TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051

Måndag 24 maj 2010 kl 08.30-13.30 i M

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 11 juni 2010.

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. Vid våtgranulering byggs aggregat upp från mindre partiklar genom tillsats av vätska som bindemedel. Det är av intresse att kunna modellera både storlek (massa m) och vätskeinnehåll (w) av aggregaten. Formulera en generell 1-D mikroskopisk populationsbalans där både mass-tillväxt (hastighet v1=dm/dt) och förändring av vätskeinnehåll (hastighet v2=dw/dt) inkluderas. Strömnings-hastigheten är u och nettoproduktionen är G.

(5p)

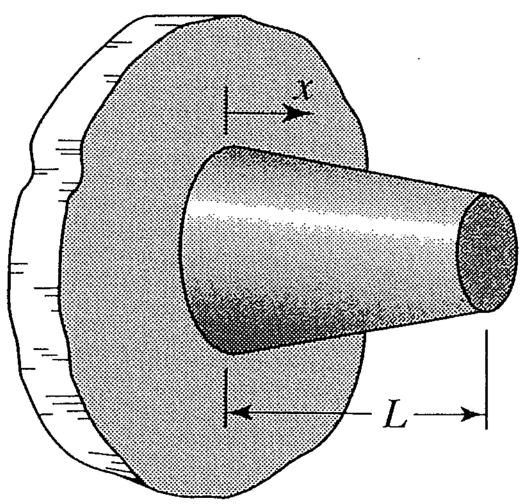
2. För att öka kylningen av en varm maskindel fastsätts flänsar i form av avsmalnande metallstavar (se Figur). Ställ, med hjälp av <u>skalbalans</u>, upp en <u>stationär</u> modell för värmetransporten i <u>en</u> stav. Väggtemperaturen är T_0 och omgivningens temperatur är T_∞. Radiella temperaturvariationer 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)



Uppgift 3 (5 poäng)

Reaktionen A + 2B → P med reaktionshastigheten $R = \dfrac{kC_A C_B}{1 + K_A C_A + K_B C_B}$ sker i en sfärisk katalysator. Materialbalansen för ämne A är

$$\frac{d^2 c_A}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dc_A}{dr} - R = 0$$

Koncentrationen av A och B vid ytan är $C_{A,YTA}$ och $C_{B,YTA}$, respektive.
Beskriv hur du räknar ut hur koncentrationen av A och B varierar i katalysatorn.
Använd valfri viktad residual. För att få full poäng krävs ej ett ekvationerna löses endast att problemet är rätt formulerat och att tillräckligt många ekvationer finns för att kunna lösa ut samtliga obekanta variabler. Beskriv lösningsgången i detalj.

Uppgift 4 (5 poäng)

Materialbalansen för en katalytisk reaktion i en tubreaktor är given nedan.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+v_z\frac{\partial C_A}{\partial z}+v_r\frac{\partial C_A}{\partial r}+\frac{v_\theta}{r}\frac{\partial C_A}{\partial \theta}=D_A\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C_A}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2}\right]-R_A$$

$R_A=kC_A$

Koncentrationen av A i inflödet varierar i radiell led pga ojämn dosering av ämne A.
Om tiden är > 10 min kan vi då anta steady state?
Tydlig motivering krävs.
Koncentrationen varierar ej i θ-led. Vidare är hastigheten i radiell och θ-led försumbar.

Längden L=0.7m
Radien R= 0.05m
Preexponentiell faktor $A=10^{10}\ s^{-1}$
Aktiveringsenergi E=130 kJ/mol
Allmäna gaskonstanten R=8.314 J/mol K
Hastighenten i axiell led $v_z=0.2$ m/s
Diffusiviteten, $D_A=10^{-4} m^2/s$
Temperatur, T=400°C

Uppgift 5 (6 poäng)

För att kunna simulera kompressorer så behövs ofta modeller för deras s.k. isentropverkningsgrad, η_{is}. Mätningar på en scrollkompressor med variabelt varvtal har gett följande resultat:

Försök nr	f Hz	Π -	t °C	η_{is}
1	40	2,6	38,7	0,662
2	40	3,1	38,5	0,611
3	40	3,9	38,7	0,522
4	40	4,9	20,1	0,502
5	50	5,2	18,9	0,502
6	50	4,0	39,3	0,569
7	50	2,5	55,4	0,638
8	50	3,0	52,9	0,602
9	65	2,4	56,1	0,657
10	65	2,8	53,2	0,618
11	65	4,0	38,7	0,578
12	65	4,9	26,5	0,515

Här används beteckningen f för nätfrekvensen till elmotorn, Π betecknar kvoten av trycken efter och före kompressorn och t är temperaturen i kompressorns inlopp.

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

$$y = \eta_{is} = a(1 + b(f / f_{ref} - 1)) + c(\Pi / \Pi_{ref} - 1)$$

Här är a,b och c modellens parametrar, f_{ref}= 50 Hz och Π_{ref} = 2,2. 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)		0,6592	
b (parameter 2)		0,0363	
c (parameter 3)		-0,1228	
SS		0,00311	
$\mathbf{J^TJ}$	12,0298	0,2761	7,6893
	0,2761	0,2259	0,1348
	7,6893	0,1348	7,2417
$\mathbf{(J^TJ)^{-1}}$	0,2641	-0,1572	-0,2775
	-0,1572	4,5693	0,0818
	-0,2775	0,0818	0,4312

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

b) Kompressorn kommer normalt att användas med f=50 Hz och Π=3,0. Beräkna ett 95%-igt konfidensintervall för y i denna punkt!

c) Beräkna korrelationen mellan parameter a och c, resp mellan b och c. Ange vad det erhållna värdet innebär för utseendet av ett sammansatt konfidensområde för resp. parameterpar. (Se ledning på nästa sida)

Ledning:
Korrelationskoefficientmatrisen C beräknas enligt

$$\mathbf{C}_{i,j} = \frac{\mathbf{D}_{i,j}}{\sqrt{\mathbf{D}_{i,i} \cdot \mathbf{D}_{j,j}}}, \text{ där } \mathbf{D} = \left(\mathbf{J}^T\mathbf{J}\right)^{-1}$$

Se bilaga för övriga tabeller och formler.

Uppgift 6 (4 poäng)

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

Försök nr	y (beräknad med modell)
1	0,6320
2	0,6041
3	0,5595
4	0,5036
5	0,4917
6	0,5587
7	0,6424
8	0,6145
9	0,6552
10	0,6329
11	0,5659
12	0,5156

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) Kvoterna SS1 och SS2 (se nedan) är båda skattningar av en modells varians σ^2 :

$$SS1 = \frac{\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n_j}(y_{ij} - \bar{y}_j)^2}{\sum_{j=1}^{m}(n_j - 1)} \qquad SS2 = \frac{\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n_j}(y_{ij} - \hat{y}_j)^2}{\sum_{j=1}^{m} n_j - P}$$

Ange en fördel och en nackdel med resp. sätt att skatta variansen! Förklara vad de använda symbolerna (n, m, P, $\hat{y}_j$, ...) betyder/representerar.

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

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

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

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

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, **b** by θ^*, **X** by **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)

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

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.