Stofstromen

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

Twee soorten stromen:

- Convectief transport

  de stroming neemt materiaal mee
- Moleculair transport

  transport door moleculaire interacties

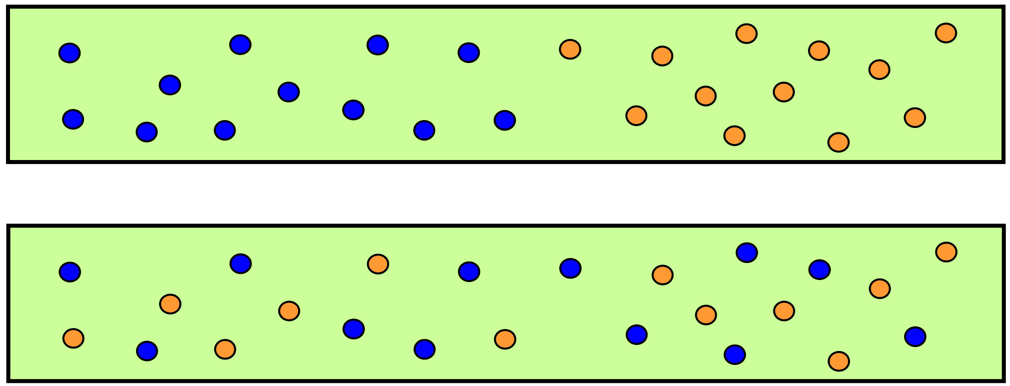
diffusie: moleculaire stoftransport

Stoftransport

moleculaire diffusie

$t = 0$

$t \rightarrow \infty$



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)

Wet van Fourier

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

Evenredig met:
- oppervlak
- enthalpiegradient
- warmtevereffeningscoëfficiënt a (m^2/s)

(bij constante ρ en C)

Wet van Fick

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

$$\lambda = a\rho C_p$$

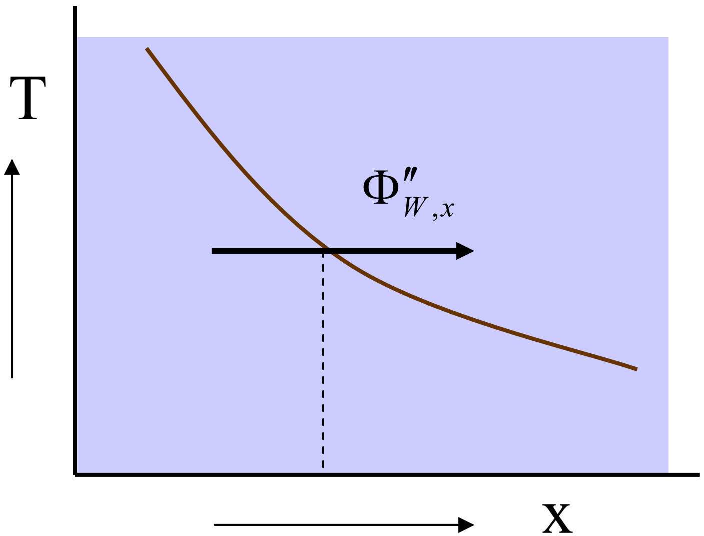
Warmte en stof

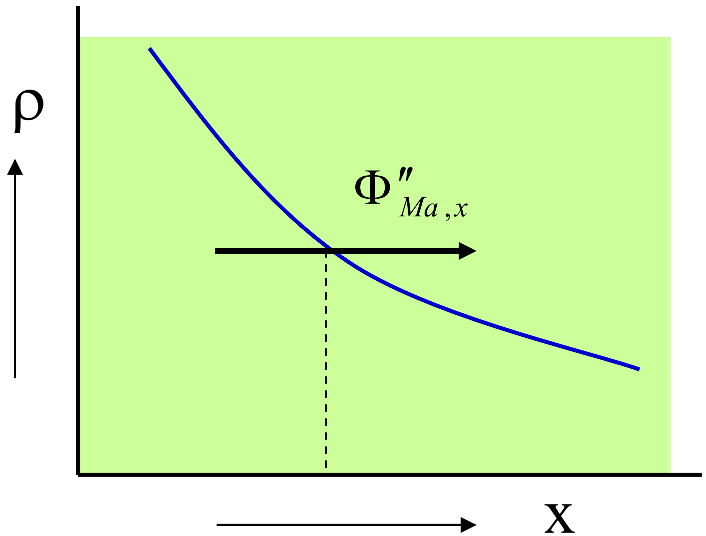
vergelijk:

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

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

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





Stofoverdracht en diffusie

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

Met X als:

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

en:

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

Warmte vs stof transport

warmtetransport

$$V\frac{dE}{dt} = \Phi_{m,in}E_{in} - \Phi_{m,uit}E_{uit} + qV$$

$en:$

$$\Phi''_w = -a\frac{d\left(\rho c_p T\right)}{dx} \text{ (moleculair transport)}$$

$en:$

$$\Phi''_w = v\rho c_p T \text{ (convectief transport)}$$

met E = $\rho c_p T$

stoftransport

$$V\frac{dc_A}{dt} = \Phi_{m,in}c_{Ain} - \Phi_{m,uit}c_{Auit} + RV$$

$en:$

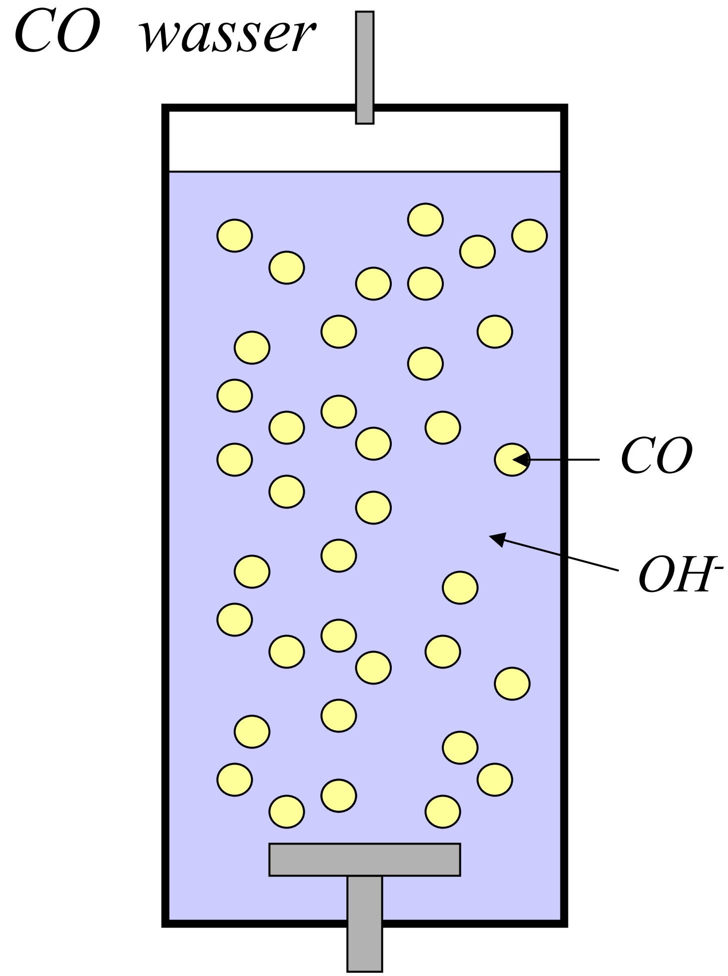
$$\Phi''_{mol} = -D\frac{dc_A}{dx} \text{ (moleculair transport)}$$

$en:$

$$\Phi''_{mol} = v.c_A \text{ (convectief transport)}$$

Verschillen met warmtetransport

- Productie van materie door chemische reacties
- grensvlak is bewegelijk
- overdragend oppervlak meestal niet bekend
- concentratiesprong aan het grensvlak
- beïnvloeding van diffunderende componenten
- diffusiecoefficient erg klein



Waarom werken wij graag in molconcentraties?

Wederzijdse diffusie, b.v.
katalytische omzetting A→B <u>in de gasfase</u>

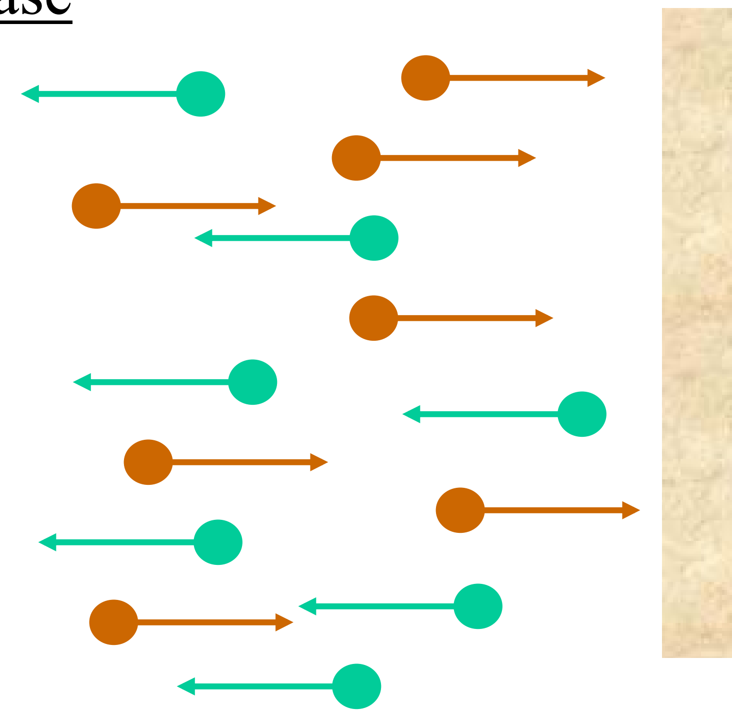
$$\Phi''_{mol,A} = -D_{AB}\frac{dc_A}{dx}$$

$$\Phi''_{mol,B} = -D_{BA}\frac{dc_B}{dx}$$

$$\Phi''_{mol,A} + \Phi''_{mol,B} = 0$$

$$\left.\begin{aligned} D_{AB}\frac{dc_A}{dx} + D_{AB}\frac{dc_A}{dx} = 0 \\ c_A + c_B = c = \text{constant} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\boxed{D_{AB} = D_{BA}}$$



N.b. in de vloeistoffase wordt
veel met massaconcentraties gewerkt

Maar als we nu geen wederzijdse diffusie hebben?

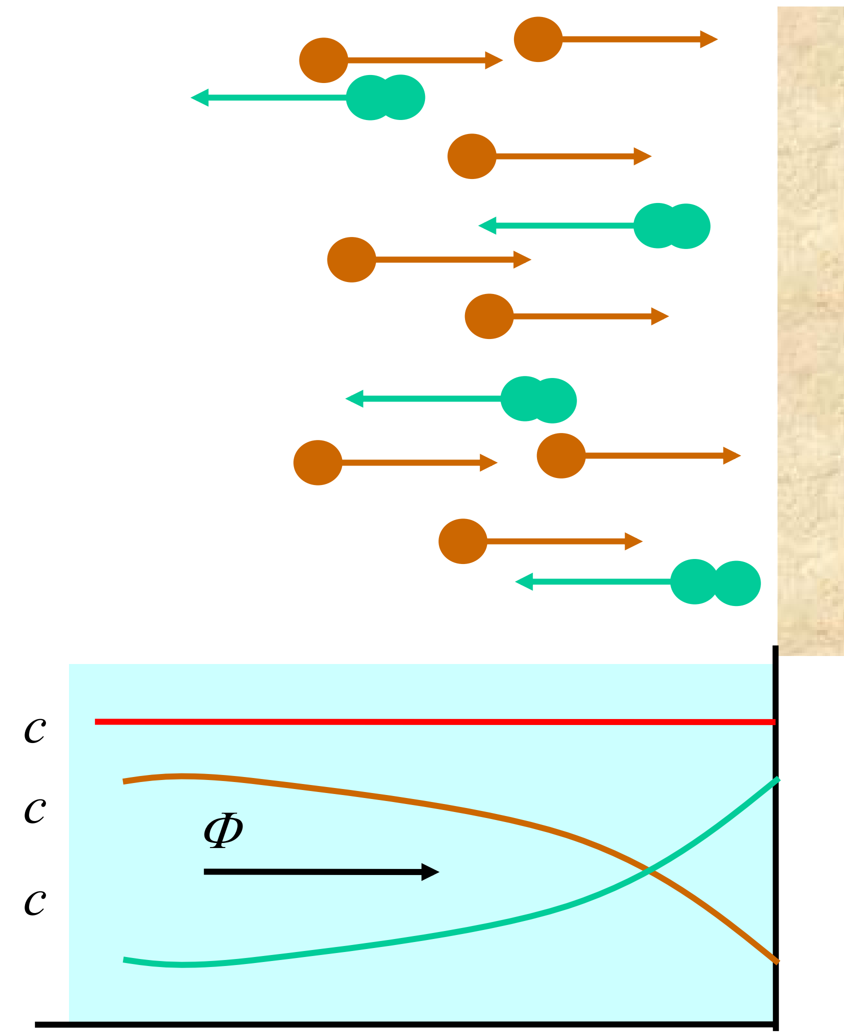
B.v. dimerisatie 2A→B

$$c_A + c_B = c = \text{constant}$$

$$2\Phi''_{mol,A} + \Phi''_{mol,B} = 0$$

Resultaat:
driftstroming om het tekort aan te vullen

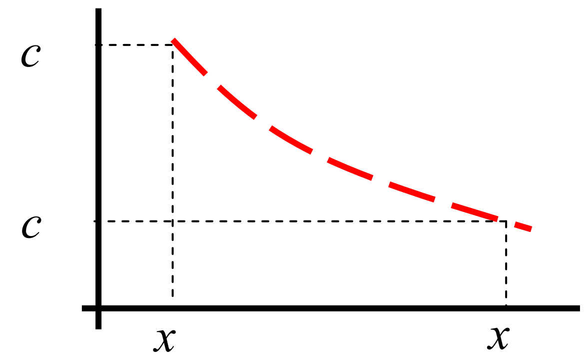
extra convectie om de druk constant te houden



Driftstroming (1)

$$\Phi''_{mol,A} = -D\frac{dc_A}{dx} + \left(\Phi''_{mol,A} + \Phi''_{mol,A}\right)\frac{c_A}{c}$$

$$\Phi''_{mol,A} = -D\frac{c}{c-c_A}\frac{dc_A}{dx}$$



Oplossen:

$$\frac{c-c_A}{c-c_{A1}} = \left(\frac{c-c_{A_2}}{c-c_{A1}}\right)^{\frac{x-x_1}{x_2-x_1}}$$

$$en:$$

$$\Phi''_{mol,A} = \frac{Dc}{x_2-x_1}\ln\left(\frac{c-c_{A_2}}{c-c_{A1}}\right) \approx -\left(1+\frac{1}{2}\frac{c_{A_1}-c_{A_2}}{c}+.....\right)D\frac{c_{A_1}-c_{A_2}}{x_2-x_1}$$

Correctiefactor van Stephan

$$\Phi''_{mol,A} = -D.f_D \frac{c_{A_1} - c_{A_2}}{x_2 - x_1}$$

$$f_D = \left(1 + \frac{1}{2} \frac{c_{A_1} - c_{A_2}}{c} + ... \right)$$

<u>Correctiefactor van Stephan:</u>
versnellingsfactor bij eenzijdige diffusie

Wederzijdse diffusie:

$$\Phi''_{mol,A} = -D \frac{dc_A}{dx}$$

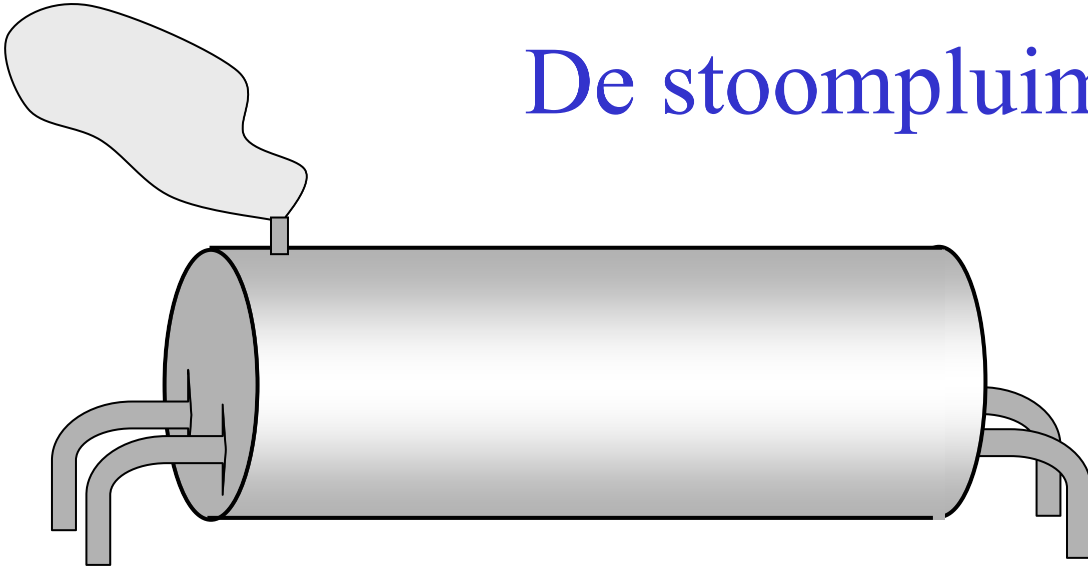
eenzijdige diffusie

$$\Phi''_{mol,A} = -f_D.D \frac{dc_A}{dx}$$

Geen correctie bij:

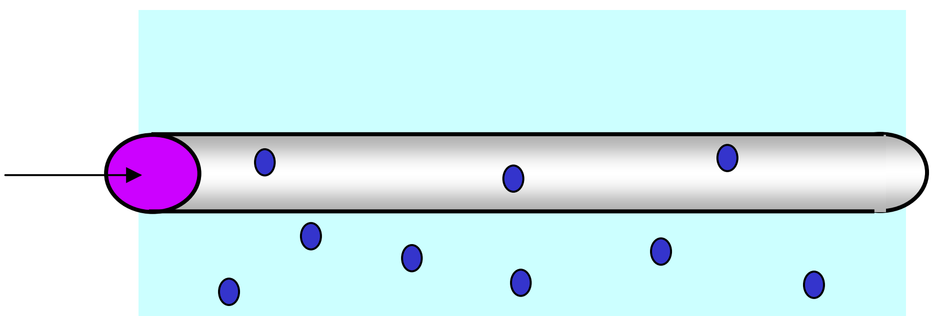
- wederzijdse diffusie
- kleine concentratiegradiënten c ≈ c
- grote hoeveelheden inert gas c >> c

De stoompluim bij condensors



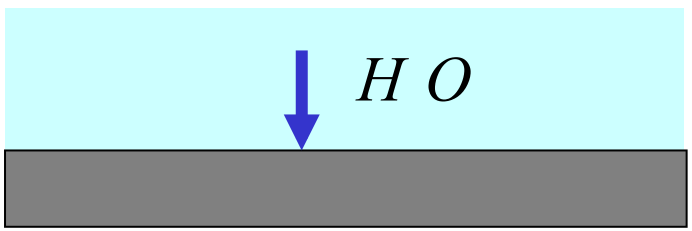
energieverspilling?
Schande !!!

Wat is een condensor?
Een warmtewisselaar met fasenovergang.



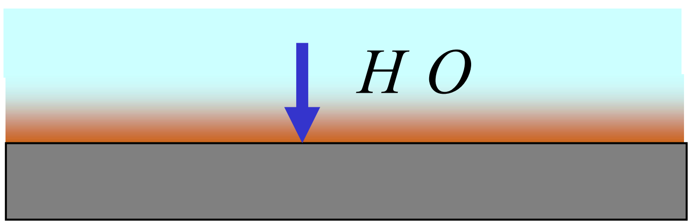
B.v. stoom condenseert op pijpen,waar de proces-vloeistof doorheen stroomt: *<u>eenzijdig stoomtransport</u>*

Driftstroming in de condensor



geen inert gas aanwezig:

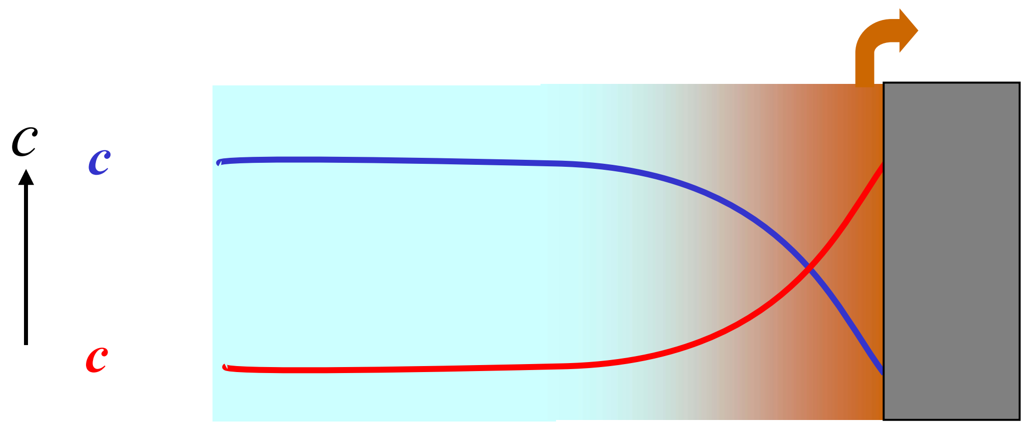
convectiestroming



bij ophoping van inert gas:

inert verzamelt bij de pijp,

diffusie gelimiteerd proces



spuien op de koudste plek bevordert de warmteoverdracht en bespaart dus energie

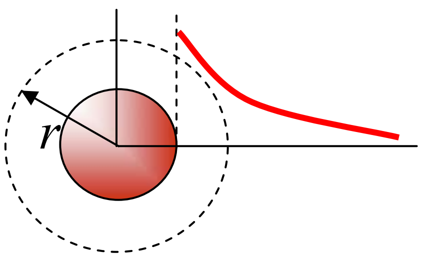
Technische stofoverdracht

is analoog aan de technische warmteoverdracht

Basisvergelijking: $$\Phi_{mol,A}'' = k.A.\Delta c_A$$

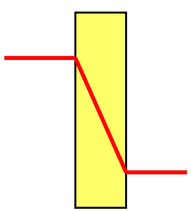
k: stofoverdrachtscoefficient (m/s)

de bol



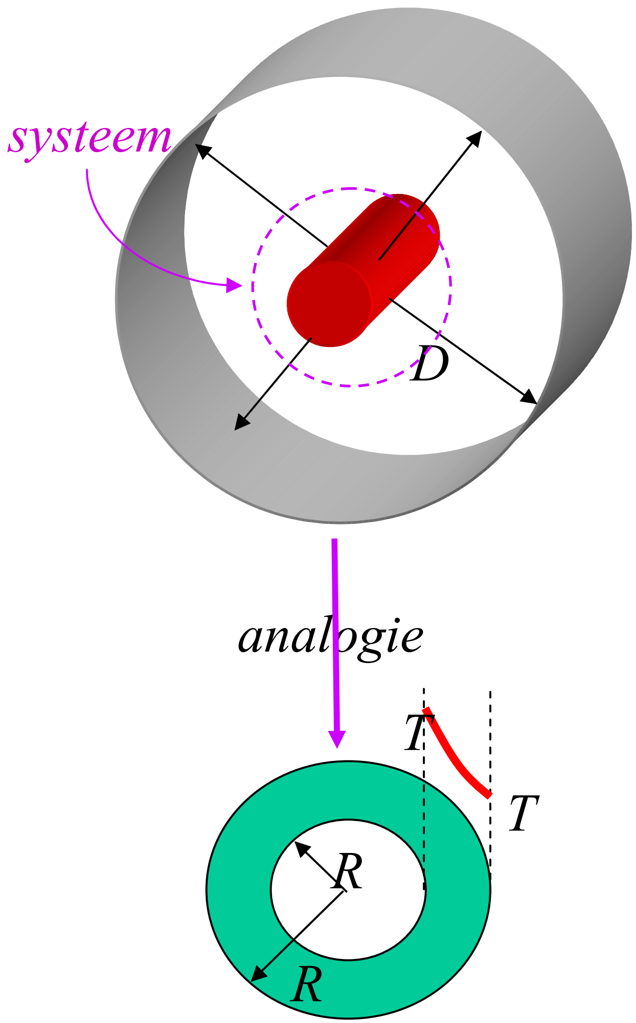
$$\left.\begin{aligned}\Phi_{mol,A} &= 4\pi RD(c_1 - c_\infty)\\ \Phi_{mol,A} &= 4\pi R^2 \frac{D}{R}(c_1 - c_\infty)\end{aligned}\right\} \qquad k = \frac{2D}{d}$$

de "plaat"



$$\Phi_{mol,A} = A\frac{D}{d}(c_1 - c_2) \qquad k = \frac{D}{d}$$

Voorbeeld: Chemical Vapour Deposition



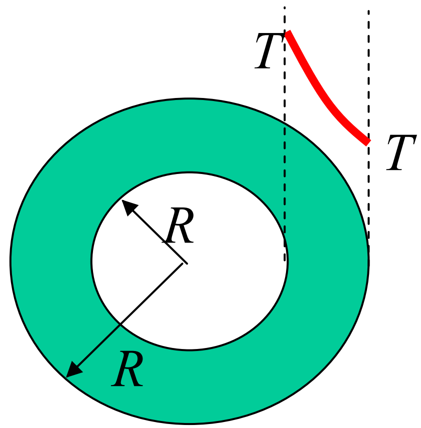
Harden van de binnenwand
van een buis

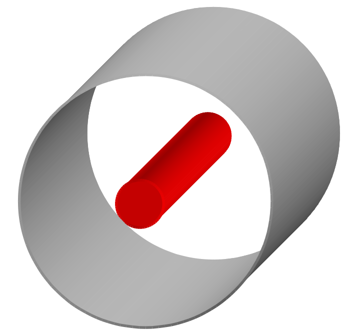
<u>probleem</u>: *vanuit een centrale staaf verdampt hardingsmateriaal dat reageert met het buismateriaal tot een harding. In de buis bevindt zich een overmaat inert gas, waardoor het hardingsmateriaal diffundeert.*

<u>Analyse:</u> *door iedere cilinder om de centrale staaf diffundeert evenveel stof A*
overmaat inert: geen driftstromen

$$\Phi_{mol,A}' = -D\frac{dc_A}{dr}2\pi r = c_1 = const$$

Het buisprobleem





$$\Phi_w{}' = -\lambda \frac{dT}{dr} 2\pi r = c_1 = const$$

$$-2\pi\lambda \int dT = \int \frac{c_1}{r} dr$$

$$-2\pi\lambda T = c_1 . \ln(r) + c_2$$

$$\frac{T - T_1}{T_2 - T_1} = \frac{\ln(r/R_2)}{\ln(R_2/R_1)}$$

$$\Phi_w{}' = -\lambda \frac{dT}{dr} 2\pi r = \frac{2\pi\lambda(T_1 - T_2)}{\ln(R_2/R_1)}$$

$$\Phi_{mol,A}{}' = -D \frac{dc_A}{dr} 2\pi r = c_1 = const$$

$$-2\pi D \int dc_A = \int \frac{c_1}{r} dr$$

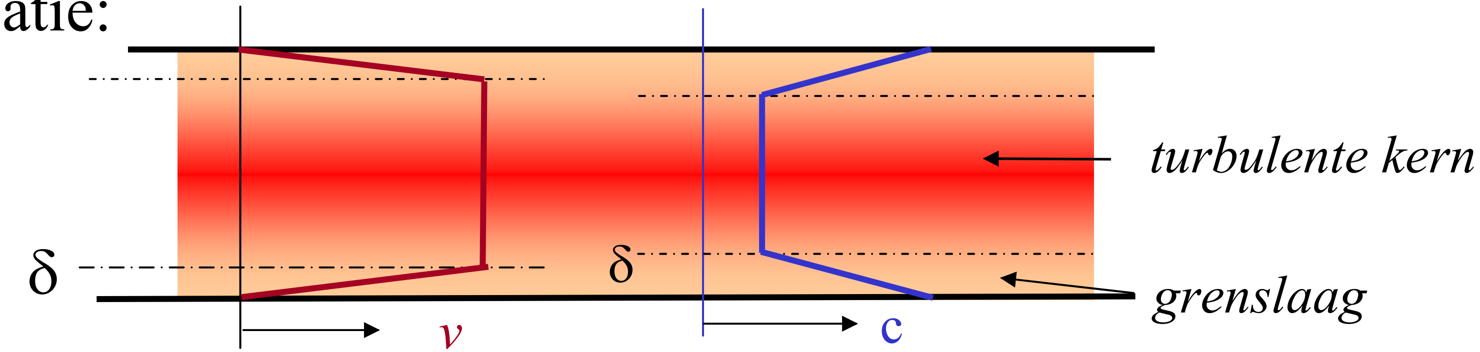
$$-2\pi D c_A = c_1 . \ln(r) + c_2$$

$$\frac{c_A - c_{A1}}{c_{A2} - c_{A1}} = \frac{\ln(r/R_2)}{\ln(R_2/R_1)}$$

$$\Phi_{mol,A}{}' = -D \frac{dc_A}{dr} 2\pi r = \frac{2\pi D(c_{A1} - c_{A2})}{\ln(R_2/R_1)}$$

Stofoverdracht bij turbulente buisstromingen

Idealisatie:



Kracht van de wand op de turbulente kern:

$$\tau_{f-w} = \eta \frac{\langle v \rangle}{\delta_h} = \frac{f}{2} \rho \langle v \rangle^2$$

Stofoverdracht door de laminaire grenslaag:

$$\Phi_{mol,A}'' = k\left(c_{A,w} - \langle c_A \rangle\right) = \lambda \frac{c_{A,w} - \langle c_A \rangle}{\delta_s}$$

Diffusie door de grenslaag en opmenging in de bulk

Stofoverdracht bij turbulente buisstroming

$$\tau_{f-w} = \eta \frac{\langle v \rangle}{\delta_h} = \frac{f}{2} \rho \langle v \rangle^2 \qquad \Phi''_{mol,A} = k\left(c_{A,w} - \langle c_A \rangle\right) = D \frac{c_{A,w} - \langle c_A \rangle}{\delta_s}$$

theorie

$$\frac{kD_i}{D} = \frac{D_i}{\delta_s} = \frac{D_i}{\delta_h} \frac{\delta_h}{\delta_s} = \frac{f}{2} \frac{\rho \langle v \rangle D_i}{\eta} \frac{\delta_h}{\delta_s} \qquad Sh \approx \frac{f}{2} . \mathrm{Re} . Sc^{1/3}$$

praktijk

$$\frac{kD_i}{D} = 0{,}027 \left(\frac{\rho \langle v \rangle D_i}{\eta} \right)^{0{,}8} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{0{,}33} \qquad \boxed{Sh = 0{,}027 . \mathrm{Re}^{0{,}8} . Sc^{0{,}33}}$$

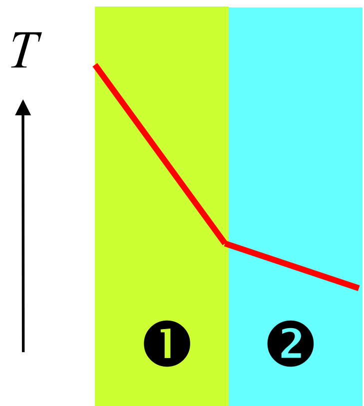
Geheel analoog aan de warmteoverdracht

Warmteoverdracht en stofoverdracht

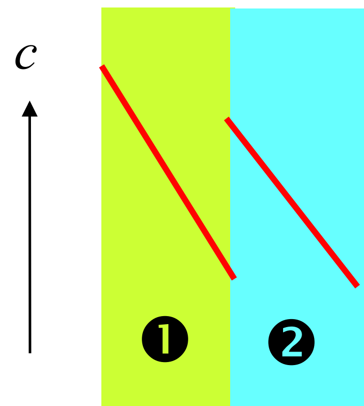
Zelfde vergelijkingen: zelfde oplossingen

Flux	Φ”	Φ”
moleculaire transport coëfficiënt	a (=λ/ρc)	D
drijvende kracht	ρc T	c
overdrachtscoëfficiënt	h	k
overdrachtskental	$Nu = \frac{hd}{\lambda}$	$Sh = \frac{kd}{D}$
grenslaagkental	$\Pr = \frac{\nu}{a}$	$Sc = \frac{\nu}{D}$

Concentratiesprong bij fasengrensvlakken



$T \quad = T$

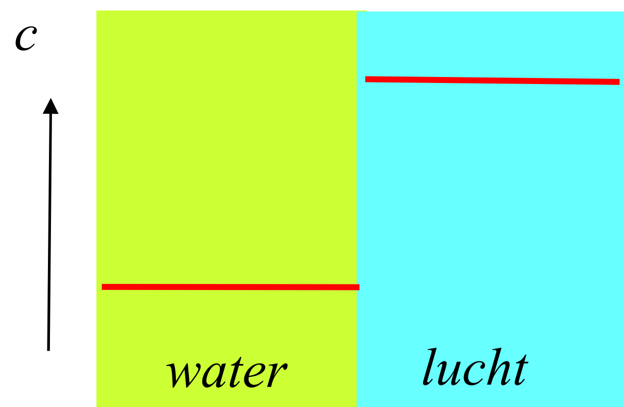


$c \quad \neq c$

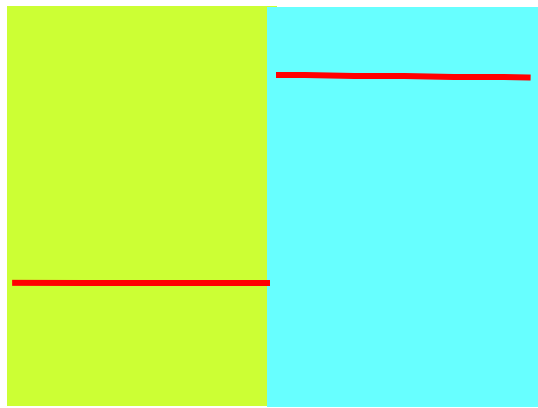
Evenwicht:

b.v. $c \qquad = 8$ ppm

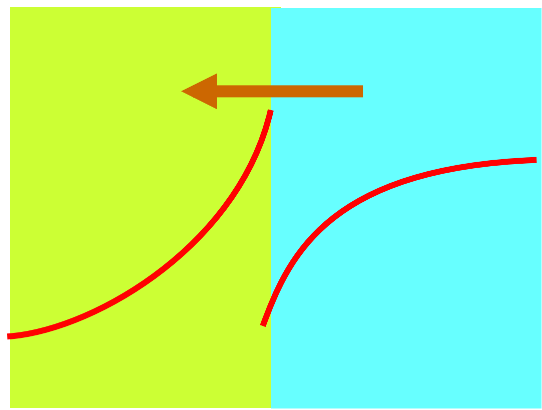
$c \qquad = 23$ %



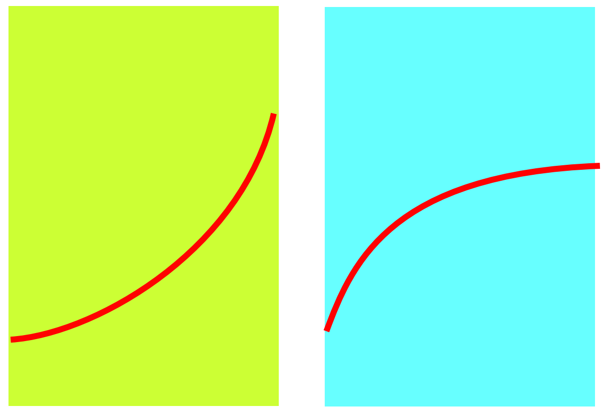
Overdracht over een fasengrensvlak (1)



evenwicht



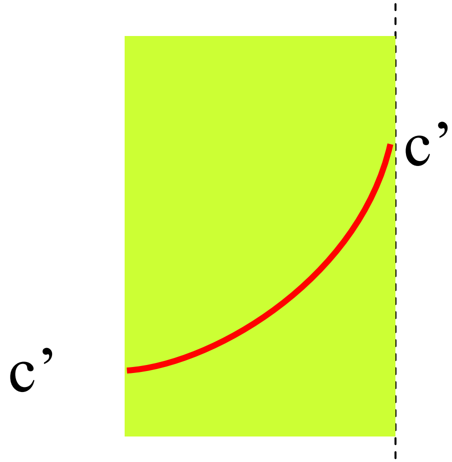
overdracht



2 overdrachts-
processen

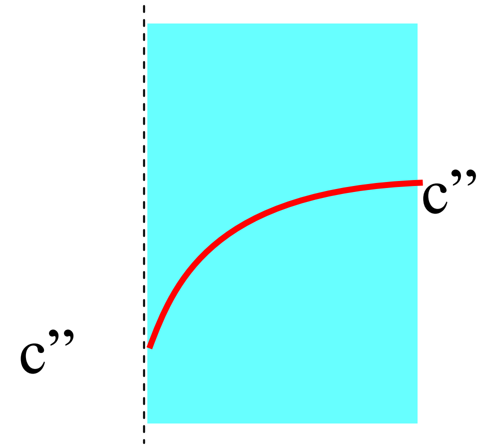
Bekijk de fasen apart !

Overdracht over een fasengrensvlak (2)



wet van Henry-Nernst:

$$c'_{A,w} = mc''_{A,w}$$



$$\Phi''_{molA} = k'\left(c'_{A,w} - c'_{A,f}\right)$$

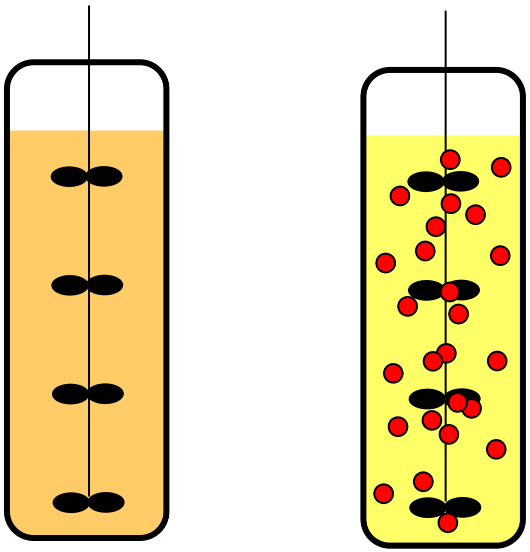
$$\Phi''_{molA} = k''\left(c''_{A,f} - c''_{A,w}\right)$$

c' en c'' elimineren:

$$\Phi''_{mol,A} = \left(\frac{1}{k''} + \frac{1}{mk'}\right)^{-1}\left(c''_{A,f} - \frac{c'_{A,f}}{m}\right) = K''\left(c''_{A,f} - \frac{c'_{A,f}}{m}\right)$$ of:

$$\Phi''_{mol,A} = \left(\frac{m}{k''} + \frac{1}{k'}\right)^{-1}\left(mc''_{A,f} - c'_{A,f}\right) = K'\left(mc''_{A,f} - c'_{A,f}\right)$$

De fermentor: S.O.met chemische reactie



dispers werkgebied

pellet werkgebied

Voordeel pellet gebied:
- *lagere viscositeit*
- *betere stofoverdracht*
- *minder mengenergie*

Nadeel pellet gebied:
- *mogelijke autolyse door nulde-orde reactie*

S.O. met negatieve productie