Reattori di tipo diverso disposti in serie

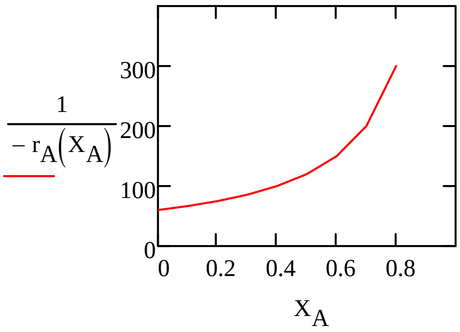
Una reazione singola in fase liquida deve essere condotta in DUE reattori ideali isotermi disposti in serie. Uno di questi è un CSTR di tempo di riempimento noto, l'altro deve essere un PFR. Sono note la concentrazione iniziale del reagente A e il grado di conversione finale desiderato. Determinare la disposizione ottimale (tempo di riempimento totale minimo) per diversi ordini di reazione (1, 2 e 0.5).

$C_{A0} := 1 \cdot \frac{mol}{m^3}$ $\qquad \tau_{CSTR} := 20 \cdot s$ $\qquad X_2 := 0.8$

CASO I : Reazione del primo ordine

$k := 1 \cdot \frac{1}{min}$ $\qquad r_A(X_A) := -k \cdot \left[C_{A0} \cdot (1 - X_A)\right]^1$

$X_A := 0, 0.1 .. X_2$



$X_A =$	$\frac{1}{-r_A(X_A)} =$ ($\frac{m^{3.0} \cdot s}{mol}$)
0	60.0
0.1	66.7
0.2	75.0
0.3	85.7
0.4	100.0
0.5	120.0
0.6	150.0
0.7	200.0
0.8	300.0

Schema A CSTR seguito dal PFR

$$\frac{\tau_{CSTR}}{C_{A0}} = \frac{X_1}{-r_A(X_1)} = \frac{X_1}{k \cdot C_{A0} \cdot (1 - X_{A1})}$$

$$\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_{X_1}^{X_2} \frac{1}{-r_A(X_A)} \, dX_A = -\frac{1}{k \cdot C_{A0}} \cdot \ln\left(\frac{1 - X_2}{1 - X_1}\right)$$

$$X_1 := \frac{k \cdot \tau_{CSTR}}{1 + k \cdot \tau_{CSTR}} = 0.25$$

$$\tau_{PFR} := -\frac{1}{k} \cdot \ln\left(\frac{1 - X_2}{1 - X_1}\right) = 79.305 \, s$$

Schema B PFR seguito dal CSTR

$$\frac{\tau_{CSTR}}{C_{A0}} = \frac{X_2 - X_1}{k \cdot C_{A0} \cdot (1 - X_2)}$$

$$\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = -\frac{1}{k \cdot C_{A0}} \cdot \ln(1 - X_1)$$

$$X_1 := X_2 - (1 - X_2) \cdot k \cdot \tau_{CSTR} = 0.733$$

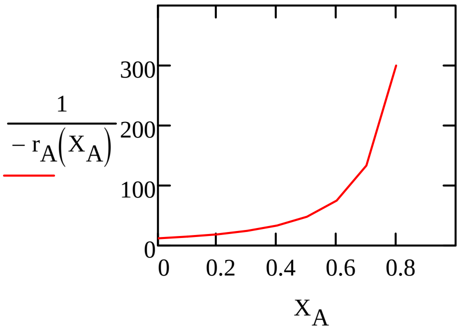
$$\tau_{PFR} := -\frac{1}{k} \cdot \ln(1 - X_1) = 79.305 \, s$$

Quindi: per reazioni del ***primo*** ordine **la disposizione è indifferente** (CSTR seguito da PFR o PFR seguito da CSTR)

CASO II : Reazione del secondo ordine

$k := 5 \cdot \frac{m^3}{mol \cdot min}$ $r_A(X_A) := -k \cdot \left[C_{A0} \cdot (1 - X_A)\right]^2$

$X_A := 0, 0.1 .. X_2$



$X_A =$	$\frac{1}{-r_A(X_A)} =$ ($\frac{m^{3.0} \cdot s}{mol}$)
0	12.0
0.1	14.8
0.2	18.7
0.3	24.5
0.4	33.3
0.5	48.0
0.6	75.0
0.7	133.3
0.8	300.0

Stima iniziale dei parametri $X_1 := 0.4$ $\tau_{PFR} := 100 \cdot s$

Schema A CSTR seguito dal PFR

Given $\frac{\tau_{CSTR}}{C_{A0}} = \frac{X_1}{-r_A(X_1)}$ $\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_{X_1}^{X_2} \frac{1}{-r_A(X_A)} \, dX_A$ $0 < X_1 < X_2$

$\begin{pmatrix} X_1 \\ \tau_{PFR} \end{pmatrix} := \text{Minerr}\left(X_1, \frac{\tau_{PFR}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.469 \\ 37.387 \end{pmatrix}$ $\tau_{PFR} := \tau_{PFR} \cdot s = 37.387\,s$

Schema B PFR seguito dal CSTR

Given $\frac{\tau_{CSTR}}{C_{A0}} = \frac{X_2 - X_1}{-r_A(X_2)}$ $\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_{0}^{X_1} \frac{1}{-r_A(X_A)} \, dX_A$ $0 < X_1 < X_2$

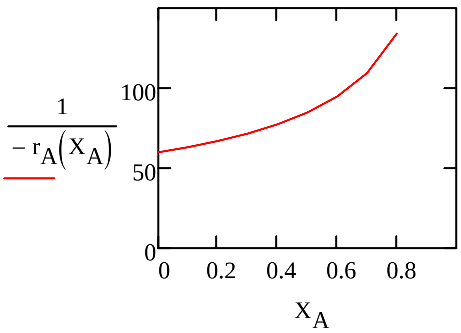
$\begin{pmatrix} X_1 \\ \tau_{PFR} \end{pmatrix} := \text{Minerr}\left(X_1, \frac{\tau_{PFR}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.733 \\ 33 \end{pmatrix}$ $\tau_{PFR} := \tau_{PFR} \cdot s = 33\,s$

Quindi: per reazioni di ordine ***superiore*** al primo conviene mettere **prima il PFR**
(la concentrazione media è più ***alta*** possibile)

Caso III : Reazione di ordine n = 0.5

$k := 1 \cdot \left(\frac{m^3}{mol}\right)^{-0.5} \cdot \frac{1}{min}$ $r_A(X_A) := -k \cdot \left[C_{A0} \cdot (1 - X_A)\right]^{0.5}$

$X_A := 0, 0.1 .. X_2$



$X_A =$	$\frac{1}{-r_A(X_A)} =$
0	60.0 $\frac{m^{3.0} \cdot s}{mol}$
0.1	63.2
0.2	67.1
0.3	71.7
0.4	77.5
0.5	84.9
0.6	94.9
0.7	109.5
0.8	134.2

Stima iniziale dei parametri $X_1 := 0.4$ $\tau_{PFR} := 100 \cdot s$

Schema A CSTR seguito dal PFR

Given $\frac{\tau_{CSTR}}{C_{A0}} = \frac{X_1}{-r_A(X_1)}$ $\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_{X_1}^{X_2} \frac{1}{-r_A(X_A)} \, dX_A$ $0 < X_1 < X_2$

$\begin{pmatrix} X_1 \\ \tau_{PFR} \end{pmatrix} := \text{Minerr}\left(X_1, \frac{\tau_{PFR}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.282 \\ 47.99 \end{pmatrix}$ $\tau_{PFR} := \tau_{PFR} \cdot s = 47.99\ s$

Schema B PFR seguito dal CSTR

Given $\frac{\tau_{CSTR}}{C_{A0}} = \frac{X_2 - X_1}{-r_A(X_2)}$ $\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_{0}^{X_1} \frac{1}{-r_A(X_A)} \, dX_A$ $0 < X_1 < X_2$

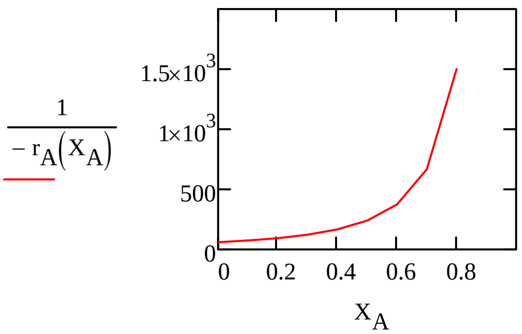
$\begin{pmatrix} X_1 \\ \tau_{PFR} \end{pmatrix} := \text{Minerr}\left(X_1, \frac{\tau_{PFR}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.651 \\ 49.101 \end{pmatrix}$ $\tau_{PFR} := \tau_{PFR} \cdot s = 49.101\ s$

Quindi: per reazioni di ordine ***inferiore*** al primo conviene mettere **prima il CSTR**
(la concentrazione media è più ***bassa*** possibile)

Una reazione singola in fase liquida deve essere condotta in **TRE** reattori ideali isotermi disposti in serie.
Due di questi sono CSTR, uno è un PFR.
Per porre correttamente il problema occorre notare che, note la cinetica e le condizioni di alimentazione, il sistema ha **sei** incognite (le tre conversioni in uscita e i tre volumi/tempi di riempimento), ed è possibile scrivere **tre** equazioni (le tre equazioni di progetto del sistema). Occorre dunque saturare **tre** gradi di libertà.
Siano determinate dall'esterno: la conversione finale, il tempo di riempimento di uno dei due CSTR e il tempo di riempimento del PFR.
Sono dunque incognite: le due conversioni intermedie e il tempo di riempimento del secondo CSTR.
Determinare la disposizione migliore (quella che minimizza il tempo di riempimento totale) per una cinetica del secondo ordine.

$C_{A0} := 1 \cdot \frac{mol}{m^3}$ $\quad \tau_{CSTR1} := 50 \cdot s$ $\quad \tau_{PFR} := 30 \cdot s$ $\quad X_3 := 0.8$

$k := 1 \cdot \frac{m^3}{mol} \cdot \frac{1}{min}$ $\quad r_A(X_A) := -k \cdot \left[C_{A0} \cdot (1 - X_A)\right]^2$ $\quad X_A := 0, 0.1 .. X_3$



$X_A =$	$\frac{1}{-r_A(X_A)} =$ ($\frac{m^{3.0} \cdot s}{mol}$)
0	60.0
0.1	74.1
0.2	93.7
0.3	122.4
0.4	166.7
0.5	240.0
0.6	375.0
0.7	666.7
0.8	$1.5 \cdot 10^3$

Stima iniziale delle incognite

$X_1 := 0.2$ $\quad X_2 := 0.2$ $\quad \tau_{CSTR2} := 1000 \cdot s$

Schema A: CSTR1 + PFR + CSTR2

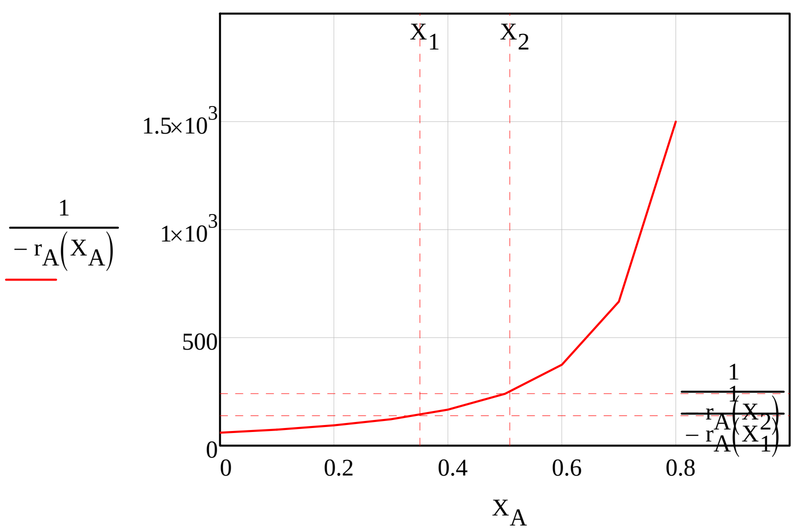
Given $\quad \frac{\tau_{CSTR1}}{C_{A0}} = \frac{X_1}{-r_A(X_1)}$ $\quad \frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_{X_1}^{X_2} \frac{1}{-r_A(X_A)}\, dX_A$ $\quad \frac{\tau_{CSTR2}}{C_{A0}} = \frac{X_3 - X_2}{-r_A(X_3)}$

$0 < X_1 < X_2 < X_3$

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix} := \text{Minerr}\left(X_1, X_2, \frac{\tau_{CSTR2}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.351 \\ 0.51 \\ 434.994 \end{pmatrix} \qquad A := \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix}$$

$\tau_{CSTR2} := \tau_{CSTR2} \cdot s$

$\tau_{CSTR2} = 434.994\, s$



Schema B: CSTR1 + CSTR2 + PFR

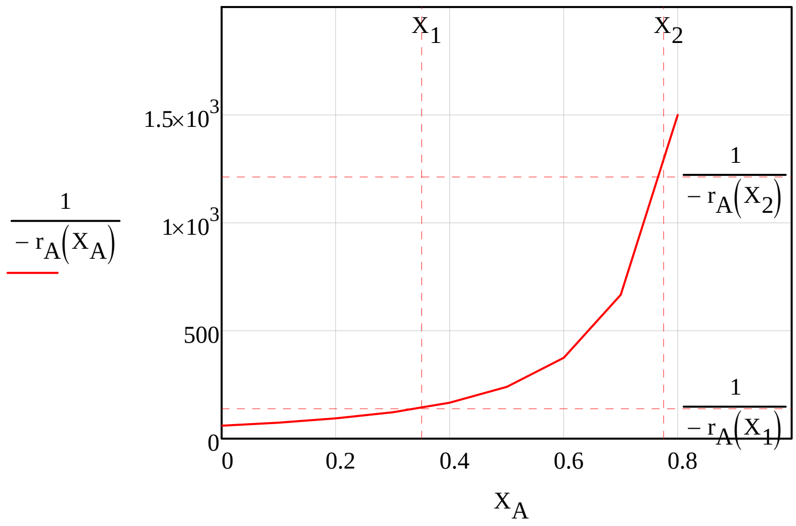
Given $\dfrac{\tau_{CSTR1}}{C_{A0}} = \dfrac{X_1}{-r_A(X_1)}$ $\dfrac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \displaystyle\int_{X_2}^{X_3} \dfrac{1}{-r_A(X_A)}\, dX_A$ $\dfrac{\tau_{CSTR2}}{C_{A0}} = \dfrac{X_2 - X_1}{-r_A(X_2)}$

$0 < X_1 < X_2 < X_3$

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix} := \text{Minerr}\left(X_1, X_2, \frac{\tau_{CSTR2}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.351 \\ 0.778 \\ 518.535 \end{pmatrix} \qquad B := \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix}$$

$\tau_{CSTR2} := \tau_{CSTR2} \cdot s$

$\tau_{CSTR2} = 518.535\ s$



Schema C: CSTR2 + CSTR1 + PFR

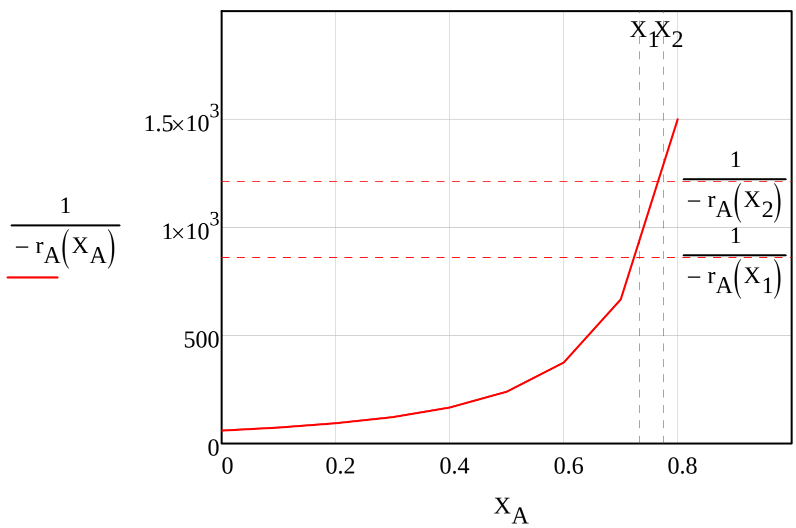
Given $\dfrac{\tau_{CSTR1}}{C_{A0}} = \dfrac{X_2 - X_1}{-r_A(X_2)}$ $\dfrac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \displaystyle\int_{X_2}^{X_3} \dfrac{1}{-r_A(X_A)}\, dX_A$ $\dfrac{\tau_{CSTR2}}{C_{A0}} = \dfrac{X_1}{-r_A(X_1)}$

$0 < X_1 < X_2 < X_3$

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix} := \text{Minerr}\left(X_1, X_2, \frac{\tau_{CSTR2}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.737 \\ 0.778 \\ 637.163 \end{pmatrix} \qquad C := \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix}$$

$\tau_{CSTR2} := \tau_{CSTR2} \cdot s$

$\tau_{CSTR2} = 637.163\ s$



Schema D: CSTR2 + PFR + CSTR1

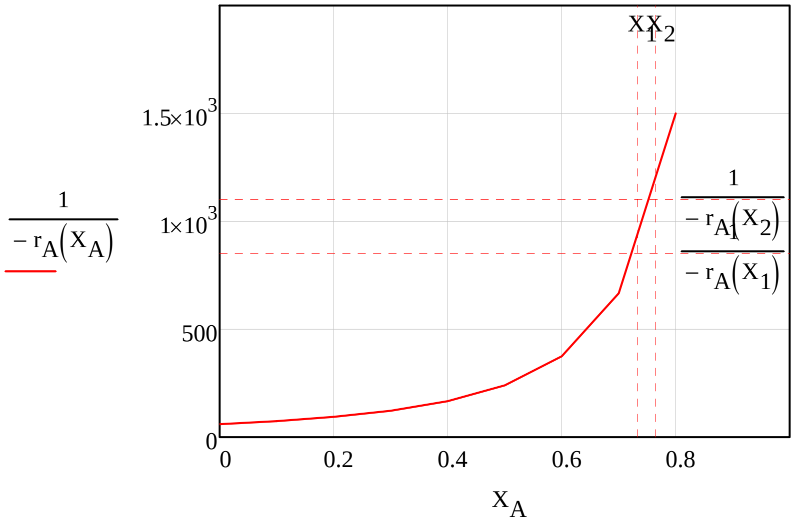
Given $\frac{\tau_{CSTR1}}{C_{A0}} = \frac{X_3 - X_2}{-r_A(X_3)}$ $\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_{X_1}^{X_2} \frac{1}{-r_A(X_A)}\, dX_A$ $\frac{\tau_{CSTR2}}{C_{A0}} = \frac{X_1}{-r_A(X_1)}$

$0 < X_1 < X_2 < X_3$

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix} := \mathrm{Minerr}\left(X_1, X_2, \frac{\tau_{CSTR2}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.736 \\ 0.767 \\ 632.755 \end{pmatrix} \quad D := \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix}$$

$\tau_{CSTR2} := \tau_{CSTR2} \cdot s$

$\tau_{CSTR2} = 632.755\ s$



Schema E PFR + CSTR1 + CSTR2

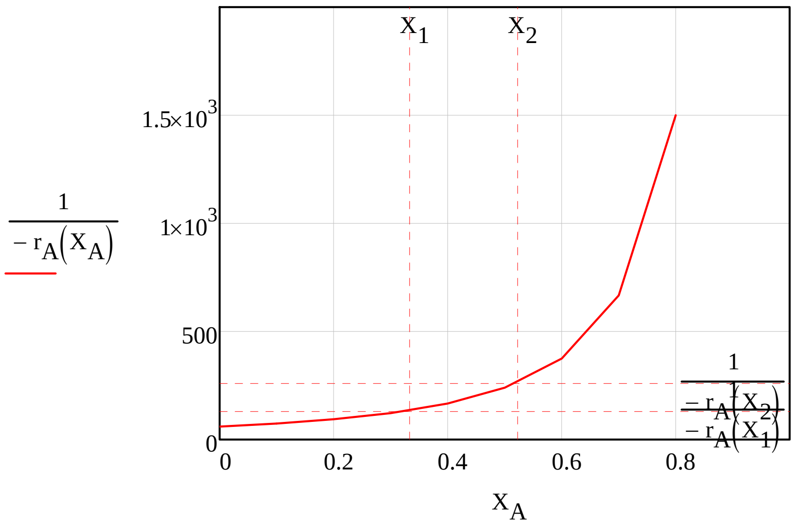
Given $\frac{\tau_{CSTR1}}{C_{A0}} = \frac{X_2 - X_1}{-r_A(X_2)}$ $\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_{0}^{X_1} \frac{1}{-r_A(X_A)}\, dX_A$ $\frac{\tau_{CSTR2}}{C_{A0}} = \frac{X_3 - X_2}{-r_A(X_3)}$

$0 < X_1 < X_2 < X_3$

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix} := \mathrm{Minerr}\left(X_1, X_2, \frac{\tau_{CSTR2}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.333 \\ 0.523 \\ 415.549 \end{pmatrix} \quad E := \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix}$$

$\tau_{CSTR2} := \tau_{CSTR2} \cdot s$

$\tau_{CSTR2} = 415.549\ s$



Schema F PFR + CSTR2 + CSTR1

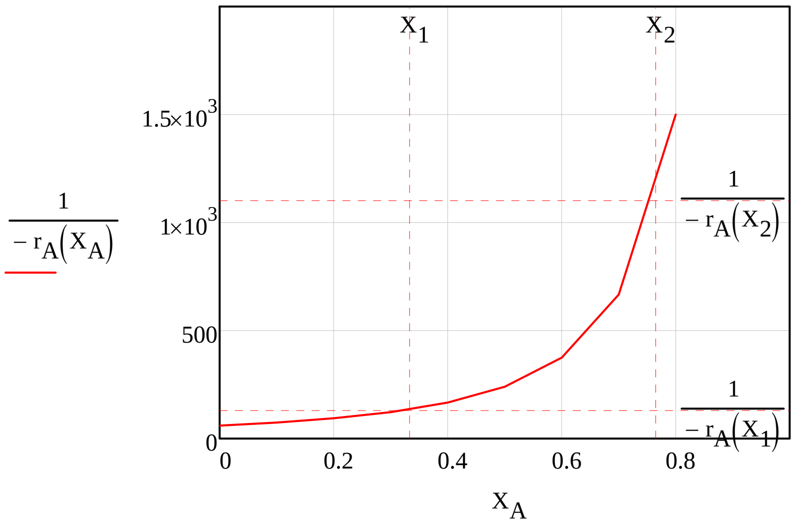
Given $\frac{\tau_{CSTR1}}{C_{A0}} = \frac{X_3 - X_2}{-r_A(X_3)}$ $\frac{\tau_{PFR}}{C_{A0}} = \int_0^{X_1} \frac{1}{-r_A(X_A)} dX_A$ $\frac{\tau_{CSTR2}}{C_{A0}} = \frac{X_2 - X_1}{-r_A(X_2)}$

$0 < X_1 < X_2 < X_3$

$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix} := \text{Minerr}\left(X_1, X_2, \frac{\tau_{CSTR2}}{s}\right) = \begin{pmatrix} 0.333 \\ 0.767 \\ 477.551 \end{pmatrix}$ $F := \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \tau_{CSTR2} \end{pmatrix}$

$\tau_{CSTR2} := \tau_{CSTR2} \cdot s$

$\tau_{CSTR2} = 477.551\ s$



$\tau_{CSTR1} = 50\,s$ $\tau_{PFR} = 30\,s$

Schema A : CSTR1 + PFR + CSTR2

Schema B : CSTR1 + CSTR2 + PFR

Schema C : CSTR2 + CSTR1 + PFR

Schema D : CSTR2 + PFR + CSTR1

Schema E : PFR + CSTR1 + CSTR2

Schema F : PFR + CSTR2 + CSTR1

$A = \begin{pmatrix} 0.351 \\ 0.51 \\ 434.994 \end{pmatrix}$ $B = \begin{pmatrix} 0.351 \\ 0.778 \\ 518.535 \end{pmatrix}$ $C = \begin{pmatrix} 0.737 \\ 0.778 \\ 637.163 \end{pmatrix}$

$D = \begin{pmatrix} 0.736 \\ 0.767 \\ 632.755 \end{pmatrix}$ $E = \begin{pmatrix} 0.333 \\ 0.523 \\ 415.549 \end{pmatrix}$ $F = \begin{pmatrix} 0.333 \\ 0.767 \\ 477.551 \end{pmatrix}$

Quindi la configurazione migliore è: **PFR, CSTR piccolo (τ = 50 secondi) e CSTR grande (τ = 416 secondi)**, sempre in modo da mantenere la concentrazione media più **alta** possibile (si tratta di una reazione del secondo ordine).

e
)