TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051

Onsdag 11 januari 2012 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 31 januari 2012.

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

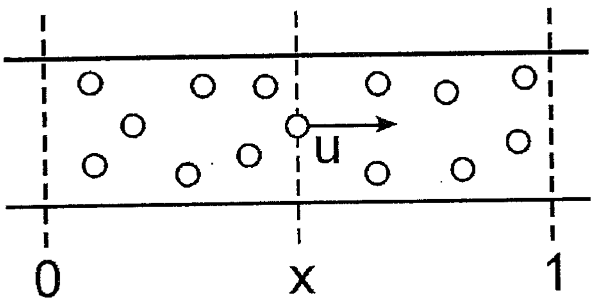
Standard Mathematical Tables

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.). Cellerna karakteriseras vid tiden t av läge x och massa m. Celltillväxten v = dm/dt, hastigheten u och nettogenereringen G antas givna.

(5p)



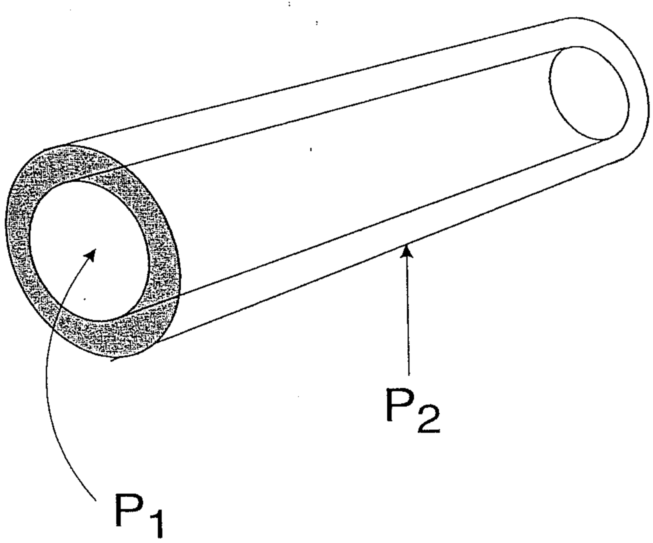
2. Ett keramiskt filter (=poröst material) är utformat enligt figuren nedan. Vätska av ett visst tryck p1 (konstant längs cylindern) strömmar genom cylinderns mitt och pressas radiellt. Trycket utanför cylindern, p2, är lägre än trycket inuti. Ställ upp en modell för beräkning av radiell tryckprofil och hastighetsprofil i filterväggen under stationära förhållanden. Darcys lag kan anses gälla.

(5p)

$$\mathbf{q} = -\frac{k}{\mu}\nabla p$$

där

q flödes-hastigheten	m^3/m^2, s
k permeabiliteten	m^2
μ viskositeten	Pas



Uppgift 3 (5 poäng)

Under en katalytisk reaktion i en kanal gäller följande värmebalans.

$$\rho_m C_m \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{ea} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - v\rho C_p \frac{\partial T}{\partial x} - k(-\Delta H)\cdot C$$

där T är temperaturen och x är längden i m. Temperaturen ställs in relativt snabbt i systemet varför den transienta variationen kan försummas. Vidare kan temperaturberoendet hos hastighetskonstanten försummas för denna reaktion. Temperaturen i inloppet på kanalen är 200°C och temperaturen i utloppet är ca 275-350°C. Man kan anta att koncentrationen C är känd.

a) Ställ upp kriterier för när $\lambda_{ea} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ kan försummas?

b) Beskriv hur uppgiften löses om kriterierna är uppfyllda och beskriv noggrant hur du kontrollerar din approximation. Ekv. behöver ej lösas, men beskrivningen skall vara detaljerad.

Uppgift 4 (5 poäng)

CO oxideras av O_2 över en Pt-katalysator. Katalysatorn finns på väggarna i monolitkanaler. Denna reaktion är mycket viktig för att rena bilavgaser från bensinmotorer från CO. Man kan beskriva monolitkanalen med en tubreaktor, och materialbalanserna för dessa reaktioner är givna nedan tillsammans med värmebalansen:

$$v_z \frac{\partial C_{CO}}{dz} + v_r \frac{dC_{CO}}{dr} = D_{er} \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r \frac{\partial C_{CO}}{dr}\right) + D_{ea} \frac{\partial^2 C_{CO}}{dz^2} - R_A$$

$$v_z \frac{\partial C_{O2}}{dz} + v_r \frac{dC_{O2}}{dr} = D_{er} \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r \frac{\partial C_{O2}}{dr}\right) + D_{ea} \frac{\partial^2 C_{O2}}{dz^2} - R_A$$

$$\rho C_p \left(v_z \frac{\partial T}{\partial z} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + R_A(-\Delta H) = k \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

$$R_A = \frac{k_1 C_{CO} C_{O2}}{\left(1 + K C_{CO}\right)^2}$$

Koncentrationen av CO och O_2 och temperaturen beror både av längd (z) och radie (r). Hastighetskonstantens temperaturberoende kan försummas i detta exempel. Använd valfri viktad residual för att lösa hur C_{CO} och C_{O2} och temperaturen beror av z och r. Motivera tydligt! Inga ekvationer behöver lösas, men lösningsgången skall beskrivas i detalj och alla ekvationer måste anges. Motivera val av randvillkor. Koncentrationerna av O_2, CO och temperatur i utlopp är ej kända.

Uppgift 5 (7 poäng)

Ketchup har som bekant en viskositet η som beror av skjuvhastigheten $\dot{\gamma}$. Mätningar på ett fabrikat gav följande resultat:

Försök nr	T °C	$\dot{\gamma}$ 1/s	η Pa s
1	30	0,1	224
2	30	0,1	210
3	30	5	7,88
4	30	100	0,606
5	30	100	0,611
6	35	0,1	188
7	35	0,1	219
8	35	5	6,81
9	35	100	0,494
10	35	100	0,497

Som utgångspunkt för modelleringen valdes följande samband:

$$y = ln\left(\frac{\eta}{\eta_{ref}}\right) = \ln\left[\left(\theta_1 + \theta_2\frac{\Delta T}{T_{ref}}\right)\left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{ref}}\right)^{\theta_3-1}\right] = ln\left(\theta_1 + \theta_2\frac{\Delta T}{T_{ref}}\right) + (\theta_3 - 1)ln\left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{ref}}\right)$$

Här är θ modellens parametrar och $\Delta T = T - T_{ref}$. Som referensvärden valdes $T_{ref} = 303{,}15$ K, $\eta_{ref} = 1{,}0$ Pa s och $\dot{\gamma} = 1{,}0\ s^{-1}$.

Genom minimering av residualkvadratsumman $SS = \sum\left(y_{modell} - y_{experiment}\right)^2$ för ovanstående data bestämdes θ och SS mm till

θ_1		31,05	
θ_2		-246,67	
θ_3		0,1394	
SS		0,02370	
$\mathbf{J^TJ}$	0,012021	0,000111	0,429922
	0,000111	1,8E-06	0,003728
	0,429922	0,003728	111,2185
$\mathbf{(J^TJ)^{-1}}$	208,3651417	-12006,7	-0,40297
	-12006,66459	1289054	3,201346
	-0,402965971	3,201346	0,010442

a) Parametern θ_3 är en indikator på vilken typ av skjuvhastighetsberoende en fluid har. Bestäm ett 95 %-igt konfidensintervall för denna parameter!

b) Hur varierar den relativa bredden (bredd/(predikterat värde på y) på ett 95% konfidensband för y? Det räcker att göra undersökningen för T=Tref och för tre värden på $\dot{\gamma}$: 0,1, 5 resp 100 s^{-1}.

c) Beräkna korrelationen mellan parameterparen θ_1 och θ_2 resp θ_1 och θ_3. Ange vad de erhållna värdena innebär för utseendet av ett sammansatt konfidensområde för dessa parameterpar.

Ledning:

Korrelationskoefficientmatrisen C beräknas enligt

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

Se bilaga för övriga tabeller och formler.

Uppgift 6 (3 poäng)

Med de parametervärden som anges i uppgift 5 blir de med modellen beräknade värdena på y:

Försök nr	y (beräknad med modell)
1	5,417212
2	5,417212
3	2,050481
4	-0,52768
5	-0,52768
6	5,279207
7	5,279207
8	1,912476
9	-0,66568
10	-0,66568

a) Undersök på lämpligt sätt om det finns anledning att anta modellens temperatur- och/eller $\dot{\gamma}$-beroende kan förbättras på något sätt!

b) Undersök på lämpligt sätt om förutsättningen ”konstant varians” kan anses vara uppfylld, och föreslå någon åtgärd om den inte är det.

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

$$\mathrm{j}_0 = \left.\frac{\partial \mathrm{f}(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}^T}\right|_{\boldsymbol{\theta}^*}$$

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	109.5	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.