Sezione 6: MODELLISTICA MATEMATICA

La **reazione irreversibile**

A → P

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

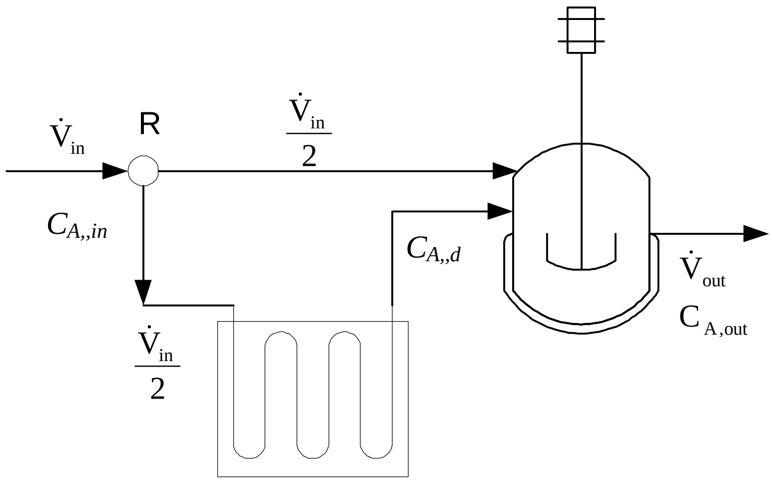
L'intero sistema è alimentato da una corrente di liquido, con una portata volumetrica $\dot{V}_{in}$ a concentrazione $c_{A,in}$. Il reattore riceve dal nodo **ripartitore di flusso** R:

i. una corrente "diretta" proveniente dal nodo ripartitore più piccola in portata
ii. una corrente "ritardata" di uguale portata, che in condizioni dinamiche subisce un **ritardo di trasporto t_d** a causa dell'attraversamento di un serpentino (non reagente)

L'uscita dal CSTR avviene con portata volumetrica $\dot{V}_{out}$ a concentrazione $c_{A,out}$.

Valgono le seguenti ipotesi:

1. perfetta miscelazione nel recipiente
2. densità costante
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 ripartitore di flusso R</u>:

a. scrivere il modello matematico dinamico. E' diverso da quello stazionario? Perché?

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

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

Si chiede, <u>con rif. all'intero sistema ingresso-uscita</u>, e quindi <u>collegando l'uscita</u> $c_{A,out}$ <u>all'ingresso</u> $c_{A,in}$ di assemblare i modelli delle 2 unità di processo di cui sopra e di:

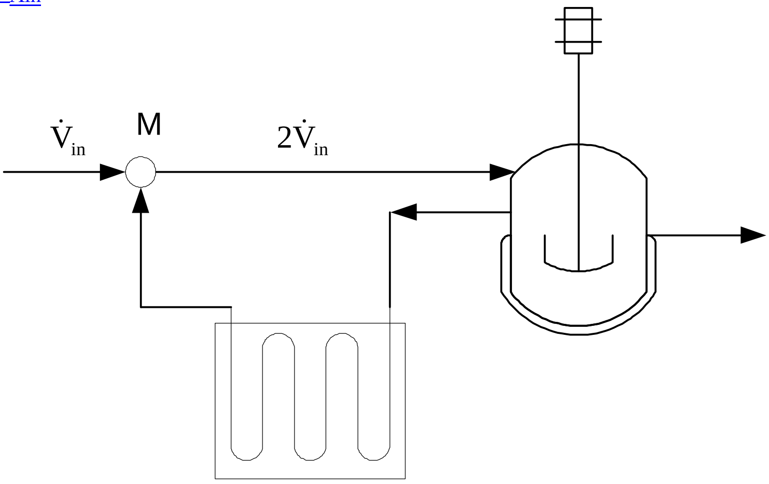
d. scrivere il modello matematico dinamico nel dominio del tempo
e. **classificare** il modello matematico **dinamico** così ottenuto
f. individuare **variabili di ingresso**, **stato** ed **uscita**, nonché i **parametri** del modello
g. esprimere il modello in variabili di deviazione
h. trasportare il modello **dinamico** nel **dominio di Laplace**
i. determinare la **funzione di trasferimento**

Come approfondimento, si desidera innanzitutto considerare il caso in cui cambia l'ip.6:
6'. cinetica del 2° ordine

j. descrivere in maniera qualitativa cosa cambia nel modello matematico dinamico nel dominio del tempo e come bisogna procedere

Come approfondimento, si desidera inoltre studiare il caso in cui il flusso della corrente "ritardata" viene invertito, si crea un **riciclo** dal CSTR al nodo e quest'ultimo diventa il **miscelatore** M, secondo lo schema nella figura seguente. Per questo nuovo caso:

k. modificare il **modello matematico** del nodo miscelatore M
l. modificare il **modello matematico** del CSTR
m. scrivere il **modello matematico dinamico** nel **dominio del tempo** che colleghi l'uscita $c_{A,out}$ all'ingresso $c_{A,in}$
n. determinare la nuova **funzione di trasferimento** che colleghi l'uscita c_{Aout} all'ingresso c_{Ain}



SOLUZIONE

a) con riferimento al nodo ripartitore R scrivere il modello matematico **dinamico**. E' diverso da quello **stazionario**? Perché?

eq. di bilancio di materia globale (a densità costante)

$$\dot{V}_{in} = \dot{V}_{out,1} + \dot{V}_{out,2} = \frac{\dot{V}_{in}}{2} + \frac{\dot{V}_{in}}{2} \qquad 1.$$

Il termine di accumulo è nullo perché il nodo ripartitore non possiede un proprio volume.

Pertanto l'equazione del modello **dinamico** è uguale a quella del modello **stazionario**.

b) con riferimento al reattore CSTR scrivere il modello matematico in stazionario

eq. di bilancio di materia globale (a densità costante)

$$\frac{\dot{V}_{in}}{2} + \frac{\dot{V}_{in}}{2} = \dot{V}_{out} = \dot{V}_{in} \qquad 2.$$

eq. di conservazione della specie A

$$\frac{\dot{V}_{in}}{2} C_{A,in} + \frac{\dot{V}_{in}}{2} C_{A,in} - \dot{V}_{out} C_{A,out} - VkC_{A,out} = 0 \qquad 3.$$

$$\dot{V}_{in} C_{A,in} - \dot{V}_{out} C_{A,out} - VkC_{A,out} = 0 \qquad 4.$$

$$\frac{\dot{V}_{in}}{V} C_{A,in} - \frac{\dot{V}_{out} + kV}{V} C_{A,out} = 0 \qquad 5.$$

c) con riferimento al reattore CSTR scrivere il modello matematico dinamico

eq. di bilancio di materia globale (a densità costante)

$$\frac{\dot{V}_{in}}{2} + \frac{\dot{V}_{in}}{2} = \dot{V}_{out} = \dot{V}_{in} \qquad 6.$$

NB: coincide con eq. di bilancio di materia globale allo stato stazionario

eq. di conservazione della specie A

$$\frac{\dot{V}_{in}}{2} C_{A,in} + \frac{\dot{V}_{in}}{2} C_{A,d} - \dot{V}_{out} C_{A,out} - VkC_{A,out} = V\frac{dC_{A,out}}{dt} \qquad 7.$$

$$V\frac{dC_{A,out}}{dt} + \left(\dot{V}_{out} + Vk\right) C_{A,out} - \frac{\dot{V}_{in}}{2} C_{A,in} - \frac{\dot{V}_{in}}{2} C_{A,d} = 0 \qquad 8.$$

$$\frac{dC_{A,out}}{dt} + \frac{\dot{V}_{out} + Vk}{V} C_{A,out} - \frac{\dot{V}_{in}}{2V} C_{A,d} - \frac{\dot{V}_{in}}{2V} C_{A,in} = 0 \qquad 9.$$

C.I.: $C_{A,out}(0) = C_{A,out}\big|_{st}$

Si chiede, con rif. all'intero sistema ingresso-uscita, e quindi collegando l'uscita C_{Aout} all'ingresso C_{Ain}, di assemblare i modelli delle 2 unità di processo di cui sopra e di:

d. scrivere il modello matematico dinamico nel dominio del tempo

Essendo per il ritardo di trasporto nel serpentino

$$C_{A,d}(t) = C_{A,in}(t - t_d) \qquad 10.$$

la precedente eq. 9 diventa:

$$\frac{dC_{A,out}}{dt} + \frac{\dot{V}_{out} + Vk}{V} C_{A,out} - \frac{\dot{V}_{in}}{2V} C_{A,in}(t - t_d) - \frac{\dot{V}_{in}}{2V} C_{A,in} = 0 \qquad 11.$$

C.I.: $C_{A,out}(0) = C_{A,out}\big|_{st}$

e. **classificare** il modello matematico **dinamico** così ottenuto

Equazione differenziale ordinaria del 1° ordine, non omogenea lineare, a coefficienti costanti (con termine di ritardo di trasporto)

f. individuare variabili di ingresso, stato ed uscita, nonché i parametri del modello

variabili IN: $C_{A,in}$
variabile di stato: $C_{A,out}$
variabili OUT: $C_{A,out}$
parametri: k, V, t_d, $\dot{V}_{in}$

g. esprimere il modello in variabili di deviazione

Definiamo:

$$\overline{C}_{A,out} = C_{A,out} - C_{A,out}\big|_{st} \qquad 12.$$

$$\overline{C}_{A,in} = C_{A,in} - C_{A,in}\big|_{st} \qquad 13.$$

e quindi:

$$\overline{C}_{A,in}(t - t_d) = C_{A,in}(t - t_d) - C_{A,in}\big|_{st} \qquad 14.$$

Sottraendo l'eq. 5 (stazionaria) all'eq. 9 (dinamica), otteniamo

$$\frac{d\overline{C}_{A,out}}{dt} + \frac{\dot{V}_{out} + Vk}{V}\overline{C}_{A,out} - \frac{\dot{V}_{in}}{2V}\overline{C}_{A,in}(t - t_D) - \frac{\dot{V}_{in}}{2V}\overline{C}_{A,in} = 0 \qquad 15.$$

C.I.: $\overline{C}_{A,out}(0) = 0$

h. trasportare il modello dinamico nel dominio di Laplace

Essendo $\dot{V}_{out} = \dot{V}_{in} = \dot{V}$ per l'eq.2, l'eq. 15 può essere così trasformata:

$$\ell\left(\frac{d\overline{C}_{A,out}}{dt}\right) + \ell\left(\frac{\dot{V} + Vk}{V}\overline{C}_{A,out}\right) - \ell\left(\frac{\dot{V}}{2V}\overline{C}_{A,in}(t - t_d)\right) - \ell\left(\frac{\dot{V}}{2V}\overline{C}_{A,in}\right) = 0 \qquad 16.$$

$$\overline{C}_{A,out}(s)s + \frac{\dot{V} + Vk}{V}\overline{C}_{A,out}(s) - \frac{\dot{V}}{2V}e^{-t_d s}\overline{C}_{A,in}(s) - \frac{\dot{V}}{2V}\overline{C}_{A,in}(s) = 0 \qquad 17.$$

Definendo $\frac{\dot{V} + Vk}{V} = \frac{1}{\tau}$ $[=] \mathrm{min}^{-1}$, si ottiene

$$s\overline{C}_{A,out}(s) + \frac{1}{\tau}\overline{C}_{A,out}(s) - \frac{\dot{V}}{2V}\left(1 + e^{-t_d s}\right)\overline{C}_{A,in}(s) = 0 \qquad 18.$$

i. determinare la funzione di trasferimento

$$\frac{\overline{C}_{A,out}(s)}{\overline{C}_{A,in}(s)} = \frac{\tau \frac{\dot{V}}{2V}\left(1 + e^{-t_d s}\right)}{\tau s + 1} \qquad 19.$$

j. descrivere in maniera qualitativa cosa cambia nel modello matematico dinamico nel dominio del tempo per cinetica del 2° ordine e come bisogna procedere

Per l'ipotesi di cinetica del 2° ordine, l'ODE diviene non lineare nel termine $VkC^2_{A,out}$.

Pertanto al fine di recuperare la linearità del modello si può effettuare la linearizzazione del suddetto termine nell'intorno della soluzione stazionaria.

Come approfondimento, si desidera inoltre studiare il caso in cui il flusso della corrente "ritardata" viene invertito, si crea un riciclo dal CSTR al nodo e quest'ultimo diventa il miscelatore M, secondo lo schema nella figura seguente. Per questo nuovo caso:

k. modificare il modello matematico del nodo miscelatore M

eq. di bilancio di materia globale (a densità costante)

$$\dot{V}_{in} + \dot{V}_r = \dot{V}_{out,M} \tag{20.}$$

per ipotesi è:

$$2\dot{V}_{in} = \dot{V}_{out,M} \tag{21.}$$

Quindi

$$\dot{V}_{in} = \dot{V}_r \tag{22.}$$

eq. di conservazione della specie A

$$\dot{V}_{in} C_{A,in}(t) + \dot{V}_{in} C_{A,out}(t - t_d) - \dot{V}_{out,M} C_{A,M}(t) = 0 \tag{23.}$$

$$\dot{V}_{in} C_{A,in}(t) + \dot{V}_{in} C_{A,out}(t - t_d) - 2\dot{V}_{in} C_{A,M}(t) = 0 \tag{24.}$$

$$C_{A,M}(t) = \frac{C_{A,in}(t) + C_{A,out}(t - t_d)}{2} \tag{25.}$$

l. modificare il modello matematico del CSTR

eq. di bilancio di materia globale (a densità costante)

$$\dot{V}_{out} + \dot{V}_{in} = \dot{V}_{out,M} = 2\dot{V}_{in} \tag{26.}$$

$$\dot{V}_{out} = \dot{V}_{in} \tag{27.}$$

eq. di conservazione della specie A

$$\dot{V}_{out,M}C_{A,M} - \dot{V}_{out}C_{A,out} - \dot{V}_r C_{A,out} - VkC_{A,out} = V\frac{dC_{A,out}}{dt} \quad 28.$$

$$\dot{V}_{out,M}C_{A,M} - 2\dot{V}_{in}C_{A,out} - VkC_{A,out} = V\frac{dC_{A,out}}{dt} \quad 29.$$

m. scrivere il modello matematico dinamico nel dominio del tempo che colleghi l'uscita $C_{A,out}$ all'ingresso $C_{A,in}$

Sostituendo nell'eq. di conservazione specie A del CSTR la rispettiva eq. 23 del nodo ripartitore M inclusiva del termine di ritardo di trasporto indotto dal serpentino, si ottiene:

$$\dot{V}_{in}C_{A,in} + \dot{V}_{in}C_{A,out}(t-t_d) - 2\dot{V}_{in}C_{A,out} - VkC_{A,out} = V\frac{dC_{A,out}}{dt} \quad 30.$$

da cui:

$$V\frac{dC_{A,out}}{dt} + \left(2\dot{V}_{in} + Vk\right)C_{A,out} - \dot{V}_{in}C_{A,out}(t-t_d) - \dot{V}_{in}C_{A,in} = 0 \quad 31.$$

$$\frac{dC_{A,out}}{dt} + \frac{2\dot{V}_{in} + Vk}{V}C_{A,out} - \frac{\dot{V}_{in}}{V}C_{A,out}(t-t_d) - \frac{\dot{V}_{in}}{V}C_{A,in} = 0 \quad 32.$$

$$\frac{dC_{A,out}}{dt} + \frac{2\dot{V}_{in} + Vk}{V}C_{A,out} - \frac{\dot{V}_{in}}{V}C_{A,out}(t-t_d) - \frac{\dot{V}_{in}}{V}C_{A,in} = 0 \quad 33.$$

C.I.: $C_{A,out}(0) = C_{A,out}\big|_{st}$

n. determinare la nuova funzione di trasferimento che colleghi l'uscita $C_{A,out}$ all'ingresso $C_{A,in}$

Trasformando secondo Laplace

$$\ell\left(\frac{d\overline{C}_{A,out}}{dt}\right) + \ell\left(\frac{2\dot{V}_{in} + Vk}{V}\overline{C}_{A,out}\right) - \ell\left(\frac{\dot{V}_{in}}{V}\overline{C}_{A,out}(t-t_d)\right) - \ell\left(\frac{\dot{V}_{in}}{V}\overline{C}_{A,in}\right) = 0 \quad 34.$$

$$\overline{C}_{A,out}(s)s + \frac{2\dot{V}_{in} + Vk}{V}\overline{C}_{A,out}(s) - \frac{\dot{V}_{in}}{V}e^{-t_d s}\overline{C}_{A,out}(s) - \frac{\dot{V}_{in}}{V}\overline{C}_{A,in}(s) = 0 \quad 35.$$

$$s\overline{C}_{A,out}(s) + \left(\frac{2\dot{V}_{in} + Vk}{V} - \frac{\dot{V}_{in}}{V}e^{-t_d s}\right)\overline{C}_{A,out}(s) - \frac{\dot{V}_{in}}{V}C_{A,in}(s) = 0 \quad 36.$$

$$s\overline{C}_{A,out}(s)+\left[k+\frac{\dot{V}_{in}}{V}\left(2-e^{-t_d s}\right)\right]\overline{C}_{A,out}(s)-\frac{\dot{V}_{in}}{V}C_{A,in}(s)=0 \qquad 37.$$

La funzione di trasferimento è:

$$\frac{\overline{C}_{A,out}(s)}{\overline{C}_{A,in}(s)}=\frac{\frac{\dot{V}_{in}}{V}}{s+k+\frac{\dot{V}_{in}}{V}\left(2-e^{-t_d s}\right)} \qquad 38.$$

$$\frac{\overline{C}_{A,out}(s)}{\overline{C}_{A,in}(s)}=\frac{\frac{\dot{V}_{in}}{kV}}{\frac{s}{k}+1+\frac{\dot{V}_{in}}{kV}\left(2-e^{-t_d s}\right)} \qquad 39.$$

posto $\tau' = \frac{1}{k}$, si ottiene:

$$\frac{\overline{C}_{A,out}(s)}{\overline{C}_{A,in}(s)}=\frac{\tau'\frac{\dot{V}_{in}}{V}}{\tau' s+1+\tau'\frac{\dot{V}_{in}}{V}\left(2-e^{-t_d s}\right)} \qquad 40.$$