TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

KAA051

Måndag 20 augusti 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 7 september 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. Modeller kan klassificeras som motsatspar. Ange <u>fem</u> sådana och förklara kort. (5p)

2. I en elektrisk ledning sker uppvärmning pga dissipation av elektrisk energi till värme. Det är då viktigt att temperaturen inte blir för hög. Ställ med skalbalans upp en <u>stationär</u> modell (inklusive randvillkor) för förloppet. Värmeutvecklingen ges av S (J/ m^3,s). Ledningen har cylindriskt tvärsnitt och omges av isolering. Yttre värmemotståndet kan <u>inte</u> försummas. Variationer längs tråden behöver inte beaktas (längd/diameter förhållandet är stort). Modellen ska inte lösas. (5p)

Uppgift 3 (7 poäng)

Materialbalansen för en cylindrisk tubreaktor är

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} + v_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r}\frac{\partial C_A}{\partial \theta} =$$

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

a)

Reaktionshastigheten är $r=kC_A^3$

För detta fall kan koncentrationens variation i radiell och även Θ riktning försummas. Även tidsberoendet kan försummas. Beskriv i detalj hur denna ekvation linjäriseras.

b)

Reaktionshastigheten är $r=kC_A^2$

För detta fall kan koncentrationens variation i radiell och i Θ riktning försummas. Även tidsberoendet kan försummas.

Inflödeskoncentration	C_{IN}	$= 800$ mol/m^3
Axiell dispersionskoefficient	D_a	$= 0.007$ m^2/s
Reaktor längd	L	$= 2$ m
Flödeshastighet	v	$= 0.7$ m/s
Hastighetskonstant	k	$= 0.005$ m^3/(mol s)

Förenkla ekvationen ytterligare (EJ med linjärisering, ej viktad residual) och ta fram ett uttryck för C som funktion av z. ALLA antaganden och förenklingar skall TYDLIGT motiveras. Vad är koncentrationen vid z=1m. Beskriv också hur du skall göra för att kontrollera om antagandena var acceptabla, men ekvationerna för denna kontroll behöver ej lösas.

Uppgift 4 (3 poäng)

Materialbalansen för en cylindrisk tubreaktor är

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+v_z\frac{\partial C_A}{\partial z}+v_r\frac{\partial C_A}{\partial r}+\frac{v_\theta}{r}\frac{\partial C_A}{\partial \theta}=$$

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

Reaktionshastigheten är $r=kC_A^3$

För detta fall kan koncentrationens variation i radiell och även Θ riktning försummas. Även tidsberoendet kan försummas. **Använd Galerkins metod** för att ta fram ett utryck för hur koncentrationen beror av z. Ekvationerna behöver ej lösas, men alla ekvationer, parametrar, randvillkor, etc. skall noggrant motiveras. Lösningsgången skall beskrivas **i detalj**.

Uppgift 5 (6 poäng)

Som bas för beräkning av ett ämnes termodynamiska egenskaper används ofta s.k. tillståndsekvationer. I gasfas så är idealgas-ekvationen ofta använd, men vid lite högre tryck och densiteter så räcker den inte riktigt till. Ett av flera möjliga alternativ är då följande ekvation

$$y = P / P_{ref} = \frac{RT / P_{ref}}{v + \theta_1 (1/T - \theta_2)}$$

där v är molvolymen i m^3/mol, $P_{ref} = 1$ MPa,

$R =$ 8,3143 J/(mol K), T är temperaturen i K och P trycket i Pa.

Vi har följande mätdata för 1,1,1,2-tetrafluoroetan

Mätpunkt nr	P MPa	T K	v m^3/mol
1	2,7087	368,14	$0{,}7661 \cdot 10^{-3}$
2	1,81101	368,14	$1{,}3648 \cdot 10^{-3}$
3	0,81753	368,14	$3{,}4447 \cdot 10^{-3}$
4	2,0511	361,15	$0{,}9228 \cdot 10^{-3}$
5	2,4063	368,15	$0{,}9238 \cdot 10^{-3}$
6	1,2340	321,15	$1{,}6617 \cdot 10^{-3}$
7	1,5128	363,15	$1{,}6644 \cdot 10^{-3}$

Genom minimering av residualkvadratsumman bestämdes parametrarna till $\theta_1 = 0{,}4746$ m^3/mol och $\theta_2 = 0{,}00197$ 1/K. Residualkvadratsumman SS blev 0,00349,

$$\left(\mathbf{J}^T\mathbf{J}\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 8{,}4725 & 0{,}0141 \\ 0{,}0141 & 23{,}79 \cdot 10^{-6} \end{pmatrix}$$

och

$$\mathbf{J}^T\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 8{,}6597 & -5132{,}8 \\ -5132{,}8 & 3{,}0843 \cdot 10^{6} \end{pmatrix}$$

a) Är parametrarna signifikanta, dvs. går deras tecken att bestämma? Gör undersökningen genom att bestämma individuella 95 %-iga konfidensintervall för våra parametrar.

b) Klarar modellen med våra parametrar att förutsäga trycket för v = 0,001 och T = 363,15 K inom ± 1 %? Undersök detta genom att bestämma lämpligt 95-%igt konfidensintervall.

c) Undersök korrelationen mellan parametrarna. Vad innebär det erhållna värdet? Vad indikerar värdet vad gäller utseendet på ett sammansatt konfidensintervall för parametrarna?

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 (4 poäng)

Med våra parametrar och modellen i uppgift 5 fås följande beräknade värden för trycket P:

Mätpunkt nr	P (beräknad) MPa
1	2,7331
2	1,7809
3	0,8058
4	2,0696
5	2,3958
6	1,2114
7	1,4830

a) Undersök på lämpligt sätt om det är troligt att modellen i uppgift 5 kan förbättras vad avser beroendet av någon variabel. Det räcker att göra undersökningen för två variabler.
b) Undersök på lämpligt sätt om förutsättningen "konstant varians" är uppfylld. Det räcker att göra undersökningen ur en aspekt utöver vad som gjorts i deluppgift a).
c) Redogör kortfattat för hur man i princip (dvs. du behöver inte göra undersökningen) gör en lack-of-fit-analys. Går undersökningen att genomföra med de data som är givna i uppgift 5 och 6 (Motivera svaret)?

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

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

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
1	161.4	109.5	215.7	224.6	230.2	234.0	236.8	238.9	240.5
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.35	19.37	19.38
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.81
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.10
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.68
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.39
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.29	3.23	3.18
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	3.02
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	3.01	2.95	2.90
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.91	2.85	2.80
13	4.67	3.81	3.41	3.18	3.03	2.92	2.83	2.77	2.71
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.76	2.70	2.65
15	4.54	3.68	3.29	3.06	2.90	2.79	2.71	2.64	2.59
16	4.49	3.63	3.24	3.01	2.85	2.74	2.66	2.59	2.54
17	4.45	3.59	3.20	2.96	2.81	2.70	2.61	2.55	2.49
18	4.41	3.55	3.16	2.93	2.77	2.66	2.58	2.51	2.46
19	4.38	3.52	3.13	2.90	2.74	2.63	2.54	2.48	2.42
20	4.35	3.49	3.10	2.87	2.71	2.60	2.51	2.45	2.39
21	4.32	3.47	3.07	2.84	2.68	2.57	2.49	2.42	2.37
22	4.30	3.44	3.05	2.82	2.66	2.55	2.46	2.40	2.34
23	4.28	3.42	3.03	2.80	2.64	2.53	2.44	2.37	2.32
24	4.26	3.40	3.01	2.78	2.62	2.51	2.42	2.36	2.30
25	4.24	3.39	2.99	2.76	2.60	2.49	2.40	2.34	2.28
26	4.23	3.37	2.98	2.74	2.59	2.47	2.39	2.32	2.27
27	4.21	3.35	2.96	2.73	2.57	2.46	2.37	2.31	2.25
28	4.20	3.34	2.95	2.71	2.56	2.45	2.36	2.29	2.24
29	4.18	3.33	2.93	2.70	2.55	2.43	2.35	2.28	2.22
30	4.17	3.32	2.92	2.69	2.53	2.42	2.33	2.27	2.21
40	4.08	3.23	2.84	2.61	2.45	2.34	2.25	2.18	2.12
60	4.00	3.15	2.76	2.53	2.37	2.25	2.17	2.10	2.04
120	3.92	3.07	2.68	2.45	2.29	2.17	2.09	2.02	1.96
∞	3.84	3.00	2.60	2.37	2.21	2.10	2.01	1.94	1.88

n \ m	10	12	15	20	24	30	40	60	120	∞
1	241.9	243.9	245.9	248.0	249.1	250.1	251.1	252.2	253.3	254.3
2	19.40	19.41	19.43	19.45	19.45	19.46	19.47	19.48	19.49	19.50
3	8.79	8.74	8.70	8.66	8.64	8.62	8.59	8.57	8.55	8.53
4	5.96	5.91	5.86	5.80	5.77	5.75	5.72	5.69	5.66	5.63
5	4.74	4.68	4.62	4.56	4.53	4.50	4.46	4.43	4.40	4.36
6	4.06	4.00	3.94	3.87	3.84	3.81	3.77	3.74	3.70	3.67
7	3.64	3.57	3.51	3.44	3.41	3.38	3.34	3.30	3.27	3.23
8	3.35	3.28	3.22	3.15	3.12	3.08	3.04	3.01	2.97	2.93
9	3.14	3.07	3.01	2.94	2.90	2.86	2.83	2.79	2.75	2.71
10	2.98	2.91	2.85	2.77	2.74	2.70	2.66	2.62	2.58	2.54
11	2.85	2.79	2.72	2.65	2.61	2.57	2.53	2.49	2.45	2.40
12	2.75	2.69	2.62	2.54	2.51	2.47	2.43	2.38	2.34	2.30
13	2.67	2.60	2.53	2.46	2.42	2.38	2.34	2.30	2.25	2.21
14	2.60	2.53	2.46	2.39	2.35	2.31	2.27	2.22	2.18	2.13
15	2.54	2.48	2.40	2.33	2.29	2.25	2.20	2.16	2.11	2.07
16	2.49	2.42	2.35	2.28	2.24	2.19	2.15	2.11	2.06	2.01
17	2.45	2.38	2.31	2.23	2.19	2.15	2.10	2.06	2.01	1.96
18	2.41	2.34	2.27	2.19	2.15	2.11	2.06	2.02	1.97	1.92
19	2.38	2.31	2.23	2.16	2.11	2.07	2.03	1.98	1.93	1.88
20	2.35	2.28	2.20	2.12	2.08	2.04	1.99	1.95	1.90	1.84
21	2.32	2.25	2.18	2.10	2.05	2.01	1.96	1.92	1.87	1.81
22	2.30	2.23	2.15	2.07	2.03	1.98	1.94	1.89	1.84	1.78
23	2.27	2.20	2.13	2.05	2.01	1.96	1.91	1.86	1.81	1.76
24	2.25	2.18	2.11	2.03	1.98	1.94	1.89	1.84	1.79	1.73
25	2.24	2.16	2.09	2.01	1.96	1.92	1.87	1.82	1.77	1.71
26	2.22	2.15	2.07	1.99	1.95	1.90	1.85	1.80	1.75	1.69
27	2.20	2.13	2.06	1.97	1.93	1.88	1.84	1.79	1.73	1.67
28	2.19	2.12	2.04	1.96	1.91	1.87	1.82	1.77	1.71	1.65
29	2.18	2.10	2.03	1.94	1.90	1.85	1.81	1.75	1.70	1.64
30	2.16	2.09	2.01	1.93	1.89	1.84	1.79	1.74	1.68	1.62
40	2.08	2.00	1.92	1.84	1.79	1.74	1.69	1.64	1.58	1.51
60	1.99	1.92	1.84	1.75	1.70	1.65	1.59	1.53	1.47	1.39
120	1.91	1.83	1.75	1.66	1.61	1.55	1.50	1.43	1.35	1.25
∞	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.