Reattori Chimici
Anno Accademico 2011-2012

Cognome	Nome	Matricola	Firma

Problema 1. In un reattore batch da laboratorio è stata studiata la reazione elementare reversibile:

$$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} R$$

Alimentando una miscela reagente contenente solo il reagente A, lavorando a due distinte temperature e ottenendo i risultati riassunti in tabella.

1. Determinare i parametri delle relazioni Arrhenius per le due costanti cinetiche;

Si vuole poi progettare un CSTR ideale isotermo, alimentato con una miscela di portata $\dot{V}$, a concentrazioni iniziali C_{A0} e C_{R0}, che deve lavorare alla temperatura T_f e deve realizzare la conversione X_{Af}. Calcolare:

2. Il volume del reattore,
3. La portata di calore che va scambiata tra la miscela reagente e l'ambiente esterno, chiarendone anche il verso.

Dati. $T_1 = 25°\text{C}$, $T_2 = 150°\text{C}$, $C_{A0} = 1$ mol/L, $C_{R0} = 0.1$ mol/L, $\dot{V} = 3$ L/s, $X_{Af} = 75\%$, $T_f = 65°\text{C}$.

t, min	0	2	4	6	8	10	12	14	16	600
$X_A\,(t,\ T_1)$	0	0.23	0.41	0.54	0.64	0.72	0.78	0.82	0.86	0.96
$X_A\,(t,\ T_2)$	0	0.32	0.46	0.51	0.53	0.54	0.547	0.548	0.549	0.5494

Problema 2. Per una certa miscela reagente, è stata sperimentalmente determinata la cinetica seguente, descritta da una polinomiale del terzo grado:

$$\frac{1}{-r_A} = \sum_{i=0}^{3} a_j C_A^j$$

Utilizzando reattori ideali isotermi, si vuole portare la concentrazione di una miscela liquida dal valore C_{A0} a C_{Af}.

1. Disegnare i diagrammi di Levenspiel per il sistema ($1/{-r_A}$ vs. C_A e $1/{-r_A}$ vs. X_A),
2. Proporre la serie di reattori ideali isotermi che minimizza il tempo di riempimento totale,
3. Calcolare i tempi di riempimento di ogni reattore selezionato.

Dati. $\{a_0, a_1, a_2, a_3\} = \{2, 1, -5, 5\}$ (le unità di misura dei coefficienti a_j sono tali che, esprimendo C_A in mol/m^3, la velocità di reazione r_A risulta espressa in mol/(m^3·hr)), $C_{A0} = 1$ mol/m^3, $C_{Af} = 0.05$ mol/m^3.

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

Problema 1. In un reattore batch da laboratorio è stata studiata la reazione elementare reversibile:

$$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} R$$

Alimentando una miscela reagente contenente solo il reagente A, lavorando a due distinte temperature e ottenendo i risultati riassunti in tabella.

1. Determinare i parametri delle relazioni Arrhenius per le due costanti cinetiche;

Si vuole poi progettare un CSTR ideale isotermo, alimentato con una miscela di portata $\dot{V}$, a concentrazioni iniziali C_{A0} e C_{R0}, che deve lavorare alla temperatura T_f e deve realizzare la conversione X_{Af}. Calcolare:

2. Il volume del reattore,
3. La portata di calore che va scambiata tra la miscela reagente e l'ambiente esterno, chiarendone anche il verso.

Dati. $T_1 = 25°C$, $T_2 = 150°C$, $C_{A0} = 1$ mol/L, $C_{R0} = 0.1$ mol/L, $\dot{V} = 3$ L/s, $X_{Af} = 75\%$, $T_f = 65°C$.

t min	0	2	4	6	8	10	12	14	16	600
$X_A(t, T_1)$	0	0.23	0.41	0.54	0.64	0.72	0.78	0.82	0.86	0.96
$X_A(t, T_2)$	0	0.32	0.46	0.51	0.53	0.54	0.547	0.548	0.549	0.5494

$$E := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0.23 & 0.32 \\ 4 & 0.41 & 0.46 \\ 6 & 0.54 & 0.51 \\ 8 & 0.64 & 0.53 \\ 10 & 0.72 & 0.54 \\ 12 & 0.78 & 0.547 \\ 14 & 0.82 & 0.548 \\ 16 & 0.86 & 0.549 \\ 600 & 0.96 & 0.5494 \end{pmatrix}$$

$T_f := 65°C = 338.15K$ $\quad X_{Af} := 75\%$

$T := \begin{pmatrix} 25°C \\ 150°C \end{pmatrix}$ $\quad V_p := 3 \cdot \frac{L}{s}$ $\quad C_{A0} := 1 \cdot \frac{mol}{L}$ $\quad C_{R0} := 0.1 \cdot \frac{mol}{L}$ $\quad M := 0$

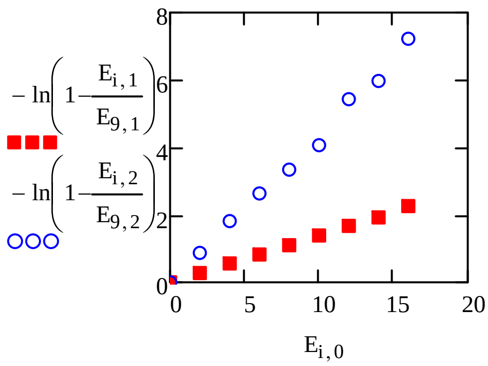
$i := 0..8$

$t_{E_i} := E_{i,0}$ $\quad Y_{1_i} := -\ln\left(1 - \frac{E_{i,1}}{E_{9,1}}\right)$ $\quad Y_{2_i} := -\ln\left(1 - \frac{E_{i,2}}{E_{9,2}}\right)$ $\quad j := 0..1$ $\quad X_j := \frac{1}{T_j}$

$S_1 := slope(t_E, Y_1) = 0.14$ $\quad S_2 := slope(t_E, Y_2) = 0.441$

$K_{CE1} := \frac{M + E_{9,1}}{1 - E_{9,1}} = 24$ $\quad k_{1E1} := \frac{M + E_{9,1}}{M+1} \cdot S_1 \cdot \frac{1}{min} = 0.134 \frac{1}{min}$

$K_{CE2} := \frac{M + E_{9,2}}{1 - E_{9,2}} = 1.219$ $\quad k_{1E2} := \frac{M + E_{9,2}}{M+1} \cdot S_2 \cdot \frac{1}{min} = 0.242 \cdot \frac{1}{min}$



$k_{1E} := \begin{pmatrix} k_{1E1} \\ k_{1E2} \end{pmatrix}$ $\quad k_{2E} := \begin{pmatrix} k_{1E1} \cdot K_{CE1}^{-1} \\ k_{1E2} \cdot K_{CE2}^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.598 \times 10^{-3} \\ 0.199 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{min}$

$Y1_j := \ln(k_{1E_j} \cdot min)$ $\quad Y2_j := \ln(k_{2E_j} \cdot min)$

$E_{1E} := -slope(X, Y1) \cdot R = 4.939 \times 10^3 \cdot \frac{J}{mol}$ $\quad E_{2E} := -slope(X, Y2) \cdot R = 2.994 \times 10^4 \cdot \frac{J}{mol}$ $\quad \Delta H := E_{1E} - E_{2E} = -2.5 \times 10^4 \cdot \frac{J}{mol}$

$k_{10E} := \frac{k_{1E_0}}{\exp\left(\frac{-E_{1E}}{R \cdot T_1}\right)} = 0.985 \cdot \frac{1}{min}$ $\quad k_{20E} := \frac{k_{1E1} \cdot K_{CE1}^{-1}}{\exp\left(\frac{-E_{2E}}{R \cdot T_1}\right)} = 986.743 \cdot \frac{1}{min}$ $\quad M := \frac{C_{R0}}{C_{A0}} = 0.1$

$k_{1E}(T) := k_{10E} \cdot \exp\left(-\frac{E_{1E}}{R \cdot T}\right)$ $\quad k_{2E}(T) := k_{20E} \cdot \exp\left(-\frac{E_{2E}}{R \cdot T}\right)$ $\quad K_{CE}(T) := \frac{k_{1E}(T)}{k_{2E}(T)}$ $\quad X_{AeE}(T) := \frac{K_{CE}(T) - M}{K_{CE}(T) + 1}$

$r_A(X_A, T) := -\left[k_{1E}(T) \cdot C_{A0} \cdot (1 - X_A) - k_{2E}(T) \cdot C_{A0} \cdot (M + X_A)\right]$

$V := V_p \cdot \frac{C_{A0} \cdot X_{Af}}{-r_A(X_{Af}, T_f)} = 5.959 \cdot m^3$ $\quad Q_p := \Delta H \cdot X_{Af} \cdot V_p \cdot C_{A0} = -56.26 \cdot kW$

Problema 2. Per una certa miscela reagente, è stata sperimentalmente determinata la cinetica seguente, descritta da una polinomiale del terzo grado:

$$\frac{1}{-r_A} = \sum_{i=0}^{3} a_j C_A^j$$

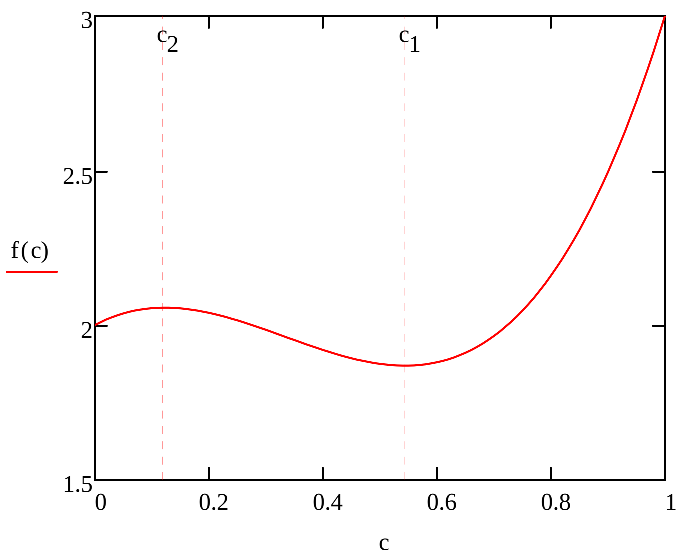
Utilizzando reattori ideali isotermi, si vuole portare la concentrazione di una miscela liquida dal valore C_{A0} a C_{Af}.

1. Disegnare i diagrammi di Levenspiel per il sistema ($1/-r_A$ vs. C_A e $1/-r_A$ vs. X_A),
2. Proporre la serie di reattori ideali isotermi che minimizza il tempo di riempimento totale,
3. Calcolare i tempi di riempimento di ogni reattore selezionato.

Dati. $\{a_0, a_1, a_2, a_3\} = \{2,1,-5,5\}$ (le unità di misura dei coefficienti a_j sono tali che, esprimendo C_A in mol/m³, la velocità di reazione r_A risulta espressa in mol/(m³·hr)), $C_{A0} = 1$ mol/m³, $C_{Af} = 0.05$ mol/m³.

$$a := \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -5 \\ 5 \end{pmatrix} \qquad f(c) := \sum_{j=0}^{3} \left(a_j \cdot c^j\right) \qquad \sum_{j=0}^{3} \left(a_j \cdot c^j\right) \rightarrow 5\cdot c^3 - 5\cdot c^2 + c + 2 \qquad c_0 := 1 \qquad c_f := 0.05 \qquad f1(c) := \frac{d}{dc} f(c)$$

$$c := 0, 0.01 .. 1 \qquad c_1 := \text{root}(f1(c), c, 0.4, 0.8) = 0.544 \qquad c_2 := \text{root}(f1(c), c, 0, 0.3) = 0.123$$

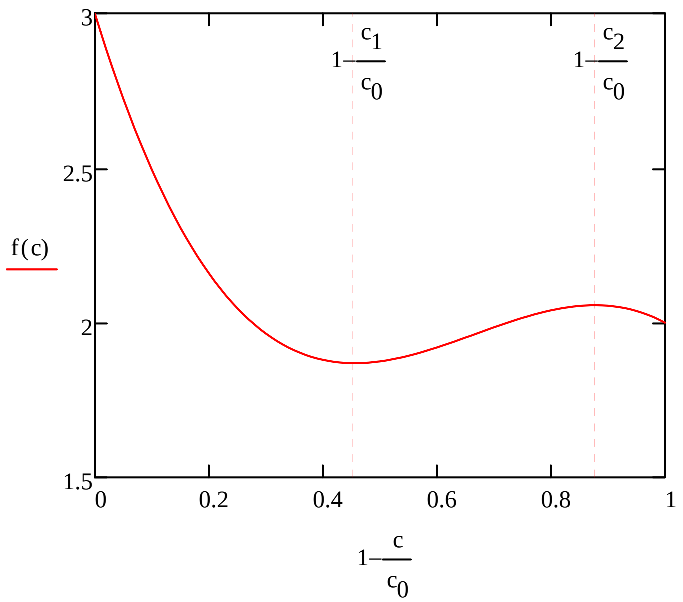


$$r_A(C_A) := \frac{1}{-f(C_A)} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3\text{hr}}$$

$$\tau_{CSTR1} := \frac{(c_0 - c_1)\cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}}{-r_A(c_1)} = 0.852\cdot \text{hr}$$

$$\tau_{PFR} := -\int_{c_1}^{c_2} \frac{1}{-r_A(c)}\, dc \cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} = 0.828\cdot \text{hr}$$

$$\tau_{CSTR2} := \frac{(c_2 - c_f)\cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}}{-r_A(c_f)} = 0.148\cdot \text{hr}$$



$$x_1 := 1 - \frac{c_1}{c_0} = 0.456$$

$$x_2 := 1 - \frac{c_2}{c_0} = 0.877$$

$$x_f := 1 - \frac{c_f}{c_0} = 0.95$$