TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING

Lördagen den 23 oktober 2004

Sammanställt av David Frisk, Kf3
Januari 2013

Betygsgränser

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

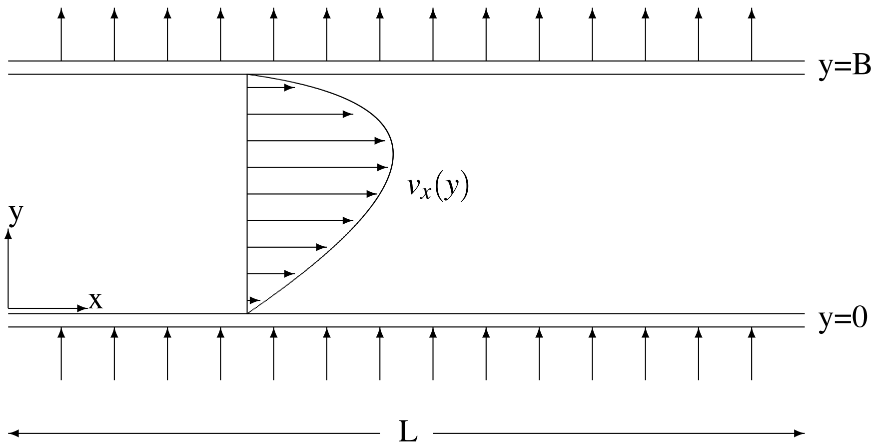
Tillåtna hjälpmedel

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

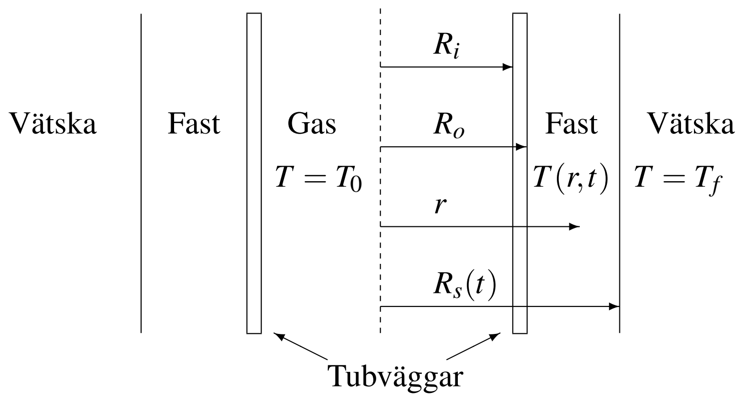
1. (4p)
En vätska strömmar i positiv x-riktning genom en lång, plan spalt med längd L, bredd W och höjd B, där

$$L \gg W \gg B$$

. Splaten har porösa väggar vid y=0 och y=B, så att ett konstant tvärflöde $v_y = v_0$ kan upprätthållas. Ställ, genom att stryka termer i den generella transportekvationen (se bilaga), upp en stationär modell för hastighetsfördelningen $v_x(y)$. Motivera!



2. (6p)
En ren vätska fryses på utsidan av ett rör enligt figur. Bulkvätskans temperatur T_f ligger på fryspunkten och insidan av röret kyls med en strömmande gas av temperaturen T_0. Ställ upp en modell för tillväxten av det frysta skiktet. Antag att T_0 är oberoende av axiell position.



3. (5p)
Etoxilering av nonylfenol kan göras i ett spraytorn där nonylfenol sprayas in som en vätska i ett torn med gasformig etenoxid (EO) vid 5 bar. Uppskatta hur mycket etenoxid som kan lösa sig i dropparna under deras fall till botten av tornet. Antag att reaktionshastigheten är långsam och att hela masstransportmotståndet ligger i vätskan. Gör en över- och en underskattning av mängden.

Löslighet	$K = 15 molEO/m^3 \cdot bar$
Droppstorlek	$d_p = 1mm$
Diffusiviteten	$D = 10^{-9} m^2/s$
Etenoxids viskositet vid 5 bar	$\nu = 5 \cdot 10^{-5} m^2/s$
Etenoxids densitet vid 5 bar	$\rho = 6kg/m^3$
Nonylfenols densitet	$\rho_n = 800kg/m^3$
Tornets höjd	D=8m

$$m\frac{dv}{dt} - mg + C_D A \frac{\rho v^2}{2} = 0$$

C_D kan uppskattas från 24/Re, där $Re = \dfrac{vd_p}{\nu}$ och droppens projicerade yta är $A = \dfrac{\pi d_p^2}{4}$.

4. (5p)
En bättre uppskattning i uppgift 3 kan fås om man löser transportekvationen i droppen. (I denna tentamen löses dock uppgifterna oberoende av varandra).

$$\frac{dC}{dt} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial C}{\partial r}\right) - kC$$

Beräkna med någon form av viktade residualer hur mycket som har transporterats in i droppen efter 10 sekunder.

Koncentration vid r=R	$75 mol/m^3$
Radien	$R = 0.5mm$
Diffusiviteten	$D = 10^{-9} m^2/s$
Hastighetskonstanten	$k = 0.1 s^-1$

5. (5p)
Acree och hans medarbetare har föreslagit följande samband för att beskriva lösligheten av ett ämne (A) i en blandning av två ämnen (B och C) vid en viss temperatur.

$$ln x_A^{sat} = x_B^0 ln(x_A^{sat})_B + (1 - x_B^0) ln(x_A^{sat})_C + x_B^0(1 - x_B^0)\sum_{i=0}^{N} S_i(x_B^0 - (1 - x_B^0))^i$$

Här avser x_B^0 den initiala molfraktionen av B; d.v.s. innan något av A löst sig. Beteckningen $(x_A^{sat})_i$ avser lösligheten av A i rent ämne B, medan x_A^{sat} avser lösligheten i blandningen av B och C. Modellen har N+1 parametrar; $S_0, S_1, \ldots, S_N$. Mätningar finns gjorda av pyrens (A) löslighet i en blandning av 1-butanol (B) och 2,2,4-trimetylpentan (C) vid 299.15 K.

x_b^0	x_A^{sat}
0.0000	0.00720 ("konstant" i modellen)
0.2001	0.00848
0.3122	0.00849
0.5407	0.00817
0.6409	0.00806
0.7307	0.00779
0.8823	0.00716
0.9334	0.00687
1.0000	0.00622 ("konstant" i modellen)

Observera att första och sista raden ger lösligheten i de rena ämnena, $(x_A^{sat})_C$ respektive $(x_A^{sat})_B$, för enkelhets skull anser vi dessa vara konstanter. Övriga mätpunkter använder vi till att bestämma modellens parametrar S. Vi gör nu en tvåparametersmodell (d.v.s. N=1) där vi låter x_A^{sat} vara beroende variabel, d.v.s. $y = x_A^{sat}$. Genom minimering av residualkvadratsumman bestämdes parametrar med mera till

S_0	0.9567
S_1	-0.1027
SS	$2.43 \cdot 10^{-7}$
$\mathbf{J}^T\mathbf{J}$	$\begin{bmatrix} 1.59 \cdot 10^{-5} & 6.50 \cdot 10^{-7} \\ 6.50 \cdot 10^{-7} & 2.32 \cdot 10^{-6} \end{bmatrix}$
$(J^TJ)^{-1}$	$\begin{bmatrix} 6.35 \cdot 10^{4} & -1.78 \cdot 10^{4} \\ -1.78 \cdot 10^{4} & 4.35 \cdot 10^{5} \end{bmatrix}$

Med modellen beräknade värden för dessa parametervärden finns givna i uppgift 6.

a) En modell av denna typ används ofta som en del i en större modell. Det är då viktigt att beta "hur bra" modellens predikation är. Undersök detta genom att uppskatta bredden på konfidensbandet(95%-igt) för y genom beräkning i minst två punkter, t.ex. x_B^0=0.2 och x_B^0=0.64. Jämför detta med den experimentella osäkerheten som har angivits till ca 1.5 %.
b) Beräkna ett 95%-igt konfidensintervall för parametrarna S_0 och S_1. Är modellen bra i detta avseende?
c) Undersök korrelationen mellan parametrarna. Är modellen bra i detta avseende?

Korrelationskoefficientmatrisen C beräknas enligt $C_{i.j} = \dfrac{D_{i,j}}{\sqrt{D_{i,i} \cdot D_{j,j}}}$, där $D = (J^TJ)^{-1}$. Se bilaga för övriga tabeller och formler.

6. (3p)

Undersök på lämpligt sätt om det finns anledning att antaga att modellen i uppgift 5 kan förbättras i något avseende, och i så fall hur. Till din hjälp finns följande värden beräknade.

x_B^0	x_A^{sat} beräknad med modell
0.2001	0.00823
0.3122	0.00852
0.5407	0.00842
0.6409	0.00812
0.7307	0.00774
0.8823	0.00693
0.9334	0.00663

1. Den generella transportekvationen för rörelsemängd i rektangulära koordinater är:

$$\rho\left(\cancelto{1}{\frac{\partial v_x}{\partial t}} + \cancelto{2}{v_x \frac{\partial v_x}{\partial x}} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + \cancelto{3}{v_z \frac{\partial v_x}{\partial z}}\right) =$$

$$= -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu\left(\cancelto{2}{\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2}} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \cancelto{3}{\frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2}}\right) + \cancelto{4}{\rho g_x}$$

1. Stationärt flöde.
2. Konstant hastighet i x-led.
3. Konstant hastighet i z-led.
4. Ingen gravitationskomponent i x-led.

$$\Rightarrow \quad \rho v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \mu \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} - \frac{\partial P}{\partial x} \quad , \quad \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\Delta P}{L}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} - \frac{\rho v_y}{\mu}\frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{1}{\mu}\frac{\Delta P}{L}}$$

▸ Homogen lösning : $\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} - \frac{\rho v_y}{\mu}\frac{\partial v_x}{\partial y} = 0$

Karakteristiskt polynom: $r^2 - \frac{\rho v_y}{\mu} r = 0$

$$\Rightarrow \quad r = \pm\sqrt{\frac{\rho v_y}{\mu}}$$

$$\Rightarrow \quad v_{x,h}(y) = C_1 e^{-\sqrt{\frac{\rho v_y}{\mu}}\,y} + C_2 e^{\sqrt{\frac{\rho v_y}{\mu}}\,y}$$

1. forts.

▶ Partikulärlösning:

BETA s. 202: $y'' + ay' = P(x)$

$$\Rightarrow \quad y_p(x) = \frac{1}{a}\left(\int P(x)\,dx - \frac{P(x)}{a} + \frac{P'(x)}{a^2} - \dots\right)$$

$$\Rightarrow \quad v_{x,p}(y) = -\frac{\mu}{\rho v_y}\left(\frac{1}{\mu}\frac{\Delta P}{L}\, y + \frac{1}{\mu}\frac{\Delta P}{L}\cdot\frac{\mu}{\rho v_y}\right)$$

<u>Svar</u>: $v_x(y) = C_1\, e^{-\sqrt{\frac{\rho v_y}{\mu}}\,y} + C_2\, e^{\sqrt{\frac{\rho v_y}{\mu}}\,y} - \frac{1}{\rho v_y}\left(\frac{\Delta P}{L}\, y + \frac{\Delta P}{L}\,\frac{\mu}{\rho v_y}\right)$

RVI: $v_x(y=0) = 0$ (no-slip)

RVII: $v_x(y=B) = 0$ (no-slip)

2. Värmebalans över ett cylindriskt skal mellan r och $r+\Delta r$ i isen:

$$qA|_r - qA|_{r+\Delta r} = \rho V c_p \frac{\partial T}{\partial t}$$

Volymen för skalet approximeras till $V \approx 2\pi r L \Delta r$

$$\Rightarrow qA|_r - qA|_{r+\Delta r} = \rho c_p \cdot 2\pi r \Delta r L \frac{\partial T}{\partial t}$$

Arean för värmeflödet är $A = 2\pi r L$

$$\Rightarrow q \cdot 2\pi r L|_r - q \cdot 2\pi r L|_{r+\Delta r} = \rho c_p \cdot 2\pi r \Delta r L \frac{\partial T}{\partial t}$$

Dela med $2\pi L \Delta r$, låt $\Delta r \to 0$

$$\Rightarrow -\frac{\partial}{\partial r}(qr) = \rho c_p r \frac{\partial T}{\partial t}$$

Fouriers lag: $q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial r}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r}\right) = \rho c_p r \frac{\partial T}{\partial t}}$$

Behöver 2 RV och ett BV!

BV: $R_s(t=0) = R_{so}$

RV I: VB över is-vätske-skiktet:

Ledning i isen = Isbildningsvärme

$$\Rightarrow qA\Delta t = \Delta H \cdot m = \Delta H \rho A R_s \quad [J]$$

Dela med $\Delta t \to 0 \Rightarrow -k \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{R_s} = \Delta H \rho \frac{\partial R_s}{\partial t}$

RV II: VB vid tubväggen:

Insida: $h(T - T_G) = k_v \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=R_i}$

Utsida: $k_v \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=R_o} = k_s \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=R_o}$

3. Vi ska ta reda på hur mycket EO som kan lösa sig i droppen under fallet.

- Ställ upp en massbalans av EO (A) över ett sfäriskt skal i droppen: Transient förlopp!

$$N_A \cdot A|_r - N_A \cdot A|_{r+\Delta r} = \frac{\partial n_A}{\partial t} = \Delta V \frac{\partial c_A}{\partial t}$$

Flödes area: $A = 4\pi r^2$

Skalvolym: $V = 4\pi r^2 \Delta r$

$$\Rightarrow \cancel{4\pi} r^2 N_A|_r - \cancel{4\pi} r^2 N_A|_{r+\Delta r} = \cancel{4\pi} r^2 \Delta r \frac{\partial c_A}{\partial t}$$

Dela med $\Delta r \rightarrow 0$

$$\Rightarrow -\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 N_A\right) = r^2 \frac{\partial c_A}{\partial t}$$

Ficks lag: $N_A = -D_{AB} \frac{\partial c_A}{\partial r}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 D_{AB} \frac{\partial c_A}{\partial r}\right) = r^2 \frac{\partial c_A}{\partial t}}$$

Behöver 2 RV och 1 BV

BV: $C_A(r, t=0) = 0$

RV I: $C_A(r=R, t) = 15 \cdot P$ mol/m³

RV II: $\left.\frac{\partial c_A}{\partial r}\right|_{r=0} = 0$ (symmetri)

3. forts.

- Överskattning: Antag att droppen mättas av EO

$$\Rightarrow C_{max} = K \cdot P = 15 \cdot 5 = 75 \text{ mol/m}^3$$

Droppvolym: $V = \dfrac{4\pi d_p^3}{3 \cdot 2^3} = 5{,}236 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3$

$$\Rightarrow n_A = C_{max} \cdot V = 3{,}927 \cdot 10^{-8} \text{ mol}$$

- Underskattning: Antag att droppen ej påverkas av formmotståndet (överskatta fallhastigheten) och antag en konstant koncentrationsprofil $\dfrac{\partial c_A}{\partial r} = \dfrac{\Delta c_A}{\Delta r} = \dfrac{c_A^*}{R}$

Falltid: $h = \cancel{v_0 \cdot t_f}^{\,v_0 = 0} + \dfrac{g t_f^2}{2}$

$$\Rightarrow t_f = \sqrt{\frac{2h}{g}} = 1{,}2765 \text{ s}$$

$$n_A = -N_A \cdot A \cdot \Delta t = D_{AB} \frac{\partial c_A}{\partial r} \cdot 4\pi R^2 \Delta t =$$

$$= D_{AB} \frac{c_A^*}{R} 4\pi R^2 \cdot t_f =$$

$$= 10^{-9} \cdot 75 \cdot 4\pi \cdot (0{,}5 \cdot 10^{-3}) \cdot 1{,}2765 \text{ s} =$$

$$= 6{,}0151 \cdot 10^{-10} \text{ mol}$$

Svar: Överskattning: $n_A = 3{,}927 \cdot 10^{-8}$ mol EO

Underskattning: $n_A = 6{,}015 \cdot 10^{-10}$ mol EO

4.

Transportekvationen $\frac{\partial c}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial c}{\partial r}\right) - kc$ kräver

två randvillkor och ett begynnelsevillkor:

RVI: $c_A(r=R, t) = c_R$

RVII: $\left.\frac{\partial c}{\partial r}\right|_{r=0} = 0$

BV: $c_A(r, t=0) = 0$

▶ Ansätt polynomet $P(r,t) = f(t)\,g(r)$

$f(t)$ avtar exponentiellt med t pga lia ord reaktion

$\Rightarrow f(t) = e^{-At}$

$g(r) = a + br + dr^2$

$\Rightarrow P(r,t) = e^{-At}(a + br + dr^2)$

▶ $P(r,t)$ uppfyller ej BV, ty $P(r,0) = 1 \cdot (a + br + dr^2)$

$\Rightarrow$ Sätt $f(t) = e^{-Bt} - 1$ för att BV ska uppfylles.

$\Rightarrow P(r,t) = (e^{-Bt} - 1)(a + br + dr^2)$

▶ Insättning av randvillkor:

RVII: $\left.\frac{\partial P}{\partial r}\right|_{r=0} = f(t)(b + 2d \cdot 0) = 0 \quad \Rightarrow b = 0$

$\Rightarrow P(r,t) = (e^{-Bt} - 1)(a + dr^2)$

RVI: $P(R,t) = (e^{-Bt} - 1)(a + dR^2) = c_r \quad \Rightarrow a = \frac{c_r}{e^{-Bt} - 1} - dR^2$

$\Rightarrow P(r,t) = (e^{-Bt} - 1)\left(\frac{c_r}{e^{-Bt} - 1} + d(r^2 - R^2)\right)$

4. forts

- 2 st kollokationspunkter behövs : $V = \frac{4}{3}\pi R^3$

Lämpliga punkter är $V_1 = \frac{1}{3} V = \frac{4}{9}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi r_1^3 \Rightarrow r_1 = R\,(1/3)^{1/3}$

och $V_2 = \frac{2}{3} V = \frac{8}{9}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi r_2^3 \Rightarrow r_2 = R\,(2/3)^{1/3}$

Residualen sätts till 0 vid $(r,t) = (R(1/3)^{1/3}, 5)$

och $(r,t) = (R(2/3)^{1/3}, 5)$. (5 s är halva tiden).

- $\text{Res}(r,t) = D\left(\frac{\partial^2 P}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial P}{\partial r}\right) - kP - \frac{\partial P}{\partial t}$

$$\frac{\partial P}{\partial r} = 2d\,(e^{-Bt}-1)\,r$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial r^2} = 2d\,(e^{-Bt}-1)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = d\,(r^2-R^2)(-B)e^{-Br}$$

$$\Rightarrow \text{Res}(r,t) = D\left(2d(e^{-Bt}-1) + \frac{2}{r}\cdot 2d\,(e^{-Bt}-1)r\right) -$$

$$- k\cdot(e^{-Bt}-1)\left(\frac{cr}{e^{-Bt}-1} + d(r^2-R^2)\right) + Bd(r^2-R^2)e^{-Bt}$$

I kollokationspunkterna r_1, r_2 är $\text{Res} = 0$.

$$\Rightarrow \text{Res}\left(R(1/3)^{1/3}, 5\right) = 0 \quad , \quad \text{Res}\left(R(2/3)^{1/3}, 5\right) = 0$$

∴ 2 ekvationer, 2 obekanta (B, d). Lös ekvationssystemet för att bestämma B, d. Sätt in dem i $P(r,t)$ för att beräkna $P(r=R, 10\,s)$.