TMA681 TILLÄMPAD MATEMATIK K 1999. KOMPLETTERANDE FÖRELÄSNINGSANTECKNINGAR OCH ÖVNINGAR.

STIG LARSSON

Matematik, Chalmers tekniska högskola

Innehåll

1. Dynamiskt system. Linjärisering. Stabilitet

1.1. **Dynamiskt system.** Vi börjar med ett enkelt exempel.

Exempel. Rörelseekvationerna för en dämpad, driven pendel är

$$ml\theta''(t) = -mg\sin\theta(t) - bl\theta'(t) + M(t)/l, \tag{1}$$

med beteckningar enlig Figur 1, och där b `[Ns/m]` är en dämpningskoefficient ("luftmotståndet") och $M(t)$ `[Nm]` är ett vridmoment ("en elmotor på axeln").

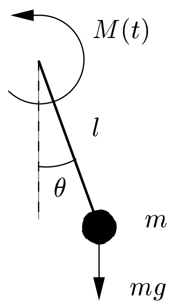
Med beteckningarna $X_1 = \theta$, $X_2 = \theta'$, $U = M$, $\omega = \sqrt{g/l}$ $[\mathtt{s}^{-1}]$, $\alpha = b/m$ $[\mathtt{s}^{-1}]$, $\beta = 1/(ml^2)$ får vi

$$\begin{aligned} X_1'(t) &= X_2(t), && [\mathtt{s}^{-1}] \\ X_2'(t) &= -\omega^2 \sin X_1(t) - \alpha X_2(t) + \beta U(t). && [\mathtt{s}^{-2}] \end{aligned} \tag{2}$$

Detta kan skrivas på matrisform,

$$X'(t) = F(X(t), U(t)), \quad \text{där } X = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix}, \ F = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix},$$

Date: September 1999.



FIGUR 1. Pendeln.

och $F_1(X,U) = X_2$, $F_2(X,U) = -\omega^2 \sin X_1(t) - \alpha X_2(t) + \beta U(t)$. Till dessa ekvationer kommer ett begynnelsevillkor

$$X(0) = \begin{bmatrix} \theta_0 \\ \nu_0 \end{bmatrix},$$

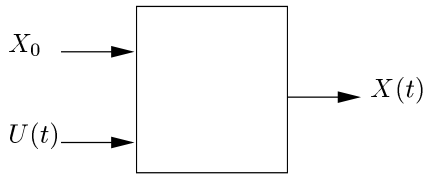
där θ_0 och ν_0 är pendelns utslagsvinkel respektive vinkelhastighet vid tiden $t = 0$. □

Mer allmänt betraktar vi ett begynnelsevärdesproblem för ett system av icke-linjära ordinära differentialekvationer av typen

$$\begin{aligned} X'(t) &= F(X(t), U(t)), \quad t > 0, \\ X(0) &= X_0, \end{aligned} \tag{3}$$

där $X(t) \in \mathbf{R}^n$ är den obekanta lösningen, $F \in \mathbf{R}^n$ är en given vektorvärd funktion av $X \in \mathbf{R}^n$ och $U \in \mathbf{R}^m$, $U(t) \in \mathbf{R}^m$ är en given funktion och $X_0 \in \mathbf{R}^n$ är ett givet begynnelsevärde. I exemplet är $n = 2$ och $m = 1$.

Vi betraktar detta som ett *dynamiskt system*, där vi ger *indata* X_0 och $U(t)$ och beräknar *utdata* $X(t)$. I detta sammanhang kallas X *tillståndsvariabel* och U *styrvariabel*. Vi är inte intresserade av en enskild lösning $X(t)$ utan av systemets beteende då vi varierar indata. Differentialekvationen är icke-linjär och kan i allmänhet endast lösas numeriskt. Viss information om systemets beteende kan man dock få genom att linjärisera, vilket vi nu skall beskriva.



FIGUR 2. Dynamiskt system.

1.2. **Stationär lösning.** Antag att systemet (3) har ett stationärt (tidsoberoende) tillstånd $\bar{X}$, $\bar{U}$. Eftersom $\bar{X}' = 0$ ger (3) att

$$F(\bar{X}, \bar{U}) = 0. \tag{4}$$

I tillämpningar kan $\bar{X}$ representera en arbetspunkt (eller jämviktsläge), som man vill uppnå genom att välja styrvariabeln $\bar{U}$ på lämpligt sätt.

Exempel. För pendeln fås de stationära punkterna genom att sätta $X_1'(t) = X_2'(t) = 0$ i (2), vilket leder till ekvationssystemet

$$\begin{aligned} \bar{X}_2 &= 0, \\ -\omega^2 \sin \bar{X}_1 - \alpha \bar{X}_2 + \beta \bar{U} &= 0. \end{aligned} \tag{5}$$

Om vi väljer t ex $\bar{U} = 0$ (dvs inget yttre vridmoment) får vi lösningarna $\bar{X}_2 = 0$, $\bar{X}_1 = k\pi$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. På grund av periodicitet räcker det att betrakta de två fallen $\bar{X}_1 = 0$ (nedre jämviktsläget) och $\bar{X}_1 = \pi$ (övre jämviktsläget). Med $\bar{U} = 0$ har vi alltså två stationära punkter $\bar{X} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ och $\bar{X} = \begin{bmatrix} \pi \\ 0 \end{bmatrix}$.

Å andra sidan, om vi vill att pendeln ska ställa in sig på vinkeln $\bar{X}_1 = \phi$ $(0 \leq \phi < \pi/2)$, väljer vi $\bar{U}$ så att

$$-\omega^2 \sin\phi + \beta\bar{U} = 0,$$

dvs $\bar{U} = \frac{\omega^2}{\beta}\sin\phi$. Med detta värde på $\bar{U}$ ges de stationära lösningarna av $\bar{X}_2 = 0$ och ekvationen

$$-\omega^2 \sin\bar{X}_1 + \omega^2 \sin\phi = 0,$$

med lösningarna

$$\bar{X}_1 = \begin{cases} \phi + k2\pi \\ \pi - \phi + k2\pi \end{cases}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

Med $\bar{U} = \frac{\omega^2}{\beta}\sin\phi$ får vi alltså (bortsett från periodiska upprepningar) två stationära punkter $\bar{X} = \begin{bmatrix} \phi \\ 0 \end{bmatrix}$ och $\bar{X} = \begin{bmatrix} \pi - \phi \\ 0 \end{bmatrix}$. □

Vi kan alltså ta två attityder: (1) med styrvariabeln $\bar{U}$ given, bestäm vilka jämviktstillstånd $\bar{X}$ som är möjliga; (2) bestäm styrvariabeln $\bar{U}$ så att ett givet jämviktstillstånd $\bar{X}$ uppnås.

1.3. **Linjärisering.** Låt nu $X(t)$ med data X_0, $U(t)$ vara en lösning till (3) som är nära $\bar{X}$. Med

$$X(t) = \bar{X} + \Delta X(t), \quad U(t) = \bar{U} + \Delta U(t), \quad X_0 = \bar{X} + \Delta X_0, \tag{6}$$

kan vi betrakta $\Delta X(t)$ som en *störning* i $X(t)$ orsakad av störningarna ΔX_0 och $\Delta U(t)$ i data. Vi söker en ekvation för $\Delta X(t)$. Vi har

$$\Delta X'(t) = X'(t) = F(X(t), U(t)) = F(\bar{X} + \Delta X(t), \bar{U} + \Delta U(t)).$$

Taylorutveckling (MA3 2.9) av F_i kring $\bar{X}, \bar{U}$ ger

$$\begin{aligned} F_i(\bar{X} + \Delta X(t), \bar{U} + \Delta U(t)) = F_i(\bar{X}, \bar{U}) &+ \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial F_i}{\partial X_j}(\bar{X}, \bar{U})\Delta X_j(t) \\ &+ \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial F_i}{\partial U_j}(\bar{X}, \bar{U})\Delta U_j(t) + R_i(t), \end{aligned} \tag{7}$$

där $R_i(t)$ är resttermen. Eftersom $F(\bar{X}, \bar{U}) = 0$, får vi (på matrisform)

$$F(\bar{X} + \Delta X(t), \bar{U} + \Delta U(t)) = A\Delta X(t) + B\Delta U(t) + R(t),$$

där matriserna

$$A = \left\{ \frac{\partial F_i}{\partial X_j}(\bar{X}, \bar{U}) \right\}_{i=1,\ j=1}^{n,\ n}, \quad B = \left\{ \frac{\partial F_i}{\partial U_j}(\bar{X}, \bar{U}) \right\}_{i=1,\ j=1}^{n,\ m}, \tag{8}$$

kallas Jacobimatriser till F i punkten $\bar{X}, \bar{U}$. Den sökta ekvationen för $\Delta X(t)$ är alltså

$$\begin{aligned} &\Delta X'(t) = A\Delta X(t) + B\Delta U(t) + R(t), \quad t > 0, \\ &\Delta X(0) = \Delta X_0. \end{aligned} \tag{9}$$

Observera att denna endast är en omskrivning av (3). Om $\Delta X(t)$ och $\Delta U(t)$ är små, så kan vi förenkla (9) genom att försumma resttermen, och vi får det *linjäriserade systemet*

$$\begin{aligned} &x'(t) = Ax(t) + Bu(t), \quad t > 0, \\ &x(0) = x_0, \end{aligned} \tag{10}$$

för den *approximativa störningen* $x(t) \approx \Delta X(t)$ orsakad av datastörningarna $x_0 = \Delta X_0$ och $u(t) = \Delta U(t)$.

Det linjära systemet (10) sägs vara *stabilt* om lösningen $x(t)$ förblir liten för alla $t \geq 0$, om man tar tillräckligt små indata x_0, $u(t)$. Man kan visa att i så fall förblir $X(t)$ nära $\bar{X}$, om man väljer X_0 tillräckligt nära $\bar{X}$ och $U(t)$ tillräckligt nära $\bar{U}$. Vi säger då att $\bar{X}$, $\bar{U}$ är en *stabil stationär punkt* till det icke-linjära systemet (3). Observera att triviala lösningen $x(t) = 0$, $u(t) = 0$ till (10) motsvarar stationära lösningen $X(t) = \bar{X}$, $U(t) = \bar{U}$ till (3).

Exempel. För pendeln blir Jacobimatriserna

$$A = \left\{ \frac{\partial F_i}{\partial X_j}(\bar{X}, \bar{U}) \right\} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 \cos \bar{X}_1 & -\alpha \end{bmatrix}, \quad B = \left\{ \frac{\partial F_i}{\partial U_j}(\bar{X}, \bar{U}) \right\} = \begin{bmatrix} 0 \\ \beta \end{bmatrix}. \tag{11}$$

I punkten $\bar{X} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, $\bar{U} = 0$ får vi det linjäriserade systemet

$$x'(t) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & -\alpha \end{bmatrix} x(t) + \begin{bmatrix} 0 \\ \beta \end{bmatrix} u(t), \tag{12}$$

vilket motsvarar den linjära, dämpade, drivna svängningsekvationen

$$\theta''(t) + \omega^2 \theta(t) + \alpha \theta'(t) = \beta u(t). \tag{13}$$

I punkten $\bar{X} = \begin{bmatrix} \pi \\ 0 \end{bmatrix}$, $\bar{U} = 0$ får vi det linjäriserade systemet

$$x'(t) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \omega^2 & -\alpha \end{bmatrix} x(t) + \begin{bmatrix} 0 \\ \beta \end{bmatrix} u(t), \tag{14}$$

vilket motsvarar

$$\theta''(t) - \omega^2 \theta(t) + \alpha \theta'(t) = \beta u(t), \tag{15}$$

vars lösningar inte är svängningar. Se övning 11.

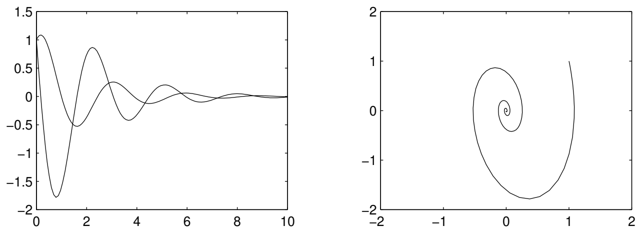
Man kan enkelt göra en numerisk lösning med Matlab. Gör detta! Följande m-fil `pendel.m` definierar högerledet i ekvation (12) med $\beta = 0$.

```
function y=pendel(t,x)
omega=5;  alpha=1;
A=[0 1; -omega^2 -alpha];
y=A*x;
```

Följande kommandon löser ekvationen och plottar sedan *lösningskurvorna*, dvs $x_1(t)$ och $x_2(t)$ som funktion av t.

```
T=10; x0=[1;1];
[t,x]=ode23('pendel', [0 T], x0]);
plot(t,x);
```

Kommandot `plot(x(:,1),x(:,2))` plottar istället x_2 mot x_1. Detta kallas *fasporträtt*, se Figur 3. □



FIGUR 3. Den linjäriserade pendeln. Lösningskurvor och fasporträtt.

Vi ska nu undersöka stabiliteten hos systemet (10). Vi börjar med den homogena ekvationen, dvs fallet då $Bu(t) \equiv 0$.

1.4. **Homogent system.** Vi betraktar ett system av linjära differentialekvationer med konstanta koefficienter

$$x'(t) = Ax(t), \ t > 0; \quad x(0) = b. \tag{16}$$

Antag att koefficientmatrisen A är diagonaliserbar, dvs att egenvektormatrisen $P = [g_1, \dots, g_n]$ är inverterbar, så att $P^{-1}AP = D$, $D = \operatorname{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$. Då utgör egenvektorerna $\{g_k\}_{k=1}^n$ en bas för $\mathbf{R}^n$ (eller $\mathbf{C}^n$ om g_k är komplexa). Varje vektor kan då skrivas på ett entydigt sätt som en linjärkombination av $\{g_k\}_{k=1}^n$. Speciellt gör vi ansatsen $x(t) = \sum_{k=1}^n y_k(t) g_k$. Koefficienterna $y_k(t)$ bestäms genom insättning i differentialekvationen. Om vi använder relationerna $Ag_k = \lambda_k g_k$ får vi

$$0 = x'(t) - Ax(t) = \sum_{k=1}^n y_k'(t) g_k - \sum_{k=1}^n y_k(t) A g_k = \sum_{k=1}^n \big(y_k'(t) - \lambda_k y_k(t)\big) g_k.$$

Identifikation av koefficienterna för g_k ger ett okopplat system

$$y_k'(t) = \lambda_k y_k(t), \ k = 1, \dots, n, \tag{17}$$

med lösningen $y_k(t) = c_k e^{\lambda_k t}$, vilket ger

$$x(t) = \sum_{k=1}^n c_k e^{\lambda_k t} g_k = c_1 e^{\lambda_1 t} g_1 + \dots + c_n e^{\lambda_n t} g_n. \tag{18}$$

Koefficienterna c_k ges av begynnelsevillkoret $x(0) = b$,

$$b = \sum_{k=1}^n c_k g_k,$$

dvs c_k är komponenterna för vektorn b med avseende på basen $\{g_k\}_{k=1}^n$.

Likheten (18) framställer lösningen $x(t)$ som en linjärkombination av egenmoder $c_k e^{\lambda_k t} g_k$. Karaktären hos dessa bestäms av egenvärdena λ_k. Om vi skriver $\lambda_k = \alpha_k + j\omega_k$ där α_k och ω_k ar real- respektive imaginärdelarna av λ_k kan vi urskilja två fall:

- $\lambda_k = \alpha_k$ är reellt. Då är $e^{\lambda_k t} = e^{\alpha_k t}$ exponentiellt växande, exponentiellt avtagande eller konstant beroende på om $\alpha_k > 0$, $\alpha_k < 0$ eller $\alpha_k = 0$.
- $\lambda_k = \alpha_k + j\omega_k$ är inte reellt ($\omega_k \neq 0$). Då är
$$e^{\lambda_k t} = e^{\alpha_k t + j\omega_k t} = e^{\alpha_k t} e^{j\omega_k t} = e^{\alpha_k t}(\cos \omega_k t + j \sin \omega_k t)$$
en harmonisk svängning med amplituden $|e^{\lambda_k t}| = e^{\alpha_k t}$ och vinkelfrekvensen ω_k. Amplituden är exponentiellt växande, exponentiellt avtagande eller konstant beroende på om $\alpha_k > 0$, $\alpha_k < 0$ eller $\alpha_k = 0$.

Bland annat kan vi nu dra slutsatser om lösningens beteende då $t \to \infty$. Vi säger att systemet (16) är

- *stabilt* om det gäller att om b är liten, så är $x(t)$ liten för alla $t \geq 0$,
- *asymptotiskt stabilt* om $x(t) \to 0$ då $t \to \infty$ för alla begynnelsevärden b,
- *instabilt* annars.

Om A är diagonaliserbar så kan vi dra vissa slutsatser genom att undersöka stabiliteten för varje egenmod separat. Av resonemanget ovan ser vi att stabiliteten för en egenmod beror på tecknet på realdelen $\operatorname{Re} \lambda_k = \alpha_k$. Vi formulerar detta som en sats.

Sats 1. *Om A är diagonaliserbar så är systemet $x' = Ax$ asymptotiskt stabilt om och endast om $\operatorname{Re} \lambda_k < 0$ för alla egenvärden λ_k, och instabilt om $\operatorname{Re} \lambda_k > 0$ för något egenvärde λ_k.*

Däremot kan man inte alltid dra slutsatsen att systemet är stabilt om varje egenmod är stabil, vilket vi strax ska se.

1.5. **Matrisexponentialfunktionen.** Om matrisen A är diagonaliserbar, dvs om $A = PDP^{-1}$, så definierar vi matrisen

$$e^{tA} = Pe^{tD}P^{-1}, \text{ där } e^{tD} = \operatorname{diag}\{e^{t\lambda_1}, \dots, e^{t\lambda_n}\}.$$

Genom transformationen $x = Py$, $b = Pc$, övergår ekvation (16) i

$$y'(t) = Dy(t), \ t > 0; \quad y(0) = c,$$

vilken är identisk med (17), med lösningen $y(t) = e^{tD}c$. Genom att transformera tillbaka får vi

$$x(t) = Py(t) = Pe^{tD}c = Pe^{tD}P^{-1}b = e^{tA}b,$$

dvs

$$x(t) = e^{tA}b,$$

vilket är ett annat sätt att skriva (18). Matrisen e^{tA} kan ses som en lösningsoperator till det homogena systemet (16). Observera att

$$\frac{d}{dt}e^{tA} = Ae^{tA} = e^{tA}A. \tag{19}$$

1.6. **Symmetriskt system.** Sats 1 är ett *kvalitativt* resultat: i det asymptotiskt stabila fallet får vi t ex veta att störningarna går mot noll då $t \to \infty$, men inte hur stora de kan bli innan de dör ut. Om A är symmetrisk så kan vi även få *kvantitativ* information.

Antag att A är symmetrisk. Enligt spektralsatsen är λ_k reella och vi kan välja g_k ortonormerade. Vi har då (TLA 6.8)

$$b = \sum_{k=1}^{n} c_k g_k, \quad c_k = (b, g_k) = b^t g_k, \quad \|b\|^2 = \sum_{k=1}^{n} c_k^2, \tag{20}$$

$$x(t) = \sum_{k=1}^{n} c_k e^{\lambda_k t} g_k, \quad \|x(t)\|^2 = \sum_{k=1}^{n} (c_k e^{\lambda_k t})^2 = \sum_{k=1}^{n} c_k^2 e^{2\lambda_k t}. \tag{21}$$

Antag nu att alla $\lambda_k \le 0$, dvs att A är negativt semidefinit (TLA 8.4). I så fall ordnar vi egenvärdena $\lambda_n \le \dots \le \lambda_k \le \dots \le \lambda_1 \le 0$ så att $e^{\lambda_k t} \le e^{\lambda_1 t} \le 1$ och

$$\|x(t)\|^2 = \sum_{k=1}^{n} c_k^2 e^{2\lambda_k t} \le e^{2\lambda_1 t} \sum_{k=1}^{n} c_k^2 = e^{2\lambda_1 t}\|b\|^2 \le \|b\|^2, \tag{22}$$

dvs

$$\|x(t)\| \le \|b\|, \quad t \ge 0.$$

Vi drar slutsatsen att en störning $x(t)$ inte kan bli större än begynnelsestörningen $x(0) = b$. Ett symmetriskt system är alltså stabilt om alla $\lambda_k \le 0$. Om A är negativt definit så har vi $\lambda_k \le \lambda_1 < 0$ och

$$\|x(t)\| \le e^{\lambda_1 t}\|b\|, \quad t \ge 0,$$

dvs störningen avtar exponentiellt då $t \to \infty$; asymptotisk stabilitet.

Alltså: Om A är symmetrisk så är systemet $x' = Ax$ stabilt om och endast om $\lambda_k \le 0$ för alla egenvärden λ_k, asymptotiskt stabilt om och endast om $\lambda_k < 0$ för alla egenvärden λ_k, och instabilt om och endast om $\lambda_k > 0$ för något egenvärde λ_k.

1.7. **Osymmetriskt system.** För en symmetrisk matris är egenvektorerna ortogonala och det är anledningen till att vi kunde göra den uttömmande stabilitetsundersökningen i det fallet. En osymmetrisk matris kan ha nästan parallella egenvektorer eller till och med parallella, dvs sammanfallande, egenvektorer (TLA 8.7). Vi nöjer oss med att undersöka följande typiska fall:

$$x' = Ax, \quad A = \begin{bmatrix} a & 1 \\ \epsilon^2 & a \end{bmatrix},$$

där a är ett reellt eller komplext tal och ϵ är ett litet positivt tal. Här blir egenvärdes- och egenvektormatriserna

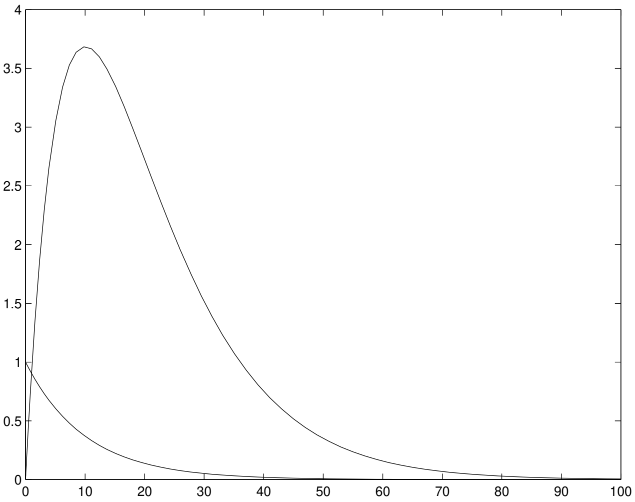
$$D = \begin{bmatrix} a+\epsilon & 0 \\ 0 & a-\epsilon \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon & -\epsilon \end{bmatrix}, \quad P^{-1} = \tfrac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \epsilon^{-1} \\ 1 & -\epsilon^{-1} \end{bmatrix}.$$

Vi ser att egenvärdena nästan sammanfaller och att egenvektorerna är nästan parallella. Då $\epsilon = 0$ är a ett dubbelt egenvärde med bara en egenvektor och matrisen A är inte diagonaliserbar (TLA 8.7).

En enkel räkning visar att

$$\begin{aligned} x(t) &= e^{tA} b = P e^{tD} P^{-1} b \\ &= \tfrac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{(a+\epsilon)t} + e^{(a-\epsilon)t} & \epsilon^{-1}\big(e^{(a+\epsilon)t} - e^{(a-\epsilon)t}\big) \\ \epsilon\big(e^{(a+\epsilon)t} - e^{(a-\epsilon)t}\big) & e^{(a+\epsilon)t} + e^{(a-\epsilon)t} \end{bmatrix} b \\ &= e^{at} \begin{bmatrix} \cosh(\epsilon t) & \epsilon^{-1}\sinh(\epsilon t) \\ \epsilon \sinh(\epsilon t) & \cosh(\epsilon t) \end{bmatrix} b. \end{aligned}$$

I Figur 4 ses resultatet av en numerisk beräkning gjord med Matlab. (Gör denna beräkning själv!) Systemet är asymptotiskt stabilt enligt Sats 1, eftersom båda egenvärdena är negativa. Vi noterar att komponenten $x_2(t)$ avtar exponentiellt, medan $x_1(t)$ först växer kraftigt innan det exponentiella avtagandet sätter in. Systemet är asymptotiskt stabilt, eftersom alla störningar går mot 0, men det kan knappast kallas stabilt, eftersom störningen kan bli mycket större än begynnelsestörningen.



FIGUR 4. $\epsilon = 0.01$, $a = -0.1$, $x(0) = [0,\ 1]^t$.

Vi har nu sett att ett osymmetriskt system kan vara asymptotiskt stabilt men ändå instabilt. Man kan visa att om matrisens egenvektorer inte är "nästan parallella eller parallella", så kan man dra slutsats om stabilitet genom att undersöka varje egenmod för sig. Annars kan man bara dra slutsats om asymptotisk stabilitet och om instabilitet.

1.8. **Inhomogent system.** Om $Bu(t) \not\equiv 0$, så ges lösningen till (10) av

$$x(t) = e^{tA} x_0 + \int_0^t e^{(t-s)A} B u(s)\, ds, \tag{23}$$

där matrisen e^{tA} är lösningsoperatorn till det homogena systemet (16), se övning 4. Om nu det homogena systemet är stabilt, dvs om operatorn e^{tA} är stabil, så kan man visa att termen $\int_0^t e^{(t-s)A} B u(s)\, ds$ också är stabil, dvs den blir liten om $u(t)$ är liten.

Exempel. Vi återvänder nu till pendeln. Jacobimatrisen för det övre jämviktsläget är, se (14),

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \omega^2 & -\alpha \end{bmatrix},$$

med egenvärdena

$$\lambda_\pm = -\frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \omega^2}.$$

Eftersom $\lambda_+ > 0$ och $\lambda_- < 0$ drar vi slutsatsen att det övre jämviktsläget är instabilt.

I det undre jämviktsläget, se (12), blir Jacobimatrisen

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & -\alpha \end{bmatrix},$$

med egenvärdena

$$\lambda_\pm = -\frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - \omega^2}.$$

Om $\alpha > 2\omega$ (stark dämpning) får vi två reella egenvärden $\lambda_\pm < 0$. Om $\alpha = 2\omega$ (kritisk dämpning) får vi ett dubbelt reellt egenvärde $\lambda_\pm = -\alpha/2 < 0$ (Jacobimatrisen är ej diagonaliserbar i detta fall). Om $0 < \alpha < 2\omega$ (svag dämpning) får vi två komplexa egenvärden med $\mathrm{Re}\ \lambda_\pm = -\alpha/2 < 0$. Om $\alpha = 0$ (ingen dämpning) får vi två imaginära egenvärden $\lambda_\pm = \pm i\omega$ med $\mathrm{Re}\ \lambda_\pm = 0$. Vi drar slutsatsen att det nedre jämviktsläget är asymptotiskt stabilt för $\alpha > 0$. Eftersom $\mathrm{Re}\,\lambda_k \leq 0$ för $\alpha \geq 0$, misstänker vi att det nedre jämviktsläget är stabilt. Men vi vet att man måste vara försiktig med den slutsatsen då systemet är osymmetriskt. Ytterligare undersökning, t ex numeriska experiment, visar att systemet faktiskt är stabilt för $\alpha \geq 0$. □

1.9. **Styva differentialekvationer.** Antag för enkelhets skull att A är symmetrisk så att den har reella egenvärden λ_k och en ON-bas g_k av egenvektorer. Vi antar dessutom att alla egenvärdena är negativa, så att det linjära systemet

$$x'(t) = Ax(t), \quad 0 < t < T; \qquad x(0) = b, \tag{24}$$

är asymptotiskt stabilt. Med numreringen $\lambda_n \leq \cdots \leq \lambda_1 < 0$ har vi

$$x(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} g_1 + \cdots + c_n e^{\lambda_n t} g_n,$$

där den sista egenmoden alltså avtar snabbare än den första. Kvoten

$$\kappa(A) = \frac{\max |\lambda_k|}{\min |\lambda_k|} \tag{25}$$

kallas *konditionstalet* för den symmetriska matrisen A. I vårt fall blir $\kappa(A) = \lambda_n/\lambda_1$. Notera att $\kappa(A) \geq 1$. Systemet sägs vara *styvt* om $\kappa(A) >> 1$, dvs om lösningarna innehåller både snabba och långsamma egenmoder. (För osymmetriska matriser definieras konditionstalet på ett lite mera komplicerat sätt.)

Den *explicita Eulers metod* med konstant steglängd h för approximativ lösning av (24) är (MA2 9.8)

$$\frac{y_j - y_{j-1}}{h} = Ay_{j-1}; \quad y_0 = b,$$

dvs vi har rekursionsekvationen

$$y_j = (E + hA)y_{j-1}; \quad y_0 = b.$$

Vi får

$$y_j = (E + hA)^j b.$$

Matrisen $B = E + hA$ är symmetrisk med egenvärdena $\mu_k = 1 + h\lambda_k$ och samma egenvektorer g_k som A. Detta ger att

$$y_j = \sum_{k=1}^n c_k \mu_k^j g_k; \quad \text{där } b = \sum_{k=1}^n c_k g_k,$$

och vi ser att Eulers metod är stabil om och endast om alla egenvärdena har absolutbelopp mindre än eller lika med 1, dvs $|\mu_k| = |1 + h\lambda_k| \leq 1$, dvs $-1 \leq 1 + h\lambda_k \leq 1$, dvs $-2 \leq h\lambda_k \leq 0$ för alla λ_k. Eftersom $\lambda_n \leq \ldots \leq \lambda_k \leq \ldots \leq \lambda_1 < 0$ är detta uppfyllt om och endast om

$$h \leq \frac{2}{|\lambda_n|} = \frac{2}{\max|\lambda_k|},$$

dvs steglängden måste vara liten om $\max|\lambda_k|$ är stort. Det intressanta tidsintervallet beror å andra sidan på den långsammaste egenmoden: $T \geq 1/|\lambda_1| = 1/\min|\lambda_k|$. Antalet tidssteg blir således

$$N = \frac{T}{h} \geq \frac{1}{2}\frac{\max|\lambda_k|}{\min|\lambda_k|} = \frac{1}{2}\kappa(A).$$

Om systemet är styvt måste vi ta många steg för att få med hela förloppet: små steg, långt tidsintervall.

Den *implicita Eulers metod* är

$$\frac{y_j - y_{j-1}}{h} = Ay_j; \quad y_0 = b,$$

dvs

$$(E - hA)y_j = y_{j-1}; \quad y_0 = b.$$

Metoden kallas *implicit* eftersom detta är ett ekvationssystem måste lösas i varje tidssteg. När detta är gjort har vi en rekursion

$$y_j = (E - hA)^{-1}y_{j-1}; \quad y_0 = b.$$

Matrisen $B = (E - hA)^{-1}$ har egenvärdena $\mu_k = (1 - h\lambda_k)^{-1}$ och metoden är stabil om och endast om alla egenvärdena har absolutbelopp mindre än eller lika med 1, dvs

$$-1 \leq \frac{1}{1 - h\lambda_k} \leq 1 \quad \text{för alla } \lambda_k.$$

Eftersom $\lambda_k \leq 0$ är detta villkor uppfyllt för alla steglängder h. Den implicita Eulers metod är alltså lämpligare för styva problem än den explicita metoden.

Styva system av differentialekvationer uppträder ofta i kemisk reaktionsteknik där olika delreaktioner i en sammansatt reaktion kan ha mycket olika reaktionshastigheter. Styva system uppträder också i samband med numerisk lösning av partiella differentialekvationer, t ex värmeledningsekvationen. Sammanfattningsvis kan sägas att man behöver ta hänsyn till styvheten när man väljer numerisk metod för differentialekvationsproblem. Lämpliga metoder är ofta implicita. Matlab har programmen `ode23` och `ode45` för icke-styva system och `ode15s` för styva system. Nu kan du göra övning 12.

2. Värmeledning, diffusion, reaktion

2.1. **Härledning av värmeledningsekvationen.** Vi studerar värmeledning i en kropp $V \subset \mathbf{R}^3$ med begränsningsytan S. Vi inför följande beteckningar:

$T = T(x, y, z, t)$ temperaturen `[K]` i punkten (x, y, z) `[m]` vid tiden t`[s]`,

$j = j(x, y, z, t)$ värmeflödesvektorn `[J/(m²s)]`,

$c_p = c_p(x, y, z)$ värmekapaciteten `[J/(kg K)]`,

$\rho = \rho(x, y, z)$ masstätheten `[kg/m³]`,

$\lambda = \lambda(x, y, z)$ värmeledningsförmågan `[J/(m K s)]`,

$q = q(x, y, z, t)$ värmekällor/sänkor `[J/(m³s)]`.

Vi betraktar värmebalansen i en godtycklig delvolym V_0 med begränsningsytan S_0. Totala värmeenergin är $\int_{V_0} \rho c_p T\, dV$ `[J]` och nettoflödet ut genom S_0 blir $\int_{S_0} j \cdot n\, dS$ `[J/s]`. Här är n den utåtriktade enhetsnormalen till ytan S_0.

Energiprincipen säger att ändringen per tidsenhet av den totala värmeenergin i V_0 är lika med värmeflödet in genom S_0 plus värmeproduktionen per tidsenhet i V_0. Eftersom den totala värmeenergin är $\int_{V_0} \rho c_p T\, dV$ och värmeproduktionen per tidsenhet är $\int_{V_0} q\, dV$, får vi

$$\frac{d}{dt}\int_{V_0} \rho c_p T\, dV = -\int_{S_0} j\cdot n\, dS + \int_{V_0} q\, dV.$$

Vi tillämpar nu divergenssatsen (MA3 4.14) för vektorfältet j och derivering under integraltecknet:

$$\int_{S_0} j\cdot n\, dS = \int_{V_0} \nabla\cdot j\, dV \quad \text{och} \quad \frac{d}{dt}\int_{V_0} \rho c_p T\, dV = \int_{V_0} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}\, dV,$$

vilket leder till

$$\int_{V_0} \left(\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla\cdot j - q\right) dV = 0.$$

Eftersom $V_0 \subset V$ är godtycklig, så måste integranden vara identiskt lika med 0, dvs

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla\cdot j = q.$$

Fouriers lag säger att värmeflödet är proportionellt mot temperaturgradienten och att värme strömmar från varmt till kallt. Därför blir flödesvektorn

$$j = -\lambda\nabla T = -\lambda \operatorname{grad} T$$

och vi får

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla\cdot(\lambda\nabla T) = q. \tag{26}$$

Detta är *värmeledningsekvationen*.

Ekvation (26) måste kombineras med ett begynnelsevillkor

$$T(x,y,z,0) = T_0(x,y,z) \tag{27}$$

samt ett randvillkor, som uttrycker att värmeflödet ut genom randen är proportionellt mot temperaturdifferensen, $j\cdot n = k(T - T_a)$, där T_a är omgivningens temperatur och k $[\mathtt{J/(m^2\,s\,K)}]$ en värmeöverföringskoefficient. Eftersom

$$j\cdot n = -\lambda\nabla T\cdot n = -\lambda\frac{\partial T}{\partial n} \quad \text{på } S,$$

där $\partial T/\partial n = \nabla T\cdot n$ betecknar normalderivatan av T, dvs riktningsderivatan i normalriktningen n, blir randvillkoret

$$\lambda\frac{\partial T}{\partial n} + k(T - T_a) = 0 \quad \text{på } S, \quad \text{(Robins randvillkor)} \tag{28}$$

Gränsfallet $k = 0$ svarar mot att begränsningsytan är isolerad:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad \text{på } S. \quad \text{(Neumanns randvillkor)}$$

Om vi å andra sidan dividerar med k i (28) och sedan låter $k\to\infty$, får vi att temperaturen är föreskriven:

$$T = T_a \quad \text{på } S. \quad \text{(Dirichlets randvillkor)}$$

Gränsfallet $k = \infty$ betyder alltså att begränsningsytan är oisolerad, dvs värme kan obehindrat strömma genom ytan och kroppens yttemperatur blir då lika med omgivningens temperatur.

Det är ofta lämpligt att skriva om ekvationerna på dimensionslös form. Vi inför då dimensionslösa variabler:

$$\tilde t = t/\tau, \quad (\tilde x,\tilde y,\tilde z) = (x/L, y/L, z/L)$$
$$u(\tilde x,\tilde y,\tilde z,\tilde t) = \frac{T(\tilde xL,\tilde yL,\tilde zL,\tilde t\tau) - T_f}{T_f},$$

där T_f, L, τ är referenskonstanter. Då fås

$$\frac{\partial u}{\partial \tilde{t}} = \tau \frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{T-T_f}{T_f}\Big), \quad \frac{\partial u}{\partial \tilde{x}} = L \frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{T-T_f}{T_f}\Big),$$

och så vidare. Om vi för enkelhets skull antar att koefficienterna ρ, c_p, λ är konstanta, och om vi dividerar (26) med λT_f får vi

$$\frac{\rho c_p}{\lambda}\frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{T-T_f}{T_f}\Big) - \nabla\cdot\nabla\Big(\frac{T-T_f}{T_f}\Big) = \frac{q}{\lambda T_f},$$

dvs

$$\frac{\rho c_p}{\lambda \tau}\frac{\partial u}{\partial \tilde{t}} - L^{-2}\nabla\cdot\nabla u = \frac{q}{\lambda T_f}.$$

Med $\tau = L^2\rho c_p/\lambda$, $f(x,y,z,t) = L^2 q(x,y,z,t)/(\lambda T_f)$ och med Laplaceoperatorn

$$\Delta u = \nabla\cdot\nabla u = \frac{\partial^2 u}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial \tilde{z}^2},$$

har vi värmeledningsekvationen med konstanta koefficienter:

$$\frac{\partial u}{\partial \tilde{t}} - \Delta u = f. \tag{29}$$

Randvillkoret (28) och begynnelsevillkoret (27) blir på liknande vis:

$$\frac{\partial u}{\partial n} + h(u-u_a) = 0 \quad \text{på } S, \quad \textsf{(Robins randvillkor)} \tag{30}$$

respektive

$$u(x,y,z,0) = u_0(x,y,z). \tag{31}$$

Här är $h = Lk/\lambda$ och $u_a = (T_a - T_f)/T_f$ och motsvarande för u_0.

Den partiella differentialekvationen (29) tillsammans med begynnelsevillkoret (31) och randvillkoret (30) säges utgöra ett begynnelse-randvärdesproblem. I fortsättningen skriver vi för enkelhets skull t i stället för $\tilde{t}$ och så vidare.

Om f inte beror på t uppnås då $t\to\infty$ ett stationärt tillstånd $u = u(x,y,z)$. Eftersom nu $\partial u/\partial t = 0$ får vi *Poissons ekvation*

$$-\Delta u = f.$$

Om dessutom $f = 0$ har vi Laplaces ekvation

$$-\Delta u = 0.$$

Dessa måste kombineras med lämpliga randvillkor enligt ovan. Vi har då ett så kallat randvärdesproblem.

Om vi betraktar värmeledning i en lång cylinder orienterad parallellt med x-axeln och vars mantelyta är isolerad, och där begynnelsetemperaturen u_0 och källtermen f är oberoende av y och z, är det rimligt att anta att temperaturen också är oberoende av y och z, dvs $u = u(x,t)$. Värmeledningsekvationen (29) blir då

$$u_t - u_{xx} = f.$$

Denna studeras i ett intervall t ex $0 < x < 1$. Eftersom $\partial u/\partial n = -\partial u/\partial x$ vid $x = 0$ och $\partial u/\partial n = \partial u/\partial x$ vid $x = 1$ blir randvillkoret (30) nu

$$-u_x + h_0(u-u_{a0}) = 0,\ x=0; \quad u_x + h_1(u-u_{a1}) = 0,\ x=1,$$

där h_0, u_{a0} respektive h_1, u_{a1} är värmeöverföringskoefficienten och omgivningens temperatur vid ytan $x = 0$ respektive $x = 1$. Gränsfallen $h_0 = 0$, $h_0 = \infty$ etc tolkas analogt med ovan.

2.2. **Diffusionsekvationen.** Vid en diffusionsprocess är massflödet proportionellt mot gradienten av koncentrationen $c = c(x, y, z, t)$ `[mol/m^3]` av det diffunderande ämnet (Ficks lag):

$$j = -D\nabla c = -D \text{ grad } c. \quad [\texttt{mol/(m}^2\texttt{s)}] \tag{32}$$

Här är D `[m^2/s]` diffusionskoefficienten. Samma härledning som ovan leder till diffusionsekvationen:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (D\nabla c) = f, \quad [\texttt{mol/(m}^3\texttt{s)}] \tag{33}$$

eller, om D är konstant,

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D\Delta c = f. \tag{34}$$

Matematiskt sett är detta samma ekvation som värmeledningsekvationen. Randvillkoret blir

$$D\frac{\partial c}{\partial n} + d(c - c_a) = 0 \quad \text{på } S, \quad \text{(Robins randvillkor)} \tag{35}$$

där koefficienten d `[m/s]` beror på ytans permeabilitet och c_a är concentrationen utanför S.

2.3. **Reaktions-diffusionsekvationer.** Betrakta en enkel exoterm kemisk reaktion där reaktionshastigheten ges av Arrhenius lag $k_0 c \exp(-E/RT)$ `[mol/(m^3s)]`. Här är E `[J/mol]` aktiveringsenergin, R `[ 8.31 J/(mol K)]` allmänna gaskonstanten, T `[K]` temperaturen och c `[mol/m^3]` koncentrationen av det reagerande ämnet. Reaktionsentalpin är $-\Delta H$ `[J/mol]`. Vi får två kopplade partiella differentialekvationer

$$\begin{aligned} &\frac{\partial T}{\partial t} - \kappa\Delta T = \beta k_0 c e^{-E/RT}, \quad \beta = \frac{-\Delta H}{\rho c_p}, \quad \kappa = \frac{\lambda}{\rho c_p}, \\ &\frac{\partial c}{\partial t} - D\Delta c = -k_0 c e^{-E/RT}, \end{aligned} \tag{36}$$

med randvillkoren

$$\frac{\partial T}{\partial n} + h(T - T_0) = 0, \ \frac{\partial c}{\partial n} + d(c - c_0) = 0 \quad \text{på } S. \tag{37}$$

Observera att differentialekvationerna är ickelinjära och kopplade till varandra.

3. Övningar

Svar och lösningar till vissa övningar finns i nästa avsnitt.

Övning 1. Bestäm lokala maxima och minima till funktionen $f(x, y) = x^3 + y^2 - xy$.

Övning 2. Kvadratisk form. (TLA 8.4, Matlab) Bestäm största och minsta värdet av den kvadratiska formen

$$f(x, y, z) = 9x^2 + 5y^2 + 6z^2 + 8xy + xz + 3yz$$

på sfären $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ och ange i vilka punkter maximum och minimum inträffar.

Övning 3. Minimering. (Matlab) Sök minimum av funktionen

$$f(x) = x_1^4 + x_2^4 - 4x_1x_2 + x_1 + 8, \quad x = [x_1, x_2]^t$$

(Tips: använd kommandot `fmins`; skriv » `help fmins` för dokumentation. Detta kommando fordrar att man skriver en funktionsfil (kallad t ex `funk.m`) som definierar funktionen f, se TLA sid App:27.)

Övning 4. Bevisa (23) genom att multiplicera ekvation (10) med den integrerande faktorn e^{-tA} (se (19)) och integrera.

Övning 5. Avgör om systemet $x' = Ax$ är stabilt när A är

$$\text{(a)} \begin{bmatrix} -1001 & 999 \\ 999 & -1001 \end{bmatrix} \quad \text{(b)} \begin{bmatrix} -1 & 3 & 5 \\ 0 & -4 & 6 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{(c)} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -4 \end{bmatrix}$$

Övning 6. Bestäm de stationära lösningarna till systemet

$$X_1'(t) = X_2(t)\bigl(1 - X_1(t)^2\bigr),$$
$$X_2'(t) = 2 - X_1(t)X_2(t).$$

Linjärisera kring de stationära lösningarna och undersök de linjäriserade systemens stabilitet.

Övning 7. Mineas ekvation. Bestäm vilka stationära lösningar man kan få för olika värden på $\bar{U}$ och $\delta > 0$. Skriv för varje stationär lösning ned den linjäriserade ekvationen och undersök dess stabilitet.

$$\begin{aligned} X_1'(t) &= -X_1(t) - \delta(X_2(t)^2 + X_3(t)^2) + U(t), \\ X_2'(t) &= -X_2(t) - \delta X_1(t)X_2(t), \\ X_3'(t) &= -X_3(t) - \delta X_1(t)X_3(t). \end{aligned}$$

Övning 8. Bestäm de stationära punkterna och avgör deras stabilitet för följande system:

(a) $\begin{aligned} X' &= X(1-Y) \\ Y' &= Y(1-X) \end{aligned}$ (b) $\begin{aligned} X' &= -2(X-10) + Ye^X \\ Y' &= -2Y - Ye^X \end{aligned}$

(c) $\begin{aligned} X_1' &= X_1 + X_1X_2^2 + X_1X_3^2 \\ X_2' &= -X_1 + X_2 - X_2X_3 + X_1X_2X_3 \\ X_3' &= X_2 + X_3 - X_1^2 \end{aligned}$

Övning 9. Skriv följande begynnelsevärdesproblem som ett system $x' = Ax$, $x(0) = b$ genom att införa nya variabler $x_1 = u$, $x_2 = u'$. Lös systemet med diagonaliseringsmetoden.

$$u'' + 4u' + 13u = 0, \quad \text{(dämpad harmonisk svängning)}$$
$$u(0) = 0, \; u'(0) = -1$$

Övning 10. (Repetition av Laplacetransformen, (MA2 kap 15).) Lös differentialekvationen i övning 9 med Laplacetransformen.

Övning 11. Lös ekvationerna (13) och (15) med $\alpha = 0$ och $\beta = 0$.

Övning 12. Explicit/implicit metod, styva differentialekvationer. Skriv två Matlab-program som löser begynnelsevärdesproblemet $x' = Ax$ för $t > 0$, $x(0) = x_0$ med explicit respektive implicit Eulers metod och konstant steg. Provkör med matriserna

$$A = \begin{bmatrix} -1000 & -999 \\ -999 & -999 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} -1000 & -999 \\ -999 & -998 \end{bmatrix}.$$

Prova med olika steglängder från $h = 0.2$ och mindre. Välj sluttid så att hela förloppet kommer med. Hur stora steg använder Matlabs `ode23` och `ode15s`? Ser du någon skillnad mellan `ode23` och `ode15s` när det gäller att lösa styva problem?

Tips: Matlab-programmet `cond(A)` beräknar konditionstalet och `diff(t)` kan användas för att beräkna stegen när man kört `ode23` eller `ode15s`.

Övning 13. Laplaceoperatorn i sfärisk symmetri. Inför sfäriska koordinater (r, θ, ϕ) (MA3, sid 3.26):

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}$$

Antag att funktionen u ej beror på θ och ϕ, dvs $u = u(r)$. Visa att

$$\Delta u = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right)$$

Övning 14. Laplaceoperatorn i cylindrisk symmetri. Inför cylindriska koordinater (ρ, φ, z) (MA3, sid 2.41):

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos\varphi \\ y &= \rho \sin\varphi \\ z &= z \end{aligned}$$

Antag att funktionen u ej beror på φ, dvs $u = u(\rho, z)$. Visa att

$$\Delta u = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\Big(\rho \frac{\partial u}{\partial \rho}\Big) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

Övning 15. Visa att följande funktioner satisfierar Laplaces ekvation $\Delta u = 0$.

$$\begin{aligned} &\text{(a)} \quad u(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r} \quad \text{(sfäriska koordinater)} \\ &\text{(b)} \quad u(\rho,\varphi,z) = \ln\rho + z \quad \text{(cylindriska koordinater)} \\ &\text{(c)} \quad u(x,y,z) = 2x^2 - y^2 - z^2 \end{aligned}$$

Övning 16. Lös följande randvärdesproblem. Tolka lösningen fysikaliskt i termer av värmeledning eller diffusion samt rita dess graf.

$$\begin{aligned} &\text{(a)} \quad -u''_{xx} = 1,\ 0 < x < L,\ u(0) = u(L) = 0 \\ &\text{(b)} \quad -u''_{xx} = 1,\ 0 < x < L,\ u(0) = 0,\ u'(L) = 0 \\ &\text{(c)} \quad -u''_{xx} = 0,\ 0 < x < L,\ -u'(0) + \frac{2}{L}(u(0) - 1) = 0,\ u'(L) + \frac{3}{L}(u(L) - 2) = 0 \\ &\text{(d)} \quad -u''_{xx} = 1,\ 0 < x < L,\ u'(0) = u'(L) = 0 \end{aligned}$$

Övning 17. Visa att funktionen $u(x,y,z) = \sin x \sin y \sin z$ safisfierar randvärdesproblemet

$$-\Delta u = 3u \text{ i } K,\ u = 0 \text{ på } S$$

där K är kuben $\{0 < x < \pi,\ 0 < y < \pi,\ 0 < z < \pi\}$ med randen S. Alltså är u en egenfunktion till Laplaceoperatorn i K med egenvärde 3.

Övning 18. Betrakta stationär värmeledning genom en vägg:

$$-(d(x)u'(x))' = 0, \quad -L < x < L; \quad u(-L) = g_0,\ u(L) = g_1.$$

Yttertemperaturerna g_0, g_1 samt värmeledningsförmågan $d(x)$ i isoleringsmaterialet är givna. Uppgiften är att bestämma en effektiv värmeöverföringskoefficient k sådan att värmeflödet genom väggen kan skrivas $j = k(g_0 - g_1)$.

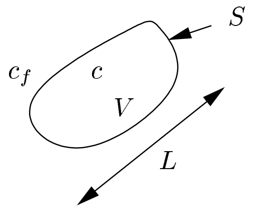
(a) Antag att $d(x) = \epsilon(1 + (\beta x)^2)$ och lös problemet för hand.

(b) Lös randvärdesproblemet med Adfem. För att bestämma värmeflödet $j(x) = -d(x)u'(x)$ gör vi så här: Nodvärdena av den beräknade temperaturen finns i vektorn `u`, nätstorleken finns i vektorn `h`. Om vi bildar differensen mellan konsekutiva u-värden med programmet `diff` (`» help diff`) och dividerar med h-värdena, så får vi temperatur-derivatan u'. Den är en styckvis konstant funktion och fås alltså i vektorn `diff(u)./h`. Värdena av värmeledningskoefficienten i mittpunkterna på elementen finns i vektorn `d`. Värmeflödet ges alltså av `j=-d.*diff(u)./h`. Testa först med ett specialfall där exakta lösningen är känd, dvs välj $d(x)$ så att $u(x)$ kan beräknas symboliskt som t ex i (a). Prova sedan med en annan värmeledningskoefficient, t ex $d(x) = 1.01 + \cos 7x$. (Försök inte bestämma den exakta lösningen i detta fall.) Detta problem är svårare att lösa även för Adfem. Varför?

Övning 19. Reaktion-diffusion i porös katalysator-pellet. Ett ämne i gasform diffunderar in i en porös katalysator-pellet och omsätts vid isoterma och stationära betingelser. Vi får reaktions-diffusions ekvationen, se (36),

$$\begin{aligned} -D\Delta c &= -kc \quad \text{i } V, \\ c &= c_f \quad \text{på } S, \end{aligned} \tag{38}$$

med koncentrationen c [mol/m^3] i katalysatorn, den konstanta koncentrationen c_f i omgivningen, diffusionskonstanten D [m^2/s], reaktionshastigheten k [s^{-1}], storleken L [m], och där $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

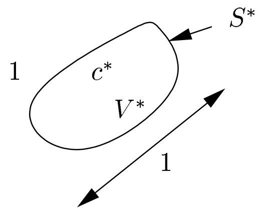


FIGUR 5. Pellet.

(a) Inför dimensionslösa variabler $(x^*, y^*, z^*) = (x/L, y/L, z/L)$, $c^* = c/c_f$ så att (38) övergår i

$$\begin{aligned} -\Delta^* c^* &= -\phi^2 c^* \quad \text{i } V^*, \\ c^* &= 1 \quad \text{på } S^*, \end{aligned} \tag{39}$$

där $\Delta^* = \frac{\partial^2}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2}{\partial z^{*2}}$ och ϕ kallas Thiele-modulen. Uttryck ϕ i de givna storheterna.



FIGUR 6. Pellet i dimensionlösa variabler.

(b) För olika värden på ϕ vill vi undersöka dels hur långt in i katalysatorn reaktionen når, dels beräkna kvoten mellan den uppnådda reaktionshastigheten och den ideala reaktionshastighet man skulle få utan hindrande diffusion, dvs om $c = c_f$. Denna kvot kallas effektivitetsfaktorn och ges alltså av

$$\eta = \frac{\int_V kc\,dV}{kc_f V} = \frac{\int_V c\,dV}{c_f V} = \frac{1}{V^*}\int_{V^*} c^*\,dV^*. \tag{40}$$

Visa detta! Visa också att

$$\eta = \frac{1}{\phi^2}\frac{1}{V^*}\int_{S^*} \frac{\partial c^*}{\partial n^*}\,dS^*. \tag{41}$$

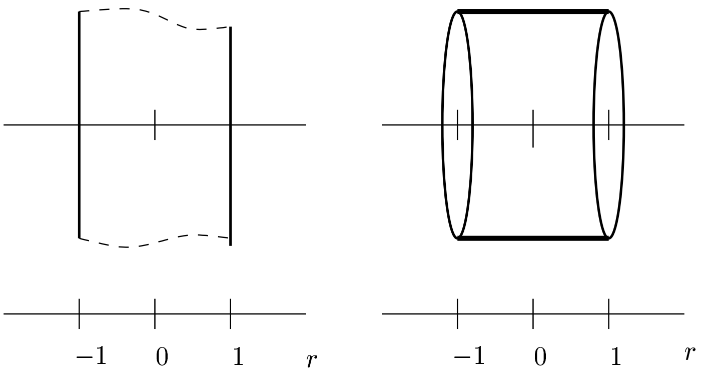
Tips: (39) och Gauss sats.

(c) Speciell geometri: (i) platta (eller stav med tät mantelyta)

$$\begin{aligned} -\frac{d^2c^*}{dr^2} &= -\phi^2 c^*, \quad -1 < r < 1, \\ c^*(-1) &= c^*(1) = 1, \end{aligned} \tag{42}$$

eller på grund av symmetri (c^* är en jämn funktion, dvs $c^*(-r) = c^*(r)$, och för varje jämn funktion gäller att derivatan är udda och därför är derivatan $= 0$ i origo)

$$\begin{aligned} -\frac{d^2c^*}{dr^2} &= -\phi^2 c^*, \quad 0 < r < 1, \\ \frac{dc^*}{dr}(0) &= 0, \ c^*(1) = 1. \end{aligned} \tag{43}$$



Figur 7. Platta eller stav.

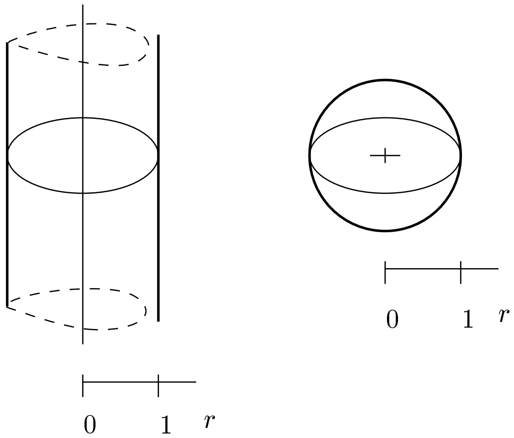
(ii) cirkulär cylinder

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\Big(r\frac{dc^*}{dr}\Big) = -\phi^2 c^*, \quad 0 < r < 1,\\
&\frac{dc^*}{dr}(0) = 0,\ c^*(1) = 1.
\end{aligned}
\tag{44}
$$

(iii) sfär

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\Big(r^2\frac{dc^*}{dr}\Big) = -\phi^2 c^*, \quad 0 < r < 1,\\
&\frac{dc^*}{dr}(0) = 0,\ c^*(1) = 1.
\end{aligned}
\tag{45}
$$

(Den dimensionlösa variabeln r borde egentligen tecknas r^*, men det blir alltför svårläst.)



Figur 8. Cylinder och sfär.

(d) Lös (43) exakt och bestäm och plotta η som funktion av ϕ.

(e) Lös (45) exakt och bestäm och plotta η som funktion av ϕ. (Se lösning i facit.)

(f) (Adfem, Matlab) Lös (43), (44), (45) numeriskt med programmet Adfem i Matlab och bestäm η för några olika värden på ϕ (små och stora). Jämför med exakta lösningar i (d) och (e). Vilken geometri är fördelaktigast? Tips: Funktionsvärdena $c^*(r_i)$ till lösningen finns i vektorn `u`, beräkningsnoderna r_i i vektorn `x` och nätstorleken h_i i vektorn `h`. Kommandot `integrate(u.*x,h)` beräknar integralen $\int_0^1 c^*(r) r\, dr$.

(g) Varianter för den ambitiöse teknologen. Gör sammalunda för någon av följande modifikationer. (i) Robins randvillkor: byt ut randvillkoret i (38) mot villkoret (35). Visa att i dimensionslösa variabler får vi

$$\frac{dc^*}{dr}(0) = 0, \ \frac{dc^*}{dr}(1) + \nu(c^*(1) - 1) = 0.$$

Uttryck ν i de ursprungliga variablerna. Plotta η som funktion av ν för fixt ϕ.

(ii) Tät kärna:

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\Big(r^2\frac{dc^*}{dr}\Big) = -\phi^2 c^*, \quad \omega < r < 1, \\ &\frac{dc^*}{dr}(\omega) = 0, \ c^*(1) = 1. \end{aligned} \tag{46}$$

(iii) Förgiftning:

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\Big(r^2\frac{dc^*}{dr}\Big) = -\phi^2 c^*, \quad 0 < r < \omega, \\ &-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\Big(r^2\frac{dc^*}{dr}\Big) = 0, \quad \omega < r < 1, \\ &\frac{dc^*}{dr}(0) = 0, \ c^*(1) = 1. \end{aligned} \tag{47}$$

4. Svar och lösningar till vissa övningar

1. De stationära punkterna till funktionen $f(x,y) = x^3 + y^2 - xy$ ges av ekvationssystemet

$$f'_x(x,y) = 3x^2 - y = 0 \tag{48}$$

$$f'_y(x,y) = 2y - x = 0 \tag{49}$$

Den andra ekvationen ger $x = 2y$ vilket insättes i den första ekvationen: $12y^2 - y = 0$, vilken har två lösningar $y = 0$ och $y = 1/12$. Vi har alltså två stationära punkter nämligen $(0,0)$ och $(1/6, 1/12)$. Hessematrisen är $f''(x,y) = \begin{bmatrix} f''_{xx} & f''_{xy} \\ f''_{xy} & f''_{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6x & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$. I de två punkterna får vi $f''(0,0) = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$ med egenvärdena $1 \pm \sqrt{2}$, så att matrisen är indefinit, och $f''(1/6, 1/12) = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$ med egenvärdena $(3 \pm \sqrt{5})/2$, så att matrisen är positivt definit. Vi drar slutsatsen att $(0,0)$ är en sadelpunkt och att $(1/6, 1/12)$ är en minimipunkt.

5. (a) asymptotiskt stabilt, (b) instabilt, (c) asymptotiskt stabilt

6. De stationära lösningarna ges av ekvationssystemet

$$\begin{aligned} \bar{X}_2(1 - \bar{X}_1^2) &= 0 \\ 2 - \bar{X}_1\bar{X}_2 &= 0 \end{aligned}$$

med två lösningar $(\bar{X}_1, \bar{X}_2) = (1, 2)$ och $(\bar{X}_1, \bar{X}_2) = (-1, -2)$. Jacobimatrisen är

$$\begin{bmatrix} -2\bar{X}_1\bar{X}_2 & 1 - \bar{X}_1^2 \\ -\bar{X}_2 & -\bar{X}_1 \end{bmatrix}.$$

Linjärisering kring $(\bar{X}_1, \bar{X}_2) = (1, 2)$ leder till det linjära systemet

$$\begin{bmatrix} x_1'(t) \\ x_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ -2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix},$$

vars matris har negativa egenvärden -4 och -1, och alltså är asymptotiskt stabilt. Linjärisering kring $(\bar{X}_1, \bar{X}_2) = (-1, -2)$ leder till systemet

$$\begin{bmatrix} x_1'(t) \\ x_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}.$$

Egenvärdena är -4 och 1 och systemet är instabilt.

8. (a) $(0,0)$ instabil, $(1,1)$ instabil; (b) $(10,0)$ asymptotiskt stabil; (c) $(0,0,0)$ och $(0,-1,1)$ båda instabila

10. $-\frac{1}{3}e^{-2t}\sin 3t$

11. $\theta(t) = Ae^{j\omega t} + Be^{-j\omega t} = C\cos\omega t + D\sin\omega t$, respektive $\theta(t) = Ae^{\omega t} + Be^{-\omega t} = C\cosh\omega t + D\sinh\omega t$

16. (a) $\frac{1}{2}L^2(x/L)(1-(x/L))$. (b) $L^2(x/L)(1-\frac{1}{2}(x/L))$. (c) $\frac{6}{11}(x/L)+\frac{14}{11}$. (d) Det finns ingen lösning. Problemet är inte "rätt ställt" (not "well posed"). Detta värmeledningsproblem är ofysikaliskt och saknar stationär lösning. Man pumpar in värme men släpper inte ut någon.

18. (a) Genom att integrera differentialekvationen får vi

$$
\begin{aligned}
&d(x)u'(x) = A, \quad u'(x) = \frac{A}{d(x)} = \frac{A}{\epsilon}\frac{1}{1+(\beta x)^2}, \quad u(x) = \frac{A}{\epsilon\beta}\arctan(\beta x) + B,\\
&g_0 = u(-L) = \frac{A}{\epsilon\beta}\arctan(-\beta L) + B = -\frac{A}{\epsilon\beta}\arctan(\beta L) + B,\\
&g_1 = u(L) = \frac{A}{\epsilon\beta}\arctan(\beta L) + B,\\
&A = \epsilon\beta\frac{g_1 - g_0}{2\arctan(\beta L)}, \quad B = \frac{g_1 + g_0}{2},\\
&u(x) = \frac{g_1 - g_0}{2}\frac{\arctan(\beta x)}{\arctan(\beta L)} + \frac{g_1 + g_0}{2},\\
&j(x) = -d(x)u'(x) = -A = -\epsilon\beta\frac{g_1 - g_0}{2\arctan(\beta L)}, \quad k = \frac{\epsilon\beta}{2\arctan(\beta L)}.
\end{aligned}
$$

19. (a) $\phi = L\sqrt{k/D}$. (d) $c^*(r) = \cosh(\phi r)/\cosh(\phi)$, $\eta = \tanh(\phi)/\phi$, $c^*(0) = 1/\cosh(\phi)$. Obs att $c^*(r) \equiv 1$ om $\phi = 0$.

(e) Med $u = rc^*(r)$ övergår (45) i

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

med allmänna lösningen

$$u(r) = A\cosh(\phi r) + B\sinh(\phi r),$$

så att

$$
\begin{aligned}
c^*(r) &= \frac{1}{r}(A\cosh(\phi r) + B\sinh(\phi r)),\\
\frac{dc^*(r)}{dr} &= -\frac{1}{r^2}(A\cosh(\phi r) + B\sinh(\phi r)) + \frac{\phi}{r}(A\sinh(\phi r) + B\cosh(\phi r))\\
&= A\phi^2\frac{\phi r\sinh(\phi r) - \cosh(\phi r)}{(\phi r)^2} + B\phi^2\frac{\phi r\cosh(\phi r) - \sinh(\phi r)}{(\phi r)^2}.
\end{aligned}
$$

Taylorutvecklingarna $\cosh x = 1 + \frac{1}{2}x^2 + O(x^4)$, $\sinh x = x + \frac{1}{6}x^3 + O(x^5)$ visar att uttrycket efter A (i derivatan) går mot ∞, och uttrycket efter B går mot 0, då r går mot 0. Därför måste $A = 0$ och randvillkoret $c^*(1) = 1$ ger sedan $B = 1/\sinh(\phi)$. Lösningen blir

$$c^*(r) = \frac{\sinh(\phi r)}{r\sinh(\phi)}.$$

Effektivitetsfaktorn blir enligt (40)

$$
\begin{aligned}
\eta &= \frac{1}{V^*}\int_{V^*} c^*\,dV^* = \frac{1}{4\pi/3}\int_0^1 c^*(r)4\pi r^2\,dr = 3\int_0^1 c^*(r)r^2\,dr\\
&= \frac{3}{\sinh(\phi)}\int_0^1 r\sinh(\phi r)\,dr = \frac{3}{\phi^2\sinh(\phi)}\int_0^\phi s\sinh(s)\,ds\\
&= \{\text{ partiell integration }\} = \frac{3}{\phi^2}\Big(\frac{\phi}{\tanh(\phi)} - 1\Big).
\end{aligned}
$$

Eller enligt (41)

$$\begin{aligned}\eta &= \frac{1}{\phi^2}\frac{1}{V^*}\int_{S^*}\frac{\partial c^*}{\partial n^*}\,dS^* = \frac{1}{\phi^2}\frac{1}{4\pi/3}c^{*\prime}(1)4\pi \\ &= \frac{3}{\phi^2}\frac{\phi\cosh(\phi)-\sinh(\phi)}{\sinh(\phi)} = \frac{3}{\phi^2}\Big(\frac{\phi}{\tanh(\phi)}-1\Big).\end{aligned}$$

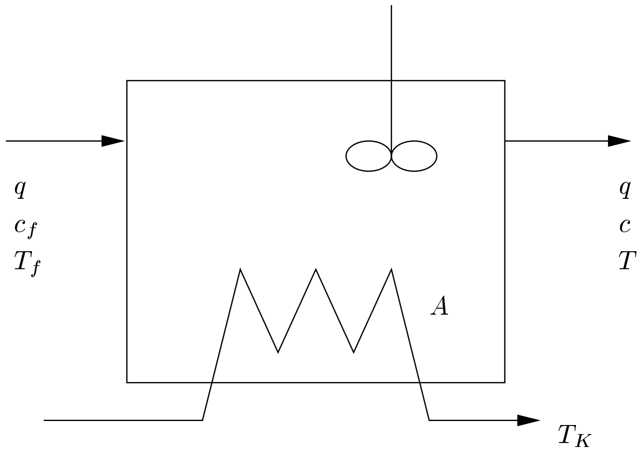
En intressant observation: Eftersom $\sinh(x)/x \to 1$ då $x \to 0$, och

$$c^*(r) = \frac{\phi}{\sinh(\phi)}\frac{\sinh(\phi r)}{\phi r},$$

ser vi att $c^*(0) = \phi/\sinh(\phi)$, och att $c^*(r) \to 1$ då $\phi \to 0$ med r fixt, vilket stämmer överens med att $c^*(r) \equiv 1$ om $\phi = 0$.

5. Tankreaktorn

I en tankreaktor på 1.2 m^3 skall ett ämne ($c_f = 5$ kmol/m^3) omsättas till 50% enligt en första ordningens reaktion med $k = 2.8 \cdot 10^{-5}$ s^{-1} vid 70 °C. Mätningar visar att värdet på k fördubblas för var tionde °C. Reaktionsvärmet är $\Delta H = -83.7$ kJ/mol. Värmekapaciteten och densiteten hos materialströmmen varierar ej med temperaturen och sammansättningen, och är $c_p = 4.19$ kJ/(kg K) respektive $\rho = 1000$ kg/m^3. Flödeshastigheten är $q = 2.79 \cdot 10^{-4}$ m^3/s. Inflödets temperatur är $T_f = 70$°C. För värmeväxlaren i tanken kan man räkna med värmegenomgångskoefficienten $\kappa = 0.58$ kJ/(m^2 s K).



Figur 9. Tankreaktor.

Beräkna gränsvärdet på erforderlig värmeväxlararea A för stabil drift. Välj därefter lämplig area och beräkna temperaturen T_K i kylvattnet vid jämvikt vid 50% omsättningsgrad. (Omsättningsgraden= $(c_f - c)/c_f$.) (Från "Kemisk reaktionsteknik. Övningsuppgifter", Kemisk reaktionsteknik, CTH 1993, uppgift 7.1.)

5.1. **Lösning.** De använda m-filerna finns på kemi-pc och på kursens web-sida, se

`http://www.math.chalmers.se/~stig`

På kemi-pc blir filerna tillgängliga efter att man exekverat kommandot "`tillmat`" i Matlab.

(a) Vi ställer först upp balansekvationer för massa och energi. Omsättningshastigheten av massa är Vck `[mol/s]`, där reaktionshastigheten ges av

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

enligt Arrhenius lag. Värmeproduktionshastigheten blir då $Q = (-\Delta H)Vck$ [J/s]. Balansekvationerna för massa Vc [mol] och värmeenergi $\rho c_p VT$ [J] blir

$$\frac{d}{dt}(Vc) = q(c_f - c) - Vck_0 \exp(-E/(RT)),$$
$$\frac{d}{dt}(\rho c_p VT) = \rho c_p q(T_f - T) + (-\Delta H)Vck_0 \exp(-E/(RT)) - \kappa A(T - T_K).$$

(b) För att kunna räkna (numeriskt) måste man skala variablerna så att de får rimliga storleksordningar (det visar sig t ex att $\exp(-E/(RT)) \approx e^{-30}$). Vi inför därför dimensionslösa variabler enligt

$$s = t/\tau, \quad \tau = V/q \ [\mathtt{s}],$$
$$X_1(s) = c(s\tau)/c_f, \quad X_2(s) = T(s\tau)/T_f, \quad U(s) = T_K(s\tau)/T_f,$$

där $\tau = V/q$ [s] kallas uppehållstiden.

Den första ekvationen divideras med qc_f, den andra med $\rho c_p q T_f$. Med $\tau = V/q$ får vi

$$\tau \frac{d}{dt}\Big(\frac{c}{c_f}\Big) = 1 - \frac{c}{c_f} - \frac{c}{c_f}\tau k_0 \exp\Big(-\frac{E}{RT_f}\frac{T_f}{T}\Big),$$
$$\tau \frac{d}{dt}\Big(\frac{T}{T_f}\Big) = 1 - \frac{T}{T_f} + \frac{(-\Delta H)c_f}{\rho c_p T_f}\frac{c}{c_f}\tau k_0 \exp\Big(-\frac{E}{RT_f}\frac{T_f}{T}\Big) - \frac{\kappa A \tau}{\rho c_p V}\Big(\frac{T}{T_f} - \frac{T_K}{T_f}\Big).$$

Med de dimensionslösa variablerna

$$s = t/\tau, \quad X_1(s) = \frac{c(s\tau)}{c_f}, \quad X_2(s) = \frac{T(s\tau)}{T_f}, \quad U(s) = \frac{T_K(s\tau)}{T_f},$$
$$\alpha = \frac{(-\Delta H)c_f}{\rho c_p T_f}, \quad \beta = \frac{\kappa A \tau}{\rho c_p V}, \quad \gamma = \frac{E}{RT_f}, \quad \delta = \tau k_0 e^{-\gamma}, \quad f(x) = \delta e^{\gamma - \gamma/x},$$

får vi det ickelinjära differentialekvationssystemet

$$\frac{dX_1}{ds} = 1 - X_1 - X_1 f(X_2) \qquad (= F_1(X,U)),$$
$$\frac{dX_2}{ds} = 1 - X_2 + \alpha X_1 f(X_2) - \beta(X_2 - U) \qquad (= F_2(X,U)).$$

Talet $\gamma = E/(RT_f)$ kallas Arrhenius tal. Observera att $e^{\gamma - \gamma/X_2} \approx 1$ då $X_2 \approx 1$, vilket är en hanterlig storleksordning. (Alternativt kan man använda variablerna $Y_1 = 1 - X_1 = (c_f - c)/c_f$ (omsättningsgraden) och $Y_2 = \gamma(X_2 - 1) = \gamma(T - T_f)/T_f$. Då blir $e^{\gamma-\gamma/X_2} = e^{Y_2/(1+Y_2/\gamma)} \approx e^{Y_2} \approx 1$ då $Y_2 \approx 0$.)

(c) Vi bestämmer parametrarna δ, γ genom att anpassa funktionen

$$\tau k = \delta e^{\gamma - \gamma/X_2}$$

till givna mätdata för k och T. Dessa finns i filen `data.m`. När man exekverar denna läses alla data in. Se exemplet "fitting" i Matlabs demo. Vi använder Matlab-programmet `fmins` och filen `fel.m`. Mätdata plottas tillsammans med den anpassade funktionen för att se hur bra det stämmer.

Med givna data får man $\delta = 0.0761$, $\gamma = 30.9896$. Detta betyder att reaktionshastighetskonstanten $k_0 = e^{\gamma}\delta/\tau \approx 5.0883 \cdot 10^8$ [$\mathtt{s}^{-1}$] och aktiveringsenergin $E = \gamma RT_f \approx 8.8376 \cdot 10^4$ [J/mol] (gaskonstanten $R \approx 8.3143$ [J/mol K]). Beräkningarna görs av programmet `step1.m`.

Anmärkning: Det visar sig vara omöjligt att anpassa Arrhenius lag i sin ursprungliga form $k = k_0 \exp(-E/(RT))$ till mätdata för k och T. Den numeriska algoritmen i `fmins` konvergerar inte. Det är orsaken till att vi skriver om Arrhenius lag på formen $k\tau = \delta e^{\gamma - \gamma/X}$.

(d) Kravet att omsättningen ska vara 50% innebär att arbetspunkten ska vara $\bar{c} = 0.5c_f$, dvs $\bar{X}_1 = 0.5$. Vi bestämmer $\bar{X}_2$ och $\bar{U}$ så att $\bar{X}_1 = 0.5$. Dessa uttrycks i $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, dvs numeriska värden sätts inte in ännu.

Stationära lösningar ges av

$$1 - \bar{X}_1 - \bar{X}_1 f(\bar{X}_2) = 0,$$
$$1 - \bar{X}_2 + \alpha \bar{X}_1 f(\bar{X}_2) - \beta(\bar{X}_2 - \bar{U}) = 0.$$

Om $\bar{X}_1$ är fixerad ger den första ekvationen

$$f(\bar{X}_2) = (1 - \bar{X}_1)/\bar{X}_1,$$

dvs

$$\bar{X}_2 = \frac{\gamma}{\gamma + \ln(\delta \bar{X}_1/(1 - \bar{X}_1))}.$$

Den andra ekvationen ger sedan

$$\bar{U} = \bar{X}_2 - \frac{1 - \bar{X}_2 + \alpha \bar{X}_1 f(\bar{X}_2)}{\beta} = \bar{X}_2 - \frac{1 - \bar{X}_2 + \alpha(1 - \bar{X}_1)}{\beta}.$$

(e) Nu linjäriserar vi kring $\bar{X}, \bar{U}$. Det linjäriserade systemet blir

$$x'(s) = Ax(s) + Bu(s), \quad s > 0; \quad x(0) = x_0,$$

med Jacobimatriserna

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial X_1}(\bar{X}, \bar{U}) & \frac{\partial F_1}{\partial X_2}(\bar{X}, \bar{U}) \\ \\ \frac{\partial F_2}{\partial X_1}(\bar{X}, \bar{U}) & \frac{\partial F_2}{\partial X_2}(\bar{X}, \bar{U}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 - f(\bar{X}_2) & -\bar{X}_1 f'(\bar{X}_2) \\ \\ \alpha f(\bar{X}_2) & -1 + \alpha \bar{X}_1 f'(\bar{X}_2) - \beta \end{bmatrix},$$

där $f'(x) = \frac{\gamma}{x^2} f(x)$, och

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial U}(\bar{X}, \bar{U}) \\ \\ \frac{\partial F_2}{\partial U}(\bar{X}, \bar{U}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \beta \end{bmatrix}.$$

(f) Nu bestämmer vi en undre gräns β_0 för β sådan att det linjäriserade systemet blir stabilt för $\beta > \beta_0$. Vi gör detta genom att systematiskt beräkna egenvärdena till Jacobimatrisen numeriskt för olika värden på β.

Vi sätter $\bar{X}_1 = 0.5$ och beräknar att $f(\bar{X}_2) = 1$, $\bar{X}_2 = 1.0906$, $\alpha = 0.2912$. Vi beräknar sedan A och $\bar{U}$ för olika värden på β. Numeriska experiment visar att A har två egenvärden $\lambda_1 < 0$, $\lambda_2 > 0$ om $0 < \beta < \beta_0 \approx 0.898$; ett konjugerat par av komplexa egenvärden med $\operatorname{Re} \lambda_{1,2} < 0$ om $\beta_0 < \beta < \beta_1 \approx 8.688$; och två negativa egenvärden om $\beta > \beta_1$. Arbetspunkten $\bar{X} = (0.5, 1.0906)$ är alltså stabil om $\beta > \beta_0 \approx 0.898$ och instabil annars. Beräkningarna görs av programmet `step2.m`. Där görs en parameterstudie: β varieras i ett intervall och real- och imaginärdelarna av egenvärdena plottas som funktion av β.

(g) Här löser vi numeriskt både det linjäriserade och det icke-linjära systemet med små störningsdata x_0 och $u(s) = u_0 \cos(s)$ kring $\bar{X}, \bar{U}$. Vi väljer β både under och över stabilitetsgränsen.

Beräkningarna görs av programmen `step3.m` och `step4.m`. Vi använder data $x(0) = x_0$, $u(s) = u_0 \cos(s)$ för det linjäriserade systemet och $X(0) = \bar{X} + x_0$, $U(s) = \bar{U} + u(s)$ för det ickelinjära. Vi tar först $u_0 = 0$ och t ex $x_0 = (0, 0)$, $x_0 = 0.001\,(1, \pm 1)$, och sedan t ex $u_0 = 0.001$. Man ser tydligt att arbetspunkten $\bar{X}_1 = 0.5$, $\bar{X}_2 = 1.0906$ är stabil om $\beta > \beta_0 \approx 0.898$ och instabil annars. I det senare fallet tippar systemet över till en annan (icke önskvärd) stabil stationär punkt. Det verkar finnas två sådana.

(h) Slutligen ger vi en rekommendation om hur reaktorn ska köras uttryckt i de ursprungliga variablerna c, T, T_K, A. Vi beräknar även hur mycket värme som måste kylas bort.

Den kritiska arean blir

$$A_0 = \frac{\beta_0 \rho c_p V}{\kappa \tau} = 1.8099 \text{ m}^2.$$

För stabil drift väljer vi t ex $\beta = 3$, vilket ger arbetspunkten

$$\begin{aligned}
&c = \bar{X}_1 c_f = 0.5 c_f = 2500 \text{ mol/m}^3,\\
&T_f = 343.15 \text{ K} = 70.00\ ^\circ\text{C},\\
&T = \bar{X}_2 T_f = 374.24 \text{ K} = 101.09\ ^\circ\text{C},\\
&T_K = \bar{U} T_f = 367.95 \text{ K} = 94.80\ ^\circ\text{C},\\
&T - T_K = 6.28 \text{ K} = 6.28\ ^\circ\text{C},\\
&A = \frac{\beta \rho c_p V}{\kappa \tau} = 6.047 \text{ m}^2,\\
&\text{kyleffekten} = \kappa A (T - T_K) = 22.04 \text{ kJ/s}.
\end{aligned}$$

Om man vill ha ett mycket snabbt insvängningsförlopp vid start av reaktorn, bör man välja $\beta > \beta_1$, t ex $\beta = 10$.

Beräkningarna görs av programmet `step5.m`.

Anmärkning: I "Kemisk reaktionsteknik. Övningsuppgifter", CTH 1993, uppgift 7.1, uppskattas kritiska arean till 1.5 m^2, vilket svarar mot $\beta = 0.7442$. För att göra en jämförelse beräknar vi $Q = (-\Delta H) k c V = \rho c_p q T_f \alpha X_1 f(X_2)$ `[J/s]` och i arbetspunkten

$$\frac{\partial Q}{\partial T} = \frac{\partial Q}{\partial X_2}\frac{\partial X_2}{\partial T} = \rho c_p q \alpha \bar{X}_1 f'(\bar{X}_2) = \rho c_p q \alpha \bar{X}_1 \frac{\gamma}{\bar{X}_2^2} f(\bar{X}_2) = 4.43 \cdot 10^3 \text{ J/(s K)}.$$

I kompendiet uppskattas $\partial Q/\partial T$ till $2.03 \cdot 10^3$ J/(s K). Detta leder till en underskattning av kritiska arean. Felet verkar vara att man beräknar

$$\left.\frac{\partial Q}{\partial T}\right|_{c_f - c - ck\tau = \text{konst}} \quad \text{i stället för} \quad \left.\frac{\partial Q}{\partial T}\right|_{c = \text{konst}}.$$