

**Scritto n. 6 - 02/05/2016**

**Esercizio 1 – Reattore CSTR non isoterma**

Si consideri il sistema di reazione in serie/parallelo riportato di seguito.

- |             |                 |                            |                              |
|-------------|-----------------|----------------------------|------------------------------|
| 1. A ---> B | $r_1 = k_1 C_A$ | $A0_1=5e9 \text{ mol/L/h}$ | $Ea_1=18000 \text{ cal/mol}$ |
| 2. A ---> C | $r_2 = k_2 C_A$ | $A0_2=3e9 \text{ mol/L/h}$ | $Ea_2=18000 \text{ cal/mol}$ |
| 3. B ---> D | $r_3 = k_3 C_B$ | $A0_3=1e9 \text{ mol/L/h}$ | $Ea_3=18000 \text{ cal/mol}$ |

Dove, la dipendenza della costante cinetica della reazione  $i$  dipende dalla legge di Arrhenius, Eq. 1.

$$k_i = A0_i \exp\left(-\frac{Ea_i}{RT}\right) \quad (1)$$

La reazione viene fatta avvenire in un reattore CSTR incamiciato, operando secondo le condizioni riportate in Tabella 1.

**Tabella 1** – Condizioni operative.

|                              | Valore | Unità                      |
|------------------------------|--------|----------------------------|
| $C_A^{IN}$                   | 0.55   | mol/L                      |
| $C_B^{IN}=C_C^{IN}=C_D^{IN}$ | 0      | mol/L                      |
| $V$                          | 50     | L                          |
| $Q$                          | 1      | L/h                        |
| $Q_J$                        | 10     | L/h                        |
| $c_p$                        | 0.75   | cal/(g °C)                 |
| $\rho$                       | 1200   | g/L                        |
| $T_J^{IN}$                   | 80     | °C                         |
| $T^{IN}$                     | 80     | °C                         |
| $c_{p,J}$                    | 1      | cal/(g °C)                 |
| $\rho_J$                     | 1400   | g/L                        |
| $U$                          | 10     | cal/(dm <sup>2</sup> h °C) |
| $A$                          | 20     | dm <sup>2</sup>            |
| $\Delta H$                   | -3000  | cal/mol                    |

$$Q(C_A^{IN} - C_A) = -V(-r_1 - r_2) \quad (2)$$

$$Q(C_B^{IN} - C_B) = -V(+r_1 - r_3) \quad (3)$$

$$Q(C_C^{IN} - C_C) = -V(+r_2) \quad (4)$$

$$Q(C_D^{IN} - C_D) = -V(+r_3) \quad (5)$$

$$\rho \cdot c_p \cdot Q \cdot (T(t=0) - T) = V \cdot \Delta H \cdot r_1 + U \cdot A \cdot (T - T_J) \quad (6)$$

$$\rho_J \cdot c_{p,J} \cdot Q_J \cdot (T_J^{IN} - T_J) = -U \cdot A \cdot (T - T_J) \quad (7)$$

**Parte 1:** Calcolare le concentrazioni in uscita di ogni componente e la temperatura del reattore e della camicia in corrispondenza delle condizioni fissate in tabella.

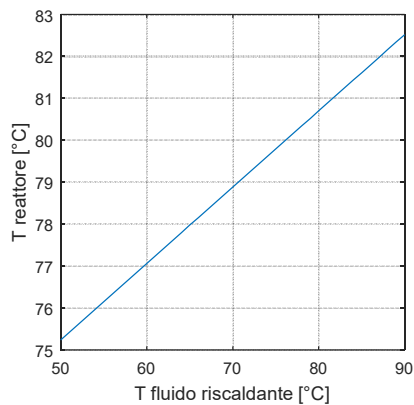
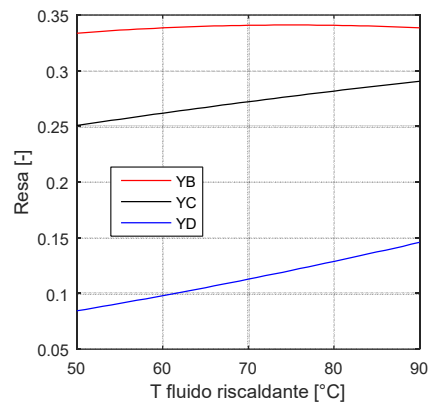
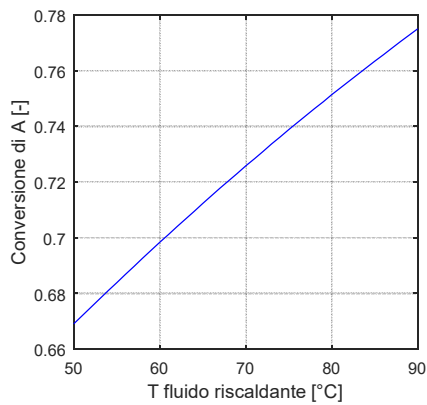
**Parte 2:** facendo variare la temperatura in ingresso alla camicia ( $T_j^{IN}$ ) in un range 50-90°C, riportare in grafico la conversione di A ( $X_A$ ), le rese dei componenti B, C e D ( $Y_i$ ) e la temperatura del reattore in funzione di  $T_j^{IN}$ .

$$X_A = \frac{C_A^{IN} - C_A}{C_A^{IN}} \quad (8) \quad Y_B = \frac{C_B}{C_A^{IN}} \quad (9) \quad Y_C = \frac{C_C}{C_A^{IN}} \quad (10) \quad Y_D = \frac{C_D}{C_A^{IN}} \quad (11)$$

## Output

### Parte 1

ca = 0.13674 mol/L  
 cb = 0.18747 mol/L  
 cc = 0.15497 mol/L  
 cd = 0.070821 mol/L  
 ct = 80.7062 °C  
 ctj = 80.0099 °C



### Parte 2

## Esercizio 2 - Equilibrio L-V in una miscela ternaria

Una corrente di vapore, costituita da 3 componenti, è in equilibrio con una fase liquida alla pressione di 300 mmHg. La composizione molare di tale miscela è: 5% di benzene (1), 40% di toluene (2) e 55% di stirene (3). Le costanti di Antoine per i 3 componenti sono riportate in tabella (P in mmHg, T in °C).

|         | A       | B        | C       |
|---------|---------|----------|---------|
| BENZENE | 6.89272 | 1203.531 | 219.888 |
| TOLUENE | 6.95334 | 1343.943 | 219.377 |
| STIRENE | 7.06623 | 1507.434 | 214.985 |

Per il calcolo è necessario trovare la radice dell'equazione non lineare:

$$f(T) = \left( \sum_{i=1}^3 x_i \right) - 1 = \left( \sum_{i=1}^3 \frac{y_i P_{tot}}{P_i^0} \right) - 1 = 0$$

### **Parte 1**

Calcolare la composizione del liquido e la temperatura del sistema assumendo un comportamento ideale.

### **Parte 2**

Ripetere il calcolo della parte 1 fissando la frazione molare (nel vapore) del componente 1 a 0.1 facendo variare la frazione molare del componente 2 tra 0.1 e 0.8. La frazione molare del componente 3 è quella da bilancio. Tracciare un grafico dove si riporta la temperatura della miscela in funzione della frazione molare del componente 2.

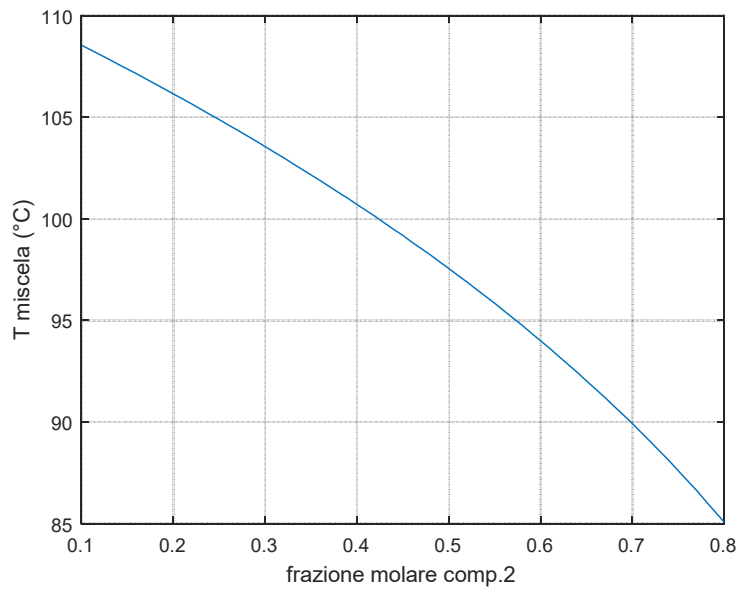
(Nota :  $y_1=0.1$ ;  $y_2=0.1:0.8$ ;  $y_3=1-y_1-y_2$ )

## Output

Parte 1

```
temp =  
    102.6047  
x =  
    0.0104  
    0.1994  
    0.7902
```

Parte 2



### Esercizio 3 - Test sul metodo di Eulero per ODE

Si vuole testare l'efficienza del metodo di Eulero per la risoluzione approssimata della seguente equazione differenziale ordinaria:

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{1+t^2} - 2y^2 \quad \text{con condizioni iniziali:} \quad y(0) = 0$$

Di questa ODE si conosce la soluzione esatta che è:

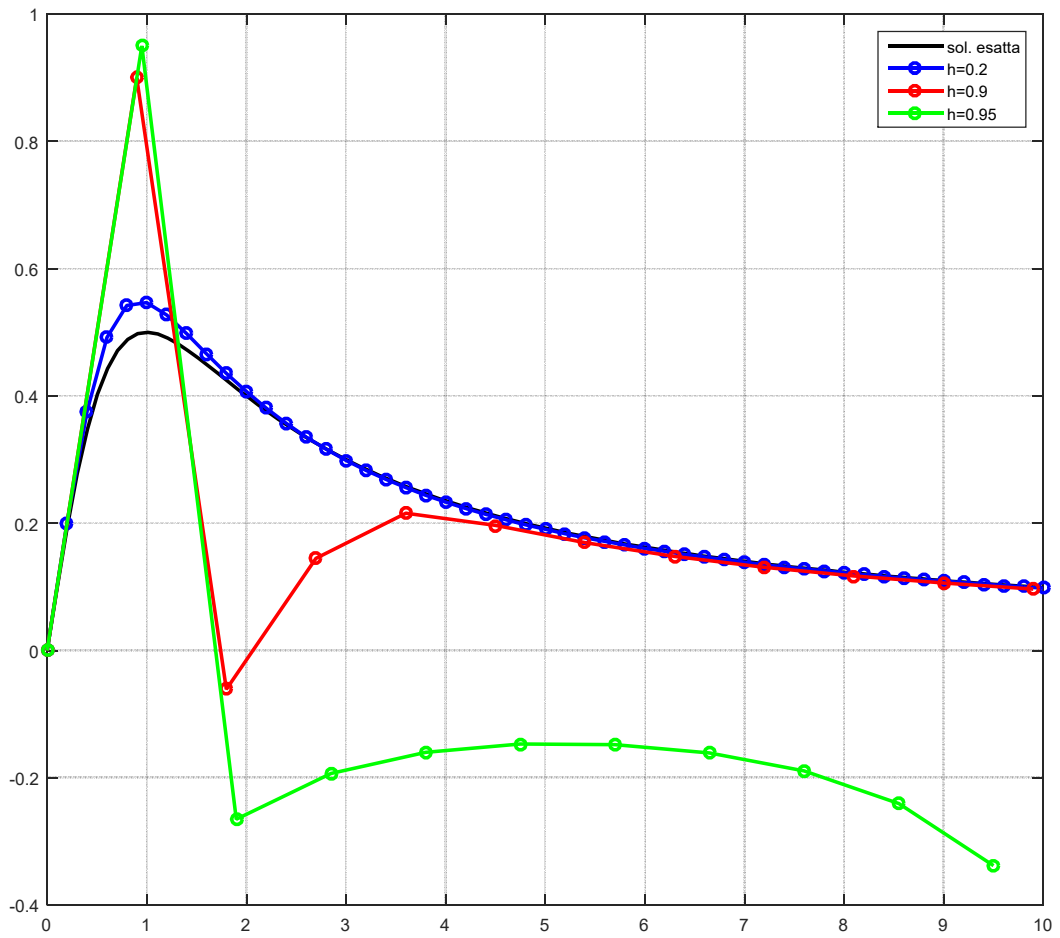
$$y(t) = \frac{t}{1+t^2}$$

Utilizzando la formula ricorsiva del metodo di Eulero tracciare un grafico con t tra 0 e 10 in cui si riportano la soluzione esatta e tre soluzioni approssimate ottenute, rispettivamente, assegnando al passo h i seguenti 3 valori: 0.20, 0.90 e 0.95.

Formula di Eulero:

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$$

## Output



#### **Esercizio 4 - Stabilità di un reattore CSTR**

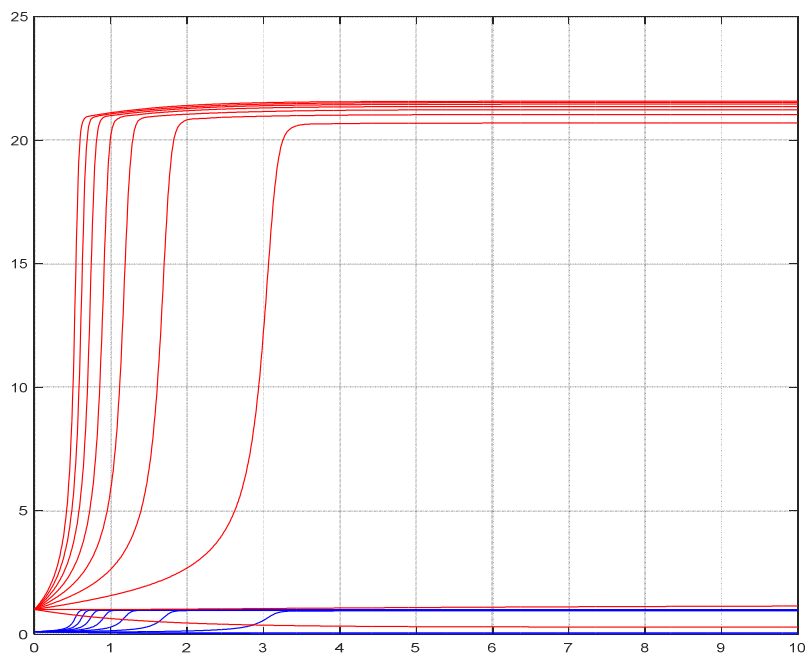
La stabilità di un reattore di tipo CSTR può essere studiata, in funzione di parametri adimensionali, attraverso la risoluzione di due equazioni differenziali riportate di seguito:

$$\frac{d\alpha}{dt} = -\alpha + D_a(1-\alpha)\exp\left(\frac{\gamma\theta}{\gamma+\theta}\right)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = -\theta + BD_a(1-\alpha)\exp\left(\frac{\gamma\theta}{\gamma+\theta}\right)$$

Risolvere queste due equazioni differenziali con  $t$  compreso tra 0 e 10,  $\gamma=9$  e  $B=22$ . Tracciare in un grafico la soluzione per  $\alpha$  e  $\theta$  attribuendo a  $D_a$  i valori da 0.01 a 0.09 con passo 0.01.

#### **Output**



### Esercizio 5 – Cinetica autocatalitica

Una sistema di reazione autocatalitico è costituito dalle due seguenti reazioni chimiche:



I bilanci differenziali per un reattore batch in cui avvengono le reazioni hanno la forma seguente:

$$\frac{dC_A}{dt} = -r_1 - r_2$$

$$\frac{dC_B}{dt} = r_2$$

$$\frac{dC_X}{dt} = -r_1$$

Altri dati per il calcolo:  $k_1=0.05$      $k_{m1}=0.003$      $k_2=0.03$   
 $C_{A0}=10$      $C_{B0}=0$

Considerando 5 valori diversi per la concentrazione iniziale di X ( $C_{X0}=0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5$ ), risolvere il sistema di equazioni differenziali in un intervallo di tempo 0-15 e riportare in tre subplot separati l'andamento delle concentrazioni, rispettivamente, di A, B e X in funzione del tempo.

### Output

