CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA
Matematik

TMA681 Tillämpad matematik K, 2000

Instruktioner till vecka 2

I en reaktion av första ordningen ges reaktionshastigheten av kc $[\mathtt{mol/(m^3s)}]$. Hastighetskoefficienten k beror på temperaturen enligt Arrhenius lag

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

där T [K] är absoluta temperaturen och R [J/(mol K)] är gaskonstanten. Uppgiften är att bestämma reaktionens hastighetskonstant k_0 $[\mathtt{s}^{-1}]$ och aktiveringsenergi E [J/(mol)] från uppmätta värden på k och T. Det vill säga att anpassa kurvan (1) till givna punkter (T_i, k_i) i T-k planet.

Det visar sig att man måste skala om variablerna för att kunna räkna. Vi skriver (1) på dimensionslös form

$$k\tau = k_0 \tau e^{-\gamma} e^{\gamma(1-1/X_2)}, \quad \gamma = \frac{E}{RT_f}, \; X_2 = \frac{T}{T_f}, \; \tau = \frac{V}{q}, \tag{2}$$

eller med $r = k\tau$, $\delta = k_0\tau e^{-\gamma}$, $\xi = 1 - 1/X_2$,

$$r = \delta e^{\gamma\xi}. \tag{3}$$

Uppgiften blir att bestämma δ,γ så att kurvan (3) passar så bra som möjligt till givna punkter (ξ_i, r_i) i ξ-r planet.

Metod 1. Vi minimerar den kvadratiska residualen (avvikelsen)

$$g(\delta, \gamma) = \sum_i \left(r_i - \delta e^{\gamma\xi_i}\right)^2$$

med avseende på δ,γ. Detta görs i programmet `step1` med hjälp av Matlabprogrammet `fmins` (detta program ersätts senaste version av Matlab av `fminsearch`). Residualen är implementerad i filen `fel.m`. Den anpassade kurvan (3) plottas sedan tillsammans med mätpunkterna. Obs att detta är ett minimeringsproblem i två variabler, se föreläsning 4.

Metod 2. Bilda logaritmen av (3) så att man får ett linjärt samband ($y = ax + b$). Sedan kan man använda den vanliga minsta kvadratmetoden enligt TLA kap 4.9 och kap 5.2.

Vad ni ska göra.

Er uppgift är att genomföra Metod 2 och att jämföra resultatet med resultatet från Metod 1.

Skriv ett program som initialiserar alla variabler som behövs (jämför `step1.m` och `data.m`).

Sätt upp minsta kvadrat-problemet enligt TLA kap 4.9, gör beräkningarna med Matlab. Kommandot

```
x=A\y
```

är användbart.

Jämför med Metod 1.

Vad blir k_0 och E?

I vilket temperaturintervall bör mätningarna göras?

Skriv en redogörelse för ovanstående som kan ingå i slutrapporten om tankreaktorn (inlämningsuppgift 1).

000317 /stig