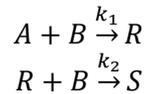


Reattori Chimici
Anno Accademico 2011-2012

Cognome	Nome	Matricola	Firma

Problema 1. In un reattore batch isoterma a volume costante viene introdotta al tempo zero una miscela a concentrazione C_{A0} di un reagente A e C_{B0} di un reagente B. Nel reattore si verificano le reazioni (elementari) del seguente schema serie-parallelo:



Dopo un certo tempo nel reattore si misurano le concentrazioni C_B e C_R . Calcolare:

1. Le concentrazioni di A e di S presenti nel reattore,
2. Il rapporto k_2/k_1 tra le costanti cinetiche.

Alla stessa temperatura dell'esperimento di laboratorio viene poi fatto funzionare un CSTR, in modo da realizzare la massima concentrazione possibile del prodotto R nel reattore. Per tale CSTR, alimentato con le stesse concentrazioni iniziali di A e di B, e supponendo che la costante della prima reazione valga k_1 , calcolare:

3. Le concentrazioni di tutte le specie (A, B, R e S) nel CSTR,
4. Il tempo di riempimento del CSTR.

Dati. $C_{A0} = 3$ mol/L, $C_{B0} = 4$ mol/L, $C_B = 1.6$ mol/L, $C_R = 1.44$ mol/L, $k_1 = 10^{-3}$ L/mol·s.

Problema 2. Si vuole far avvenire la reazione reversibile del primo ordine $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} R$ disponendo di reattori ideali

adiabatici, per ottenere un grado di conversione X_{Af} . La temperatura di alimentazione della miscela costituita da A puro è T_0 , il calore specifico è uguale per tutti i composti, è indipendente dalla temperatura e vale C_p , le costanti cinetiche della reazione diretta ed inversa sono esprimibili con la legge di Arrhenius. Calcolare:

1. Il tempo di riempimento di un CSTR ideale adiabatico in cui si realizza tutta la conversione, e la temperatura di uscita dal reattore della corrente;
2. Il tempo di riempimento di un PFR ideale adiabatico in cui si realizza tutta la conversione e la temperatura di uscita dal reattore della corrente;
3. Il tempo di riempimento nella migliore combinazione di reattori ideali adiabatici in cui si realizza tutta la conversione, e la temperatura di uscita da ogni reattore delle correnti.

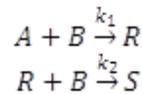
Suggerimento: può essere utile tracciare il diagramma $1/-r_A$ vs. X_A .

Dati. $X_{Af} = 0.85$, $k_{10} = 10^{-2}$ 1/s, $k_{20} = 2 \cdot 10^{-2}$ 1/s, $E_1 = 10^4$ J/mol, $E_2 = 5 \cdot 10^5$ J/mol, $C_p = 1$ kJ/molK, $T_0 = 300$ K.

Istruzioni: compilare innanzitutto con i propri dati la parte alta di questo foglio; per le risposte utilizzare solo questo foglio.

Prova d'esame - 21 febbraio 2012

Problema 1. In un reattore batch isoterma a volume costante viene introdotta al tempo zero una miscela a concentrazione C_{A0} di un reagente A e C_{B0} di un reagente B. Nel reattore si verificano le reazioni (elementari) del seguente schema serie-parallelo:



Dopo un certo tempo nel reattore si misurano le concentrazioni C_B e C_R . Calcolare:

1. Le concentrazioni di A e di S presenti nel reattore,
2. Il rapporto k_2/k_1 tra le costanti cinetiche.

Alla stessa temperatura dell'esperimento di laboratorio viene poi fatto funzionare un CSTR, in modo da realizzare la massima concentrazione possibile del prodotto R nel reattore. Per tale CSTR, alimentato con le stesse concentrazioni iniziali di A e di B, e supponendo che la costante della prima reazione valga k_1 , calcolare:

3. Le concentrazioni di tutte le specie (A, B, R e S) nel CSTR,
4. Il tempo di riempimento del CSTR.

Dati. $C_{A0} = 3 \text{ mol/L}$, $C_{B0} = 4 \text{ mol/L}$, $C_B = 1.6 \text{ mol/L}$, $C_R = 1.44 \text{ mol/L}$, $k_1 = 10^{-3} \text{ L/mol}\cdot\text{s}$.

$$C_{A0} := 3 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad C_{B0} := 4 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad C_B := 1.6 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad C_R := 1.44 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad k_1 := 10^{-3} \cdot \frac{\text{L}}{\text{mol}\cdot\text{s}}$$

$$y_{R\text{pfr}}(X_A, p) := \text{if} \left[p = 1, -(1 - X_A) \cdot \ln(1 - X_A), \frac{1}{1 - p} \cdot \left[(1 - X_A)^p - (1 - X_A) \right] \right] \quad y_{R\text{m}}(X_A, p) := \frac{(1 - X_A) \cdot X_A}{(1 - X_A) + p \cdot X_A}$$

$$y_{RB}(X_A, C_B) := 2 \cdot X_A + \frac{C_B - C_{B0}}{C_{A0}} \quad \text{cinetica in un batch, PFR} \quad \text{cinetica in un CSTR}$$

$$\frac{C_B - C_{B0}}{C_{A0}} = 0.8 \quad \frac{C_R}{C_{A0}} = 0.48$$

valori di primo tentativo $p := 1 \quad X_A := 0.5$

$$\text{Given} \quad y_{R\text{pfr}}(X_A, p) = \frac{C_R}{C_{A0}} = y_{RB}(X_A, C_B) \quad \begin{pmatrix} X_A \\ p \end{pmatrix} := \text{Minerr}(X_A, p) = \begin{pmatrix} 0.64 \\ 0.5 \end{pmatrix} \quad \text{Oppure dal grafico di pagina 196}$$

stechiometria su S

$$C_A := C_{A0} \cdot (1 - X_A) = 1.08 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} - \frac{C_R}{C_{A0}} = 0.16 \quad C_S := C_{A0} - C_A - C_R = 0.48 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad p = 0.5$$

condizioni di velocità massima in un CSTR per $p = 0.5$ oppure dal grafico di pagina 197

$$X_A^\circ := 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{\sqrt{p}}} = 0.586 \quad y_{R\text{m},\text{max}} := \frac{1}{(\sqrt{p} + 1)^2} = 0.343 \quad y_{R\text{m}}(X_A^\circ, p) = 0.343$$

$$C_{A^\circ} := C_{A0} \cdot (1 - X_A^\circ) = 1.243 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad C_{R^\circ} := y_{R\text{m},\text{max}} \cdot C_{A0} = 1.029 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad C_{S^\circ} := C_{A0} - C_{A^\circ} - C_{R^\circ} = 0.728 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\text{Given} \quad y_{RB}(X_A^\circ, C_B) = \frac{C_R}{C_{A0}} \quad C_{B^\circ} := \text{Minerr}(C_B) = 1.515 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad \text{oppure dal grafico di pagina 197}$$

$$\tau = C_{A0} \cdot \frac{X_A^\circ}{-r_A} = C_{A0} \cdot \frac{X_A^\circ}{k_1 \cdot C_A \cdot C_B} \quad \tau := C_{A0} \cdot \frac{X_A^\circ}{k_1 \cdot C_{A^\circ} \cdot C_{B^\circ}} = 933.648 \text{ s} \quad \tau = 15.561 \cdot \text{min}$$

Problema 2. Si vuole far avvenire la reazione reversibile del primo ordine $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} R$ disponendo di reattori ideali

adiabatici, per ottenere un grado di conversione X_{Af} . La temperatura di alimentazione della miscela costituita da A puro è T_0 , il calore specifico è uguale per tutti i composti, è indipendente dalla temperatura e vale C_P , le costanti cinetiche della reazione diretta ed inversa sono esprimibili con la legge di Arrhenius. Calcolare:

1. Il tempo di riempimento di un CSTR ideale adiabatico in cui si realizza tutta la conversione, e la temperatura di uscita dal reattore della corrente;
2. Il tempo di riempimento di un PFR ideale adiabatico in cui si realizza tutta la conversione e la temperatura di uscita dal reattore della corrente;
3. Il tempo di riempimento nella migliore combinazione di reattori ideali adiabatici in cui si realizza tutta la conversione, e la temperatura di uscita da ogni reattore delle correnti.

Suggerimento: può essere utile tracciare il diagramma $1/-r_A$ vs. X_A .

Dati. $X_{Af} = 0.85$, $k_{10} = 10^{-2} \text{ 1/s}$, $k_{20} = 2 \cdot 10^{-2} \text{ 1/s}$, $E_1 = 10^4 \text{ J/mol}$, $E_2 = 5 \cdot 10^5 \text{ J/mol}$, $C_P = 1 \text{ kJ/molK}$, $T_0 = 300 \text{ K}$.

$$k_{10} := 10^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \quad E_1 := 10^4 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol}} \quad k_{20} := 2 \cdot 10^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \quad E_2 := 5 \cdot 10^5 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol}} \quad T_0 := 300 \cdot \text{K} \quad C_P := 10^3 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$\underline{R} := 8.314 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \quad \underline{k}_1(T) := k_{10} \cdot \exp\left(-\frac{E_1}{R \cdot T}\right) \quad \underline{k}_2(T) := k_{20} \cdot \exp\left(-\frac{E_2}{R \cdot T}\right) \quad X_{Af} := 0.85$$

$$\Delta H := E_1 - E_2 = -4.9 \times 10^5 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$r_A(T, X_A) := -[k_1(T) \cdot (1 - X_A) - k_2(T) \cdot X_A]$$

$$ir_A(X_A) := \begin{cases} T \leftarrow T_0 + \frac{X_A \cdot (-\Delta H)}{C_P} \\ \frac{1}{-r_A(T, X_A)} \end{cases}$$

$$X_A := 0, 0.01 \dots 0.99$$

$$x^\circ := 0.5 \quad \text{Given} \quad \frac{d}{dx^\circ} ir_A(x^\circ) = 0 \quad \underline{x^\circ} := \text{Minerr}(x^\circ) = 0.498$$

$$\tau_{\text{CSTR}} := X_{Af} \cdot ir_A(X_{Af}) = 50.609 \cdot \text{min}$$

$$\tau_{\text{CSTR}} = 3.037 \times 10^3 \text{ s}$$

$$\tau_{\text{PFR}} := \int_0^{X_{Af}} ir_A(x) dx = 35.575 \cdot \text{min}$$

$$\tau_{\text{PFR}} = 2.134 \times 10^3 \text{ s}$$

$$\tau_{\text{CSTR}^\circ} := X_A^\circ \cdot ir_A(X_A^\circ) = 904.996 \text{ s}$$

$$\tau_{\text{PFR}^\circ} := \int_{X_A^\circ}^{X_{Af}} ir_A(x) dx = 792.482 \text{ s}$$

$$\tau^\circ := \tau_{\text{CSTR}^\circ} + \tau_{\text{PFR}^\circ} = 28.291 \cdot \text{min} \quad \tau^\circ = 1.697 \times 10^3 \text{ s}$$

$$T_{\text{CSTR}} := T_0 + \frac{X_{Af} \cdot (-\Delta H)}{C_P} = 716.5 \text{ K}$$

$$T_{\text{PRF}} := T_{\text{CSTR}}$$

$$T_{\text{CSTR}^\circ} := T_0 + \frac{X_A^\circ \cdot (-\Delta H)}{C_P} = 543.978 \text{ K}$$

