

Projeto 1

A espectrometria de massa é uma técnica analítica física para detectar e identificar moléculas de interesse por meio da medição da sua massa e da caracterização de sua estrutura química. A análise do espectrômetro gera uma série de alturas de sinais h_i de massa por vários íons criados. Cada altura de sinal (peak height) é obtida como a contribuição de vários compostos químicos do tipo CH . Na seguinte tabela damos o valor da contribuição c_{ij} no sinal h_i por cada unidade da concentração p_j do composto j .

| Sinal | Composto | | | | |
|-------|----------|----------|----------|----------|----------|
| | CH_4 | C_2H_4 | C_2H_6 | C_3H_6 | C_3H_8 |
| 1 | 0.165 | 0.202 | 0.317 | 0.234 | 0.182 |
| 2 | 27.7 | 0.862 | 0.062 | 0.073 | 0.131 |
| 3 | | 22.35 | 13.05 | 4.420 | 6.001 |
| 4 | | | 11.28 | 0 | 1.110 |
| 5 | | | | 9.850 | 1.684 |
| 6 | | | | | 15.94 |

Considere que foram medidos as seguintes alturas de sinais : $h_1 = 5.20$, $h_2 = 61.7$, $h_3 = 149.2$, $h_4 = 79.4$, $h_5 = 89.3$, $h_6 = 69.3$. E sabe-se que a soma das concentrações p_i é 21.53.

Determinar os valores das concentrações p_i dos compostos obtidos na espectrometria descrita da tabela e dos h_i medidos.

Para resolver o problema determinar o sistema linear que descreve os sinais obtidos em função das concentrações.

Usar um método direto e um iterativo a escolha para aproximar a solução do sistema com uma tolerância escolhida. É requerido também de

- Comparar os resultados dos dois métodos implementados, e
- Descrever em quais condições neste problema um método é preferível ao outro.