TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051 (KAA050)

Lördag 31 maj 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 19 juni 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. Den generella mikroskopiska populationsbalansen kan skrivas:

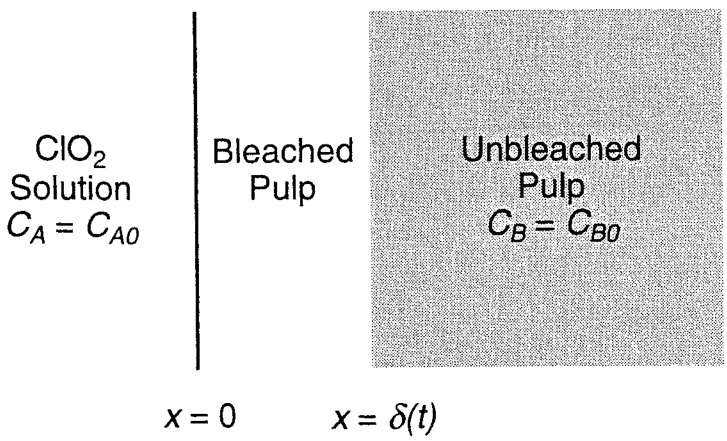
$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial (f v_i)}{\partial p_i} - \nabla \cdot (f\mathbf{u}) + G$$

Ge fysikalisk betydelse för samtliga termer! (4p)

2. Klordioxid (ClO_2) används vid blekning av vattensuspensioner av pappersmassa. ClO_2 reagerar snabbt och irreversibelt med ligninet i massan, som utgör ungefär 5%; resterande del av massan (framförallt cellulosa) är inert map ClO_2. Förutom reaktionen med lignin sker en långsam spontan sönderdelning av ClO_2.

En förenklad bild av processen visas i Figur. Gränsytan mellan ClO_2-lösning och massan ligger vid x=0, och tjockleken av denna kan antas "oändlig". Om vi antar att reaktionen mellan ClO_2 och lignin är "oändligt" snabb bildas en skarp gräns mellan blekt och oblekt massa (x = δ(t)). Koncentrationen av ClO_2 vid x=0 är konstant C_{A0} och den oblekta lignin-koncentrationen är C_{B0}. Ligninet ingår i fiberstrukturen och kan därför betraktas som immobil. Antag att sönderdelningen av ClO_2 sker enligt första ordningens homogen reaktion.

Ställ upp en matematisk modell för blekningsförloppet! (6p)



Uppgift 3 (5 poäng)

A oxideras över ädelmetallkatalysatorer till B. Nedan är reaktionshastigheten för detta:

$$r_A = k_A c_A^2 c_{O2}$$

En sfärisk katalysator med radie, R=5mm används. Materialbalansen är:

$$D_{eff}\left(\frac{d^2C_A}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dC_A}{dr}\right) - r_A = 0$$

a) Använd Galerkins metod för att lösa koncentrationen A som funktion av radien (r). Motivera val av polynom.

b) Använd Galerkins metod med ett högre ordningens polynom än vad som användes i a) för att lösa koncentrationen A som funktion av radien (r)

Motivera val av polynom och randvillkor. Alla nya införda beteckningar skall förklaras.

OBS! För full poäng krävs EJ att ekvationerna löses, men alla ekvationer skall finnas och lösningsmetod beskrivas i detalj. Om integraler uppstår skall dessa integreras. Detta gäller både a) och b).

Uppgift 4 (5 poäng)

CO och HC oxideras över en bilavgaskatalysator (en cylinder). Det är mycket exoterma reaktioner. Katalysatorn deaktiveras också termiskt efter lång tid. Reaktionshastigheterna är

$$r_{CO} = \frac{k_1 c_{CO} c_{O2}}{\left(1 + K_1 c_{CO} + K_2 c_{HC}\right)^2}$$

$$r_{HC} = \frac{k_2 c_{HC} c_{O2}}{\left(1 + K_3 c_{CO} + K_4 c_{HC}\right)^2}$$

En metod att modellera detta är att simulera allt i minsta detalj, vilket är mycket tidskrävande. Det finns olika metoder för att förenkla detta problem. Diskutera olika möjligheter för förenklingar och ange när förenklingarna är giltliga (1p för varje metod). Varje metod skall förklaras noggrant.

Uppgift 5 (7 poäng)

Vatten rinner som en film ner för utsidan av ett vertikalt rör. Vi vill nu göra en modell på dimensionslös form för hur filmens medeltjocklek beror av flödeshastigheten. Flödeshastigheten karaktäriseras i modellen med hjälp av Reynoldstalet Re och filmtjockleken med den dimensionslösa filmtjockleken δ^*.

Följande mätresultat erhölls:

Re	T C	δ^*
4943	23	22,76
5517	27	20,71
9310	23	30,35
10287	27	28,77
12414	23	39,03
12414	27	35,67
17241	27	41,43
17356	23	48,78
19195	27	50,63

En vanlig typ av modell för filmtjocklek är

$$\delta^* = \theta_1 Re^{\theta_2}$$

Genom minimering av residualkvadratsumman bestämdes parametrarna till $\theta_1 = 0{,}0708$ och $\theta_2 = 0{,}663$. Residualkvadratsumman SS blev 57,28 och

$$(\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1} = \begin{array}{cc} 0{,}0002953 & -0{,}0004373 \\ -0{,}0004373 & 0{,}0006486 \end{array}$$

$$\mathbf{J}^T\mathbf{J} = \begin{array}{cc} 2{,}415E6 & 1{,}6284E6 \\ 1{,}6284E6 & 1{,}0996E6 \end{array}$$

Tidigare undersökningar har kommit fram till andra parametervärden. Brötz föreslår p1 $\theta_1=0{,}068$ och p2 $\theta_1=2/3$, medan Brauer föreslår p1 $\theta_1=0{,}208$ och p2 $\theta_1=8/15$. För våra mätvärden blir residualkvadratsumman med Brötz parametrar 57,72 och med Brauers parametrar 332,82.

a) Ligger Brötz och Brauers parametervärden innanför individuella 95%-iga konfidensintervall för våra parametrar?

b) Ligger Brötz och Brauers parametervärden innanför ett sammansatt 95%-igt konfidensområde med korrekt form för våra parametrar?

Fortsätter nästa sida !

c) Ligger Brötz och Brauers parametervärden innanför ett sammansatt 95%-igt konfidensområde med korrekt konfidensgrad för våra parametrar?

d) Bestäm korrelationen mellan våra parametrar. Förklara vad det erhållna värdet innebär för formen av konfidensområdet i föregående deluppgift (c).

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 (3 poäng)

Med våra parametrar och modellen i uppgift 5 fås följande beräknade värden för filmtjockleken:

Re	T C	δ^* beräknade med modell
4943	23	19,92
5517	27	21,43
9310	23	30,31
10287	27	32,38
12414	23	36,68
12414	27	36,68
17241	27	45,61
17356	23	45,82
19195	27	48,98

Undersök på lämpligt sätt modellen i uppgift 5

a) Kan variansen anses konstant?
b) Finns det anledning att anta att modellen kan förbättras och i så fall hur?

Bilaga till tentamen i Matematisk modellering:

The maximum likelihood estimate of the parameters β, $\mathbf{b}$, 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

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

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

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

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 $\mathbf{x}$ 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, $\mathbf{b}$ by θ^*, $\mathbf{X}$ by $\mathbf{J}^*$, $\mathbf{x}_0^T\mathbf{b}$ by $\mathrm{f}(\mathbf{x}_0,\theta^*)$, and $\mathbf{x}_0$ by

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

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.