Matematik Chalmers

Övningstentamen i TMA681 Tillämpad matematik K, maj 2001

Hjälpmedel: Beta, Physics Handbook. Kalkylator ej tillåten.

En stor del av frågorna förutsätter att du **har gjort, har förstått** och **kommer ihåg** *tankreaktorn* och *katalysatorn*.

1. (10 poäng) Funktionen f är periodisk med period 6 och $f(t) = 1$ för $|t| \leq 1$, $f(t) = 0$ för $1 < |t| \leq 3$. Rita dess graf och bestäm dess Fourierserie. Rita amplitudspektrum (de första 7 termerna räcker).

2. (10 poäng) Undersök funktionen $f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 + 3x_1x_2^2 - 27x_1$ med avseende på lokala maxima och minima.

3. (10 poäng) Tankreaktorn. Visa att massbalansekvationen

$$V\frac{dc}{dt} = q(c_f - c) - ckV$$

via införandet av variablerna $\tau = V/q_{\text{ref}}$, $s = t/\tau$, $X = c/c_f$ och $U = q/q_{\text{ref}}$ transformerar sig till

$$\frac{dX}{ds} = -(k\tau + U)X + U.$$

Bestäm $X(s)$ då $U = 0$. Bestäm $X(s)$ då $U = \bar{U}$ är konstant. Visa att lösningen i detta fall går mot ett stationärt tillstånd $X(s) \to \bar{X}$ då $s \to \infty$? Bestäm $\bar{X}$. Vad betyder detta fysikaliskt? Hur ska $\bar{U}$ väljas för att $\bar{X}$ ska bli 0.5?

4. (10 poäng) Förklara vad det innebär geometriskt att tillämpa minsta kvadrat-metoden på det överbestämda ekvationssystemet

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

där $A \in \mathbf{R}^{m\times n}$, $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$, $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^m$ och $m > n$. Förklara också att $\hat{\mathbf{x}}$ löser minsta kvadrat-problemet om och endast om $A^tA\hat{\mathbf{x}} = A^t\mathbf{b}$.

5. (10 poäng) Katalysatorn. (a) Definiera effektivitetsfaktorn η dels med ord, dels med en matematisk formel.

   (b) Skriv ned differentialekvationen och randvillkoren för katalysatorn i platt geometri. Lös detta randvärdesproblem. Beräkna η.

   (c) Rita en figur som visar hur η varierar med Thiele-modulen ϕ. Diskutera denna utgående från ekvationens kemitekniska betydelse.

   (d) Förklara dels i ord, dels med matematiska formler vad som menas med "förgiftning" av katalysatorn.

Slut på övningstenta. Här nedan kommer några fler tentamensuppgifter att öva på.

6. (10 poäng) Beskriv kortfattat vad tankreaktorövningen handlar om.

7. (10 poäng) Visa hur man med hjälp av integrerande faktor löser en differentialekvation av typen

$$u'(t) = a(t)u(t) + b(t),\ u(0) = u_0.$$

Antag att $b(t) = b$ är konstant i föregående uppgift. Visa att lösningen ges av

$$u(t) = u_0\exp(at) + \frac{b}{a}(\exp(at) - 1) \quad (\text{om } a \neq 0).$$

För vilka värden på a går lösningen mot ett stationärt tillstånd $u(t) \to \bar{u}$ då $t \to \infty$? Bestäm $\bar{u}$.

8. (10 poäng) Beskriv hur man bestämmer koefficienterna k_0 och E i Arrhenius lag

$$k = k_0 \exp(-E/(RT)) \quad [\mathrm{s}^{-1}]$$

från följande mätdata:

T [K]	343	353	363	373	383	393	403
k [s^{-1}]	$2.8 \cdot 10^{-5}$	$5.6 \cdot 10^{-5}$	$11.2 \cdot 10^{-5}$	$22.4 \cdot 10^{-5}$	$44.8 \cdot 10^{-5}$	$89.6 \cdot 10^{-5}$	$179.2 \cdot 10^{-5}$

Ställ upp de formler och ekvationer som behövs. Ange också gärna hur man löser dem med matlab.

Lösningar

1. Eftersom periodlängden är $T = 6$ får vi $\Omega = 2\pi/T = \pi/3$ så att

$$a_0 = \frac{1}{3}\int_{-3}^{3} f(t)dt = \frac{1}{3}\int_{-1}^{1} dt = \frac{2}{3}$$

$$a_n = \frac{1}{3}\int_{-3}^{3} f(t)\cos(n\pi t/3)dt = \frac{1}{3}\int_{-1}^{1} \cos(n\pi t/3)dt = \frac{1}{n\pi}[\sin(n\pi t/3]_{-1}^{1}$$

$$= \frac{2}{n\pi}\sin(n\pi/3)$$

$$b_n = \frac{1}{3}\int_{-1}^{1} \sin(n\pi t/3)dt = 0.$$

Således är

$$f(t) = \frac{1}{3} + \frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\sin(n\pi/3)\cos(n\pi t/3).$$

(Detta är det enklaste sättet att skriva summan på; följden $\{\sin(n\pi/3)\}_{n=1}^{\infty}$ blir $\{\sqrt{3}/2, \sqrt{3}/2, 0, -\sqrt{3}/2, -\sqrt{3}/2, \dots\}$.)

2. Vi har $f(x,y) = x^3 + y^3 + 3xy^2 - 27x$. För att hitta de stationär punkterna ska vi lösa

$$f'_x(x,y) = f'_y(x,y) = 0,$$

dvs

$$3x^2 + 3y^2 - 27 = 3y^2 + 6xy = 0.$$

Vi finner att lösningarna är $(3,0), (-3,0), (3/\sqrt{5}, -6/\sqrt{5}), (-3/\sqrt{5}, 6/\sqrt{5})$. För att avgöra karaktären hos dessa stationära punkter bildar vi Hessematrisen

$$S = \begin{bmatrix} f''_{xx} & f''_{xy} \\ f''_{xy} & f''_{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6x & 6y \\ 6y & 6x+6y \end{bmatrix}$$

som har egenvärdena $6x + 3y \pm 3\sqrt{5}y$ från vilket vi ser att $(3,0)$ är ett lokalt minimum och att $(-3,0)$ är ett lokalt maximum medan de andra två stationära punkterna är sadelpunkter.

3. Eftersom $X = c/c_f$ och $s = t/\tau$ får vi att

$$\frac{dX}{ds} = \frac{\tau}{c_f}\frac{dT}{dt} = \frac{\tau q}{c_f V}(c_f - c) - \frac{\tau c k}{c_f}$$

$$= \frac{q}{q_{ref}}(1 - \frac{c}{c_f}) - k\tau\frac{c}{c_f} = U(1-X) - k\tau X = -(k\tau + U)X + U.$$

Med $U = 0$ får vi ekvationen $X'(s) = -k\tau X(s)$ som har lösningen $X(s) = X(0)e^{-k\tau s}$.

Med U konstant får vi

$$X(s) = X(0)e^{-(k\tau+U)s} - \frac{U}{k\tau + U}(e^{-(k\tau+U)s} - 1)$$

som då $s \to \infty$ konvergerar mot $\bar{X} = U/(k\tau + U) = q/(q + kV)$. För att få $\bar{X} = 0.5$ ska vi ha $U = k\tau$, dvs $q = kV$.

4. Den gemoetriska betydelsen är att vektorn $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^m$ projiceras ortogonalt på A:s kolonnrum som är ett p-dimesionellt linjärt underrum till $\mathbf{R}^m$ för något $p \leq n$. I övrigt finns svaret i pm:et till Studioövning 3.

5. Se pm:et till Studioövning 6-7.

   (a) Vi har

   $$\eta = \frac{\int\int\int_{\mathcal{V}} kcdxdydz}{k_{ref}c_f V}$$

   där $\mathcal{V}$ är katalysatorns utbredning i rummet, c_f är koncentrationen av det reagerande ämnet utanför katalysatorn och k är reaktionshastighetskoefficient. På dimensionslös form får vi

   $$\eta = \frac{1}{V^*}\int\int\int_{\mathcal{V}^*} k^* u dx^* dy^* dz^*$$

   där $u = c/c_f$ och $k^* = k/k_{ref}$.

   (b) I dimensionslösa variabler med konstanta koefficienter för reaktionshastighet och diffusion ges ekvationen för stationärt tillstånd för katalytsatorn i platt geometri av

   $$u''(r) = \phi^2 u(r), -1 < r < 1, u(-1) = u(1) = 1$$

   där $\phi = L\sqrt{k/D}$ är Thielemodulen. Lösningen är på allmän form $u(r) = Ae^{\phi r} + Be^{-\phi r} = C\cosh\phi r + D\sinh\theta r$. Eftersom $u(-1) = C\cosh\phi - D\sinh\phi = u(1) = C\cosh\phi + D\sinh\phi = 1$ ser vi att $D = 0$ och $C = 1/\cosh\phi$. Således är

   $$u(r) = \frac{\cosh\phi r}{\cosh\phi} = \frac{e^{\phi r} + e^{-\phi r}}{e^{\phi} + e^{-\phi}}.$$

   Effektivitetsfaktorn η blir nu

   $$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} u(r)dr = \tanh\phi/\phi.$$

   (c) η avtar som $1/\phi$ då ϕ växer.

   (d) Förgiftning betyder att en rgion nära randen på katalysatorn har låg reaktionshastighet, dvs $k^* << 1$ nära $\mathcal{V}$'s begränsningsyta.