

TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051 (KAA050)

Onsdag 14 januari 2009 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 3 februari 2009.

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. Härled en mikroskopisk populationsbalans för cell-tillväxt i en 1-D plugg flödes reaktor (Fig. 1). Cellerna karakteriseras vid tiden t av läge x och massa m . Celltillväxten $v = dm/dt$, hastigheten u och nettogenereringen G antas givna.

(5p)

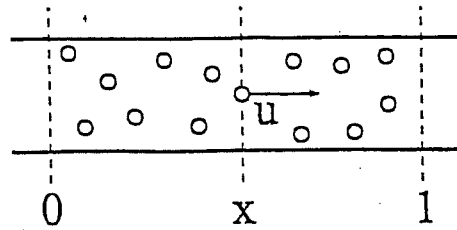


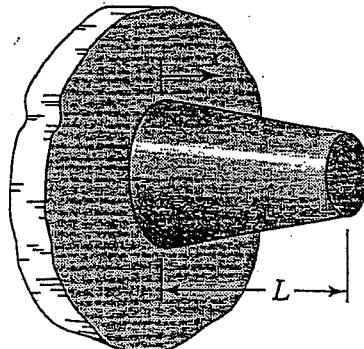
Fig. 1

2. För att öka kylningen av en varm maskindel fastsätts flänsar i form av avsmalnande metallstavar (se Fig. 2). Ställ, med hjälp av skalbalans, upp en stationär modell för värmetransporten i en stav. Väggtemperaturen är T_0 och omgivningens temperatur är T_∞ . Radiella temperaturvariationer i staven kan försummas och konvektiva värmeöverföringskoefficienten, h , är given.

Tvärsnittsytan A och omkretsen P varierar med avståndet från väggen enligt:

$$A = A(x)$$

$$P = P(x)$$



(5p)

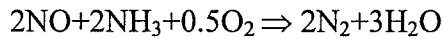
Fig. 2

Uppgift 3

(5 poäng)

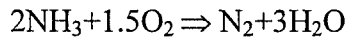
NO är en mycket giftig förening som bildas vid förbränning från fordon och stationära anläggningar. Denna kan reduceras genom att tillsätta ammoniak.

Reaktionen och dess hastighet beskrivs av



$$r_{\text{SCR}} = k \cdot C_{\text{NO}} \cdot C_{\text{NH}_3}$$

En del NH_3 oxideras också med O_2 enligt:



$$r_{\text{NH}_3, \text{ox}} = k \cdot C_{\text{O}_2} \cdot C_{\text{NH}_3}$$

Där O_2 halten är så hög att den kan betraktas som konstant.

Katalysatorn är belagd på kanalerna av en monolit och materialbalansen för komponent i kan beskrivas enligt:

$$D_{ea} \frac{d^2 C_i}{dz^2} - v \frac{dC_i}{dz} + \sum v_i r = 0 \quad (1)$$

där C är koncentrationen (mol/m^3), z är längden (m), v är flödes hastigheten (m/s), D_{ea} är axiell dispersions koefficient (m^2/s), r reaktionshastigheten ($\text{mol}/(\text{s m}^3)$), v stökiometrisk koefficient. Vid katalysatorns utlopp kan koncentrationsändringen av NO och NH_3 antas vara mycket liten.

- Använd valfri viktad residual för att lösa koncentrationen av NO och NH_3 som funktion av längden, z , i en ideal tubreaktor. Ekvationerna behöver ej lösas, men alla ekvationer, parametrar, randvillkor, etc. skall noggrant motiveras. Lösningsgången skall beskrivas i detalj.
- Beskriv hur du använder residualanalys för att undersöka tillförlitligheten i din approximation.

Uppgift 4

(5 poäng)

- a) När en kropp faller i luft kan dess rörelse beskrivas av

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

Denna ekvation kan lösas för 2 begränsande fall. Beskriv dessa och visa grafiskt principen.

- b) Koncentrationen i en tubreaktor med axiell dispersion kan beskrivas med följande ekvation:

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

Linjärisering är en metod för att förenkla lösningen för denna ekvation. Beskriv hur du linjäriserar ekvationen ovan.

- c) Beskriv ytterligare en metod (valfri) för att förenkla matematiska modeller.

Uppgift 5 (5 poäng)

Hastigheten r för reaktionen när 2-etylhexenal (ämne A) hydreras till 2-etylhexanal (ämne B) undersöktes för några olika koncentrationer och temperaturer med följande experimentella resultat:

Försök nr	p_A	p_B	p_{H_2}	T	r
1	1,4	2,8	88,2	379,7	126
2	2,9	5,0	188,8	379,8	246
3	7,3	5,5	24,1	379,5	362
4	1,0	2,2	87,7	404,9	126
5	7,6	7,1	22,0	404,8	477
6	2,4	6,3	80,6	404,7	234
7	1,7	3,0	118,0	429,5	252
8	3,5	6,4	115,7	429,4	348
9	5,4	6,7	59,6	429,4	587

Som ett första steg i arbetet med att modellera reaktionen undersöktes modellen

$$r = a \exp\left(b\left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T}\right)\right) p_A^c$$

Här är p_A partialtrycket av A och T_{ref} är en referenstemperatur med värdet 400 K. Genom minimering av residualkvadratsumman $SS = \sum (r_{modell} - r_{experiment})^2$ för ovanstående data bestämdes parametrarna a , b , och c samt SS mm till

a (parameter 1)	128,2		
b (parameter 2)	1871		
c (parameter 3)	0,652		
SS	9118		
$\mathbf{J^T J}$	62,37	0,5521	$1,24 \cdot 10^4$
	0,5521	0,0185	96,18
	$1,24 \cdot 10^4$	96,18	$2,746 \cdot 10^6$
$(\mathbf{J^T J})^{-1}$	0,1903	-1,475	$-8,09 \cdot 10^{-4}$
	-1,475	77,735	0,0040
	$-8,09 \cdot 10^{-4}$	0,0040	$3,887 \cdot 10^{-6}$

- En annan undersökning av reaktionshastigheten har kommit fram till värdet 1215 för b och 0,87 för c . Går det att säga att dessa värden skiljer sig signifikant från de som anges ovan? Använd 95%-iga individuella konfidensintervall vid undersökningen.
- Införandet av en referenstemperatur (T_{ref}) i modellen har gjorts för att minska korrelationen mellan parametrarna a och b (utan den blev korrelationskoefficienten 0,99). Har det lyckats? Vad innebär det tidigare och det nuvarande värdet? Illustrera gärna grafiskt.
- Hur säker är modellens prediktion av reaktionshastigheten? Beräkna ett 95% konfidensintervall för r i den sista försökspunkten (punkt 9). Med modellen beräknat värde på r finns i tabell i uppgift 6.

Ledning:

Korrelationskoefficientmatrisen C beräknas enligt

$$C_{i,j} = \frac{D_{ij}}{\sqrt{D_{i,i} \cdot D_{j,j}}}, \text{ där } \mathbf{D} = (\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1}$$

Se bilaga för övriga tabeller och formler.

Uppgift 6 (5 poäng)

- a) Med de parametervärden som anges i uppgift 5 blir den med modellen beräknade reaktionshastigheten

Försök nr	r (beräknad med modell)
1	124
2	200
3	364
4	136
5	508
6	240
7	250
8	400
9	530

Undersök på lämpligt sätt om det finns anledning att anta att modellen i uppgift 5, med de genom kvadratsumminimering bestämda parametrarna, kan förbättras på något sätt. Föreslå, med undersökningen som grund, ett lämpligt nästa steg i modelleringsprocessen.

- b) Beskriv hur (i princip) en lack-of-fit-analys går till. Inkludera

- En kort beskrivning av hur försöksdata måste se ut för att det skall gå att göra en analys
- en graf, med ”påhittade” data och en modell som kan beskrivas med en rät linje. Visa de sträckor som motsvarar de skillnader som ingår i residualkvadratsumman respektive ”pure-error”-kvadratsumman.
- En beskrivning av innebörden av att värdet av testvariabeln $\frac{SS_L/v_L}{SS_e/v_e}$ blir (mer än fyra gånger) större än motsvarande värde från F-fördelningen, $F(v_L, v_e; \alpha)$.

Bilaga till tentamen i Matematisk modellering:

The maximum likelihood estimate of the parameters β , \mathbf{b} , can be obtained as

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

The variance can be estimated as the residual mean square:

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

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

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

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

$$(\beta - \mathbf{b})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\beta - \mathbf{b}) \leq P s^2 F(P, N-P, \alpha)$$

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

A $1-\alpha$ marginal confidence interval for the parameter β_p is

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

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

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

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

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

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

A $1-\alpha$ confidence band for the response function at any \mathbf{x} is

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

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 $f(\mathbf{x}_0, \theta^*)$, 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*)

<i>n</i> \ <i>F</i>	.50	.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, 1933. It is here published with the kind permission of the authors and their publishers.

F-Distribution

PERCENTAGE POINTS, F-DISTRIBUTION (Continued)

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

m \ n	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	236.5	238.0	240.5	241.9	243.9	245.9	248.0	249.1	250.1	251.1	252.2	253.3	254.8
2	18.31	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	6.01	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77	4.74	4.68	4.63	4.56	4.53	4.50	4.46	4.43	4.40	4.36
6	5.00	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	4.74	4.74	4.36	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	4.52	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	4.32	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	2.76	2.71
10	4.10	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	2.91	2.85	2.80	2.75	2.68	2.62	2.54	2.51	2.47	2.43	2.38	2.34	2.30
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.09	2.98	2.80	2.74	2.69	2.64	2.57	2.51	2.43	2.40	2.36	2.32	2.27	2.23	2.19
13	4.67	3.81	3.41	3.18	3.03	2.92	2.74	2.68	2.63	2.58	2.51	2.45	2.37	2.34	2.30	2.26	2.21	2.17	2.13
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.67	2.61	2.56	2.50	2.43	2.37	2.29	2.26	2.22	2.18	2.13	2.09	2.05
15	4.54	3.68	3.28	3.05	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	3.23	3.01	2.85	2.74	2.66	2.59	2.54	2.49	2.42	2.35	2.28	2.24	2.20	2.15	2.10	2.06	2.01
17	4.45	3.59	3.20	2.97	2.81	2.70	2.62	2.55	2.50	2.45	2.38	2.31	2.24	2.20	2.16	2.11	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	2.20	2.16	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	2.37	2.30	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	2.34	2.28	2.20	2.13	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	2.48	2.42	2.36	2.31	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	2.29	2.23	2.16	2.08	2.03	1.99	1.94	1.90	1.85	1.78
23	4.28	3.42	3.03	2.80	2.64	2.53	2.44	2.37	2.32	2.27	2.21	2.13	2.05	2.00	1.96	1.91	1.86	1.81	1.75
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	2.23	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	2.38	2.32	2.26	2.21	2.14	2.07	1.99	1.94	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	1.98	1.93	1.89	1.84	1.79	1.74	1.68
28	4.20	3.34	2.95	2.71	2.56	2.45	2.36	2.30	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	2.34	2.28	2.22	2.17	2.10	2.03	1.94	1.90	1.85	1.81	1.76	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	4.09	3.23	2.84	2.61	2.46	2.34	2.25	2.19	2.13	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	2.26	2.17	2.11	2.05	2.00	1.92	1.84	1.76	1.71	1.66	1.61	1.56	1.49	1.42
120	3.92	3.07	2.68	2.45	2.29	2.18	2.09	2.03	1.97	1.92	1.84	1.76	1.68	1.63	1.58	1.53	1.48	1.41	1.34
∞	3.84	3.00	2.60	2.37	2.21	2.10	2.01	1.95	1.89	1.84	1.76	1.68	1.60	1.55	1.50	1.45	1.40	1.33	1.26

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