

Prosessi- ja ympäristötekniikan perusta

Aihe 3: Ilmiölähtöinen prosessitarkastelu

Oulun yliopisto



Tavoite

Tavoitteena on oppia tarkastelemaan yksikköprosesseja niissä esiintyvien erilaisten ilmiöiden näkökulmasta

Miksi ilmiölähtöinen näkökulma?

- Ilmiöiden voidaan ajatella muodostavan teoreettisen taustan prosessien hallinnalle
- Tietyt perusilmiöt toistuvat erilaisissa yksikköprosesseissa ja prosessiketjuissa
- Jos ymmärtää ilmiöt, ymmärtää myös prosessia
 - Kyky tarkastella (analysoida, mitata, mallintaa) ilmiöitä mahdollistaa arviot siitä:
 - mitkä ilmiöt ovat mahdollisia (tietyissä olosuhteissa)
 - mihin "suuntaan" ilmiöt tapahtuvat
 - kuinka pitkälle ilmiöt etenevät
 - miten olosuhteiden muutokset vaikuttavat ilmiöihin
 - Ilmiöiden hallinta edellyttää luonnontieteiden (fysiikka, kemia, biologia, geotieteet, ...) hyödyntämistä ja soveltamista
 - Yleensä soveltaminen vaatii myös matematiikkaa

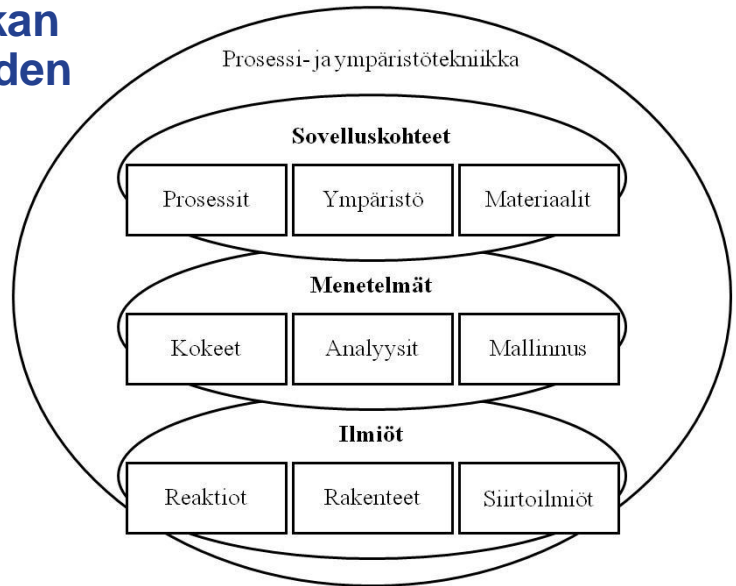


Kuvalähde: Masamune Shirow: Ghost in the shell.

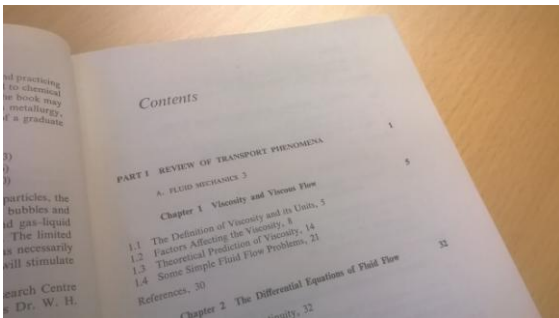
Oulun yliopisto



Prosessi- ja ympäristötekniikan opinnoista ja niiden rakenteesta



Sisältö



Prosessi- ja ympäristötekniikassa tyypillisesti esiintyviä ilmiöitä

- Fysikaaliset
 - Mekaaniset ilmiöt
 - Siirtoilmiöt
- Olomuodon muutokset ja faasitransformaatiot
- Kemialliset reaktiot
- Biologiset ilmiöt

- Mitä ne ovat? Miten niitä tarkastellaan?

Ilmiölähtöisen tarkastelun menetelmät

Aiheen 3 tehtävä



Prosessi- ja ympäristötekniikassa tyypillisesti esiintyviä ilmiöitä

Fysikaaliset ilmiöt

- Mekaaniset ilmiöt
- Siirtoilmiöt

Olomuodon muutokset ja faasitransformaatiot

Kemialliset reaktiot

Biologiset ilmiöt

Oulun yliopisto



Mekaaniset ilmiöt ja niihin liittyvät yksikköprosessit



Partikkeli = Kiintoainerae (yksittäinen)

- Kiinteillä kappaleilla on tietty koko ja muoto, joilla on suuri merkitys monien tuotteiden laadun ja ominaisuuksien määräytymisessä
 - Jako koon perusteella jauhemaiseen (alle 0,1 mm), rakeiseen ja kappalemaiseen (yli 3 mm) kiintoainekseen
 - Koon ja muodon mittaus (sekä siihen liittyvä näytteenotto)
- Muita keskeisiä ominaisuuksia ovat mm.
 - Puhtaus/sekarae, pinta-ala, kovuus, lujuus, varautuminen, ...
- Partikkelikoon pieneneminen/pienentäminen
 - Murskaus, jauhatus
- Partikkelikoon kasvu/suurentaminen
 - Agglomerointi, granulointi, pelletointi, briketointi, sintraus
- Partikkelikoon hallinta / Erottuminen koon perusteella
 - Seulonta, luokitus
- Partikkelien erottautuminen/erotus nesteistä ja kaasuista
 - Suodatus, laskeutus, linkous
- Partikkelien erottautuminen/erotus toisistaan
 - Rikastustekniset menetelmät kuten vaahdotus, magneettinen erotus, painovoimaerotus

Oulun yliopisto



Mekaaniset ilmiöt ja niihin liittyvät yksikköprosessit



Jauheet ja suspensiot

- Suspensiossa kiintoaine on sekoittunut jatkuvaan väliaineeseen
- Dispersiossa ei-jatkuva aine on sekoittunut hienojakoisena jatkuvaan väliaineeseen, esim.:
 - aerosolit (kiinteä tai neste kaasussa), emulsiot (neste nesteessä), soolit (kiinteä nesteessä), vaahdot (kaasu nesteessä)
- Kuljetus, sekoitus, varastointi, ...

Yksittäisillä jauhepartikkeleilla on tietyt ominaisuudet

- Määrittävät jauheen käyttäytymisen
- esim. koko, muoto, pinta-ala, tiheys, varautuminen, kovuus, koostumus, faasikoostumus, johtavuudet, ...

Prosessien ohjauksessa tarvitaan jauheen bulk-ominaisuuksia

- Muodostuvat partikkelien yhteisvaikutuksesta
- esim. kokojakauma, muotojakauma, ominaispinta-ala, bulk-tiheys, liuku- ja vierintäkitka, valumakulma, kokoonpuristuvuus, virtaus- ja leijutusominaisuudet, ... Oulun yliopisto



Mekaaniset ilmiöt Miten niitä tarkastellaan?



Partikkelit ja niiden ominaisuudet

- Kokeelliset mittaukset ja analysointi
 - Partikkelien koko(jakauma) ja muoto, ominaispinta-ala
 - Näytteenotto!
- Mekaanisten yksikköprosessien (esim. murskaus, jauhatus, seulonta, granulointi, jne.) simulointi ja mallinnus
- Partikkelien erotus
 - Pintakemialliset, magneettiset, sähköiset ja morfologiset ominaisuudet, tiheyserot, inertia

Jauheiden ja suspensioiden käsittely

- Fluidimekaniikka
 - Sekoittumisen ja kuljetuksen tarkasteluun; vrt. aihe 5

Mekaanisten ilmiöiden tarkastelutapoja käsitellään tarkemmin mm. seuraavissa opintojaksoissa:

- 477121A, Partikkelitekniikka (5 op)
- 477122A, Jauheiden ja suspensioiden käsittely (5 op)

Kuvalähde: Niinimäki: Partikkeleiden vuorovaikutus. POHTO, 2013.

Oulun yliopisto



Siirtoilmiöt

*"Process engineer never dies,
it's just another transport phenomenon."*



Kuvalähde: Turbulenssin vuodet 1961-2011.
Oulun yliopiston prosessikilta 50 vuotta.

Kaikissa prosesseissa esiintyy aineen, energian ja/tai liikemäärän siirtymistä

- Energian siirtyminen → Lämmönsiirto
- Liikemäärän siirtyminen → Liikkeensiirto/Virtausmekaniikka
- Aineen (komponentin) siirtyminen
→ Aineensiirto/Diffuusio

Eri siirtoilmiöiden mekanismit ovat molekulaarisella tasolla samankaltaisia

- Molekyylien välisistä vuorovaikutuksista voidaan johtaa korrelaatioita eri siirtoilmiöitä kuvaaville suureille
 - Lämmönjohtavuus, diffuusiokerroin, viskositeetti
 - Ilmiöitä kuvaavien mallien samankaltaisuutta voidaan hyödyntää ongelmien ratkaisussa

Siirtoilmiöiden hallinta on keskeistä prosessi- ja ympäristötekniikassa!

- Olosuhteiden valinnalla voidaan hallita ilmiöitä ja ohjata niitä oikeaan suuntaan
- Matemaattisilla malleilla voidaan ennustaa käyttäytymistä Oulun yliopisto



Siirtoilmiöt: Lämmönsiirto



Kuva: Kesäinen ilta Schelde/Escaut-joen varrella (Tournai, Belgia), 2017.

Mekanismit

- Johtuminen
 - Lämmönjohtavuus on aineominaisuus, joka on seurausta ainehiukkasten vuorovaikutuksista toistensa kanssa
 - Johtumismekanismit ovat erilaisia eri olomuodoissa
 - Lämmönjohtavuus on suurinta kiinteissä aineissa ja pienintä kaasuissa; parhaita lämmönjohtimia ovat metallit
 - Siirtyvä lämpömäärä on suoraan verrannollinen lämpötilaeroon
- Kuljetus / konvektio
 - Lämpö siirtyy virtaavan fluidin mukana
 - Voi olla pakotettua tai vapaata
 - Pakotettu = Ulkoisesti aiheutettu virtaus
 - Vapaa = Lämpötilaero saa aikaan virtauksen
- Säteily
 - Kappaleeseen tuotu energia aikaansaa hiukkasten virittymistä, joka pyrkii palautumaan takaisin alempiin energiatiloihin. Palautumisessa purkautuu energiaa säteilyn muodossa.
 - Esiintyy kaikissa lämpötiloissa, mutta merkittävä vasta korkeammissa lämpötiloissa (noin 400 – 500 °C:sta ylöspäin)

Oulun yliopisto



Siirtoilmiöt: Lämmönsiirto

Lämpötilaerojen ja/tai virtausten aikaansaamaa energian siirtymistä

Käytännön merkitys

- Tietyt yksikköprosessit perustuvat lämmönsiirtoon
 - Haihdutus, kuivaus, kiteytys, lämmönvaihdin
- Lähes kaikki prosessit sisältävät lämmönsiirtoa

Lämmönsiirron matemaattiseen käsittelyyn liittyviä keskeisiä käsitteitä

- Lämmönsiirto eli lämpövirta, lämpövuoto
- Ominaislämpökapasiteetti
- Virtaus
- Entalpia eli lämpösisältö

Lämmönsiirtoa käsitellään tarkemmin mm. seuraavassa opintojaksossa:

- 477322A, Lämmön- ja aineensiirto (5 op)

Oulun yliopisto



Siirtoilmiöt Liikkeensiirto

Liikkeensiirto on liikemäärän ($p = mv$) siirtymistä eli virtausmekaniikkaa

- Virtaavan fluidin osaset noudattavat mekaniikan peruslakeja (kuten kiinteät kappaleet)
 - Kun kappaleeseen ei kohdistu ulkoisia voimia, se on joko levossa tai jatkuvassa suorassa liikkeessä
 - Ulkoisen voiman vaikuttaessa kappaleen liikemäärän muutosnopeus on suoraan verrannollinen käytettyyn voimaan
 - Voima ja vastavoima ovat yhtäsuuret ja vastakkaissuuntaiset
- Liikkeensiirto eli voiman vaikutus näkyy kaikkien kappaletta liikuttavien voimien summana
 - esim. potentiaalienergia (maan vetovoima), staattinen (ulkoinen) paine, virtauksen kuljetus sekä molekulaariset törmäykset
- Keskeinen fluidin ominaisuus on viskositeetti
 - kuvaa fluidin käyttäytymistä leikkauvoimien alaisena (osasten väliset kitkavoimat, jotka pyrkivät estämään liikettä toistensa ohii)
- Sisäisen kitkan lisäksi virtausta hidastavat rajapinnat, joiden hidastavaa vaikutusta kuvataan pintakitkalla



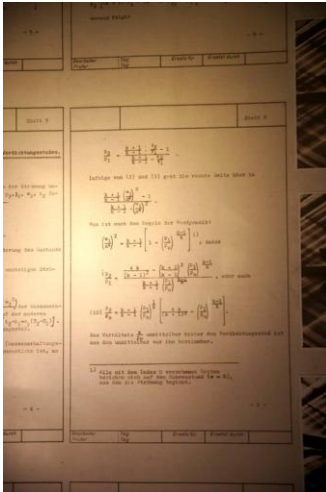
Kuva: Ruotsinlapinkoira pysäyttää suihkulähteen veden virtauksen päällään (Arlon, Belgia), 2015.

Fluidi = Kaasu tai neste, joka ei pysyvästi vastusta muodonmuutosta.

Oulun yliopisto



Siirtoilmiöt Liikkeensiirto



Käytännön merkitys

- Huomioitava kaikissa prosesseissa, joissa esiintyy esim. virtauksia tai sekoittumista
- Luonnollisesti keskeisessä roolissa kuljetuksessa
 - vrt. aihe 5

Liikkeensiirtoa käsitellään tarkemmin mm. seuraavassa opintojaksossa:

- 477052A, Virtaustekniikka (5 op)

Kuva: Virtausten laskentaa eli saksalaista rakettitiedettä Deutsches Technikmuseumissa (Berliini, Saksa), 2015.

Oulun yliopisto

Siirtoilmiöt Aineensiirto



Ainehiukkasten pyrkimys siirtyä korkeammasta pitoisuudesta laimeampaan

- Ajavana voimana pitoisuuserot (konsentraatiogradientti)
- Pitoisuuseron lisäksi taustalla voi olla:
 - Lämpötilagradientti: Pienet hiukkaset konsentroituvat korkean lämpötilan alueelle (terminen diffuusio)
 - Painegradientti: Suuret molekyylit konsentroituvat esim. linkouksessa ulkokehälle (painediffuusio)
 - Potentiaaligradietti: Ulkoinen voima aikaansaa erottumisen (pakotettu diffuusio)

Mekanismit

- Molekulaarinen diffuusio
 - Kaikki molekyylit ovat jatkuvassa liikkeessä (lämpöliike, Brownin liike)
 - Spontaani sekoittuminen (entropian kasvu)
 - Diffuusio = Nettovirta, jolla hiukkaset siirtyvät korkeammasta pitoisuudesta matalampaan
- Virtauksen aiheuttama aineensiirto
 - Fluidin virtauksen aikaansaama aineensiirto
 - Väkevässä liuoksissa diffuusio aiheuttaa virtausta
- Kokonaisaineensiirto on näiden summa

Oulun yliopisto



Siirtoilmiöt Aineensiirto



Kuva: Japanilainen jälkiruoka (Kokura, Japani), 2015.

Molekulaarista diffuusiota kuvataan Fickin diffuusiolakien avulla

- Keskeisiä käsitteitä moolivuo, diffuusiokerroin, konsentraatio
- Diffuusiokerroin kuvaa aineensiirtonopeutta
 - Kullekin systeemille ominainen suure
 - Aine, joka siirtyy
 - Aine, jossa siirtyy
 - Lämpötila, paine, koostumus
 - Kaasuilla lähes riippumaton koostumuksesta; kasvaa lämpötilan noustessa
 - Suuruusluokka $0,05 - 2 \text{ cm}^2/\text{s}$
 - Nesteillä riippuu koostumuksesta; kasvaa lämpötilan noustessa
 - Suuruusluokka $0,5 \cdot 10^{-5} - 4 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$
 - Diffuusio kiinteän aineen sisällä kasvaa voimakkaasti lämpötilan noustessa; lisäksi huokosdiffuusio kiintoaineen huokosissa
 - Suuruusluokka $\cdot 10^{-30} - \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$

Oulun yliopisto



Siirtoilmiöt Aineensiirto

Käytännön merkitys

- Aineensiirtoa esiintyy muodossa tai toisessa kaikissa prosesseissa
- esim.:
 - absorptio, jossa aine siirtyy kaasusta nesteeseen
 - kuivaus, jossa neste (vesi) poistetaan kuiva-aineesta
 - vaatii samanaikaista lämmön- ja aineensiirtoa

Aineensiirtoa käsitellään tarkemmin mm. seuraavassa opintojaksossa:

- 477322A, Lämmön- ja aineensiirto (5 op)

Oulun yliopisto



Yhteydet siirtoilmiöiden välillä

$$\text{Lämpövuoto} = q_y = -k \frac{dT}{dy}$$

$$\text{Leikkausjännitys} = \tau_{yx} = -\mu \frac{dv_x}{dy}$$

$$\text{Moolivuoto} = J_{Az} = -cD_{AB} \frac{dx_A}{dz}$$

Siirtoilmiöitä kuvaavat matemaattiset yhtälöt ovat samankaltaisia

- Lämmönsiirto: Fourierin lämmönjohtavuuslaki
- Liikkeensiirto: Newtonin viskositeetilaki
- Aineensiirto: Fickin 1. diffuusiolaki

Ajavat voimat

- Lämmönsiirto: lämpötilagradientti (dT/dy)
- Liikkeensiirto: nopeusgradientti (dv_x/dy)
- Aineensiirto: pitoisuusgradientti (dx_A/dz)

Vastusta kuvaava suure

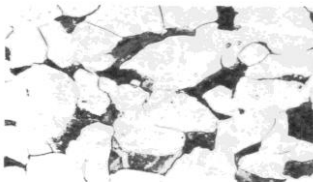
- Lämmönsiirto: lämmönjohtavuus (k)
- Liikkeensiirto: viskositeetti (μ)
- Aineensiirto: diffuusiokerroin (D_{AB})
- Viskositeetti kuvaa suoraan vastusta – lämmönjohtavuus ja diffuusiokerroin vastuksen käänteislukua

Oulun yliopisto



Olomuodon muutokset ja faasitransformaatiot

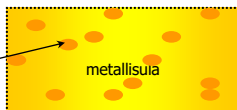
Kuvalähde: Miekk'ojan metallioppi.



KUVA 7.9. Alieutektoidinen hiiliteräs (0,18 % C), jäähtynyt ilmassa kuumavaltssauksen jälkeen; valkoiset kiteet ferriittia, tummat periittia, jonka lamelleja ei kuvassa erotu.



kuonaprisaroita



metallisula

Peruskäsitteitä

- Homogeeninen systeemi
 - Ei epäjatkuvuuskohtia systeemiä kuvaavissa suureissa
 - HUOM! Suureiden ei tarvitse olla vakioita
- Heterogeeninen systeemi
 - Koostuu useasta homogeenisestä systeemistä (= faasit), joiden välillä on epäjatkuvuuskohtia systeemiä kuvaavissa suureissa (= rajapinnat)
- Faasit
 - Kiinteä, nestemäinen (sula) ja kaasumainen (höyry) olomuoto
 - Heterogeeninen systeemi voi koostua useasta saman olomuodon faasista (esim. öljy ja vesi)

Olomuodon muutokset (faasimuutokset)

- Muutos olomuodosta toiseen
- Kiinteä – Neste → Sulaminen ja jähmettyminen
- Neste – Kaasu → Höyrystyminen ja tiivistyminen
- Kiinteä – Kaasu → Sublimoituminen ja härmistyminen

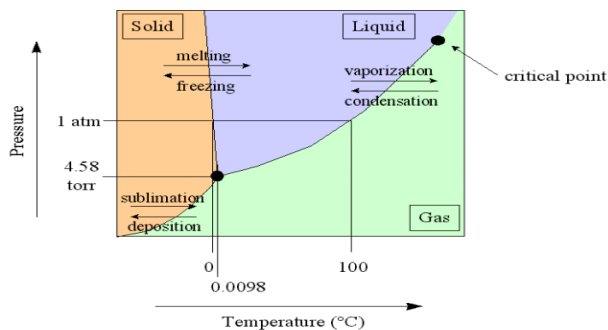
Faasitransformaatiot

- Kiinteän tilan kiderakenteen muutokset

Oulun yliopisto



Olomuodon muutokset ja faasitransformaatiot



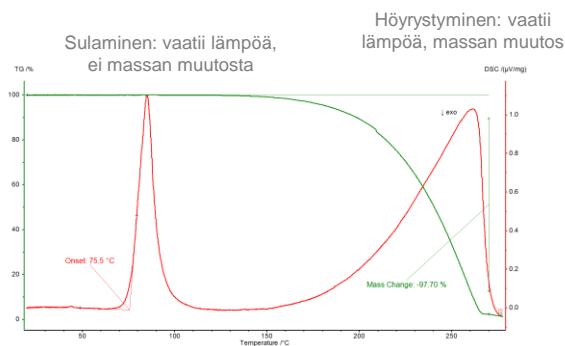
Oulun yliopisto

Käytännön merkitys

- Kaikissa prosesseissa ei välttämättä esiinny faasimuutoksia eikä –transformaatioita, mutta ne on otettava huomioon, mikäli niitä esiintyy
- Kaikkiin muutoksiin liittyy tilavuuden muutos
 - Yleensä tilavuus kasvaa, kun siirrytään matalamman lämpötilan olomuodosta korkeamman lämpötilan muotoon
 - Poikkeuksena esim. jää – vesi
- Kaikissa muutoksissa vapautuu tai sitoutuu lämpöä
 - Aineen perushiukkasten välisten sidosten hajoamista ja uudelleen muodostumista
 - Vastakkaisiin faasimuutoksiin liittyvät energianmuutokset ovat yhtäsuuret, mutta "vastakkaismerkiset"
 - esim. se lämpö, joka tarvitaan tietyn kiinteän kappaleen sulattamiseksi, vapautuu, kun sama kappale jäähmettyy
- Aineen olomuoto vaikuttaa reaktiomekanismeihin
 - esim. kiinteän ja sulan teräksen hapettumisreaktioilla on hyvin erilaiset mekanismit



Olomuodon muutokset ja faasitransformaatiot



Kuva: Differential Scanning Calorimetry (DSC) – menetelmällä määritetyt entalpien ja massan muutoksia kuvaavat käyrät lämpötilaa nostettaessa.

Oulun yliopisto

Miten tarkastellaan?

- Kokeelliset tarkastelut
 - esim. näyte altistetaan kuumennus-jäähdytys-syklille ja seurataan siinä tapahtuvia muutoksia (visuaalisesti, lämpö määrän muutosten mittaus, ...)
- Analyysit
 - esim. näytteiden mineraloginen tarkastelu
- Mallinnus
 - esim. erilaiset tasapainotarkastelut vastaavalla tavalla kuin kemiallisiin reaktioihin liittyen; tasapainopiirroksot

Olomuodon muutoksia ja faasitransformaatioita käsitellään tarkemmin mm. seuraavissa opintojaksoissa:

- 477401A, Termodynaamiset tasapainot (5 op)
- 477402A, Kiinteiden materiaalien rakenne (5 op)



Kemialliset reaktiot

Reaktioiden jaottelusta

- Homogeeniset ja heterogeeniset reaktiot
 - Homogeeniset reaktiot usein kaasureaktioita
- Katalyyssi- ja ei-katalyyssi-reaktiot
 - Homogeeninen ja heterogeeninen katalyyssi
- Ekso- ja endotermiset reaktiot
 - Vapautuuko vai sitoutuuko lämpöä? Reaktioentalpia (ΔH)
- Jaottelu lähtöaineen tai tuotteen mukaan
 - esim. hapetus, hydraus, hydrolyysi (veden aikaansaama hajoaminen), nitraus, sulfonointi, ...
- Yksi- ja monivaiheiset reaktiot
- Reversiibelit ja irreversiibelit reaktiot
- Jaottelu operointitavan mukaan panosreaktoreissa ja jatkuvatoimisissa reaktoreissa tapahtuviin reaktioihin

Kemiallisia reaktioita käsitellään mm. seuraavissa opintojaksoissa:

- 780116P, Johdatus orgaaniseen kemiaan (5 op)
- 780120P, Kemian perusta (5 op)
- 780123P, Kemian perustyöt (5 op)

Oulun yliopisto



Kemialliset reaktiot

Käytännön merkitys

- Lähes kaikissa prosesseissa esiintyy myös kemiallisia reaktioita, jotka vaikuttavat mm.:
 - syntyvään tuotteeseen (määrä, laatu, ...)
 - prosessin tehokkuuteen/tuottavuuteen/toimintaan
 - prosessiolosuhteisiin
 - prosessin vuorovaikutuksiin ympäristön kanssa
- Reaktiot voivat olla prosessin sisäisiä tai prosessin ja ympäristön välisiä

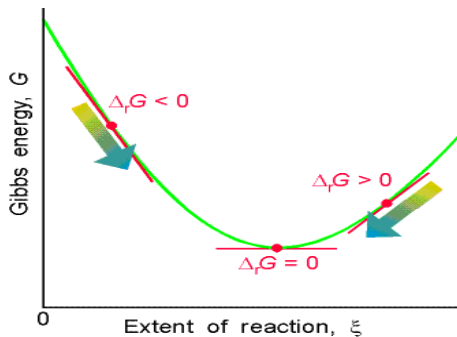
Miten tarkastellaan?

- Tasapainotarkastelut, termodynamiikka
- Reaktionopeudet, kinetiikka
- Reaktiomekanismit, rajoittavat tekijät, kokonaisnopeus
 - usein huomioitava myös siirtoilmiöiden nopeudet

Oulun yliopisto



Kemialliset reaktiot Tasapainotarkastelut ja termodynamiikka



Kuvalähde: Atkins: Physical chemistry.

Tasapainotiloja tarkastellaan termodynamiikkaa hyödyntäen

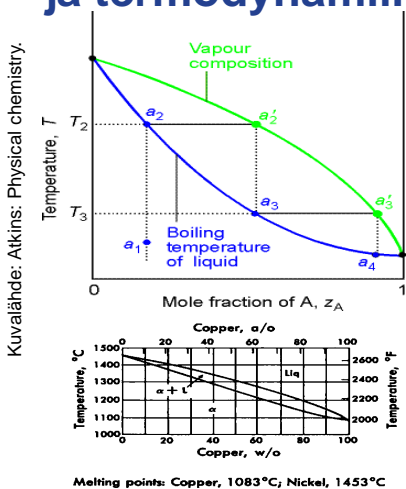
- Termodynamiikka on osa fysikaalista kemiaa
- Termodynamiikka ei tunne aikaa muuttujana

Tasapainotila

- Tila, jossa systeemin mitattavissa suureissa ei tapahdu muutoksia pitkään ajan kuluessa
 - Lämpötila, paine, kemiallinen koostumus, ... (Terminen, mekaaninen ja kemiallinen tasapainotila)
- **Spontaanit** (ts. ilman ulkoista apua tapahtuvat) **reaktiot** johtavat tasapainotilaan
- Termodynamiikassa tarkastellaan reaktioiden/ilmiöiden spontaanisuutta ja määritetään tasapainotiloja
 - Keskeinen suure tasapainojen määrittämisessä on **Gibbsin vapaaenergia**, jolla on minimi tasapainotilassa
 - Tasapainotilan määrittäminen laskennallisesti on Gibbsin vapaaenergian lausekkeen minimin etsimistä
 - Tasapaino voidaan määrittää myös käyttäen **tasapainovakiota**, jonka arvo voidaan määrittää Gibbsin vapaaenergian pohjalta
 - Muita keskeisiä suureita: lämpökapasiteetti, entalpia, **entropia**



Kemialliset reaktiot Tasapainotarkastelut ja termodynamiikka



Kuvalähde: Atkins: Physical chemistry.

Melting points: Copper, 1083°C; Nickel, 1453°C

N. B. Pilling and T. E. Kihlgren, *Metals Handbook*, American Society for Metals, Cleveland, Ohio, 1948 ed., p. 1198.

Kemiallinen tasapaino

- Homogeenisessä systeemissä yhden faasin sisässä
- Tasapainon määrittäminen Gibbsin vapaaenergian avulla – **Minimointimenetelmä**
 - Tarkasteltava systeemi (käytössä olevat alkuaineet, olosuhteet): miten alkuaineet on "jaettava" eri komponenttien kesken, jotta Gibbsin vapaaenergia olisi minimissään?
- Tasapainon määrittäminen tasapainovakion avulla – **Tasapainovakio menetelmä**
 - Tasapainovakion arvo lasketaan Gibbsin vapaaenergiasta
 - Tasapainovakio kuvaa tuotteiden ja lähtöaineiden suhdetta tasapainossa – Määritetään tasapainokoostumukset

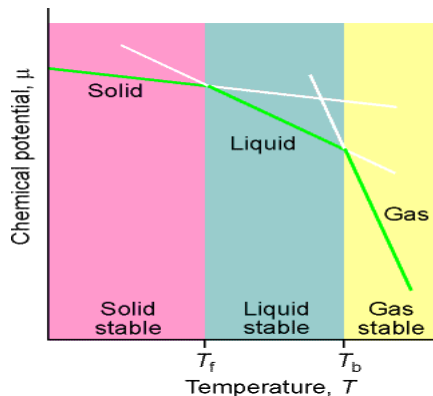
Faasitasapaino

- Heterogeenisessä systeemissä eri faasien (ja niiden sisältämien komponenttien) välillä
- Minimointi- ja tasapainovakio menetelmää voidaan hyödyntää myös faasitasapainojen määrittämiseen
- Huomioitava, että **faasien välinen tasapaino vallitsee** kaikkien systeemin komponenttien välillä
- Tarkastelussa hyödynnetään **tasapaino- eli faasipiirroksia**

Oulun yliopisto



Kemialliset reaktiot Tasapainotarkastelut ja termodynamiikka



Kuvalähde: Atkins: Physical chemistry.

Oulun yliopisto

Termodynaaminen stabiilisuus

- Yhdisteen stabiilisuudella tarkoitetaan sen pysyvyyttä
 - ts. yhdiste ei spontaanisti pyri hajoamaan tai reagoimaan muiksi yhdisteiksi
- Tasapainotilassa esiintyy stabiileja faaseja
- Koska Gibbsin vapaaenergialla on tasapainotilassa minimi, on stabiileimmalla faasilla on alhaisin Gibbsin vapaaenergia

Termodynamiikkaa ja tasapainojen määrittystä käsitellään tarkemmin mm. seuraavassa opintojaksossa:

- 477401A, Termodynaamiset tasapainot (5 op)



Kemialliset reaktiot Reaktionopeudet ja kinetiikka

Termodynamiikka kertoo tilan, jota kohti systeemi pyrkii spontaanisti

- Ei kuitenkaan ota kantaa, kuinka nopeasti liikutaan

Tekijöitä, jotka hidastavat tasapainon saavuttamista:

- Reaktionopeus
- Aineensiirto (lähtöaineet, tuotteet) rajapinnoille, rajapintojen yli sekä pois rajapinnoilta
- Lämmönsiirto
- Virtaukset
- Reaktiotuotekerrokset

Aikariippuvuuksien tarkasteluun tarvitaan

- reaktiokinetiikkaa
- reaktiomekanismista riippuen siirtoilmiötarkasteluja

Oulun yliopisto



Kemialliset reaktiot Reaktionopeudet ja kinetiikka



Kuvat: Eri nopeuksilla tapahtuvaa hapettumista.

Reaktionopeus riippuu

- lämpötilasta
 - reaktiot ovat nopeampia korkeammissa lämpötiloissa
- muista olosuhdemuuttujista (esim. paine)
- reaktioon osallistuvien komponenttien pitoisuuksista
 - ominainen kullekin reaktiolle
- reaktiomekanismista
 - HUOM! Tasapainotarkasteluissa keskeistä on ero lähtö- ja lopputilanteen välillä. Nopeustarkasteluissa myös "reitillä" on väliä!
- reagoivien aineiden olomuodosta ja raekoosta
- sekoituksesta
- katalyyteistä

Reaktionopeuden mallintamiseksi on erilaisia matemaattisia yhtälöitä

- Yleensä: reaktionopeus = $f(\text{lämpötila, pitoisuus})$

Oulun yliopisto



Kemialliset reaktiot Reaktionopeudet ja kinetiikka

Reaktionopeus ja tuotanto

- Reaktionopeus kuvaa nopeutta, jolla lähtöaineet muuttuvat tuotteiksi tietyssä reaktiossa
- Tuotanto kuvaa nopeutta, jolla tiettyä komponenttia muodostuu (tai häviää) tietyssä prosessivaiheessa
- Jos prosessivaiheessa tapahtuu useita reaktioita
 - on jokaisella reaktiolla oma reaktionopeus
 - on komponentin tuotanto kaikkien siihen vaikuttavien reaktioiden yhteisvaikutus

Reaktionopeuksia ja kinetiikkaa käsitellään tarkemmin mm. seuraavassa opintojaksossa:

- 477222A, Reaktorianalyysi (5 op)

Oulun yliopisto



Kemialliset reaktiot Reaktiomekanismit

Reaktiomekanismilla kuvataan reittiä, jota pitkin reaktio etenee lähtöaineista reaktiotuotteisiin

- Voi sisältää useita vaiheita ja välituotteita
- Jokin välivaihe voi muodostua kokonaisreaktiota rajoittavaksi tekijäksi
 - Hitaimman osan aikariippuvuuden mallinnus kuvaa koko ilmiön aikariippuvuutta
- Tarkan kineettisen mallinnuksen perustaksi tarvitaan reaktiomekanismin tuntemusta

Oulun yliopisto



Biologiset ilmiöt



Kuvat: Biologisia ilmiöitä sisältävää tuotantoa (alakuva, Sasbachwalden, Schwarzwald, Saksa) sekä tuotteiden laadunvarmistusta (yläkuva, Muggenbrunn, Baden-Württemberg, Saksa), 2015.

Biologisissa ilmiöissä on mukana jokin elollinen osa/tekijä, esim.:

- Kasvi- ja eläinsoluissa tapahtuvat ilmiöt
- Ilmiöt, joissa on mukana mikrobeja

Usein monimutkaisia

- Sisältävät kemiallisia ja fysikaalisia ilmiöitä
- Esiintyvät erittäin vaihtelevassa mittakaavassa
 - Atomi- ja molekyyli-tason ilmiöt
 - Solutason ilmiöt
 - Kudos- ja elintason ilmiöt
 - Organismitason ilmiöt
 - Ekosysteemitason ilmiöt
- Mallinnus vaatii yksinkertaistamista ja/tai valtavasti laskentakapasiteettia ja -tehoa

Biologisia ilmiöitä käsitellään tarkemmin mm. seuraavissa opintojaksoissa:

- 488052A, Introduction to bioproduct and bioprocess engineering (5 op)
- 488309A, Biokatalyyysi (5 op)

Oulun yliopisto



Ilmiölähtöinen tarkastelu?

Miksi ilmiöiden tarkastelu on tärkeää prosessi- ja ympäristötekniikassa?

- Mitä hyötyjä ilmiöpohjaisella tarkastelulla voidaan mielestäsi saavuttaa?

Pohdi jotain omaan kokemusmaailmaasi liittyvää kohdetta, jota mielestäsi voisi tarkastella ilmiöpohjaisesti?

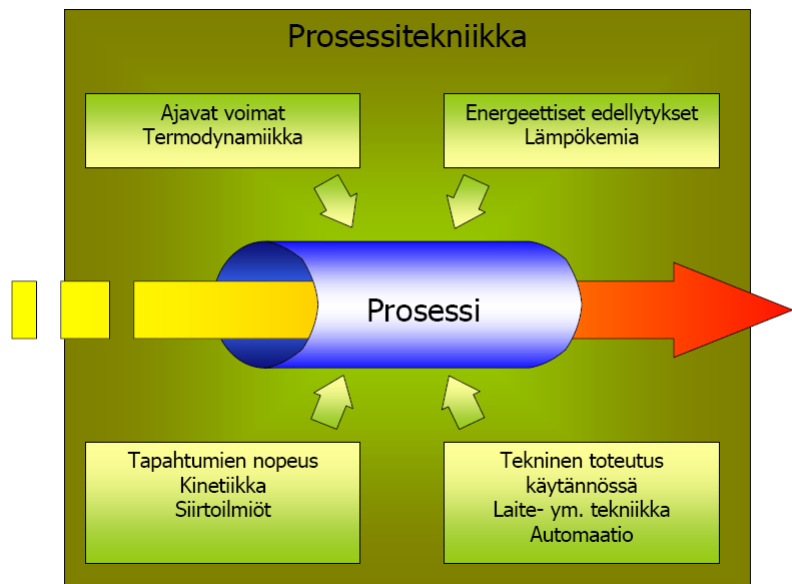
- Mitä ilmiöitä kohteessa esiintyy?
- Mitkä tekijät vaikuttavat kyseisiin ilmiöihin?
- Millaisia hyötyjä ilmiötarkastelulla voidaan saavuttaa?



Oulun yliopisto

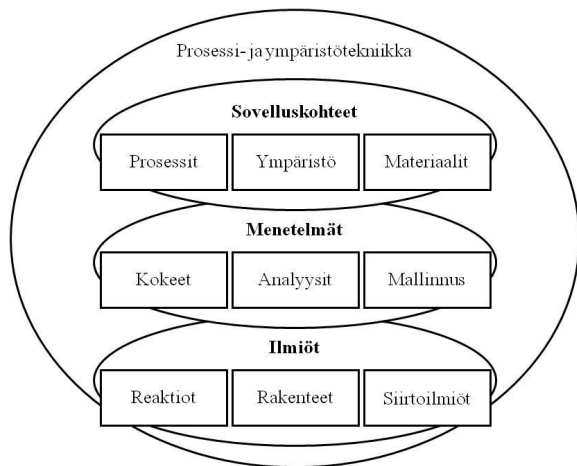


Ilmiölähtöinen tarkastelu





Ilmiölähtöinen tarkastelu



Oulun yliopisto

Voi perustua

- kokeisiin ja mittauksiin
- analyyseihin
- mallinnukseen

Analyytit

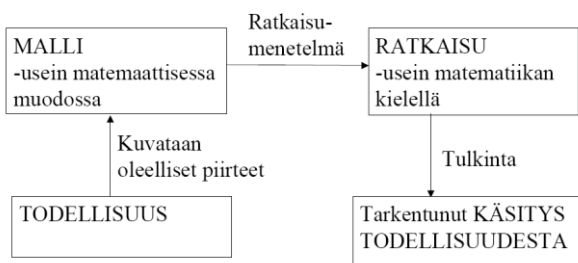
- Analysoitavat näytteet voivat olla todellisesta prosessista tai prosessiolosuhteita simuloivasta koejärjestelystä
- Lukuisia menetelmiä erilaisten fysikaalisten ja kemiallisten ominaisuuksien määrittämiseksi
 - Oleellista tuntea eri menetelmien rajoitukset/mahdollisuudet

Kokeet ja mittaukset

- Kokeilla pyritään simuloimaan todellista prosessia
- Mittaukset voivat kohdistua sekä todelliseen prosessiin että koejärjestelyihin
 - Mittaustarkkuus?



Ilmiölähtöinen tarkastelu



Kuvallähde: Juha Ahola.

Oulun yliopisto

Mallinnus

- Deterministinen mallinnus voi perustua
 - yleisiin luonnonlakeihin (esim. termodynamiikan pääsääntöihin perustuva tasapainolaskenta)
 - ilmiökohtaisiin lakeihin (esim. siirtoilmiöiden tai reaktiokinetiikan mallinnus)
- (Black box –mallinnus perustuu ulkoa mitattaviin suureisiin ja niiden välisten riippuvuuksien hakemiseen)
- Ilmiöperustainen mallinnus vaatii luonnontieteiden ja matematiikan hallintaa
- Käytännössä laajemmat simuloinnit tehdään aina tietokoneavusteisesti erilaisia yleisiä tai spesifisiä simulointiohjelmistoja hyödyntäen.



Tehtävä

Kuvaile tarkastelun kohteena olevaa prosessia ilmiöiden näkökulmasta

- Millaisia fysikaalisia, kemiallisia, biologisia, jne. ilmiötä tarkastelun kohteena olevassa prosessissa esiintyy?
 - Voit keskittyä prosessin kannalta keskeisimpien yksikköprosessien tarkasteluun.
- Mitkä ilmiöistä ovat kokonaisuuden kannalta toivottavia, mitkä eivät?
 - Miten toivottujen ilmiöiden esiintymistä pyritään edistämään ja ei-toivottujen ilmiöiden esiintymistä vastaavasti estämään tai hidastamaan?
- Mitkä tekijät vaikuttavat ilmiöihin? Miten niihin pyritään vaikuttamaan?

Sopiva pituus 1-3 sivua

Oulun yliopisto



Miten alat suorittamaan tehtävää?

Mihin kysymyksiin haet vastauksia?

Mitä (lisä)tietoa tarvitset?

Mistä aiot hakea tarvitsemaasi tietoa?

Miten?

Millaisella aikataululla teet annetun tehtävän?

Paljonko varaat siihen aikaa?



Oulun yliopisto



Yhteenveto

Prosessien hallinta edellyttää, että ymmärretään ilmiöt, jotka

- tapahtuvat prosessissa
- tapahtuvat prosessin ja ympäristön välillä

Tyypillisiä ilmiöitä

- Siirtoilmiöt
- Mekaaniset ilmiöt
- Olomuodon muutokset ja faasitransformaatiot
- Kemialliset reaktiot
- Biologiset ilmiöt

Ilmiöiden tarkastelussa voidaan käyttää

- kokeita ja mittauksia
- analysointia
- mallinnusta