TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051 (KAA050)

Lördag 30 maj 2009 kl 08.30-13.30 i V

Louise Olsson är anträffbar för frågor på telefonankn 4390 och kommer att vara i tentamenslokalen någon gång mellan kl 10.00 och 11.00

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 18 juni 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. Den generella populationsbalansen för tillväxt och sönderdelning av flockar vid vattenrening (sluten tank med konstant volym) kan skrivas:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2}\sum_{i+j=k}\alpha(i,j)\beta(i,j)n_i n_j - \sum_{i=1}^{\infty}\alpha(i,k)\beta(i,k)n_i n_k - \chi(k)n_k + \sum_{i>k}^{\infty}\chi(i)n_i$$

Ge fysikalisk betydelse för samtliga termer! (4p)

2. Ställ upp en modell för frysning av en sfärisk vattendroppe. Droppen omströmmas av kall luft med temperaturen T_∞ och droppens temperatur ligger initialt på T_i ($>$ fryspunkten T_0). Antag ingen volymförändring vid infrysningen. (6p)

Uppgift 3 (5 poäng)

En lång cylindrisk metallstång med diametern 2 cm värms elektriskt i vacuum. Värmeledningen kan beskrivas med följande differentialekvation.

$$\lambda \frac{1}{r}\frac{d}{dr} r \frac{dT}{dr} = -k(1 - \alpha T)$$

med randvärdena

$$\lambda \frac{dT}{dr} = -\sigma T^4 \quad vid\ r = R$$

och

$$\frac{dT}{dr} = 0 \quad vid\ r = 0$$

Använd valfri viktad residual för att ta fram ett uttryck för hur temperaturen varierar med radien.

OBS: Du behöver ej lösa ut konstanterna, men alla ekvationer skall noggrant motiveras och lösningsgången beskrivas i detalj.

Uppgift 4 (5 poäng)

För att producera vätgas från CO används water gas shift (WGS) reaktion.

$$CO + H_2O \xleftrightarrow{R_A} CO_2 + H_2$$

Med reaktionshastigheten

$$R_A = k\frac{C_{CO}C_{H2O}}{C_{CO2}C_{H2}}$$

Denna reaktion utföres i en tub-reaktor där materialbalansen kan beskrivas enligt:

$$\frac{\partial C_A}{dt} + v_z\frac{\partial C_A}{dz} + v_r\frac{dC_A}{dr} = D_{er}\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(r\frac{\partial C_A}{dr}) + D_{ea}\frac{\partial^2 C_A}{dz^2} - R_A \qquad (1)$$

och värmebalansen enligt:

$$\rho C_p\left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_z\frac{\partial T}{\partial z} + v_r\frac{\partial T}{\partial r}\right) = k\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right) + k\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + Q \qquad (2)$$

Vad är tidskonstanten för:

(i) Den radiella transporten,

(ii) Den axiella diffusionen

(iii) Den radiella diffusionen

Om du skulle lösa uppgiften ovan med snabb beräkningshastighet, vilka förenklingar föreslår du. De förenklingar som föreslås skall vara direkt kopplade till exemplet ovan.

Motivera noggrant!

Uppgift 5 (5 poäng)

En katalysator för dieselfordon undersöktes med avseende på hur mycket NO_x den klarade att reducera beroende på reduktionsmedelstillsats i medeltal (rtm), cykeltid (ct) och under hur stor andel av cykeltiden som reduktionsmedlet tillsätts (art). Följande resultat erhölls

Försök nr	rtm mg/s	ct s	Art	NO_x-reduktion %
1	158	120	0,042	41,4
2	80	240	0,021	29,5
3	120	160	0,062	36,4
4	120	160	0,062	34,7
5	20	240	0,021	16,5
6	120	160	0,062	39,6
7	40	120	0,042	22,7
8	78	240	0,083	31,4
9	120	160	0,062	39,3
10	156	120	0,167	41,2
11	630	120	0,167	43,7

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

$$y = a \cdot rtm(1 + b \cdot rtm) + c \cdot ct$$

Här är a,b och c modellens parametrar och y är reduktionen i %. Genom minimering av residualkvadratsumman $SS = \sum \left(y_{\text{modell}} - y_{\text{experiment}} \right)^2$ för ovanstående data bestämdes a, b, c och SS mm till

a (parameter 1)	0,289		
b (parameter 2)	-0,00126		
c (parameter 3)	0,0474		
SS	62,8		
$\mathbf{J^T J}$	$1{,}025\cdot10^{5}$	$1{,}883\cdot10^{7}$	$1{,}546\cdot10^{5}$
	$1{,}883\cdot10^{7}$	$1{,}333\cdot10^{10}$	$1{,}909\cdot10^{7}$
	$1{,}546\cdot10^{5}$	$1{,}909\cdot10^{7}$	$3{,}328\cdot10^{5}$
$\mathbf{(J^T J)^{-1}}$	$4{,}433\cdot10^{-5}$	$-3{,}61\cdot10^{-8}$	$-1{,}853\cdot10^{-5}$
	-1,475	$1{,}111\cdot10^{-10}$	$1{,}04\cdot10^{-8}$
	$-8{,}09\cdot10^{-4}$	0,0040	$1{,}102\cdot10^{-5}$

a) Är alla parametrarna signifikanta, dvs. går det att bestämma deras tecken? Använd 95%-iga individuella konfidensintervall vid undersökningen.

b) Ett ytterligare försök gjordes med rtm=154 mg/s och ct=65 s och då blev reduktionen 63%. Ligger detta värde på y inom ett 95%-igt konfidensintervall i denna punkt?

Se bilaga för tabeller och formler.

Uppgift 6 (5 poäng)

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

Försök nr	y (beräknad med modell) %
1	42,3
2	32,2
3	37,0
4	37,0
5	17,0
6	37,0
7	16,7
8	31,7
9	37,0
10	41,9
11	43,6

Undersök på lämpligt sätt om det finns anledning att anta att modellen i uppgift 5, med de genom kvadratsummeminimering bestämda parametrarna, kan förbättras på något sätt.

b) Vid en lack-of-fit-analys förekommer följande kvot:

$$\frac{\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n_j}(y_{ij}-\bar{y}_j)^2}{\sum_{j=1}^{m}(n_j-1)}$$

Vad är denna kvot en skattning av? Vad kallas den ingående kvadratsumman? Beräkna kvoten för fallet i uppgift 5.

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.