

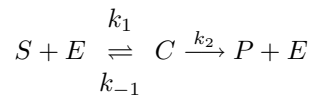
TMA075 Matematisk Modellering
(MAI530)
Förslag till lösningar

För godkänt krävs 15 poäng. För att kursen skall godkännas krävs förutom ett godkänt tentamensresultat också ett godkänt projekt. Betyget är en sammanvägning av projekt och tentamen.

1. Se föreläsningssanteckningarna

(10p)

2. Betrakta en kemisk reaktion



Vi skall beskriva hur koncentrationerna $S(t)$, $E(t)$, $C(t)$ och $P(t)$ ändras med tiden. För $S(t)$ var ekvationen redan given i tentamenstesen:

$$\frac{d}{dt}S(t) = k_{-1}C(t) - k_1S(t)E(t). \quad (1)$$

På motsvarande sätt får man då

$$\frac{d}{dt}E(t) = -k_1S(t)E(t) + (k_{-1} + k_2)C(t) \quad (2)$$

$$\frac{d}{dt}C(t) = k_1S(t)E(t) - (k_{-1} + k_2)C(t) \quad (3)$$

$$\frac{d}{dt}P(t) = k_2C(t) \quad (4)$$

Sammanlagt har vi ett system med fyra ekvationer och fyra obekanta. Varje komponent i högerledet är deriverbart, och därmed Lipschitzkontinuerligt. Till exempel är uttrycket

$$F(S, E, C, P) = k_{-1}C - k_1SE$$

partiellt deriverbart med avseende på alla komponenterna, och det är samma med de övriga. Då säger satsen om existens och entydighet för system av ordinära differentialekvationer att det finns ett intervall $0 \leq t \leq T$ i vilket systemet har en entydig lösning.

En observation man kan göra genast (genom att addera (??) och (??)) är att $C(t) + E(t) = \text{konst.}$ Kalla den konstanten för E_0 (det namnet är motiverat om det vid tiden $t = 0$ gäller att $C(0) = 0$, men oavsett detta kan vi kalla konstanten E_0). Antag nu att $S(t) = S_0$, en konstant, för alla tider. Vi söker en jämviktslösning för $\bar{C}$ för koncentrationen. Då är $\frac{d}{dt}C(t) = 0$, och om man samlar allt detta i (??), får man

$$0 = k_1S_0(E_0 - \bar{C}) - (k_{-1} + k_2)\bar{C},$$

eller $(k_1S_0 + (k_{-1} + k_2))\bar{C} = k_1S_0E_0$, vilket ger

$$\bar{C} = \frac{k_1S_0E_0}{k_1S_0 + (k_{-1} + k_2)}$$

För den sista delen av uppgiften, skriver studerar vi bara två ekvationer,

$$\frac{d}{dt}S(t) = k_{-1}(E_0 - E(t)) - k_1S(t)E(t) \quad \text{och} \quad (5)$$

$$\frac{d}{dt}E(t) = -k_1S(t)E(t) + (k_{-1} + k_2)(E_0 - E(t)) \quad (6)$$

De kommer från systemet ovan genom från att $E + C$ är konstant, och att koncentrationen P inte förekommer i någon av de andra ekvationerna, och därför kan vi lösa den ekvationen sist, efter att de andra är avklarade. Naturliga dimensionslösa variabler är

$$\tilde{E}(t) = E(t)/E_0 \quad \tilde{S}(t) = S(t)/S_0,$$

vilket ger

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{S}(t) &= k_{-1}\frac{E_0}{S_0}(1 - \tilde{E}(t)) - k_1E_0\tilde{S}(t)\tilde{E}(t) \quad \text{och} \\ \frac{d}{dt}\tilde{E}(t) &= -k_1S_0\tilde{S}(t)\tilde{E}(t) + (k_{-1} + k_2)(1 - \tilde{E}(t)) \end{aligned}$$

Eftersom E_0 antas vara mycket mindre än S_0 , kallar vi kvoten E_0/S_0 för ϵ . Sen skall vi välja en lämplig tidsskala. Det finns flera möjligheter, men en tänkbar variant är att skriva $\tau = \epsilon k_{-1}t$ vilket ger

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\tilde{S} &= (1 - \tilde{E}) - k_1S_0\tilde{S}\tilde{E} \quad \text{och} \\ \frac{d}{d\tau}\tilde{E} &= -\frac{k_1S_0}{k_{-1}\epsilon}\tilde{S}\tilde{E} + \frac{k_{-1} + k_2}{k_{-1}\epsilon}(1 - \tilde{E}) \end{aligned}$$

Här tänker vi oss alltså en situation där S_0 , och de olika konstanterna k inte är av "rimlig" storlek, och att det är just ϵ som är mycket liten i förhållande till de andra. Och observera också att vi nu måste tänka oss de olika koncentrationerna som funktioner av τ istället för t .

Det man kan säga nu är att om ϵ är mycket liten, så kommer $\tilde{E}$ att konvergera mycket snabbt mot sitt jämviktsläge; när man studerar ekvationen för S kan man anta att $\frac{d}{d\tau}\tilde{E} = 0$, och på så sätt kan man få fram en approximativ ekvation som bara innehåller S .

(10p)

3. Ekvationen

$$\frac{\partial}{\partial t}c(\mathbf{x}, t) - D\nabla^2c(\mathbf{x}, t) = 0.$$

medför att D måste ha dimensionen m^2s^{-1} . Naturligtvis måste a ha dimensionen meter. Om

$$D = F(a, k, T, \mu)$$

så är $D/F(a, k, T, \mu)$ en dimensionslös variabel. Alltså är det naturligt att försöka hitta en dimensionslös

$$\Pi = D/F(a, k, T, \mu) = D^\alpha a^\beta k^\gamma T^\delta \mu^\lambda.$$

Dimensionen för högerledet blir

$$\begin{aligned} [D]^\alpha [a]^\beta [k]^\gamma [T]^\delta [\mu]^\lambda &= \left(\frac{m^2}{s}\right)^\alpha m^\beta \left(\frac{kg m^2}{s^2 K}\right)^\gamma [K]^\delta \left(\frac{kg}{s m}\right)^\lambda \\ &= m^{2\alpha+\beta+2\gamma-\lambda} s^{-\alpha-2\gamma-\lambda} kg^{\gamma+\lambda} K^{-\gamma+\delta} \end{aligned}$$

Om man sätter $\alpha = 1$, blir den enda dimensionslösa varianten $\beta = \lambda = 1$ och $\gamma = \delta = -1$, och alltså är

$$D = \Pi \frac{kT}{a\mu}$$

(10p)