

## Scritto n. 3 - 29/09/2016

### Esercizio n. 1 – Fitting lineare trigonometrico

Sono disponibili i seguenti dati sperimentali:

x: 0.2 0.5 0.8 1.0 1.3 2.0 3.0 4.0

y: 3.5 2.1 1.0 0.3 -1.0 -5.0 -7.5 6.2

Si vogliono descrivere questi dati utilizzando una funzione trigonometrica definita come:

$$f(x) = a_1 \sin(x) + a_2 \cos(x) + a_3$$

Dove i parametri  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  devono essere determinati per fitting sui dati sperimentali. Il problema della determinazione di tali parametri può essere risolto risolvendo il sistema lineare sovradeterminato definito dalla relazione matriciale:

$$\begin{bmatrix} \sin(x_1) & \cos(x_1) & 1 \\ \sin(x_2) & \cos(x_2) & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \sin(x_n) & \cos(x_n) & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_n \end{bmatrix}$$

#### **Parte 1**

Determinare i parametri incogniti nella funzione  $f(x)$  e stamparne i valori a schermo.

#### **Parte 2**

Tracciare un grafico dei dati sperimentali e calcolati ed un grafico degli scarti.

#### **Output**

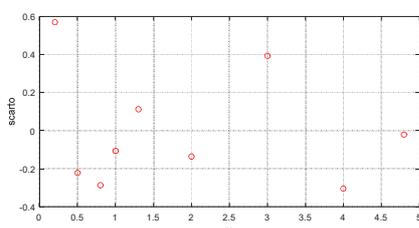
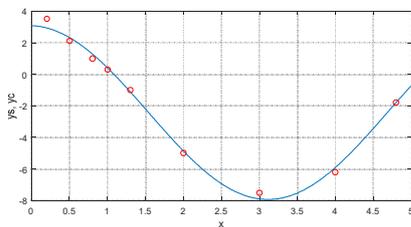
ax =

-0.1643

5.4991

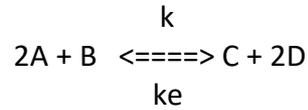
-2.4259

>>



## Esercizio n. 2 – Reazione di equilibrio in semibatch

In un reattore semibatch viene condotta una reazione di equilibrio che ha la stechiometria seguente:



La velocità di reazione ha la seguente espressione:

$$r = kC_A C_B \left( 1 - \frac{1}{k_e} \frac{C_C C_D}{C_A C_B} \right)$$

I bilanci di materia per il reattore, relativi ad ognuno dei componenti, sono rappresentati dalle seguenti equazioni differenziali:

$$\frac{dn_A}{dt} = -2Vr \quad \frac{dn_B}{dt} = -Vr \quad \frac{dn_C}{dt} = Vr \quad \frac{dn_D}{dt} = 2Vr$$

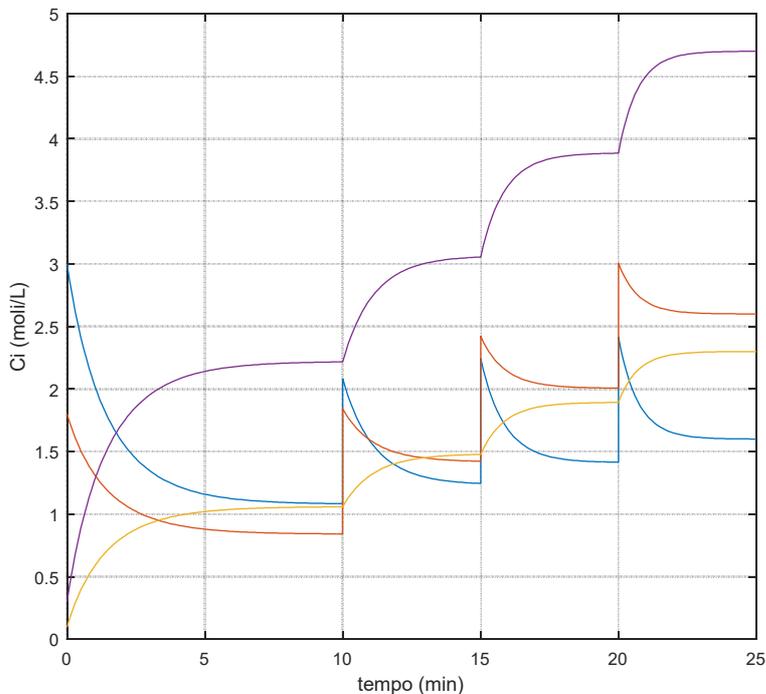
Altri dati necessari al calcolo sono:  $V=30$ ;  $k=4$ ;  $k_e=2.6$

Condizioni iniziali per le moli (A,B,C e D):  $3 \quad 1.8 \quad 0.1 \quad 0.3$

Integrare le equazioni di bilancio di materia e tracciare i profili del numero di moli in funzione del tempo tra  $t=0$  e  $t=25$  minuti.

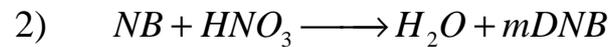
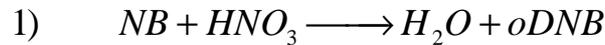
Tenere conto che ai tempi 10, 15 e 20 minuti, vengono aggiunte nel sistema 1 mole di A e 1 mole di B.

### Output



### Esercizio n. 3 – Produzione di dinitrobenzene

Il dinitrobenzene (isomero orto, oDNB) viene prodotto nitrazione del nitrobenzene (NB) con acido nitrico  $HNO_3$ . Le reazioni che avvengono, portano alla produzione simultanea di due isomeri orto e meta secondo lo schema:



Le costanti cinetiche per le due reazioni sono:  $k_1=1.17e-2$ ;  $k_2=0.09e-2$  e le espressioni di velocità sono:

$$r_1 = k_1 C_{NB} C_{HNO_3} \quad r_2 = k_2 C_{NB} C_{HNO_3}$$

La produzione viene effettuata in un reattore continuo agitato (CSTR) avente volume di 200 L e una portata di alimentazione pari a 350 L/h.

Il bilancio di materia su tale sistema, per un generico componente  $i$ , ha la forma:

$$\frac{Q}{V} (C_i - C_{i0}) - \sum_{j=1}^{NR} \nu_{ij} r_j = 0$$

Le concentrazioni in ingresso, per nitrobenzene ed acido nitrico, valgono, rispettivamente 4 e 4.5 mol/L.

**Parte 1** Risolvere le equazioni di bilancio di materia e calcolare le concentrazioni di ogni componente,  $i$ , nel reattore.

**Parte 2** Ripetere il calcolo del punto precedente facendo variare la portata di alimentazione tra 50 e 700 L/h e riportare poi in grafico la conversione del nitrobenzene e la concentrazione del prodotto desiderato (isomero orto).

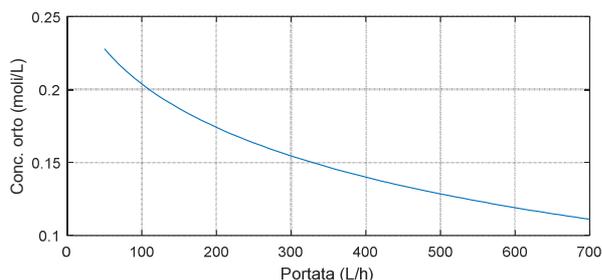
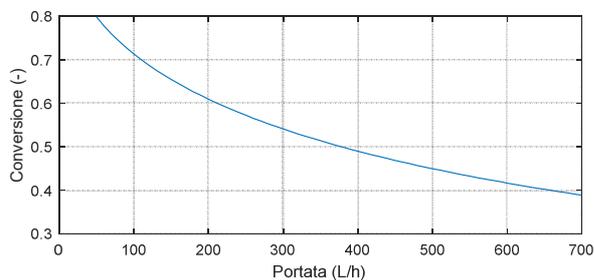
### Output

#### Parte 1

$C_x = 1.9452 \quad 2.4452 \quad 2.0548 \quad 1.9080 \quad 0.1468$

$f_x = 1.0e-15 \quad * \quad -0.2776 \quad -0.2776 \quad 0.2776 \quad 0 \quad 0.0555$

#### Parte 2



### Esercizio n. 4 – Bilancio per la sintesi di benzaldeide

La benzaldeide viene prodotta per ossidazione parziale del toluene in un reattore continuo. Il toluene viene alimentato ad una portata di 100 mol/h ed aria in eccesso del 100%. La temperatura in ingresso è pari a 177°C e 1 atm. La corrente in uscita si trova a 193°C e pressione atmosferica. Oltre alla reazione desiderata, parte del toluene viene convertito ad anidride carbonica e acqua: il 13% del toluene produce benzaldeide mentre lo 0.5% si converte in anidride carbonica.

Risolvere i bilanci di materia e calcolare portate molari e composizione della corrente uscente. Calcolare le portate volumetriche relative alle correnti in ingresso e in uscita.

### Soluzione

			$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$ $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + 9\text{O}_2 \rightarrow 7\text{CO}_2 + 4\text{H}_2\text{O}$					
	MOLI/H	FR MOL		MOLI/H	FR MOL		MOLI/H	FR MOL
C6H5CH3	100,00	0,0950		86,42	0,0821		86,42	0,0821
O2	200,00	0,1900		182,50	0,1733		182,50	0,1733
N2	752,38	0,7149		752,38	0,7146		752,38	0,7146
C6H5CHO	0,00	0,0000		13,00	0,0123		13,00	0,0123
H2O	0,00	0,0000		15,00	0,0142		15,00	0,0142
CO2	0,00	0,0000		3,50	0,0033		3,50	0,0033
<b>TOT</b>	<b>1052,38</b>	<b>1,0000</b>		<b>1052,80</b>	<b>1,0000</b>		<b>1052,80</b>	<b>1,0000</b>
T	177	°C		193	°C		193	°C
P	1	ATM		1	ATM		1	ATM
Q VOL	38857	L/H		40254	L/H		40254	L/H

## Esercizio n. 5 – Fitting non lineare esponenziale

Sono disponibili i seguenti dati sperimentali:

x: 0.8 1 2 3 5 7 10  
y: 75 109 149 149 191 213 224

Si vogliono descrivere questi dati utilizzando una funzione dalla forma:

$$y = f(x) = A * (1 - \exp(-B * x))$$

Dove i parametri A e B devono essere determinati per fitting non lineare sui dati sperimentali.

### **Parte 1**

Determinare i parametri incogniti A e B e stamparne il valore insieme al valore della funzione obiettivo. Tracciare un grafico che riporti i valori sperimentali e calcolati in un intervallo della x tra 0 e 12

### **Parte 2**

Sullo stesso grafico del punto 1 tracciare due ulteriori curve in corrispondenza di una variazione di +10% e -10% sul parametro A trovato

## Output

### Parte 1

Iteration	Func-count	f(x)	Norm of step	First-order optimality
0	3	189927		9.94e+05
1	6	8671.17	4.97674	1.14e+05
2	9	4645.6	1.45139	1.59e+05
3	12	1178.52	0.601545	7.64e+03
4	15	1168.57	0.0202905	468
5	18	1168.5	0.00435358	75.8
6	21	1168.49	0.000784681	12.7
7	24	1168.49	0.000135602	2.17

```
p = 213.9552 0.5450  
fval = 1.1685e+03
```

```
>> Parte 2
```

