Modellformulering

Balanser

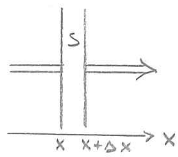
Ackumulation i systemet | Netto transport in i systemet | Nettoproduktion i systemet

Görs, för en definierad kontrollvolym, med avseende på rörelsemängd, energi, massa, entropi, antal.

Transportprocesser:

- Rörelsemängd $[Ns/m^2 \cdot s]$ – $\tau_{yx} = -\mu \frac{\partial v_x}{\partial y}$
- Värme $[J/m^2 \cdot s]$ – $q_x = -k \frac{\partial T}{\partial x}$
- Massa $[mol/m^2 \cdot s]$ – $J_{A,x} = -c D_{AB} \frac{\partial y_A}{\partial x}$
- Flöde $[m^3/m^2 \cdot s]$ – $q_x = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}$

Ex 1-D värmeledning + källterm S $[J/m^3 \cdot s]$



Ack: $\rho A \Delta x c_p \Delta T$

In: $(qA)|_x \Delta t$ Ut: $(qA)|_{x+\Delta x} \cdot \Delta t$ Prod: $S(A \cdot \Delta x)\Delta t$

$$\Rightarrow \rho c_p \Delta T (A\Delta x) = (qA)|_x \Delta t - (qA)|_{x+\Delta x} \Delta t + S(A\Delta x)\Delta t$$

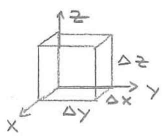
Om A är konstant kan A förkortas bort. Dela med $A \Delta x \Delta t \to 0$

$$\Rightarrow \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial x} + S \qquad \text{Sätt in } q = -k\frac{\partial T}{\partial x}$$

$$\Rightarrow \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(-k\frac{\partial T}{\partial x}\right) + S = k\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + S,$$ förutsatt att k är konstant.

$$\therefore \boxed{\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + S}$$, behöver 1 begynnelsevillkor och 2 randvillkor.

Ex 3-D masstransport, transient



Transportmekanismer: Diffusion och strömning.

$$\Rightarrow \underbrace{\Delta c_A(\Delta x \Delta y \Delta z)}_{\text{Ack}} = \underbrace{J_{A,x}|_x \Delta y \Delta z \Delta t}_{\text{Diff in, x}} - \underbrace{J_{A,x}|_{x+\Delta x} \cdot \Delta y \Delta z \Delta t}_{\text{Diff ut, x}} + \underbrace{(v_x c_A)|_x \Delta y \Delta z \Delta t}_{\text{Str. in, x}} - \underbrace{(v_x c_A)|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \Delta t}_{\text{Str. ut, x}} + \dots$$

$$+ \underbrace{R_A (\Delta x \Delta y \Delta z)\Delta t}_{\text{Prod}}$$

Dela med $\Delta x \Delta y \Delta z \cdot \Delta t \to 0$

Sätt in $J_{A,x} = -c D_{AB} \frac{\partial y_A}{\partial x}$ för att eliminera ena variabeln.

$\Rightarrow \dots \Rightarrow$

Alternativ: Utgå från generell transportekvation och stryk termer.

Populationsbalanser

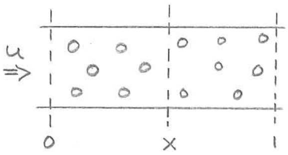
Balanser på antal med viss egenskap, t.ex massa, diameter, ålder.

Ex: Populationsbalans för partiklar med en viss storlek vid flockning.

$$\underbrace{\frac{dn_k}{dt}}_{\text{Ack. av part. med storlek } k.} = \frac{1}{2}\underbrace{\sum_{i+j=k}\alpha(i,j)\beta(i,j)\,n_i n_j}_{\text{Bildning av part. med storlek } k \text{ genom kollision.}} - \underbrace{\sum_{i=1}^{\infty}\alpha(i,k)\beta(i,k)\,n_i n_k}_{\text{Förbrukning av part. med storlek } k \text{ genom kollision.}} - \underbrace{\chi(k)\,n_k}_{\text{Sönderfall av part. med storlek } k} + \underbrace{\sum_{i>k}^{\infty}\chi(i)\,n_i}_{\text{Bildning av part. med storlek } k \text{ genom sönderfall.}}$$

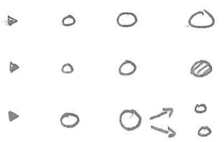
Egenskaper $p_1, p_2, p_3, \ldots$ ger en antalsdistribution $f(x, y, z, p_1, p_2, p_3, \ldots, p_n, t)$ där f är en frekvensfunktion. Talet $f(\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta p_1, \ldots, \Delta p_n, \Delta t)$ är andelen i volymen $\Delta x \Delta y \Delta z$ med egenskaper inom $\Delta p_1, \ldots, \Delta p_n$.

Ex



Celltillväxt i en flödesreaktor.

Beteenden:



Tillväxt

Död

Sönderfall

Balansera antal med massa m.

$$\underbrace{\Delta f\,(\Delta x \cdot A)\cdot \Delta m}_{\text{Ack}} = \underbrace{\left(fu|_x - fu|_{x+\Delta x}\right) A\,\Delta m\,\Delta t}_{\text{Netto inflöde pga strömn.}} + \underbrace{\left((fv)|_m - (fv)|_{m+\Delta m}\right)\Delta x A\,\Delta t}_{\text{Nettoändring pga tillväxt}} +$$

$$+ \underbrace{G\,(\Delta x\, A)\,\Delta m\,\Delta t}_{\text{Nettoproduktion}},$$

där $v = \dfrac{dm}{dt} = f(m)$ är en tillväxthastighet.