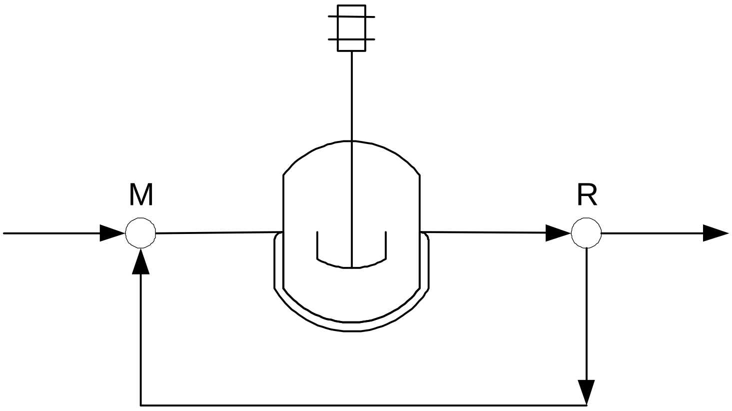
Sezione 6: MODELLISTICA MATEMATICA

La **reazione irreversibile**

$$\mathbf{A \rightarrow P}$$

viene condotta in un **reattore CSTR** con **riciclo** (v. figura).

L'intero sistema è alimentato da una corrente di liquido, con una portata volumetrica $\dot{V}_{in}$ a concentrazione c_{Ain}. Il reattore riceve dal nodo miscelatore M una corrente più grande in portata, essendo $r = \frac{\dot{V}_r}{\dot{V}_{in}}$ il **rapporto di riciclo** e $\dot{V}_r$ la **portata di riciclo**. L'uscita dal ripartitore di flusso R avviene con portata volumetrica $\dot{V}_{out}$ a concentrazione c_{Aout}.



Valgono le seguenti ipotesi:

1. perfetta miscelazione nel recipiente
2. ρ = cost.
3. reazioni chimiche ed intero sistema isotermi
4. $\dot{V}_{in}$ = cost.
5. l'altezza del liquido nel recipiente è costante
6. cinetica del 1° ordine

Si chiede, <u>con rif. al nodo miscelatore M</u>:

a. scrivere il modello matematico in **stazionario**
b. il modello matematico **dinamico** è diverso da quello **stazionario**? Perché?

Si chiede, <u>con rif. al reattore CSTR</u>

c. scrivere il modello matematico in **stazionario**
d. scrivere il modello matematico **dinamico** nel **dominio del tempo**

Si chiede, <u>con rif. all'intero sistema ingresso-uscita</u> e quindi al modello che colleghi <u>l'uscita</u> c_{Aout} <u>all'ingresso</u> c_{Ain}:

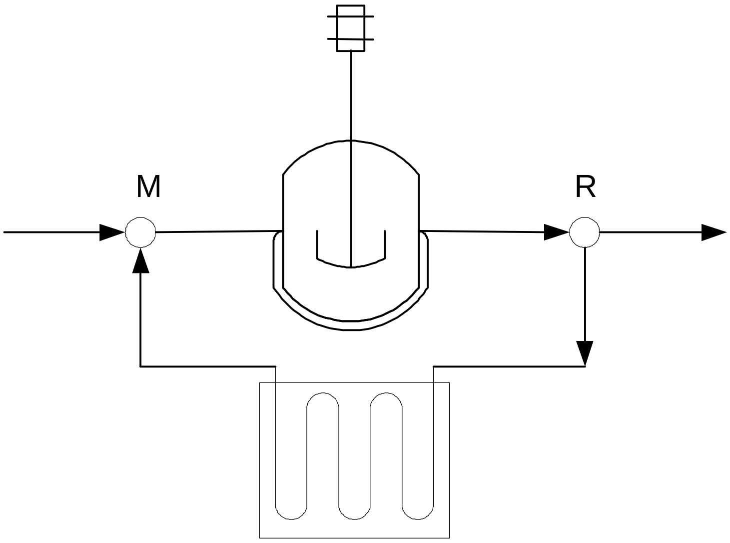
e. scrivere il modello matematico **dinamico** nel **dominio del tempo**
f. **classificare** il modello matematico **dinamico** così ottenuto
g. individuare **variabili di ingresso**, **stato** ed **uscita**, nonché i **parametri** del modello
h. discutere quali tra le variabili di ingresso possano essere prese come **funzioni forzanti** e ragionevolmente di che **tipo**, vista la natura del problema
i. esprimere il modello in **variabili di deviazione**
j. trasportare il modello **dinamico** nel **dominio di Laplace**
k. determinare la **funzione di trasferimento**

Come approfondimento, si desidera studiare il caso in cui il fluido della corrente di riciclo $\dot{V}_r$ subisce un **ritardo di trasporto t_d** a causa dell'attraversamento di un serpentino (non reagente) secondo lo schema nella figura seguente. Per questo nuovo caso:

l. modificare il **modello matematico** del nodo miscelatore M

m. scrivere il **modello matematico dinamico** nel **dominio del tempo** che colleghi l'uscita c_{Aout} all'ingresso c_{Ain}

n. determinare la nuova **funzione di trasferimento** che colleghi l'uscita c_{Aout} all'ingresso c_{Ain}



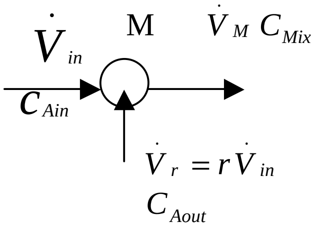
Reazione irreversibile A ⇒ P
Condotta in un CSTR con riciclo

Rapporto di riciclo $r = \dfrac{\dot{V}r}{\dot{V}in}$

Ipotesi:

1. Perfetta miscelazione
2. r = cost
3. reazioni chimiche ed intero sistema isotermi
4. $\dot{V}_{in}$ = cost
5. l'altezza del liquido nel recipiente è costante
6. cinetica del I ordine

a) Modello matematico in stazionario riferito al nodo miscelatore M



Anche $\dot{V}r$ ha una concentrazione C_{Aout} poiché R è un semplice ripartitore di flusso.

Bilancio sulla specie A

$$\dot{V}_M \, C_{MIX} = \dot{V}_{IN} \, C_{AIN} + r\dot{V}_{IN} \, C_{Aout}$$

$$\dot{V}_M \, C_{MIX} = \dot{V}_{IN} \left(C_{AIN} + rC_{Aout} \right)$$

b) Modello matematico in dinamico riferito al nodo miscelatore M

Il modello matematico in dinamico non differisce da quello in stazionario, per quanto riguarda M; infatti non è ancora avvenuta nessuna reazione (in M) e non c'è alcun accumulo, dunque:

IN – OUT + 0 = 0 $\Rightarrow$ IN = OUT

Proprio come per il modello in regime stazionario.

Modello matematico stazionario per il ripartitore R

$$\dot{V}_R \, C_R = \dot{V}_{in} \, C_{Aout} + \dot{V}_{in} \, rC_{Aout};$$

$$\dot{V}_R \, C_R = C_{Aout} \dot{V}_{IN} (1 + r)$$

Ma nel ripartitore risulta:
$C_R = C_{Aout}$
e quindi:

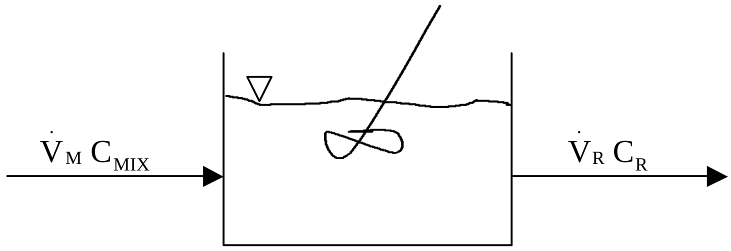
$$\dot{V}_R = \dot{V}_{IN} (1 + r)$$

c) Modello matematico in stazionario riferito al reattore CSTR

Per l'ipotesi 4) $\dot{V}_{IN} = \dot{V}_{OUT}$

Sapendo che

$$\dot{V}_M\, C_{MIX} = \dot{V}_{IN}\, C_{AIN} + r\dot{V}_{IN}\, C_{Aout}$$



Quindi il bilancio è:

$$\dot{V}_{IN}\, C_{Ain} + r\dot{V}_{IN}\, C_{Aout} + GENERAZIONE = C_{Aout}(\dot{V}_{IN} + r\dot{V}_{IN})$$

Per il termine di generazione:
sapendo che $(-r_A) = KC_A$ da A $\longrightarrow$ P che ha una cinetica del I ordine ed è irreversibile scrivo

$$\dot{V}_{IN}\, C_{AIN} + r\dot{V}_{IN}\, C_{Aout} - VKC_{Aout} = C_{Aout}(\dot{V}_{IN} + r\dot{V}_{IN}) \qquad (*)$$

d) Modello matematico dinamico del CSTR

Questa volta bisogna anche aggiungere il termine di accumulo che è $V\dfrac{dC_{Aout}}{dt}$; quindi posso riscrivere il bilancio:

$$\dot{V}_{IN}\, C_{AIN}(t) + r\dot{V}_{IN}\, C_{Aout}(t) - VKC_{Aout}(t) = C_{Aout}(t)(\dot{V}_{IN} + r\dot{V}_{IN}) + V\frac{dC_{Aout}}{dt} \qquad (**)$$

e)

Ho già legato nelle risposte precedenti l’uscita C_{Aout} con l’ingresso C_{Ain}. Infatti avevo chiamato la corrente in ingresso al CSTR:

$\dot{V}_M\, C_{MIX}$ sostituita poi con $\dot{V}_{IN}\, C_{Ain} + r\dot{V}_{IN}\, C_{Aout}$

e la corrente di uscita dal reattore CSTR:

$\dot{V}_R\, C_R$ sostituita poi con $C_{Aout}(\dot{V}_{IN} + r\dot{V}_{IN})$

Quindi la ODE precedente è anche l’equazione che lega l’uscita $C_{Aout}(t)$ all’ingresso $C_{Ain}(t)$

f)

ODE lineare del primo ordine, non omogenea, a coeff. costanti.

g)

V. INGRESSO	V. STATO	V. USCITA	PARAMETRI
C_{Ain}	C_{Aout}	C_{Aout}	$\dot{V}_{in}$ V, r, K

h)

La variabile in ingresso C_{Ain} può essere presa come funzione forzante del tipo:
Onda quadra, rampa (limitata), gradino, sinusoidale.

i)

Per esprimere il modello in variabile di deviazione devo sottrarre al bilancio globale in dinamico (**) quello stazionario (*) (globale nel senso che ingloba tutto il sistema).

$$(\dot{V}_{IN}\, C_{AIN}(t) - V_{IN} C_{Ain}) + r\dot{V}_{in}\, C_{Aout}(t) + VKC_{Aout}(t) = (C_{Aout}(t)(\dot{V}_{IN} + r\dot{V}_{IN}) - \dot{V}_{IN}\, C_{Aout}) + V\,\frac{dC_{Aout}}{dt}$$