Chemie, Technologie en Samenleving

Scheikunde in het groot

- chemische industrie en fabrieken
- toepassen op “de omgeving”

Scheikundige Technologie

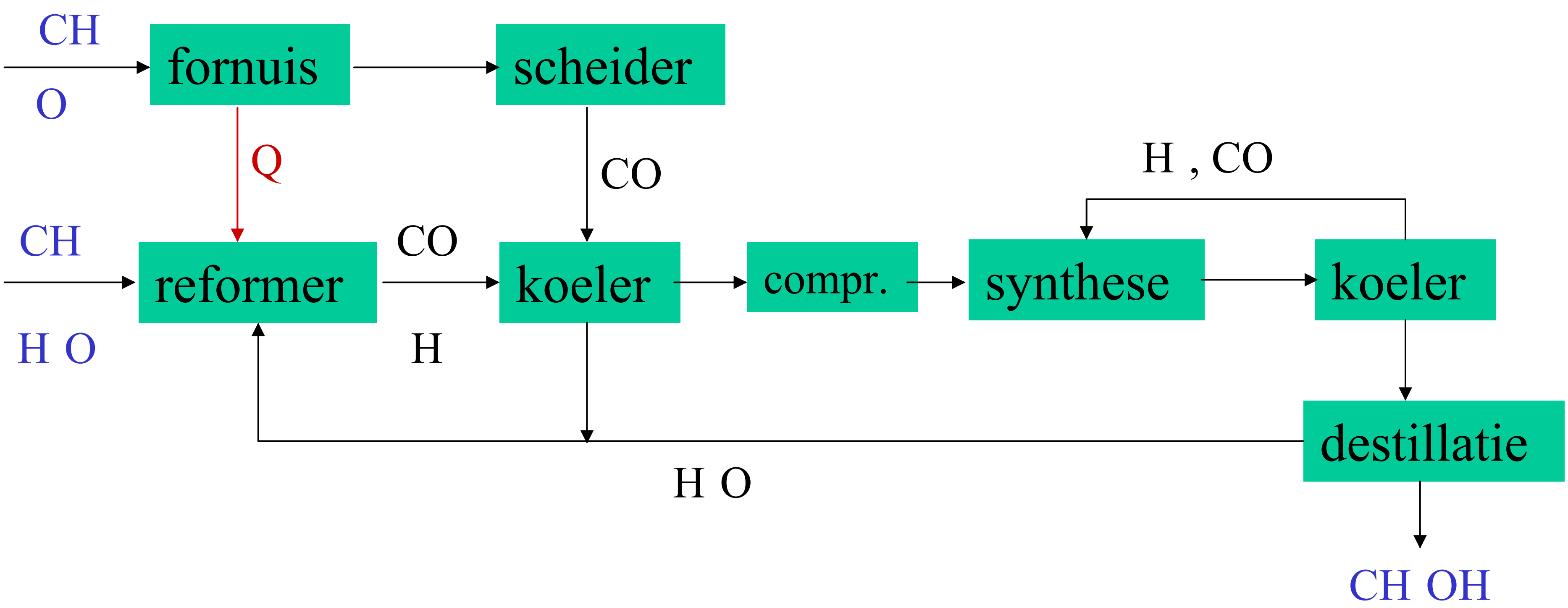
• Stroming en menging	(stromingsleer)
• warmte overdracht	(warmteleer)
• stofuitwisseling	(stofoverdracht)
• reactoren	(reactorkunde)
• scheidingsapparatuur	(scheidingstechno- logie)

B.v. Methanolfabriek

de theorie:

$$CO \;+ 3\,H \longrightarrow CH\;OH + H\;O$$

de praktijk:

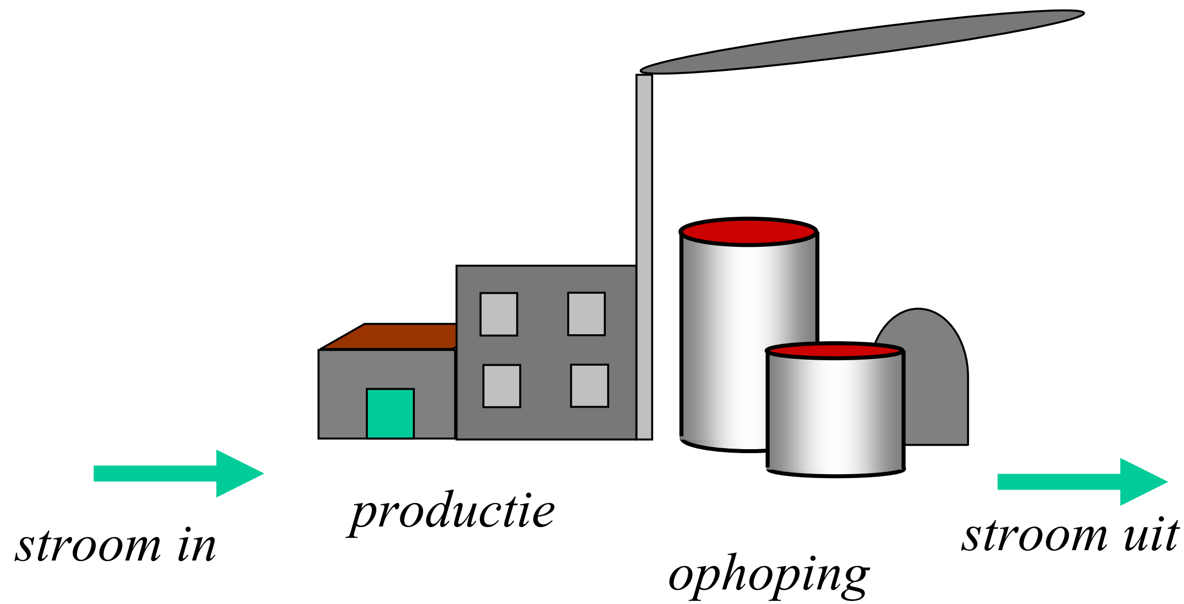


Balansen

$$\frac{\text{ophoping}}{\text{tijdseenheid}} = \text{stroom}_{\text{in}} - \text{stroom}_{\text{uit}} + \text{productie}$$

Geldt voor:

- fabrieken
- demografieën
- stofoverdracht
- warmteoverdracht
- stroming
- economieën



In formulevorm:

$$\boxed{V\frac{dX}{dt} = \Phi_{in} X_{in} - \Phi_{uit} X_{uit} + RV}$$

Met X als:

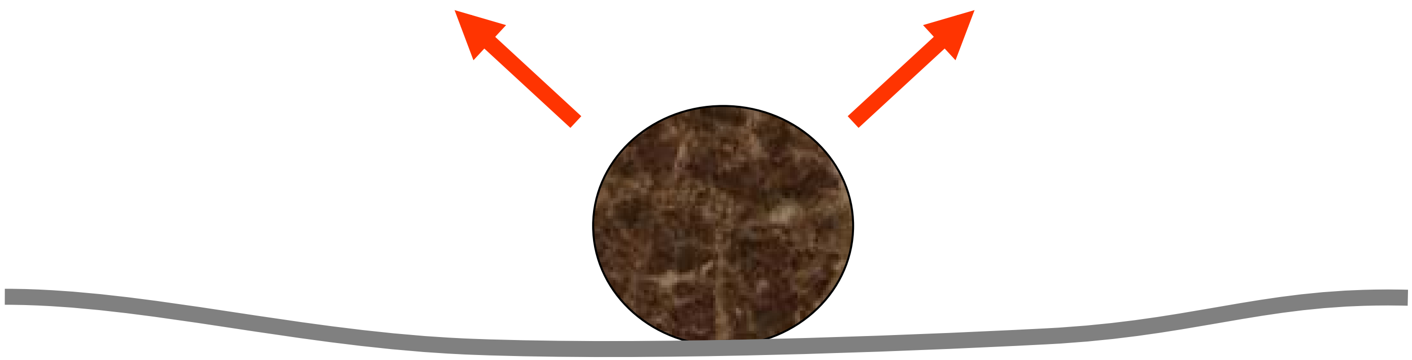
impuls	(stromingsleer)
enthalpie	(warmteleer)
molaire concentratie	(stofoverdracht)

en:

V:	volume	[m^3]
Φ:	volumetrische stroming	[m^3/s]
R:	volumetrische productie	[$1/m^3.s$]

Snelheden

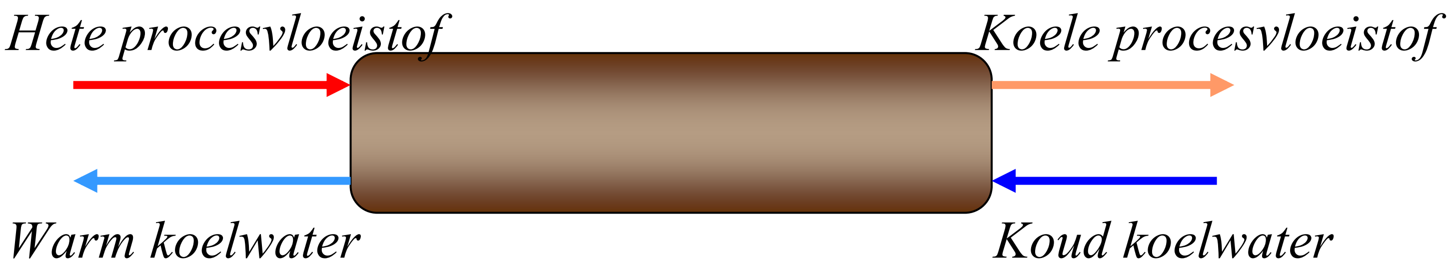
De snelheid waarmee een evenwicht zich instelt is belangrijk voor de hoeveelheid, die overgedragen wordt.



de bitterbal

harder blazen $\Rightarrow$ minder kans om je mond te branden

warmtewisselaar



- Hoeveel warmte moet ik kwijt?
- Hoe snel wordt de warmte overgedragen?
- Hoeveel warmte wisselt per m^2 oppervlak?
- Hoeveel m^2 warmtewisselaar heb ik nodig?

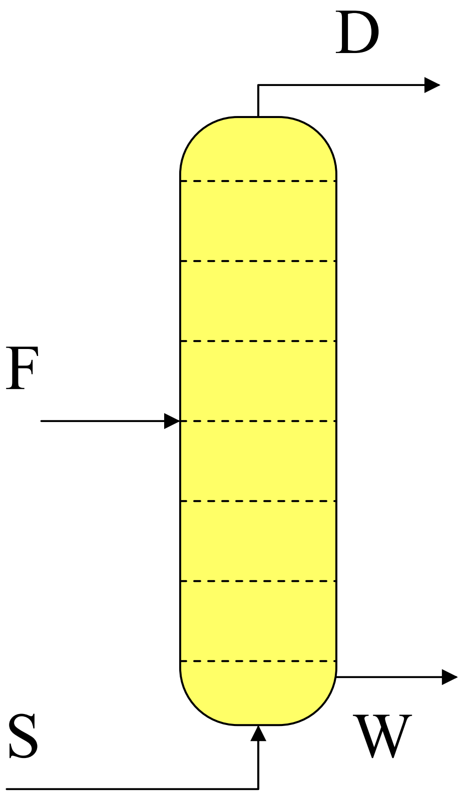
Wat gaan we doen met de balansen?

Ontwerp van:

- destillatiekolom *(massabalans)*
- waterleiding met pomp *(energiebalans)*
- bocht in een leiding *(impulsbalans)*

De stofbalans (1)

ontwerp van een ethanol-water scheider



Gegeven:

F: 40% ethanol + 60% water

D: 90% ethanol

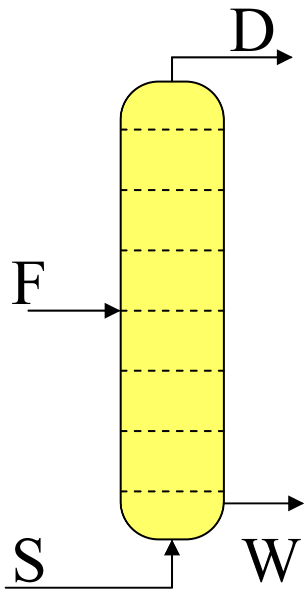
W: 0,1% ethanol

S: even groot als F

Gevraagd:

D/W

De stofbalans (2)



Ethanol + water:

$$F + S = D + W$$

of:

$$2F = D + W$$

ethanol:

$$0{,}4\ F + 0\ S = 0{,}9\ D + 0{,}001\ W$$

oplossen:

$$D = 0{,}44\ F$$

$$W = 1{,}56\ F$$

dus:

$$\frac{D}{W} = \frac{0{,}44}{1{,}56} = 0{,}28$$

De energiebalans (1)

Algemeen: thermische energie, potentiële energie, kinetische energie, magnetische energie, elektrische energie, drukenergie

In ons vak:

- enthalpie per massa $H=u+p/\rho$
- kinetische energie per massa $v^2/\ \rho$
- potentiële energie gh
- arbeidsstroom (vermogen) Φ
- warmtestroom Φ

De energiebalans (2)

In formulevorm (in massa eenheden):

$$\frac{d(mX)}{dt} = \Phi_{m,in} X_{in} - \Phi_{m,uit} X_{uit} + R_m m$$

$$\frac{dE}{dt} = \Phi_{m,i}\left[u_i + \frac{p_i}{\rho} + \frac{v_i^{\,2}}{2} + gh_i\right] - \Phi_{m,u}\left[u_u + \frac{p_u}{\rho} + \frac{v_u^{\,2}}{2} + gh_u\right] - \Phi_{w,u} + \Phi_A$$

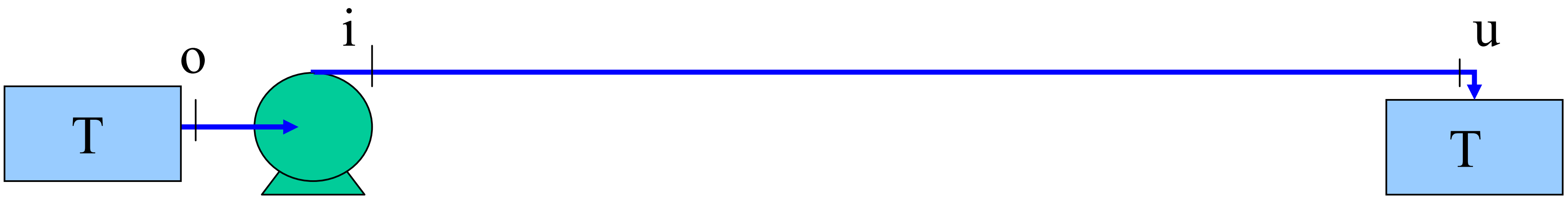
stationair:

$$0 = \Phi_m\left[u_i + \frac{p_i}{\rho} + \frac{v_i^{\,2}}{2} + gh_i\right] - \Phi_m\left[u_u + \frac{p_u}{\rho} + \frac{v_u^{\,2}}{2} + gh_u\right] - \Phi_{w,u} + \Phi_A$$

in *uit* *warmteverlies*

pompenergie

Een waterleiding



gegevens:

$\Delta p = 2.10^5$ Pa

$\Phi = 1$ kg/s

$\rho = 10^3$ kg/m^3

gevraagd:

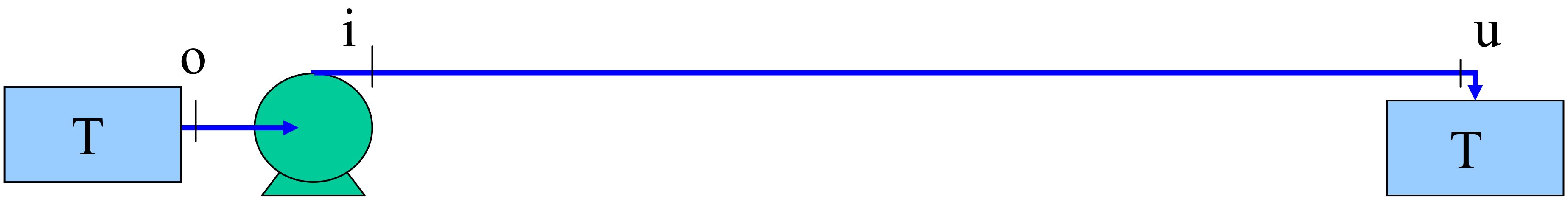
opwarming en
pompvermogen

$$0 = \cancel{\Phi}_m \left[u_i + \frac{p_i}{\rho} + \cancel{\frac{v_i^2}{2}} + \cancel{gh_i} \right] - \cancel{\Phi}_m \left[u_u + \frac{p_u}{\rho} + \cancel{\frac{v_u^2}{2}} + \cancel{gh_u} \right]$$

$$0 = \left[u_i + \frac{p_i}{\rho} \right] - \left[u_u + \frac{p_u}{\rho} \right] \Rightarrow u_u - u_i = c_p \left(T_u - T_i \right) = \frac{p_i - p_u}{\rho}$$

$$\boxed{T_u - T_i = \frac{p_i - p_u}{c_p \rho} = \frac{2.10^5}{4{,}2.10^3 * 10^3} = 0{,}048\ {}^0C}$$

En nu de pomp nog!



$$0 = \Phi_m \left[u_0 + \cancel{\frac{p_0}{\rho}} + \cancel{\frac{v_0^2}{2}} + \cancel{gh_0} \right] - \Phi_m \left[u_u + \cancel{\frac{p}{\rho}} + \cancel{\frac{v_u^2}{2}} + \cancel{gh_u} \right] \cancel{- \Phi_W} + \Phi_A$$

$$\Phi_A = \Phi_m \left[u_u - u_i \right] = \Phi_m \left[\frac{p_i - p_u}{\rho} \right]$$

$$\boxed{\Phi_A = 1 . \frac{2.10^5}{10^3} = 200W}$$

De impulsbalans

uitbreiding van de tweede wet van Newton:

Voor een vast lichaam:

$$\sum K_x = \frac{d\left(Mv_x\right)}{dt}, \sum K_y = \frac{d\left(Mv_y\right)}{dt}, \sum K_z = \frac{d\left(Mv_z\right)}{dt}$$

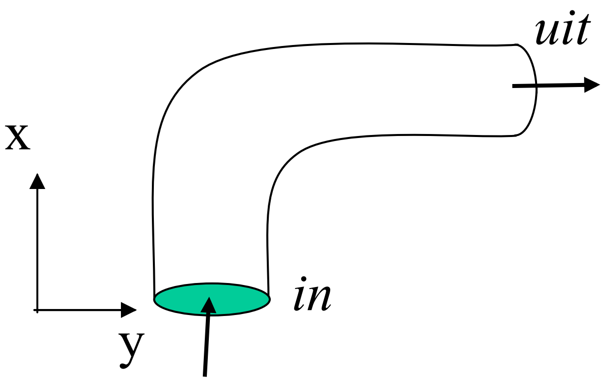
Voor een vloeistof:

$$\frac{d\left(Mv_x\right)}{dt} = \Phi_{m,in} v_{x,in} - \Phi_{m,uit} v_{x,uit} + \sum K_x$$

$$\frac{d\left(Mv_y\right)}{dt} = \Phi_{m,in} v_{y,in} - \Phi_{m,uit} v_{y,uit} + \sum K_y$$

$$\frac{d\left(Mv_z\right)}{dt} = \Phi_{m,in} v_{z,in} - \Phi_{m,uit} v_{z,uit} + \sum K_z$$

Een bocht in een pijp



Stap 1:

$$\cancel{\frac{d\left(Mv_x\right)}{dt}} = \Phi_{m,in} v_{x,in} - \cancel{\Phi_{m,uit} v_{x,uit}} + \sum K_x$$

$$\cancel{\frac{d\left(Mv_y\right)}{dt}} = \cancel{\Phi_{m,in} v_{y,in}} - \Phi_{m,uit} v_{y,uit} + \sum K_y$$

Stap 2:

$$\sum K_x = \Phi_m v = \left(\rho F v\right) v = \rho F v^2$$

$$\sum K_y = -\Phi_m v = -\left(\rho F v\right) v = -\rho F v^2$$

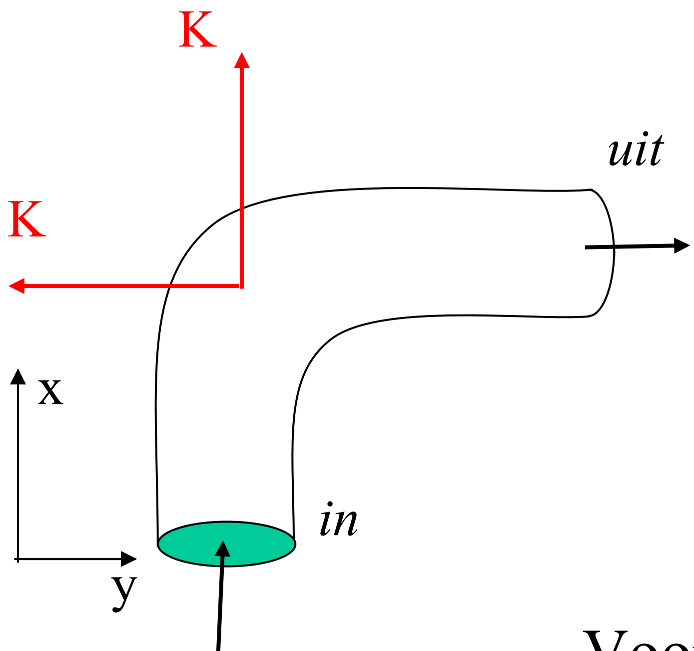
Stap 3:

$$\sum K_x = -K_{x,w-f} + pF$$

$$\sum K_y = K_{x,w-f} - pF$$

Hoe sterk moet de ophanging zijn?

De bocht in een pijp



$$K_{x,f-w} = -K_{x,w-f} = \rho v^2 F + pF$$

$$K_{y,f-w} = -K_{y,w-f} = -\rho v^2 F - pF$$

Voor gelijke F:

$$K_{f-w} = F\sqrt{2}\left(\rho v^2 + p\right)$$

onder 45⁰

Stromen

$$\frac{\text{ophoping}}{\text{tijdseenhe id}} = \text{stroom}_{\text{in}} - \text{stroom}_{\text{uit}} + \text{productie}$$

Twee soorten stromen:

- Convectief transport

  de stroming neemt impuls, warmte en stof mee

- Moleculair transport

  transport door moleculaire interacties

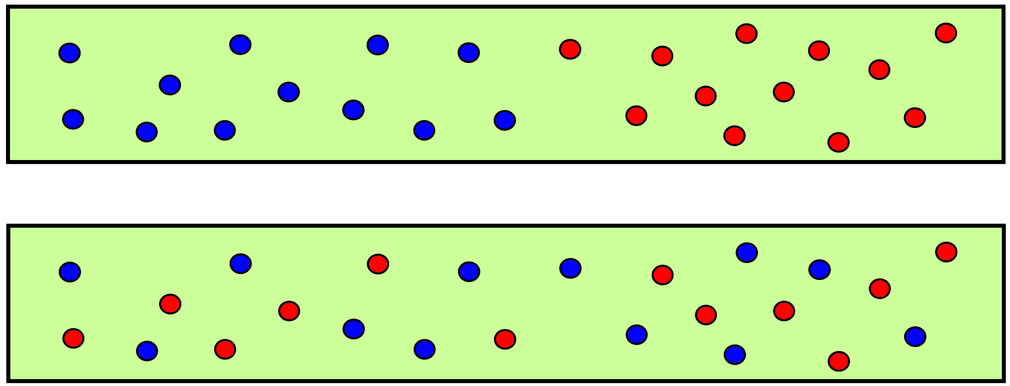
  - diffusie: moleculaire stoftransport
  - geleiding: moleculair warmtetransport
  - inwendige wrijving: moleculair impulstransport

Stoftransport

moleculaire diffusie

$t = 0$

$t \to \infty$



Massatransport evenredig met:

- concentratiegradient
- moleculaire eigenschappen

  (vrije weglengte, moleculaire snelheid)
- oppervlak

Wet van Fick

$$\Phi''_{mA,x} = -D_A \frac{d\rho_A}{dx}$$

$$D_A \approx \frac{1}{3}\overline{v_m}.\bar{l} \qquad (\mathrm{m^2/s})$$

Warmtetransport

Evenredig met:

- oppervlak
- temperatuurgradient
- warmtegeleidingsvermogen λ (W/mK)

<u>Wet van Fourier</u>

$$\Phi''_{W,x} = -\lambda \frac{dT}{dx}$$

Evenredig met:

- oppervlak
- enthalpiegradient
- warmtevereffeningscoëfficiënt a (m²/s)

(bij constante ρ en C)

$$\Phi''_{W,x} = -a \frac{d\left(\rho C_p T\right)}{dx}$$

$$\lambda = a \rho C_p$$

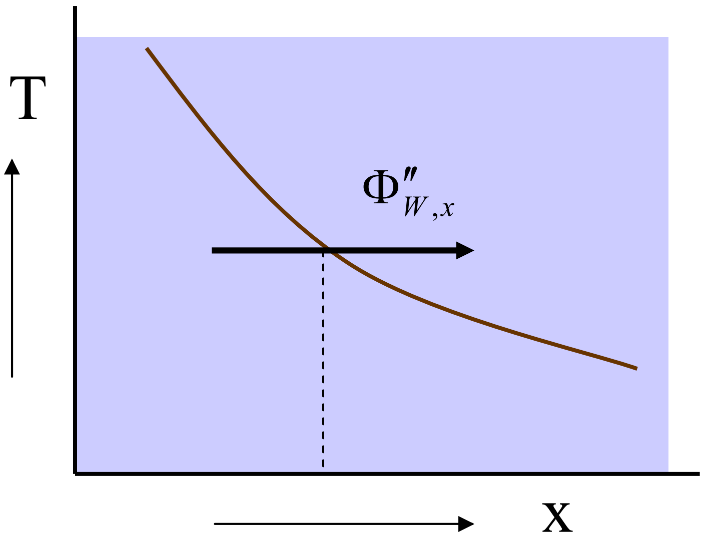
Warmte en stof

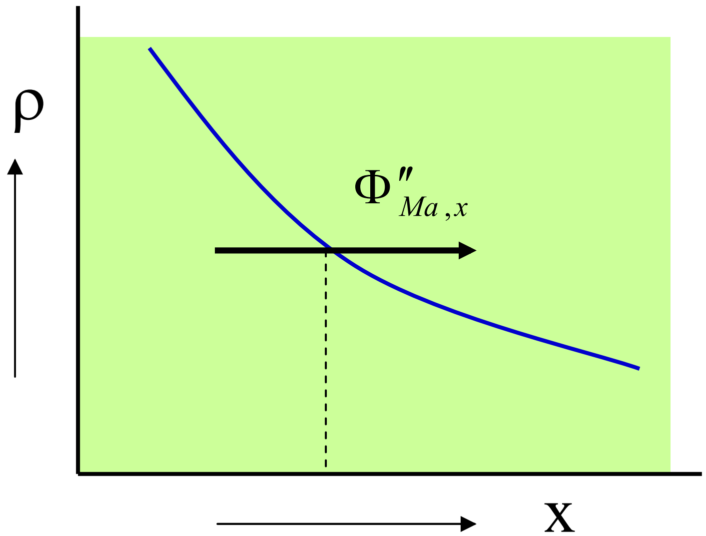
vergelijk:

$$\Phi''_{W,x} = -\lambda \frac{dT}{dx}$$

$$\Phi''_{mA,x} = -D_A \frac{d\rho_A}{dx}$$

handig:
zelfde vorm van de vergelijkingen, dus bij dezelfde randvoorwaarden: dezelfde oplossingen



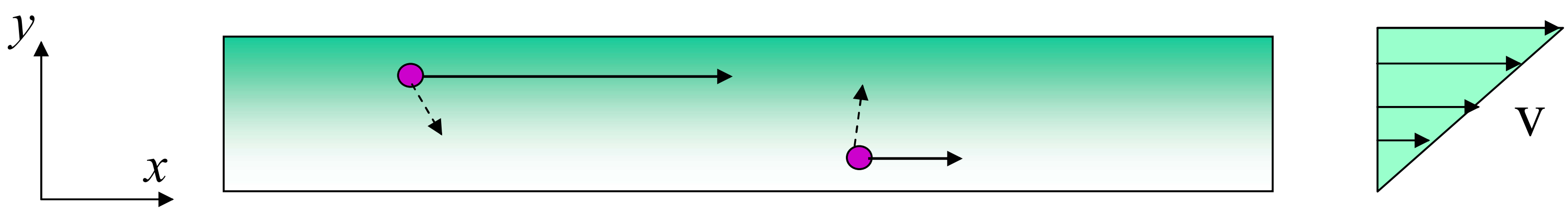


Maar nu impulstransport

impuls: m.v

impuls per volume-eenheid: ρ.v

één-dimensionale stroming in de x-richting:

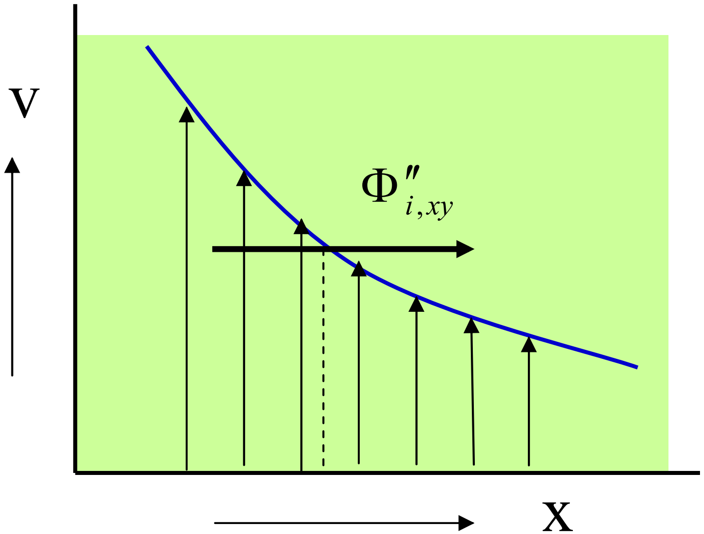


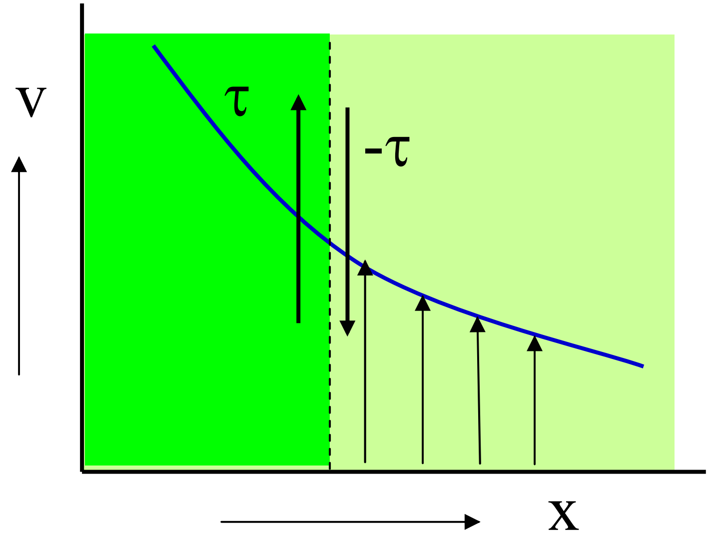
$$\Phi''_{i,xy} = -\eta \frac{dv_y}{dx} \qquad \text{of:} \qquad \Phi''_{i,xy} = -\nu \frac{d\rho v_y}{dx}$$

η: dynamische viscositeit (Pa.s)

ν: kinematische viscositeit (m^2/s)

Inwendige wrijving





$$\tau_{xy} = -\eta \frac{dv_y}{dx} = -\nu \frac{d(\rho v_y)}{dx}$$

Dimensie analyse

stelling 1:

in de technologie bestaat een antwoord
uit een getal en een dimensie

stelling 2:

een vergelijking moet dimensioneel homogeen zijn

afspraak:

wij gebruiken (zoveel mogelijk) het
***S**ysteme **I**nternationale (SI stelsel)*

Grondeenheden:

meter (m), kilogram (kg), seconde (s), Kelvin (K), mol (mol)

Afgeleide grootheden:

Newton (N), Pascal (Pa), Watt (W), Joule (J)

Dimensionele homogeniteit

Stroming door een buis:

$$\Phi_M = \pi R^2 \rho < v >$$

$$\left[\frac{kg}{s}\right] = \left[\frac{kg}{\cancel{m^3}} \cdot \frac{\cancel{m}}{s} . \cancel{m^2}\right]$$

Klopt!

Adiabatische temperatuurverhoging bij reactie:

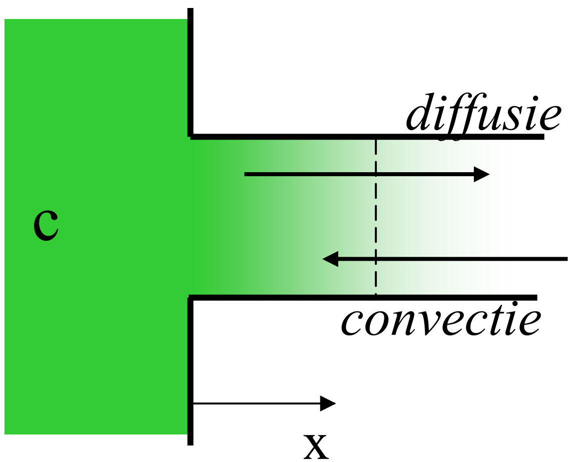
$$\Delta T = \frac{\Delta H}{\rho . C_p}$$

$$[K] = \left[\frac{\cancel{J} / \cancel{m^3}}{\cancel{kg} / \cancel{m^3} . \cancel{J} / \cancel{kg} K}\right]$$

Klopt!

Tip: goede controlemogelijkheid bij tentamens!

Diffusie voorbeeld



$$c = f(x, c_0, v, D)$$

$$[mol] = f\left[m, mol, \frac{m}{s}, \frac{m^2}{s}\right]$$

mol elimineren

$$\frac{c}{c_0} = f(x, v, D)$$

$$[-] = f\left[m, \frac{m}{s}, \frac{m^2}{s}\right]$$

s elimineren

$$\frac{c}{c_0} = f\left(x, \frac{v}{D}\right)$$

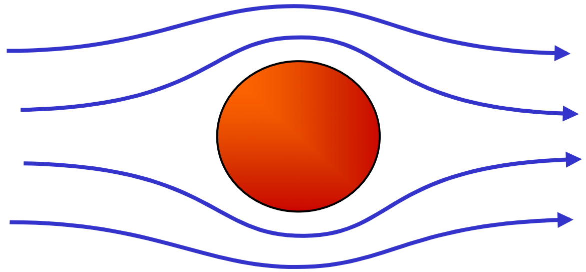
$$[-] = f\left[m, \frac{1}{m}\right]$$

m elimineren

$$\frac{c}{c_0} = f\left(\frac{v.x}{D}\right)$$

$$[-] = f[-]$$

Kracht op een omstroomde bol (1)



$$K = f\left(D_u, v_r, \rho, \eta\right)$$

Iedere functie moet dimensioneel homogeen zijn, dus ook:

$$K = D_u^a \times v_r^b \times \rho^c \times \eta^d \,(\times getal)$$

$$K : [N] = \left[\frac{LM}{T}\right] \qquad D_u : [L] \qquad v_r : \left[\frac{L}{T}\right]$$

$$\rho : \left[\frac{M}{L^3}\right] \qquad \eta : [Pa.s] = \left[\frac{M}{LT}\right]$$

$$\boxed{\left[\frac{LM}{T^2}\right] = [L]^a \times \left[\frac{L}{T}\right]^b \times \left[\frac{M}{L^3}\right]^c \times \left[\frac{M}{LT}\right]^d}$$

Kracht op een omstroomde bol (2)

$$\left[\frac{LM}{T^2}\right] = [L]^a \times \left[\frac{L}{T}\right]^b \times \left[\frac{M}{L^3}\right]^c \times \left[\frac{M}{LT}\right]^d$$

lengte:	$L = L^a . L^b . L^{-3c} . L^{-d}$	of	$1 = a + b - 3c - d$
tijd:	$T^{-2} = T^0 . T^{-b} . T^0 . T^{-d}$	of	$-2 = \quad -b \quad -d$
massa:	$M = M^0 . M^0 . M^c . M^d$	of	$1 = \quad c + d$

$$\left.\begin{aligned} a &= 2-d \\ b &= 2-d \\ c &= 2-d \end{aligned}\right\} \qquad K = D_u^{(2-d)} v_r^{(2-d)} \rho^{(1-d)} \eta^d \times getal$$

Kracht op een omstroomde bol (3)

$$K = D_u^{(2-d)} v_r^{(2-d)} \rho^{(1-d)} \eta^d \times getal$$

$$\frac{K}{\rho v_r^2 D_u^2} = \left(\frac{\eta}{\rho v_r D_u}\right)^d \times getal \quad \Rightarrow \quad \frac{K}{\rho v_r^2 D_u^2} = f\left(\frac{\eta}{\rho v_r D_u}\right)$$

$$\frac{\rho v_r D_u}{\eta} = \mathrm{Re} \qquad \text{(Reynolds)}$$

dus

$$\frac{\mathrm{K}}{\rho \mathrm{v}_\mathrm{r}^2 D_u^2} = f(\mathrm{Re})$$

Aantal dimensieloze groepen

π-theorema van Buckingham:
aantal dimensieloze groepen is aantal parameters minus aantal grondeenheden

Controle van het bol probleem:

parameters:	K, v , D , ρ, η	5
grondeenheden:	L, T, M	<u>3</u>
aantal kentallen:		2

Fysische interpretatie (1)

Kracht op een omstroomde bol

Lage snelheden:

K onafhankelijk van ρ

dus d = 1

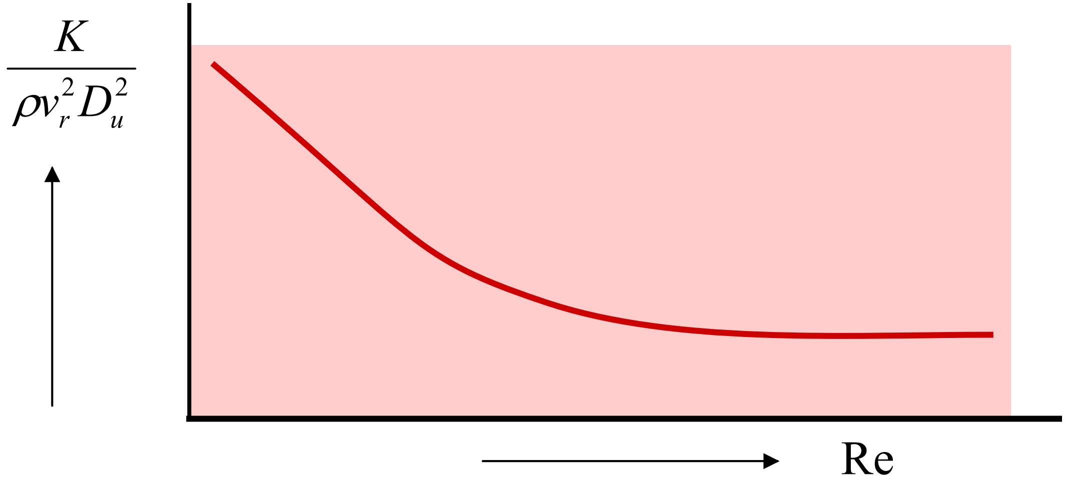
$$\frac{K}{\eta v_r D_u} = const.$$

Hoge snelheden:

K onafhankelijk van η

dus d = 0

$$\frac{K}{\rho v_r^2 D_u^2} = const$$



Fysische interpretatie (2)

$$\frac{K}{\rho v_r^2 D_u^2} = f\left(\frac{\rho v_r D_u}{\eta}\right) \quad \Rightarrow \quad \frac{K/D_u^2}{\rho v_r^2} = f\left(\frac{\rho v_r{}^2}{\eta\, v_r / D_u}\right)$$

$$\frac{drukkrachten}{traagheids\ krachten} = f\left(\frac{traagheids\ krachten}{visceuze\ krachten}\right)$$

$$\text{dus}: \quad \mathrm{Re} = \left(\frac{traagheids\ krachten}{visceuze\ krachten}\right)$$

buisstroming: $\mathrm{Re} > 4000$ turbulente stroming

$\mathrm{Re} < 2100$ laminaire stroming

Het braden van een kalkoen (1)

Gegeven:

•*grillen van een kip van 1 kg duurt 2 uur*

•*een kalkoen weegt 3 kg*

Gevraagd:

griltijd kalkoen

$$t = f\left(T_0, T_k, a, D\right)$$

$$\left[T\right] = f\left[\theta, \theta, \frac{m^2}{s}, m\right]$$

$$ofwel:$$

$$\frac{at}{D^2} = f\left(\frac{T_o}{T_k}\right)$$

$$dus:$$

$$\left(\frac{at}{D^2}\right)_{kip} = \left(\frac{at}{D^2}\right)_{kalkoen}$$

Het braden van een kalkoen (2)

$$\left(\frac{at}{D^2}\right)_{kip} = \left(\frac{at}{D^2}\right)_{kalkoen}$$

$$a_{kip} = a_{kalkoen}$$

$$\frac{t_{kalkoen}}{t_{kip}} = \left(\frac{D_{kalkoen}}{D_{kip}}\right)^2$$

$$M \approx V \approx D^3$$

$$dus:$$

$$\frac{t_{kalkoen}}{t_{kip}} = \left(\frac{M_{kalkoen}}{M_{kip}}\right)^{\frac{2}{3}}$$

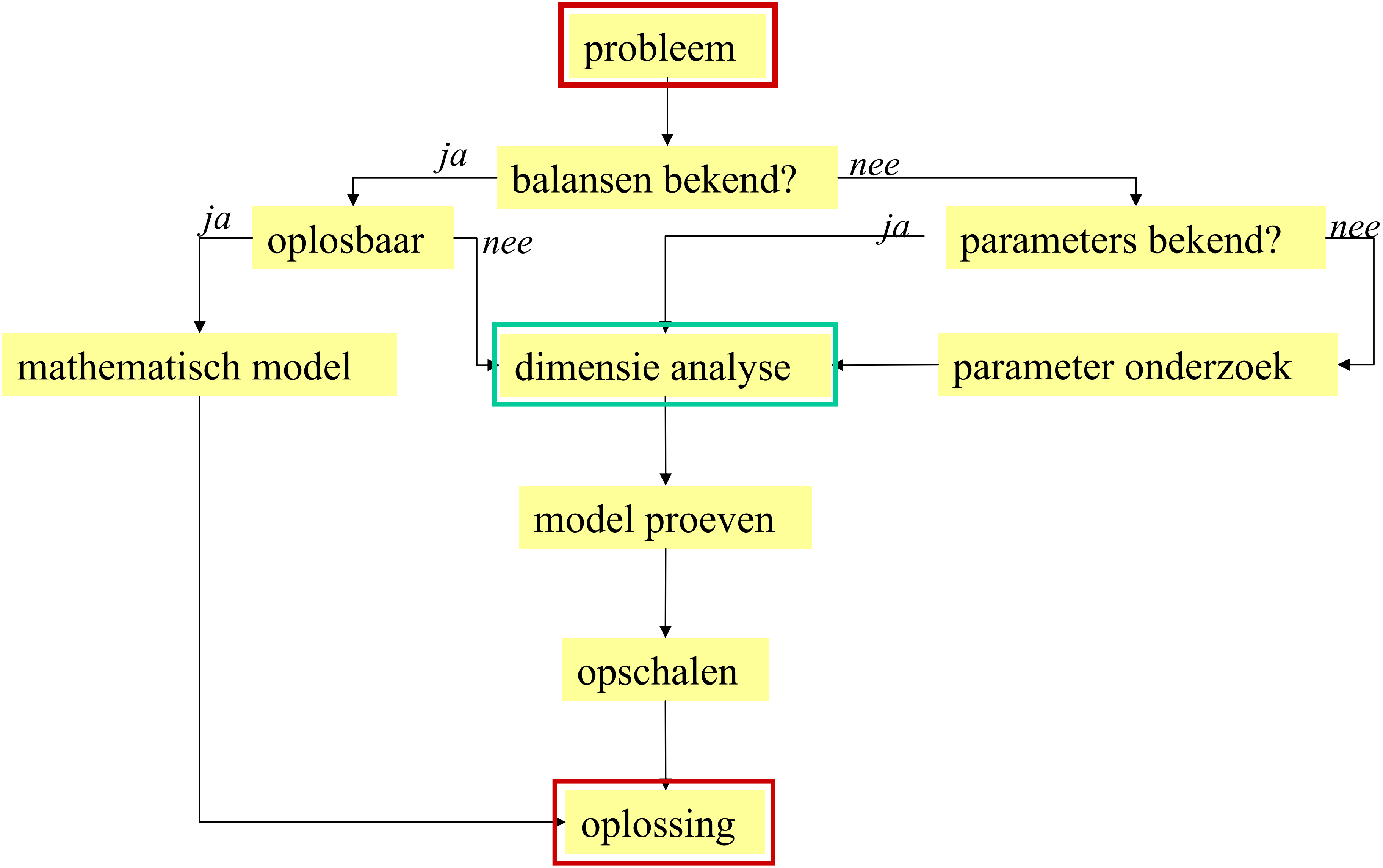
Ergo:
als het braden van een kip van 1 kg 2 uur duurt, duurt het braden van een kalkoen van 3 kg:

t = 2 * $(3/1)^{2/3}$ = 4,16 uur
= 4 uur en 10 minuten

Waarom dimensieanalyse?

- *het probleem wordt overzichtelijker*
- *er zijn minder variabelen (parameterreductie)*
- *randvoorwaarden worden eenvoudiger*
- *afweging van effecten*
- *opschalen van laboratorium naar productie*

Probleemoplossen



Samenvatting

- Vergelijkingen moeten dimensioneel homogeen zijn
- druk alle parameters uit in basisdimensies
- stel een coëfficiënten vergelijking op
- los deze vergelijking op
- aantal kentallen = aantal parameters - aantal basisdimensies