TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051 (KAA050)

Måndag 24 augusti 2009 kl 14.00-19.00 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 16.00 och 17.00

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 11 september 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. Modeller kan klassificeras som motsatspar. Ange fyra sådana och förklara kort. (4p)

2. I en kokbok anges ett ”skonsamt” sätt att koka fisk (en fisk uppfattas som färdigkokt när temperaturen är cirka 60 °C).

En kastrull fylls med vatten som kokas upp. Kokkärlet tas sedan av från spisen och ställs på ett isolerande underlag. Därefter läggs fiskbiten i och locket sätts på.

Ställ upp en matematisk modell (med randvillkor) för "kokförloppet" med följande antaganden:

Fiskbiten antas sfärisk och är från början rumstempererad.

Vattnet i kastrullen är väl omblandat.

Eventuella ytterligare förenklingar ska motiveras! (6p)

Uppgift 3 (5 poäng)

a)

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

Reaktionen ovan är en värmebalans för en icke-adiabatisk cylindrisk tubreaktor. z är längden och r radien på cylindern. Temperaturen i radiell led kan antas konstant. Totala längden är L och temperaturen in i cylindern T_{IN} och ut T_{UT}. Ange ett kriterie när den axiella ledningen kan försummas. Motivera noggrant och förklara alla antaganden. All reaktant har reagerat vid reaktorns slut.

b)

Beskriv hur du gör för att kontrollera din approximation. OBS Inga ekvationer behöver lösas.

Uppgift 4 (5 poäng)

En sfärisk katalysator används för en reaktion. Materialbalansen är:

$$\frac{d^2c}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dc}{dr}-R_A=0$$

Använd 2 punktskollokation för att ta fram ett uttryck för hur koncentrationen c varierar med radien.

Reaktionshastigheten beskrivs av

$$R_A = kc$$

Motivera val av randvillkor.

OBS: Ekvationerna behöver ej lösas, men lösningsgången måste beskrivas i detalj.

Uppgift 5 (7 poäng)

Vid modellering av termodynamik för blandningar använder man sig ofta av s.k aktivitetsfaktormodeller. Denna uppgift handlar om parameterskattning i en modell för att beskriva hur aktivitetsfaktorn γ_1 varierar med sammansättningen och temperatur. Här använder vi oss av Wilsons aktivitetsfaktormodell som för en binär blandning kan uttryckas som

$$\gamma_1 = \exp[-\ln(x + \Lambda_{12}(1-x)) + (1-x)(\frac{\Lambda_{12}}{x + \Lambda_{12}(1-x)} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x + (1-x)})]$$

där

x = molfraktion av ämne 1 i vätskefasen,

$$\Lambda_{12} = \frac{v_2}{v_1}\exp(\frac{-\theta_1}{T}) \text{ och } \Lambda_{21} = \frac{v_1}{v_2}\exp(\frac{-\theta_2}{T})$$

där T är temp i K och $\frac{v_1}{v_2}$ ett volymförhållande som i detta fall är 0,87.

Vi har följande mätdata för blandningen 1-buten (ämne 1) och 1-butanol (ämne 2) :

Mätpunkt nr	T	x molfraktion ämne 1 i vätskefas	γ_1 Aktivitetsfaktor för ämne 1
1	318,40	0,947	1,02
2	318,40	0,6946	1,28
3	318,41	0,3966	1,85
4	318,40	0,0990	2,85
5	364,52	0,9447	1,01
6	364,52	0,6900	1,22
7	364,49	0,3917	1,71
8	364,52	0,0931	2,62

Genom minimering av residualkvadratsumman för γ_1 bestämdes parametrarna till θ_1 = 153,0 K och θ_2 = 610.8 K. Residualkvadratsumman SS blev 0,00380 och

$$\left(\mathbf{J}^T\mathbf{J}\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 0,1057 & -0,4766 \\ -0,4766 & 2,4342 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6}$$

och

$$\mathbf{J}^T\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 80,51 & 15,76 \\ 15,76 & 3,497 \end{pmatrix} \cdot 10^{6}$$

En annan undersökning i litteraturen har kommit fram till parametervärdena θ_1^{litt} = 100 K och θ_2^{litt} = 648 K .

a) Ligger ”litteraturparametrarna” (θ_1^{litt} och θ_2^{litt}) innanför individuella 95 %-iga konfidensintervall för våra parametrar?

b) Ligger ”litteraturparametrarna” innanför ett sammansatt 95 %-igt konfidensområde med korrekt konfidensgrad (men inte nödvändigtvis korrekt form) för våra parametrar?

c) Ytterligare en mätning görs för x=0,0341 och T=318,4. Det uppmätta värdet i denna punkt blir $\gamma_1 = 3{,}14$. Ligger denna punkt inom ett 95% konfidensintervall? I denna punkt gäller för modellen att $\dfrac{\partial \gamma_1}{\partial \theta_1} = 0{,}009\ \mathrm{K}^{-1}$ och $\dfrac{\partial \gamma_1}{\partial \theta_2} = 0{,}013\ \mathrm{K}^{-1}$.

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

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 trycket P:

Mätpunkt nr	γ_1 beräknad
1	1,0148
2	1,2600
3	1,8097
4	2,8358
5	1,0129
6	1,2365
7	1,7388
8	2,6410

Undersök med hjälp av detta på lämpligt sätt om modellen i uppgift 5 kan förbättras och i så fall hur!

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)

$$F(F) = \int_0^F \frac{\Gamma\left(\frac{m+n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} m^{\frac{m}{2}} n^{\frac{n}{2}} x^{\frac{m}{2}-1} (n+mx)^{-\frac{m+n}{2}}\, dx = .05$$

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.