Scritto n. 2 - 15/07/2015

Esercizio n. 1 – Regula falsi per equazioni non lineari

Il metodo della "regula falsi" per l'azzeramento di equazioni non lineari prevede l'applicazione di una formula ricorsiva del tipo:

$$x_{i+2} = \frac{f(x_i)x_{i+1} - f(x_{i+1})x_i}{f(x_i) - f(x_{i+1})}$$

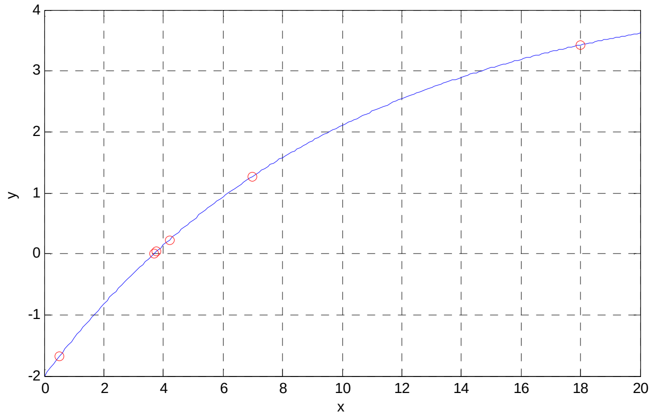
Applicare la formula ricorsiva per determinare la sequenza degli x_i con i=1:8 per la funzione non lineare:

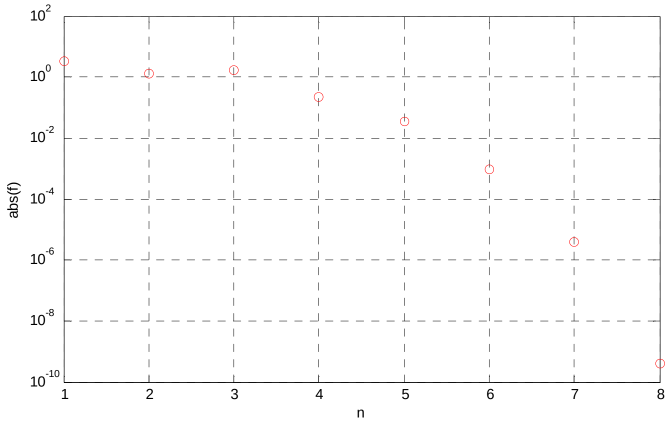
$$f(x) = 6.5\left(1 - e^{-0.1x}\right) - 2$$

Utilizzare come primo tentativo x_1=18, x_2=7.

Riportare in un subplot due grafici descritti nel seguito.
1) Grafico 1: grafico della funzione con sovrapposta la sequenza degli x_i-$f(x_i)$
2) Grafico 2: grafico semi-logaritmico asse y riportando il valore assoluto di $f(x_i)$ in funzione di i

Output





Esercizio n. 2 – Fitting cinetica enzimatica

In un bioreattore viene condotta una reazione enzimatica attraverso la quale un substrato S viene convertito in prodotti attraverso l'uso di un enzima. La concentrazione di substrato, [S], viene misurata a diversi tempi di reazione e si ottengono i seguenti dati sperimentali:

```
tempo: 0  30    60    90    120   180   240   300   315   330         (min)
[S]  : 2  1.87  1.73  1.58  1.43  1.07  0.63  0.12  0.04  0.01        (moli/L)
```

La cinetica di reazione è espressa dalla seguente equazione differenziale di bilancio su S:

$$\frac{d[S]}{dt} = -\left(\frac{m_E}{\alpha_C V_R}\right)\frac{V_m[S]}{K_m + [S] + \left([S]^2 / K_{SI}\right)}$$

Le quantità costanti sono: `alfac=1e3;   me=10;   Vr=100`
Le condizioni iniziali sono [S]°=2 moli/L.

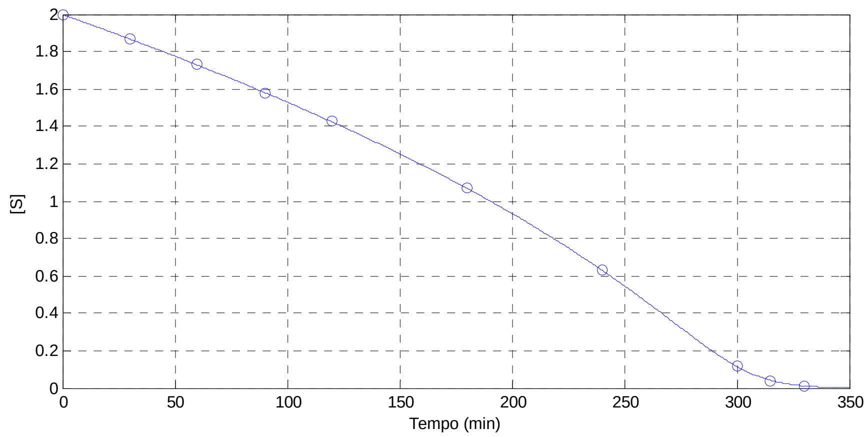
Determinare i parametri aggiustabili Vm, Km e Ksi attraverso fitting dell'equazione differenziale sopra riportata e stamparne il valore.

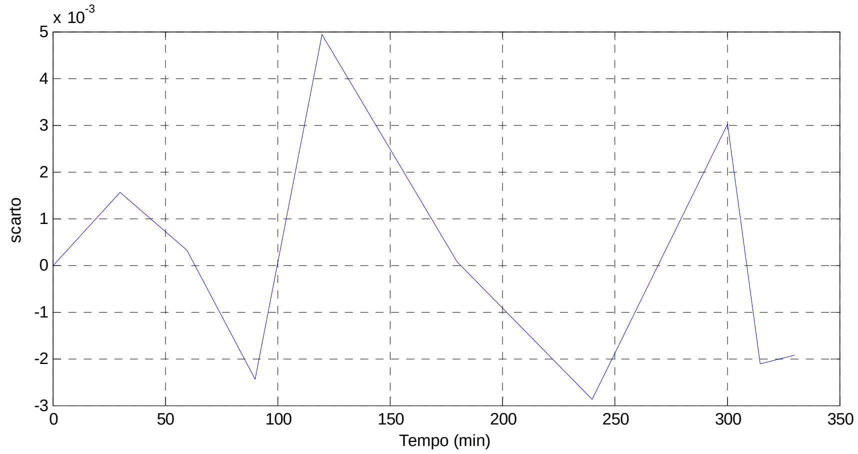
Tracciare in un subplot due grafici:

1) Grafico 1: dati sperimentali e calcolati in corrispondenza dei parametri di minimo in funzione del tempo
2) Grafico 2: grafico degli scarti (y sper - y calc) in funzione del tempo

Output

```
k =

  211.2323    0.2259    0.5228

fmin =

   5.8416e-05

>>
```





<u>Esercizio n. 3 – Derivata seconda dell'energia libera di eccesso</u>

La formazione di due fasi liquide all'equilibrio può essere rivelata dallo studio della derivata seconda dell'energia libera di eccesso del sistema inserita nella relazione generale (criterio di stabilità):

$$\left(\frac{\partial^2 g^E}{\partial x_1^2}\right)_{T,P} + RT\left(\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}\right) < 0$$

Utilizzando come modello per l'energia libera di eccesso l'equazione di Margules riportata qui sotto (A_{12}=9000, A_{21}=7000, T=400 K, R=8.31),

$$g^E = \frac{A_{12}A_{21}x_1x_2}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2}$$

tracciare quattro grafici in un subplot con le seguenti caratteristiche:
1) gE in funzione di x1 (x1 da 0.05 a 0.95)
2) derivata prima di gE in funzione di x1
3) derivata seconda di gE in funzione di x1
4) criterio di stabilità (vedi sopra) in funzione di x1

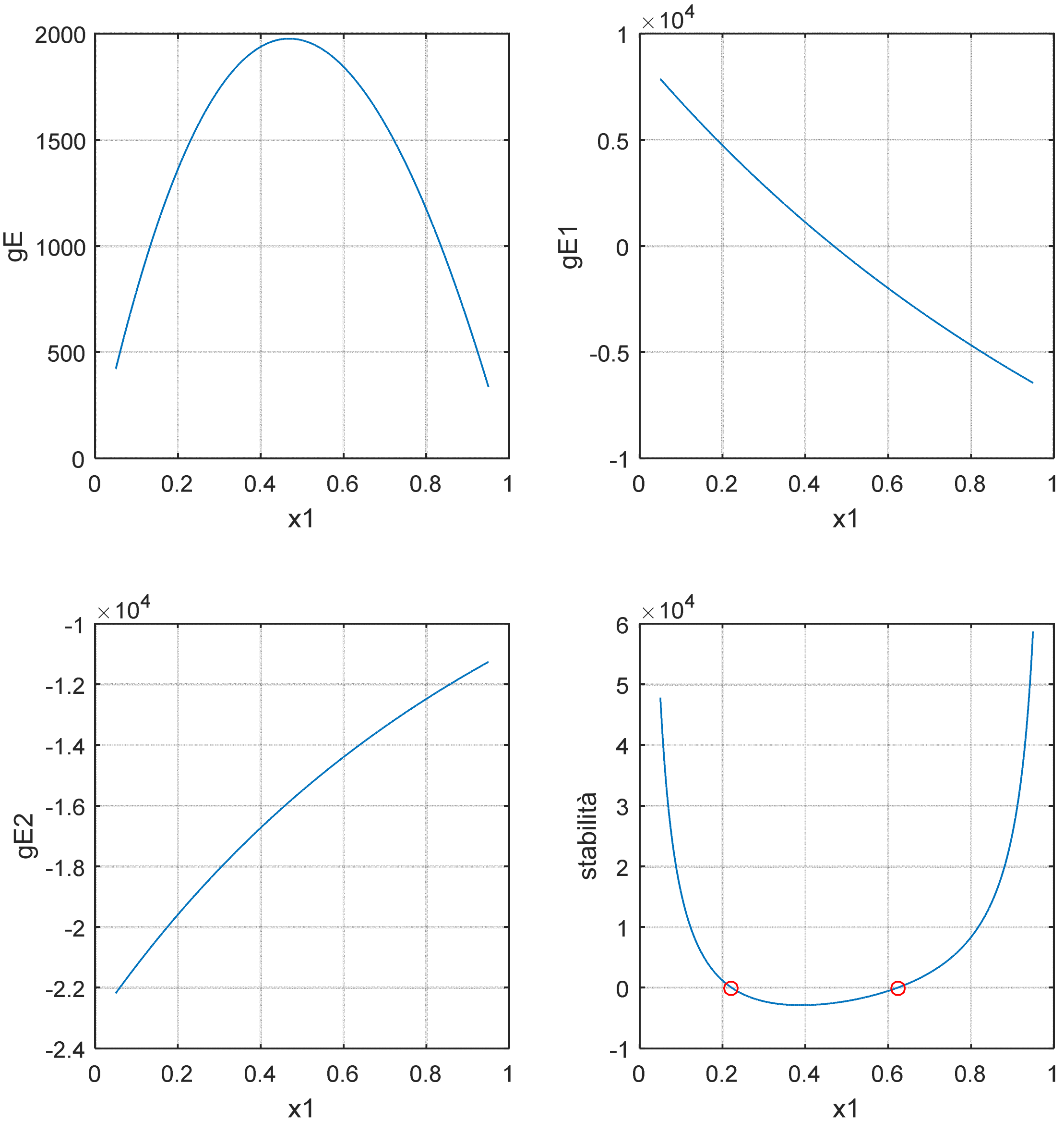
Nell'ultimo grafico individuare gli estremi della lacuna di miscibilità utilizzando un simbolo a piacere.

Nota: per il calcolo della derivata prima e seconda dell'energia libera di eccesso, utilizzare le formule sotto riportate adottando per h il valore di 0.001.

$$f^{'}(t) = \frac{f(t+h) - f(t-h)}{2h}$$

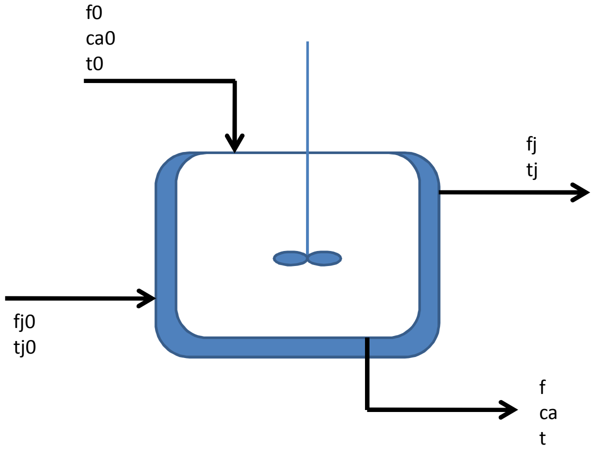
$$f^{''}(t) = \frac{f(t+h) - 2f(t) + (t-h)}{h^2}$$

<u>Output</u>



Esercizio 4 - CSTR non isotermo

Una reazione irreversibile esotermica viene condotta in un reattore CSTR incamiciato schematizzato in figura.



La reazione è del primo ordine e la sua costante cinetica varia con la temperatura secondo la legge di Arrhenius. Alcune equazioni utili al calcolo sono riportate di seguito:

$$r = kC_a \qquad k = \alpha \exp(-E/(RT)) \qquad Q_{tr} = UA(T - T_j)$$

dove Q_{tr} è il calore trasferito dal reattore alla camicia (jacket). Altri dati numerici necessari allo svolgimento dell'esercizio sono:

```
f0=40;          % portata alimentazione         ft3/h
f=40;           % portata uscente               ft3/h
ca0=0.55;       % concentrazione entrante       lb moli/ft3
v=48;           % volume del reattore           ft3
fj=49.9;        % alimentazione al jacket       ft3/h
cp=0.75;        % cp miscela reagente           btu/(lb mole °R)
alfa=7.08e10;   % fattore pre-esponenziale      1/h
ro=50;          % densità miscela reagente      lbm/ft3
R=1.9872;       % costante gas                  btu/(lb mole °R)
U=150;          % coefficiente scambio termico  btu/(h ft2 °R)
A=250;          % area scambio termico          ft2
tj0=530;        % temperatura ingresso jacket   °R
t0=530;         % temperatura alimentazione     °R
lam=-30000;     % calore di reazione            btu/lb mole
cj=1;           % calore spec. fluido jacket    btu/(lbm °R)
E=30000;        % energia di attivazione        btu/lb mole
roj=62.3;       % densità fluido jacket         lbm/ft3
vj=12;          % volume jacket                 ft3
```

I bilanci di materia e di energia sono riassumibili nelle tre seguenti equazioni algebriche non lineari:

$$F_0 C_{A0} - F\, C_A - VkC_A = 0$$

$$\rho c_P (F_0 T_0 - FT) - \lambda VkC_A - UA(T - T_j) = 0$$

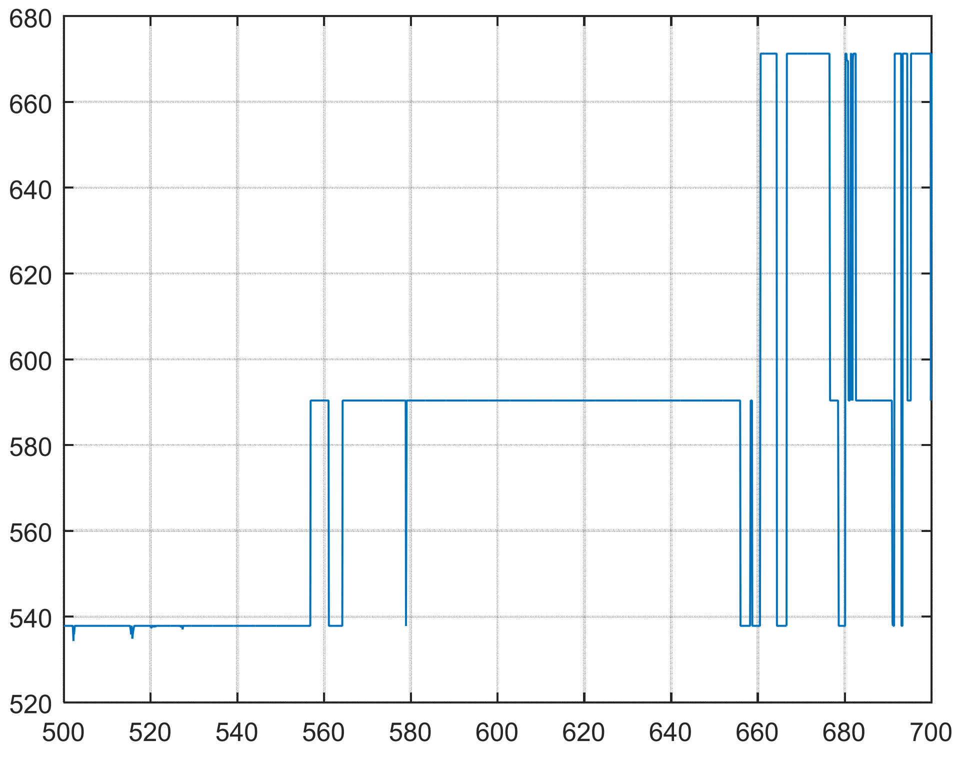
$$\rho_j c_P F_j (T_{j0} - T_j) + UA(T - T_j) = 0$$

Parte 1: Risolvere i bilanci di materia e di energia sul sistema calcolando concentrazione uscente, T uscente e Tj uscente.

Parte 2: Usando come valore di primo tentativo per T i valori tra 200 e 700 °R, risolvere il sistema e calcolare coma varia la T di uscita in questo range, diagrammandola in funzione del valore di primo tentativo adottato (verificare che si ottengono tre stati stazionari).

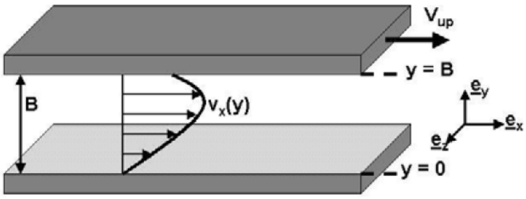
Output

```
>> xs, fvs
xs =
    0.5214  537.8548  537.2534
fvs =
   1.0e-08 *
    0.0000    0.1783   -0.1841
>>
```



Esercizio 5 - Metodo delle differenze finite (esercizio da 2 punti)

Un fluido newtoniano scorre tra due lastre piane delle quali quella superiore è posta essa stessa in movimento a velocità costante. Il flusso (laminare) è causato da un gradiente di pressione e si può assumere che le velocità lungo y e z siano nulle. Il sistema è rappresentato schematicamente come segue.

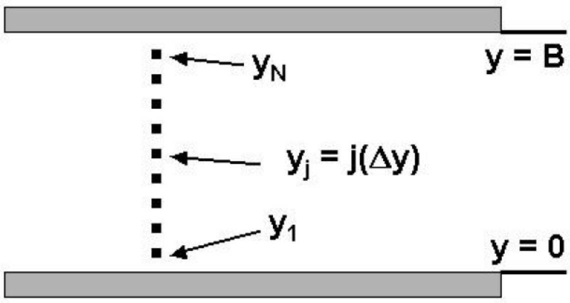


L'equazione differenziale a derivate parziali che mette in relazione le grandezze considerate è la seguente:

$$0 = -\frac{dP}{dx} + \mu \frac{d^2 v_x}{dy^2}$$

Scegliendo una serie di punti collocati lungo l'asse y è possibile trasformare l'equazione precedente in un sistema di equazioni lineari del tipo:

$$v_{j+1} - 2v_j + v_{j-1} = \frac{(\Delta y)^2}{\mu}\frac{dP}{dx} \equiv G \qquad \Delta y = \frac{B}{N+1}$$



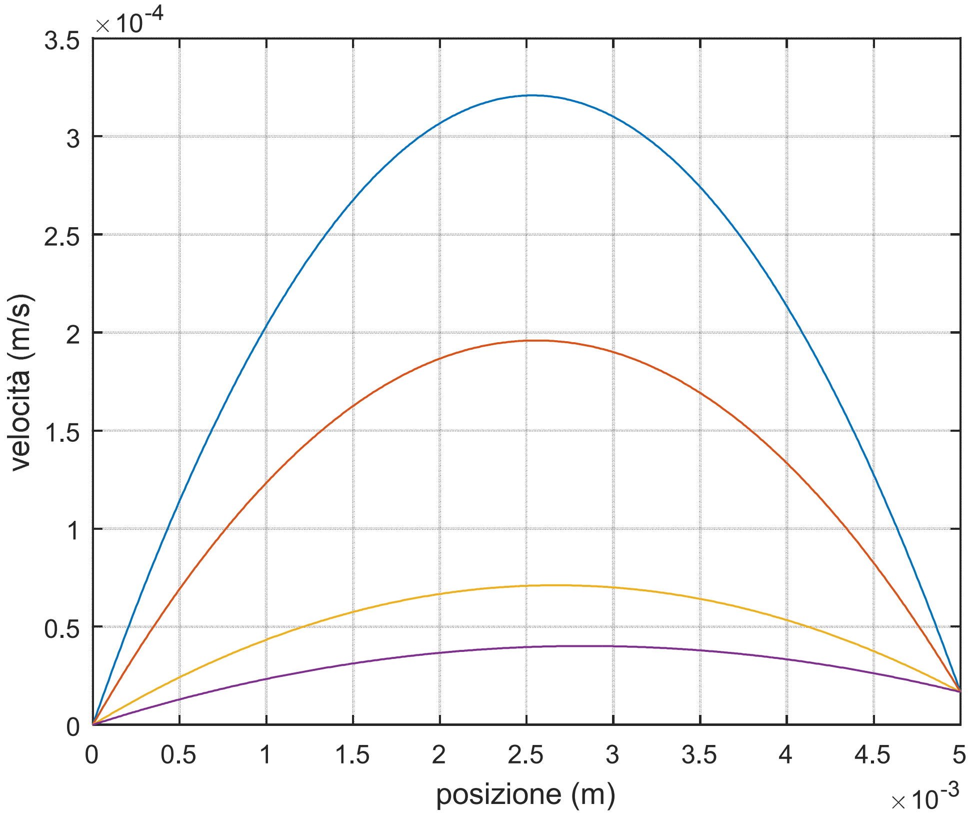
Le incognite sono da v_1 a v_N ,mentre le condizioni al contorno sono: v_0=0; v_{N+1}=Vu

Dati per il calcolo: N=100, B=5e-3; mu=1e-3; Vu=1.667e-5

Risolvere il sistema di equazioni lineari (N equazioni nelle incognite v_i i=1:N; v_0 e v_{N+1} note) e calcolare il profilo di velocità tra le due lastre utilizzando i seguenti valori del gradiente di pressione dPdx: -0.10 ; -0.06 ; -0.02 ; -0.01. Per ognuno dei valori di dPdx riportare in grafico la velocità del fluido in funzione della posizione tra le due lastre piane.

Nota: per evitare di memorizzare tutti i dati per ogni dPdx si può inserire il grafico nel ciclo sui 4 valori di dPdx e congelarlo con il comando 'hold on'.

Output



×10-4
3.5
3
2.5
2
1.5
1
0.5
0
velocità (m/s)
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
4.5
5
posizione (m)
×10-3