TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051 (KAA050)

Onsdag 16 januari 2008 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 5 februari 2008.

Betygsgränser

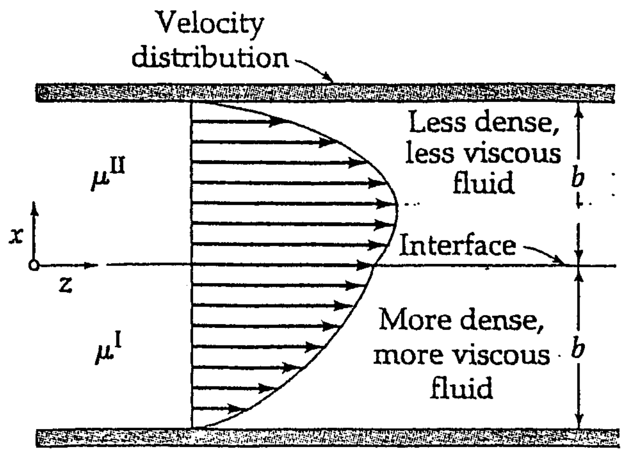
Poäng:	0-14	15-19	20-24	25-
Betyg:	U	3	4	5

Tillåtna hjälpmedel

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

1. Två icke blandbara vätskor strömmar laminärt mellan två horisontella plattor enligt Figur. Ställ med hjälp av skalbalans (dvs. ej genom förenkling av NS ekvation) upp en modell (inklusive randvillkor) för hastighetsprofilen i spalten under stationära förhållanden. Strömningen är fullt utbildad och änd-effekter kan försummas. Modellen ska ej lösas!

Ledning: I fas-gränsytan mellan vätskorna är hastighet och rörelsemängds-flüx kontinuerliga. (5p)



2. Förvintern 1657 står svenska hären med Karl X i spetsen på Jylland och funderar på att anfalla Dansken som slagit vinterläger på Själland. Problemet är att isen över Bälten som skiljer Jylland från Själland är för tunn. Isen växer dock snabbt eftersom det är kallt och ingen snö ligger på isen och isolerar. Ställ upp en matematisk modell för istillväxten, med följande antaganden:

vindhastigheten över isen är konstant
temperaturen hos omgivande luft är konstant och lägre än fryspunkten
värmeledningen i isen är snabb i förhållande till istillväxten
vattnet är nollgradigt och väl omblandat
strålning kan försummas
isens ursprungstjocklek är z_0

Motivera! (5p)

Uppgift 3 (5 poäng)

Materialbalansen för en kemisk reaktion som körs i en packad bädd kan skrivas

$$D_{ea}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v\frac{\partial C}{\partial z} - kC^2 = 0$$

Gör en grov skattning av derivatorna och avgör om man kan förenkla lösningen av ekvationen. Lös sedan dem förenklade ekvationen och kolla om approximationerna var OK. Diskutera om man genom att lösa den förenklade ekvationen kan verifiera att man kan få en korrekt lösning.

Inflödeskoncentration	Cin	= 1000 mol/m^3
Utflöde	$\frac{dC}{dz}$	=0 mol/m^4
Reaktorns längd	L	= 2 m
Dispersion	D_{ea}	= $2\cdot10^{-3}$ m^2/s
Flödeshastighet	v	= 0,2 m/s
Hastighetskonstant	k	= $8 \cdot 10^{-4}$ s^{-1}
Koncentration	C	
Längd	z	

Uppgift 4 (5 poäng)

Lös ekvationen i uppgift 3 med 2-punktskollokation. Motivera valet av funktion och kollokationspunkter. Uppskatta residualen i två inre punkter (ej kollokationspunkterna) och bedöm om resultatet är tillfredsställande.

Uppgift 5 (4 poäng)

Vid mätningar på värmeväxlare är det ofta så att det enbart går att mäta flöden samt in- och utgående temperaturer. Det gör det möjligt att bestämma det totala värmeövergångstalet U. Utan mätning av väggtemperaturen går det däremot inte att direkt från mätningar bestämma värmeövergångstalen för de båda sidorna. För dimensionering av värmeväxlare för andra förhållanden än de vid mätningarna är det dock önskvärt att kunna modellera båda sidorna var för sig. Genom att göra vissa antaganden om värmeöverföringens flödesberoende och göra mätningar vid olika flöden är detta möjligt. Ett exempel på detta ges här.

Värmeväxlaren består av ett inre och ett yttre rör. Mediet som skall värmas går i det inre röret, medan det värmande mediet går i motström i spalten mellan ytter- och innerrör. Båda medierna är vätskeformiga. Två försöksserier genomfördes där flödet och medeltemperaturen i ytterspalten hölls konstant medan flödet (här givet som Reynolds tal, Re) på insidan varierades. Följande resultat erhölls:

Re	U – serie 1 W/m^2 K	U - serie 2 W/m^2 K
13000	403	412
18000	505	518
23000	609	614
28000	723	697
33000	778	743

Sambandet mellan U, refererad till innerrörets ytteryta, insidans värmeövergångstal α_i och utsidans α_o ges som bekant av

$$U = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_o} + R_{tub} + \frac{A_o}{A_i \alpha_i}}$$

Om vi nu antar att flödesberoendet kan beskrivas som $\alpha_i = k\,(\mathrm{Re})^{0,8}$, så kan, eftersom förhållandena på utsidan hållits konstanta, och efter sammanslagning av konstanter, följande modell användas för utvärdering av resultaten:

$$U = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_{o+w}} + \frac{1}{\alpha_{ref}\,\mathrm{Re}^{0,8}}}$$

Genom minimering av residualkvadratsumman bestämdes parametrarna till α_{ref} (parameter 1) = 0,236 W/(m^2 K) och α_{o+w} (parameter 2) = 3744 W/(m^2 K). Residualkvadratsumman SS blev 1903 (W/(m^2 K))^2 och

$$(\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1} = \begin{matrix} 6{,}564\cdot 10^{-7} & -0{,}055 \\ -0{,}055 & 4736 \end{matrix}$$

a) Bestäm 95% individuella konfidensintervall för parametrarna!

b) Beräkna korrelationskoefficienten mellan parametrarna och beskriv vad det erhållna värdet innebär för utseendet av parametrarnas konfidensyta och för längden på parametrarnas individuella konfidensintervall.

Ledning:

Korrelationssmatrisen **C** definieras som

$$C_{ij} = \{(\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1}\}_{ij} / [\{(\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1}\}_{ii} \{(\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1}\}_{jj}]^{0.5}$$

Se bilaga för tabeller och övriga formler.

Uppgift 6 (6 poäng)

Med de parametervärden som angetts i uppgift 5 så blir de med modellen beräknade värdena

Re	U – beräknat W/m^2 K
13000	411
18000	516
23000	610
28000	694
33000	772

a) Undersök modellen i uppgift 5 med hjälp av residualanalys. Finns det anledning att anta att modellen kan förbättras och i så fall hur?

b) Visa att modellen i uppgift 5 är ”transformerbart linjär”, dvs. att det genom transformationer går att uttrycka sambandet på formen y = a + bx. Det ingår att visa hur a och b är relaterade till parametrarna i modellen i uppgift 5.

c) Ange två metoder för hur man (i princip) kan göra för att avgöra vilken modellformulering (den i uppgift 5 eller den i 6b) som bäst uppfyller förutsättningen ”konstant varians”. Ange vilken eller vilka som går att använda med det data som är givna här.

d) Är det möjligt att genomföra en Lack-of-fit-analys av modellen i uppgift 5 med de data som är givna, eller behövs något mera och i så fall vad? Motivera!

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.