

# CORREZIONE ESERCIZIO 8 (03/12/09)

## ESERCIZIO 1

Utilizzando il seguente M-file:

```
dati = load('datiEserc1.txt');  
x = dati(:,1);  
y = dati(:,2);  
X = [ones(length(dati),1), 1./x, 1./x.^3];  
A = (X'*X);  
c = X'*y;  
theta = A\c
```

si perviene alla stima dei parametri a, b e c:

```
1.1008  
0.5973  
-0.4995
```

In alternativa, si può utilizzare il comando “regress” con la stessa matrice X di sopra:

```
regress(y, X)
```

ottenendo gli stessi valori dei parametri.

## ESERCIZIO 2

Prima di procedere alla stima dei parametri  $k_0$  ed E, conviene linearizzare il modello attraverso la trasformazione  $g = \ln(y)$ :

$$\ln(k) = \ln(k_0 e^{-\frac{E}{RT}}) = \ln(k_0) + \ln(e^{-\frac{E}{RT}}) = \ln(k_0) - \frac{E}{RT}$$

Definendo le seguenti variabili:

$$y = \ln(k)$$

$$x = 1/T$$

$$a = \ln(k_0)$$

$$b = -\frac{E}{R}$$

si perviene al modello lineare:

$$y = a + bx$$

Siccome abbiamo applicato una trasformazione non lineare, per la stima di a e b è necessario procedere attraverso il metodo di minimi quadrati PESATI. I pesi sono dati da:

$$w_i = \left( \frac{d \ln(k)}{dk} \Big|_{k_i} \right)^2 = \frac{1}{k^2} \Big|_{k_i}$$

Quindi, la function da costruire è:

```
function f = arrheniusLIN(c)
dati = load('datiEserc2.txt');
x = dati(:,1);
y = dati(:,2);
a = c(1);
b = c(2);
Tlin = 1./x;
klin = log(y);
w = 1./(y.^2);
f = sum(((klin - a - b*Tlin).^2)./w);
```

Utilizzando il comando “fminsearch”:

```
fminsearch(@arrheniusLIN, [1,1])
```

si hanno le seguenti stime per a e b:

```
2.4748      -138.7912
```

Da queste stime si può risalire alle stime per i parametri  $k_0$  ed E:

```
k0 = exp(a) = 11.8789
E = -bR = 1.154·103
```

Tali stime saranno utilizzate come primo tentativo per “fminsearch” o “nlinfit” applicato al modello non lineare. Utilizzando per esempio la seguente function:

```
function f = arrheniusNONLIN(theta,x)
k0 = theta(1);
E = theta(2);
R = 8.314472;
f = k0*exp(-E./(R*x));
```

con il comando “nlinfit” (dopo aver caricato in x ed y i dati):

```
nlinfit(x,y,@arrheniusNONLIN,[11.8789,1.154e3])
```

si hanno le seguenti stime di  $k_0$  ed E:

```
11.8793      1154.2
```