

Varför modellering?

- ▶ Utformning och uppskalning av kemiteknisk utrustning.
- ▶ Processstyrning.
- ▶ Optimering av processer och utrustning.
- ▶ Process-förståelse.
- ▶ Utvärdering och planering av försök.

Modellering görs både i molekylär skala och för hela system, och görs för både transienta och tidsinvarianta förlopp.

Kursen indelas i tre huvuddelar: ▶ Modellformulering och klassificering.
▶ Numeriska och överslagsmetoder
▶ Parameterestimering och residualanalys.

Klassificering

- ▶ Motsatspar
- ▶ Matematisk komplexitet
- ▶ Upplösning

Motsatspar

- ▶ Linjär / ickelinjär - Bättre lösbarhet för linjära modeller.
- ▶ Stationär / instationär - Instationärt vid uppstart, reglering m.m.
- ▶ Lumpad / distribuerad - Lumpad: Betraktar ej rumsvariation, "svart låda".
- ▶ Kontinuerlig / diskret - Beskrivs storheter kontinuerligt eller diskret?
- ▶ Deterministisk / stokastisk - Slumpmässigt beteende hos vissa egenskaper?
- ▶ Interpolation / extrapolation - Extrapolation: bestämning utanför mätområde.
- ▶ Teoretisk / empirisk - Olika metoder för att skapa grunden till en modell.
- ▶ Kopplad / okopplad - Samverkan mellan samband som används.

Matematisk komplexitet

- ▶ Tar hänsyn till differentialekvationerna som används i modellen.
- ▶ Klassificerar utifrån ekvationernas lösbarhet, både analytiskt och numeriskt.

Upplösning

Vilken tids- och rumsskala vill vi lösa problemet för?

Rumsskalor:

Molekylär
Mikroskopisk
Mesoskopisk
Makroskopisk
Megaskopisk



Ökande storlek