Cognome	Nome	Matricola	Firma

E-mail:

Problema 1. Una microcapsula è una sferetta – solitamente di materiale polimerico – di diametro esterno D_e e diametro interno D_i. Nella cavità (*core*) è contenuta una soluzione acquosa di un farmaco (composto A), a concentrazione iniziale C_{A0}^{I}, mentre lo spessore di polimero (*shell*) è permeabile al farmaco (diffusività del farmaco nel polimero D_{AP}). Tra la concentrazione di A in fase liquida e nel polimero esiste la relazione di equilibrio $C_A^{POL} = K C_A^{LIQ}$. All'istante zero, un numero N di microcapsule viene introdotto in un volume V^{II} di acqua pura (*medium*, agitato e mantenuto alla temperatura T, in cui $C_{A0}^{II} = 0$).

1. Calcolare la concentrazione del composto A nella fase acquosa interna alle microcapsule e nel volume di liquido esterno allo stato stazionario (trascurando la quantità di composto A che allo stato stazionario è contenuta negli *shell* polimerici);
2. Calcolare il valore di un coefficiente globale di scambio di materia tra il *core* delle particelle e il *medium* (il mezzo acquoso esterno alle microsfere);
3. Proporre un modello per descrivere l'evoluzione delle concentrazioni di A nel *core* e nel *medium*. Calcolare dopo quanto tempo si raggiunge lo stato stazionario (ingegneristicamente).

Note. Per effetto dell'agitazione, la velocità tangenziale dell'acqua esternamente alla sfera è v_W; la diffusività del composto A in acqua è D_{AW}; il numero di Sherwood nel core vale N_{Sh}^{I}, la lunghezza caratteristica essendo il diametro interno.
Dati. $D_e = 300$ μm, $D_i = 280$ μm; $C_{A0}^{I} = 8.5$ g/litro; $K = 0.01$; $N = 2{\cdot}10^5$; $V_{II} = 0.5$ litri; $T = 37$°C;
$v_W = 3$ cm/s; $N_{Sh}^{I} = 0.25$; $D_{AP} = 10^{-10}$ m^2/s; $D_{AW} = 10^{-9}$ m^2/s.

Problema 2. Dal fondo di un serbatoio a forma di parallelepipedo a base quadrata di lato W, parte un tubo orizzontale liscio, lungo L, a sezione circolare di diametro interno d, aperto all'atmosfera. Il serbatoio, il cui interno è perfettamente agitato, è alimentato con una portata $\dot{V}_1$ di una soluzione acquosa di un sale, composto B, a concentrazione C_{B1}.

1. Calcolare l'altezza del pelo libero di liquido che si stabilisce nel serbatoio allo stato stazionario.

Da un certo istante in poi, al serbatoio viene inviata, insieme alla precdente, un'altra portata $\dot{V}_2$ di una soluzione acquosa dello stesso sale B a concentrazione C_{B2}.

2. Proporre un modello (ODE + condizione iniziale + metodo di soluzione) per descrivere l'evoluzione in transitorio del pelo libero del liquido e calcolarne il nuovo valore di stato stazionario;
3. Proporre un modello (ODE + condizione iniziale + metodo di soluzione) per descrivere l'evoluzione in transitorio della concentrazione di B all'uscita e calcolarne il nuovo valore di stato stazionario.

Nota. Tutte le soluzioni del sale B hanno le proprietà fisiche dell'acqua.
Dati. $W = 2$ m; $L = 6$ m; $d = 5$ cm; $\dot{V}_1 = 0.006$ m^3/s; $C_{B1} = 4.0$ kg/m^3; $\dot{V}_2 = 0.002$ m^3/s; $C_{B2} = 1.0$ kg/m^3.

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

Problema 1. Una microcapsula è una sferetta – solitamente di materiale polimerico – di diametro esterno D_e e diametro interno D_i. Nella cavità (*core*) è contenuta una soluzione acquosa di un farmaco (composto A), a concentrazione iniziale C_{A0}^{I}, mentre lo spessore di polimero (*shell*) è permeabile al farmaco (diffusività del farmaco nel polimero D_{AP}). Tra la concentrazione di A in fase liquida e nel polimero esiste la relazione di equilibrio $C_A^{POL} = KC_A^{LIQ}$. All'istante zero, un numero N di microcapsule viene introdotto in un volume V^{II} di acqua pura (*medium*, agitato e mantenuto alla temperatura T, in cui $C_{A0}^{II} = 0$).

1. Calcolare la concentrazione del composto A nella fase acquosa interna alle microcapsule e nel volume di liquido esterno allo stato stazionario (trascurando la quantità di composto A che allo stato stazionario è contenuta negli *shell* polimerici);
2. Calcolare il valore di un coefficiente globale di scambio di materia tra il *core* delle particelle e il *medium* (il mezzo acquoso esterno alle microsfere);
3. Proporre un modello per descrivere l'evoluzione delle concentrazioni di A nel *core* e nel *medium*. Calcolare dopo quanto tempo si raggiunge lo stato stazionario (ingegneristicamente).

Note. Per effetto dell'agitazione, la velocità tangenziale dell'acqua esternamente alla sfera è v_W; la diffusività del composto A in acqua è D_{AW}; il numero di Sherwood nel core vale N_{Sh}^{I}, la lunghezza caratteristica essendo il diametro interno.

Dati. $D_e = 300$ μm, $D_i = 280$ μm; $C_{A0}^{I} = 8.5$ g/litro; $K = 0.01$; $N = 2\cdot10^5$; $V_{II} = 0.5$ litri; $T = 37$°C; $v_W = 3$ cm/s; $N_{Sh}^{I} = 0.25$; $D_{AP} = 10^{-10}$ m²/s; $D_{AW} = 10^{-9}$ m²/s.

$D_e := 300\cdot\mu m$ $\quad D_i := 280\cdot\mu m$ $\quad \delta := \frac{D_e - D_i}{2} = 10\cdot\mu m$ $\quad C_{A0.I} := 8.5\cdot\frac{gm}{liter} = 8.5\,\frac{kg}{m^3}$ $\quad K := 0.01$ $\quad T := 37\,°C$

$v_W := 3\cdot\frac{cm}{s}$ $\quad N_{Sh.I} := 0.25$ $\quad D_{AP} := 10^{-10}\cdot\frac{m^2}{s}$ $\quad D_{AW} := 10^{-9}\cdot\frac{m^2}{s}$ $\quad N := 2\cdot10^5$ $\quad V_{II} := 0.5\cdot liter$

Volume totale dei core

$$V_I := N\cdot\frac{\pi\cdot D_i^3}{6} = 2.299\times10^{-3}\,L$$

Quantità iniziale di A

$$m_{A0} := N\cdot\frac{\pi\cdot D_i^3}{6}\cdot C_{A0.I} = 19.54\cdot mg$$

Quantità finale di A (trascurando quella che è nel polimero)

$$m_{Afin} = N\cdot\frac{\pi\cdot D_i^3}{6}\cdot C_{A.ss} + V_{II}\cdot C_{A.ss} = (V_I + V_{II})\cdot C_{A.ss}$$

essendo m.A0 = m.Afin si ha

$$C_{A.ss} := \frac{m_{A0}}{V_I + V_{II}} = 0.039\,\frac{kg}{m^3}$$

La quantità di A che è nel polimero è dell'ordine di $N\cdot\frac{\pi}{6}\cdot\left(D_e^3 - D_i^3\right)\cdot K\cdot C_{A.ss} = 2.056\times10^{-10}\,kg$

La forza spingente totale è

$$C_{A.I} - C_{A.II} = (C_{A.I} - C_{A.I.i}) + (C_{A.I.i} - C_{A.II.i}) + (C_{A.II.i} - C_{A.II})$$

ovvero

$$C_{A.I} - C_{A.II} = (C_{A.I} - C_{A.I.i}) + \frac{1}{K}\cdot(C_{A.P.I.i} - C_{A.P.II.i}) + (C_{A.II.i} - C_{A.II})$$

quindi (ipotesi di lastra piana perché δ << D)

$$\frac{1}{K_C} = \frac{1}{k_{c.I}} + \frac{1}{K}\cdot\frac{1}{\frac{D_{AP}}{\delta}} + \frac{1}{k_{c.II}}$$

$C_{A.I}$	concentrazione nel core
$C_{A.I.i}$	concentrazione all'interfaccia core-shell polimerico, lato liquido
$C_{A.P.I.i}$	concentrazione all'interfaccia core-shell, lato polimero
$C_{A.II.i}$	concentrazione all'interfaccia shell-medium, lato liquido
$C_{A.P.II.i}$	concentrazione all'inerfaccia shell-medium, lato polimero
$C_{A.II}$	concentrazione nel medium

$k_{c.I} := \dfrac{N_{Sh.I} \cdot D_{AW}}{D_i} = 8.929 \times 10^{-7} \dfrac{m}{s}$ $\qquad K \cdot \dfrac{D_{AP}}{\delta} = 1 \times 10^{-7} \dfrac{m}{s}$ $\qquad N_{Re.II} := \dfrac{v_W \cdot D_e}{\nu_w(T)} = 12.492$

$N_{Sh.II} := 2.0 + 0.6 N_{Re.II}^{\ 0.5} \cdot S_{Sc.II}^{\ 0.33} = 20.599$ $\qquad k_{c.II} := \dfrac{N_{Sh.II} \cdot D_{AW}}{D_e} = 6.866 \times 10^{-5} \dfrac{m}{s}$

$$K_C := \left(\frac{1}{k_{c.I}} + \frac{1}{K} \cdot \frac{1}{\frac{D_{AP}}{\delta}} + \frac{1}{k_{c.II}} \right)^{-1} = 8.981 \times 10^{-8} \frac{m}{s}$$

In coordinate sferiche (cioè senza trascurare la curvatura) sarebbe stato $\quad R_i := \dfrac{D_i}{2} = 140 \cdot \mu m \quad R_e := \dfrac{D_e}{2} = 150 \cdot \mu m$

$$K_{Ci} := \frac{1}{R_i^{\ 2}} \cdot \left[\frac{1}{k_{c.I} \cdot R_i^{\ 2}} + \frac{1}{K} \cdot \frac{1}{D_{AP}} \cdot \left(\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_e} \right) + \frac{1}{k_{c.II} \cdot R_e^{\ 2}} \right]^{-1} = 9.555 \times 10^{-8} \frac{m}{s}$$

$$K_{Ce} := \frac{1}{R_e^{\ 2}} \cdot \left[\frac{1}{k_{c.I} \cdot R_i^{\ 2}} + \frac{1}{K} \cdot \frac{1}{D_{AP}} \cdot \left(\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_e} \right) + \frac{1}{k_{c.II} \cdot R_e^{\ 2}} \right]^{-1} = 8.323 \times 10^{-8} \frac{m}{s}$$

Bilancio sugli N core (uguale a quello su un solo core)

$$N \cdot \frac{\pi \cdot D_i^{\ 3}}{6} \cdot \left(\frac{d}{dt} C_{A.I}(t) \right) = -N \cdot \pi \cdot D_i^{\ 2} \cdot K_C \cdot \left(C_{A.I}(t) - C_{A.II}(t) \right) \qquad C_{A.I}(t = 0) = C_{A0.I}$$

Bilancio sul medium

$$V_{II} \cdot \left(\frac{d}{dt} C_{A.II}(t) \right) = N \cdot \pi \cdot D_i^{\ 2} \cdot K_C \cdot \left(C_{A.I}(t) - C_{A.II}(t) \right) \qquad C_{A.II}(t = 0) = C_{A0.II} = 0$$

Definendo $\quad \delta_A(t) = C_{A.I}(t) - C_{A.II}(t)$

Si ha

$$\frac{d}{dt} C_{A.I}(t) - \frac{d}{dt} C_{A.II}(t) = -\left[\frac{1}{\left(N \cdot \frac{\pi \cdot D_i^{\ 3}}{6} \right)} + \frac{1}{V_{II}} \right] \cdot \left(N \cdot \pi \cdot D_i^{\ 2} \cdot K_C \right) \cdot \left(C_{A.I}(t) - C_{A.II}(t) \right)$$

ovvero $\quad \dfrac{d}{dt} \delta_A(t) = -\dfrac{1}{\tau} \cdot \delta_A(t) \quad$ con $\quad \tau := \left[N \cdot \pi \cdot D_i^{\ 2} \cdot K_C \cdot \left(\dfrac{1}{V_I} + \dfrac{1}{V_{II}} \right) \right]^{-1} = 517.235\, s \qquad \tau = 8.621 \cdot min$

questo transitorio si esaurisce (ingegneristicamente) dopo 5τ perché $\quad \exp(-5) = 0.0067$

quindi lo stato stazionario si raggiunge dopo un tempo pari a 5τ $\quad 5 \cdot \tau = 2.586 \times 10^3\, s \qquad 5 \cdot \tau = 43.103 \cdot min$

Problema 2. Dal fondo di un serbatoio a forma di parallelepipedo a base quadrata di lato W, parte un tubo orizzontale liscio, lungo L, a sezione circolare di diametro interno d, aperto all'atmosfera. Il serbatoio, il cui interno è perfettamente agitato, è alimentato con una portata $\dot{V}_1$ di una soluzione acquosa di un sale, composto B, a concentrazione C_{B1}.

1. Calcolare l'altezza del pelo libero di liquido che si stabilisce nel serbatoio allo stato stazionario.

Da un certo istante in poi, al serbatoio viene inviata un'altra portata $\dot{V}_2$ di una soluzione acquosa dello stesso sale B a concentrazione C_{B2}.

2. Proporre un modello (ODE + condizione iniziale + metodo di soluzione) per descrivere l'evoluzione in transitorio del pelo libero del liquido e calcolarne il nuovo valore di stato stazionario;
3. Proporre un modello (ODE + condizione iniziale + metodo di soluzione) per descrivere l'evoluzione in transitorio della concentrazione di B all'uscita e calcolarne il nuovo valore di stato stazionario.

Nota. Tutte le soluzioni del sale B hanno le proprietà fisiche dell'acqua.

Dati. $W = 2$ m; $L = 6$ m; $d = 5$ cm; $\dot{V}_1 = 0.006$ m³/s; $C_{B1} = 4.0$ kg/m³; $\dot{V}_2 = 0.002$ m³/s; $C_{B2} = 1.0$ kg/m³.

$W := 2\cdot m \quad L := 6\cdot m \quad d := 5\cdot cm \quad V_{p1} := 0.006\cdot\frac{m^3}{s} \quad C_{B1} := 4\cdot\frac{kg}{m^3} \quad V_{p2} := 0.002\cdot\frac{m^3}{s} \quad C_{B2} := 1\cdot\frac{kg}{m^3}$

$\rho := 1000\cdot\frac{kg}{m^3} \quad \mu := 0.001\cdot\frac{kg}{m\cdot s}$

Nella fase iniziale, da un bilancio di materia sul serbatoio $\quad V_{p1} = V_{OUT} = \frac{\pi\cdot d^2}{4}\cdot v_{out} \quad v_{out} := \frac{4\cdot V_{p1}}{\pi\cdot d^2} = 3.056\,\frac{m}{s}$

da un bilancio di energia meccanica tra il pelo libero del serbatoio e la sezione di uscita dal tubo $\quad g\cdot H = \frac{v_{out}^2}{2}\cdot\left(\frac{4\cdot f\cdot L}{d} + \Sigma e_v\right) \quad \Sigma e_v := 1 + 0.45$

$N_{Re} := \frac{v_{out}\cdot d\cdot\rho}{\mu} = 1.528\times 10^5 \quad f_t := f(N_{Re}, 0) = 4.087\times 10^{-3} \quad H_1 := \frac{v_{out}^2}{2\cdot g}\cdot\left(\frac{4\cdot f_t\cdot L}{d} + \Sigma e_v\right) = 1.624\,m$

Quando comincia ad arrivare la portata Vp2, il bilancio globale di materia diventa

$W^2\cdot\left(\frac{d}{dt}H(t)\right) = V_{p1} + V_{p2} - \frac{\pi\cdot d^2}{4}\cdot v_{out}(t)$ con il bilancio di EM dato da (stato pseudo-stazionario) $\quad g\cdot H(t) = \frac{v_{out}(t)^2}{2}\cdot\left(\frac{4\cdot f_t(t)\cdot L}{d} + \Sigma e_v\right)$

e con $\quad H(t = 0) = H_1$

da risolvere numericamente perchè il bilancio di EM è implicito in v.out

Al nuovo stato stazionario

$V_{p1} + V_{p2} = \frac{\pi\cdot d^2}{4}\cdot v_{out} \quad v_{out} := \frac{4\cdot(V_{p1} + V_{p2})}{\pi\cdot d^2} = 4.074\,\frac{m}{s} \quad H_2 := \frac{v_{out}^2}{2\cdot g}\cdot\left(\frac{4\cdot f_t\cdot L}{d} + \Sigma e_v\right) = 2.888\,m$

Bilancio di componente B

$$W^2\cdot\left[\frac{d}{dt}(H(t)\cdot C_B(t))\right] = V_{p1}\cdot C_{B1} + V_{p2}\cdot C_{B2} - \frac{\pi\cdot d^2}{4}\cdot v_{out}(t)\cdot C_B(t)$$

con $\quad C_B(t = 0) = C_{B1} \quad$ da isolvere insieme al bilancio globale di materia e dal bilancio di EM

Allo stato stazionario

$$\left[V_{p1}\cdot C_{B1} + V_{p2}\cdot C_{B2} = \frac{\pi\cdot d^2}{4}\cdot v_{out}\cdot C_B = (V_{p1} + V_{p2})\cdot C_B\right] \qquad C_B := \frac{V_{p1}\cdot C_{B1} + V_{p2}\cdot C_{B2}}{V_{p1} + V_{p2}} = 3.25\,\frac{kg}{m^3}$$

$$S_{Sc.II} := \frac{\nu_w(T)}{D_{AW}} = 720.453$$