TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051 (KAA050)

Lördag 2 juni 2007 kl 08.30-13.30 i V

Anders Rasmuson är anträffbar för frågor på telefonankn 2940 eller 27 36 06 och kommer att vara i tentamenslokalen någon gång mellan kl 10.00 och 11.00.

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 20 juni 2007.

Betygsgränser

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

Tillåtna hjälpmedel

Skrivdon och valfri räknedosa (nollställd)
TEFYMA-tabellen
Physics Handbook
Standard Mathematical Tables
BETA Mathematics Handbook samt
Handbook of Chemistry and Physics

1. Vid våtgranulering byggs aggregat upp från mindre partiklar genom tillsats av vätska som bindemedel. Det är av intresse att kunna modellera både storlek (massa m) och vätskeinnehåll (w) av aggregaten. Formulera en generell 1-D mikroskopisk populationsbalans där både masstillväxt (hastighet v1=dm/dt) och förändring av vätskeinnehåll (hastighet v2=dw/dt) inkluderas. Strömnings-hastigheten är u och nettoproduktionen är G.

(5p)

2. I en elektrisk ledning sker uppvärmning pga dissipation av elektrisk energi till värme. Det är då viktigt att temperaturen inte blir för hög. Ställ med skalbalans upp en <u>stationär</u> modell (inklusive randvillkor) för förloppet. Värmeutvecklingen ges av S (J/ m^3,s). Ledningen har cylindriskt tvärsnitt och omges av isolering. Yttre värmemotståndet kan <u>inte</u> försummas. Variationer längs tråden behöver inte beaktas (längd/diameter förhållandet är stort). Modellen behöver inte lösas. (5p)

Uppgift 3 5 poäng

Masstransport och reaktion för en andra ordningens reaktion i en isoterm sfärisk katalysatorpartikel kan skrivas

$$D_{eff}\left(\frac{d^2C}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dC}{dr}\right)-k_V C^2=0$$

med randvärdena

$$r^2\frac{dC}{dr}=0 \qquad \text{vid} \quad r=0$$

och

$$C=C_b \qquad \text{vid} \quad r=R$$

Beräkna C(r) med enpunkts kollokation. Beräkna sedan residualen i två punkter (ej kollokationspunkten eller på ränderna) och bedöm om lösningen är tillfredsställande.

Radien	$R = 5\cdot 10^{-3}$ m
Effektiv diffusivitet	$D_{eff} = 1\cdot 10^{-6}$ m^2/s
Bulk koncentration	$C_b = 1$ mol/m^3
Hastighetskonstant	k_V=0,2 m^3/mol,s

Uppgift 4 5 poäng

Ta fram ett kriterium för hur lång en reaktor behöver vara för att den axiella dispersionen skall kunna försummas i en tubreaktor som beskrivs av följande ekvation

$$D_{ea}\frac{d^2C}{dz^2}-v\frac{dC}{dz}-k\cdot C=0$$

Ange även förutsättningarna för att kriteriet skall gälla. Ger en försumning av termen en över- eller underskattning av koncentrationen ut vid z=L?
Ledning: Kriteriet skall innebära att den första termen i ekvationen skall vara mycket mindre än övriga termer.

Axiell koordinat, z m	Bäddlängd, L m
Axiell dispersion, D_{ea} m^2/s	Hastighet, v m/s
Reaktionskastighetskonstant, k s^{-1}	

Uppgift 5 (6 poäng)

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)	0,1299
b (parameter 2)	0,2138 kg/s
SS	0,00171
$\mathbf{J}^T\mathbf{J}$	21,2759 27,3280 27,3280 41,1683
$(\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1}$	0, 3190 -0,2117 -0,2117 0,1648

a) Är modellens parametrar signifikanta på 98% signifikansnivå?

b) För en linjär modell brukar konfidensbandet för prediktionen (dvs y) vara smalare mitt bland punkterna (vid medianen för x) än i utkanten av det undersökta intervallet. Undersök hur det förhåller sig i detta fall genom att beräkna bredden på konfidensbandet för x=0,4 (nära medianvärdet) och x=13 (nära högsta värdet). Använd 95% signifikansnivå.

c) $\left(\mathbf{J}^T\mathbf{J}\right)^{-1}_{1,2} / \sqrt{\left(\mathbf{J}^T\mathbf{J}\right)^{-1}_{1,1}\left(\mathbf{J}^T\mathbf{J}\right)^{-1}_{2,2}} = -0,92$. Använd denna information för att göra en principskiss (axlarna i figuren behöver inte graderas) på hur en konfidensyta med approximativ form ser ut för detta fall.

Se bilaga för tabeller och formler.

Uppgift 6 (4 poäng)

a) Den metod vi använt för att bestämma konfidensintervall mm i uppgift 5 förutsätter att variansen för y är någorlunda konstant. Undersök för det exemplet om denna förutsättning är uppfylld! Till din hjälp har du nedanstående tabell. Ge exempel på någon åtgärd man kan ta till om förutsättningen inte visar sig vara uppfylld.

x (kg/s)	y-modell (viktsandel)
0,265	0, 3624
0,291	0, 2847
0,323	0, 2344
0,366	0, 1965
0,434	0, 1635
0,606	0, 1264
1,31	0,0874
13,4	0,0504

b) Antag att vi för exemplet i uppgift 5 också gjort upprepade försök i några punkter, så att en lack-of-fit-analys kunnat göras. Vi fann då att värdet på testvariabeln $\frac{SS_L / \nu_L}{SS_e / \nu_e}$ blev mer än fyra gånger större än motsvarande värde från F-fördelningen, $F(\nu_L,\nu_e;\alpha)$. Vad innebär det och vad är då ett lämpligt nästa steg i modellbyggnadsprocessen för detta exempel.

c) Illustrera i en graf, med ”påhittade” data och en modell som kan beskrivas med en rät linje, de sträckor som motsvarar de skillnader som ingår i residualkvadratsumman respektive ”pure-error”-kvadratsumman.

Bilaga till tentamen i Matematisk modellering:

The maximum likelihood estimate of the parameters β, **b**, can be obtained as

$$\mathbf{b} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

The variance can be estimated as the residual mean square:

$$s^2 = \frac{SS(\mathbf{b})}{N-P}$$

A 1-α joint confidence region for β, i.e. accounting for the simultaneous variation of all the parameters is defined by

$$SS(\boldsymbol{\beta}) \le SS(\mathbf{b})\left[1+\frac{P}{N-P}\mathrm{F}(P,N-P,\alpha)\right]$$

which in the linear case can be proven to be the ellipsoid

$$(\boldsymbol{\beta}-\mathbf{b})^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}(\boldsymbol{\beta}-\mathbf{b}) \le Ps^2\,\mathrm{F}(P,N-P,\alpha)$$

where F(P,N-P;α) is the upper α quantile for the F distribution with P and N-P degrees of freedom. Note also that SS(**b**) is the minimum residual sum of squares.

A 1-α marginal confidence interval for the parameter β_p is

$$b_p \pm \mathrm{se}(b_p)\,\mathrm{t}(N-P,\alpha/2)$$

where t(N-P;α/2) is the upper α/2 quantile for the Student's *t*-distribution with N-P degrees of freedom and the standard error of the parameter estimator is

$$\mathrm{se}(b_p) = s\sqrt{\left\{\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\right\}_{pp}}$$

with $\{(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\}_{pp}$ equal to the pth diagonal term of the matrix $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$.

A 1-α confidence interval for the expected response at $\mathbf{x}_0$ is

$$\mathbf{x}_0^T\mathbf{b} \pm s\sqrt{\mathbf{x}_0^T\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{x}_0}\;\mathrm{t}(N-P,\alpha/2)$$

A 1-α confidence band for the response function at any **x** is

$$\mathbf{x}^T\mathbf{b} \pm s\sqrt{\mathbf{x}^T\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{x}}\sqrt{P\,\mathrm{F}(P,N-P,\alpha)}$$

The linear approximation can also be used to construct approximate confidence regions for the non-linear case. We can then use the same equations as for the non-linear case by replacing β by θ, **b** by θ*, **X** by **J***, $\mathbf{x}_0^T\mathbf{b}$ by $f(\mathbf{x}_0,\theta^*)$, and $\mathbf{x}_0$ by

$$\mathbf{j}_0 = \left.\frac{\partial f(\mathbf{x}_0,\theta)}{\partial\theta^T}\right|_{\theta^*}$$

PERCENTAGE POINTS, STUDENT'S t-DISTRIBUTION

This table gives values of t such that

$$F(t) = \int_{-\infty}^{t} \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\sqrt{n\pi}\,\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(1+\frac{x^2}{n}\right)^{-\frac{n+1}{2}} dx$$

for n, the number of degrees of freedom, equal to 1, 2, . . . , 30, 40, 60, 120, ∞; and for $F(t) = 0.60$, 0.75, 0.90, 0.95, 0.975, 0.99, 0.995, and 0.9995. The t-distribution is symmetrical, so that $F(-t) = 1 - F(t)$

n \ F	.60	.75	.90	.95	.975	.99	.995	.9995
1	.325	1.000	3.078	6.314	12.706	31.821	63.657	636.619
2	.289	.816	1.886	2.920	4.303	6.965	9.925	31.598
3	.277	.765	1.638	2.353	3.182	4.541	5.841	12.924
4	.271	.741	1.533	2.132	2.776	3.747	4.604	8.610
5	.267	.727	1.476	2.015	2.571	3.365	4.032	6.869
6	.265	.718	1.440	1.943	2.447	3.143	3.707	5.959
7	.263	.711	1.415	1.895	2.365	2.998	3.499	5.408
8	.262	.706	1.397	1.860	2.306	2.896	3.355	5.041
9	.261	.703	1.383	1.833	2.262	2.821	3.250	4.781
10	.260	.700	1.372	1.812	2.228	2.764	3.169	4.587
11	.260	.697	1.363	1.796	2.201	2.718	3.106	4.437
12	.259	.695	1.356	1.782	2.179	2.681	3.055	4.318
13	.259	.694	1.350	1.771	2.160	2.650	3.012	4.221
14	.258	.692	1.345	1.761	2.145	2.624	2.977	4.140
15	.258	.691	1.341	1.753	2.131	2.602	2.947	4.073
16	.258	.690	1.337	1.746	2.120	2.583	2.921	4.015
17	.257	.689	1.333	1.740	2.110	2.567	2.898	3.965
18	.257	.688	1.330	1.734	2.101	2.552	2.878	3.922
19	.257	.688	1.328	1.729	2.093	2.539	2.861	3.883
20	.257	.687	1.325	1.725	2.086	2.528	2.845	3.850
21	.257	.686	1.323	1.721	2.080	2.518	2.831	3.819
22	.256	.686	1.321	1.717	2.074	2.508	2.819	3.792
23	.256	.685	1.319	1.714	2.069	2.500	2.807	3.767
24	.256	.685	1.318	1.711	2.064	2.492	2.797	3.745
25	.256	.684	1.316	1.708	2.060	2.485	2.787	3.725
26	.256	.684	1.315	1.706	2.056	2.479	2.779	3.707
27	.256	.684	1.314	1.703	2.052	2.473	2.771	3.690
28	.256	.683	1.313	1.701	2.048	2.467	2.763	3.674
29	.256	.683	1.311	1.699	2.045	2.462	2.756	3.659
30	.256	.683	1.310	1.697	2.042	2.457	2.750	3.646
40	.255	.681	1.303	1.684	2.021	2.423	2.704	3.551
60	.254	.679	1.296	1.671	2.000	2.390	2.660	3.460
120	.254	.677	1.289	1.658	1.980	2.358	2.617	3.373
∞	.253	.674	1.282	1.645	1.960	2.326	2.576	3.291

* This table is abridged from the "Statistical Tables" of R. A. Fisher and Frank Yates published by Oliver & Boyd, Ltd., Edinburgh and London, 1938. It is here published with the kind permission of the authors and their publishers.

PERCENTAGE POINTS, F-DISTRIBUTION (Continued)

$$F(F) = \int_0^F \frac{\Gamma\left(\frac{m+n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} m^{\frac{m}{2}} n^{\frac{n}{2}} x^{\frac{m}{2}-1} (n+mx)^{-\frac{m+n}{2}}\, dx = .95$$

n \ m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	20	24	30	40	60	120	∞
1	161.4	199.5	215.7	224.6	230.2	234.0	236.8	238.9	240.5	241.9	243.9	245.9	248.0	249.1	250.1	251.1	252.2	253.3	254.3
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.35	19.37	19.38	19.40	19.41	19.43	19.45	19.45	19.46	19.47	19.48	19.49	19.50
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.81	8.79	8.74	8.70	8.66	8.64	8.62	8.59	8.57	8.55	8.53
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00	5.96	5.91	5.86	5.80	5.77	5.75	5.72	5.69	5.66	5.63
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77	4.74	4.68	4.62	4.56	4.53	4.50	4.46	4.43	4.40	4.36
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.10	4.06	4.00	3.94	3.87	3.84	3.81	3.77	3.74	3.70	3.67
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.68	3.64	3.57	3.51	3.44	3.41	3.38	3.34	3.30	3.27	3.23
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.39	3.35	3.28	3.22	3.15	3.12	3.08	3.04	3.01	2.97	2.93
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.29	3.23	3.18	3.14	3.07	3.01	2.94	2.90	2.86	2.83	2.79	2.75	2.71
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	3.02	2.98	2.91	2.85	2.77	2.74	2.70	2.66	2.62	2.58	2.54
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	3.01	2.95	2.90	2.85	2.79	2.72	2.65	2.61	2.57	2.53	2.49	2.45	2.40
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.91	2.85	2.80	2.75	2.69	2.62	2.54	2.51	2.47	2.43	2.38	2.34	2.30
13	4.67	3.81	3.41	3.18	3.03	2.92	2.83	2.77	2.71	2.67	2.60	2.53	2.46	2.42	2.38	2.34	2.30	2.25	2.21
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.76	2.70	2.65	2.60	2.53	2.46	2.39	2.35	2.31	2.27	2.22	2.18	2.13
15	4.54	3.68	3.29	3.06	2.90	2.79	2.71	2.64	2.59	2.54	2.48	2.40	2.33	2.29	2.25	2.20	2.16	2.11	2.07
16	4.49	3.63	3.24	3.01	2.85	2.74	2.66	2.59	2.54	2.49	2.42	2.35	2.28	2.24	2.19	2.15	2.11	2.06	2.01
17	4.45	3.59	3.20	2.96	2.81	2.70	2.61	2.55	2.49	2.45	2.38	2.31	2.23	2.19	2.15	2.10	2.06	2.01	1.96
18	4.41	3.55	3.16	2.93	2.77	2.66	2.58	2.51	2.46	2.41	2.34	2.27	2.19	2.15	2.11	2.06	2.02	1.97	1.92
19	4.38	3.52	3.13	2.90	2.74	2.63	2.54	2.48	2.42	2.38	2.31	2.23	2.16	2.11	2.07	2.03	1.98	1.93	1.88
20	4.35	3.49	3.10	2.87	2.71	2.60	2.51	2.45	2.39	2.35	2.28	2.20	2.12	2.08	2.04	1.99	1.95	1.90	1.84
21	4.32	3.47	3.07	2.84	2.68	2.57	2.49	2.42	2.37	2.32	2.25	2.18	2.10	2.05	2.01	1.96	1.92	1.87	1.81
22	4.30	3.44	3.05	2.82	2.66	2.55	2.46	2.40	2.34	2.30	2.23	2.15	2.07	2.03	1.98	1.94	1.89	1.84	1.78
23	4.28	3.42	3.03	2.80	2.64	2.53	2.44	2.37	2.32	2.27	2.20	2.13	2.05	2.01	1.96	1.91	1.86	1.81	1.76
24	4.26	3.40	3.01	2.78	2.62	2.51	2.42	2.36	2.30	2.25	2.18	2.11	2.03	1.98	1.94	1.89	1.84	1.79	1.73
25	4.24	3.39	2.99	2.76	2.60	2.49	2.40	2.34	2.28	2.24	2.16	2.09	2.01	1.96	1.92	1.87	1.82	1.77	1.71
26	4.23	3.37	2.98	2.74	2.59	2.47	2.39	2.32	2.27	2.22	2.15	2.07	1.99	1.95	1.90	1.85	1.80	1.75	1.69
27	4.21	3.35	2.96	2.73	2.57	2.46	2.37	2.31	2.25	2.20	2.13	2.06	1.97	1.93	1.88	1.84	1.79	1.73	1.67
28	4.20	3.34	2.95	2.71	2.56	2.45	2.36	2.29	2.24	2.19	2.12	2.04	1.96	1.91	1.87	1.82	1.77	1.71	1.65
29	4.18	3.33	2.93	2.70	2.55	2.43	2.35	2.28	2.22	2.18	2.10	2.03	1.94	1.90	1.85	1.81	1.75	1.70	1.64
30	4.17	3.32	2.92	2.69	2.53	2.42	2.33	2.27	2.21	2.16	2.09	2.01	1.93	1.89	1.84	1.79	1.74	1.68	1.62
40	4.08	3.23	2.84	2.61	2.45	2.34	2.25	2.18	2.12	2.08	2.00	1.92	1.84	1.79	1.74	1.69	1.64	1.58	1.51
60	4.00	3.15	2.76	2.53	2.37	2.25	2.17	2.10	2.04	1.99	1.92	1.84	1.75	1.70	1.65	1.59	1.53	1.47	1.39
120	3.92	3.07	2.68	2.45	2.29	2.17	2.09	2.02	1.96	1.91	1.83	1.75	1.66	1.61	1.55	1.50	1.43	1.35	1.25
∞	3.84	3.00	2.60	2.37	2.21	2.10	2.01	1.94	1.88	1.83	1.75	1.67	1.57	1.52	1.46	1.39	1.32	1.22	1.00

$F = \frac{s_1^2}{s_2^2} = \frac{S_1}{m} \Big/ \frac{S_2}{n}$, where $s_1^2 = S_1/m$ and $s_2^2 = S_2/n$ are independent mean squares estimating a common variance σ^2 and based on m and n degrees of freedom, respectively.