si trasforma in una molecola di C:

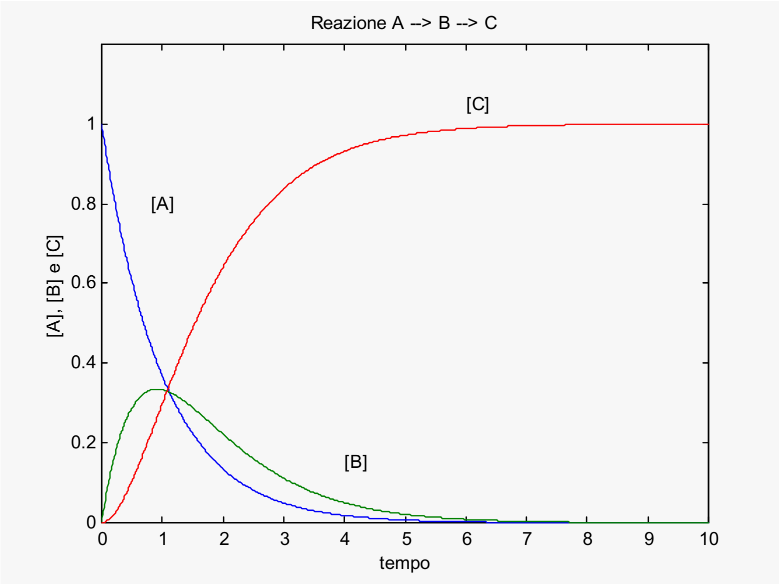
$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$$

è descritto dalle seguenti leggi temporali:

$$[A] = [A_0]e^{-kt}$$

$$[\mathrm{B}] = \left(\frac{\mathrm{k}_1[\mathrm{A}]_0}{\mathrm{k}_2 - \mathrm{k}_1}\right)\left[\exp(-\mathrm{k}_1 \mathrm{t}) - \exp(-\mathrm{k}_2 \mathrm{t})\right]$$

la prima descrive la diminuzione della concentrazione del reagente A mentre la seconda descrive l'andamento della concentrazione dell'intermedio B in funzione del tempo a seguito della reazione. $[A_0]$ rappresenta la concentrazione iniziali delle specie A. La concentrazione delle specie B e C è invece assunta nulla all'inizio.
Si scriva un codice Matlab che permetta di ottenere il seguente Grafico:



dove sono riportati gli andamenti in funzione del tempo di [A], [B] e [C], avendo impostato

k_1=1
k_2=1.2
$[A_0]$ = 1.0

Si definiscano due funzioni locali per il calcolo della concentrazione $[A]$ e $[B]$ in funzione del tempo mediante le formule su riportate e si ottenga invece $[C]$ mediante la relazione

$$[C] = [A_0] - [A] - [B]$$

Il codice dovrà quindi mostrare il grafico riportato nella figura precedente e solo il seguente output testuale nella finestra di comando:

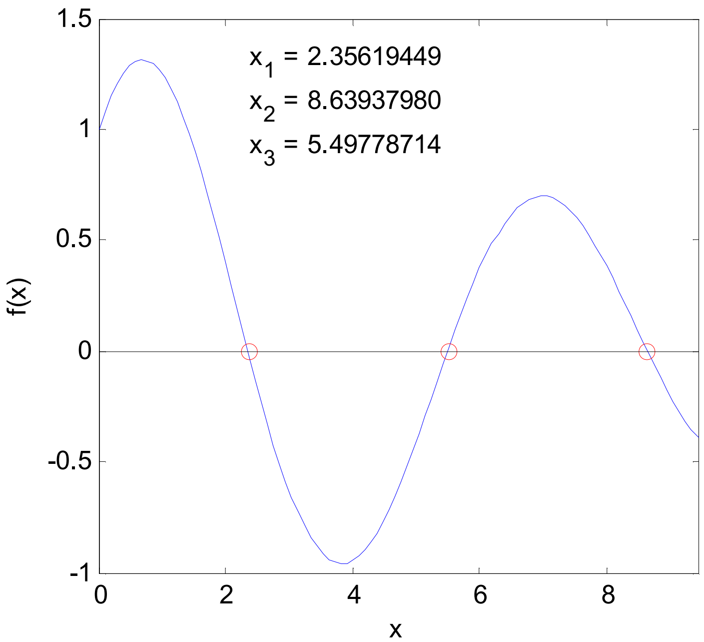
con il nome e cognome del candidato.

Esercizio 9B: Trovare lo zero di una funzione

Il grafico della funzione:

$$x \in [0, 3\pi] \longrightarrow f(x) = [\cos(x) + \sin(x)] e^{\frac{-x}{10}}$$

è il seguente:



la funzione rappresenta delle oscillazioni smorzate della variabile *y=f(x)* intorno al valore 0 e nell'intervallo di definizione interseca l'asse X in tre punti distinti.

Si realizzi uno script Matlab per ottenere il grafico nell'intervallo considerato definendo la funzione *f(x)* come una funzione locale.

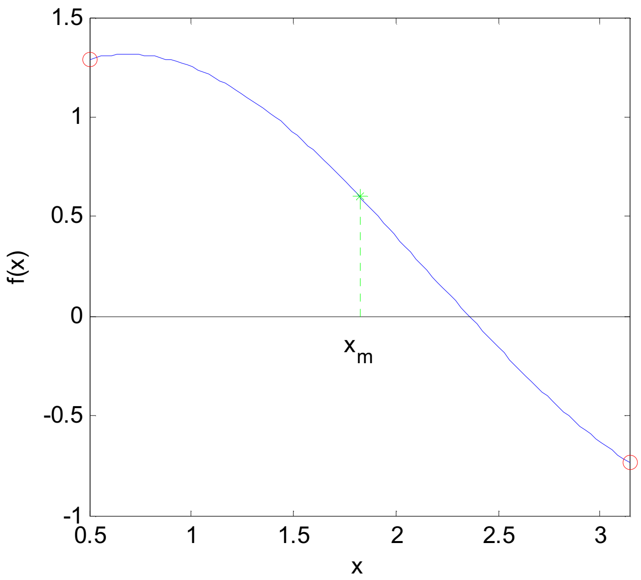
Si scriva inoltre la funzione locale:

```
function [x0] = getZero(s_Fname, x1, x2, h)
```

```
s_Fname   = Nome funzione
x1, x2    = intervallo di valori in cui è compreso lo zero: esiste
            x0 ∈ [x1, x2] tale che f(x0) = 0,
h         = precisione.
```

per la determinazione dei punti un cui la funzione si annulla utilizzando l'algoritmo delle bisezioni di seguito illustrato.

Algoritmo delle bisezioni



Data una funzione *f(x)* definita nell'intervallo [x_1, x_2] e che in detto intervallo passa per zero una sola volta, allora la funzione calcolata negli estremi deve avere segni discordi:

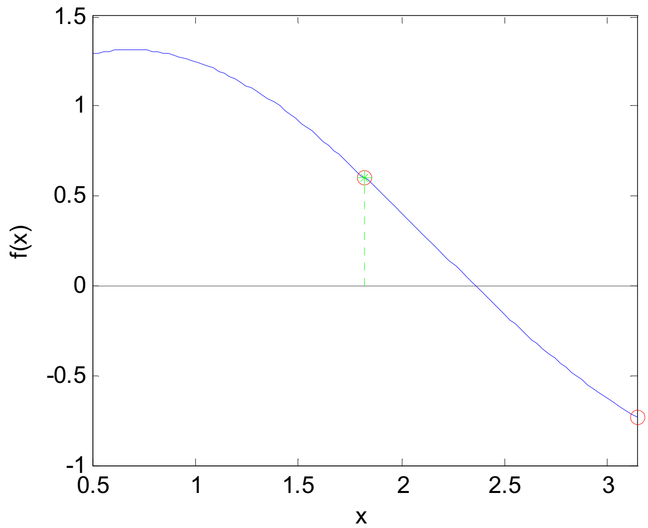
$$f(x_1)>0 \ \text{ e } \ f(x_2)< 0$$

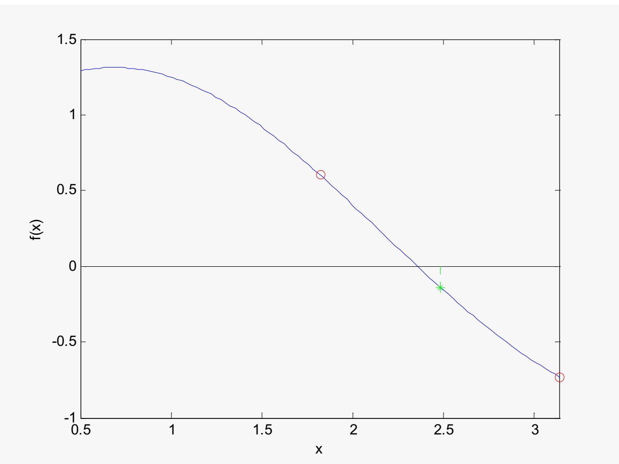
$$f(x_1)<0 \ \text{ e } \ f(x_2)> 0$$

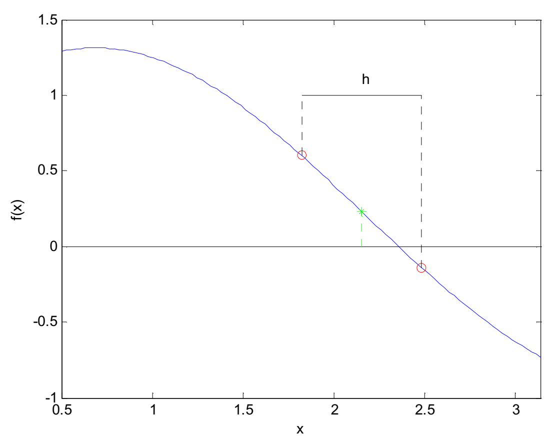
Sapendo questo, si può allora procedere dimezzando l'intervallo e calcolando il valore del punto medio:

$$x_m = \frac{x_1 + x_2}{2}$$

Quindi si deve scegliere il nuovo intervallo che contiene lo zero fra i due possibili intervalli sinistro [x_1, x_m] e destro [x_m, x_2] come quello che ha ancora valori della funzione calcolati negli estremi discordi. Nel caso in figura l'intervallo da scegliere è quello a destra di x_m che deve diventare il nuovo limite sinistro. Si può dimezzare l'intervallo un'altra volta e ripete l'operazione descritta fino a quando la differenza fra gli estremi dell'intervallo non diventa inferiore al valore di precisione *h* desiderato.







Il valore di x0 puo essere quindi stimato come il valor medio degli estremi dell'ultimo intervallo.