TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING

Onsdagen den 18 oktober 2000

Sammanställt av David Frisk, Kf3
Januari 2013

Betygsgränser

Poäng:	0-14	15-19	20-24	25-
Betyg:	U	3	4	5

Tillåtna hjälpmedel

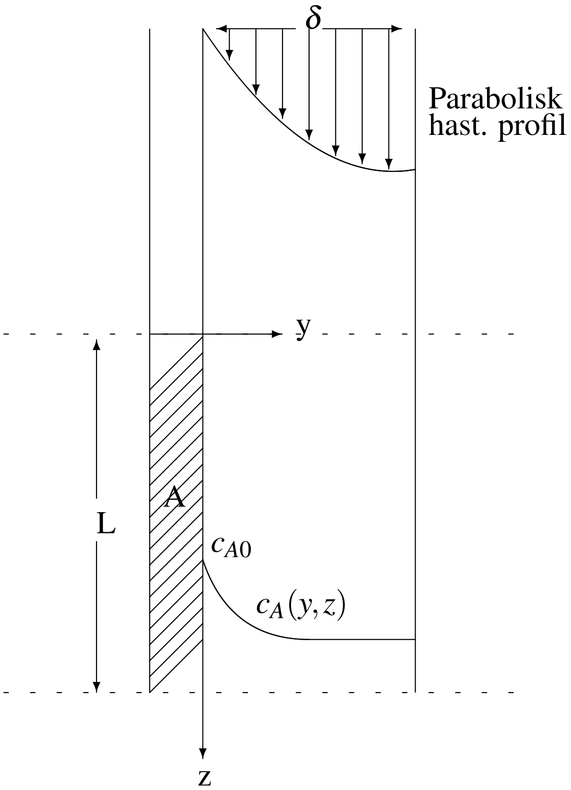
Skrivdon och valfri räknedosa
TEFYMA tabellen
Physics Handbook
Standard Mathematical Tables
BETA Mathematics Handbook
Handbook och Chemistry and Physics

1. (4p)
Ställ, med skalbalans, upp en instationär modell för att beräkna den kritiska radien för ett autokatalytiskt system. I ett sådant system ökar reaktionsprodukten reaktionshastigheten. För ett givet system erhålls kriticitet då förlusterna över systemgränserna (transporterad med diffusion) inte längre kan balansera produktionen. Exempel utgör sönderfall av acetylen och kärnfission.

Antag att systemet består av en lång cylinder med radien R (ändeffekter kan försummas) och att produktionshastigheten kan modelleras som en första ordningens reaktion. Randvillkoret vid ytan kan sättas till 0 och initialkoncentrationen är konstant (=C_i).

2. (6p)
En vätska strömmar laminärt längs en vertikal vägg enligt figur. För z<0 är väggen inert, medan för 0<z<L innehåller väggen en komponent som är något löslig i vätskan. Ställ upp en matematisk modell för upplösningsförloppet.

Eventuella ytterligare förenklingar ska motiveras!



3. (5p)
I grundkursen i kemisk reaktionsteknik definierar vi en ideal tubreaktor med att alla koncentrationer och temperaturer är konstanta i ett infinitialt element över hela reaktortvärsnittet.

Diskutera i detta fall då man inte helt uppfyller det ideala antagandet om approximationen om att medelvärdet av reaktionshastigheten är lika med hastigheten vid medelkoncentrationen och medeltemperaturen i reaktortvärsnittet. När kan man få en överskattning respektive en underskattning av medelreaktionshastigheten?

Diskutera även om transporten av reaktant kan beskrivas av medelkoncentration gånger medelflödeshastighet då man har att koncentration och flödet varierar radiellt i en tubreaktor. Ger denna beräkning (q*Cmedel) i normalfallet då man har högre flöde och lägre reaktantkoncentration i mitten (pga högre temperatur) en över- eller underskattning av transporten?

4. (5p)
En snabb reaktion sker i ett katalytiskt membran där de två reaktanterna diffunderar från var sitt håll. Reaktionen är så snabb att inget diffunderar ut på andra sidan.

$A + 2B \rightarrow C$
$D_A \dfrac{d^2C_A}{dx^2} - kC_AC_B = 0$
$D_B \dfrac{d^2C_B}{dx^2} - 2kC_AC_B = 0$
$C_A = 1000 mol/m^3$ $\quad$ $C_B = 0$ mol/m^3 vid x=0
$C_B = 800 mol/m^3$ $\quad$ $C_A = 0$ mol/m^3 vid x=δ

Beräkna reaktionshastigheten per m^2 membran. Använd någon form av viktade residualer.

$D_A = 10^{-9} m^2/s$
$D_B = 2 \cdot 10^{-9} m^2/s$
$k = 3 \cdot 10^{-5} m^3/mol \cdot s$
$\delta = 10^{-3} m$

Beräkna även residualen i några punkter och jämför denna med de största termerna i ekvationerna. Diskutera sedan lösningens tillförlitlighet.

5. (6p)
Som en del i ett arbete som syftar till att hitta optimala driftsförhållanden i en ångstripper behövs en enkel modell för att beskriva hur destillatets vattenhalt (y) beror av ångförbrukningen(x). Som underlag gjordes några mätningar med följande resultat

x (kg/s)	y(viktsandel)
0.265	0.35
0.291	0.30
0.323	0.25
0.366	0.21
0.434	0.14
0.606	0.12
1.31	0.07
13.4	0.05

Som modell föreslås $y = a(ln(x/b))^{-\frac{2}{3}}$, där a och b är modellens parametrar. Genom minimering av residualkvadratsumman SS erhölls:

a (parameter 1)	0.130	
b (parameter 2)	0.214 kg/s	
SS	0.0017	
$J^T J$	21.2759	27.3280
	27.3280	41.1683
$(J^T J)^{-1}$	0.3190	-0.2117
	-0.2117	0.1648

a) Optimalt ångflöde förväntas vara ca 0.6 kg/s. Beräkna ett 95%-igt konfidensintervall som beskriver modellens osäkerhet för detta flöde.

b) Andra som gjort liknande försök har kommit fram till att a=0.103 och b=0.215. Ligger dessa värden, på approximativt 95 % signifikansnivå, inom den konfidensyta för ovanstående bestämning som har korrekt form?

c) $(J^T J)^{-1}_{1,2} / \sqrt{(J^T J)^{-1}_{1,1} (J^T J)^{-1}_{2,2}} = -0.92$. Förklara vad detta uttryck beskriver och vad dess värde innebär. Hur är det kopplat till konfidensytans utseende?

Se bilaga för tabeller och formler.

6. (4p)
a) Ange två viktiga förutsättningar för att bestämning av parametrar med minsta-kvadratmetoden skall vara statistiskt korrekt. Ange även för en av dessa hur man kan kontrollera om förutsättningen är uppfylld.

b) Vilken förutsättning behöver vara uppfylld för att man skall kunna skatta variansen enligt σ^2=SS/(N-P), där SS är minimum för residualkvadratsumman? Hur kan man kontrollera att denna förutsättning är uppfylld, och vad krävs av försöksdata för att en sådan kontroll ska kunna göras?

1. Kriticitet erhålls då Produktion $\geq$ Borttransporterat.

- Första ordningens reaktion, $r_c = k \cdot c$
- Skalbalans i radiell riktning: Cylinder med längd L, radie r och inga ändeffekter.

$$\underbrace{-D \cdot 2\pi L \cdot \left(r \frac{dc}{dr}\right)\Big|_r}_{\text{In}} - \underbrace{\left(-D \cdot 2\pi L \left(r \frac{dc}{dr}\right)\Big|_{r+\Delta r}\right)}_{\text{Ut}} + \underbrace{r_c \cdot 2\pi L \cdot r \cdot \Delta r}_{\text{Prod.}} = \underbrace{2\pi L r \cdot \Delta r \frac{dc}{dt}}_{\text{Ack.}}$$

Dela med $2\pi L \Delta r$

$$\Rightarrow \frac{-D\left(\left(r \frac{dc}{dr}\right)\Big|_r - \left(r \frac{dc}{dr}\right)\Big|_{r+\Delta r}\right)}{\Delta r} + r\, r_c = r \frac{dc}{dt}$$

Låt $\Delta r \to 0$

$$\Rightarrow D \cdot \frac{d}{dr}\left(r \frac{dc}{dr}\right) + r \cdot r_c = r \frac{dc}{dt}$$

dela med r

$$\Rightarrow D\left(\frac{d^2 c}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dc}{dr}\right) + r_c = \frac{dc}{dt}$$

Randvillkor: $c(r=R)=0 \quad \to \quad \frac{dc}{dr}\Big|_{r=0} = 0$ (Symmetri)

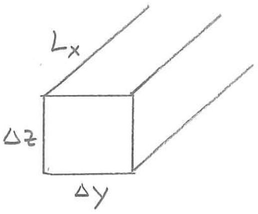
Begynnelsevillkor: $c(t=0) = c_i$

2. Laminär strömning av vätska på vertikal vägg.

- Laminär strömning i z-led:

$$\left.\begin{array}{l}\begin{cases} V_z = V_\infty \text{ vid } y = \delta \\ V_z = 0 \text{ vid } y = 0 \end{cases} \Rightarrow \left.\dfrac{dV_z}{dy}\right|_{y=\delta} = 0 \\ \text{Diffusion i y-led!} \end{array}\right\} \quad \begin{array}{l} V_z = f(y) \\ V_z(y) = V_{max}\left(1 - \left(\dfrac{y}{\delta}\right)^2\right) \end{array}$$

- Skalbalans över volymselementet $\Delta z \Delta y L_x$



Använder L_x, dvs hela bredden i x-led, istället för Δx, eftersom ingen förändring sker i x-led.

$$\overbrace{(V_z c_A)|_z L_x \Delta y}^{\text{Strömning in}} - \overbrace{(V_z c_A)|_{z+\Delta z} L_x \Delta y}^{\text{strömning ut}} + \overbrace{\left(-D_z \frac{\partial c_A}{\partial z} L_x \Delta y\right)\Big|_z}^{\text{Diffusion in, z-led}} - \overbrace{\left(-D_z \frac{\partial c_A}{\partial z} L_x \Delta y\right)\Big|_{z+\Delta z}}^{\text{Diffusion ut, z-led}} +$$

$$+ \underbrace{\left(-D_y \frac{\partial c_A}{\partial y} L_x \Delta z\right)\Big|_y}_{\text{Diffusion in, y-led}} - \underbrace{\left(-D_y \frac{\partial c_A}{\partial y} L_x \Delta z\right)\Big|_{y+\Delta y}}_{\text{Diffusion ut, y-led}} = \underbrace{L_x \Delta y \Delta z \frac{\partial c_A}{\partial t}}_{\text{Ackumulerat i kontrollvolymen.}}$$

Dividera med $L_x \Delta y \Delta z$, låt $\Delta y, \Delta z \to 0$

$$\Rightarrow \quad -V_z \frac{dc_A}{dz} + D_z \frac{d^2 c_A}{dz^2} + D_y \frac{d^2 c_A}{dy^2} = \frac{dc_A}{dt}$$

Behöver 5 ekvationer $\longrightarrow$ 4 randvillkor, 1 begynnelsevillkor:

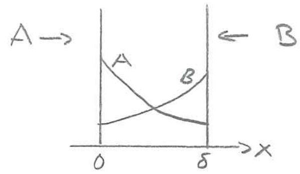
- RV I: $c_A(y=0) = c_{A0}$ (Ytkoncentration)
- RV II: $c_A(z=0) = 0$ (Ej börjat lösas upp)
- RV III: $\dfrac{dc_A}{dy}(y \gg 0) = 0$ (Konstant utanför filmen)
- RV IV: $N_A = \displaystyle\int_0^{L_x}\int_0^{L} N_{Ay}\Big|_{y=0} dz\,dx = \lim_{\delta \to \infty} L_x \delta V_{max}\left(\frac{1}{\delta}\int_0^{\delta} c_A|_{z=L}\, dy\right) =$

$$= L_x V_{max} \int_0^{\infty} c_A|_{z=L}\, dy$$

- BV I: $c_A(t=0) = 0$

3. Teoriuppgift – se kursmaterial.

4. Snabb reaktion i membran



▸ Balanser:

$$D_A \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} - k c_A c_B = 0 \qquad (1) \qquad c_A(x=0) = 1000 \text{ mol/m}^3, \quad c_A(x=\delta) = 0$$

$$D_B \frac{\partial^2 c_B}{\partial x^2} - 2 k c_A c_B = 0 \qquad (2) \qquad c_B(x=0) = 0, \quad c_B(x=\delta) = 800 \text{ mol/m}^3$$

▸ Polynom: Ansätt två st. andragradspolynom : $c_A \approx P_A(x)$, $c_B = P_B(x)$

$$P_A(x) = a + bx + cx^2 \Rightarrow \frac{dP_A}{dx} = b + 2cx \Rightarrow \frac{d^2P_A}{dx^2} = 2c$$

$$P_B(x) = d + ex + fx^2 \Rightarrow \frac{dP_B}{dx} = e + 2fx \Rightarrow \frac{d^2P_B}{dx^2} = 2f$$

Insättning av randvillkor:

$$\left.\begin{aligned} &c_A(x=0) = a = 1000 \text{ mol/m}^3 \\ &c_A(x=\delta) = 1000 + b\delta + c\delta^2 = 0 \Rightarrow b = \frac{-1000 - c\delta^2}{\delta} \end{aligned}\right\} P_A(x) = 1000 - \frac{1000 + c\delta^2}{\delta} x + cx^2 \quad (3)$$

$$\left.\begin{aligned} &c_B(x=0) = d = 0 \\ &c_B(x=\delta) = e\delta + f\delta^2 = 800 \Rightarrow e = \frac{800 - f\delta^2}{\delta} \end{aligned}\right\} P_B(x) = \frac{800 - f\delta^2}{\delta} x + fx^2 \quad (4)$$

▸ Kombinering av (1), (2), (3), (4) ger med kollokationspunkt $x_1 = 0{,}5\,\delta$:

$$D_A \cdot 2c - k\left(1000 - \frac{1000 + c\delta^2}{\delta} x_1 + cx_1^2\right)\left(\frac{800 - f\delta^2}{\delta} x_1 + f x_1^2\right) = 0$$

$$D_B \cdot 2f - 2k\left(1000 - \frac{1000 + c\delta^2}{\delta} x_1 + cx_1^2\right)\left(\frac{800 - f\delta^2}{\delta} x_1 + f x_1^2\right) = 0$$

$$\Rightarrow D_A \cdot 2c = D_B \cdot f \Rightarrow f = \frac{2 D_A c}{D_B} = \frac{10^{-9}}{2 \cdot 10^{-9}} \cdot 2c = c$$

$$\Rightarrow 4 c D_A - 2k\left(1000 - \frac{1000 + c\delta^2}{\delta} x_1 + c x_1^2\right)\left(\frac{800 - c\delta^2}{\delta} x_1 + c x_1^2\right)$$

$$\Rightarrow \ldots \Rightarrow c = 835\,186\,329{,}715 = f$$

Reaktionshastigheten /m² membran: N_A

4. forts.

$$\langle r \rangle \cdot A \cdot \delta = \int_0^\delta k c_A c_B \cdot A \, dx \approx k \int_0^\delta P_A P_B A \, dx$$

$$\Rightarrow \quad \langle r \rangle = \frac{k}{\delta} \int_0^\delta P_A P_B \, dx$$

$$N_A = \langle r \rangle \delta$$

▸ Residual i följande punkter:

X	R_B	R_A
$0{,}25\,\delta$	1,8	0,9
$0{,}50\,\delta$	0	0
$0{,}75\,\delta$	0,86	0,43
$1{,}00\,\delta$	3,34	1,67

X	$D_A \cdot \frac{d^2 c_A}{dx^2}$ $(D_A \cdot 2c)$	$k c_A c_B$	$D_B \cdot \frac{d^2 c_B}{dx^2}$ $(D_B \cdot 2f)$
$0{,}25\,\delta$	1,67	0,77	3,34
$0{,}50\,\delta$	1,67	1,67	3,34
$0{,}75\,\delta$	1,67	1,24	3,34
$1{,}00\,\delta$	1,67	0	3,34

Lösningen är dålig då residualen ej är försumbar i jämförelse med övriga termer

$\Rightarrow$ Ingen större tillförlitlighet.

5. Modellen $y = a\left(\ln(x/b)\right)^{-2/3} = f(a,b,x) = f(\theta, x)$

a) $f = f(\theta^*, x_0) \pm s\sqrt{j_0^T (J^T J)^{-1} j_0} \cdot t(n-p, \alpha/2)$, (1)

där $\hat{y}(x_0) = f(\theta^*, x_0)$, $j_0^* = \left.\dfrac{\partial f(\theta^*, x_0)}{\partial \theta^*}\right|_{\theta^*}$, $s^2 = \dfrac{SS(\theta^*)}{n-p}$

Kan bestämma numeriska värden på termerna i konfidensintervallet (1)

- $f(\theta^*, x_0) = a^*\left(\ln(x/b^*)\right)^{-2/3} = 0{,}13\ln(0{,}6/0{,}214)^{-2/3} \approx 0{,}127$

- $\left.\dfrac{\partial f(\theta^*, x_0)}{\partial \theta^*}\right|_{\theta^*}$: $\begin{cases} \dfrac{\partial f(\theta^*, x_0)}{\partial a^*} = \left(\ln(x_0/b_0)\right)^{-2/3} \approx 0{,}9799 \\ \dfrac{\partial f(\theta^*, x_0)}{\partial b^*} = -a^* \dfrac{x_0/b^{*2}}{x_0/b^*}(-2/3)\left(\ln\left(\dfrac{x_0}{b^*}\right)\right)^{-5/3} = \dfrac{2}{3}\dfrac{a^*}{b^*}\ln\left(\dfrac{x_0}{b^*}\right)^{-5/3} = 0{,}3849 \end{cases}$

$\Rightarrow j_0^* = \begin{bmatrix} 0{,}9799 \\ 0{,}3849 \end{bmatrix}$

- $s^2 = \dfrac{SS(\theta^*)}{n-p} = \dfrac{0{,}0017}{8-2}$, $s = \sqrt{s^2} \approx 0{,}01683$

- $t(n-p, \alpha/2) = t(6, 0{,}0025) = 2{,}447$

- Insättning i (1) ger:

$f = 0{,}127 \pm 0{,}01683 \cdot 2{,}447 \cdot \sqrt{\begin{bmatrix} 0{,}9799 & 0{,}3849 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0{,}3190 & -0{,}2117 \\ -0{,}2117 & 0{,}1648 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0{,}9799 \\ 0{,}3849 \end{bmatrix}} =$

$= 0{,}127 \pm 0{,}0015$

Svar a): $f = 0{,}127 \pm 0{,}0015$

5. forts.

b) Konfidensområde med korrekt form:

$$SS(\theta) \leq SS(\theta^*)\left(1+\left(\frac{p}{N-p}\right)f(p, N-p, \alpha)\right), \quad SS(\theta^*) = 0{,}0017$$

$p = 2$

$N-p = 6$

$\alpha = 0{,}05$

$$f(2, 6, 0.05) = 5{,}14$$

$$\Rightarrow SS(\theta) \leq 0{,}0017\left(1+\frac{2}{6}\cdot 5{,}14\right) = 4{,}61\cdot 10^{-3}$$

- Ligger punkten $a_{old} = 0{,}103$ och $b_{old} = 0{,}215$ inom det approx. konfidensområdet, dvs är $S(a_{old}, b_{old}) \leq 4{,}61\cdot 10^{-3}$?

$$\hat{Y}_{old} = a_{old}\left(\ln x/b_{old}\right)^{-2/3}$$

$$S(a_{old}, b_{old}) = \sum(y-\hat{y}_{old})^2 \approx \sum\left(y_{obs} - a_{old}\ln\left(x_{obs}/b_{old}\right)^{-2/3}\right)^2 \approx 0{,}01573$$

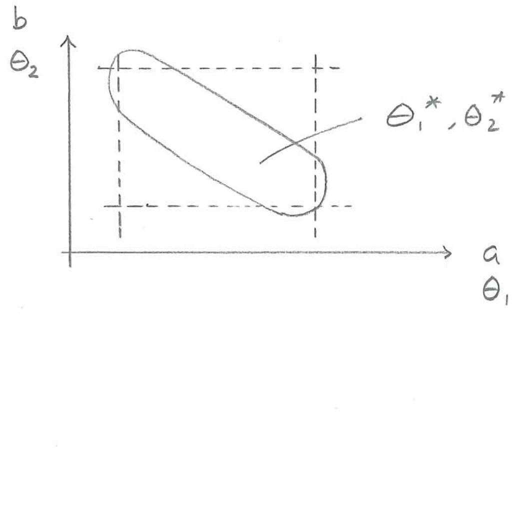
$$S(a_{old}, b_{old}) > 4{,}61\cdot 10^{-3}$$

Svar b) Ligger ej i området!

c) $$C_{1,2} = \frac{(J^TJ)^{-1}_{12}}{\sqrt{(J^TJ)^{-1}_{11}\,(J^TJ)^{-1}_{22}}} = -0{,}92 \quad \text{- korrelationskoefficienten}$$

Om $\begin{cases} V(\theta_1) = V(\theta_2) & \text{- cirkel} \\ V(\theta_1) > V(\theta_2) & \text{- ellips med axlarna parallella med koordinataxlarna} \end{cases}$

$C_{1,2} = -0{,}92 \Rightarrow$ Konfidensområdet är ovalt och utdraget med negativ lutning, ökning i $\theta_1 \Rightarrow$ minskning i θ_2



- Parametrarna bör endast användas i denna modell
- De individuella konfidensintervallen ska betraktas med försiktighet

6.

Om $E(\underline{\varepsilon}) = \underline{0}$ och $V(\underline{\varepsilon}) = \underline{\underline{I}}\,\sigma^2$, dvs felen behöver ej vara normal fördelade.

▸ Följande moment kan utföras:

1. $\hat{\underline{y}} = \underline{\underline{x}}\,\underline{b}$ - anpassat värde

2. $\underline{e} = \underline{y} - \hat{\underline{y}}$ - residual vektor

3. $\underline{\underline{V}}(\underline{b}) = (\underline{\underline{x}}^T \underline{\underline{x}})^{-1} \sigma^2$ - varians och covariansen skattas.

4. $\hat{y}_0 = \underline{x}_0^T \underline{b} = \underline{b}^T \underline{x}_0$ - anropat värde i punkten x_0

$V(\hat{y}_0) = \underline{x}_0^T \underline{\underline{V}}(\underline{b}) \underline{x}_0 = \underline{x}_0^T (\underline{\underline{x}}^T \underline{\underline{x}})^{-1} \underline{x}_0 \, \sigma^2$

5. Variansanalys, uppdelning på kvadratsummor.

▸ Om dessutom $\underline{\varepsilon} \sim N(0, I\sigma^2)$ - felen normal fördelade

1. Testa "lack-of-fit"

2. Testa "over-all-regi": $H_0: \beta_1 = \beta_2 = \ldots = 0$

mot H_1: Alla $\beta_i \neq 0$

3. Konfidensintervall för $\hat{y}_0$

4. $b \sim N(\underline{\beta}, (x^T x)^{-1} \sigma^2)$

5. Konfidens intervall för $\underline{b}$

6. Konfidens område för $\underline{b}$

a) För fullständig analys krävs således:

Normalfördelad residual (normalfördelningsplot)

Konstant varians (Plotta residualen mot oberoende variabel)

b) Om ingen "lack-of-fit" föreligger så är $SS_{res}/n-p = M_{SE} = s^2$ en "objektiv" beräkning av σ^2

Ett "lack-of-fit"-test måste göras. Förutsättning: Upprepade försök i flera mätpunkter.