

Reattori Chimici
Anno Accademico 2011-2012

Cognome	Nome	Matricola	Firma

Problema 1. Una reazione irreversibile del primo ordine $A \xrightarrow{k} R$ viene condotta in N CSTR isotermi ideali di ugual volume e disposti in serie, ottenendo una conversione X_{Am} .

1. Determinare il numero di Damköhler, $k\tau$, per il sistema in esame;
2. Calcolare la conversione, X_{Ap} , che si otterrebbe in un PFR ideale isoterma, di volume uguale a uno dei CSTR, e operante con un rapporto di riciclo R ;
3. Calcolare la conversione, X_{A1} , corrispondente alla sezione di ingresso del PFR.

Dati. $X_{Am} = 0.95$, $N = 3$, $R = 2$.

Problema 2 (*H. Scott Fogler, Elements of Chemical Reaction Engineering, 4th ed., example 8-3*).

L'isomerizzazione del *n*-butano (composto A) a *i*-butano (composto B) è un processo di interesse industriale che si può condurre con reattori ideali adiabatici, ed è descritta da una reazione elementare reversibile del primo ordine. Per questa reazione la cinetica diretta è descritta dall'equazione:

$$k = k_1 \exp \left[\frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

Mentre la costante termodinamica vale:

$$K_C = K_{C2} \exp \left[\frac{\Delta H}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

Dovendo convertire una portata \dot{V} (corrispondente ad una portata molare totale \dot{n}), costituita da *n*-butano con frazione molare y_{A0} (il resto essendo *i*-pentano, un inerte, composto I), alimentata ai reattori ad una temperatura T_0 , fino ad una conversione finale X_{Af} :

1. Calcolare la temperatura operativa ed il volume di un CSTR adiabatico ideale;
2. Calcolare la temperatura di uscita ed il volume di un PFR adiabatico ideale;
3. Disegnare inoltre il diagramma $(-1/r_A)$ contro X_A per la reazione in esame, condotta in condizioni adiabatiche.

Dati. $\dot{V} = 4.38 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$, $\dot{n} = 163 \text{ kmol/h}$, $y_{A0} = 0.9$, $T_0 = 330 \text{ K}$, $X_{Af} = 0.4$, $k_1 = 31.1 \text{ 1/h}$, $E_A = 65.7 \text{ kJ/mol}$, $T_1 = 360 \text{ K}$, $K_{C2} = 3.03$, $\Delta H = -6900 \text{ J/mol}$, $T_2 = 60^\circ\text{C}$, $C_{P,A} = 141 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$, $C_{P,B} = 141 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$, $C_{P,I} = 161 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$.

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

Prova d'esame - 20 settembre 2012

Problema 1. Una reazione irreversibile del primo ordine $A \xrightarrow{k} R$ viene condotta in N CSTR isotermi ideali di ugual volume e disposti in serie, ottenendo una conversione X_{Am} .

1. Determinare il numero di Damköhler, $k\tau$, per il sistema in esame;
2. Calcolare la conversione, X_{Ap} , che si otterrebbe in un PFR ideale isoterma, di volume uguale a uno dei CSTR, e operante con un rapporto di riciclo R ;
3. Calcolare la conversione, X_{A1} , corrispondente alla sezione di ingresso del PFR.

Dati. $X_{Am} = 0.95$, $N = 3$, $R = 2$.

$$R := 2$$

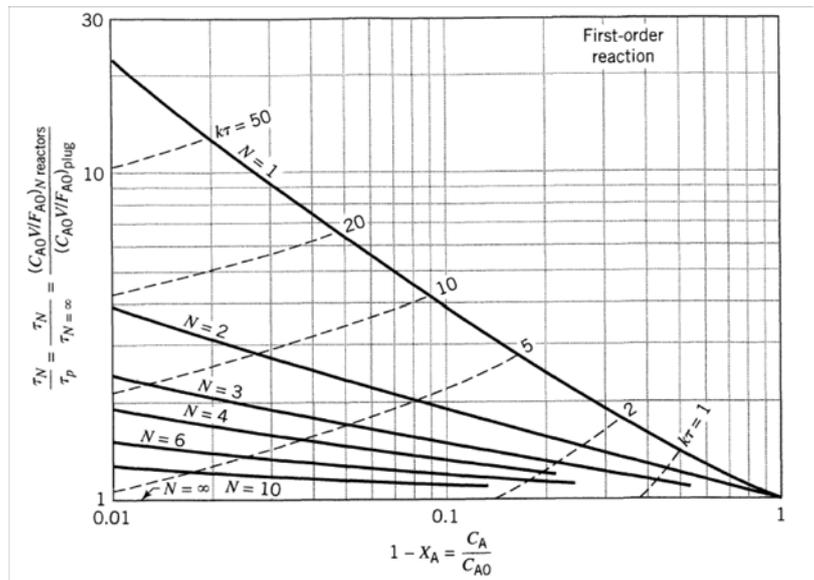
Dalla figura 5 di pagina 139, per $X_{Am} := 0.95$ $1 - X_{Am} = 0.05$ $N := 3$ si legge $k \cdot \tau = 5$

ovvero

$$k\tau_N(X_A, N) := N \cdot \left[\left(\frac{1}{1 - X_A} \right)^{\frac{1}{N}} - 1 \right]$$

$$Da := k\tau_N(X_{Am}, N) = 5.143$$

$$k\tau_R := \frac{Da}{N} = 1.714$$



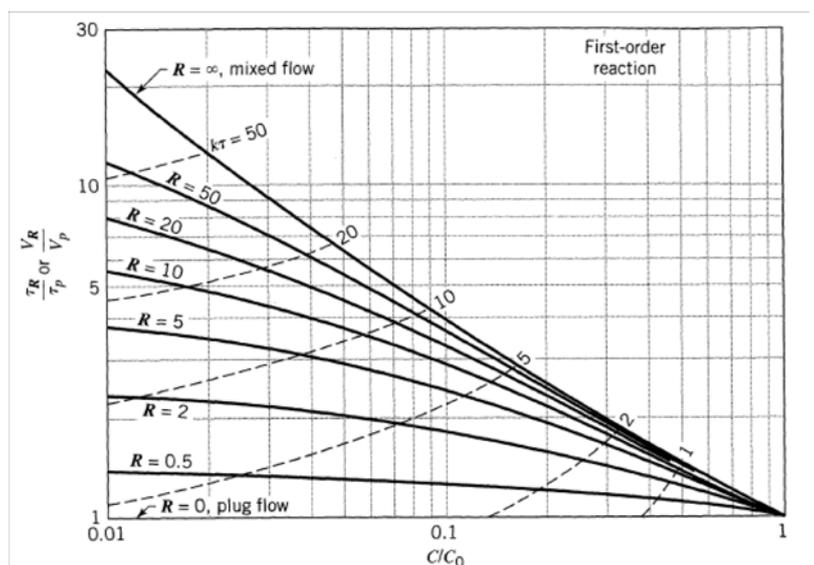
Dalla figura 16 di pag. 151, per $k\tau_R = 1.714$ si legge $1 - X_{Ap} = 0.3$ $X_{Ap} = 0.7$

ovvero

$$x(k\tau_R, R) := \frac{(1 + R) \cdot \left(\exp\left(\frac{k\tau_R}{R + 1}\right) - 1 \right)}{(1 + R) \cdot \exp\left(\frac{k\tau_R}{R + 1}\right) - R}$$

$$X_{Ap} := x(k\tau_R, R) = 0.698$$

$$X_{A1} := \frac{R}{R + 1} \cdot X_{Ap} = 0.465$$



Problema 2 (*H. Scott Fogler, Elements of Chemical Reaction Engineering, 4th ed., example 8-3*).

L'isomerizzazione del *n*-butano (composto A) a *i*-butano (composto B) è un processo di interesse industriale che si può condurre con reattori ideali adiabatici, ed è descritta da una reazione elementare reversibile del primo ordine. Per questa reazione la cinetica diretta è descritta dall'equazione:

$$k = k_1 \exp \left[\frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

Mentre la costante termodinamica vale:

$$K_C = K_{C2} \exp \left[\frac{\Delta H}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

Dovendo convertire una portata \dot{V} (corrispondente ad una portata molare totale \dot{n}), costituita da *n*-butano con frazione molare y_{A0} (il resto essendo *i*-pentano, un inerte, composto I), alimentata ai reattori ad una temperatura T_0 , fino ad una conversione finale X_{Af} :

1. Calcolare la temperatura operativa ed il volume di un CSTR adiabatico ideale;
2. Calcolare la temperatura di uscita ed il volume di un PFR adiabatico ideale;
3. Disegnare inoltre il diagramma $(-1/r_A)$ contro X_A per la reazione in esame, condotta in condizioni adiabatiche.

Dati. $\dot{V} = 4.38 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$, $\dot{n} = 163 \text{ kmol/s}$, $y_{A0} = 0.9$, $T_0 = 330 \text{ K}$, $X_{Af} = 0.4$, $k_1 = 31.1 \text{ 1/h}$, $E_A = 65.7 \text{ kJ/mol}$, $T_1 = 360 \text{ K}$, $K_{C2} = 3.03$, $\Delta H = -6900 \text{ J/mol}$, $T_2 = 60^\circ\text{C}$, $C_{P,A} = 141 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$, $C_{P,B} = 141 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$, $C_{P,I} = 161 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$.

$$\text{kJ} := 10^3 \cdot \text{J} \quad \text{R} := 8.314 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$$

$$V_{p0} := 4.38 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \quad n_p := 163000 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{hr}} \quad y_{A0} := 0.9 \quad y_{I0} := 0.1 \quad T_0 := 330 \cdot \text{K} \quad X_{Af} := 0.4$$

$$k_1 := 31.1 \cdot \frac{1}{\text{hr}} \quad T_1 := 360 \cdot \text{K} \quad E_A := 65.7 \cdot \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \quad k(T) := k_1 \cdot \exp \left[\frac{E_A}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

$$K_{C2} := 3.03 \quad T_2 := 60^\circ\text{C} \quad \Delta H := -6900 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol}} \quad K_C(T) := K_{C2} \cdot \exp \left[\frac{\Delta H}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

$$C_{PA} := 141 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}} \quad C_{PB} := 141 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}} \quad C_{PI} := 161 \cdot \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$$

$$C_{A0} := \frac{y_{A0} \cdot n_p}{V_{p0}} = 9.304 \times 10^3 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

Aspetti stechiometrici $C_A = C_{A0} \cdot (1 - X_A) \quad C_B = C_{A0} \cdot X_A$

Aspetti cinetici $-r_A = k \cdot \left(C_A - \frac{C_B}{K_C} \right) \quad r_A(X_A, T) := -k(T) \cdot C_{A0} \cdot \left[1 - \left(1 + \frac{1}{K_C(T)} \right) \cdot X_A \right]$

Termine OUT per convezione nel bilancio di energia

$$\Sigma_{npCP} = V_{p0} \cdot C_{A0} \cdot (1 - X_A) \cdot C_{PA} + V_{p0} \cdot C_{A0} \cdot X_A \cdot C_{PB} + y_{I0} \cdot n_p \cdot C_{PI}$$

In realtà è indipendente da X.A

$$\Sigma_{npCP} := V_{p0} \cdot C_{A0} \cdot C_{PA} + y_{I0} \cdot n_p \cdot C_{PI}$$

Bilancio di energia (adiabatico e risolto in T)

$$T(X_A) := T_0 + \frac{X_A \cdot (-\Delta H)}{\frac{\Sigma_{npCP}}{V_{p0} \cdot C_{A0}}} \quad \frac{(-\Delta H)}{\frac{\Sigma_{npCP}}{V_{p0} \cdot C_{A0}}} = 43.427 \text{ K}$$

Per un CSTR adiabatico

$$T_f := T_0 + \frac{X_{Af} \cdot (-\Delta H)}{\frac{\Sigma_{npCP}}{V_{p0} \cdot C_{A0}}} = 347.371 \text{ K}$$

$$T_f = 74.221 \cdot ^\circ\text{C}$$

$$V_{CSTR} := \frac{V_{p0} \cdot C_{A0} \cdot X_{Af}}{-r_A(X_{Af}, T_f)}$$

$$V_{CSTR} = 0.993 \cdot \text{m}^3$$

Per un PFR adiabatico

$$V_{PFR} := \int_0^{X_{Af}} \frac{V_{p0} \cdot C_{A0}}{-r_A(X_A, T(X_A))} dX_A$$

$$V_{PFR} = 1.149 \cdot \text{m}^3$$

$$X_A := 0, 0.01 .. 0.7$$

Grafico

