Modellförenklingar

LV4F1

- Fysiska och kemiska approximationer.
- Matematiska och numeriska approximationer.

Då kemitekniska processer ofta är mycket komplexa är förenklingar ett centralt begrepp vid modellering av dessa.

Modellbyggande

i) Starta med en avancerad, generell modell och ta bort delar som ej har en signifikant betydelse.

ii) Starta med ett fysikaliskt resonemang av de ingående fenomenen och skapa en mer detaljerad modell.

Varför behövs förenklingar?

- Navier-Stokes
- Kontinuitetsekvationen

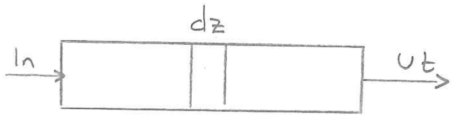
} Icke-linjära, kopplade PDE ⇒ Icke-analytiska lösningar.

- Turbulent flöde
- Storleksfördelning på katalysatorer

Verktyg för modellförenklingar

Uppskattning av derivator

Ex: Tubreaktor med axiell dispersion



$A \to B$

$$\underbrace{D_{ea}\cdot\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}}_{\text{Dispersion}} - \underbrace{v\frac{\partial c}{\partial z}}_{\text{Flöde}} - \underbrace{kc}_{\text{Reaktion}} = 0$$

RV I: $C_A(z=0) = C_{A0}$

RV II: $\left.\frac{\partial c}{\partial z}\right|_{z=L} = 0$ (Kan ifrågasättas)

Kan någon term i differentialekvationen försummas? Jämför storlekar!

Dimensionslös form: Sätt $y = c/c_{in}$, $x = z/L$

$$\Rightarrow D_{ea}\frac{c_{in}}{L^2}\cdot\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{c_{in}}{L}\frac{\partial y}{\partial x} - \frac{k\,y\,c_{in}}{v} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{D_{ea}}{vL}\cdot\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\partial y}{\partial x} - \frac{kyL}{v} = 0, \quad \frac{L}{v} = \tau$$

Approximation: $\frac{\partial c}{\partial z} \approx \frac{\Delta c}{\Delta z} \approx \frac{c_{in} - 0}{0 - L} = -\frac{c_{in}}{L} \Rightarrow \boxed{\frac{\partial y}{\partial x} \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} \approx \frac{1-0}{0-1} = -1}$

Approximation: $\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \approx \frac{\left.\frac{\partial c}{\partial z}\right|_{z+dz} - \left.\frac{\partial c}{\partial z}\right|_{z}}{dz} \approx \frac{\left.\frac{\Delta c}{\Delta z}\right|_{z=L} - \left.\frac{\Delta c}{\Delta z}\right|_{z=0}}{L} \approx \frac{0 - \left(-\frac{c_{in}}{L}\right)}{L} = \frac{c_{in}}{L^2}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \approx \frac{\left.\frac{\Delta y}{\Delta x}\right|_{x=1} - \left.\frac{\Delta y}{\Delta x}\right|_{x=0}}{1} \approx \frac{0-(-1)}{1} = 1}$$

Diffekv. kan approximeras till: $\frac{D_{ea}}{vL} + 1 - k\tau = 0$.

Första termen försummas om $\frac{D_{ea}}{vL} << 1$

$$\Rightarrow \frac{\partial y}{\partial x} + k\tau y = 0 \quad \Rightarrow y = e^{-k\tau x} \quad \Rightarrow \frac{\partial y}{\partial x} = -k\tau y \quad \Rightarrow \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = (k\tau)^2 y.$$

Vi behöver kontrollera om approximationerna gäller!

$k\tau$	$y_{ut}\|_{x=1}$	$-\frac{\partial y}{\partial x}\|_{x=0}$	$-\frac{\partial y}{\partial x}\|_{x=1}$	$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\|_{x=0}$	$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\|_{x=1}$
0,69	0,5	0,69	0,35	0,48	0,24
2,3	0,1	2,3	0,23	5,3	0,53
4,6	0,01	4,6	0,046	21,2	0,21

Är $\frac{D_{ea}}{vL} < 0{,}01$ tillräckligt för att försumma termen?

$k\tau$	$-\frac{\partial y}{\partial x}\|_{x=0}$	$-\frac{\partial y}{\partial x}\|_{x=1}$	$\frac{D_{ea}}{vL} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\|_{x=0}$	$\frac{D_{ea}}{vL} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\|_{x=1}$	
0,69	0,69	0,35	0,0048	0,0024	OK
2,3	2,3	0,23	0,053	0,0053	OK
4,6	4,6	0,046	0,212	0,0021	Nja

$\downarrow$ sämre approx

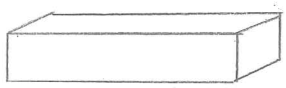
Jämför $\frac{D_{ea}}{vL} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$ mot $-\frac{\partial y}{\partial x}$ i punkterna $x=0$ och $x=1$

$\therefore$ Om $k\tau$ är ~ 4 eller större behöver alla termer inkluderas.

För omsättningsgrader $X < 0{,}1$ kan uttrycket förenklas.

Tidskonstanter

I en diffekvation $\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{\tau} v = f(t)$ är tidskonstanten τ inversen av den konstant som står framför v.



Ex: Diffusion i en platta

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

RV I: $c(z=0) = c_{in}$

RV II: $\frac{\partial c}{\partial z}\Big|_{z=L} = 0$

Jämför tidsderivatan med en annan term i dimensionslös form

Sätt $y = c/c_{in}$, $x = z/L$, $t_{dim} = t/\tau$

$$\Rightarrow \frac{c_{in}}{\tau} \frac{\partial y}{\partial t_{dim}} = D \frac{c_{in}}{L^2} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \quad \Rightarrow \frac{c_{in}}{\tau} = D \cdot \frac{c_{in}}{L^2} \quad \Rightarrow \tau = \frac{L^2}{D}$$

Alt: $c_{in} \frac{\partial y}{\partial t} = \frac{D c_{in}}{L^2} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \Rightarrow \frac{\partial y}{\partial t} = \frac{D}{L^2} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \Rightarrow \frac{1}{\tau} = \frac{D}{L^2} \Rightarrow \tau = \frac{L^2}{D}$

Det tar $\frac{L^2}{D}$ att fylla volymen $V = A \cdot L$. En långsam process ger en stor tidskonstant och det tar lång tid att nå steady-state. En snabb process ger en liten tidskonstant.

Om $t \gg \frac{L^2}{D}$ kan vi anta steady state.

Strategier för att förenkla matematiska modeller

1. Koppla isär ekvationer.
2. Reducera antalet oberoende variabler.
3. Steady-state -antagande.
4. Förenklade geometrier (symmetrier etc.)
5. Linjärisering
6. Försumma termer
7. Lösa för begränsade fall.

1. Koppla isär ekvationer

Ex: Seriereaktion $A \xrightarrow{r_1} B \xrightarrow{r_2} C$

Materialbalans A: $V \frac{dc_A}{dt} = q c_{Af} - q c_A - k_1(T) c_A V$ (1)

B: $V \frac{dc_B}{dt} = q c_{Bf} - q c_B + k_1(T) c_A V - k_2(T) c_B V$ (2)

C: $V \frac{dc_C}{dt} = q c_{Cf} - q c_C + k_2(T) c_B V$ (3)

Värmebalans: $\rho c_p V \frac{dT}{dt} = q \rho c_p (T_{in} - T) + k_1(T) c_A V(-\Delta H_1) + k_2(T) c_B V(-\Delta H_2)$ (4)

Om temp. är konstant $\Rightarrow$ (1) ger $c_A(t) \Rightarrow$ (2) ger $c_B(t)$

$\Rightarrow$ (3) ger $c_C(t)$