



Corso Luigi Einaudi, 55 - Torino

Appunti universitari

Tesi di laurea

Cartoleria e cancelleria

Stampa file e fotocopie

Print on demand

Rilegature

NUMERO: 615

DATA: 0409/2013

A P P U N T I

STUDENTE: Gemello

MATERIA: Reattori Chimici

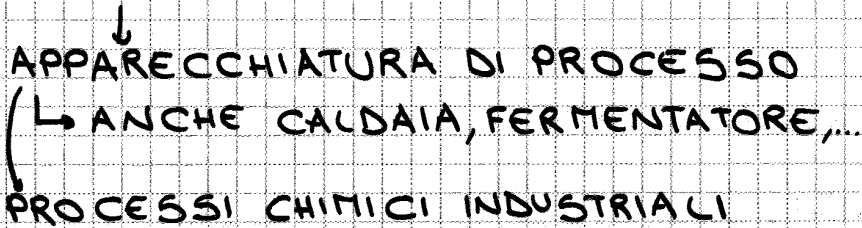
Prof. Mazzarino

Il presente lavoro nasce dall'impegno dell'autore ed è distribuito in accordo con il Centro Appunti.

Tutti i diritti sono riservati. È vietata qualsiasi riproduzione, copia totale o parziale, dei contenuti inseriti nel presente volume, ivi inclusa la memorizzazione, rielaborazione, diffusione o distribuzione dei contenuti stessi mediante qualunque supporto magnetico o cartaceo, piattaforma tecnologica o rete telematica, senza previa autorizzazione scritta dell'autore.

**ATTENZIONE: QUESTI APPUNTI SONO FATTI DA STUDENTIE NON SONO STATI VISIONATI DAL DOCENTE.
IL NOME DEL PROFESSORE, SERVE SOLO PER IDENTIFICARE IL CORSO.**

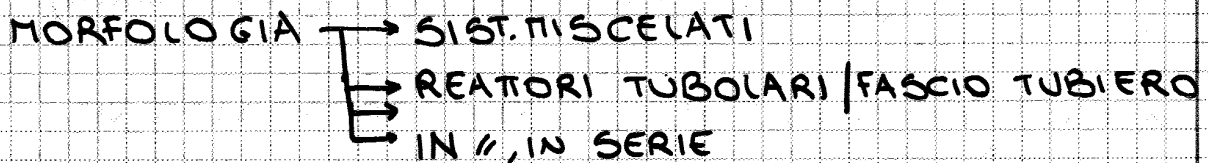
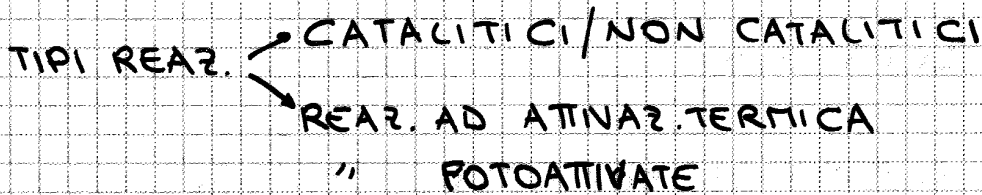
REATTORI CHIMICI



- R. DISCONTINUI → CARICO REAG, REAZ, SCARICO PROD.
- R. CONTINUI → FLUSSO CONTINUO REAG.
- R. IBRIDI → ES: MARGARINA → CARICO OLIO PRIMA DELLA REAZ, POI FLUSSO H₂

* R. OMOGENEI → 1 FASE (GAS O LIQUIDA)

* R. ETEROGENEI → POLIFASICI



GRANDEZZE FONDAMENTALI

* COMPOSIZIONE

FRAZ. IN MASSA $w_i = m_i / m_{TOT}$

CONC. MOLARE $c_i = n_i / V$

FRAZ. MOLARE $x_i = n_i / n_{TOT}$

PRESS. PARZIALE $p_i = y_i P$

DIRENDE SIA DA m , CHE DA DENSITA'

USATA POICHE' SE STUD. REAZ. EQUAZ. CINETICHE + FACILI CON C_i

$$\sum w_i = 1$$

SOLO SE CONSIDERO TUTTE LE SPECIE

(ANCHE SOLVENTI INERTI)

↳ y_i x GAS

BASE DI RIFERIMENTO $\begin{cases} \nearrow \text{VOLUME (REAZ. OMOGENEE)} \\ \rightarrow \text{M/VOL CATALIZZATORE} \\ \searrow \text{SUPERF. (REAZ. SOLIDO-FLUIDO)} \end{cases}$

A PARITÀ DI VOLUME/TEMPERATURA SE SUPERF. + ESTESA REAZ. AVVIENE + VELOCEMENTE (VELOCITÀ =, MA SUPERFICIE >)
(REAZIONE AVVIENE SULLA SUPERFICIE, AD ESEMPIO IN COMBUSTIONE DI LEGNO/CARBONE)

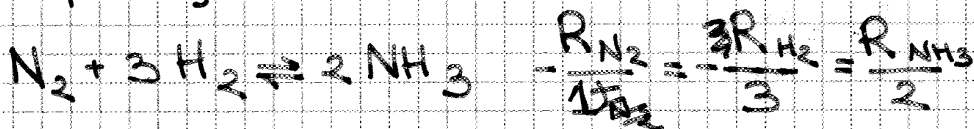
VELOCITÀ $\begin{cases} \nearrow \text{POSITIVA} \rightarrow \text{GENERAZ. PRODOTTI} \\ \searrow \text{NEGATIVA} \rightarrow \text{CONVERS. REAGENTI} \end{cases}$

$r_i = R_i, M_i$ \rightarrow DIPENDE DA TEMPERATURA/COMPOSIZ.

$\sum_i r_i = 0 \rightarrow$ GENERAZ. M_{TOT} NULLA

$\sum_i R_i$ PUO' ESSERE \neq DA σ (σ SE $\sum V_{REAG} = \sum V_{PROD}$)

$$\frac{|R_i|}{V_i} = \frac{|R_j|}{V_j}$$

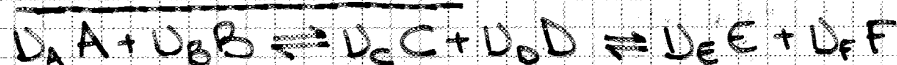


$$R_B = \frac{V_B}{V_A} R_A$$

$$R_B(T) = \frac{V_B}{V_A} R_A(T)$$

ANCHE REAZ. + COMPLESSE:

*REAZ. CONSECUTIVE



$$\frac{R_A}{V_A} = \frac{R_B}{V_B}$$

$$\frac{R_C}{V_C} = \frac{R_D}{V_D} = \left(+\frac{R_A}{V_A} + \frac{R_E}{V_E} \right)$$

$$\frac{R_E}{V_E} = \frac{R_F}{V_F}$$

IN UN SIST. CHIUSO :

$$m_j = \frac{W_j m}{M_j} \quad |m_{i0} - m_i| = |m_{j0} - m_j|$$

$$\left| \frac{W_{i0} m_0 - W_i m}{M_i} \right| = \left| \frac{W_{j0} m_0 - W_j m}{M_j} \right|$$

$m = m_0$
↑
COST.

$$\frac{\xi_j}{U_j M_j} = \frac{\xi_i}{U_i M_i} \rightarrow \xi_j = \xi_i \frac{U_j M_j}{U_i M_i}$$

$$\xi_i = \xi_j \frac{W_{j0}}{W_{i0}} \rightarrow \frac{\xi_i W_{i0}}{U_i M_i} = \frac{\xi_j W_{j0}}{U_j M_j}$$

ξ LEGATE TRA DI LORO DA STECHIOMETRIA

SE CONSIDERIAMO ~~VELOCITÀ RE~~ CONCENTRAZ. MOLARI:

* SE ρ COST: → ρ = A

$$\xi_j = \frac{|C_{j0} - C_j|}{C_{j0}} \leftarrow \xi_j = \frac{|W_{j0} - W_j|}{W_{j0}} = \frac{\left| \frac{C_{j0}}{\rho_0} - \frac{C_j}{\rho} \right|}{\frac{C_{j0}}{\rho_0}}$$

* SE ρ NON È COST:

$$\xi_j = \frac{\left| \frac{C_{j0}}{\rho_0} - \frac{C_j}{\rho} \right|}{\frac{C_{j0}}{\rho_0}}$$

SELETTIVITA' E RESA → X REAZ. COMPRESSE (IN %)

SELETTIVITA' NEL PRODOTTO k (INTEGRALE)

$$\sigma_k = \frac{MOE_k \text{ PRODOTTE}}{MOE_j \text{ REAGITE}} \cdot \frac{U_j}{U_k} = \frac{|\Delta n_k| U_j}{|\Delta n_j| U_k} = \frac{\sum_k M_j U_j}{\sum_j M_k U_k}$$

$\sigma_k \leq 1$ → NO SOTTOPRODOTTI 2°

$U_k \geq 0$ → NO k (SOLO SOTTOPRODOTTI)

$$\sigma_p + \sigma_x = 1 \leftarrow 1 = \frac{|\Delta n_p|}{|\Delta n_A|} + \frac{|\Delta n_x|}{|\Delta n_A|}$$

$$\sigma_p + \sigma_y = 1$$

EQUAZIONI CINETICHE

VELOCITÀ DIPENDE DA STATO CHIMICO-FISICO DEL SISTEMA

(COMPOSIZ, p, T , CATALIZZATORE, ...)

$$R_A = f(C_A, C_B, \dots, T, p, \dots)$$



LEGGE DI AZIONE DI MASSA:

$$R_A = -k_1 C_A^a C_B^b + k_2 C_P^p C_Q^q$$

ORDINI DI REAZ.

k_1, k_2 COST. CINETICHE

$$R_A = -k_1 (C_A^a C_B^b - \frac{1}{K} C_P^p C_Q^q) \quad K = \frac{k_1}{k_2}$$

SE $k_1 \gg k_2$ ($K \gg 1$) \rightarrow PRATICAM. IRREVERSIBILE

$$R_A = -k_1 C_A^a C_B^b$$

SE UN SOLO REAG. $\nu_A A \rightarrow \nu_P P + \nu_Q Q$
 REAZ. PRATICAM. IRREV.

$$a=1$$

$$R_A = -k_1 C_A \quad \text{RELAZIONE LINEARE}$$

$$R_A = -k_1 C_A^{a_1} + k_2 C_P^p - k_3 C_A^{a_2} + k_4 C_X^x$$

$$= -\frac{D_{A1}}{D_p} R_p - \frac{D_{A2}}{D_x} R_x$$

$$R_p = -\frac{D_p}{D_{A1}} R_A - \frac{D_p}{D_{A1}} \cdot \frac{D_{A2}}{D_x} R_x = \frac{D_p}{D_{A1}} (k_1 C_A^{a_1} - k_2 C_P^p)$$

$$R_x = -\frac{D_x}{D_{A2}} R_A - \frac{D_x}{D_{A2}} \cdot \frac{D_{A1}}{D_p} R_p = \frac{D_x}{D_{A2}} (k_3 C_A^{a_2} - k_4 C_X^x)$$

SE IRREV

$$\begin{cases} a=p=x=1 & D_{A1}A \rightarrow P \cdot D_p \\ D_A = D_p = D_x = 1 & D_{A2}A \rightarrow X \cdot D_x \end{cases}$$

$$R_A = -\frac{D_{A1}}{D_p} R_p - \frac{D_{A2}}{D_x} R_x = -(k_1 + k_3) C_A$$

$$R_p = \frac{D_p}{D_{A1}} k_1 C_A \quad R_x = \frac{D_x}{D_{A2}} k_3 C_A$$

EFFETTO TEMPERATURA

SU COST. CINETICHE (OMOGENEE)

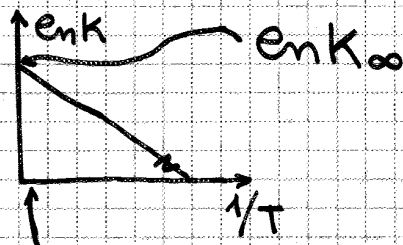
EQ. ARRHENIUS

$$\ln k = \ln k_\infty - \frac{E}{RT} \quad \text{EN. ATTIVAZ. [KJ \cdot kmol^{-1}]}$$

LEGGE EMPIRICA

FATTORE PREESPOENZIALE

$$k \text{ A } T = \infty$$



$$k = k_\infty e^{-\frac{E}{RT}} \quad \text{[ADIM]}$$

$$R = 8,31 \frac{KJ}{kmol \cdot K}$$

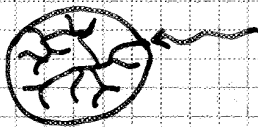
ALTE TEMPERATURE

REAZ. CATALITICHE ETEROGENEE

CATALIZZATORE ABBASSA EN. ATTIVAZIONE, RAGGIUN-
GENDO UNO STATO ATTIVATO CON E + BASSA
(POI SI RITROVA NEI PRODOTTI)

REAGENTI/PRODOTTI FLUIDI

CATALIZZATORI SOLIDI POROSI → AUMENTANO SUP.



- 1) DIFFUSIONE REAG. DA BULK A SUP. CATALIZZATORE
- 2) DIFFUSIONE REAG. DA SUP. TRAMITE I PORI
- 3) CHEMI ADSORBIMENTO → CATTURA REAGENTI
- 4) REAZIONE DA REAG. CHEMI ADSORBITO A PRODOTTO CHEMI ADSORBITO
- 5) CHEMIDESORBIMENTO PRODOTTI
- 6) PRODOTTI DIFFONDONO DA PORI A SUP. EXT
- 7) CONTRODIFF. PRODOTTI DA SUP. A BULK

1, 2, 6, 7 → MASS TRANSFER

3, 4, 5 → REAZ. CATALITICA ETEROGENEA

MODELLO LANGMUIR

• INTERAZIONE TRA MOLECOLE CHEMI ADSORB. TRASCUR.



• RREVERSIBILE $A + L \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} AL$ SITO ATTIVO CATALIZZATORE

• VALIDITA' LEGGE AZIONE MASSA $R_A = -k_1 C_A C_L + k_2 C_{AL}$

• ENERGIA = X TUTTI I SITI ATTIVI

• STRATO ATTIVO MONOMOLECOLARE

(NO 2° STRATO)



↳ X LEG. CHIMICI

≠ DA ADSORB. FISICO

↳ CARBONI ATTIVI

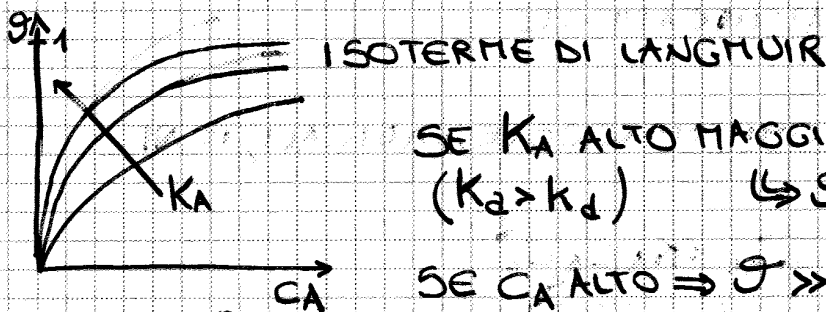
GRADO DI SATURAZIONE $\rightarrow \theta = \frac{C_{AL}}{C_T}$ \rightarrow SATURAZIONE RELATIVA

$$\theta = \frac{C_{AL}}{C_T} = \frac{C_T K_A C_A}{1 + K_A C_A} \cdot \frac{1}{C_T} = \frac{K_A C_A}{1 + K_A C_A}$$

QUANDO È SFRUTTATO IL CATALIZZATORE

$$0 \leq \theta \leq 1$$

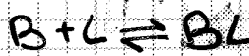
PICCOLA PARTE SFRUTTATA \rightarrow POCA AFFINITÀ



SE K_A ALTO MAGGIORE AFFINITÀ ($K_d > k_d$) $\rightarrow \theta \gg$

SE C_A ALTO $\Rightarrow \theta \gg$

SE MECCANISMO COMPETITIVO



$$C_T = C_L + C_{AL} + C_{BL}$$

COSTANTE DI AD. SORBITI DI A

ALL'EQUILIBRIO

$$C_{AL} = K_A C_A C_L$$

$$C_{BL} = K_B C_B C_L$$

COST. ADSORB. DI B

$$C_T = C_L + K_A C_A C_L + K_B C_B C_L$$

$$C_L = \frac{C_T}{1 - K_A C_A - K_B C_B}$$

$$C_{AL} = \frac{K_A C_A C_T}{1 - K_A C_A - K_B C_B}$$

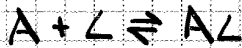
$$C_{BL} = \frac{K_B C_B C_T}{1 - K_A C_A - K_B C_B}$$

$$\theta = \frac{C_{AL} + C_{BL}}{C_T} = \frac{K_A C_A + K_B C_B}{1 - K_A C_A - K_B C_B}$$

$$\theta_A = \frac{C_{AL}}{C_T} = \frac{K_A C_A}{1 - K_A C_A - K_B C_B}$$

SE $K_A \gg K_B$ E $C_A \sim C_B \Rightarrow C_A K_A \gg K_B C_B$

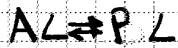
B NON INFUISCE SU NUM. SITI OCCUPATI



$$R_d = -k'_d \left(C_A C_L - \frac{C_{AL}}{K_A} \right)$$

VELOC. NETTA (under R_d)
 COST. ADSORBIMENTO ALL'EQUIL. DELLA SPECIE A (under $\frac{C_{AL}}{K_A}$)
 COST. CINETICA DELLA SEMI-REAZIONE DI ADSORBIMENTO (K'_d CONVENZIONE) (under k'_d)

3) REAZ. SUPERFICIALE



$$R_{sr} = -k'_{sr} \left(C_{AL} - \frac{C_{PL}}{K_{SR}} \right)$$

COST. CINETICA DELLA SEMI-REAZIONE CON CUI AL DIVENTA PL (under k'_{sr})
 COSTANTE DI EQUILIBRIO DELLA SEMIREAZIONE (under $\frac{C_{PL}}{K_{SR}}$)

3) DESORBIMENTO DI P



$$R_d = -k'_d \left(\frac{C_{PL}}{K_P} - C_P C_L \right)$$

COST. CINETICA DESORBIM. (under k'_d)
 COST. ADSORBIM. DI P (under $\frac{C_{PL}}{K_P}$)

SE UNO DEGLI STADI E' MOLTO + LENTO DEGLI ALTRI 2 (CINETICAMENTE CONTROLLANTE), GLI ALTRI 2 SONO VICINI ALL'EQUILIBRIO

ES: SUPPONIAMO ADSORBIM. CONTROLLANTE (DIA)

EQ. REAZ. SUP. $\rightarrow C_{AL} = \frac{C_{PL}}{K_{SR}}$ (under $\frac{C_{PL}}{K_{SR}}$)
 EQ. DESORB. P $\rightarrow C_{PL} = K_P C_P C_L$ (under $C_{PL} = K_P C_P C_L$)

AL \rightarrow PL Istantanea \rightarrow QUANTITA' DI AL, PL IN EQUIL.

$$R_d = -k'_d \left(C_A C_L - \frac{C_{AL}}{K_A} \right) = -k'_d \left(C_A C_L - \frac{C_{PL}}{K_A K_{SR}} \right) =$$

$$= -k'_d \left(C_A C_L - C_L \frac{C_P}{K} \right) = -k'_d \left(C_A C_L - \frac{K_P C_P C_L}{K_{SR} K_A} \right)$$

$$R_A = - \frac{FC \cdot FM}{GA}$$

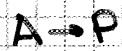
Fattore cinetico
 Forza motrice → DIFF. CONC.
 Gruppo adsorbim.
 DISTANZA DA CONDIZ. EQUIL.



$$-R_A = k_1 C_A - k_2 C_P$$

$$= k_1 \left(C_A - \frac{C_P}{K} \right)$$

$$\frac{C_P}{K} = C_A \quad \text{IN EQ. CON } C_P$$



$$-R_A = k (C_A - 0)$$

$$\frac{C_P}{K} \text{ TRASCURABILE } \approx 0$$

GAS RIDUCE VELOCITÀ DI AZIONE, DOVUTA DA SATURAZ. DEI SITI ATTIVI

↓
 C_A TENDE A UN NUMERO FINITO: $C_A \rightarrow C_T$

FC, FM, GA DIPENDONO DA SCHEMA PROCESSO, STADIO CINETICAM. CONTROLLANTE

LHHW APPLICABILE ANCHE X FASE VAPORE CON P:

MODELLO ELEY-RIDEAL

ES: ETILENE + OSSIGENO CON CATALIZZATORE Ag

O₂ OSSIDA Ag E POI ETILENE SI LEGA CON ME
 OSSIDATO CON O₂ (NON ADSORBE)

↑
 REDOX

↓
 IMPAATA CON O ADSORBITO



• ELEVATA FLESSIBILITA' OPERATIVA

FACILE VARIARE CONDIZ. OPERATIVE → ES: TEMPO VARIABILE

IN UN REATTORE CONTINUO NON SI PUO' RALLENTARE, SENNO' FINISCE IN REGIME LAMINARE (NO $V = D$ TRASF.); PEGGIO ANCORA SE LETTO FLUIDIZZATO, CHE BLOCCA MASS TRANSFER

MERCATO DELL'USATO (POICHE' MOLTO FLESSIBILE)

• FASI CICLO OPERATIVO MORTE → IN CARICO, SCARICO, PULITURA (BONIFICA, LAVAGGIO), PRESURIZZAZIONE (TEMPI MORTI)

X GRANDI QUANTITATIVI REATTORI CONTINUI

X PRODOTTI PREGIATI REATTORI DISCONTINUI

IN FASE VAPORE/GAS REATTORI CONTINUI (ρ BASSA)

X VEDERE DENTRO REATTORE SPECULE DA 10/15 mm ϕ

PASSO D'UOMO DA 60 mm ϕ X ENTRARE

CONTROLLO DEL PESO TRAMITE UNA CELLA DI CARICO, CHE TRASMETTE PESO A UNA BILANCIA

MOTORE X MISCELAZIONE

MOTORE A SINCRONO A CORRENTE ALTERNATA, MA GIRI TROPPO VELOCI, QUINDI SI USA UN VARIATORE DI VELOCITA' (RIDUTTORE)

SE RIDUCO VELOCITA' CON INVERTER, RISCHIO CHE SI FONDA XKE' RALLENTA SIST. RAFFREDDAM (MAX 50% VELOC.)

CONOSCIAMO STATO INIZIALE ($t=0$) $\rightarrow C_j = C_{j0}$

$$t = \int_0^{\xi_i} \frac{\rho}{M_j |R_j|} d\xi_i = W_{j0} \int_0^{\xi_i} \frac{\rho}{M_j |R_j|} d\xi_i$$

FUNZ. DELLA COMPOSIZ. / DELLA TEMPERATURA

SE $\rho = \text{COST}$ $\rightarrow t = C_{j0} \int_0^{\xi_i} \frac{1}{|R_j|} d\xi_i$

SE R_j ALTA SERVE UN TEMPO MINORE

ESEMPIO:

$A \rightarrow P$ $R_A = k C_A$ IRREV. DI ORDINE 1

$$t = \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{1}{C_{A0} - k C_A} dC_A$$

$\hookrightarrow k = k(T)$, MA CONSIDERIAMO T COST

$$t = -\frac{1}{k} \ln \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right)$$

$C_A = C_{A0} e^{-kt}$ \rightarrow VERIFICHE $\begin{cases} \text{SE } t=0 \rightarrow C_A = C_{A0} \\ \text{SE } t=\infty \rightarrow C_A = 0 \end{cases}$

POICHE' TRASF. COMPLETA, CHE TENDE A CONV. COMPLETA

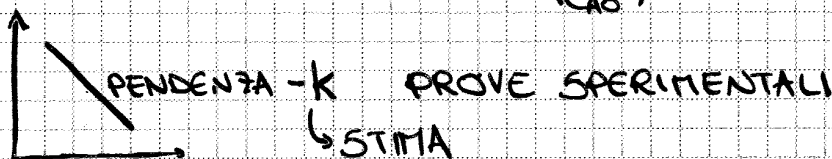
$kC = -\ln(1 - \xi_A) \rightarrow \xi_A = 1 - e^{-kC}$ $\begin{cases} t=0 \rightarrow \xi_A = 0 \\ t=\infty \rightarrow \xi_A = 1 \end{cases}$

FUNZ. CRESCENTE NEL TEMPO

TEMPO DI REAZIONE ADIMENSIONATO \rightarrow VALIDITA' GENERALE

\hookrightarrow VALE \forall REAZ. LINEARE (IRREV.)

SE CINETICA LINEARE $\ln \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right) = -kC$



PRODUTTIVITA' E TEMPO DI REAZ. OTTIMALE

SE ORDINE REAZ > 0 ALL'INIZIO REAZ. VELOCE

CON IL PASSARE DEL TEMPO CONC. REAGENTI DIMINUISCE E CINETICA DI REAZ. DIMINUISCE

↓
CONVERSIONE AUMENTA, MA DATO IL MAGGIOR TEMPO DIMINUISCE PRODUTTIVITA'

DIPENDE CHE % DI CONV. MINIMA MI VIENE IMPOSTATA

τ TROPPO LUNGO → BASSE PRODUTTIVITA'

τ TROPPO BREVE → NO % DI CONV. MINIMO

SI SENTO TEMPI MORTI

↳ ABBASSANO

PRODUTTIVITA'

↓
BISOGNA TROVARE MAX PRODUTTIVITA'

↓
BISOGNA CONSIDERARE TUTTO IL CICLO (ANCHE TEMPI MORTI)

$$\Pi_j = \frac{\text{PROD. MOLARE DI UN CICLO}}{\text{DURATA DI UN CICLO}} = \frac{C_j V}{\tau + \tau_m}$$

↑
PRODUTTIVITA' DI j INTEGRALE

TEMPO REAZ.

TEMPI MORTI

BONIFICA / CARICA REAGENTI / ...

VARIABILE INDIPENDENTE = τ

↓
DEVO TROVARE MAX PRODUTTIVITA'

$$\rightarrow \frac{d\Pi_j}{d\tau} = 0$$

$$\text{OPPURE } \frac{d\Pi_j}{dC_j} = 0$$

$$\Delta T = \frac{(-\Delta H_r)_j}{\rho C_p} \xi_j = \Delta T_{AD} \xi_j \quad \text{INCREMENTO ADIABATICO T}$$

VARIAZ. T NON LINEARE NEL TEMPO, POICHÉ ξ_j NON AUMENTA IN MODO COSTANTE

ΔT_{AD} = VARIAZ. T CHE SI GENERA IN CONDIZ. ADIABATICA CON CONVERS. COMPLETA ($\xi_{ji} = 1$)

INDICE DELLA POTENZIALITÀ TERMICA

IMPORTANTE X CONTROLLO TERMICO DEL REATTORE E SICUREZZA

↳ SE IL REATTORE SI ROMPE

SE SI ROMPE MISCELATORE SI CREANO GRADIENTI DI T

$$T_{MAX} = T_0 + \Delta T_{AD}$$

PER REATTORE ADIABATICO:

$$\frac{dT}{d\xi} = \frac{(-\Delta \tilde{H}_r)_j}{\rho C_p} \frac{d\xi_j}{d\xi} = \frac{(-\Delta \tilde{H}_r)_j}{\rho C_p} |R_j|$$

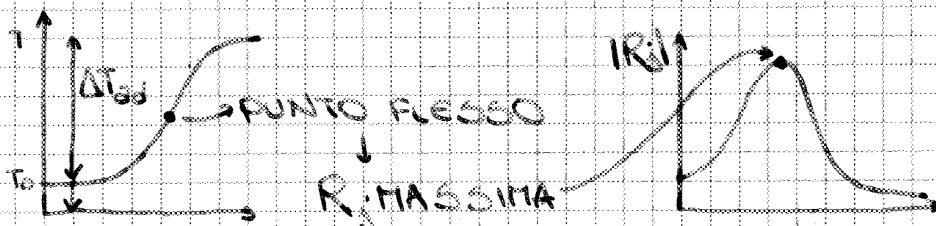
$$\Delta T = \Delta T_{AD} \cdot \xi_j$$

$$T = T_0 + \Delta T_{AD} \cdot \xi_j \quad \xi_j = \frac{T - T_0}{\Delta T_{AD}}$$

INTEGRAZIONE NUMERICA X OTTENERE L'ANDAM. NEL TEMPO DI T

FINO A ξ_j PREFISSATA

AUMENTO T → AUMENTO K → AUMENTA R_j → SUBITO PREVALE AUMENTO PRODOTTI, - REAG → DIMINUISCE R_j



X SIST. ADIABATICO

PROGRESSIVAMENTE AUMENTO T RALLENTA

$$\rho = \text{cost} \rightarrow dV = 0$$

$$V \frac{dC_i}{dz} = R_i S$$

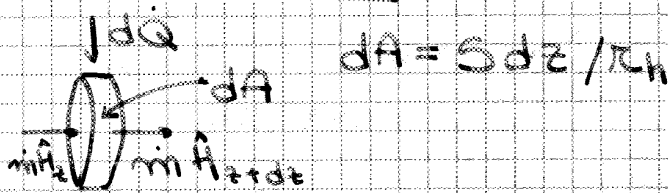
$$\frac{V_c}{V} = \tau_c \text{ TEMPO DI PERMANENZA NEL REATTORE}$$

$$\tau_c = C_{i0} \int_0^{\tau_{ic}} \frac{d\tau_i}{|R_i|} \quad \text{RELAZ. ANALOGA A QUELLA DEL REATTORE DISCONTINUO}$$

REATTORE BATCH = REATTORE PFR
 TEMPO DI REAZIONE = TEMPO DI PERMANENZA

$$\tau_c = \frac{L}{\langle v \rangle} \rightarrow \langle v \rangle \text{ VELOCITA' COST.}$$

BILANCI ENERGIA → ENTALPICI



SE SIST. ADIABATICO C'E' ΔT

↓
 C'E' POCO DIFFUSIONE SCAMBIO CALORE, MA TRASCURABILE SE VELOCITA' FLUIDO ABBASTANZA ALTA
 (1-2 m·s⁻¹ x LIQUIDI) (10 m·s⁻¹ x GAS)

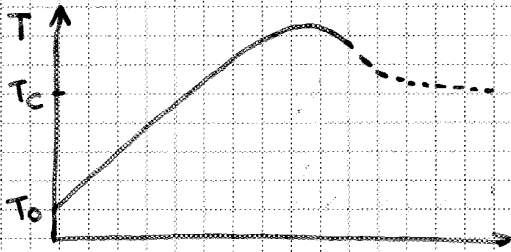
↓
 TRASCURIAMO CONTROLLO DIFFUSIONE ANCHE X MATERIA
 ↓
 IN PARAMETRO DI DISPERSIONE

$$mH_2 + dQ = mH_{2+d2}$$

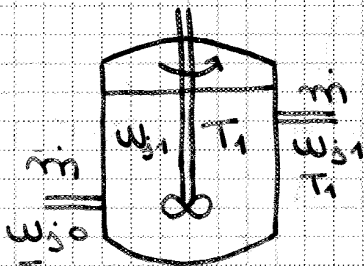
$$dQ = U dA (T_c - T) = \frac{S dz U (T_c - T)}{r_H}$$

↓
 SUP. SCAMBIO → PARETE LATERALE

SITUAZIONE INTERMEDIA → PROFILO TERMICO HA UN MAX



REATTORE CONTINUO PERFETTAMENTE MISCELATO (CSTR) IN STATO STAZIONARIO



IN USCITA = A QUELLO NEL REATTORE SIA w_j CHE T

INCONVENIENTE: IN REATTORI BASSA CONC. REAGENTI (VELOCITA' SUBITO BASSA)

A MENO CHE NON SIA UNA REAZIONE DI ORDINE ZERO

$$\dot{m} = \text{COST} \quad \dot{m}_e = \dot{m}_u = \dot{m} = \text{COST.}$$

$$\dot{m} w_{j1} = \dot{m} w_{j0} + V_r M_j R_{j1} \quad \text{NO ACCUMULO}$$

SE ρ E' UGUALE A CORRENTE ENTRANTE E USCENTE

$$V C_{j1} = V C_{j0} + V_r R_{j1}$$

$$\tau = \frac{V_r}{\dot{V}} \quad \text{TEMPO MEDIO DI PERMANENZA}$$

IN FLUSSO A PISTONE $\tau = V$ MOLECOLA DI FLUIDO, IN CSTR QUESTIONE PROBABILISTICA, UNA VOLTA ENTRATE TUTTE LE MOLECOLE HANNO LA STESSA PROBABILITA' DI USCIRE

R_j COST

$$\tau = \frac{C_{j1} C_{j0}}{R_{j1}} = \frac{(C_{j0} - C_{j1})}{R_{j1}}$$

$$\underbrace{\frac{UA}{V} (T_1 - T_c)}_{\text{CALORE RIMOSSO}} = \underbrace{\dot{V}_0 \hat{C}_p (T_0 - T_1)}_{\text{PORTA TERMINA}} + \underbrace{(-\Delta \tilde{H}_R)_A C_{A0} \xi_{A1}}_{\text{NETA CONVETTIVA}} \leftarrow \frac{\dot{V}}{m^3}$$

$$UA (T_1 - T_c) = \dot{V}_0 \hat{C}_p (T_0 - T_1) + (-\Delta \tilde{H}_R)_A C_{A0} \xi_{A1} \dot{V} \leftarrow \frac{\dot{V}}{V} = W$$

SOSTITUISCO ξ_{A1} SCRITTA COME $f(\tau, k)$

IN CASO DI ORDINE 1:

$$\xi = \frac{k\tau}{1+k\tau} = \frac{k_{\infty} e^{-E/RT_1} \tau}{K_{\infty} e^{-E/RT_1} \tau + 1}$$

SE CINETICA LINEARE:

$$\underbrace{\Delta T_{A0} \frac{K_{\infty} e^{-E/RT_1} \tau}{K_{\infty} e^{-E/RT_1} \tau + 1}}_{\text{HP} \rightarrow \text{DIPENDE DA CINETICA}} = \underbrace{\frac{UA}{V \hat{C}_p \rho} (T_1 - T_c) + (T_1 - T_0)}_{\text{HR}}$$

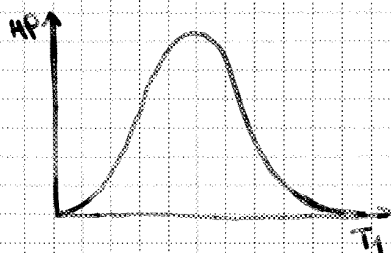
SE REAZ. IRR. DI ORDINE > 0



MONOTONA CRESCENTE

REAZ. CATALIZZATA
SI PUO' VEDERE
COME OGNI CATA-
LIZZATORE COME
CSTR

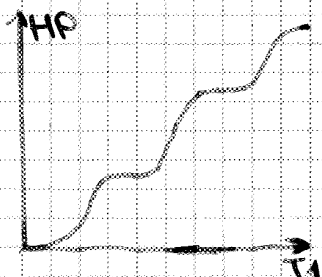
SE REAZ. REVERSIBILI



HA UN MAX

↓
STATI STAZIONARI
MULTIPLI

SE + REAZIONI IN SERIE: STATI STAZIONARI MULTIPLI



ISTERESI TERMICA

↓
PARTIAMO DA (C) E ABBASSIAMO T_0

↓
HP NON DIPENDE DA T_0 → FISSARE \dot{Q} → VARIA ϵ

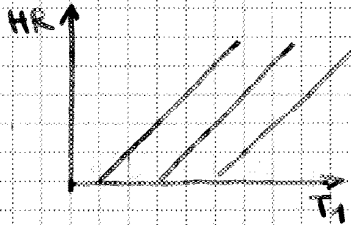
HR DIPENDE LINEARMENTE DA T_0

$$HR(T_1) = \left(\frac{UA}{\dot{V}C_{p,D}} + 1 \right) T_1 + \left(\frac{UA}{\dot{V}C_{p,D}} T_0 - T_0 \right) = aT_1 + b$$

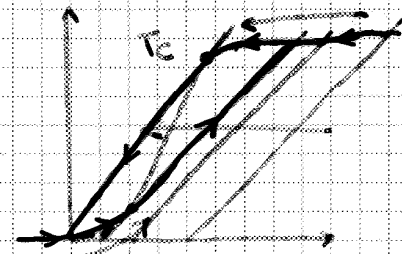
ALL'AUMENTARE DI T_0 b DIMINUISCE

T_0 COMPRESO SOLO IN TERMINE NOTO

PENDENZA RIMANE COST.



SE SIAMO IN (C) E ABBASSO T_0



↓
FRITTA MINIMA CADUTA ϵ_{TA} ,
UNA VOLTA SUPERATA T_c
CRITICA ϵ_A CROLLA VELOCE-
MENTE (PARTE ALTA)

SE FACCIAMO RISAURE T_0 SUCCEDDE LA COBA
OPPOSTA, MA SIAMO IN PARTE BASSA DELLA
CURVA

↓ CICLO ISTERESI

↓
SE DEVO RAFFREDDARE X MOTIVI DI SICUREZZA
FASE SPEGNIMENTO ≠ DA FASE DI START-UP
(INERZIA TERMICA)

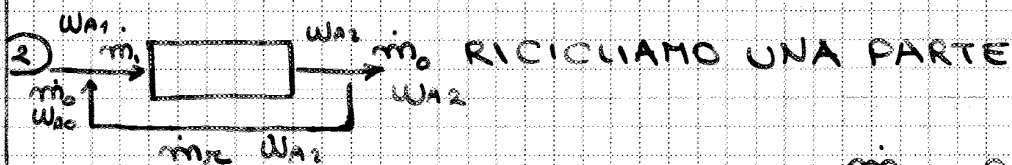
$$\frac{C_{AN}}{C_{AO}} = \frac{C_{A1}}{C_{AO}} \cdot \frac{C_{A2}}{C_{A1}} \dots = (1 + k\tau_n)^{-N} = \left(1 + k \frac{\tau_{TOT}}{N}\right)^{-N}$$

$$\frac{C_{AN}}{C_{AO}} = 1 - (\xi_A)_{TOT}$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{C_{AN}}{C_{AO}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{k\tau}{N}\right)^{-N} = e^{-k\tau} \quad \tau = \tau_{TOT}$$

PRESTAZIONI TENDONO A QUELLE DI UN PFR

SE PFR NON IDEALE POSSO PRENDERE COSTR A CASCATA CON UN CERTO NUMERO N DI REATTORI



$$\dot{m}_1 = \dot{m}_0 + \dot{m}_R = \dot{m}_0 (1 + R) \quad R = \frac{\dot{m}_R}{\dot{m}_0} \text{ RAPPORTO RICICLO}$$

$$W_{A1} \dot{m}_1 = W_{A0} \dot{m}_0 + W_{A2} \dot{m}_R$$

$$W_{A1} = \frac{W_{A0} \dot{m}_0 + W_{A2} \dot{m}_R}{\dot{m}_1} = \frac{W_{A0} + R W_{A2}}{1 + R}$$

C'E' GIA UN GRADO DI CONV. INIZIALE (CONVENZIONALE) DOVUTO A RICICLO

$$\xi_{A1} = |W_{A0} - W_{A1}| = \left| W_{A0} - \frac{W_{A0} + R W_{A2}}{1 + R} \right| = \frac{1}{1 + R} |W_{A0} + R W_{A0} - W_{A0} - R W_{A2}| = \frac{R}{1 + R} |W_{A0} - W_{A2}|$$

$$\xi_{A1} = \frac{R}{R + 1} \xi_{A2} \quad \frac{V_2}{\dot{m}_1} = \tau / \rho$$

$$V_2 = \int_{\xi_{A1}}^{\xi_{A2}} \dot{m}_1 \frac{d\xi}{\rho A |R_A|} = (1 + R) \dot{m}_0 \int_{\frac{R}{R+1} \xi_{A2}}^{\xi_{A2}} \frac{d\xi}{\rho A |R_A|}$$

SE ALZO R, \tau NEL REATTORE DIMINUISCE

$$K = \frac{k_x v_p}{k_p v_x}$$

SELETTIVITA' NON DIPENDE DALLA CONV. RELATIVA IN QUESTO CASO

IN PFR ISOTERMO:

$$\sigma'_p = \frac{|R_p|}{|R_x| v_p} = \frac{1}{1+K} = \sigma_p \leftarrow \eta_{PL} = \int_0^{\xi_{AL}} \sigma'_p d\xi_A = \frac{1}{1+K} \xi_A$$

LA T INFLUENZA σ_p

$$\sigma_p = \frac{1}{1 + \frac{v_p k_x e^{(E_p - E_x)/RT}}{v_x k_p}}$$

SE $E_p > E_x \rightarrow \sigma_p$ AUMENTA SE $T >$

SE $n \neq m$

$$\sigma'_p = \frac{k_p C_A^m}{k_p C_A^m + k_x C_A^n} \frac{v_p}{v_x} = \frac{1}{1 + K (1 - \xi_A)^{n-m}}$$

SE $m > n \rightarrow \sigma_p <$ SE $\xi_A >$ (R_p RALLENTA + VELOC.)

* SE $m = n + 1$ ($m > n$), $v_p = v_x$, $\rho = \text{COST}$, $C_{p0} = C_{x0} = 0$

$$\xi_p = \frac{C_p - C_{p0}}{C_{A0}} = \frac{C_p}{C_{A0}} \quad \xi_x = \frac{C_x - C_{x0}}{C_{A0}} = \frac{C_x}{C_{A0}} \quad \text{NON E' UNA VERA CONV. RELATIVA}$$

$$C_{A0} - C_A = C_{A0} \xi_p + C_{A0} \xi_x$$

$$\xi_A = \xi_p + \xi_x$$

CHIAMATO A VOLTE η DIFFERENT.

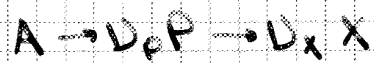
SELETTIVITA' RELATIVA: \rightarrow FA RIFERIM. A 2 PRODOTTI

$$\frac{d\xi_p}{d\xi_x} = \frac{|R_p|}{|R_x|} = \frac{k_p C_{A0}^{m-n}}{k_x} \frac{(1 - \xi_A)^{m-n}}{k_x} = \frac{1}{K} (1 - \xi_p - \xi_x)$$

$$\xi_p = \xi_A + K \xi_x \left(1 - \frac{\xi_A}{K+1} \right)$$

A PARITA' DI ξ_A CONVIENE USARE PFR/BATCH RISPETTO A CSTR

REAZ. CONSECUTIVE IRREV.



SE IL PRODOTTO VOLUTO FOSSE L'ULTIMO SI SPINGE REAZ. FINO ALLA FINE

SE VOGLIO PRODOTTO INTERMEDIO P DEVO FERMARSI A UN CERTO PUNTO

↓
SELETTIVITA' DI P DIMINUISCE ALL'AUMENTARE DI C_A

$$R_A = -\frac{k_p}{D_p} C_A^m \quad R_X = +\frac{k_x D_x}{D_p} C_P^n$$

$$R_P = D_p R_A - \frac{D_p}{D_x} R_X = k_p C_A^m - k_x C_P^n$$

$$\sigma_P = \frac{|R_P|}{|R_A| D_p} = \frac{k_p C_A^m - k_x C_P^n}{k_p C_A^m}$$

NEL CASO DI $m=n=1$; $C_{P0} = C_{X0} = 0$; $D_p = D_x$

• X PFR $\frac{dC_P}{dZ} = k_p C_A - k_x C_P$

$$\frac{dC_A}{dZ} = -k_p C_A$$

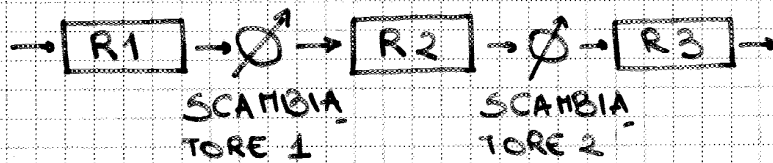
$$\frac{dC_P}{dC_A} = \frac{k_p C_A - k_x C_P}{-k_p C_A} = K \frac{C_P}{C_A} - 1$$

$$\text{SELETTIVITA}'_P = \frac{C_{P1} - C_{P0}}{C_{A0} - C_{A1}}$$

$$\text{RESA}'_P = \frac{C_{P1} - C_{P0}}{C_{A0} - C_{A1}} \cdot \frac{C_{A0} - C_{A1}}{C_{A0}} = \frac{C_{P1} - C_{P0}}{C_{A0}}$$

• X CSTR → NO DIFFERENZIALI, MA RELAZ. INTEGRALI

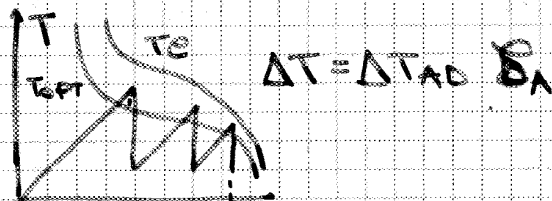
$$\sigma_{P1} = \frac{|R_{P1}|}{|R_{A1}|} = 1 - K \frac{C_{P1}}{C_{A1}}$$



NEGLI SCAMBIATORI NON CI SONO CATALIZZATORI (REAZIONE SI ARRESTA) (NO REAZ. IN SCAMBIATORI)

DI SOLITO $R_2 \gg R_1$ POICHE' T + BASSA E SERVE τ MAGGIORE X STESSA DIFFERENZA DI C_A

MAX 3/4 TRONCHI \rightarrow X COSTI



ALTERNATIVA: INIEZIONE FLUSSI FREDDI DI REAGENTE CHE SI MISCELANO CON GIÀ' IN PARTE REAGITI CALDI

↓ COSTI MINORI C_A DIMINUISCE
 ↓ USATO SE PRODOTTI DI REAZ. FACILMENTE SEPARABILI DA NON REAGITI

CONDIZ. OTTIMALE \rightarrow MINIMO VOLUME DELLO STADIO

$$V_c = C_{A0} \int_{\varphi_{A0}}^{\varphi_{A1}} \frac{d\varphi_A}{R_A}$$

ADIABATICO

X VEDERE DOVE SI DEVE FERMARE

↓ T OTTIMALE

$$T_{opt} = \left(\frac{\varphi_{A1}}{\varphi_{A0}} \left(\frac{\partial R_A}{\partial T} \right) \frac{d\varphi_A}{R_A^2} \right) = 0$$

$$T_0^{(n)} = T_0^{(n-1)} + \Delta T_{AD} \varphi_{A0}^{(n)}$$

$$R_A = -k_{100} e^{-E_1/RT} + k_{200} e^{-E_2/RT}$$

SCAMBIO TERMICO FINO A QUANDO R_A RAGGIUNTA E' LA STESSA CHE AVEVO QUANDO ERO A T_{MAX} QUANDO AVEVO SUPERATO T_{opt}

T_{opt}

SI DISCOSTANO DA CONDIZ. OTTIMALI

↓
ANCHE SENEA EVENTI CATASTROFICI SI ABBASSA
 η_p, η_r

CONDIZ. RUN-AWAY → NON POSSIAMO + CONTROLLARE

REAZIONI RUN-AWAY (REA?. FUGGITIVE)

↳ REAZ. ANOMALE INFERMABILI → ES. DETONAZIONI
INDESIDERATE → ES. DECOMPOSIZIONI

ALTO RISCHIO RUN-AWAY SE ESOTERMIA, E_a ALTA,
INSTABILITA' TERMICA, CON SOST. INFIAMMABILI

↓
POTREBBE ESSERE INSTABILE ANCHE UN INTERME
DIO DI REAZ. / SOTTOPRODOTTO

↓
DIPENDE MAGARI DA REATTORE USATO (AD ESEMPIO
Ni / Fe NELL'ACCIAIO FANNO DA CATALIZZATORE X
REA?. 2°, OPPURE IMPUREZZE DEI REAGENTI)

X SOST. ESPLOSIVE BISOGNA STARE FUORE DA
LIMITI INFIAMMABILITA'

↳ DOBBIAMO QUINDI STARE LONTANO DA RAPPORTO
STECCHIOMETRICO E PERDIAMO IN PRODUTTIVITA'

CONDIZ. RUN-AWAY DOVUTE A:

• BLOCCO REFRIGERAZ. : $Q_{\text{PRODOTTO}} > Q_{\text{RIMOSSO}}$

$$\propto (T - T_c) R \propto (e^{-1/T})^{1/T}$$

• SE SALE T AUMENTA DI + Q PRODOTTO

• BLOCCO MISCELATORE X REATTORI GRANDI

↳ COEFF. SCAMBIO TERMICO SCENDE, NON T
CONVEZ. FORZATA

LA T_0 INFLUENZA \rightarrow $TMR > SE T_0 >$
 \rightarrow $MTR > SE T_0 >$, MA IN MODO +
MODESTO, x_{KE} COMPENSATO DA
 $C_A(t)/C_{A0}$

SE $T_0 >$ DEVO AGIRE + VELOCEMENTE, MA NON + RISCHIO

SE AUMENTO INVECE C_{A0} CAMBIA POCO TMR , MA
AUMENTO $MTR \rightarrow$ AUMENTA CLASSE DI RISCHIO

\downarrow
 TMR CAMBIA POCO x_{KE} CURVA + RIPIDA, MA SI
SPOSTA ANCHE FLESSO

PROVVEDIMENTI: DILUIZIONE CON INERTE ALLO
STATO LIQUIDO

\hookrightarrow SE FACCIO T_{eb} INERTE PRIMA DI RISALIRE
LA T DEVE EVAPORARE TUTTO IL SOLVENTE

\downarrow
DOBBIAMO TOGLIERE VAPORI E POI FARLI RICON-
DENSARE E REINTEGRARLI DENTRO

PROBL: RISCHIO VAPORI INFIAMMABILI

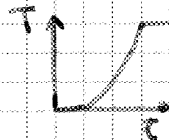
$H_2O \rightarrow$ COSTA POCO, \hat{C}_p ALTO, CALORE EVAPORAZ.
ALTO, NO VAPORI INFIAMMABILI

\downarrow
MA A VOLTE NON SI PUO' USARE x_{KE} TALVOLTA
IDROLITICA O NON SOLUBILE

\downarrow
SI USANO SOLVENTI CON T_{eb} OPPORTUNA, SOPRA
 T_0 , SOTTO T INNESCO RUN-AWAY, CHE DEVE
ESSERE IN GRADO DI SCIOLGERE REAG. E NON
DEVE REAGIRE

SPESSE REAZ. RUN-AWAY SONO DI ORDINE ZERO

\downarrow
NON ABBIAMO PUNTO FLESSO



② $T_d < T_b < MTSR < (T_0)_{24} \rightarrow$ RUN-AWAY PROBABILE,
EBOLLIZ. NON PROTEGGE,
MA DINAMICA LENTA

③ $T_d < T_b < MTSR; (T_0)_{24} \ll MTSR \rightarrow$ NON ACCETTABILE

PROCESSI ENZIMATICI

CATALIZZATORI PROTEICI / POLIPEPTIDICI

MASSE MOLECOLARI ENORMI

≠ DA CATALIZZATORI, MA STESSO FUNZIONAMENTO
INTERVENGONO SU CINETICA, ACCELERANDOLA,
MA ALLA FINE LI RITROVIAMO

RELAT. CINETICHE (EMPIRICHE) N CATALIZZATORI

ESTREMA SELETTIVITA' \rightarrow REPLICAZ. GENOMICA $\rightarrow 10^{-8}$ ERROR
+ PROOF READING

AFFINITA' CHIMICA SPECIFICA / STEREO SELETTIVITA'
CON SUBSTRATO DEL SITO ATTIVO

SI POSSONO ADATTARE AL SUBSTRATO IN REALTA'

DESORBIMENTO E VELOCISSIMO XRE° PRODOTTO
REAZIONE NON SI ATTACCA AL SITO ATTIVO

NOME ENZIMA \rightarrow NOME SUBSTRATO + -ASI

DAL 1955 NOMENCLATURA UFFICIALE DIPENDE DA
TIPO DI REAZIONE

APPLICAZIONI IN CAMPO INDUSTRIALE

* PAMIFICAZIONE \rightarrow X EVITARE CHE VADA A MALE, E CUMI
NAR. PROTEINE X DOCCIONI

CINETICA 2' STADIO $\rightarrow R_p = k_3 C_{EA} = -R_A = \frac{k_3 C_A C_{E1}}{\frac{1}{K} + C_A}$

$k = k_3 \quad K_M = 1/K = k_2/k_1$



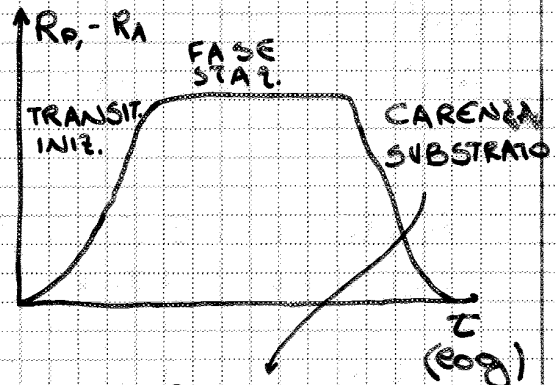
VALE SE 2' STADIO CONTROLLANTE

SENZA IPOTIZZARE 2' STADIO CONTROLLANTE, BASTA IPOTIZZARE R_{EA} ("STAZIONARIETA'")

$R_p = \frac{k_3 C_A C_{E1}}{\frac{k_2+k_3}{k_1} + C_A} \quad K_M = \frac{k_2+k_3}{k_1}$

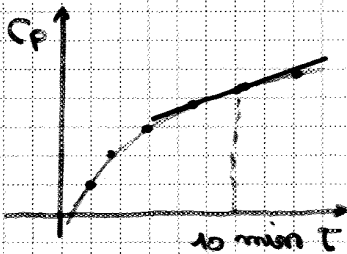
$\left\{ \begin{aligned} \frac{dC_A}{dt} &= -k_1 C_A C_E + k_2 C_{EA} \\ \frac{dC_{EA}}{dt} &= \dots \\ \frac{dC_p}{dt} &= \dots \end{aligned} \right.$

$C_{A0} = C_A + C_{EA} + C_p$
 $C_{E1} = C_E + C_{EA}$



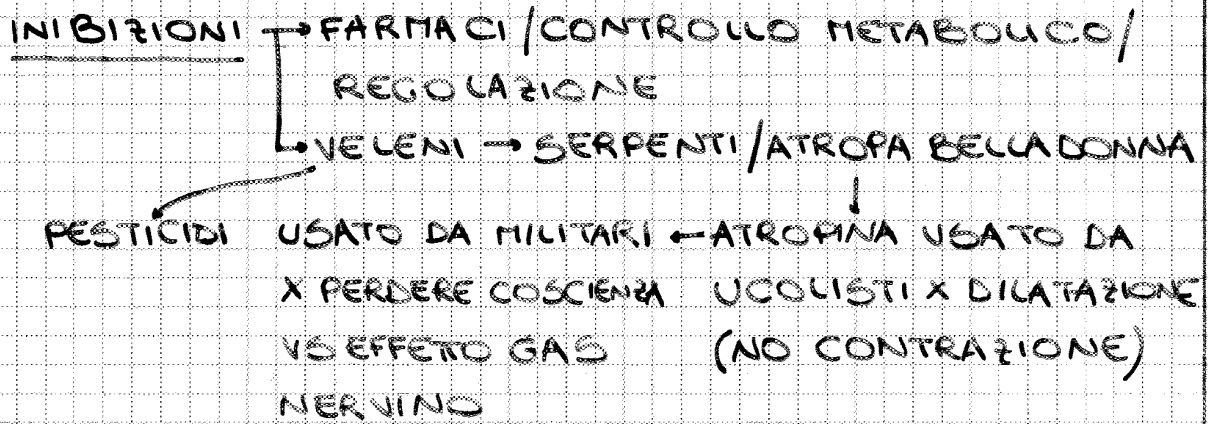
SI COMPORTA COME BATCH CHE ESAURISCE REAGENTI

X ANALISI MISURO R_p DA VARIARE C_p VS t , MISURO LA PENDENZA DELLA CURVA

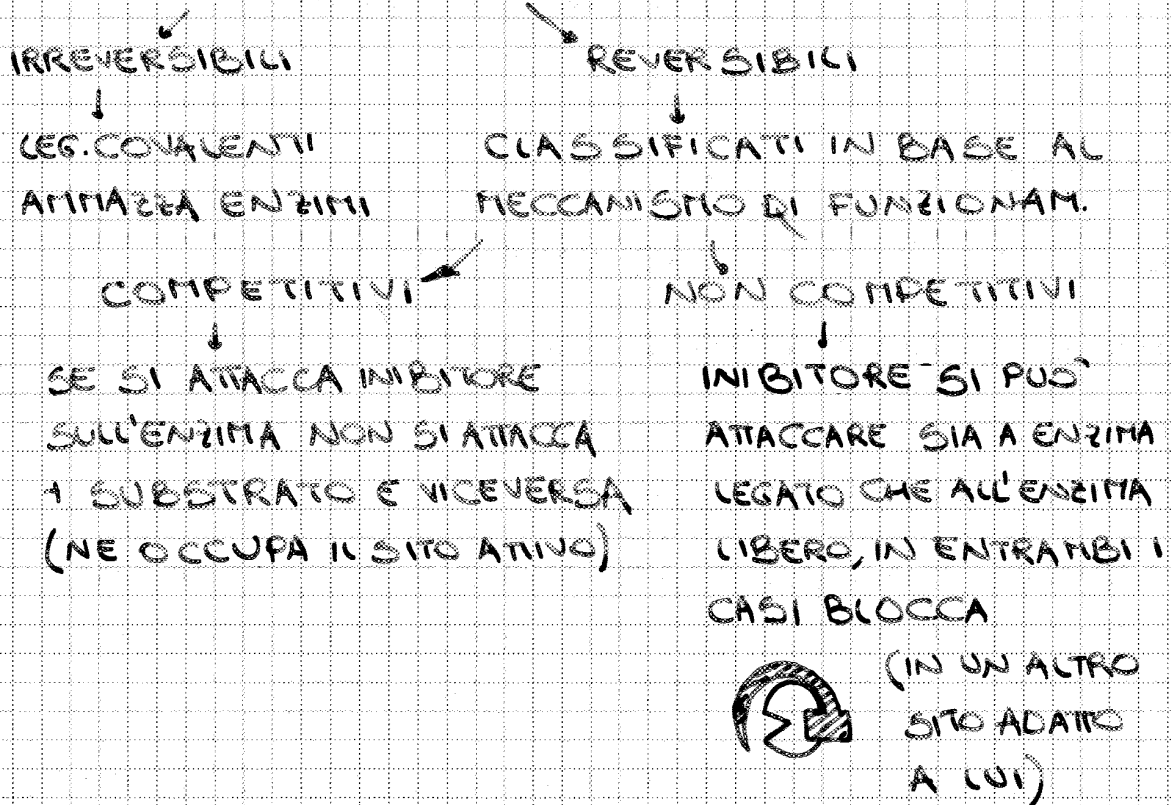


EFFETTO CONDIZ. OPERATIVE

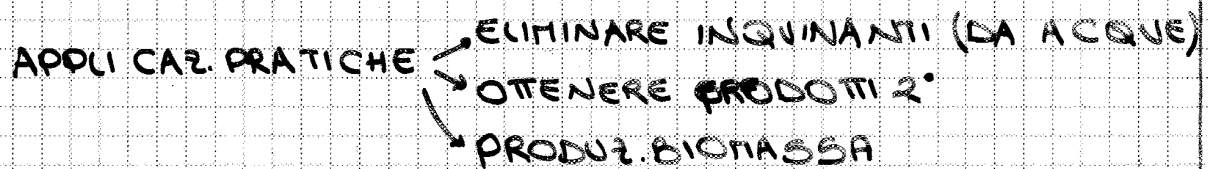
- 1) TEMPERATURA \rightarrow SE ABBASSO T LA CINETICA RALLENTA, SE T TROPPO ALTA PROTEINE SI DEGRADANO E QUINDI ANCHE ENZIMI



INIBITORI ENZIMATICI



PROCESSI MICROBIOLOGICI



SACCARONICES X PANE (CO₂)

MAX 14/15 ALCOL ← BIRRA/VINO (ALCOL)

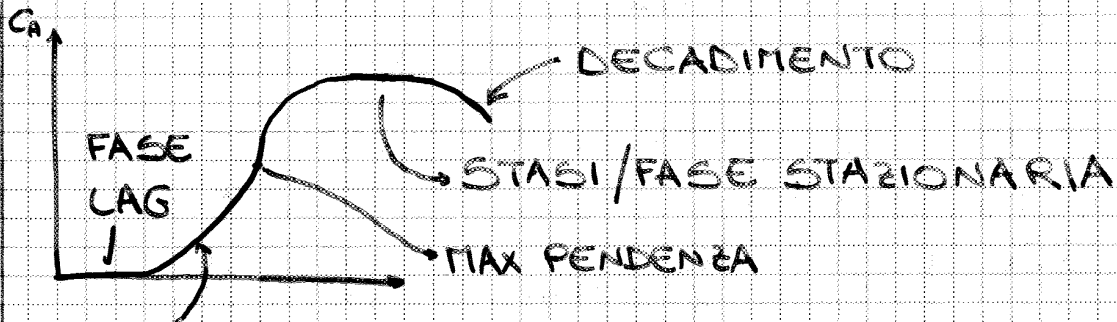
↳ SENNO' SERVE DISTILLAZ. ↳ INIBIZIONE DA PRODOTTO

FASE INIZIALE → LAG

FINO A
SETTIMANE

RITARDO/ACCUMULAZIONE → t_m AGGIUNTIVO

E' VARIABILE, MINORE SE BIOMASSA CONOSCE
GIÀ SUBSTRATO E SE E' GIOVANE



FASE ESPONENZIALE → CRESCITA CON ABBONDANZA
DI SUBSTRATO
(N CURVA LOGISTICA)

SI ARRIVA IN FASE DECADIMENTO SOLO IN USI DEPUR
RATIVI CON CRISTALLIZZAZIONE SOST. ORGANICHE
DOPO DECADIMENTO SI SCENDE FINO A ESTINZ.

X OVVIARE AL PROBL. DEL RITARDO SI PUO' USARE
CSTR

BIOMASSA MESSA ALL'INTERNO
DEL CSTR (NON ENTRA CON LA
CORRENTE USCENTE, MA ESCE
CON CORRENTE USCENTE)
(GENERAZIONE BIOMASSA)

BATCH CHQIL +
DIFFUSO

→ CORRENTE SUB
STRATO IN INGRESSO
= CORRENTE USCENTE

SE AUMENTO PORTATA ENTRANTE, AUMENTA ANCHE
QUELLA USCENTE E DIMINUISCE CONC. BIOMASSA,
FINO A EQ. + BASSA

X VALORE FINITO \dot{V}_e LA $C_B \rightarrow 0$ → CONDIZ. LIMITE:
WASH-OUT

SOLUZ. OTTIMALE → CSTR + BATCH IN CASCATA

BATCH

FFR' SOLO IN SCARICHI

$$\frac{dC_A}{dt} = R_A = -\phi_A R_B = -\phi_A \frac{k C_A C_B}{C_A + K_M}$$

FOGNARI

$$= -\phi_A \frac{k C_A [C_{B0} - \phi_B (C_{A0} - C_A)]}{C_A + K_M}$$

SE UN INOCULO C_{B0}

IN VINO INOCULO

GA' PRESENTE

NELLA BUCCIA

$$\tau = -\frac{1}{k} \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{(C_A + K_M) dC_A}{C_{A0} \phi_A C_A [C_{B0} - \phi_B (C_{A0} - C_A)]}$$

SI RISOLVE SPACCANDO IN 2

COMODA SE SI

VUOLE ABBASSARE

C_A SOTTO UN VALORE

$$\frac{1}{R_B} = \frac{K_M}{k C_A C_B} + \frac{1}{k C_B}$$

SE SCOPO E' PRODURRE BIOMASSA C_B CONVIENE

SCRIVERE τ IN FUNZIONE DI C_B , AL POSTO DI C_A ,

CON LA RELAZIONE:

$$C_A - C_{A0} = \phi (C_{B0} - C_B)$$

AD ESEMPIO SE DEVO

ABBATTERE DA ACQUE

SOTTO LIMITI DI LEGGE

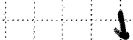
SE INVECE VOGLIAMO PRODURRE UN PRODOTTO P,

AD ESEMPIO ANTIBIOTICO

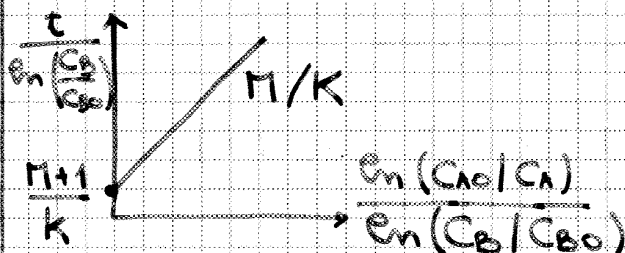
$$\phi_P (C_A - C_{A0}) = C_P - C_{P0}$$

PARAMETRI CINETICI, MISURATI DA PROVE SPERIM.

IN REATTORE BATCH

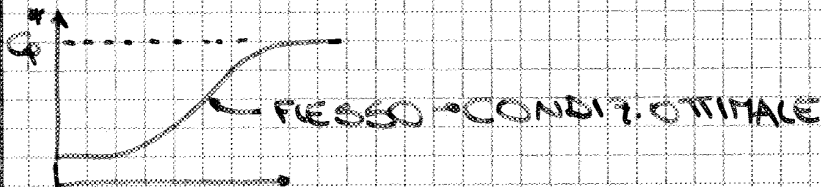


LINEARIZZIAMO EQ. DI BILANCIO INTEGRATA



$$R_p = \phi_p \phi_A R_B = k \left(1 + \frac{C_p}{C_p^*} \right) (C_p - C_{p0} + \phi_p \phi_A C_{B0})$$

$$\frac{dR_p}{dC_p} = 0 \rightarrow R_p \text{ MAX} \rightarrow \text{CONDIZ. OTTIMALE}$$



INIBIZIONE DA PRODOTTO IN CSTR

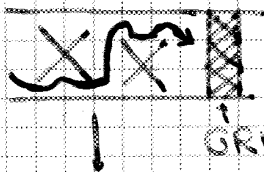
NON SI ARRIVA A $(C_{B1})_{\text{MAX}}$ CHE SI ARRIVEREBBE IN ASSENZA DI INIBIZIONE, MA $(C_{B1})_{\text{MAX}}$ AVRA' UN VALORE + BASSO (L'INIBIZIONE \Rightarrow)

$$C_{p1} = C_p^* - \frac{C_p^*}{k} \frac{1}{\tau}$$

REATTORI MISCELATI

MISCELAZIONE X MANTENERE CONDIZ. OMOGENEE DI T E COMPOSIZ., FAVORIRE SCAMBIO Q CON LE PARETI; X SIST. ETEROGENI SCAMBIO MATERIA INTERFASE, UNIFORMITA' NELLA DISTRIBUZ. DELLE FASI (ES: SOLIDO IN SOSPENSIONE OPPURE BOLLE DI GAS DISPERSE NEL LIQUIDO)

- MISCELAZ. MECCANICA
- CIRCOLAZIONE ESTERNA FORZATA \rightarrow PER CON ALTO RICIRCOLO
- MISCELATORE STATICO



GRIGLIA

CORPO SOLIDO FERRO, QUINDI IN MOTO RELATIVO CON IL FLUIDO

IN MOVIMENTO

ABBIAIMO PERO' PERDITE DI PRESSIONE

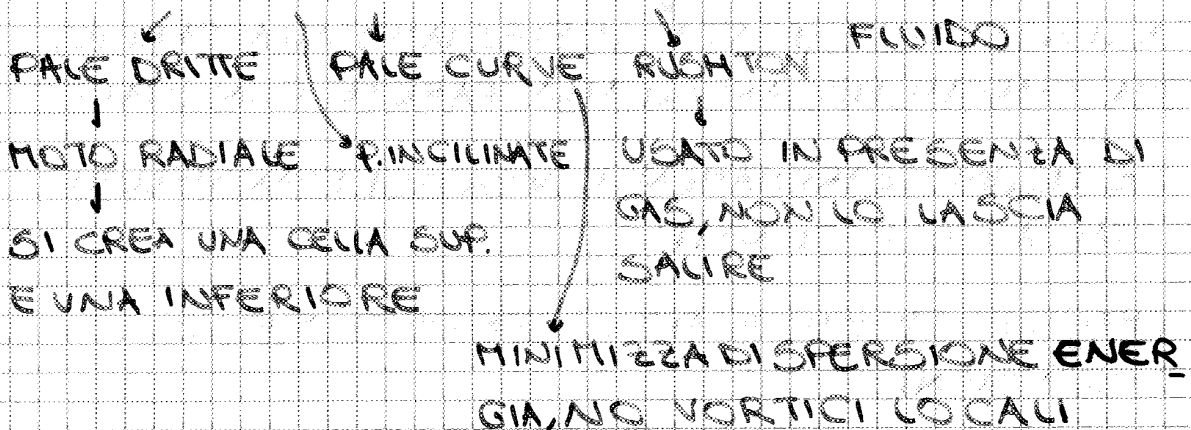
- GORGOGLIAZIONE GAS
- LETTO GRANULARE \rightarrow ALTI

• GUARNIEONI IDRAULICHE → SIFONE PIENO DI LIQUIDO
VA BENE SE ΔP MOLTO PICCOLE, POICHÉ GIOCA
SUL BATTENTE IDROSTATICO

• X MOVIMENTAZIONE POSSO USARE COPPIA MAGNETICA
X REATTORI NON TROPPO GRANDI

MOTORE DI SOLITO MESSO IN ALTO, POICHÉ IN
BASSO CI SAREBBERO PROBL. DI USURA DOVUTO
ALLA SEDIMENTAZ. E AL FATTO CHE IN BASSO C'È
LO SPURGO

SI POSSONO USARE ≠ TURBINE → IN BASE AL



• X REATTORI GRANDI CORPI MISCELATI PROGETTATI
CON FLUIDODINAMICA COMPUTAZIONALE
< COSTI >, EFFICENZA >, RISPARMIO ENERGIA

• X FLUIDI AD ELEVATA VISCOSITÀ → ES: NUTELLA

AD ANCORATA / A NASTRO → RASCHIANO IL BORDO
X EVITARE CHE BRUCI
SUL BORDO

CON PALE DRITTE → CELLE SEGREGATE → CASCATA CSTR

NORMALMENTE FORMA CILINDRICA E FONDO NON PIATTO, X FACILITARE EVAQUAZIONE

ENERGIA TRASMESSA DA POMPA: $\Delta P / \rho$

ENERGIA CINETICA $\propto \rho N^2 D^2$

$$\dot{V} = N_p \cdot N \cdot D^3$$

NUMERO DI POMPAGGIO → FATTORE PROPORZIONALE

↳ LITRI

DIPENDE DA DIMENSIONI, VORTICI, Re , N , FRANGIFLUTTI, D/T (DIAM. PALE/DIAM. REATTORE)

IN REGIME TURBOLENTO → $Re_c > 10^4$ → $N_p \approx \text{COST}$

↓
 \dot{V} INDIPENDENTE DA μ

PROPORZIONALE ALLA VELOCITA' ROTAZIONE

$$\begin{aligned} \text{POTENZA (P)} &= \text{ENERGIA CINETICA VOLUMICA} \cdot \dot{V} \\ &= N_p (\rho N^2 D^2) \cdot (N D^3) = N_p \rho N^3 D^5 \end{aligned}$$

NUMERO DI POTENZA

IN REGIME TURBOLENTO

$$N_p \approx \text{COST}$$

$$N_p \propto N^3$$

$$N_p \propto \rho$$

$$N_p \propto \mu$$

IN REGIME LAMINARE

$$N_p \propto \frac{1}{Re} \propto \frac{N^3}{N} = N^2$$

$$N_p \propto \mu$$

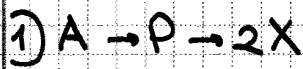
$$N_p \propto \rho \text{ (SI SEMPLIFICA)}$$

PERO' L'AUMENTARE DI ρ FA AUMENTARE Re , E RISCHIO DI CADERE IN REGIME TURBOLENTO

$N_{p0} = N_p$ STANDARD → G FRANGIFLUTTI DI AMPIEZZA $\frac{T}{10}$

N_p DIPENDE DA FRANGIFLUTTI E DIST. DAL FONDO

STECIOMETRIA



$$M_A = 35 \text{ [Kg kmol}^{-1}\text{]}$$

$$\rho = 1150 \text{ [Kg m}^{-3}\text{]} \text{ COST.}$$

X FASI CONDENSATI ρ COST. (SE ABBAST. DILUITI)

X FASI GASSOSE ρ NON COST \rightarrow GAS IDEALI

$$W_{A0} = 0,25$$

$$W_P = W_X = 0$$

$\sum W_i \neq 1 \rightarrow$ C'È UN INERTE

$$C_A = 1,6 \text{ [kmol m}^{-3}\text{]}$$

$$C_P = 6,0 \text{ [kmol m}^{-3}\text{]}$$

$$\frac{|\Delta n_A|}{V_A} = \frac{\Delta n_P}{V_P} + \frac{\Delta n_X}{V_X}$$

$$\frac{C_{A0} - C_A}{1} = \frac{C_{P0} + C_P}{1} + \frac{C_{X0} + C_X}{2}$$

$$C_{A0} - C_A = \frac{n_{A0}}{V} - \frac{n_A}{V}$$

$$\frac{n_{A0}}{V} - \frac{n_A}{V} = \frac{|\Delta n_A|}{V} = \frac{\Delta n_P}{V} + \frac{\Delta n_X}{V}$$

$$C_{A0} - C_A = C_P - \cancel{C_{P0}} + \frac{C_X}{2} - \frac{\cancel{C_{X0}}}{2}$$

$$\frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} = \zeta_A = \frac{C_P}{C_{A0}} + \frac{1}{2} \frac{C_X}{C_{A0}}$$

$$C_{A0} = W_{A0} \frac{\rho}{M_A} = 0,25 \frac{1150}{35}$$

$$C_{A0} = 8,21 \text{ [kmol m}^{-3}\text{]}$$

$$\zeta_A = \frac{8,21 - 1,6}{8,21} = 0,805 \text{ [-]}$$

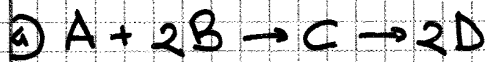
$$\xi_A = |W_A - W_{A0}| = |C_A - C_{A0}| \cdot \frac{M_A}{\rho} \leftarrow \text{GRADO DI CONVERSIONE}$$

$$C_X = 2(C_{A0} - C_A - C_P) = 2(8,21 - 1,6 - 6) = 1,23 \text{ [kmol m}^{-3}\text{]}$$

$$\sigma_P = \frac{|\Delta n_P / V_P|}{|\Delta n_A / V_A|} = \frac{C_P - \cancel{C_{P0}}}{C_{A0} - C_A} = 0,907$$

$$\eta_P = \sigma_P \cdot \zeta_A = 0,73$$

OK IL FATTO CHE $\eta_P \leq \sigma_P$ E CHE $\zeta_A, \eta_P, \sigma_P \leq 1$



$C_{A1} = 10 \text{ [Kmol} \cdot \text{m}^{-3}]$

$C_{C1} = 4 \text{ "}$

$\rho_1 = 830 \text{ [Kg} \cdot \text{m}^{-3}]$

$C_{A0} = 15,5 \text{ [Kmol} \cdot \text{m}^{-3}]$

$C_{B0} = 25 \text{ "}$

$C_{C0} = C_{D0} = 0 \text{ "}$

$\rho_0 = 850 \text{ [Kg} \cdot \text{m}^{-3}]$

$\frac{|\Delta n_B|}{V_B} = \frac{|\Delta n_C|}{V_C} + \frac{|\Delta n_D|}{V_D}$

$\frac{n_{B0} - n_B}{2} = n_C - n_{C0} + \frac{n_D - n_{D0}}{2}$

$\frac{1}{2} \left(\frac{n_{B0}}{V_1} - \frac{n_B}{V_1} \right) = \frac{n_C}{V_1} + \frac{1}{2} \frac{n_D}{V_1}$

$m = \text{const} \rightarrow V_0 \rho_0 = V_1 \rho_1 \rightarrow V_1 = V_0 \frac{\rho_0}{\rho_1}$

$\frac{1}{2} \left(C_{B0} \frac{\rho_1}{\rho_0} - C_{B1} \right) = C_{C1} + \frac{1}{2} C_{D1}$

$C_{A0} \cdot \frac{\rho_1}{\rho_0} - C_{A1} = C_{C1} + \frac{1}{2} C_{D1} \rightarrow C_{D1} = 2,27 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$

$C_{B1} = C_{B0} \frac{\rho_1}{\rho_2} - 2 C_{C1} - C_{D1} \rightarrow C_{B1} = 14,14 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$

$\sigma_C = \frac{\Delta n_C}{\Delta n_A} \cdot \frac{V_A}{V_C} = 0,73$



$C_{A0} = 2,5 \text{ [Kmol} \cdot \text{m}^{-3}]$

$C_{B0} = 1,5 \text{ "}$

$C_{P0} = 0 \text{ "}$

$C_{X0} = 0,5 \text{ "}$

$\rho_0 = 1150 \text{ [Kg} \cdot \text{m}^{-3}]$

$C_{A1} = 1,5 \text{ [Kmol} \cdot \text{m}^{-3}]$

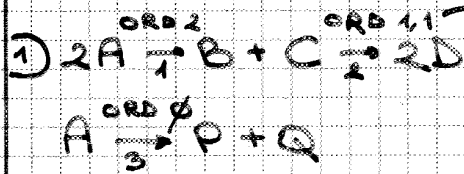
$C_{P1} = 0,7 \text{ "}$

$\rho_1 = 950 \text{ [Kg} \cdot \text{m}^{-3}]$

$\frac{\Delta n_A}{V_A} = \frac{\Delta n_B}{V_B}$

$n_A - n_{A0} = n_B - n_{B0}$

EQUAZIONI CINETICHE



COME U.R. COME FOSSE DI ORDINE 2.

$$R_A = -k_1 C_A^2 - k_3$$

$$= -2R_B - R_D - R_P$$

$$R_D = k_2 C_B C_C = -R_A - 2R_B - R_P$$

$$R_B = R_A/2 - R_D \quad \text{SE CONSIDERASSI SOLO 1' REAZ.$$

$$R_P = R_Q = k_3$$

$$R_B = R_C = -\frac{1}{2} (R_A + R_D + R_P) = \dots$$

← DA SOSTITUIRE DELLE ALTRE

$$= -\frac{1}{2} (-k_1 C_A^2 - k_3 + k_2 C_B C_C + k_3) =$$

$$= +\frac{1}{2} (k_1 C_A^2 - k_2 C_B C_C)$$

$$k_1, k_2 \rightarrow \text{ORDINE } 2 \rightarrow \text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$k_3 \rightarrow \text{ORDINE } 0 \rightarrow \text{kmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$$



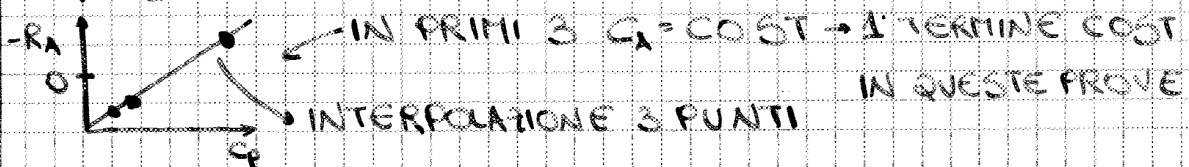
VELOCITÀ DI REAZ. NON MISURABILE DIRETTAMENTE (SAVO CASI ECCEZIONALI), POSSIAMO FARE SOLO UNA STIMA INDIRETTA TRAMITE VARIAZ. NEL TEMPO DELLA CONC. → TERMINE DERIVATIVO APPROSSIMATO

$$R_P = k_1 C_A^2 - k_2 C_P^2 - k_3 C_P$$

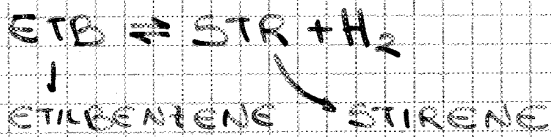
$$R_P = -R_A - R_X$$

$$R_A = -k_1 C_A^2 + k_2 C_P^2$$

$$R_X = k_3 C_P$$



3) REAZ. CATALITICA ETEROGENEA



$P_{STR} = P_{H_2}$ SE ALL'INIZIO SOLO ETB

DOBBIAMO IPOTIZZARE CHE UN MECCANISMO SIA CONTROLLANTE E VERIFICHIAMO SE DATI CORRISP. SE CONTROLLANTE REAZIONE. SUPERFIC. DA TABELLA

$$R_{ETB} = - \frac{k_{SR} K_{ETB} (P_{ETB} - P_{H_2} P_{STR} / K)}{(1 + K_{ETB} P_{ETB} + K_{H_2} P_{H_2} + K_{STR} P_{STR})^2}$$

$$\frac{R_{ETB}}{k_{SR} K_{ETB} (\dots)} = \frac{1}{(\dots)^2}$$

4) $A + B \rightarrow C$ CATALITICO (BASTA SIA IRREV. UNO STADIO)

SUPPONIAMO $R_A = - \frac{k C_A C_B C_C}{1 + K_A C_A + K_B C_B + K_C C_C}$

PER DETERMINARE RELAZ. TRA R_A , C_A PRENDIAMO C_B, C_C COSTANTI E VEDIAMO IN MODO GRAFICO LA RELAZ. CHE PERSISTE

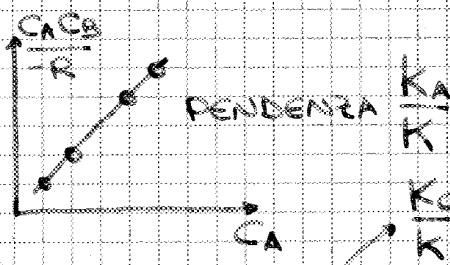


$$-R_A = \frac{k C_A C_B}{1 + K_A C_A + K_B C_B}$$

SE APPLICO PROCEDIM. PER I 3 COND.

$$\frac{C_A C_B}{-R_A} = \frac{1}{k} + \frac{K_A C_A}{k} + \frac{K_B C_C}{k}$$

PRENDO PROVE X CUI C_B, C_C FISSATI



FACCIO LA STESSA COSA ANCHE X C_C

ASSEMBLIAMO ULTIMI VALORI ALL'EQUILIBRIO

$$K = \frac{C_{Fe}}{C_{Ae}} = \frac{C_{A0} \varphi_{TAE}}{C_{A0}(1-\varphi_{TAE})} = \frac{\varphi_{TAE}}{1-\varphi_{TAE}}$$

$$K = \frac{k_1}{k_2}$$

T [K]	413	433	453
K [-]	3,653	2,088	1,254

$$\varphi_{TA} = \frac{k_1}{k_1+k_2} \dots R_A = -(k_1+k_2)C_A + k_2 C_{A0}$$

$$\frac{dC_A}{dt} = R_A = -(k_1+k_2)C_A + k_2 C_{A0}$$

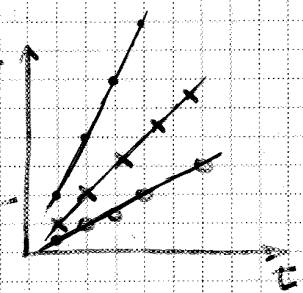
$$\int_0^t \frac{dC_A}{C_{A0} - (k_1+k_2)C_A + k_2 C_{A0}} = \int_0^t dt$$

$$\varphi_{TA} = \frac{k_1}{k_1+k_2} \cdot [1 - e^{-(k_1+k_2)t}]$$

$$= \frac{k_1/k_2}{k_1/k_2 + 1} [1 - e^{-(\frac{k_1}{k_2} + 1)k_2 t}]$$

$$= \frac{K}{K+1} [1 - e^{-k_2(K+1)t}]$$

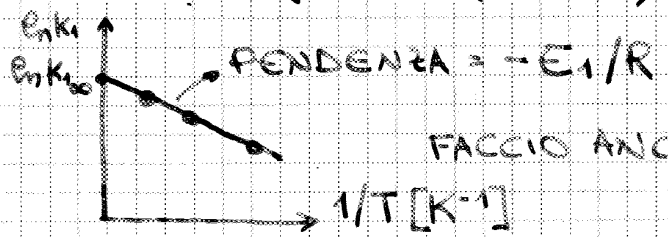
$$k_2 t = \frac{-\ln(1 - (K+1)/K \varphi_{TA})}{K+1}$$



TROVO I 3 VALORI DI k_2 (E QUINDI DI k_1)

$k_1 =$	$1,04 \cdot 10^{-2}$	$1,82 \cdot 10^{-2}$	$3,05 \cdot 10^{-2}$
$k_2 =$	$2,85 \cdot 10^{-3}$	$8,72 \cdot 10^{-3}$	$2,44 \cdot 10^{-2}$

k_2 AUMENTA + DI k_1 , GIUSTO x REAZ. ESOTERMICA E QUINDI $E_2 > E_1$ ($\Delta H < 0$)



PENDENZA = $-E_1/R$
FACCIO ANCHE PER k_2

② $V_R = 8 \text{ [m}^3\text{]}$ $R_A = -kC_A^2$ $k = 0,0036 \text{ [m}^3\text{s}^{-1}\text{kmol}^{-1}\text{]}$

$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A^2$ $\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A^2} = \int_0^t -k dt$ $C_A^2 = C_{A0}^2 (1 - \xi_A)^2$

$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = kC = \frac{1}{C_{A0}} \left(\frac{\xi_A}{1 - \xi_A} \right)$ $\tau_m = 120 \text{ [min]}$
 $\xi_A = 0,85$

$C = \frac{1}{k} \left(\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} \right) = 13117 \text{ [s]} = 3,64 \text{ [h]}$

$C_P = C_A \cdot \xi_A = 0,12 \cdot 0,85$

$\Pi_P = \frac{V_R C_P}{(C + \tau_m)} = 0,145 \text{ [kmol} \cdot \text{h}^{-1}\text{]}$

$\Pi_P = \frac{V_R C_P}{C + \tau_m} = \frac{V_R C_{A0} \xi_A}{\frac{1}{k C_{A0}} \frac{\xi_A}{1 - \xi_A} + \tau_m} = \frac{V_R C_{A0}^2 \xi_A (1 - \xi_A)}{\frac{1}{k} \xi_A + \tau_m}$

$\frac{d\Pi_P}{d\xi_A} = 0$ OPPURE $\frac{d\Pi_P}{dC} = 0$ OPPURE GRAFICO



RAPPORTO STECH. MIGLIORE: $C_{A0} = C_{B0}$

!
 SENNO' QUELLO IN ECCESSO NON AVRA' MAI REAZ. TOTALE

$C_{A0} = C_{B0} \Rightarrow C_A = C_B$ $-R_A = kC_A^2$ SOLO SE CONC. INIZIALE $\xi =$

$C = \frac{1}{k} \left[\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} \right] = \frac{1}{k C_{A0}} \frac{\xi_A}{1 - \xi_A}$

$C_P = C_{A0} \xi_A$

$\Pi_P = \frac{V_R C_{A0} \xi_A}{\frac{1}{k C_{A0}} \cdot \frac{\xi_A}{1 - \xi_A} + \tau_m} = \frac{V_R C_{A0} \frac{k C_{A0} \tau}{1 + k C_{A0} \tau}}{C + \tau_m}$



SE $C_{A0} \neq C_{B0} \rightarrow C_{A0} - C_A = C_{B0} - C_B$

METANO
 IN 5 V 7500 NEU'ECVAM.

10) ADIAB. → CAMBIA SIA CONC, CHE T

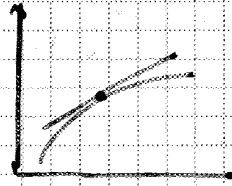
ΔT_{AD} DIPENDE DA C_{A0} $\Delta T_1 = \Delta T_2$ SE $\Delta T_{AD1} \cdot C_{A1} = \Delta T_{AD2} \cdot C_{A2}$

$$T = T_0 + (\Delta H_r)_A / (\rho \hat{C}_p) \cdot C_{A0} \varphi_A$$

DEVE ESSERE =

$$\frac{d\varphi_A}{dt} = \frac{|R_A|}{C_{A0}}$$

$$\left(\frac{d\varphi_A}{dt}\right)_{C_{A0}} = |R_A|$$



$|R_A| \approx$ X TUTTE LE CURVE → ORDINE ZERO

CONC. NON INFLUISCE SU R_A → $R_A = k$

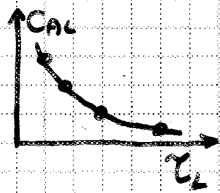
REATTORE TUBOLARE

1) A → P ORDINE ZERO $\langle v \rangle_{MIN} = 0,5 [m \cdot s^{-1}]$

$$R_A = -0,024 [kmol \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}]$$

PROVARE A CASA

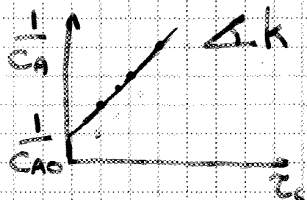
2) $R_A = -k C_A^n$ $\tau_L = \frac{V_R}{\dot{V}}$ → DIAGRAMMA τ_L VS C_{AL}



NON PUO' ESSERE DI ORDINE ZERO
 (NON ANDAM. LINEARE) ($C_A = C_{A0} - k\tau_L$)

NON POSSO AUMENTARE TROPPO τ_L
 POICHE' DOVREI RIDURRE $\langle v \rangle$, CADENDO
 IN REGIME LAMINARE (NO FLUSSO A PISTONE)

SE $n=2$



IN REALTA' NON E' COSI'

NON E' DI ORDINE 2

SE $n=1$ → $C_{AL} = C_{A0} e^{-k\tau_L}$ → $\ln\left(\frac{C_{AL}}{C_{A0}}\right) = -k\tau_L$

$$\Pi_p = \frac{C_p V_r}{\tau + \tau_m} = \frac{C_{A0} \varphi_A V_r}{0,834 + 40/60} = 14,55 \text{ [kmol} \cdot \text{h}^{-1}\text{]}$$

CON FLUSSO A PISTONE: $\Pi_p = C_p \dot{V} = C_{A0} \varphi_{AL} \frac{V_r}{\tau_L} \quad \tau_L = \tau$

$$V_r = \frac{\Pi_p \tau_L}{C_{A0} \varphi_{AL}} = 1,1 \text{ [m}^3\text{]}$$

5) PFR NON COMBENTATO $T_{\text{EST}}^{\text{MIN}} = 263 \text{ K}$ $T_{\text{EST}}^{\text{MAX}} = 308 \text{ K}$

A → P

$-R_A = 86 e^{-3500/T} \cdot C_A \quad L = 5,5 \text{ [m]} \quad \dot{V} = 2,59 \cdot 10^{-3} \text{ [m}^3 \text{ s}^{-1}\text{]}$
 $\Delta T_{A0} = 195 \text{ [}^\circ\text{C]} \quad \phi_i = 0,6 \text{ [m]} \quad C_{A0} = 5 \text{ [kmol} \cdot \text{m}^{-3}\text{]}$

$\frac{U}{\rho C_p \kappa_h} = 0,0035 \text{ [s}^{-1}\text{]} \quad T_0 = 20 \text{ [}^\circ\text{C]}$

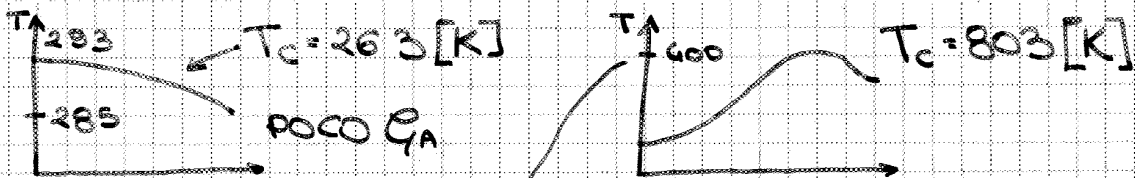
$U \left[\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ K}} \right] \quad \rho \text{ [kg} \cdot \text{m}^{-3}\text{]} \quad \hat{C}_p \text{ [J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}\text{]} \quad \kappa_h \text{ [m]}$

$$\tau_L = \frac{V_r}{\dot{V}} = \frac{L \pi / 4 D^2}{\dot{V}} = 600 \text{ [s]}$$

$\frac{d\varphi_A}{d\tau} = \frac{|R_A|}{C_{A0}} \quad \Delta \varphi_A = \frac{|R_A|}{C_{A0}} \Delta \tau \quad T_c = T_{\text{EST}}$

$\frac{dT}{d\tau} = \Delta T_{A0} \frac{d\varphi_A}{d\tau} - \frac{U(T - T_c)}{\rho \hat{C}_p \kappa_h} \quad \Delta T = \Delta T_{A0} \frac{\Delta \varphi_A}{1} - \Delta \tau \frac{U(T - T_c)}{\rho \hat{C}_p \kappa_h}$

MI VENGONO ≠ INTERVALLI, CALCOLO CON FOGLIO EXCEL
 (ES: INTERVALLI DA 1 [s])



RISCHIO REAZIONI SECONDARIE; EBOLLIZIONE CON AUMENTO PERICOLOSO P
 → SI TRASURA 2° TERMINE
 DIFFERENZE ENORMI → MEGLIO ISOLARE

$$R_{C_1} = 0,0156 \cdot 12 \cdot 64 - 2,03 \cdot 4 = 3,86 \text{ [kmol} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}]$$

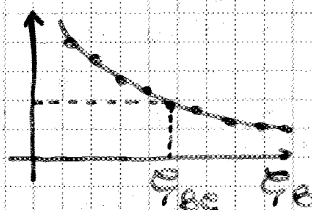
$$R_{B_1} = -R_{C_1} \nu_B = -7,72 \text{ [kmol} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}]$$

$$(C_{B_0} - C_{B_1}) \dot{V} = |R_{B_1}| \nu_C$$

$$\tau = \frac{C_{B_0} - C_{B_1}}{|R_{B_1}|} = 1,04 \text{ [h]}$$

$$K = \frac{C_{B_0} \varphi_{B_0} / 2}{[C_{B_0} (1 - \varphi_{B_0})]^2 [C_{A_0} - (C_{B_0} \varphi_{B_0}) / 2]}$$

$$R_1(\varphi_{B_0}) = \frac{C_{B_0} \varphi_{B_0} / 2}{[C_{B_0} (1 - \varphi_{B_0})]^2 [C_{A_0} - (C_{B_0} \varphi_{B_0}) / 2]}$$



② $A \rightarrow P$ $R_A = -k C_A^2$ $k = 5,55 \cdot 10^6 e^{-7000/T}$

$$(\Delta T_{A0}) = \frac{(-\Delta H_{r,A}) C_{A_0}}{\rho \hat{C}_p} = 109^\circ \text{C} = 109 \text{ [K]}$$

$$T_1 = \Delta T_{A0} \varphi_A + T_0 = 413 \text{ [K]}$$

$$k_{T_1} = 5,55 \cdot 10^6 \cdot e^{-7000/413} = 0,2427 \text{ [m}^3 \text{ kmol}^{-1} \text{ h}^{-1}]$$

$$R_{A1} = -k_{T_1} C_{A1}^2 = -k_{T_1} [C_{A_0} (1 - \varphi_{A1})]^2 = -0,2763 \text{ [...]}$$

$$\dot{V} (C_{A1} - C_{A0}) = \nu_C R_{A1}$$

$$\frac{C_{A1} - C_{A0}}{C_{A0}} = \frac{(\nu_C / \dot{V}) (-R_{A1})}{C_{A0}}$$

$$\nu_C = \varphi_{A1} \cdot C_{A0} \dot{V} / (-R_{A1}) = 487,4 \text{ [m}^3]$$

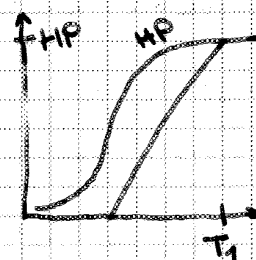
$$\dot{Q} = (C_{A0} - C_{A1}) \dot{V} (-\Delta H_{r,A})$$

$$= \nu_C |R_{A1}| (-\Delta H_{r,A}) = 11,5 \cdot 10^8 \text{ [J/h]} = 3,2 \text{ [MW]}$$

③ $\Delta T_{A0} = \frac{(-\Delta H_{r,A}) C_{A0}}{\rho \hat{C}_p} = 138 \text{ [K]}$

$$\text{HP} \rightarrow \Delta T_{A0} \frac{k \tau}{1 + k \tau} = \Delta T_{A0} \frac{\tau k_{\infty} e^{-E/RT_1}}{1 + \tau k_{\infty} e^{-E/RT_1}}$$

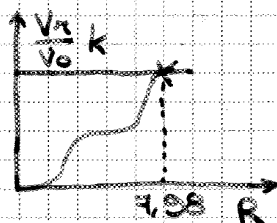
$$\text{HR} = (T_1 - T_0) + UA / (\rho \hat{C}_p \nu_C) \tau (T_1 - T_c)$$



$$\tau_{TP} = 2,51 = \dot{V}_0 \cdot 2,45 \rightarrow \dot{V}_0 = 1029 [\text{m}^3/\text{h}]$$

$$\left(\frac{V_A}{V_0} k\right) = (1+R) \ln\left(\frac{C_{A0} + R C_{AL}}{(1+R) C_{AL}}\right)$$

FACCIO GRAFICO 2' TERMINE AL VARIARE DI R



↓
OPPURE CON METODO
NUMERICO, PORTANDO
TUTTO DA UNA PARTE E
TROVANDO LA RADICE

SCHEMA DI REAZ. COMPLESSO (VII)



$$R_A = -2R_P - R_X = -2k_1 C_A^2 - k_2 C_A$$

$$C_{A1} = C_{A0} (1 - \eta_{A1}) = 0,05 \cdot 12 = 0,6 [\text{kmol m}^{-3}]$$

$$R_{A1} = -2k_1 C_{A1}^2 - k_2 C_{A1}$$

$$k_1 = 3,06 [\text{m}^3 \text{kmol}^{-1} \text{h}^{-1}]$$

$$k_2 = 2,01 [\text{h}^{-1}]$$

$$(C_{A0} - C_{A1}) \dot{V} = V_R R_{A1} \quad \frac{C_{A0} - C_{A1}}{|R_{A1}|} = \frac{V_R}{\dot{V}} = \tau = 3,36 [\text{h}]$$

$$\sigma_{P1} = \frac{C_{P1} - C_{P0}}{C_{A0} - C_{A1}} \cdot \frac{V_A}{V_P}$$

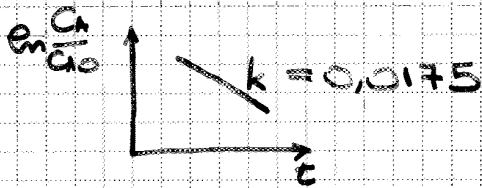
$$\sigma'_{P1} = \frac{|R_P|}{|R_A|} \frac{V_A}{V_P} = \sigma_{P1}$$

$$(C_{P1} - C_{P0}) \dot{V} = V_R R_{P1} \rightarrow C_{P1} = \tau R_{P1} = \tau k_1 C_{A1}^2 = 3,68 [\text{kmol m}^{-3}]$$

$$\sigma_{P1} = \frac{C_{P1}}{C_{A0} - C_{A1}} = 0,645$$

$$\eta_{P1} = \sigma_{P1} \eta_{A1} = 0,612$$

$$\sigma_{X1} = 1 - \sigma_{P1} = 0,355$$



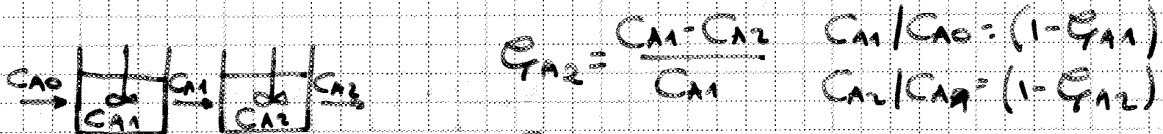
$$\frac{dC_p}{dt} = R_p = k_p C_x = k_p (C_{A0} - C_p - C_x) \quad \frac{dC_p}{C_{A0} - C_p - C_x} = k_p dt$$

$$U_p = \frac{C_p}{C_{A0} - C_A} = \frac{Y_{O_2}}{k_p + k_x}$$

$$\frac{k_x}{k_p} = \frac{C_{A0} - C_A}{C_p} - 1 = 0,1667$$

ANDREBBE
BENE SE NON
CI FOSSE C_x

SE SONO IN SERIE:



$$\eta_{A2} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{C_{A1}} \quad C_{A1}/C_{A0} = (1 - \eta_{A1})$$

$$C_{A2}/C_{A1} = (1 - \eta_{A2})$$

$$1 - \eta_{A1} = \frac{C_{A2}}{C_{A0}} = (1 - \eta_{A1})(1 - \eta_{A2})$$

$$\eta_{A1} = 1 - \left(1 + \frac{k_x + k_p \tau}{2}\right)^{-2} = \frac{1}{1 + k\tau_1} \cdot \frac{1}{1 + k\tau_2}$$

$$\tau = \frac{2}{k_x + k_p} \left(\frac{1}{1 - \eta_{A1}} - 1 \right) \quad \eta_{A1} = 1 - \frac{C_{A2}}{C_{A0}} \quad \tau_1 = \tau_2 = \frac{\tau}{2}$$

$$\eta_{A1} = 1 - \frac{1}{1 + k\tau/2} \cdot \frac{1}{1 + k\tau/2} = 1 - (1 + k\tau/2)^{-2}$$

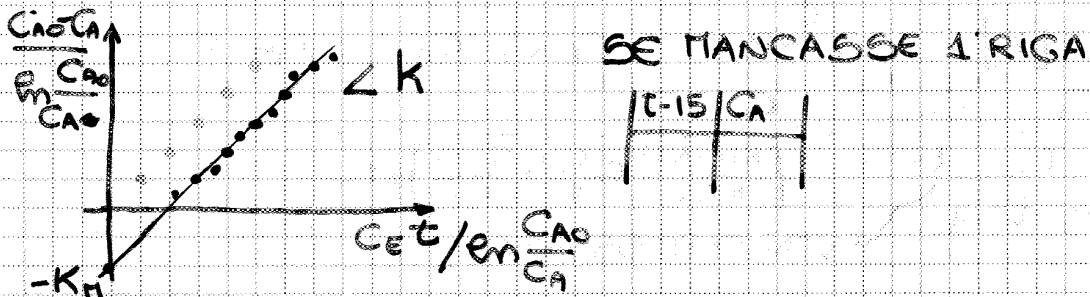
$$\tau = 397 \text{ [min]}$$

$$\dot{V}_p = \dot{V} C_{p2} \quad \dot{V} = \frac{V_{r1} + V_{r2}}{\tau} = \frac{100}{397} = 1,51 \text{ [m}^3 \text{ h}^{-1}]$$

$$U_{p2} = \frac{k_p}{k_p + k_x}$$

$$C_{p2} = \frac{k_p}{k_p + k_x} (C_{A0} - C_{A2}) = 6,1 \text{ [kmol} \cdot \text{m}^{-3}]$$

$$\dot{V}_p = 92,2 \text{ [kmol h}^{-1}]$$



METTIAMO TUTTE LE PROVE SUL GRAFICO

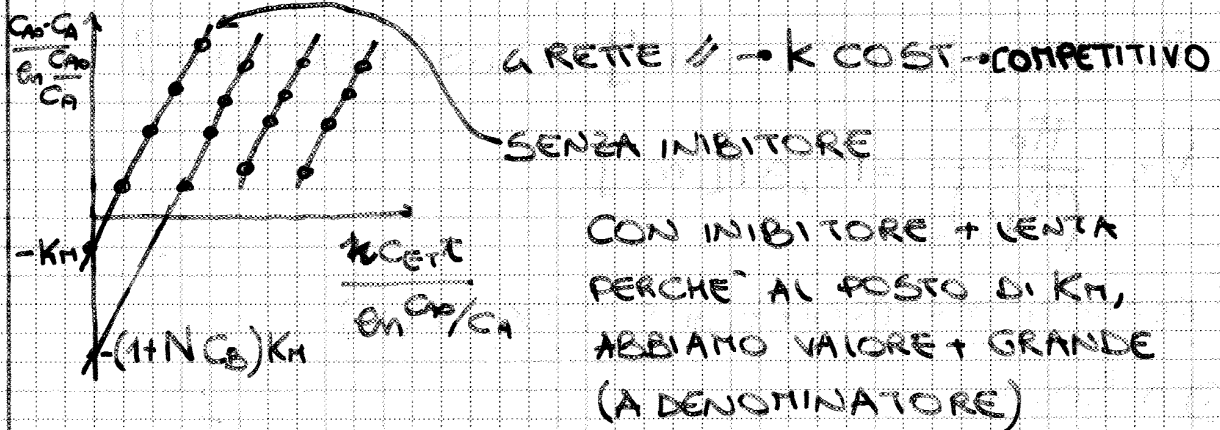
STANNO TUTTE SU UNA RETTA

$k = 1,65 [\text{min}^{-1}] \quad K_M = 2,1 [\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}]$

- 3) SE COMPETITIVA → 1 PARAM.
- SE NON COMPETITIVA → 2 PARAM.

PRENDO ALCUNI PUNTI SULLE CURVE

MI VENGONO 4 RETTE SU:



$$\frac{-(1 + N C_B) K_M}{-K_M} = 1 + N C_B \rightarrow \text{CALCOLO } N$$

LO FACCIAMO X TUTTE 3 LE PROVE CON INIBITORE

$N = 3,53 [\text{m}^3 / \text{mol}]$

$$\frac{k_{CEt}}{k_{CEt}} = \frac{K_M (1 - N C_B) e_n C_A}{k_{CEt}} + \frac{(C_{A0} - C_A)}{k_{CEt}}$$

$$\frac{dC_B}{dt} = R_B = \frac{k C_A C_B}{K_M + C_A}$$

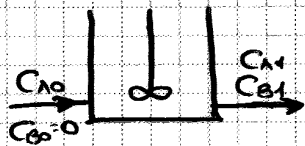
$$kt = \left(1 + \frac{K_M}{C_{A0} + \phi_A C_{B0}}\right) - \frac{K_M}{C_{A0} + \phi_A C_{B0}} \cdot e_n \left(\frac{C_{A0} + \phi_A C_{B0} - \phi_A C_B}{C_{A0}}\right)$$

$$t = 11,72 [R]$$

$$t_{tot} = t + t_m = 13,72 [R]$$

$$\Pi_p = \frac{C_p \cdot V_{rx}}{t + t_m} \rightarrow V_{rx} = \frac{\Pi_p \cdot t_{tot}}{C_p} = 11,63 [m^3]$$

2) CSTR STAZIONARIO



$$\phi_B = \frac{C_{B1}}{C_{A0} - C_{A1}} = 0,0133 \rightarrow \text{VALORE SEMPRE PICCOLO}$$

VALOR MEDIO TRA 16

$$R_{B1} = \frac{k C_{A1} C_{B1}}{K_M + C_{A1}}$$

$$\frac{V_{rx}}{\dot{V}} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{(-R_{A1})} = \frac{C_{B1} - C_{B0}}{R_{B1}} \cdot \frac{\phi_B}{\phi_B} = \frac{K_M + C_{A1}}{k C_{A1}} = \frac{1}{C_{A1}} \cdot \frac{K_M}{k} + \frac{1}{k} = \tau$$

$$\frac{R_{B1}}{C_{B1}} = \frac{k C_{A1}}{K_M + C_{A1}}$$

