

# TENTAMEN I MATEMATISK MODELLERING INOM KEMITEKNIKEN

**KAA051**

**Torsdag 30 maj 2013 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

**OBS För uppgift 4 finns två alternativ: i) de som läst kursen i år (2013) ii) de som ej läst kursen i år (före 2013)**

---

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 19 juni 2013.

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

(5p)

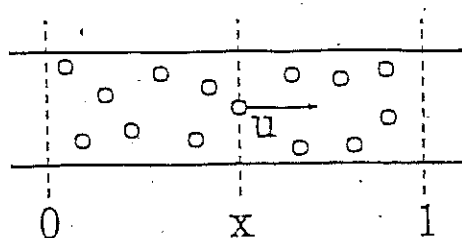


Fig. 1

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  $r > R_F$ .

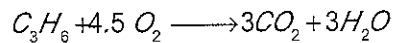
Härled en modell för värmefflux och temperaturprofil vid stationära förhållanden. Yttre värmemotståndet kan inte försummas. Lösning av modellen krävs ej. (5p)

### Uppgift 3

(5 poäng)

a)

För att oxidera propen till  $\text{CO}_2$  används en platinakatalysator och följande reaktion sker



Med reaktionshastigheten

$$R_A = k C_{\text{C}_3\text{H}_6} C_{\text{O}_2}$$

Denna reaktion utföres i en tub-reaktor där materialbalansen kan beskrivas enligt:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} + v_r \frac{dC_A}{dr} = D_{er} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + D_{ez} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - R_A \quad (1)$$

och med värmebalansen

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

Variationen i tid kan försummas. Temperaturen i utflödet är 25% högre än temperaturen i inloppet. Ange ett kriterie för när den axiella värmeledningen kan försummas. Beskriv också i detalj hur du kontrollerar dina antaganden. Inga lösningar av ekvationer krävs men detaljerad beskrivning av metod och framtagning av kriterie skall finnas. Motivera tydligt.

Denna uppgift löses av studenter som har läst kursen i år

(2013).

Uppgift 4

(5 poäng)

1.) Solution of higher order differential equations with standard ODE algorithms requires the equation is converted to a system of first order equations. Convert the following equation

$$\frac{d^3 y}{dx^3} - \frac{d^2 y}{dx^2} \frac{dy}{dx} + y^2 - e^x = 0$$

(1p)

2.) An example of an implicit method with improved accuracy compared to the implicit Euler method is

$$y_{n+1} = y_n + h \left( \frac{5}{12} f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{8}{12} f(x_n, y_n) - \frac{1}{12} f(x_{n-1}, y_{n-1}) \right)$$

Explain the additional challenge occurring when implementing this method, compared to the implicit Euler method.

(1p)

3.) Diffusion and reaction inside a spherical catalyst particle is described by the boundary value problem,

$$\frac{d^2 c}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dc}{dr} - 4c = 0$$

$$c(1) = 1$$

$$\left. \frac{dc}{dr} \right|_{r=0} = 0$$

$$r \in [0, 1]$$

Use the collocation method, with a collocation point at  $r=0.5$ , to find an approximate solution.

(1.5p)

4.) Use the central differences and discretize the following equation using a mesh size  $h$ . Explain what equations are solved and show how the boundary conditions are accounted for.

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - \alpha(x) \frac{dy}{dx} - \beta(x) y = 0$$

$$y(a) = y_a$$

$$y(b) = y_b$$

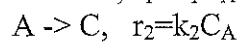
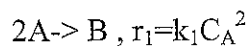
(1.5p)

**Denna uppgift löses av studenter som EJ läst kursen i år, dvs FÖRE 2013.**

**Uppgift 4**

(5 poäng)

En sfärisk katalysator används för en parallell reaktion enligt



Materialbalansen är

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

- Använd Galerkins metod för att beskriva hur koncentrationen  $c$  beror av radien.
- Använd Kollokation för att beskriva hur koncentrationen  $c$  beror av radien.
- Använd minsta kvadratmetoden för att beskriva hur koncentrationen  $c$  beror av radien.

Motivera val av randvillkor.

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

Matematisk modellering Tentamen maj 2013

Uppgift 5 (7 poäng)

När man indunstar mjölk till höga koncentrationer, så är det inte säkert att viskositeten längre är så kallat Newtonsk, utan man får ta till något mer komplicerade modeller för att beskriva sambandet mellan skjuvhastighet  $\dot{\gamma}$  och skjuvspänning  $\tau$ . Vid ett försök med indunstad mjölk uppmättes följande:

Försök nr	$\dot{\gamma}$	$\tau$
1	1000	55,6
2	1403	76,0
3	1106	61,2
4	1500	80,7
5	358	22,3
6	153	10,6
7	697	41,2
8	1694	91,3
9	447	27,8

En vanlig modell är

$$\tau = \theta_1 + \theta_2 \dot{\gamma}^{\theta_3}$$

Här är  $\theta$  modellens parametrar. Genom minimering av residualkvadratsumman

$$SS = \sum (\tau_{\text{modell}} - \tau_{\text{experiment}})^2$$

för ovanstående data bestämdes  $\theta$  och SS mm till

$\theta_1$	1,042		
$\theta_2$	0,0953		
$\theta_3$	0,921		
SS	1,893		
$\mathbf{J}^T \mathbf{J}$	9	4797,8	3145,3
	4797,8	3255489	2154011
	3145,3	2154011	1429064
$(\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1}$	0,585731	-0,0038	0,004444
	-0,0038	0,000139	-0,0002
	0,004444	-0,0002	0,000293

I en rapport baserad på något fler mätpunkter anges  $\theta_{1\text{rapport}} = 1,83$ ,  $\theta_{2\text{rapport}} = 0,08$   $\theta_{3\text{rapport}} = 0,942$ . Med de parametervärdena blir vår residualkvadratsumma  $SS_{\text{rapport}} = 4,98$ .

- För att en fluid skall anses Newtonsk, så skall  $\theta_1 = 0$  och  $\theta_3 = 1$ . Går det "statistiskt" att säga att den här undersökta mjölken inte är Newtonsk? Använd 95%-iga individuella konfidensintervall för undersökningen.
- Ligger rapportens parametervärden inom ett sammansatt konfidensintervall med korrekt form med approximativt 95 % konfidensgrad?
- Beräkna korrelationen mellan parametrarna  $\theta_2$  och  $\theta_3$ . Vad innebär det erhållna värdet? Vad säger det om utseendet på ett sammansatt konfidensintervall för  $\theta_2$  och  $\theta_3$ ?
- Bestäm ett 95 % -igt konfidensintervall för  $y$  i försökspunkt nr 1.

Ledning:

Korrelationskoefficientmatrisen C beräknas enligt

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

Se bilaga för övriga tabeller och formler.

Uppgift 6 (3 poäng)

Med de parametervärden som anges i uppgift 5 blir de med modellen beräknade värdena på  $\tau$ :

Försök nr	$\tau$ (beräknad med modell)
1	56,1
2	76,3
3	61,5
4	81,1
5	22,4
6	10,8
7	40,6
8	90,6
9	27,3

- Undersök på lämpligt sätt om det finns anledning att anta modellens skjuvhastighetsberoende kan förbättras på något sätt och ge i så fall förslag på åtgärd. Undersök även om det kan finnas något tidsberoende (antag att försöken är gjorda i tidsordning).
- Undersök på lämpligt sätt om förutsättningen "konstant varians" kan anses vara uppfylld, och föreslå någon åtgärd om den inte är det.

2013-05-30

1. Se boken kap. 3.4

2.

Med användande av skalbalans och Fourier's lag blir energiekvationen:

$$0 < r < R_F$$

$$0 = k_{\text{bränste}} \left( \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{dT}{dr} \right) + S_n$$

$$R_F < r < R_C$$

$$0 = k_{Al} \left( \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{dT}{dr} \right)$$

Randvillkor:

$$\frac{dT}{dr} = 0 \text{ vid } r = 0$$

$$-k \frac{dT}{dr} = h(T_{r=R_C} - T_\infty) \text{ vid } r = R_C$$

$$T_{\text{bränste}} = T_{Al} \text{ vid } r = R_F$$

$$\left( -k \frac{dT}{dr} \right)_{\text{bränste}} = \left( -k \frac{dT}{dr} \right)_{Al} \text{ vid } r = R_F$$



MMIKT 2013-05-30

$$3. \rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} \right) =$$
$$= k \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + Q$$

Jamfara termer

Axiella ledn.

$$\rho c_p v_z \frac{\partial T}{\partial z} \gg k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

$$k \frac{T_{dm}}{L^2} \frac{\partial^2 T'}{\partial z'^2} \ll \rho c_p v_z \frac{T_{dm}}{L} \frac{\partial T'}{\partial z'}$$

$$\frac{k}{L} \frac{\partial^2 T'}{\partial z'^2} \ll \rho c_p v_z \frac{\partial T'}{\partial z'}$$

$$\frac{\partial T'}{\partial z'} \approx \frac{\Delta T}{\Delta z} = \frac{1 - 1,25}{1 - 0} = 0,2$$

$$T' = \frac{T}{T_{ut}} \quad T_{ut} = 1,25 \cdot T_{dm} \quad T_{dm} = \frac{T_{ut}}{1,25}$$

$$\frac{\partial^2 T'}{\partial z'^2} = \frac{\frac{\Delta T'}{\Delta z'} \Big|_{z'=1} - \frac{\Delta T'}{\Delta z'} \Big|_{z'=0}}{1} = \frac{0 - 0,2}{1} = -0,2$$

$$\frac{k}{L^2} \frac{\partial^2 T'}{\partial z'^2} \ll \rho C_p \sqrt{z} \frac{1}{L} \frac{\partial T'}{\partial z'}$$

$$\frac{k}{L^2} \cdot 0,2 \ll \rho C_p \frac{\sqrt{z}}{L} \cdot 0,2$$

$$\underline{\underline{\frac{k}{L} \ll \rho C_p \sqrt{z}}}$$

Försumma termen, räkna ut  $T$   
sedan derivera uttrycket  $\underline{c}$  räkna  
ut alla termer för olika  $\underline{z} \in r$ ,  
se om termen var försumbar inom  
intervallet.

---

## Tentauppgifter MMIKT 2013 Maj –Numerik

4.

Lösningsförslag

1.)

$$\text{Ansätt } y(x) = y_1(x)$$

ger

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = y_2(x) \\ \frac{dy_2}{dx} = y_3(x) \\ \frac{dy_3}{dx} = y_3(x)y_2(x) - y_1^2(x) + e^x \end{cases}$$

2.) Identifiera att detta är en flerstegsmetod och förklara att det därmed föreligger ett uppstartsproblem vid implementeringen, vilket det inte gör för den implicita Euler metoden. Se boken kap 6.1.6

3.) Ansätt polynomet  $y = a_1 + a_2x + a_3x^2$ , derivera detta och implementera randvilkoren, och kollokationspunkten. Detta ger 3st ekvationer, lös för de tre koefficienterna för att finna den approximativa lösningen. Se kap6.2.3.

4.) Detaljerad lösning på detta problem finns i boken, kapitel 6.2.2.

$$4. \left( W_i = \frac{dy}{da_i} \right. \quad \text{Galerkin} \\ \left. \int_V R_N \frac{\partial \partial_{\text{dyn}}}{\partial a_i} dV = 0 \right)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} - 2k_1 c_A^2 - k_2 c_A = 0$$

$$c|_R = c_{yta}$$

$$\frac{dc}{dr} \Big|_{r=0} = 0$$

$$c = A + Br + Dr^2$$

$$\frac{dc}{dr} = B + 2Dr \Rightarrow \boxed{B=0}$$

$$c = A + Dr^2 \quad c_{yta} = A + DR^2$$

$$\boxed{A = c_{yta} - DR^2}$$

$$c = c_{yta} - DR^2 + Dr^2$$

a) Galerkin

$$\frac{dc}{dD} = -R^2 + r^2$$

$$\frac{\partial c}{\partial r} = 2Dr$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} = 2D$$

$$Res = 2D + \frac{2}{r} \cdot 2Dr - 2k_7 (c_{yta} - DR^2 + Dr^2)^2$$

$$- \frac{2k_7}{R} (c_{yta} - DR^2 + Dr^2)$$

$$\int_0^R Res (c_{yta} - R^2 + r^2) \cdot 4\pi r^2 dr = 0$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{D}}$$

b) Kollokation

$$\frac{1}{2} \text{ volym: } \frac{4\pi R^3}{3 \cdot 2} = \frac{4\pi r^3}{3} \Rightarrow$$

$$r = \frac{R}{\sqrt[3]{2}}$$

$$Res \left( r = \frac{R}{\sqrt[3]{2}} \right) = 0 \Rightarrow \underline{\underline{D}}$$

y Minsta kwadratmetoden

$$\int \text{Res} \frac{\partial \text{Res}}{\partial a_i} dV = 0$$

$$\frac{\partial \text{Res}}{\partial D} = 2 + \frac{2}{r} \cdot 2 \cdot r - 2k_2 \frac{(-R^2 + r^2)}{D} \cdot (-R^2 + r^2)$$

$$(-R^2 + r^2) - k_2 (-R^2 + r^2)$$

$$\int_0^R \text{Res} \frac{\partial \text{Res}}{\partial D} \cdot 4\pi r^2 dr = 0 \Rightarrow \underline{\underline{D}}$$

---

Uppgift 5

Kommentar: Den i texten givna  $\mathbf{J}^T\mathbf{J}$  och dess invers är inte helt konsistenta med den givna uppgiften. Lösningen här är baserad på de i uppgiftstexten angivna värdena, vilket gör att svaren presenterade här kan avvika mot vad som skulle erhållas vid en i alla steg korrekt lösning.

a) Vi behöver 95%-iga individuella konfidensintervall för  $\theta_1$  och  $\theta_3$  för att kunna avgöra om deras intervall innehåller värdet 0 resp. 1. Då gäller (från formelbladet)

$$b_p \pm se(b_p) t(n-p, \alpha/2)$$

Ur uppgiftstexten fås att antal parametrar  $p = 3$  och antal mätdata  $n = 9$ . Ur tabell fås  $t((9-3), 0.975) = 2.447$ . För att beräkna  $se$  så behövs en skattning av variansen

$$s^2 = \frac{SSE(\mathbf{b})}{n-p} = 0.3156 \Rightarrow s = 0.5617$$

Från formelbladet

$$se(b_p) = s \sqrt{\left\{ (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \right\}_{pp}} = \begin{matrix} 0.4299 \\ 0.0066 \\ 0.0096 \end{matrix}$$

Vilket ger att konfidensintervallen blir

$$1,04 \pm 1,05 \text{ resp. } 0,92 \pm 0,002.$$

Svar: Parameter 2 har inte 1,0 inom sitt intervall, vilket innebär att det inte går att påstå att den undersökta mjölken är Newtonsk.

b) Vi behöver ett sammansatt konfidensintervall med korrekt form. Det ges av (formelbladet)

$$SSE(\boldsymbol{\beta}) \leq SSE(\mathbf{b}) \left[ 1 + \frac{p}{n-p} F(p, n-p, \alpha) \right]$$

Från tabell  $F(3,6,0.95)=4,757$ , vilket ger att gränsen i högerledet blir 6,397, vilket klart innefattar det SSE vi får för rapportens parametrar.

Svar: Rapportens parametrar ligger inom ett konfidensintervall med korrekt form och approximativt 95 % konfidensgrad.

c) Vi behöver beräkna korrelationsmatrisen enligt den i uppgiften givna formeln. Det ger för korrelationen mellan parameter 2 och 3 värdet -0,995. Det innebär att parameter 2 och 3 är mycket starkt negativt korrelerade, dvs vi kan öka den ena och sänka den andra utan att förklaringsgraden minskas påtagligt. Grafiskt ger detta en mycket smal och långsträckt "konfidensellips" som "lutar åt höger".

d) Vi behöver här ett konfidensintervall för  $y$  i en given punkt. Det ges av

$$f(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\theta}^*) \pm s \sqrt{\mathbf{j}_0' (\mathbf{J}'\mathbf{J})^{-1} \mathbf{j}_0} t(n-p, \alpha/2)$$

där

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

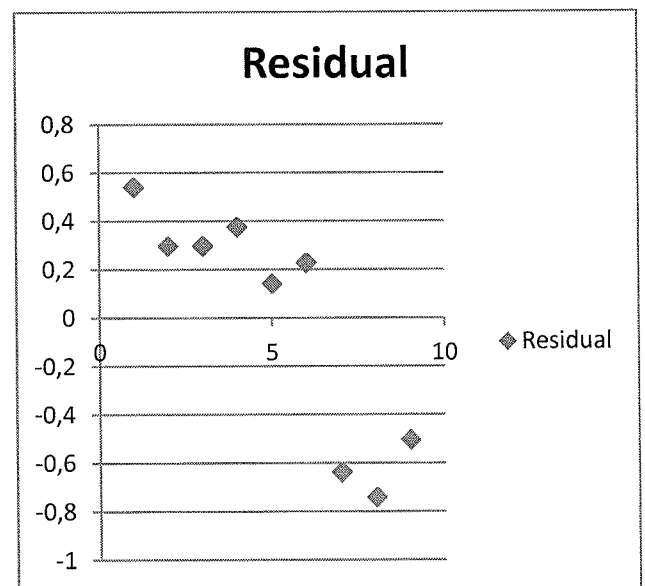
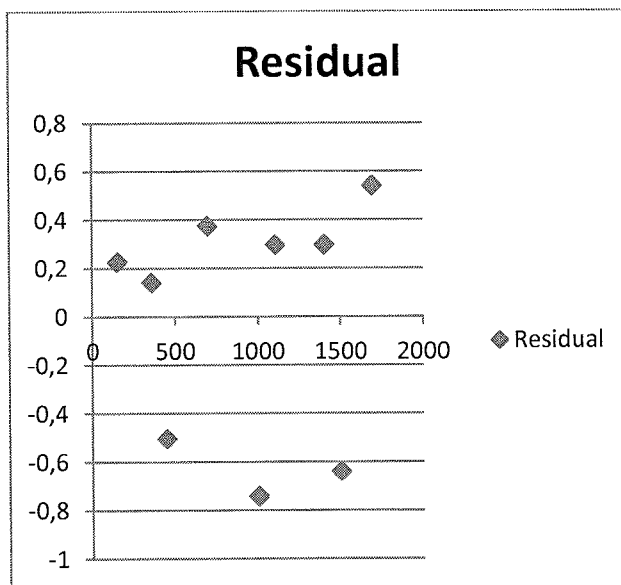
Vi behöver alltså derivatan av  $f$  (dvs  $y$ ) i punkten 1.

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} = \begin{matrix} 1 & 1 \\ \dot{\gamma}^{\beta_3} & \\ \theta_2 \dot{\gamma}^{\beta_3} \ln(\dot{\gamma}) & 381 \end{matrix} = 578$$

Sätter vi in dessa värden i formeln, så erhålls gränsen 0,833, dvs konfidensintervallet blir (funktionsvärdet för punkt 1 finns i uppgift 6)  $y = 56,1 \pm 0,833$ .

### Uppgift 6

a) Residualanalys är en lämplig metod för att finna beroenden som inte inkluderats på ett tillräckligt bra sätt i en modell. En plot av residualen mot skjuvhastigheten resp. försöksnr ger följande utseenden:



Som framgår av plotterna så finns inget påtagligt beroende av skjuvhastigheten, men däremot en mycket påtaglig trend med försöksnummer/tid. Det senare kan antingen vara en brist i modellen som kan behöva någon form av nästan linjärt tidsberoende, eller vara ett tecken på att det finns någon icke kontrollerad/uppmätt försöksbetingelse som ändrat sig mellan försöken.

b) Eftersom vi inte har upprepade försök göres analysen bäst mha residualanalys, där vi undersöker om spridningen mellan punkter är olika för olika förhållanden. De båda undersökningarna i a) indikerar hyggligt konstant varians. Vi kompletterar med en plot mot modellens beräknade värden, som inte heller visar på ojämn spridning.

