

***Fysische
Transportverschijnselen***

denken in balansen

***Fysische
Transportverschijnselen***

denken in balansen

Harrie van den Akker
Rob Mudde

© **Delft Academic Press**

Eerste druk 1996, 1998

Tweede druk 2003-2005

Derde druk 2008

Vierde druk 2014

Uitgegeven door Delft Academic Press /VSSD

Leeghwaterstraat, 2628 CA Delft, Nederland

tel. +31 15 27 82124, e-mail: dap@vssd.nl

Uitgevers website www.vssd.nl/hlf

Dit boek: www.vssd.nl/hlf/c014

De uitgever stelt aan docenten die dit boek in cursusverband gebruiken, desgewenst de collectie digitale illustraties en/of een elektronische versie ter beschikking. Een verzoek kan ingediend worden bij dap@vssd.nl

Alle rechten voorbehouden. Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd, opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand, of openbaar gemaakt, in enige vorm of op enige wijze, hetzij elektronisch, mechanisch, door fotokopieën, opnamen, of op enige andere manier, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de uitgeverij.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photo-copying, recording, or otherwise, without the prior written permission of the publisher.

ISBN 978-90-6562-3577

Keywords: natuurkunde, transportverschijnselen.

NUR 924

Voorwoord

In 1956 verscheen van de hand van prof.ir. H. Kramers het diktaat “Fysische Transportverschijnselen”: wereldwijd voor technologie-studenten het eerste leer“boek” op dit gebied. Het presenteerde een systematische behandeling van het transport van impuls, energie en materie op basis van balansen (behoudswetten) en wetten voor moleculair transport. In 1961 verscheen dit diktaat in boekvorm bij de Delftsche Uitgevers Maatschappij. Dit boek begon met een kort hoofdstuk (8 pagina’s) over de fundamentele wetten als uitgangspunt voor het opstellen van de transportvergelijkingen; in de drie volgende hoofdstukken werden achtereenvolgens elementen van de technische stromingsleer (ruim 70 pagina’s), warmtegeleiding en warmteoverdracht (bijna 80 pagina’s) en diffusie en stofoverdracht (ruim 20 pagina’s) behandeld, waarna het boek afsloot met een kort hoofdstukje van 11 pagina’s over mengen en roeren.

Ondertussen was Prof. R.B. Bird in 1958 (van januari tot september) de gast van Prof. Kramers in Delft in wat thans het “Kramers Laboratorium voor Fysische Technologie” heet. Veel is toen gediscussieerd over Fysische Transportverschijnselen en over de manier waarop dit nieuwe vak het best gedoceerd kon worden. In de herfst van 1958 zagen “Notes on Transport Phenomena” het licht, gevolgd in 1960 door “Transport Phenomena”. Dit laatste boek, 780 pagina’s dik en met als auteurs Bird, Stewart en Lightfoot, is uitgegroeid tot de bijbel van het vakgebied.

In de loop der jaren zijn in het Delftse steeds nieuwe versies van Kramers’ oorspronkelijke boek verschenen. Zo kwam prof.dr.ir. W.J. Beek in 1968 met een versie zonder het hoofdstuk mengen en roeren, maar met een stuk over verblijftijdspreiding; ook werd de indeling wat aangepast. In 1973 en 1981 liet prof. J.M. Smith M.Sc. opnieuw lichtelijk aangepaste versies verschijnen. Steeds bleef de opbouw van het boek hetzelfde, met name de insteek via de behoudswetten en de wetten voor moleculair transport alsmede de volgorde van behandeling van impuls-, warmte- en stoftransport.

In Eindhoven ontwikkelde prof.dr. K. Rietema een eigen benadering van het vak die hij zelf als inductief omschreef: van eenvoudige waarneming komend tot generalisatie. Zijn boek “Fysische transport- en overdrachtsverschijnselen” bestond uit een deel A over moleculair transport van warmte, materie en impuls (in die volgorde) en een deel B over stromingsleer, grenslaagtheorie en turbulentie, convectief warmte- en stoftransport, en chemische reactoren. Rietema vond deze aanpak didactisch meer verantwoord en meer gericht op het stimuleren van fysisch inzicht en intuïtie.

Anno 1996 denken de auteurs van dit boek dat de tijd rijp is voor een iets andere benadering van het vakgebied “Fysische Transportverschijnselen”. Enerzijds is er de laatste tien jaar zeer veel veranderd in het Nederlandse universitaire onderwijswereld, anderzijds is het vakgebied zelf aan grote veranderingen onderhevig.

Wat de onderwijskundige veranderingen betreft: had vroeger het vak een plaats in het derde jaar van de opleidingen tot natuurkundig en scheikundig ingenieur, thans wordt het vak eerder in deze opleidingen gegeven. Ook studenten van andere technische opleidingen (zoals materiaalkunde, mijnbouw en technische bestuurskunde) krijgen nu het vak. Daarnaast studeren studenten tegenwoordig anders, waar zij in toenemende mate te maken hebben met maatregelen die de studieduur beperken en het studietempo verhogen. Alles bij elkaar voldoende reden voor een bezinning op inhoud en didactiek van het vak.

Verder is het vakgebied zelf aan het veranderen: in 1981 schreef Rietema al dat de fysische technologie aan vernieuwing toe was en hield hij een pleidooi voor een grotere rol van de stromingsleer in het vakgebied. Met de opkomst van Computational Fluid Dynamics (CFD)-technieken is het dan intussen inderdaad mogelijk geworden transport en overdracht van warmte en materie te beschouwen op basis van informatie over lokale stromingsverschijnselen (snelheidsvelden).

Bird (pagina 71 van “Transport Phenomena”) schrijft: “Het is gemakkelijker, sneller en veiliger uit te gaan van de behoudswetten van massa en impuls in algemene vorm en deze te vereenvoudigen tot zij het specifieke probleem in kwestie beschrijven.” In onze visie vormen de tijdafhankelijke driedimensionale transportvergelijkingen met name de basis van de moderne CFD-benadering. De traditionele aanpak met dimensie-analyse en fenomenologische overdrachtscoëfficiënten en met film- en grenslaagtheorieën en empirische drukvalvergelijkingen gaat daaraan vooraf, als een voorbereiding op de veel exactere numerieke aanpak.

In onze visie dienen studenten bij hun eerste kennismaking met het vakgebied eerst vertrouwd te geraken met de techniek van balansen opstellen en met een aantal begrippen, concepten en wetmatigheden. Zelf balansen opstellen voor specifieke problemen van betrekkelijk eenvoudige geometrie is de meest leerzame weg naar fysisch inzicht. In die eenvoudiger balansen mogen nog overdrachtscoëfficiënten voorkomen: dat levert doorgaans analytisch op te lossen vergelijkingen op. De rigoureuze CFD-aanpak bouwt als het ware op de eigenhandig geleerde expertise voort en is, indien de eindige-volumemethode wordt gebruikt voor het numeriek oplossen van de transportvergelijkingen, zelfs synoniem met het opstellen en oplossen van (micro)balansen. Bij simulaties van turbulente stromingen met behulp van turbulentiemodellen dienen vaak nog meer transportvergelijkingen (of balansen) te worden opgelost, zoals één voor de concentratie van turbulente kinetische energie alsmede één voor de dissipatie daarvan.

De behandeling van impulstransport volgt in dit boek pas na warmte- en stoftransport, enerzijds omdat impuls en schuifspanning moeilijker te hanteren begrippen zijn vanwege hun vectorkarakter (hierin volgen wij Rietema), anderzijds omdat zo een vloeiender overgang wordt verkregen naar de Navier-Stokes-vergelijkingen en CFD (zie ook paragraaf 5.8.3). Juist vanwege de fenomenologische aanpak van convectief warmte- en stoftransport is het ook geen gemis als laminaire stroming pas later behandeld wordt; hetzelfde heeft al die jaren ook voor turbulente stroming gegolden. Wel zijn allerlei concepten en termen tevoren behandeld in de hoofdstukken 1 en 2. Veel studenten zullen ook juist die concepten en termen en de grovere overdrachtsmodellen nodig hebben en de meer gedetailleerde theorieën en vergelijkingen kunnen ontberen.

Streng gehandhaafd is het idee van de analogie van warmte-, stof- en impulstransport. Dit is onder andere tot uiting gebracht in de identieke opbouw van de hoofdstukken 3 en 4. In de tekst is deze analogie ook steeds weer benadrukt, onder meer door consequent het begrip concentratie te hanteren (dus impulsconcentratie in plaats van snelheid) en door zo veel mogelijk de fysische mechanismen van het transport (weerstand, overdracht, filmmodel) in beelden te beschrijven. In hoofdstuk 5.8 komt de analogie ook bij de CFD-aanpak weer sterk naar voren.

Wij hopen dat onze aanpak van Fysische Transportverschijnselen aan zal slaan bij collega’s en vooral studenten. Graag houden wij ons voor op- en aanmerkingen aanbevolen.

Aan het eind van dit voorwoord passen woorden van oprechte dank aan het adres van stafleden en promovendi van het Kramers Laboratorium voor Fysische Technologie die aan de totstandkoming van dit boek in enigerlei vorm hebben bijgedragen. Daarnaast danken wij ir. A.G.N. Boers voor diens assistentie bij de voorbeelden in de eerste versie van de tekst en Karin Westra voor haar bijdragen aan de tekstverwerking.

Delft, februari 1996

Harrie van den Akker
Rob. Mudde

Voorwoord bij de vierde druk

In een tweede druk in 2003 – 2005 en een derde druk in 2008 werden een aantal wijzigingen aangebracht in de behandeling van een aantal onderwerpen – mede naar aanleiding van ervaringen en suggesties van gebruikers en collega’s. De laatste jaren

stromen echter steeds meer buitenlandse studenten met sterk wisselende vooropleidingen een aantal Master-opleidingen van de TU Delft in. Deze ontwikkeling heeft ons er toe gebracht een Engelstalige editie van dit studieboek uit te brengen – naast de vertrouwde Nederlandse editie..

Dat was dan wel een mooie aanleiding om het gehele boek nog eens grondig op de schop te nemen – waarbij overigens opzet en didactiek gehandhaafd zijn gebleven. Zo blijven wij geloven dat het zelf (kunnen) afleiden van balansen en differentiaalvergelijkingen een goede leerschool is die bovendien goed voorbereid op moderne simulatietechnieken (Computational Fluid Dynamics). Het boek heeft dan ook als ondertitel ‘denken in balansen’ meegekregen. Ook de nadruk op het aanleren van oplostechnieken voor steeds weer nieuwe problemen is gehandhaafd.

Wij willen op deze plaats onze waardering uitspreken voor alle suggesties die ons door de jaren heen zijn aangereikt. Wij willen hier speciaal A.G.N. Boers, C. Ouwerkerk, G.C.J. Bart, C.R. Kleijn, J.J.Ph. Elich, L.M. Portela, J. A. Battjes, R.B. Bird, en J.E. Schievink noemen. Zij hebben zeker bijgedragen aan de verbeterde versie die u nu in handen hebt. Voor verdere suggesties en commentaren blijven wij openstaan.

Delft, augustus 2014

Harrie van den Akker
Rob Mudde



Inhoud

Voorwoord	v
1 Balansen	1
1.1 De balans: recept en vorm	1
1.2 De massabalans	6
1.2.1 De totale-massabalans en de componentbalans	6
1.2.2 Chemische reactoren	13
1.2.3 Verblijftijdspreiding	18
1.2.4 Meer tanks in serie	28
1.3 De energiebalans	32
1.3.1 Inleiding	32
1.3.2 De totale-energiebalans	36
1.3.3 De thermische-energiebalans	48
1.3.4 De mechanische-energiebalans en de Bernoulli-vergelijking	50
1.4 De impulsbalans	57
1.5 Voorbeelden van gecombineerd gebruik van massa-, energie- en impulsbalansen	63
Appendix 1A	70
Appendix 1B	72
2 Mechanismen, kentallen, krachten	75
2.1 Moleculair transport	75
2.1.1 Bewegende moleculen	75
2.1.2 Fick, Fourier, Newton	79
2.1.3 Transportcoëfficiënten	86
2.1.4 Schuifspanning: een alternatieve beschrijving van moleculair impulstransport	89
2.2 Dimensie-analyse	92
2.2.1 Dimensieloze kentallen	92
2.2.2 Het Reynolds-getal en de overgang van laminaire naar turbulente stroming	96
2.2.3 Dimensie-analyse: het concept	99
2.2.4 Dimensie-analyse: techniek en Buckingham- Π theorema	102
2.2.5 Voorbeelden van dimensie-analyse	105
2.3 Krachten op omstroomde lichamen	113
2.3.1 Omstroming en stromingsweerstand	113
2.3.2 Meesleepkracht en weerstandscoefficiënt	117
2.3.3 Krachtenbalans en eenparige snelheid	121

3	Warmtetransport	125
3.1	Stationaire warmtegeleiding	125
3.1.1	Warmtegeleiding in cartesische coördinaten	125
3.1.2	Analogie met de Wet van Ohm	129
3.1.3	Warmtegeleiding in cilindrische coördinaten	131
3.1.4	Warmtegeleiding in bolcoördinaten	134
3.1.5	Een numerieke behandeling voor 2-D cartesisch	136
3.2	Warmteoverdrachtscoëfficiënt en Nusselt getal	141
3.2.1	Newton's afkoelingswet	141
3.2.2	Het Nusselt getal	142
3.2.3	Overall warmteoverdrachtscoëfficiënt	143
3.3	Instationaire warmtegeleiding	146
3.3.1	Penetratietheorie: conceptueel	146
3.3.3	Penetratietheorie: toepassing	150
3.3.5	Doorverwarming	156
3.3.6	Het totale opwarmproces van een voorwerp	160
3.3.7	Intern en extern warmtetransport	166
3.3.8	Numerieke aanpak	168
3.4	De algemene microbalans voor warmtetransport	171
3.5	Warmteoverdrachtscoëfficiënten bij convectie	176
3.5.1	Algemene beschouwingen	176
3.5.2	Warmteoverdracht bij gedwongen convectie	180
3.5.3	Warmteoverdracht bij vrije convectie	187
3.5.4	De numeriek aanpak van convectief warmtetransport	192
3.6	Warmtewisselaars	195
3.6.1	Inleiding	195
3.6.2	Warmteoverdracht zonder fase-overgang	196
3.6.3	Warmteoverdracht met fase-overgang	200
3.7	Warmtetransport door straling	203
3.7.1	Emissie	204
3.7.2	Reflectie, transmissie, absorptie	206
3.7.3	Warmteoverdracht door straling	209
3.7.4	Warmteoverdrachtscoëfficiënt bij straling	212
4	Massatransport	217
4.1	Analogie tussen massatransport en warmtetransport	217
4.2	Wederzijdse diffusie naar analogie van warmtetransport	220
4.2.1	Stationaire diffusie in cartesische coördinaten	220
4.2.2	Stationaire diffusie in cilindrische coördinaten	221
4.2.3	Stationaire diffusie in bolcoördinaten	223
4.2.4	Stofoverdrachtscoëfficiënt en Sherwood getal	226
4.2.5	Instationaire diffusie: penetratietheorie	228
4.2.6	Instationaire lange-termijn diffusie	231
4.3	Diffusie en driftflux	233
4.4	De algemene microbalans voor stoftransport	239
4.5	Stofoverdrachtscoëfficiënten bij convectie	241

4.5.1	Algemene beschouwingen	241
4.5.2	Stofoverdracht bij gedwongen convectie	242
4.5.3	Stofoverdracht bij vrije convectie	247
4.6	Stofoverdracht over een fasegrensvlak	248
4.6.1	Inleiding over hoe om te gaan met twee fasen	248
4.6.2	De verdelingscoëfficiënt	251
4.6.3	Stofoverdracht over een fasegrensvlak	253
4.6.4	Penetratietheorie bij een fasegrensvlak	256
4.7	Gelijktijdig transport van warmte en massa: de natteboltemperatuur	259
5	Stromingsleer	263
5.1	Inleiding	263
5.2	Stroommeters	266
5.2.1	Overloop	266
5.2.2	Meetschijf	270
5.2.3	Rotameter	271
5.3	Drukval over een rechte leiding	273
5.3.1	Het concept van de frictiefactor	273
5.3.2	Het gebruik van de frictiefactor	277
5.3.3	De analogie met warmte- en stofoverdracht	282
5.4	Drukval in pijpleidingsystemen	283
5.5	Drukval over een gepakt bed	289
5.6	Laminaire stroming van Newtonse vloeistoffen	293
5.6.1	Laminaire stroming in cartesische coördinaten – onder invloed van een bewegende wand	294
5.6.2	Laminaire stroming in cartesische coördinaten – onder invloed van een drukgradiënt	297
5.6.3	Laminaire stroming in cartesische coördinaten – onder invloed van de zwaartekracht	302
5.6.4	Laminaire stroming in cilindercoördinaten – onder invloed van een drukgradiënt	306
5.7	Laminaire stroming van niet-Newtonse vloeistoffen	309
5.7.1	Power law vloeistoffen	310
5.7.2	Bingham-vloeistoffen	313
5.7.3	Casson-vloeistoffen	316
5.7.4	Visco-elastische vloeistoffen	316
5.8	De algemene bewegingsvergelijkingen	318
5.8.1	Stromingsleer en fysische transportverschijnselen	318
5.8.2	De continuïteitsvergelijking	320
5.8.3	De Navier-Stokes-vergelijkingen	321
5.8.4	Computational Fluid Dynamics	329
	Uitgewerkte tentamenopgaven	333
	Adviezen	333
6.1	Opgaven	333

6.2 Oplossingen	342
Symbolenlijst	362
Voorbeeldenlijst	367
Trefwoordenlijst	369

Balansen

1.1 De balans: recept en vorm

Het vak Fysische Transportverschijnselen houdt zich bezig met het transport van de drie belangrijkste grootheden massa, energie en impuls in een willekeurig (fysisch of chemisch) proces. Vooral de toevoeging ‘in een willekeurig proces’ geeft een van de belangrijkste kenmerken van het vakgebied aan: Fysische Transportverschijnselen is bovenal een ingenieursvak met een breed scala van toepassingen.

Toch is het vak ook fundamenteel, aangezien het de basis legt voor veel andere procestechnologische disciplines, zoals reactorkunde, scheidingstechnologie en stromingsleer. Fysische Transportverschijnselen is dan ook een ‘must’ voor iedere procestechnoloog. Maar ook natuurkundigen, chemici, bouwkundigen, materiaal-kundigen en werktuigbouwkundigen hebben belang bij een goede beheersing van het vak Fysische Transportverschijnselen.

Het terrein dat het vak Fysische Transportverschijnselen en de discipline fysische technologie bestrijken is enorm uitgebreid. Aan de ene kant zijn er allerlei processen in de (petro-)chemische industrie, is er de stroming van één of meerdere fasen door een transportleiding, het gedrag van belletjes in een bioreactor of het vullen van een gietmal met vloeibaar metaal. Aan de andere kant is het vakgebied veel dichterbij huis ook van belang, bijvoorbeeld bij de warmteafgifte van een radiator en de daarmee gepaard gaande luchtstromingen in de kamer, en zuurstoftransport door bloed. Gelukkig zijn zulke zeer verschillende processen goed te begrijpen en te beschrijven met een beperkt aantal regels.

Verschijnselen van stroming en warmte- en stofoverdracht worden in dit vakgebied beschreven in termen van continuümgrootheden, met slechts hier en daar een verwijzing naar moleculaire processen. Op deze manier wordt de basis gelegd voor de *fysische technologie*: de expertise van het ontwerpen en verbeteren van processen waarin of waarmee stoffen worden getransporteerd, omgezet, bewerkt of vormgegeven. Daarbij is het van belang de essentie van een proces te doorgronden, dat wil zeggen de essentiële stappen bij het transport van massa, warmte en/of impuls te identificeren. Het transport van die drie grootheden kan overigens op precies dezelfde manier beschreven worden. Fysische Transportverschijnselen legt de basis voor de fysische technologie en reikt de gereedschappen aan. Dit boek handelt over die gereedschappen.

Fysische Transportverschijnselen is allereerst een vak van *balansen* en *concepten* waarmee fysische processen en verschijnselen beschreven kunnen worden. Vaak gaat het in het vak om afwijkingen van evenwichtstoestanden en de dan optredende *weerstand* voor warmte- en stoftransport. Het gaat dan ook vaak om het kwantitatief beschrijven van oorzaak en gevolg. Met behulp van deze nu nog wat duistere begrippen is het mogelijk om de bovengenoemde en nog talloze andere processen, globaal maar ook zeer gedetailleerd te begrijpen en te beschrijven. In dit hoofdstuk zal het begrip *balans* uitgebreid aan de orde komen.

Voor de beschrijving van het transport van een willekeurige grootheid, bijvoorbeeld de overdracht van zuurstof uit luchtbelletjes naar de vloeistoffase in een fermentor of het transport van warmte door een fornuiswand, is de balans een onmisbaar stuk gereedschap. Het basisprincipe van de balans is het boekhouden van een gekozen (fysische) grootheid. Dit concept is van bijzonder belang bij het werken met zogenaamde behouden grootheden; dit zijn grootheden (zoals massa en energie) die gedurende een proces niet verloren gaan, maar behouden blijven.

Het vak fysische transportverschijnselen houdt zich bezig met stationaire (*Eng.* ‘steady-state’) en instationaire (*Eng.* ‘transient’) processen waarin massa, energie en impuls (*Eng.* ‘momentum’) worden uitgewisseld tussen domeinen als gevolg van drijvende krachten (verschillen in massa-, energie- en impulsconcentraties, en/of een drukverschil). Fysische transportverschijnselen gaat dan ook bovenal over het ‘boekhouden’ van de drie fysische grootheden: massa, energie en impuls.

Dit boekhouden kan een groot controlevolume betreffen: het gaat dan om *macrobalansen*; balansen kunnen echter ook over heel kleine controlevolumes opgesteld worden: dan wordt gesproken van *microbalansen*, die informatie op lokale schaal opleveren. In bijna alle gevallen start het oplossen van problemen met betrekking tot transport- of overdrachtssnelheden, of aangaande veranderingen in concentraties of temperaturen met het opstellen van een of meer balansen.

De volgende stap is dan uit die balansen geëigende vergelijkingen af te leiden, veelal differentiaalvergelijkingen; die laatste vergen begin- en/of randvoorwaarden. In de laatste stap worden dan de (differentiaal)vergelijkingen opgelost om het antwoord op de gestelde vraag te vinden. In deze aanpak dienen alle grootheden weergegeven te worden met symbolen.

Het *algemene recept* voor het opstellen van een balans en het oplossen van het probleem luidt daarmee als volgt:

- 1) Maak een schets van de situatie. Noteer alle grootheden met symbolen, vermijd het gebruik van getalswaarden.
- 2) Kies de grootheid G die getransporteerd of overgedragen wordt in het te beschouwen proces.

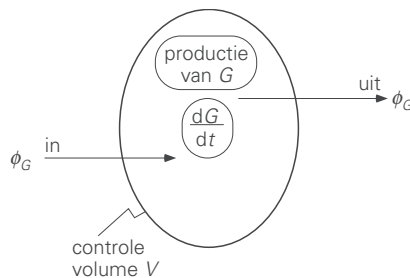
- 3) Kies het “*controlevolume*” V waarover informatie verkregen moet worden.
- 4) Ga na of en, zo ja, waardoor de hoeveelheid van G in het controlevolume V gedurende een kort tijdsinterval Δt verandert. Stel de balans op (in symbolen).
- 5) Los de (differentiaal)vergelijking op die uit de balans volgt.

De hoeveelheid van G in V kan op allerlei manieren veranderen. Deze dienen systematisch te worden nagegaan en, indien van toepassing, meegenomen in de balans. Zo kan er, gedurende Δt , stroming van G van buiten V naar binnen plaatsvinden. Hierdoor neemt de hoeveelheid G in V toe. Er kan ook stroming van G van binnen V naar buiten plaatsvinden. Uiteraard neemt hierdoor de totale hoeveelheid van G in V af. We spreken van “*stroom in*” respectievelijk “*stroom uit*”. Uiteraard kan er gedurende het interval Δt ook *productie* van G binnen V plaatsvinden: hierdoor neemt de totale hoeveelheid G in V toe. Negatieve productie (= vernietiging, consumptie, annihilatie) is ook mogelijk, bijvoorbeeld als G staat voor de massa van een reactant die in een chemisch proces wordt omgezet.

Bedenk dat G niet noodzakelijkerwijs de grootte is waarin je geïnteresseerd bent. Om bijvoorbeeld de temperatuur T te berekenen moet een thermische-energiebalans opgesteld worden en zal voor G de thermische energie U gekozen worden.

De algemene opzet voor een balans is nu als volgt (zie ook figuur 1.1):

$$\begin{aligned}
 & \text{de verandering van } G \text{ in } V \text{ gedurende } \Delta t = \\
 & = G \text{ (op tijdstip } t + \Delta t) \text{ in } V - G \text{ (op tijdstip } t) \text{ in } V \\
 & = \text{hoeveelheid van } G \text{ die van buiten } V \text{ naar binnen stroomt gedurende } \Delta t + \\
 & \quad - \text{hoeveelheid van } G \text{ die van binnen } V \text{ naar buiten stroomt gedurende } \Delta t + \\
 & \quad + \text{netto hoeveelheid van } G \text{ die in } V \text{ wordt geproduceerd gedurende } \Delta t
 \end{aligned}$$



Figuur 1.1.

Vanaf nu wordt het symbool ϕ gebruikt om een stroom, of transport, van een grootte G aan te geven, met de dimensie ‘hoeveelheid van G per tijdseenheid’. In plaats van een ‘stroom’ spreekt men liever van een *debiet*. De letter P staat voor de nettoproductie per tijdseenheid. Met behulp van deze notatie kan, indien Δt erg klein is, de hoeveelheid van G die “in” stroomt (= van buiten naar binnen) *gedurende* het

2 Mechanismen, kentallen, krachten

2.1 Moleculair transport

2.1.1 *Bewegende moleculen*

Tot nu toe is voornamelijk gekeken naar stroming van massa, energie of impuls ten gevolge van ‘collectief’ gedrag. Er stroomde massa van een bepaalde component, energie van welk type dan ook, of impuls het controlevolume in (of uit) doordat dit als het ware ‘onder de arm’ werd meegenomen door een massastroom die het controlevolume in (of uit) stroomde. Je zou kunnen zeggen dat hierbij de moleculen ‘samen’gaan. De vorm van de uitdrukkingen voor de stromen in en uit is altijd een product van een massa- (of volume-)stroom en een concentratie in die stroom (per massa- of volume-eenheid). Dergelijke stromen zijn vormen van *convectief transport*.

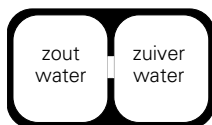
Individuele moleculen zijn echter ook in staat om transport van massa, energie en impuls tot stand te brengen. Op moleculaire schaal bewegen de moleculen in een vloeistof of gas immers nogal chaotisch, kriskras door elkaar ten gevolge van hun warmtebeweging. Elk molecuul transporteert zo zijn eigen massa, impuls en kinetische energie. Door middel van botsingen is het molecuul in staat om zijn impuls en energie geheel of gedeeltelijk over te dragen aan andere moleculen. Op deze wijze is er op den duur ook nettotransport over grotere afstanden mogelijk. In een vaste stof is de beweeglijkheid van de individuele moleculen uiteraard veel geringer, maar ook dan zijn moleculen dankzij vibraties uitstekend in staat warmte door te geven, door te geleiden, middels botsingen met hun burens.

Niettegenstaande het feit dat dit zogenaamde *moleculaire transport* zijn oorzaak vindt in de bewegingen van individuele moleculen is het toch goed uit te drukken in ‘gemiddelde grootheden’ (continuümgrootheden) zoals dichtheid, (massa)-concentratie en temperatuur. Deze paragraaf beschrijft bovengenoemd transport op fenomenologische wijze.

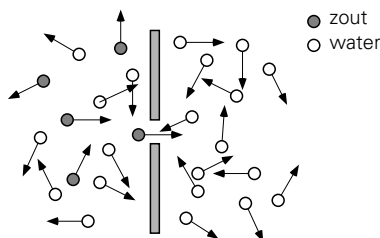
Diffusie

Om wat meer inzicht te krijgen in het mechanisme van moleculair transport dient het volgende experiment. Een reservoir is in twee gelijke delen verdeeld door een scheidingswand waarin een klein gat zit (zie figuur 2.1). De rechterzijde van het reservoir is geheel gevuld met zuiver water, de linkerzijde met zout water. De

drukken aan beide zijden zijn zodanig dat er geen convectieve stroming van het ene naar het andere compartiment plaatsvindt. Na voldoende lang wachten zullen beide zijden echter in gelijke mate zout water bevatten. Deze evenwichtssituatie zal nooit spontaan terugkeren naar de situatie waarin één zijde zuiver en de andere zijde zout water bevat. Hoe is dit te verklaren? Een close-up van het gaatje (zie figuur 2.2) maakt dit duidelijk.



Figuur 2.1.



Figuur 2.2.

Van beide kanten vindt op de scheidingswand een waar bombardement van moleculen plaats, en dus ook op het denkbeeldige vlak van het gaatje: net zoveel moleculen vinden hun weg door het gaatje van links naar rechts als in de omgekeerde richting, waarbij de drukken in de beide compartimenten gelijk blijven. Als we echter kijken naar de zoutmoleculen⁴, is het verhaal anders. Het aantal zoutmoleculen dat van de ene of de andere kant het gat weet te vinden, hangt af van de aantalldichtheid (of concentratie) van zoutmoleculen aan die kant. Aanvankelijk komen er enkel zoutmoleculen van links naar rechts door het gaatje: rechts zijn er immers nog geen zoutmoleculen. In de loop van de tijd neemt het aantal zoutmoleculen in het rechtercompartiment toe, en daarmee ook het aantal zoutmoleculen dat weer naar links kan terugkeren. Het *netto*transport van links naar rechts neemt langzamerhand af totdat de zoutconcentraties aan beide zijden gelijk zijn.

Het hierboven beschreven proces staat bekend als *moleculaire diffusie* en vindt zijn oorsprong in macroscopische concentratieverschillen. Verwacht mag worden dat de resulterende netto massastroom ϕ_m op eenvoudige wijze van dit concentratieverschil afhangt: hoe groter het concentratieverschil hoe sterker de stroom, en hoe groter de afstand tussen de plaatsen van hoge en lage concentratie hoe zwakker de stroom (omdat moleculen er langer over doen een grotere afstand te overbruggen).

⁴ Spreken over zoutmoleculen is feitelijk onzin, daar het oplossen van zout altijd gepaard gaat met dissociatie tot ionen. Dit is weer zo'n typisch voorbeeld van het gebruiken van een 'engineering point of view': het 'uitkleden' van de fysische werkelijkheid en het introduceren van allerlei vereenvoudigingen tot het te onderzoeken verschijnsel in essentie en in het volle licht zichtbaar wordt en gemakkelijk beschreven kan worden.