

TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051

Måndag 23 augusti 2010 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 10 september 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. Modeller kan klassificeras som motsatspar. Ange fem sådana och förklara kort. (5p)

2. Ett kärnbränsleelement består av en sfär med klyvbart material med radien R_F omgivet av ett skal av aluminium med yttre radien R_C . Kollisioner mellan fissionsprodukter och stillastående atomer av klyvbart material utgör den huvudsakliga värmekällan i en kärnreaktor. Antag att värmekällan (i det klyvbara materialet) ges av:

$$S_n = S_{n0} \left[1 + b \left(\frac{r}{R_F} \right)^2 \right] \quad (J/m^3, s)$$

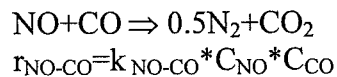
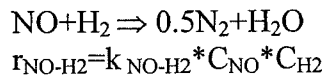
där b är en konstant mellan 0 och 1, och $S_n = 0$ för $r > R_F$.

Härled en modell för värmeflux och temperaturprofil vid stationära förhållanden. Yttre värmemotståndet kan inte försummas. Lösning av modellen krävs ej. (5p)

Uppgift 3

(5 poäng)

NO är en mycket giftig förening som bildas vid förbränning från fordon och stationära anläggningar. I bilar reagerar NO på en trevägskatalysator via reaktioner med tex H₂ och CO. Reaktionerna och dess hastigheter beskrivs av



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

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

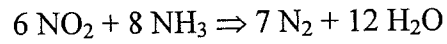
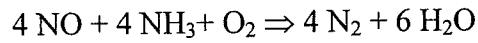
där C är koncentrationen (mol/m³), z är längden (m), v är flödes hastigheten (m/s), D_{ea} är axiell dispersions koefficient (m²/s), r reaktionshastigheten (mol/(s m³)), v stökiometrisk koefficient. Vid katalysatorns utlopp kan koncentrationsändringen av NO, CO och H₂ antas vara mycket liten.

- Använd **2 punkts kollokation** för att beskriva koncentrationen av NO, H₂ och CO 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.
- Använd **Galerkins metod** för att beskriva koncentrationen av NO, H₂ och CO 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.

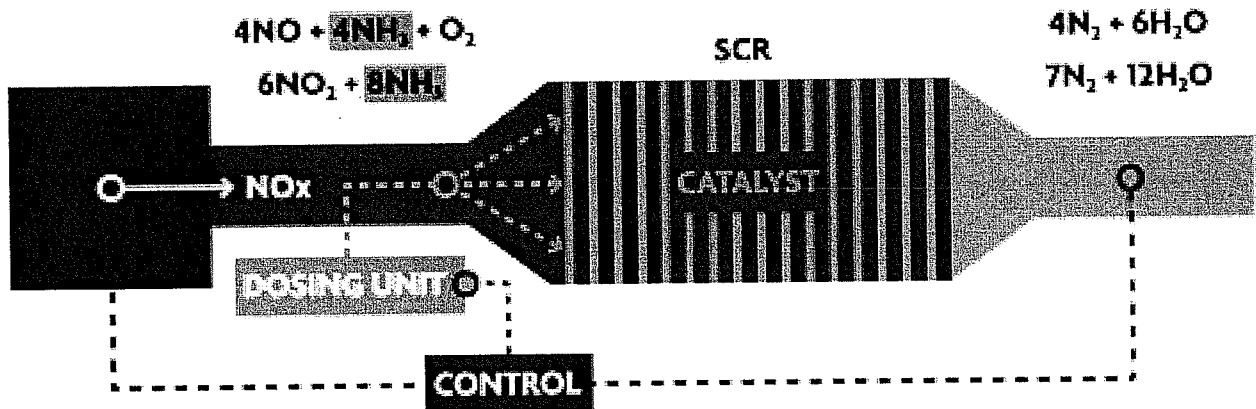
Uppgift 4

(5 poäng)

För att rena avgaserna från lastbilar använder man urea insprutning före en katalysator. Urean sönderfaller till ammoniak. Ammoniaken reagerar över katalysatorn med NO eller NO₂ enligt:



Att beskriva den exakta fördelningen av olika ämnen och temperatur i hela katalysatorn kräver stor datakraft. Beskriv olika metoder som du kan använda för att förenkla beräkningarna av detta system. Motivera noggrant!



Uppgift 5 (7 poäng)

Mätning av viskositeten μ av 1,1,1,2-tetrafluoroetan i vätskefas vid olika temperaturer och densitet ρ gav följande resultat.

Försök nr	T K	ρ mol/dm ³	μ mPa·s
1	300	12,8	0,662
2	300	12,37	0,611
3	300	11,91	0,522
4	250	13,92	0,502
5	250	13,71	0,502
6	250	13,47	0,569
7	200	15,1	0,638
8	200	14,97	0,602
9	200	14,82	0,657

Som ett första steg i arbetet valdes att modellera inversen av viskositeten (även kallad fluiditeten)

$$y = \frac{1}{\mu} = a \exp\left(\frac{-b}{T^2}\right) \left(\frac{1}{\rho} - c\right)$$

Här är a, b och c modellens parametrar. För variablerna används samma enheter som i ovanstående tabell. Genom minimering av residualkvadratsumman

$SS = \sum (y_{\text{modell}} - y_{\text{experiment}})^2$ för ovanstående data bestämdes a, b, c och SS mm till

a (parameter 1)	221,6		
b (parameter 2)	13687		
c (parameter 3)	0,0604		
SS	0,00487		
$\mathbf{J}^T \mathbf{J}$	1,319·10 ⁻³	-3,775·10 ⁻⁶	-17,63
	-3,775·10 ⁻⁶	1,155·10 ⁻⁸	0,0559
	-17,63	0,0559	2,782·10 ⁵
$(\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1}$	3,118·10 ⁴	2,277·10 ⁷	-2,600
	2,277·10 ⁷	1,979·10 ¹⁰	-2,534·10 ³
	-2,600	-2,534·10 ³	3,479·10 ⁻⁴

I litteraturen finns en annan uppsättning parametervärden föreslagna: a=242,25, b=16070 och c=0,061.

- Ligger det i litteraturen föreslagna värdet på b inom konfidensintervallet för "vårt" b? Använd dels ett 95%-igt och dels ett 99%-igt individuellt konfidensintervall vid undersökningen.
- Ligger den i litteraturen föreslagna parameteruppsättningen inom en sammansatt konfidensvolym för parametrarna a, b, och c. Använd en konfidensvolym med exakta konfidensgraden 95% men med approximativ form.
- Beräkna korrelationen mellan parameter b och c. Ange vad det erhållna värdet innebär för utseendet av ett sammansatt konfidensområde för detta parameterpar. (Se ledning på nästa sida)
- Beräkna ett 95%-igt konfidensintervall för y samma förhållanden (samma T och ρ) som i punkt 9.

Ledning:

Korrelationskoefficientmatrisen C beräknas enligt

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

Se bilaga för övriga tabeller och formler.

Uppgift 6 (3 poäng)

Med de parametervärden som anges i uppgift 5 blir den med modellen beräknade fluiditeten

Försök nr	y (beräknad med modell)
1	3,3703
2	3,8873
3	4,4817
4	2,0330
5	2,2289
6	2,4603
7	0,9137
8	1,0042
9	1,1106

- Undersök på lämpligt sätt om det kan antas att förutsättningen "konstant varians" är uppfyllt!
- Undersök på lämpligt sätt om det finns anledning att anta modellens temperatur- och/eller densitetsberoende kan förbättras på något sätt!

Bilaga till tentamen i Matematisk modellering:

The maximum likelihood estimate of the parameters β , b , can be obtained as

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

The variance can be estimated as the residual mean square:

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

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

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

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

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

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 $SS(b)$ 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

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

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

A $1-\alpha$ confidence interval for the expected response at x_0 is

$$x_0^T b \pm s \sqrt{x_0^T (X^T X)^{-1} x_0} t(N-P, \alpha/2)$$

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

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

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 , b by θ^* , X by J^* , $x_0^T b$ by $f(x_0, \theta^*)$, and x_0 by

$$j_0 = \left. \frac{\partial f(x_0, \theta)}{\partial \theta^T} \right|_{\theta^*}$$

PERCENTAGE POINTS, STUDENT'S *t*-DISTRIBUTION

This table gives values of *t* such that

$$F(t) = \int_{-\infty}^t \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\sqrt{\pi n} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(1 + \frac{x^2}{n}\right)^{-\frac{n+1}{2}} dx$$

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>	.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	2.325	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.

F-Distribution

PERCENTILE POINTS, F-DISTRIBUTION (Continued)

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

m \ n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	20	24	30	40	60	120	∞	
1	161.4	109.5	215.7	224.0	230.2	234.0	236.8	238.9	240.5	241.9	243.9	245.9	248.9	249.1	249.1	249.1	249.2	249.3	249.3	249.3
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.34	19.36	19.37	19.38	19.40	19.41	19.43	19.45	19.46	19.46	19.47	19.48	19.49	19.49	19.49
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.88	8.85	8.81	8.79	8.74	8.70	8.66	8.64	8.63	8.62	8.61	8.60	8.60	8.60
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00	5.98	5.91	5.86	5.80	5.77	5.75	5.74	5.73	5.72	5.72	5.72
5	6.01	5.19	4.81	4.58	4.45	4.35	4.28	4.22	4.17	4.14	4.08	4.02	3.94	3.91	3.89	3.88	3.87	3.86	3.86	3.86
6	5.00	4.14	3.73	3.48	3.34	3.24	3.17	3.11	3.06	3.03	2.97	2.90	2.81	2.78	2.76	2.75	2.74	2.73	2.73	2.73
7	4.34	3.44	3.01	2.74	2.59	2.49	2.42	2.36	2.31	2.28	2.22	2.15	2.05	2.02	2.00	1.99	1.98	1.97	1.97	1.97
8	3.84	2.91	2.46	2.17	2.01	1.91	1.84	1.78	1.73	1.70	1.64	1.56	1.45	1.42	1.40	1.39	1.38	1.37	1.37	1.37
9	3.44	2.48	2.01	1.71	1.54	1.44	1.37	1.31	1.26	1.23	1.17	1.08	0.97	0.94	0.92	0.91	0.90	0.89	0.89	0.89
10	3.11	2.13	1.64	1.34	1.17	1.07	1.00	0.94	0.89	0.86	0.80	0.71	0.60	0.57	0.55	0.54	0.53	0.52	0.52	0.52
11	2.84	1.84	1.34	1.04	0.87	0.77	0.70	0.64	0.59	0.56	0.50	0.41	0.30	0.27	0.25	0.24	0.23	0.22	0.22	0.22
12	2.61	1.59	1.09	0.79	0.62	0.52	0.45	0.39	0.34	0.31	0.25	0.16	0.05	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
13	2.41	1.38	0.88	0.58	0.41	0.31	0.24	0.18	0.13	0.10	0.04	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
14	2.24	1.20	0.70	0.40	0.23	0.13	0.06	0.00	0.05	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
15	2.10	1.05	0.55	0.25	0.08	0.08	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1.98	0.93	0.43	0.13	0.06	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1.87	0.82	0.33	0.03	0.04	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1.78	0.74	0.24	0.04	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1.71	0.69	0.16	0.06	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1.65	0.64	0.08	0.08	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1.60	0.60	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1.56	0.56	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1.52	0.52	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1.48	0.48	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1.45	0.45	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1.42	0.42	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1.40	0.40	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1.38	0.38	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1.36	0.36	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1.35	0.35	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	1.30	0.30	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	1.25	0.25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
120	1.20	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
∞	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

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

$$F = \frac{s_1^2/s_2^2}{m/n}$$