

# Reattori Chimici

## Anno Accademico 2011-2012

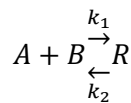
| Cognome | Nome | Matricola | Firma |
|---------|------|-----------|-------|
|         |      |           |       |

**Problema 1.** Una reazione irreversibile del secondo ordine  $2A \xrightarrow{k_1} R$  viene condotta in un PFR isoterma ideale, ottenendo una conversione  $X_{Ap}$ .

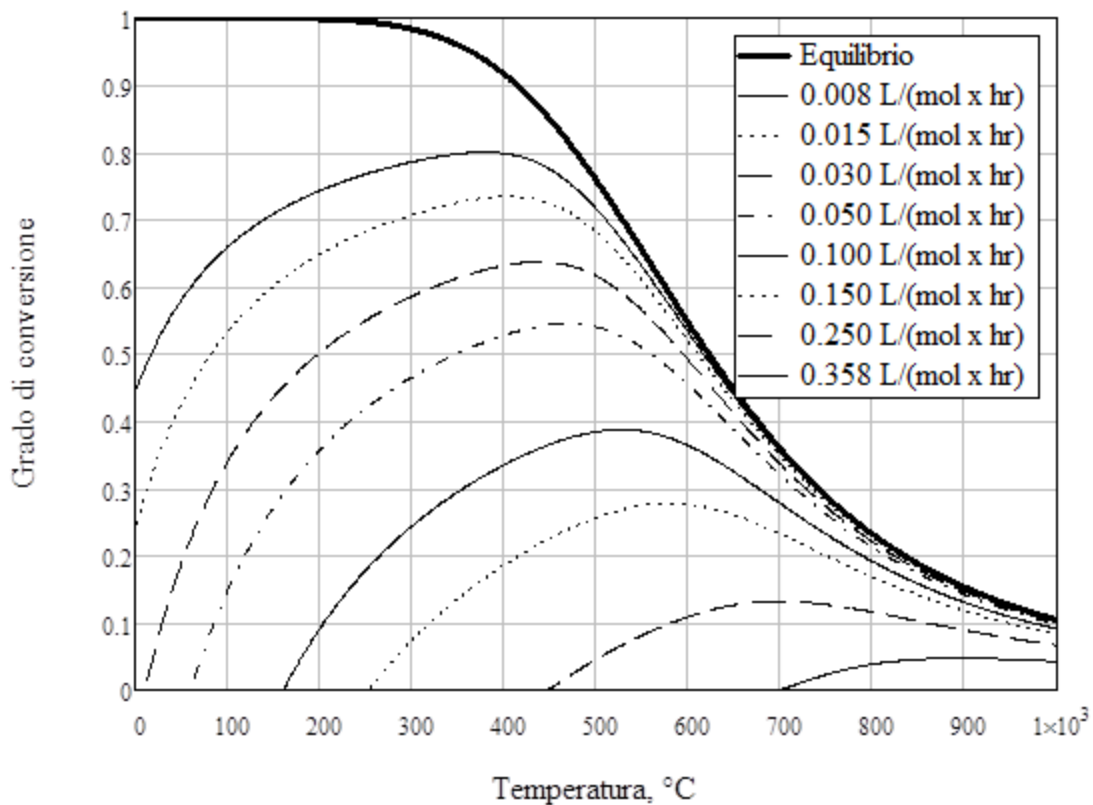
1. Determinare il numero di Damköhler,  $k_1 C_{A0} \tau$ , per il sistema in esame;
2. Calcolare la conversione,  $X_{Am}$ , che si otterrebbe in un CSTR ideale isoterma, di volume uguale al PFR;
3. Calcolare la conversione,  $X_{A2}$ , che si otterrebbe disponendo in serie due CSTR ideali isotermi di volume uguale al PFR.

**Dati.**  $X_{Ap} = 0.91$ .

**Problema 2.** Per la reazione chimica reversibile esotermica



Il diagramma  $X_A$  vs.  $T$  è riprodotto in figura, per  $C_{A0} = C_{B0}$ . Il parametro delle curve isocinetiche è  $-r_A/C_{A0}^2$  ed i relativi valori sono riportati nella legenda.



La miscela reagente è disponibile alla temperatura iniziale  $T_0$ , e si vuole realizzare una conversione pari a  $X_{Af}$  utilizzando un PFR che è sostanzialmente isoterma fino alla conversione  $X_{A1}$ , poi prosegue lavorando nelle condizioni di velocità massima.

1. Disegnare la curva di lavoro e la curva  $1/-r_A$  vs.  $X_A$  per la situazione descritta,
2. Proporre un metodo per calcolare il tempo di riempimento del PFR isoterma (fino a  $X_{A1}$ )
3. Calcolare il tempo di riempimento per il PFR che va da  $X_{A1}$  a  $X_{Af}$ .

**Dati.**  $C_{A0} = 2.0$  mol/L,  $X_{Af} = 0.80$ ,  $X_{A1} = 0.132$ ,  $T_0 = 700^\circ\text{C}$ .

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

**Problema 1.** Una reazione irreversibile del secondo ordine  $2A \xrightarrow{k_1} R$  viene condotta in un PFR isotermo ideale, ottenendo una conversione  $X_{Ap}$ .

1. Determinare il numero di Damköhler,  $k_1 C_{A0} \tau$ , per il sistema in esame;
2. Calcolare la conversione,  $X_{Am}$ , che si otterrebbe in un CSTR ideale isotermo, di volume uguale al PFR;
3. Calcolare la conversione,  $X_{A2}$ , che si otterrebbe disponendo in serie due CSTR ideali isotermi di volume uguale al PFR.

**Dati.**  $X_{Ap} = 0.91$ .

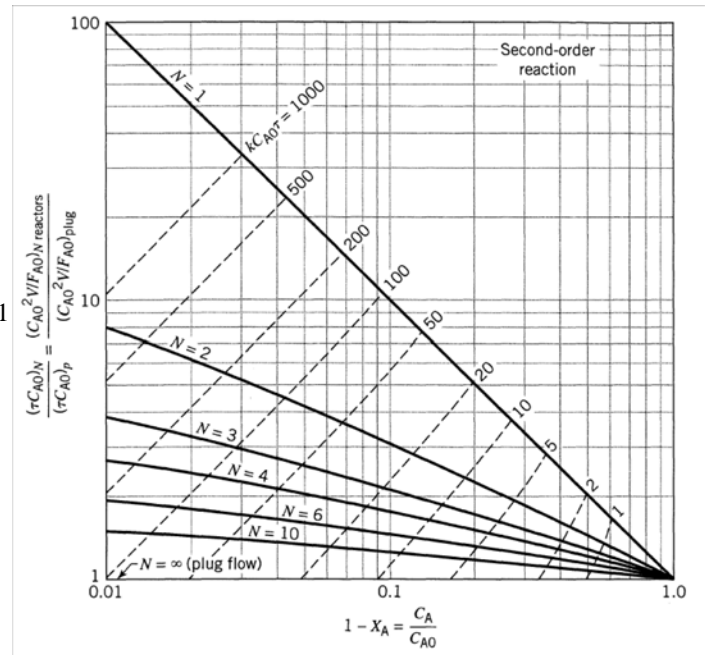
Dalla figura 6 di pagina 140, per  $X_{Ap} := 0.91$   $1 - X_{Ap} = 0.09$  si legge  $k_1 \cdot C_{A0} \cdot \tau = 10$

ovvero

$$kC_0\tau_P(X_A) := \frac{X_A}{1 - X_A} \quad \text{Da} := kC_0\tau_P(X_{Ap}) = 10.111$$

$$f_N(k\tau C_0, N) := \begin{cases} f_1 \leftarrow \frac{-2 + 2 \cdot \sqrt{1 + 4 \cdot k\tau C_0}}{4 \cdot k\tau C_0} \\ \left( \begin{array}{l} \text{for } i \in 2..N \\ f_i \leftarrow \frac{-2 + 2 \cdot \sqrt{1 + 4 \cdot k\tau C_0 \cdot f_{i-1}}}{4 \cdot k\tau C_0} \end{array} \right) \text{ if } N > 1 \\ f_N \end{cases}$$

$$kC_0\tau_N(X_A, N) := N \cdot \begin{cases} y \leftarrow 0.01 \\ \text{root}[f_N(y, N) - (1 - X_A), y] \end{cases}$$



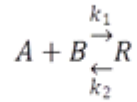
Sempre dalla figura 6 di pagina 140, seguendo la curva tratteggiata si ha

$$X_{Am} := 0.9 \quad \text{Given} \quad \text{Da} = kC_0\tau_N(X_{Am}, 1) \quad X_{Am} := \text{Minerr}(X_{Am}) = 0.731 \quad 1 - X_{Am} = 0.269$$

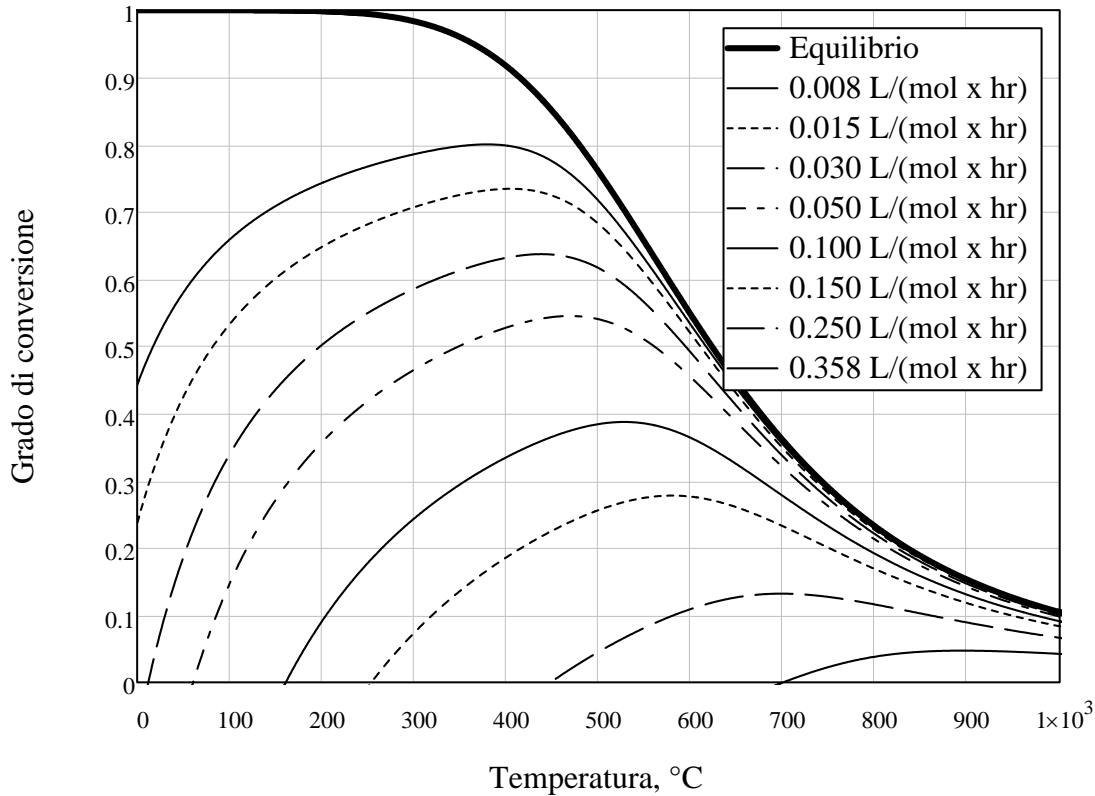
Sempre dalla figura 6 di pagina 140, raddoppiando il tempo di riempimento

$$X_{A2} := 0.9 \quad \text{Given} \quad 2 \cdot \text{Da} = kC_0\tau_N(X_{A2}, 2) \quad X_{A2} := \text{Minerr}(X_{A2}) = 0.879 \quad 1 - X_{A2} = 0.121$$

**Problema 2.** Per la reazione chimica reversibile esotermica



Il diagramma  $X_A$  vs.  $T$  è riprodotto in figura, per  $C_{A0} = C_{B0}$ . Il parametro delle curve isocinetiche è  $-r_A/C_{A0}^2$  ed i relativi valori sono riportati nella legenda.



La miscela reagente è disponibile alla temperatura iniziale  $T_0$ , e si vuole realizzare una conversione pari a  $X_{Af}$  utilizzando un PFR che è sostanzialmente isotermo fino alla conversione  $X_{A1}$ , poi prosegue lavorando nelle condizioni di velocità massima.

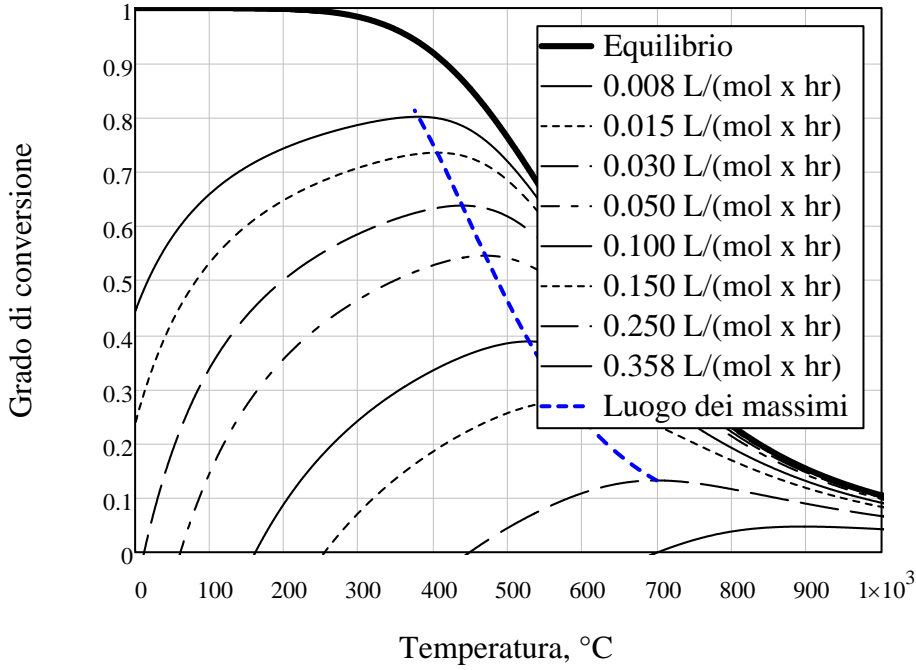
1. Disegnare la curva di lavoro e la curva  $1/-r_A$  vs.  $X_A$  per la situazione descritta,
2. Proporre un metodo per calcolare il tempo di riempimento del PFR isotermo (fino a  $X_{A1}$ )
3. Calcolare il tempo di riempimento per il PFR che va da  $X_{A1}$  a  $X_{Af}$ .

**Dati.**  $C_{A0} = 2.0$  mol/L,  $X_{Af} = 0.80$ ,  $X_{A1} = 0.132$ ,  $T_0 = 700^\circ\text{C}$ .

$$C_{A0} := 2.0 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad X_{Af} := 0.80 \quad T_0 := 700^\circ\text{C}$$

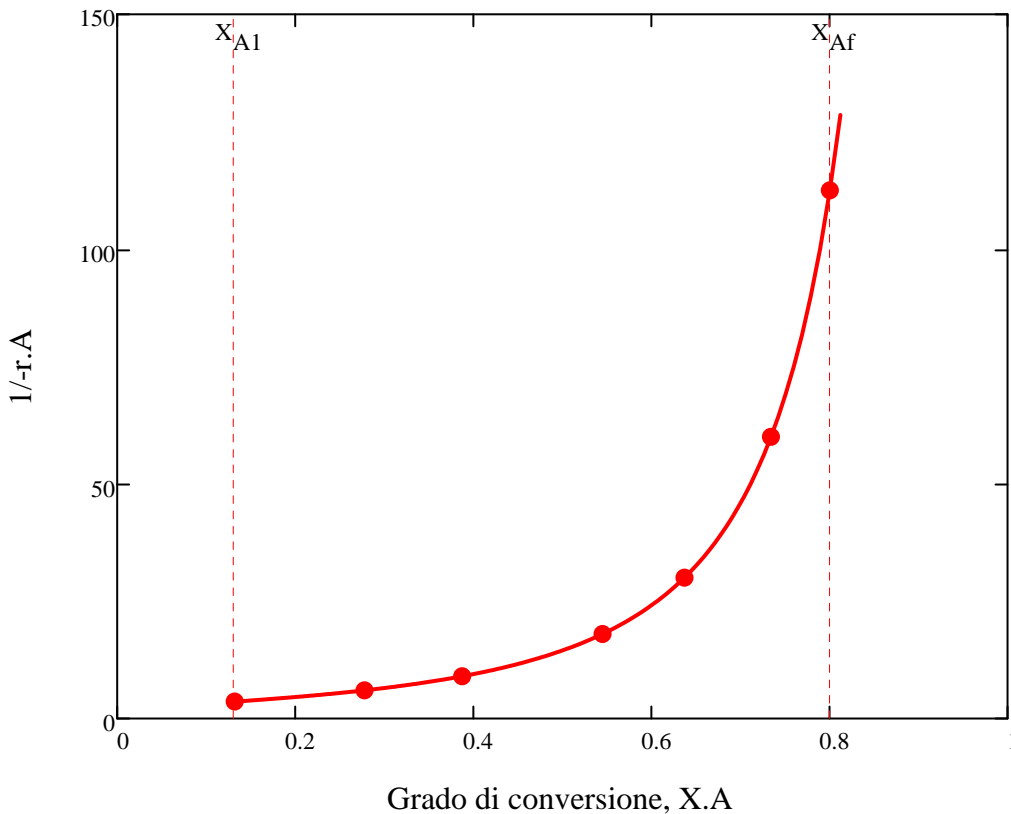
$$r_A(T, X_A) := -C_{A0}^2 \cdot \left[ k_1(T) \cdot (1 - X_A)^2 - k_2(T) \cdot X_A^2 \right] \quad X_{A1} := X_A \left( T^\circ \left( 0.250 \cdot \frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{hr}} \right), 0.250 \cdot \frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{hr}} \right) = 0.132$$

1. Disegnare il luogo dei massimi  $i := 0..6$



| $T^{\circ}(P_i)/^{\circ}C =$ | $X_A(T^{\circ}(P_i), P_i) =$ |
|------------------------------|------------------------------|
| 379.338                      | 0.8                          |
| 404.638                      | 0.734                        |
| 438.294                      | 0.637                        |
| 469.346                      | 0.545                        |
| 527.794                      | 0.387                        |
| 580.036                      | 0.278                        |
| 698.466                      | 0.132                        |

2. Disegnare la curva  $-1/r.A$  vs  $X.A$



| $\frac{1}{P_i \cdot C_{A0}^2} =$ | $\frac{\text{liter} \cdot \text{hr}}{\text{mol}}$ |
|----------------------------------|---|
| 31.25                            |   |
| 16.667                           |   |
| 8.333                            |   |
| 5                                |   |
| 2.5                              |   |
| 1.667                            |   |
| 1                                |   |

| $\frac{1}{P_i \cdot C_{A0}^2} =$ | $\frac{\text{m}^3 \cdot \text{s}}{\text{mol}}$ |
|----------------------------------|--|
| 112.5                            |  |
| 60                               |  |
| 30                               |  |
| 18                               |  |
| 9                                |  |
| 6                                |  |
| 3.6                              |  |

Il PFR è isoterma fino a  $X_{A1}$  e poi lavora alla massima velocità fino a  $X_{Af}$

$$\tau = C_{A0} \cdot (\tau_1 + \tau_2) = C_{A0} \cdot \left( \int_0^{X_{A1}} \frac{1}{-r_A(T_0, X_A)} dX_A + \int_{X_{A1}}^{X_{Af}} \frac{1}{-r_A(T(X_A), X_A)} dX_A \right)$$

Il tempo necessario ad arrivare a  $X_{A1}$  (PFR isoterma)

$$\tau_1 := C_{A0} \cdot \int_0^{X_{A1}} \frac{1}{-r_A(T_0, X_A)} dX_A = 783.901 \text{ s}$$

approssimazione col metodo dei trapezi

$$\tau_1 = 0.218 \cdot \text{hr} \quad C_{A0} \cdot \left( \frac{1}{P_6 \cdot C_{A0}^2} + \frac{1}{P_7 \cdot C_{A0}^2} \right) \cdot \frac{1}{2} \cdot X_{A1} = 806.635 \text{ s}$$

Il tempo necessario a andare da  $X_{A1}$  a  $X_{Af}$

$$r_{Am}(x) := \begin{cases} pp \leftarrow P_0 \\ pp \leftarrow \text{root}(X_A(T^\circ(pp), pp) - x, pp) \\ -pp \cdot C_{A0}^2 \end{cases}$$

(questa funzione determina la velocità in funzione del grado di conversione nel luogo dei massimi)

$$\tau_2 := C_{A0} \cdot \int_{X_{A1}}^{X_{Af}} \frac{1}{-r_{Am}(X_A)} dX_A = 3.039 \times 10^4 \text{ s}$$

$$\tau_2 = 8.442 \cdot \text{hr}$$

$$\tau_1 + \tau_2 = 8.66 \cdot \text{hr}$$

Soluzione del secondo integrale col metodo dei trapezi

$$-C_{A0} \cdot \sum_{i=1}^6 \left[ \left( \frac{1}{P_i \cdot C_{A0}^2} + \frac{1}{P_{i-1} \cdot C_{A0}^2} \right) \cdot \frac{1}{2} \cdot (X_A(T^\circ(P_i), P_i) - X_A(T^\circ(P_{i-1}), P_{i-1})) \right] = 3.186 \times 10^4 \text{ s}$$