



Corso Luigi Einaudi, 55 - Torino

Appunti universitari

Tesi di laurea

Cartoleria e cancelleria

Stampa file e fotocopie

Print on demand

Rilegature

NUMERO: 1068

DATA: 09/09/2014

APPUNTI

STUDENTE: Gemello

MATERIA: Reattori Chimici ed Elettrochimici + temi d'esame + Eserc

Prof. Sicardi

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.**

ESAME → SCRITTO → SICARDI + SPECCHIA
 ↳ ORALE → SICARDI

RICHIAMI

$$R_A = -k C_A$$

↑
VELOCITÀ DI REAZ.

REAGENTE CHIAVE



$$C_A \rightarrow \left[\frac{\text{kmol} \cdot \text{PA}}{\text{m}^3} \right]$$

$$C_A = \frac{n_A}{V}$$

$$W_A \rightarrow \left[\frac{\text{kg}_A}{\text{kg}_{\text{TOT}}} \right]$$

$$W_A = \frac{m_A}{m_{\text{TOT}}}$$

$$W_A = \frac{m_A}{m_T} = \frac{n_A M_A}{m_T}$$

$$\frac{m_T}{V} = \rho$$

$$W_A = \frac{n_A M_A}{\rho V} = \frac{C_A M_A}{\rho} = W_A \leftarrow \text{SE NON VI SONO VARIAZ. DI } \rho$$

CONVERSIONE RELATIVA



$$Z_A = \frac{W_{A0} - W_A}{W_{A0}} \leftarrow \text{CON FRAZ. MASSICHE}$$

$$Z_A = \frac{\frac{C_{A0}}{\rho_0} - \frac{C_A}{\rho}}{\frac{C_{A0}}{\rho_0}} \xrightarrow{\text{SE } \rho = \text{COST.}} Z_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

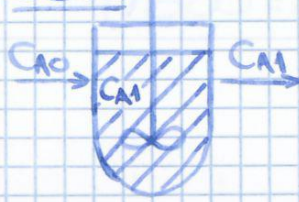
RESA

QUANTO PRODOTTO CHIAVE SI PRODUCE

$$\eta_P = \frac{W_P - W_{P0}}{W_{A0}} \cdot \frac{M_A}{M_P} \cdot \frac{\nu_A}{\nu_P} \leftarrow \text{RAPP. MOLARE STECHIOMETRICO TRA P E A}$$

$$0 < \eta_P < 1$$

CSTR



LA CONC. IN USCITA E' = A QUELLA INTERNA

REATTORI REALI

MONOFASICI → LIQUIDI

NON IDEALI DA PUNTO DI VISTA FLUIDODINAMICO

NON E' A PISTONE O CSTR, AD ESEMPIO NEI PFR BISOGNA CONSIDERARE PROFILO DI VELOCITA' (CHE E' ≠ 0 SUI BORDI)

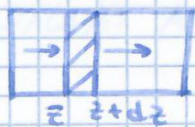
DIFFERENZA DI VOLUME NECESSARIO X PRODUZ. DI P

PARTIAMO DA PFR, CSTR IDEALI

CON CINETICA DEL 1° ORDINE

CONFRONTO TRA 2 REATTORI → PRODUTTIVITA'

PFR



$$V dC_A = R_A dV = -k C_A dV$$

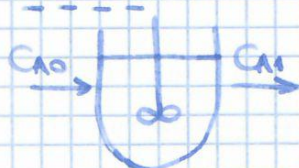
$$\frac{dC_A}{C_A} = -k \frac{dV}{V}$$

$$\frac{dC_A}{C_A} = -k dt$$

$$\ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -k \tau$$

$$k\tau = -\ln(1 - z_A) \quad \text{PISTONE}$$

CSTR



$$\frac{C_{A0} - C_{A1}}{C_{A0}} = \frac{k C_{A1} \tau}{C_{A0}}$$

$$k\tau = \frac{z_{A1}}{1 - z_{A1}} \quad \text{CSTR}$$

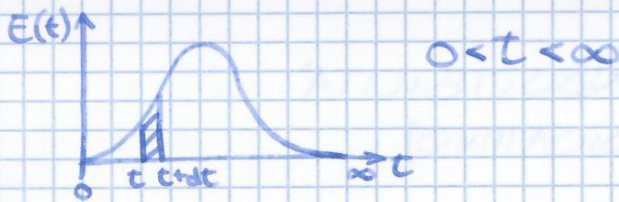
DIVIDO IN TANTI ELEMENTINI, DI CUI OGNUNO STA X UN CERTO TEMPO

QUINDI VALUTIAMO DISTRIBUZ. DEI TEMPI DI PERM.

* DIFFERENZIALE $E(t)$

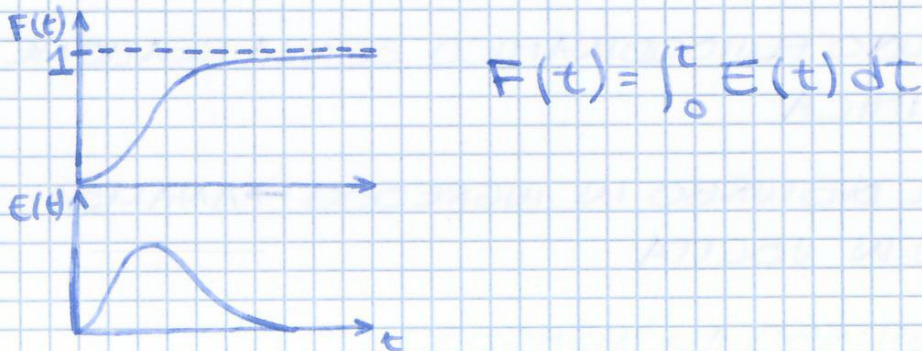
$[E(t)dt] \rightarrow$ % DI PARTICELLE PRELEVATE CHE HANNO TEMPO COMPRESO TRA t E $t+dt$

E' SIMILE A UNA DISTRIBUZ. GRANULOMETRICA



* POSSO ANCHE OTTENERE LA CURVA INTEGRALE:

% DI PARTICELLE CHE HANNO AVUTO UN t DI PERM. COMPRESO TRA 0 E t ; SI INDICA $F(t)$ (E' L'INTEGRALE DELLA CURVA PRECEDENTE)

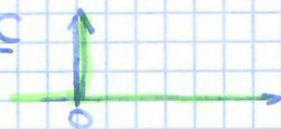


LE CURVE DI DISTRIBUZIONE SONO NORMALIZZATE, CIOE'

$$\int_0^{\infty} E(t) dt = 1$$

QUINDI DO' LA PERCENTUALE

* IMPULSO DIRAC
(TEORICA)



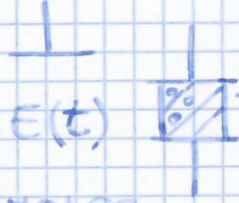
$$\delta(t) = 0 \begin{cases} t < 0 \\ t > 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t) dt = 1$$

che ci vuole

CON LA NOSTRA ANALISI RICOVRO $E(t)$

$t=0$ n_A PRIMA DI $t=0$ NON CE NE SONO, DOPO $t=0$ IN INGRESSO NON CE NE'.

$t=10'$  LE MOLECOLE CHE VEDO, STANNO USCENDO, QUINDI STANNO NEL REATTORE 10 min (POICHE' SONO ENTRATE TUTTI INSIEME A $t=0$)

TUTTE LE MOLEC. CHE INTRODUCO DA $0 < t < \infty$ ESCONO

$$\dot{V} \int_0^{\infty} C_A dt = n_A$$

$$C_A(t) = k E(t)$$

$$\left[\frac{m^3}{s} \right] \left[\frac{mol}{m^3} \right] [s]$$

OPPURE SCRIVO $k C_A(t) = E(t)$

$$\dot{V} \int_0^{\infty} k E(t) dt = n_A$$

$$\dot{V} k \int_0^{\infty} E(t) dt = n_A$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_1$

$$\dot{V} k = n_A$$

$$\frac{1}{k} = \frac{n_A}{\dot{V}} = \int_0^{\infty} C_A(t) dt$$

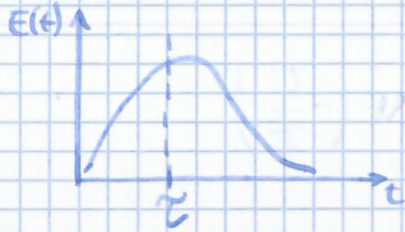
$$\frac{C_A(t)}{\int_0^{\infty} C_A(t) dt} = E(t) = \frac{\dot{V}}{n_A} C_A(t) \quad \text{IMPULSO}$$

$E(t)$ E' DIMENSIONATO: s^{-1} , INFATTI $E(t) dt$ E' ADIMENSIONATO

$$F(t) = \int_0^t E(t) dt$$

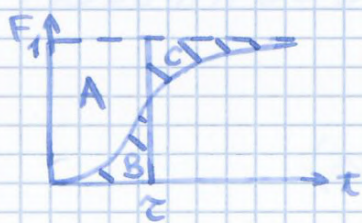
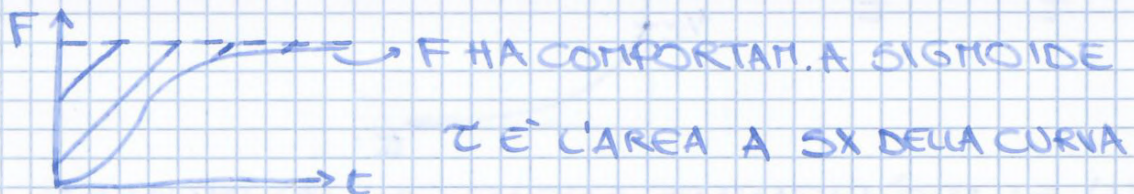
$$E(t) = \frac{dF(t)}{dt}$$

E' ANCHE IL MOMENTO PRIMO DELLA FUNZ. $E(t)$



$$E(t) = \frac{dF}{dt} \quad \tau = \int t E(t) dt = \int t \frac{dF}{dt} dt = \int t dF$$

$$\tau = \int_0^1 t dF$$



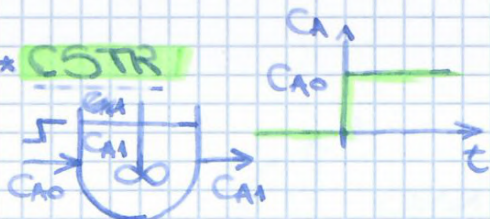
$$\int_0^1 t dF = A + C = \tau = A + B$$

$$A + B = \tau \cdot 1 \quad B = C$$

CALCOLO DELLE RTDF X 2 REATTORI IDEALI

- CSTR
- PFR

* CSTR



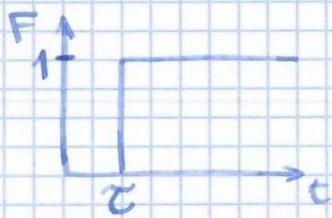
FACCIAMO BILANCIO AL COMP. A

$$V \frac{dC_A}{dt} + \dot{V} C_{A1} - \dot{V} C_{A0} = 0$$

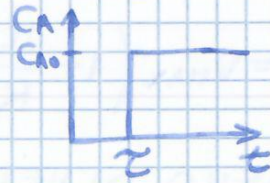
ACCUMULO

COSTANTE NEL TEMPO X $t > 0$

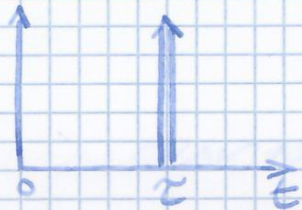
$$\frac{dC_A}{dt} + \frac{\dot{V}}{V} C_{A1} - \frac{\dot{V}}{V} C_{A0} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{dC_{A1}}{dt} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{\tau}$$



$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} = \frac{L \cdot S}{\dot{V} \cdot S}$$

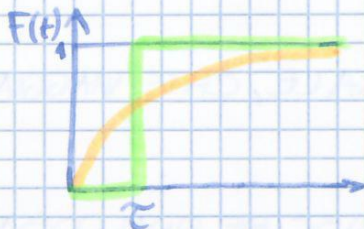


SE INVECE FACCIAMO UN IMPULSO:



È VENUTA UN DIRAC SPOSTATO

IL REATTORE A PISTONE CORRISP. QUINDI A UN RITARDO PURO DI UN TEMPO τ



■ = PISTONE
■ = CSTR

$R_A = k C_{A1}$ → CON PISTONE SI SFRUTTANO MEGLIO I VOLUMI POCHÉ ALL'INIZIO LAVORO CON C_{A0} E NON SOLO CON C_{A1} , COME IN CSTR

REATTORE REALE

REATTORE TUBOLARE IN CUI SCORRE UN FLUIDO IN **REGIME LAMINARE**

(È MOLTO IMPORTANTE IL PROFILO DI VELOCITÀ)

USATO X SOST. MOLTO VISCOSE

↓
PARABOLICO

TRASCURIAMO EFFETTI DI MISCELAZ. DIFFUSIVA

STUDIAMO INFLUENZA DEL PROFILO DI VELOCITÀ SULLA $E(t)$ E $F(t)$

NO MISCELAZ. ASSIEMI TURBOLENTE

$$F(t) = \frac{\int_0^{\tau} C_{A0} \cdot v(r) \cdot 2\pi r \, dr}{C_{A0} \pi R^2 \cdot \bar{v}} = \frac{\int_0^{\tau} 2\bar{v} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) 2\pi r \, dr}{R^2 \bar{v}}$$

$$y = 1 - \frac{r^2}{R^2} \quad dy = \frac{-2r \, dr}{R^2}$$

$$F(t) = \frac{\int_0^{\tau} \underbrace{2 \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)}_y \cdot \underbrace{2\pi r \, dr}_{\frac{R^2}{2} dy}}{R^2 \bar{v}}$$

$$F(t) = - \int_1^y 2y \, dy = F(y)$$

$$F(y) = 1 - y^2$$

DEVO TRASF Y IN T

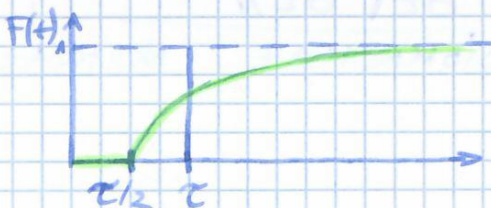
$$t = \frac{L}{v(r)} \rightarrow \text{LEGATO ALLA } v \text{ DEL FILETTO CHE IMPIEGA } t \text{ A CERCORRERE IL REATTORE}$$

$$t = \frac{L}{v(r)} = \frac{L}{2\bar{v} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)} \quad \text{ASSOCIATA ALL'ESTREMO DELL'INTEGRALE}$$

$$t = \frac{L}{2\bar{v} y} \Rightarrow y = \frac{L}{2\bar{v} t} = \frac{\tau}{2t}$$

$$F(t) = 1 - y^2$$

$$F(t) = 1 - \left(\frac{\tau}{2t}\right)^2 \quad \text{PER } t > \frac{\tau}{2}$$



MODELLI FLUIDODINAMICI

- 1) MODELLO DISPERSIONE LONGITUDINALE
- 2) MODELLO CASCATA DI REATTORI

RIFERIM: REATTORE IDEALE A PISTONE

PER $t > 0$

$$\begin{cases} C_{A0} = 0 \\ z \rightarrow \infty \end{cases} \quad \begin{cases} C_A = C_{A0} \\ z \rightarrow -\infty \end{cases}$$

INTRODUCIAMO DUE NUOVE VARIABILI:

$$\xi = \frac{z - \sqrt{L}t}{\sqrt{4D_L t}} \quad C = \frac{C_A}{C_{A0}}$$

$$\frac{d^2 C}{d\xi^2} + 2\xi \frac{dC}{d\xi} = 0 \rightarrow \text{SOLUZIONE: ERROR FUNCTION}$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = F(t, z) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z - \sqrt{L}t}{\sqrt{4D_L t}} \right) \right]$$

A NOI INTERESSA COSA SUCCEDERE A $z=0$

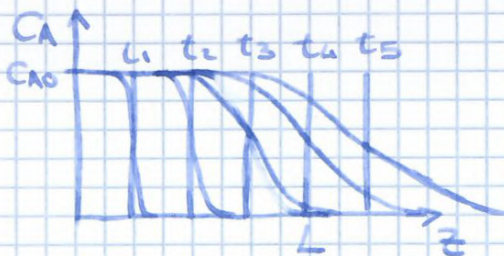
$$\frac{C_A}{C_{A0}} = F(t) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{L}{D_L}} \sqrt{\frac{t}{\tau}} \right) \right]$$

ADIMENSIONATO

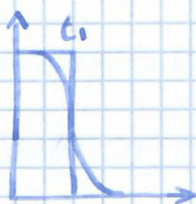
$$\left[\frac{\left(\frac{m}{s} \right) m}{\left(\frac{m^2}{s} \right)} \right]$$

$$Pe = \frac{\sqrt{L}}{D_L}$$

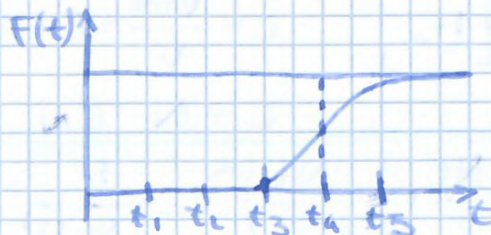
PECLET



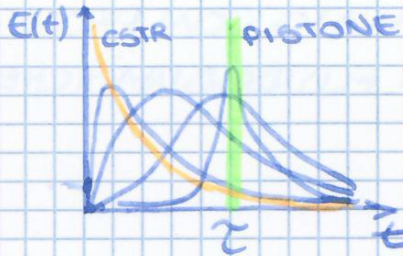
SONO DELLE SIGMOIDI
SEMPRE + SPANCIATE
(IL FLUIDO SI MISCHIA
SEMPRE DI +)



DOMANDA D'ESAME: COME RICOVO F(t)?



$$E(t) = \frac{N}{\tau} e^{-\left(\frac{Nt}{\tau}\right)} \frac{1}{(N-1)!} \left(\frac{Nt}{\tau}\right)^{N-1}$$



$$E(\theta) = \frac{N^N \theta^{N-1}}{(N-1)!} e^{-N\theta}$$

CON $\theta = \frac{t}{\tau}$

$$N = \left(\frac{\frac{\bar{V}}{2 D_L}}{\tau} \right) \leftarrow \text{SE } N > 10$$

SE $N > 10$ (AD ESEMPIO SE $N = 15$) LE DUE CURVE SONO QUASI IDENTICHE

D_L DISPERSIONE LONGITUDINALE
 N CASCATA DI REATTORI MISCELATI

DATI SPERIMENTALI



VARIANDO D_L , TROVO QUELLO CHE DA IL MINIMO SCARTO QUADRATICO MEDIO (CONTINUO)

OPPURE VARIO N ALLO STESSO MODO, INTERO, SEMPRE BASANDOMI SUL MINIMO SCARTO QUADRATICO MEDIO

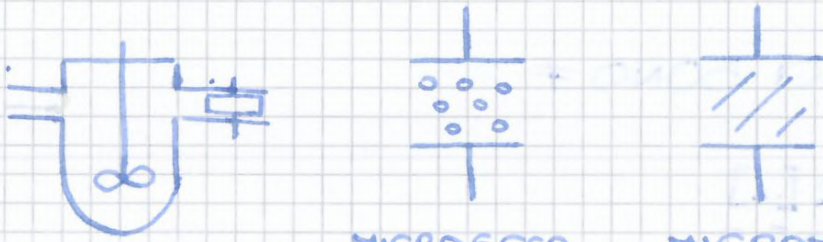
RICAVO QUINDI D_L E N OTTIMALI

REATTORE REALE



POSSO RICAVARE Z_A , UTILIZZANDO D_L O N

* SE HO USATO MODELLO D_L , CONSIDERO UN REATTORE CHE CONSIDERA DISPERS. LONGIT.



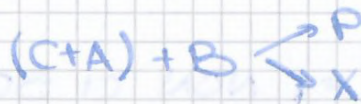
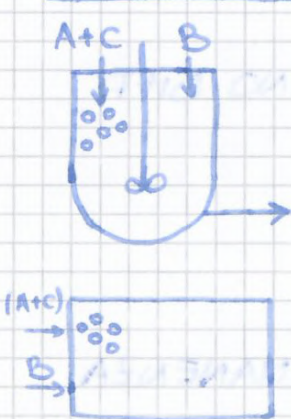
MICROSEGR. MICROMIX

HANNO CINETICHE \neq

ORA ABBIAMO SIA LE DEVIAZIONI DALL'IDEALITA',
SIA DIFFERENZE MICROSEGREGAZ./MICROMIX
(ANCHE SE HANNO LA STESSA $F(t)$)

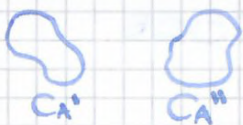
E' IMPORTANTE IN REAZ. MOLTO VELOCI

ALTRI CASI:



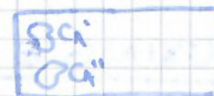
C'E' UN FENOMENO INIZIALE ^{DI} SEGREGAZ.
DI A+C, CHE SI DEVE POI MISCELARE
IN B (IN ECCESSO)

↳ SI OTTENGONO RISULTATI MOLTO
 \neq SE SONO PRESENTI REAZ.
MOLTO VELOCI

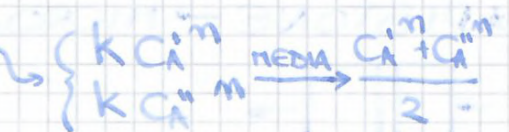


2 VOLUMETTI DI = VOLUME

1) CASO ELEMENTI SEGREGATI
(NON SI MESCOLANO)



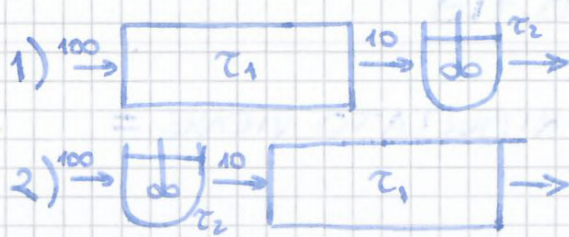
SE REAZIONI DI ORDINE n



2) CASO ELEM. MICROMISCELATI

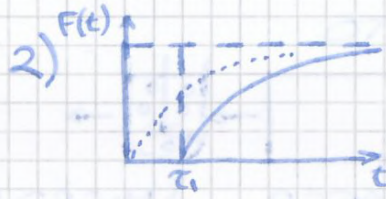
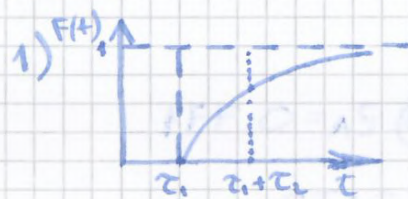


PARADOSSO DI KRAMERS



$$R_A = -k C_A^2$$

RTDF



LE 2 CURVE $F(t)$ SONO VENUTE IDENTICHE

MA:

- 1) PRIMA MICROSEGR POI MICROMIX
- 2) PRIMA MICROMIX POI MICROSEGR.

NEL 1° REATTORE LAVORO AD ALTA CONCENTRAZ.,
POI NEL 2° REATT " " " BASSA " "

$$\frac{(100+50)^2}{2} = 5625 \text{ MIX ALTA CONC. (A)}$$

$$\frac{100^2 + 50^2}{2} = 6250 \text{ SEG. ALTA CONC. (B)}$$

$$\frac{(10+5)^2}{2} = 56,25 \text{ MIX BASSA CONC. (C)}$$

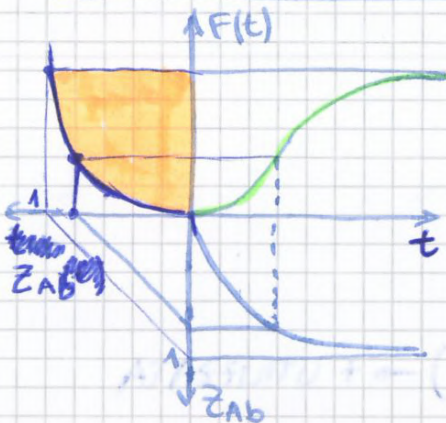
$$\frac{10^2 + 5^2}{2} = 62,50 \text{ SEG. BASSA CONC. (D)}$$

$$1) (6250) \rightarrow 56,25$$

$$2) (5625) \rightarrow 62,50$$

NEL 1° UNO GUADAGNO DI
T E PERDO DI MENO,
QUINDI
CONVERSIONE (1) > (2)

METODO GRAFICO DI SCHOENEMAN-HOFFMANN



$$R_A = -kC_A^2 \text{ (ES)}$$

$$\frac{dC_A}{dt} = R_A$$

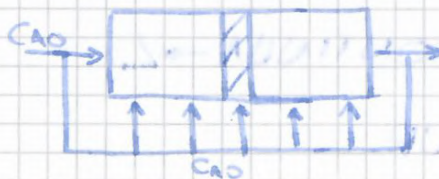
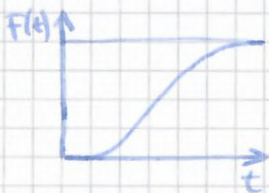
$$\bar{z}_A = \int_0^1 z_{Ab}(F) dF$$

1) COMPLETA MICROSEGREGAZIONE

$$\bar{z}_A = \int_0^\infty z_{Ab}(t) E(t) dt \begin{matrix} \rightarrow \text{VIA ANALITICA} \\ \rightarrow \text{VIA GRAFICA} \end{matrix}$$

2) MASSIMA MICROMISCELAZIONE

ZWIETERING



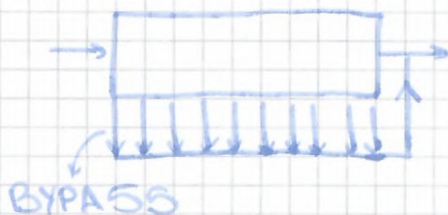
$$\bar{z}_{A, \text{MIX}} \text{ (MIN) x (MAX)}$$

CORRENTI LATERALI $\rightarrow F(t)$ NEL REATTORE

TUTE LE CORRENTI ENTRANO CON MAX CONC. C_{A0} DOSATE

IN OGNI ELET. $(z, z+dz)$ AVVIENE MISCELAZIONE A LIVELLO MICROSCOPICO DEL FLUIDO IN INGRESSO CON QUELLO VECCHIO

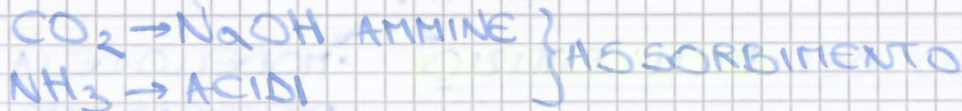
1) X LA COMPLETA MICROSEGREGAZIONE:



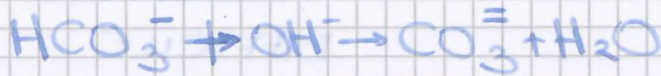
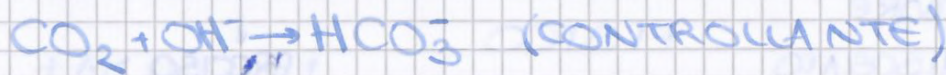
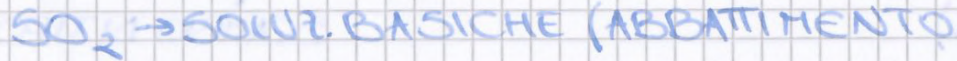
(NON C'E' MISCELAZ.)

$$\text{RICOVO } \bar{z}_{A, \text{SEGR}} \text{ (MAX PER MAX)}$$

ESEMPLI:



CLORURAZ. BENZENE

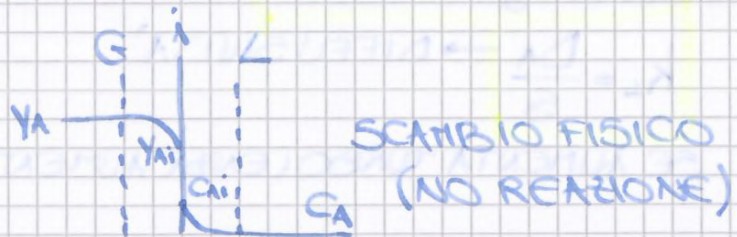


$\underbrace{\text{CO}_2}_A + 2 \underbrace{\text{OH}^-}_B \rightarrow \text{CO}_3^{2-} + \text{H}_2\text{O}$
 $v_A = 1 \quad v_B = 2$

TRASFERIMENTO DI MATERIA IN PRESENZA DI REAZIONE CHIMICA GAS-LIQUIDO

A - CO_2
B - OH^-

ASSORBIMENTO



INTERFACCIA \rightarrow EQUILIBRIO TERMODINAMICO

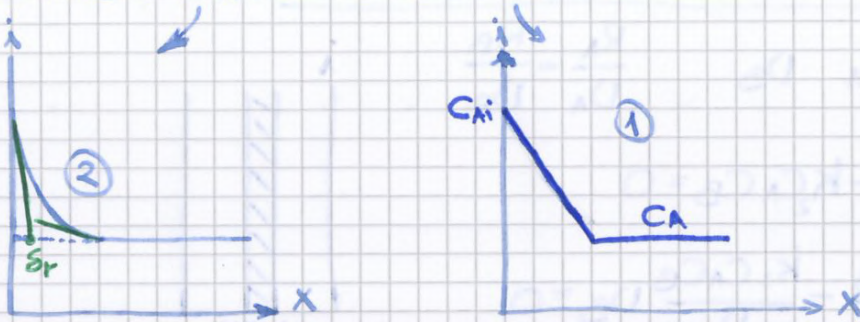
✓ AFFRONTARE REAZIONE CHIMICA BISOGNA USARE UN MODELLO: (REAZ. IN FASE LIQUIDA)

MODELLI DI TRASPORTO DI MATERIA NELLA FASE LIQ:
LIQ E GAS IN CONDIZ. DI TURBOLENZA

LIQUIDO \rightarrow SCAMBIO MATERIA ATRAVERSO UN COEFF. DI SCAMBIO E UNA FORZA SPINGENTE

SENZA REAZ. CHIMICA $\rightarrow J_A \rightarrow$ FLUSSO DI MATERIA
 $[k_{mol} c_A / (s \cdot m^2)]$

SE CONFRONTIAMO A PARITÀ DI F. SPINGENTE
TRA CASO CHIMICO E FISICO:



$(J_{Ai})_p \rightarrow$ FISICO ①
 $(J_{Ai})_c \rightarrow$ CHIMICO ②

$$J_{Ai,p} = -D_A \left(\frac{dC_A}{dx} \right)_{x=0}$$

$$J_{Ai,c} = -D_A \left(\frac{dC_A}{dx} \right)_{x=0}$$

$$\left(\frac{dC_A}{dx} \right)_p = \frac{C_{Ai} - C_A}{\delta_r} \text{ FISICO}$$

$$\left(\frac{dC_A}{dx} \right)_c = \frac{C_{Ai} - C_A}{\delta_r} \text{ CHIMICO}$$

$$\frac{(J_{Ac})}{(J_{Ap})} = \frac{\delta}{\delta_r} \gg 1$$

IN PRESENZA DI REAZ. CHIMICA, A PARITÀ DI F. SPING.

$(J_{Ai})_c = \frac{\delta}{\delta_r} (J_{Ai})_p$ AMPLIFICAZIONE DELLO SCAMBIO
 $k_L \uparrow$ GRANDE

$$J_{Ac} = k_L \left(\frac{\delta}{\delta_r} \right) (C_{Ai} - C_A)$$

AUMENTO DEL COEFF. DI SCAMBIO

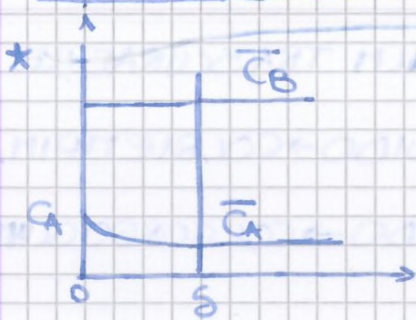
E_A ENHANCEMENT FACTOR

$(E_A \cdot k_L)$ INVECE DI (k_L)
 CHIMICO FISICO

$E_A > 1$

INOLTRE LA REAZIONE CHIMICA ABBASSA ANCHE LA C_A QUINDI + FORZA SPINGENTE ($C_A \rightarrow 0$)

CASI SEMPLIFICATI



REAZIONE PSEUDO 1° ORDINE

ECCESSO DI B

\bar{C}_B NON CAMBIA

$C_B = \bar{C}_B = \text{CONST.}$

$k_2 \bar{C}_B = k_1$ PSEUDO 1° ORDINE

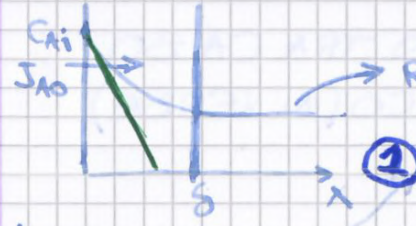
VARIA SOLO C_A QUINDI

$D_A \frac{d^2 C_A}{dx^2} - k_1 C_A = 0$

HATA 1° ORDINE: $\phi = s \sqrt{\frac{k_1}{D_A}}$

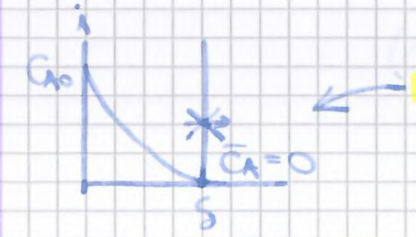
$\frac{C_A}{C_{Ai}} = \left[\frac{\bar{C}_A}{C_{Ai}} - \text{ch}(\phi) \right] \frac{1}{\text{sh}(\phi)} \text{sh}(\phi \frac{x}{s}) + \text{ch}(\phi \frac{x}{s})$

$J_{A0} = -D_A \left(\frac{dC_A}{dx} \right)_{x=0} = \frac{D_A}{s} \left(\frac{\phi}{\text{th}(\phi)} \right) \left(C_{Ai} - \frac{\bar{C}_A}{\text{ch}(\phi)} \right)$



REAZIONE PSEUDO 1° ORDINE

② REAZIONE VELOCE SE AVVIENE TUTTA ENTRO IL FILM, E QUESTO CAPITA $\phi > 2$



$\bar{C}_A = 0$

TANGENTE A $x=s$ E' = 0

② REAZIONE LENTA PER $\phi < 0,3$



RETTILINEO → COME CASO ASS. FISICO

$E_s = 1$

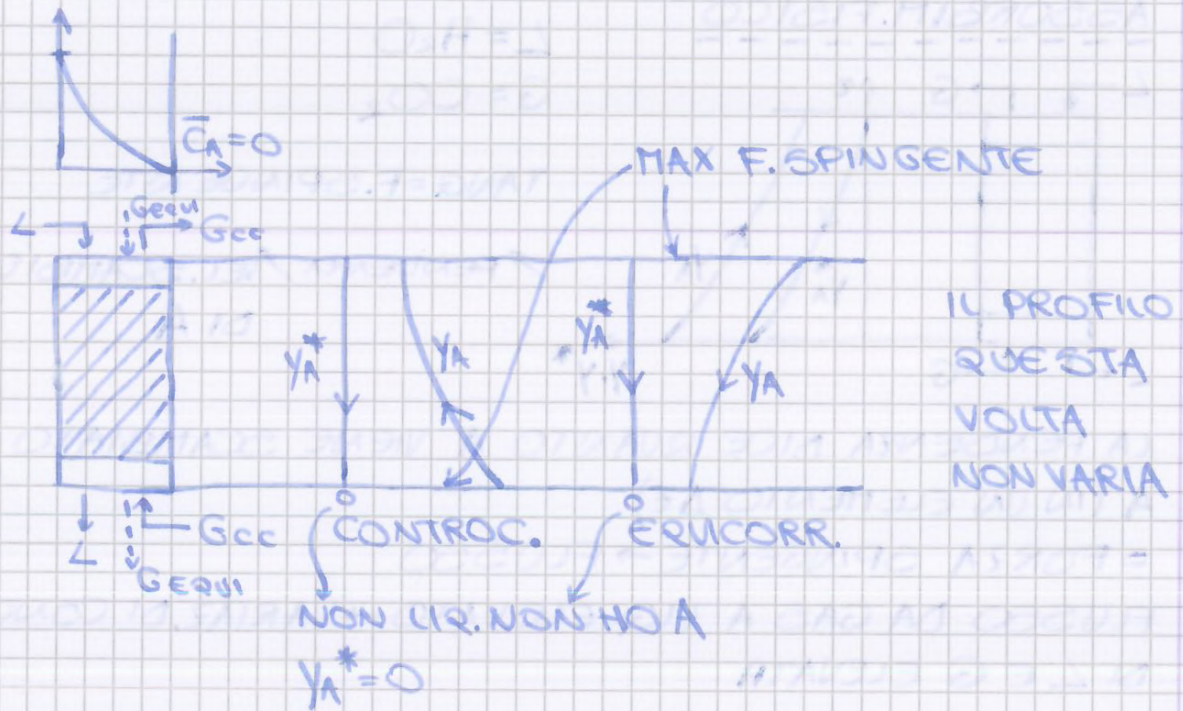
(REAZ. NEL FILM TRASCURABILE)

LE CONSIDERAZ. FATTE X ② E ③ VALGONO ANCHE X REAZ. ≠ DA PSEUDO-1° ORDINE

IN CONTROCORRENTE MIGLIORE ← + F. SPINGENTE

ASSORBIM. CON REAZ. CHIMICA

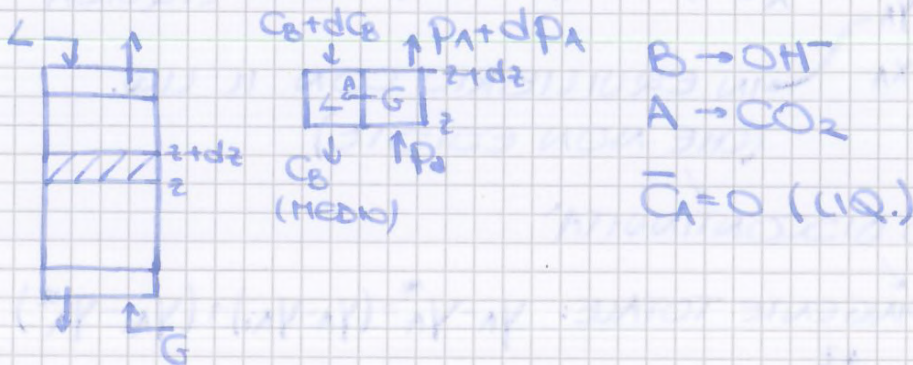
$\phi > L$ $\bar{C}_A = 0$ (CONC. DI A NELLA FASE LIQ. NULLA)



COLONNA DI ASSORBIM. CON REAZ. CHIMICA

CONTROCORRENTE

REAZ. VELOCE



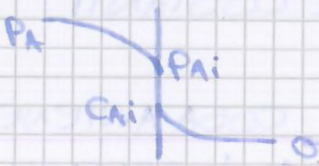
BILANCI (6 EQUAZ.) IN CONDIZ. STAZIONARIE

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

$$[P_A - P_{Ai} + P_{Ai}] = |R_A| \left\{ \frac{RT}{K_G a} + \frac{RTm}{K_L a E_A} \right\}$$

$$\left(\frac{P_A}{RT} \right) = |R_A| \left\{ \frac{1}{K_G a} + \frac{m}{K_L a E_A} \right\} \text{ RESIST. IN SERIE}$$

$(P_A - 0) = F. \text{ SPINGENTE TOTALE}$



$$4) -V \frac{dP_A}{RT} = |R_A| S dz$$

↳ DIMENS. COLONNA

$$5) |R_A| = \frac{P_A}{RT} \left(\frac{1}{\frac{1}{K_G a} + \frac{m}{K_L a E_A}} \right)$$

$$6) E_A = f(\phi, E_A^*)$$

$\bar{C}_B = \text{CUORE DE LIQ. (NON SI TRASFERISCE NEK GAS)}$

P_{Ai}

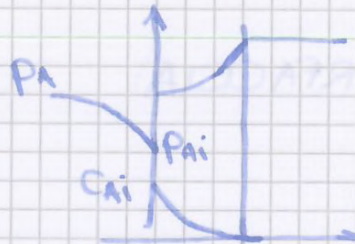
P_A

C_{Ai}

E_A

$|R_A|$

6 INCOGNITE



$$-V_G \frac{dP_A}{RT} = \frac{P_A}{RT} \frac{S dz}{\left(\frac{1}{K_G a} + \frac{1}{K_L a E_A} \right)} = \frac{1}{K_0} S dz \quad \leftarrow G^* \text{ NELLA } S^*$$

$$\frac{1}{K_0} \Rightarrow \frac{1}{K_G a} + \frac{1}{K_L a E_A} \rightarrow \text{FUNZ. DELLE CONC.} \rightarrow E_A = f(\phi, E_A^*)$$

$$\int_{P_{A1}}^{P_{A2}} \frac{dP_A}{P_A K_0} = - \frac{S}{V_G} \int_0^z dz = - \frac{S z}{V_G}$$

PROGETTAZIONE

SI PARTE DAL MICROSCOPICO X ARRIVARE AL MACRO
CINETICA ALL'INTERNO DELLA PARTIC. CATALITICA



A+B FORMATA X SINTERIZZAZIONE

POROSITA' INTERNA $\epsilon_i = \frac{V_{VUOTO}}{V_{PARTICELLA}}$

5 mm

LA REAZ. AVVIENE ANCHE FUORI,
MA LO TRASCURIAMO



GAS-SOLIDO (CAT.)

ALL'INTERNO MOTO DIFFUSIVO
ALL'ESTERNO C'E' TURBOLENZA, QUINDI
E' CONVETTIVO

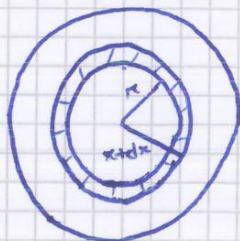
PARTICELLA → PSEUDOMOGENEA

LA CONSIDERIAMO OMOGENEA, MA CON DIFFUSIVITA'
INTERNA ≠

SE A REAGENTE CHIAVE, D_A DIFFUSIVITA' LIBERA
DI A NEL GAS, MENTRE ALL'INTERNO D_e (DIFFUS.
EFFETTIVA ALL'INTERNO DELLA PARTICELLA)

$D_e = \frac{D_i \epsilon_i}{\tau} \rightarrow \epsilon_i < 1$
 $\tau \rightarrow$ TORTUOSITA' $\rightarrow \tau > 1$

SFERA



ISOTERMO
STAZIONARIE

$\frac{d}{dr} \left(-D_e \frac{dC_A}{dr} \cdot 4\pi r^2 \right) d\tau = R_A' \cdot 4\pi r^2 d\tau$

$-D_e \frac{d}{dr} \left(\frac{dC_A}{dr} \cdot r^2 \right) - R_A' r^2 = 0$

RIFERITO AL
VOLUME PARTIC.
(CAT.)

$$\frac{C_A}{C_{Ai}} = \frac{K_1}{R} C_R \left(\psi \frac{R}{R} \right) + \frac{K_2}{R} S_R \left(\psi \frac{R}{R} \right)$$

$K_1, K_2 = ?$

$\left\{ \begin{array}{l} R \rightarrow 0 \\ C_A \text{ NON DEVE ANDARE A } \infty \end{array} \right.$

SE $R \rightarrow 0$ $C_R \left(\psi \frac{R}{R} \right) \rightarrow 1$

MA, ANDANDO $R \rightarrow 0$, $\frac{C_A}{C_{Ai}} = \frac{K_1 \cdot 1}{R \rightarrow 0} \Rightarrow K_1 = 0$

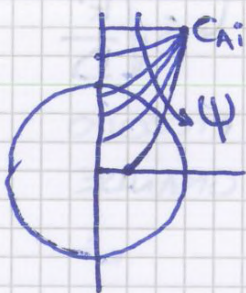
$\left\{ \begin{array}{l} R = R \\ \frac{C_A}{C_{Ai}} = 1 = K_2 \cdot \frac{1}{R} S_R(\psi) \Rightarrow K_2 = \frac{R}{S_R(\psi)} \end{array} \right.$

SI OTTIENE QUINDI:

$$\frac{C_A}{C_{Ai}} = \frac{R}{R} \frac{S_R \left(\psi \frac{R}{R} \right)}{S_R(\psi)}$$

REAZ. DEL 1° ORDINE
ISOTERMO

EFFECTIVENESS DELLA PARTICELLA



$$\psi = R \sqrt{\frac{k_1'}{D_e}}$$

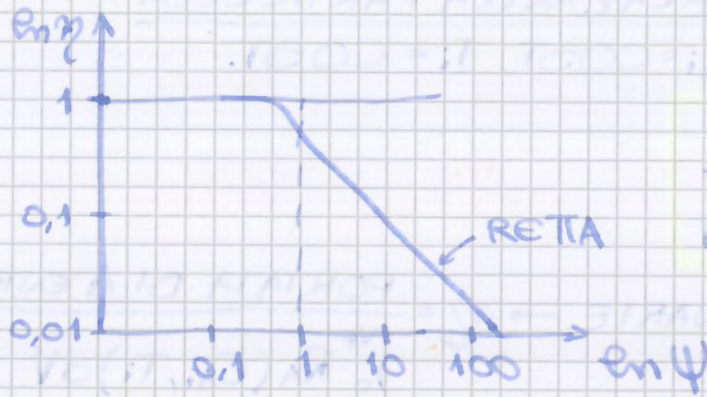
THIELE

SE ψ PICCOLO IL PROFILO E' QUASI PIATTO

BISOGNA PROGETTARE CATALIZZATORE IN BASE A ψ
(X SFRUTTARE TUTTA LA PARTICELLA)

EFFICIENZA DELLA PARTICELLA

VOGLIO UN PARAMETRO FUNZIONE DELLE CONDIZ.
ALL'INTERFACCIA



PER $\psi > 10 \Rightarrow \epsilon R(\psi) \approx 1$ (TRASCURO C'1)

$$\eta \approx \frac{3}{\psi^2} \Rightarrow \psi = \frac{3}{\eta}$$

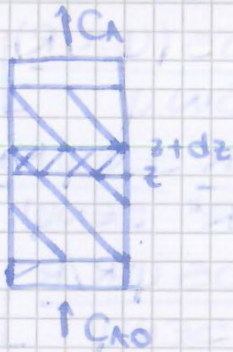
$$\log \eta = \log 3 - \log \psi \quad [y = c - x]$$

= RETTA CON PENDENZA -1

MI DA L'EFFETTIVO UTILIZZO DI UNA PARTICELLA

PROGETTO DEL REATTORE ISOTERMO A LETTO

FISSO

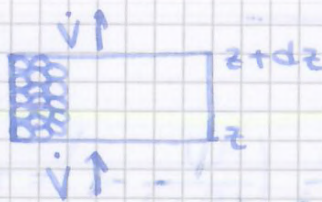


MACROKINETICA

↓
ELEMENTO INFINITESIMO MA +
GRANDE DELLA PARTICELLA
(MICROKINETICA)

HO LE PARTICELLE NELLE
STESSE CONDIZIONI

BILANCI:



GAS FLUISCE
PARTICELLE FERME

- 1) $\dot{V} dC_A = R_A S dz \rightarrow$ MACROKINETICA
- 2) $k_g \alpha (C_A - C_{Ai}) = |R_A| \rightarrow$ MICROKINETICA
- 3) $k' C_{Ai} \eta (1 - \epsilon_0) = |R_A|$
- a) $\eta = f(\psi)$

$C_A, C_{Ai}, R_A, \eta \rightarrow 4$ INCOGNITE

$$(C_A - C_{Ai} + C_{Ai}^3) = |R_A| \left[\frac{1}{k_g \alpha} + \frac{1}{k' \eta (1 - \epsilon_0)} \right] = |R_A| \cdot \frac{1}{K_0}$$

$$\frac{1}{K_0} = \frac{1}{k_g \alpha} + \frac{1}{k' \eta (1 - \epsilon_0)}$$

COSTANTE LUNGO IL REATT. \rightarrow

- $\dot{V} \approx \text{COST} \rightarrow k_g \approx \text{COST}$
- $k' = f(T) = \text{COST} \leftarrow \text{ISOT.}$
- $(1 - \epsilon_0) = \text{COST} (= \text{CATAL.})$
- $\eta = k'/D_e = \text{COST.}$

$|R_A| = K_0 C_A \sim$ REAZ. 1° ORDINE

$$\dot{V} dC_A = -K_0 C_A S dz$$

$$\frac{dC_A}{C_A} = -\frac{K_0 S}{\dot{V}} dz \rightarrow \ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -\frac{K_0 S}{\dot{V}} z$$

ALTEZZA

= VALORI I/O DI CONC.

$K_0 \rightarrow$ E' UNA COSTANTE CINETICA? DIPENDE (DEL 1° ORDINE)

HO 2 SITUAZIONI IN SERIE DIFFUSION + REAZIONE (CINETICA)

\rightarrow REAZIONI LENTE: $K_0 \approx k' \eta (1 - \epsilon_0) \rightarrow$ CINETICA CONTROLLANTE

\rightarrow REAZIONI VELOCI: $K_0 = k_g \alpha \rightarrow$ IL TRASPORTO DI MATERIA E' CONTROLL.

CONVERSIONE NON LEGATA ALLA CINETICA
MOLI SI CONVERTONO X TRASP

$$+k_e(T_o - T_i) = De(-\Delta H_r) (C_{Ai} - C_{Ao})$$

$>0 \qquad \qquad >0 \qquad \qquad >0$

$$k_e \frac{T_o - T_i}{T_i} = De(-\Delta H_r) \frac{C_{Ai} - C_{Ao}}{C_{Ai}} \cdot C_{Ai}$$

$$\left(\frac{T_o - T_i}{T_i} \right) \cdot \frac{C_{Ai}}{C_{Ai} - C_{Ao}} = \frac{De C_{Ai}}{T_i k_e} (-\Delta H_r)$$

$\beta =$ NUMERO DI PRATER [ADIMENS]

DA UN'IDEA DEL TRASPORTO DI MATERIA RISPETTO AL TRASPORTO DI CALORE

SERVE A TROVARE η (EFFECTIVENESS)

SI RISOLVONO NUMERICAMENTE, ANCHE NEL CASO DEL PRIMO ORDINE

$$R_A' = k'(T) C_A$$

$\hookrightarrow k_o e^{-E/RT}$

È DEI RISULTATI SOTTO FORMA DI GRAFICI

$\eta \rightarrow$ PARAMETRI NEL CASO DI REAZIONI NON ISOTERME

1° ORDINE - NON ISOTERMO

$\eta = f$ (NUM. ADIMENSIONATI CALCOLATI ALLE CONDIZ. DI INTERFACCIA)

$$* \psi = R \sqrt{\frac{k'(T_i)}{De(T_i)}}$$

$$* \beta = \frac{De C_{Ai} (-\Delta H_r)}{T_i k_e} = \text{NUMERO DI PRATER}$$

$$* \gamma = \text{NUM. ARRHENIUS} = \frac{E}{RT_i}$$

$$\eta = f(\psi, \beta, \gamma)$$

REAZIONE ISTANTANEA

CATALIZZ. MOLTO EFFICIENTE

LA REAZ. AVVIENE SOLO SULLA SUPERFICIE

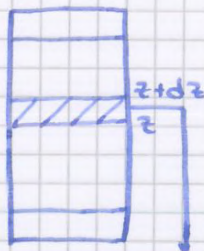


$$C_{Ai} = 0$$

SEMPLIFICAZ.: NO PROFILI INTERNI
NO η

DENTRO IL CATALIZZAT. LA REAZ. NON AVVIENE

NELLA PARTIC. NO REAZ. = NO GENERAZ. Q = T COSTANTE



REATT. ADIABATICO A LETTO FISSO

REAZ. ESOTERMICA ($\Delta H_{rx} < 0$)

REAZ. VELOCISSIMA \rightarrow SVILUPPI TERMICI ELEVATI

MACROKINETICA

ρ NON COSTANTE

\dot{V} VARIA [m^3/s] LUNGO Z

$$A_1) d(\dot{V}C_A) = R_A S dz$$

$< 0 \quad < 0$

$$d\left(\dot{V} \frac{C_A \rho}{\rho}\right) = \dot{V}_m \left(\frac{dC_A}{\rho}\right)$$

PER $\dot{V}_p = \dot{V}_m$ E LA PORTATA MASSICA NON VARIA

$$\dot{V}_m \left(\frac{dC_A}{\rho}\right) = R_A S dz$$

$$A_2) \text{BILANCIO TERMICO: } \dot{V}_m C_p dT = -R_A (-\Delta H_{rx}) S dz$$

$> 0 \quad < 0 \quad < 0$

Q SENSIBILE \rightarrow Q GENERATO

MICROKINETICA

$$B_1) -R_A = k_g a (C_A - C_{Ai}) = k_g a C_A$$

COEFF. TRASPORTO
CINETICA CONTROLL. (CONTROLLO SCAMBIOAL.)
Q SULLA SUP \rightarrow

$$B_2) \text{TRASP. LOCALE Q: } R_A (-\Delta H_{rx}) = h a (T_i - T) \rightarrow \text{F. SPING.}$$

$$A2) \dot{V}_m C_p dT = - \underbrace{\dot{V}_m d\left(\frac{C_A}{\rho}\right)}_{R_A \text{ DA A1)}} (-\Delta H_{RA})$$

COST, VARIA POCO CON T
[kcal/m³ / kmol/m³]

$$C_p(T-T_0) = \left(\frac{C_{A0}}{\rho_0} - \frac{C_A}{\rho}\right) (-\Delta H_{RA})$$

$$C_p(T-T_0) = \frac{C_{A0}}{\rho_0} \left(1 - \frac{C_{A0}\rho_0}{C_{A0}\rho}\right) (-\Delta H_{RA})$$

$$T-T_0 = \left\{ \frac{C_{A0}}{\rho_0 C_p} (-\Delta H_{RA}) \right\} \left(1 - \frac{P_A}{P_{A0}}\right)$$

!! MASSICO !!

$$\Delta T_{add} \rightarrow (-\Delta H_{R0}) C_{A0}$$

[°C]

Q GENERAZ. X

REAZIONE TOT. C_{A0}

↳ SCALDA LA PORTATA $\dot{V}_m \rho_0$ CHE ENTRA

↳ AUMENTO MAX DI T

$$T_0 - T_{MAX}^* = -\Delta T_{add}$$

$$T-T_0 = \Delta T_{add} \left(1 - \frac{P_A}{P_{A0}}\right)$$

CON ρ_0 INGRESSO

Q DALLA PARTIC. ALL'ESTERNO

$$Q_R(T_i - T) = \frac{K_G a C_A (-\Delta H_{RA}) C_{A0} \rho_0 (C_p \rho)}{\rho_0 C_p C_{A0}} \quad (B_1) + (B_2)$$

$$T_i - T = \left[\frac{K_G a}{P_A a} (\rho C_p) \right] (\Delta T_{add}) \left(\frac{P_A}{P_{A0}} \right)$$

$K_G a$ E $P_A a$ HANNO U.M. ≠, DIVENTA ADIM. CON (ρC_p)

$$\frac{K_G a}{P_A a} = \frac{\left[\frac{m \cdot l}{s \cdot m} \right]}{\frac{1}{s}} = \frac{1}{\text{TEMPO DI SCAMBIO DI MATERIA}}$$

$$\frac{K_G a}{P_A a} \frac{\rho C_p}{\rho C_p} = \frac{\frac{k_{ca} \rho}{m^2 \cdot s} \cdot \frac{m^3}{m^3}}{\frac{k_{ca} \rho}{kg \cdot ^\circ C} \cdot \frac{kg}{m^3}} \rightarrow \frac{1}{s} = \frac{1}{\text{TEMPO DI SCAMBIO TERMICO}}$$

COSTRUZ. OTTENUTA XKE' I TRIANG. SONO \approx

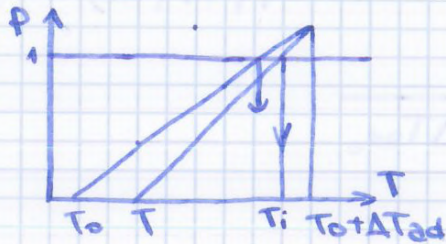
CONSIDERAZIONI:

1) $Le < 1$ $T_i > T_o + \Delta T_{ad}$ (AFFINCHE AVVENGA SCAMBIO E' NECESSARIO $T_i > T$)

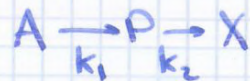
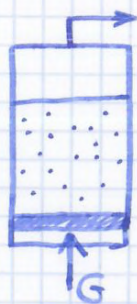
2) T_i MASSIMA SI TROVA ALL'INGRESSO, POICHE' C_A ALTO, QUINDI C'E' TANTO TRASP. DI MATERIA E LA TEMP. SALE (IL Q SI TRASP. MENO VELOCEM.)

3) RISCHIO $T_i \nearrow$, CON SINTERIZZAZ. CATALIZZATORE

SE INVECE $Le > 1$



REATT. CATALITICO A LETTO FLUIDIZZATO



$$k_1 = k_1' (1 - \epsilon_0)$$

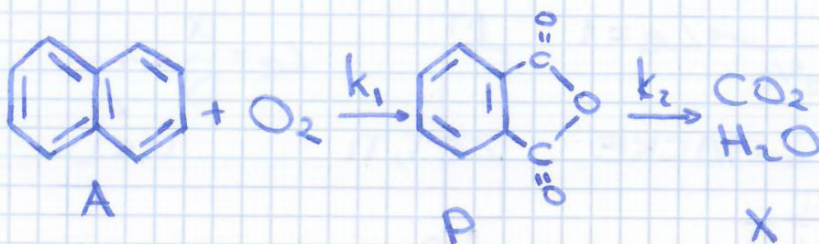
CINETICA 1° ORDINE

$$\left\{ \eta = 1 \right.$$

CONTROLLO CINETICO

REATTORE PERFETTAM. MISCELATO

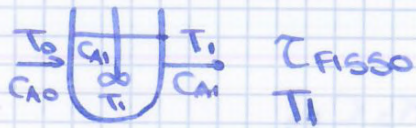
ES INDUSTRIALE: OSSIDAZ. NAFTALINA



(SE HO SOLO 1 REAZ.)
 $(z_A = \eta_P \quad \sigma_P = 1)$

$$\eta_P = \sigma_P z_A \rightarrow \sigma_P = \frac{\eta_P}{z_A}$$

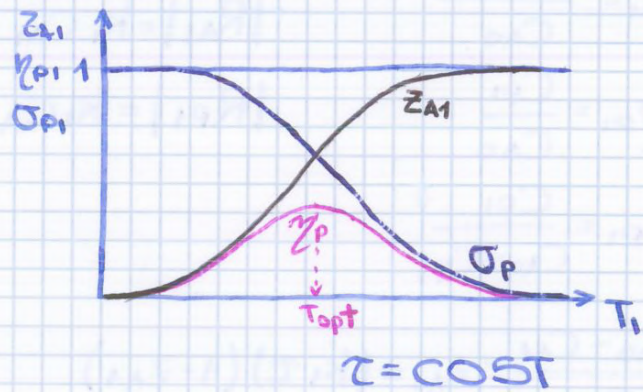
$$\sigma_P = \frac{k_1 \tau (1 + k_1 \tau)}{(1 + k_1 \tau)(1 + k_2 \tau) k_1 \tau} = \frac{1}{1 + k_2 \tau}$$



$$z_{A1} = \frac{k_{100} e^{-E_1/RT} \tau}{1 + k_{100} e^{-E_1/RT} \tau}$$

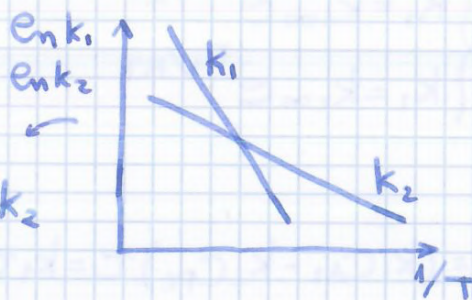
$$\sigma_P = \frac{1}{1 + k_{200} e^{-E_2/RT} \tau}$$

$$\eta_{P1} = z_{A1} \cdot \sigma_P$$

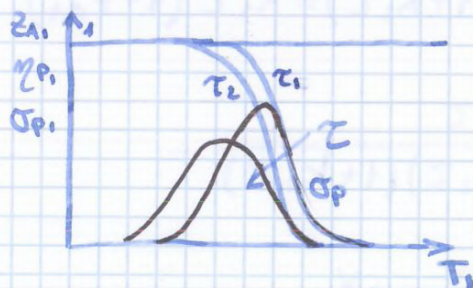


*SE $E_1 > E_2$

A T ALTE
 k_1 PREVALE SU k_2



VARIARE IL TEMPO τ



τ_1 η_P ALTA (T ALTE)

τ_2 η_P BASSA (T BASSE)

$$\frac{C_{x1}}{C_{A0}} = z_{A1} - \eta_{P1}$$

(REAZ. ESOTERM.)

$$\dot{Q}'_g = \eta_{P1} \left(\frac{-\Delta H_{rp}}{-\Delta H_{rp} - \Delta H_{rx}} \right) + z_{A1} - \eta_{P1}$$

< 1 ASINTOTO

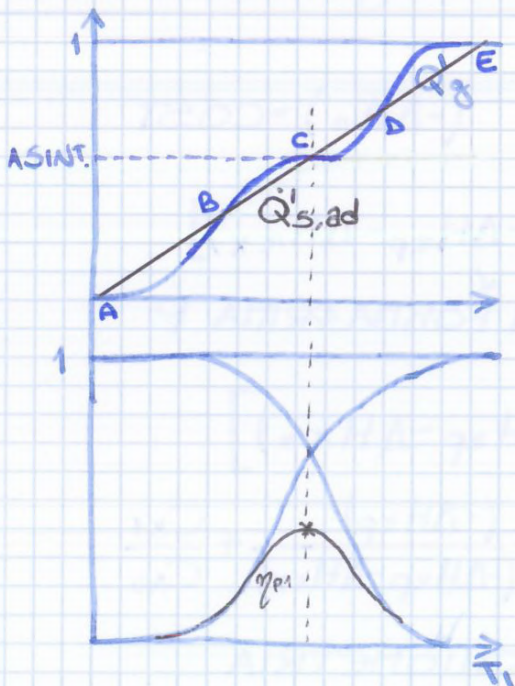


REFRIGERAZ. → ASSUMIAMO A T COST

$$\dot{Q}'_s = \underbrace{\dot{V} \rho C_p (T_1 - T_0)}_{Q \text{ SENSIBILE}} + \underbrace{UA (T_1 - T_c)}_{Q \text{ SCAMB. CON REFRIG.}} \quad [kcal/m^3]$$

$$\dot{Q}'_s = \frac{\rho C_p (T_1 - T_0)}{C_{A0} (-\Delta H_{rp} - \Delta H_{rx})} + \frac{UA \cdot (T_1 - T_c)}{\dot{V} C_{A0} (-\Delta H_{rp} - \Delta H_{rx})}$$

{ BIL. MATERIA
{ BIL. TERMICO



$\tau = \text{COST.}$

$$\dot{Q}'_{s \text{ ADIABATICO}} = \frac{\rho C_p (T_1 - T_0)}{C_{A0} (-\Delta H_{rp} - \Delta H_{rx})}$$

CONDIZ. STAZIONARIE:

$$\dot{Q}'_s = \dot{Q}'_g$$

DOBBIAMO ORA
STUDIARE LA STABILITA'
DI QUESTI 5 PUNTI
TROVATI

STABILITA' STATICA
(IN CONDIZ. STAZIONARIE)

CALCOLANDO \bar{T} DEL PUCCHIO:

$$\bar{T} = \frac{1}{\pi R^2 dz} \int_0^R T(r) 2\pi r dr dz$$

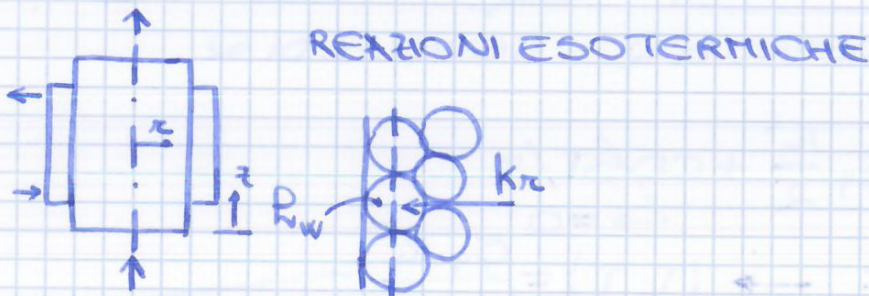
$$\bar{T} = \frac{1}{R^2} \int_0^R \left(T_m - \frac{C_p r^2}{4 k_r} \right) 2\pi r dr$$

$$3) \bar{T} = T_m - \frac{C_p R^2}{k_r 8}$$

MODELLO BIDIMENSIONALE

REATTORE GAS-SOLIDO (CAT.)

SCAMBIO DI CALORE IN PARETE



REAZIONI ESOTERMICHE

CRITERIO:

MODELLO MONODIMENS. $\rightarrow z \rightarrow C_A, T = f(r)$

MODELLO BIDIMENSIONALE $\rightarrow z, r \rightarrow C_A, T(z, r)$

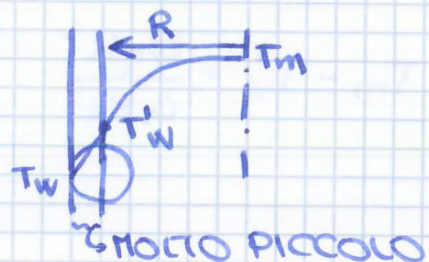
CERCHIAMO UN PARAMETRO CHE MI DICE QUALE MODELLO UTILIZZARE

USIAMO IPOTESI (APPROX) $C_p = \text{cost}$ $\left[\frac{k_{ca} e}{\Delta m^3} \right]$

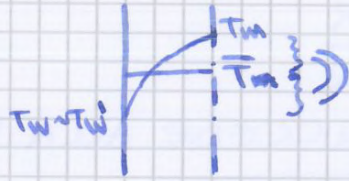
$$\textcircled{1} \frac{dT}{dr} = \frac{C_p r}{k_r 2}$$

$$\textcircled{1bis} T_m - T_w = \frac{C_p}{4 k_r} \cdot \frac{R^2}{4}$$

\hookrightarrow È INTEGRALE DI $\textcircled{1}$ TRA 0 E R



$$\textcircled{2} \begin{cases} \frac{k_r G}{R P_{RW}} \rightarrow 0 \\ P \rightarrow 1 \end{cases}$$



DOBBIAMO
CONSIDERARE
IL PROFILO
TERNICO RADIALE

$0 < P < 0,2 \rightarrow$ PROFILO PIATTO
MODELLO MONODIMENSIONALE

$1 > P > 0,5 \rightarrow$ MODELLO BIDIMENSIONALE

IMPORTANZA DI $R \rightarrow D$ DEL REATTORE

IMPIANTO PILOTA $\rightarrow R$ PICCOLO \rightarrow
A PARITA' DI $\frac{k_r}{P_{RW}} \Rightarrow \left(\frac{k_r G}{P_{RW} R} \right)$ GRANDE

AD ESEMPIO:

$\{ R = 10 \text{ cm} \text{ PILOTA}$

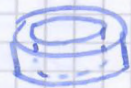
$\{ P = 0,15 \rightarrow$ PROFILO PIATTO

$\{ R = 1 \text{ m} \text{ REATT. INDUSTRIALE}$

$\{ P = 0,64 \rightarrow$ PROFILO NON PIATTO
 \hookrightarrow MODELLO BIDIM.

MODELLO BIDIMENSIONALE

D_r DISPERSIONE RADIALE DI MATERIA



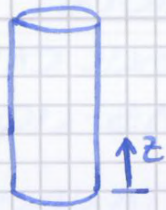
k_r CONDUCEBILITA' RADIALE DEL LETTO

$$-D_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial C_A}{\partial r} \right) \times \pi r dz + \bar{v} \times \pi r dz \frac{\partial C_A}{\partial z} = R_A \times \pi r dz$$

$$-D_r \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) - \bar{v} \frac{\partial C_A}{\partial z} = -R_A \leftarrow \text{BILANCIO MATERIA}$$

$$k_r \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \bar{v} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial z} = -R_A (\Delta H_{rA}) \leftarrow \text{BILANCIO ENERGIA}$$

CONDIZIONI AL CONTORNO:



$$\begin{array}{l}
 z=0 \quad 0 < r < R \quad \left\{ \begin{array}{l} C_A = C_{A0} \\ T = T_0 \end{array} \right. \\
 z > 0 \quad r = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_A}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \end{array} \right. \\
 z > 0 \quad r = R \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_A}{\partial r} = 0 \end{array} \right.
 \end{array}$$



REATTORI TRIFASICI

GAS - LIQUIDO - SOLIDO

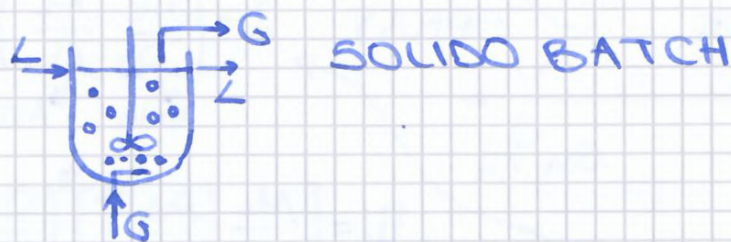
A B CAT

TIPOLOGIE

1) LETTO FISSO CON L+G IN EQUICORRENTE DOWNFLOW (DALL'ALTO IN BASSO)



2) REATTORI A "SLURRY"



2) PERDITE DI CARICO

3) HOLD-UP LIQUIDO

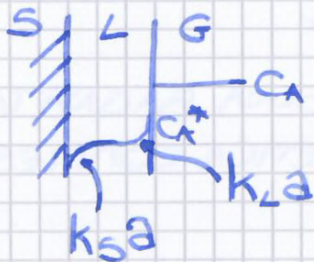


$$\frac{V_L}{V_T} = R$$

VARIAZIONE DI HOLD-UP CON LA PORTATA DI GAS



G → SE H₂ È PURO NEL GAS NON C'È RESISTENZA AL TRASPORTO DI MATERIA



ABBIAMO 2 COEFF. DI SCAMBIO: k_La, k_Ga



INTERNO PARTICELLA: PER FENOMENI CAPILLARITÀ PORE FILLING TOTALE (PIENO DI LIQUIDO)

BAGNATURA DELLA SUPERF. ESTERNA NON COMPLETA

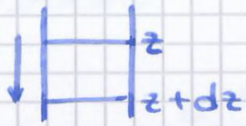
TRICKLING → $f_w = \frac{A_{ESTERNA\ BAGNATA}}{A_{TOTALE\ ESTERNA}}$



good file for a check

PROGETTO DEL REATTORE TBR

CASO 2) A CONTROLLANTE (H₂)

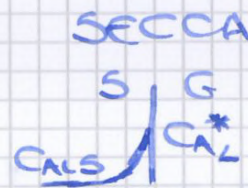
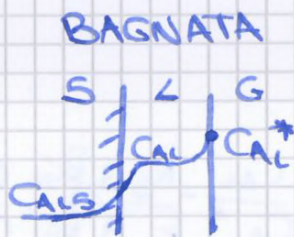


MACROCINETICA:

FLUSSI A PISTONE

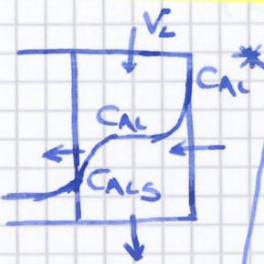
SUP. ESTERNA BAGNA P_w

MICROCINETICA:



ZONA SECCA: REAZ. PSEUDO 1° ORDINE

$$1) |R_A|_S = k' (1 - \epsilon_0) \eta \cdot C_{AL}^* (1 - f_w)$$



ZONA BAGNATA:

$$2a) S v_z \frac{dC_{AL}}{dz} dz + S dz k_{L0} f_w (C_{AL}^* - C_{AL})$$

$$- S dz k_{s0} f_w (C_{AL} - C_{ALS}) = 0$$

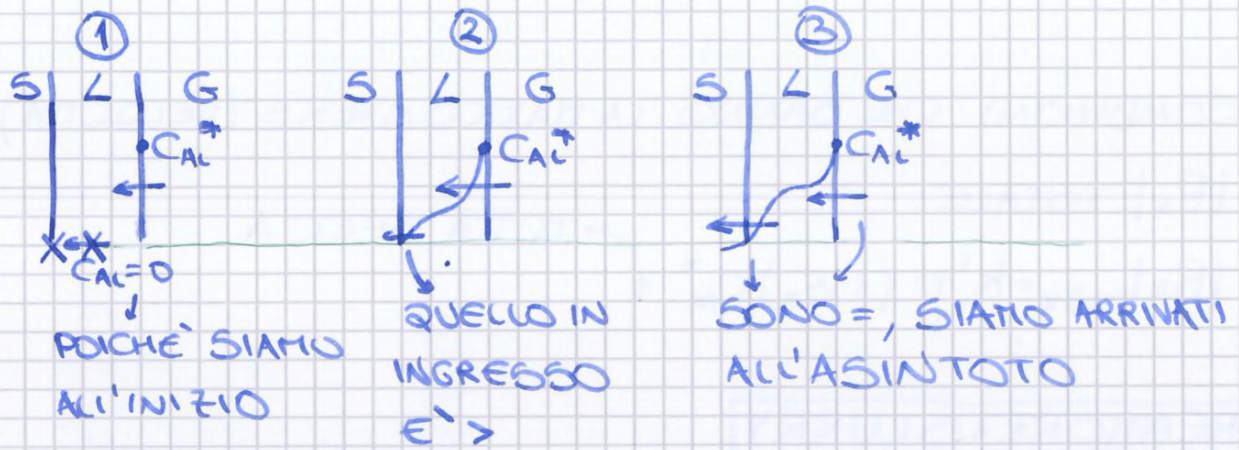
$$2b) |R_A|_w = k_{s0} f_w (C_{AL} - C_{ALS}) = k' (1 - \epsilon_0) \eta C_{ALS} f_w$$

$$2d) \eta = f(\psi)$$

$$3) C_{AL}^* = H C_{AG} = \text{COST} \quad \text{P NON VARIA NEL REATTORE}$$

6 EQUAZIONI

6 INCOGNITE $\left(\frac{C_{AG}}{P}\right), C_{AL}, C_{ALS}, |R_A|_S, |R_A|_w, \eta$



$$|R_A| = |R_A|_W + |R_A|_S$$

VARIA CON Z NON VARIA CON Z (E' COST.)

$$\bar{C}_{AL} = \int_0^L C_{AL}(z) \frac{dz}{L} = \frac{C_{AL}^*}{L K_2'} \int_0^L (1 - e^{-\frac{K_1' z}{z_0}}) dz$$

$$= \frac{C_{AL}^*}{K_2'} \left[1 - \frac{1}{\alpha L} + \frac{e^{-\alpha L}}{\alpha L} \right] \quad \alpha = \frac{K_1'}{z_0}$$

$$|R_A| = |R_A|_W + |R_A|_S = |R_A|_S + \frac{C_{AL}^* K_0}{K_2'} \left(1 - \frac{1}{\alpha L} + \frac{e^{-\alpha L}}{\alpha L} \right)$$

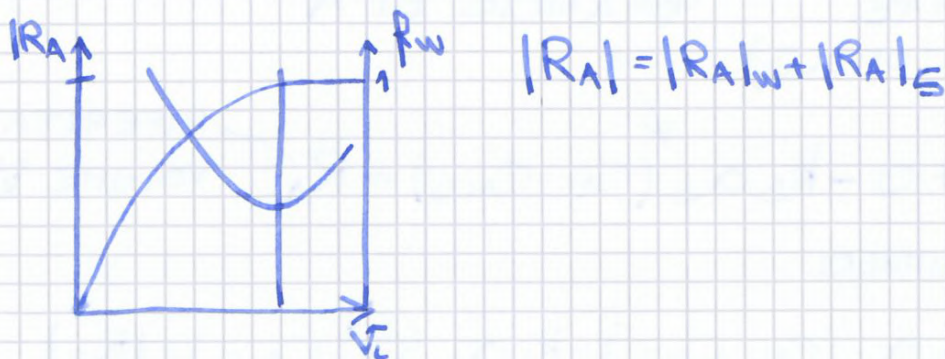
CALCOLO DI z_{aim} ~ z > z_{aim} $\frac{0,99}{K_2'} < \frac{C_{AL}}{C_{AL}^*} < \frac{1}{K_2'}$

$$C_{AL} = \frac{C_{AL}^*}{K_2'} \cdot 0,99$$

$$= (1 - e^{-\alpha z_{aim}}) \frac{C_{AL}^*}{K_2'}$$

99% DELL'ASINTOTO

$$0,99 = 1 - e^{-\alpha z_{aim}} \Rightarrow \alpha z_{aim} = 4,605$$



BILANCIO DEL COMP. B:

$$\left\{ \frac{V_L}{V_R} \left(\frac{dC_{BL}}{dt} \right) + (k_s a_s)_B (C_{BL} - C_{BLS}) = 0 \right.$$

$$\left. \begin{aligned} & -k_s a_s (C_{BL} - C_{BLS}) + \frac{dC_{BLS}}{dt} \frac{V_S}{V_R} = R_B \end{aligned} \right\}$$

→ TRASC. PERCHÉ ACCUMULO NEL SOLIDO È ≪ FLUIDO

$$\frac{V_L}{V_R} \left(\frac{dC_{BL}}{dt} \right) = R_B < 0 \rightarrow \text{REAGISCE QUINDI DIMINUISCE}$$

PROGETTO REATTORE SLURRY

$$1,2) |R_A| = k_L a_L (C_A^* - C_{AL}) = k_s a_s (C_{AL} - C_{ALS})$$

$$3) |R_A| = k'' C_{ALS} C_{BLS} \eta \cdot \left(\frac{V_S}{V_R} \right) \quad \text{EFFECTIVENESS}$$

↑
ALL'INTERFACCIA L-S

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

$$4) \frac{V_L}{V_R} \frac{dC_{BL}}{dt} = R_B = R_A \frac{V_A}{V_B} \quad \leftarrow \text{NON LO CONSIDERIAMO}$$

$$5) C_A^* = \frac{P_A}{m'_A}$$

$$6) \eta = \frac{3}{\psi^2} \left(\frac{\psi}{\epsilon R \psi} - 1 \right) \quad \psi = \sqrt{\frac{k'' C_{BLS}}{D_e}} \cdot R$$

INCOGNITE 6: $C_A^*, C_{AL}, C_{ALS}, C_{BL}, \eta, R_A$

CI SAREBBE ANCHE C_{BLS} , MA NOI ASSUMIAMO $C_{BLS} = C_{BL}$ POICHÉ LA PARTICELLA È MOLTO MOLTO PICCOLA (RESIST. TRASCURABILE)

Esercitazione 1

Esercizio 1

Due gas (A e B) sono trasportati in successione per una distanza L di 1 Km attraverso un tubo di diametro interno $D = 0.10$ m ad una velocità media di 1 m/s.

I due fluidi hanno circa la stessa densità ($\rho = 1$ kg/m³) e viscosità cinematica ($\nu = 5 \cdot 10^{-6}$ m² / s).

Assumendo che la transizione da A a B sia rapida all'ingresso del tubo (come un disturbo a gradino con B tracciante), dopo quanto tempo sarà scaricata una miscela che contiene il 4% di B in A e dopo quanto tempo sarà scaricata una miscela che contiene l'1% di A in B ?

Per il calcolo della Dispersione In letteratura si trova per tubi lisci :
Numero di Bodenstein:

$$Bo = \frac{v \cdot D}{D_l} = \frac{0,283}{\sqrt{f}} \quad \text{con il friction factor dato da} \quad f = \frac{0,0791}{Re^{1/4}}$$

Ricordiamo che il Numero di Peclet (simile al Bodenstein) è il seguente:

$$Pe = \frac{v \cdot L}{D_l} \quad \text{ove } D_l \text{ è la dispersione longitudinale.}$$

Allegata tabella della error function.

Esercizio 2

Le concentrazioni riportate in tabella sono la risposta nel tempo ad un disturbo di ingresso impulsivo in un reattore continuo.

t (min)	0	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5
C (g/l)	0	3	5	5	4	2	1	0

Calcolare la curva E(t), il tempo medio di permanenza τ , i valori corrispondenti della curva F(t) e verificare il tempo di permanenza τ dalla curva F(t).

Il calcolo di τ dovrà essere svolto con il metodo dei trapezi.

Sapendo che la portata volumica entrante nel reattore è $3 \cdot 10^{-5}$ m³/s calcolare il volume del reattore e la massa m_A di tracciante introdotta con l'impulso.

Determinare la E(t) del reattore perfettamente miscelato con lo stesso tempo medio di permanenza.

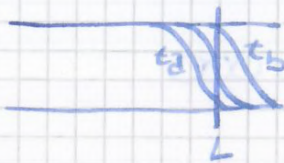
$$\frac{1}{2} \sqrt{Pe} \frac{(1 - t/\tau)}{\sqrt{t/\tau}} = 1,26 \quad \tau = \frac{L}{v} = \frac{1000 [m]}{1 [m/s]} = 1000 [s]$$

$$\frac{1 - t/\tau}{\sqrt{t/\tau}} = \frac{1,26 \cdot 2}{\sqrt{Pe}} = 0,0133$$

$$\left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2 = 0,0133^2 \frac{t}{\tau} \quad 1 - \frac{1}{500} t + \frac{1}{10^6} t^2 = \frac{0,0133^2 \cdot t}{1000}$$

$$10^{-6} t^2 - 2 \cdot 10^{-3} t + 1 = 0$$

$$t = \begin{cases} 1013,38 \rightarrow \text{NO} \\ 986,78 \rightarrow \text{OK!} \end{cases} \rightarrow t_a = 987 [s]$$



È ACCETTABILE, PERCHÉ SE PONIAMO $t/\tau = 1$, OVVERO $t = 1000$ ARRIVIAMO A $F(t) = 0,5$; NEL NOSTRO CASO VOGLIAMO UNA CON.C. <, QUINDI $t_a < \tau$.

$$b) \frac{C_B}{C_{B0}} = 0,99 \dots t \begin{cases} 1017,9 \\ 982 \end{cases} \rightarrow t_b = 1017,9 [s]$$

VOLUME DI FLUIDO CON: (IMPURO)

$$0,04 < \frac{C_B}{C_{B0}} < 0,99$$

$$t_b - t_3 = 1018 - 987 = 31 [s] \quad \rightarrow t \text{ CHE INTERCORRE}$$

$$L^* = 31 s \cdot 1 [m/s] = 31 [m] \text{ DI GAS INQUINATO}$$

$$\text{VOLUME GAS INQUINATO} = L^* \cdot S = 31 m \cdot \frac{\pi \cdot 0,1^2 m^2}{4} = 0,24 [m^3]$$

È VENUTO INQUINATO IL 3,1%

ERROR FUNCTION AND FRESNEL INTEGRALS

ERROR FUNCTION AND ITS DERIVATIVE

Table 7.1

x	$\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}$	$\operatorname{erf} x$	x	$\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}$	$\operatorname{erf} x$
1.00	0.41510 74974	0.84270 07929	1.50	0.11893 02892	0.96610 51465
1.01	0.40684 71315	0.84681 04962	1.51	0.11540 38270	0.96727 67481
1.02	0.39867 13992	0.85083 80177	1.52	0.11195 95356	0.96841 34969
1.03	0.39058 18368	0.85478 42115	1.53	0.10859 63195	0.96951 62091
1.04	0.38257 98986	0.85864 99465	1.54	0.10531 30683	0.97058 56899
1.05	0.37466 69570	0.86243 61061	1.55	0.10210 86576	0.97162 27333
1.06	0.36684 43034	0.86614 35866	1.56	0.09898 19506	0.97262 81220
1.07	0.35911 31488	0.86977 32972	1.57	0.09593 17995	0.97360 26275
1.08	0.35147 46245	0.87332 61584	1.58	0.09295 70461	0.97454 70093
1.09	0.34392 97827	0.87680 31019	1.59	0.09005 65239	0.97546 20158
1.10	0.33647 95978	0.88020 50696	1.60	0.08722 90586	0.97634 83833
1.11	0.32912 49667	0.88353 30124	1.61	0.08447 34697	0.97720 68366
1.12	0.32186 67103	0.88678 78902	1.62	0.08178 85711	0.97803 80884
1.13	0.31470 55742	0.88997 06704	1.63	0.07917 31730	0.97884 28397
1.14	0.30764 22299	0.89308 23276	1.64	0.07662 60821	0.97962 17795
1.15	0.30067 72759	0.89612 38429	1.65	0.07414 61034	0.98037 55850
1.16	0.29381 12389	0.89909 62029	1.66	0.07173 20405	0.98110 49213
1.17	0.28704 45748	0.90200 03990	1.67	0.06938 26972	0.98181 04416
1.18	0.28037 76702	0.90483 74269	1.68	0.06709 68781	0.98249 27870
1.19	0.27381 08437	0.90760 82860	1.69	0.06487 33895	0.98315 25869
1.20	0.26734 43470	0.91031 39782	1.70	0.06271 10405	0.98379 04586
1.21	0.26097 83664	0.91295 55080	1.71	0.06060 86436	0.98440 70075
1.22	0.25471 30243	0.91553 38810	1.72	0.05856 50157	0.98500 28274
1.23	0.24854 83805	0.91805 01041	1.73	0.05657 89788	0.98557 84998
1.24	0.24248 44335	0.92050 51843	1.74	0.05464 93607	0.98613 45950
1.25	0.23652 11224	0.92290 01283	1.75	0.05277 49959	0.98667 16712
1.26	0.23065 83281	0.92523 59418	1.76	0.05095 47262	0.98719 02752
1.27	0.22489 58748	0.92751 36293	1.77	0.04918 74012	0.98769 09422
1.28	0.21923 35317	0.92973 41930	1.78	0.04747 18791	0.98817 41959
1.29	0.21367 10145	0.93189 86327	1.79	0.04580 70274	0.98864 05487
1.30	0.20820 79868	0.93400 79449	1.80	0.04419 17233	0.98909 05016
1.31	0.20284 40621	0.93606 31228	1.81	0.04262 48543	0.98952 45446
1.32	0.19757 88048	0.93806 51551	1.82	0.04110 53185	0.98994 31565
1.33	0.19241 17326	0.94001 50262	1.83	0.03963 20255	0.99034 68051
1.34	0.18734 23172	0.94191 37153	1.84	0.03820 38966	0.99073 59476
1.35	0.18236 99865	0.94376 21961	1.85	0.03681 98653	0.99111 10301
1.36	0.17749 41262	0.94556 14366	1.86	0.03547 88774	0.99147 24883
1.37	0.17271 40811	0.94731 23980	1.87	0.03417 98920	0.99182 07476
1.38	0.16802 91568	0.94901 60353	1.88	0.03292 18811	0.99215 62228
1.39	0.16343 86216	0.95067 32958	1.89	0.03170 38307	0.99247 93184
1.40	0.15894 17077	0.95228 51198	1.90	0.03052 47404	0.99279 04292
1.41	0.15453 76130	0.95385 24394	1.91	0.02938 36241	0.99308 99398
1.42	0.15022 55027	0.95537 61786	1.92	0.02827 95101	0.99337 82251
1.43	0.14600 45107	0.95685 72531	1.93	0.02721 14412	0.99365 56502
1.44	0.14187 37413	0.95829 65696	1.94	0.02617 84752	0.99392 25709
1.45	0.13783 22708	0.95969 50256	1.95	0.02517 96849	0.99417 93336
1.46	0.13387 91486	0.96105 35095	1.96	0.02421 41583	0.99442 62755
1.47	0.13001 33993	0.96237 28999	1.97	0.02328 09986	0.99466 37246
1.48	0.12623 40239	0.96365 40654	1.98	0.02237 93244	0.99489 20004
1.49	0.12254 00011	0.96489 78648	1.99	0.02150 82701	0.99511 14132
1.50	0.11893 02892	0.96610 51465	2.00	0.02066 69854	0.99532 22650

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2} = 0.88622 69255$$

ESERCIZIO 3

REAZIONE DEL PRIMO ORDINE

MICROMISCELAZ. E MICROSEGREGAZ. NON DIPENDE SE REAZ. DEL 1° ORDINE

IPOTIZZIAMO ALLORA COMPLETAM. MICROSEGREGATO

$$\bar{z}_A = \int_0^{\infty} z_{AB} E(t) dt \quad \text{USIAMO METODI DEI TRAPEZI}$$

$$R_A = -kC_A = \frac{dC_A}{dt} \rightarrow -k dt = \frac{dC_A}{C_A} \quad k = 0,66 \text{ min}^{-1}$$

$$\ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -kt \Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-kt} \Rightarrow z_{AB} = 1 - e^{-kt}$$

t	E(t)	z _{AB}	z _{AB} · E(t)
0	0	0	0
0,5	0,3	0,281	0,0843
1	0,5	0,483	0,2415
1,5	0,5	0,628	0,3140
2	0,3	0,733	0,2932
2,5	0,2	0,808	0,1616
3	0,1	0,862	0,0862
3,5	0	0,901	0

$$\bar{z}_A = \frac{3,5 - 0}{7} \left(\frac{0}{2} + 0,843 + \dots \right)$$

$$\bar{z}_A = 0,5904$$

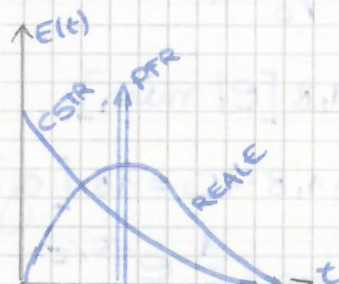
ANALOGIA PISTONE-BATCH

$\rho = \text{COST}$ (SENNO' NON VARREBBE)
 $z_{APFR} = z_{AB} = 0,628 \leftarrow \tau = 1,5 \text{ min}$

X CSTR: $\dot{V} (C_{A0} - C_{A1}) = k C_{A1} V \quad \frac{V}{\dot{V}} = \tau$

$$\frac{C_{A0} - C_{A1}}{C_{A0}} = k\tau \frac{C_{A1}}{C_{A0}} \quad z_{A1} = k\tau (1 - z_{A1}) \quad z_{A1} = k\tau - k\tau z_{A1}$$

$$z_{A1} = \frac{k\tau}{1 + k\tau} = \frac{0,66 \cdot 1,5}{1 + 0,66 \cdot 1,5} = 0,497$$



ESERCIZIO 4 -

CINETICA NON 1° ORDINE → MICROSEGREG ≠ MICROMIX

REATTORE PERFETAM. MICROSEGREGATO =



$$R_A = -k(C_A)^{3/2} \quad (n > 1)$$

$$k\tau\sqrt{C_{A0}} = 15,4 \quad [-]$$

NO COALESCENZA, QUINDI LO CONSIDERO MICROSEGR.
 È PERFETAM. MISCELATO MACROSCOPICAMENTE,
 QUINDI È UN CSTR

$$\frac{dC_A}{dt} = R_A = -k(C_A)^{3/2}$$

$$\frac{dC_A}{C_A^{3/2}} = -k dt \quad \leftarrow \text{BATCH}$$

ESSENDO
MICROSEGR.

$$V \frac{dC_A}{dt} + \dot{V} C_{A1} - \dot{V} C_{A0} = 0 \rightarrow \text{CSTR}$$

$$\int C_A^{-3/2} dC_A = - \int k dt \Rightarrow \frac{C_A^{-1/2}}{+1/2} \Big|_{C_{A0}}^{C_A} = +kt$$

$$\frac{2}{\sqrt{C_A}} - \frac{2}{\sqrt{C_{A0}}} = kt$$

$$2 \frac{\sqrt{C_{A0}}}{\sqrt{C_A}} - 2 = kt\sqrt{C_{A0}}$$

$$2 \frac{\sqrt{C_{A0}}}{\sqrt{C_A}} = 2 + kt\sqrt{C_{A0}}$$

$$\frac{C_{A0}}{C_A} = 1 + kt\sqrt{C_{A0}} + (kt\sqrt{C_{A0}})^2$$

$$\frac{C_{A0}}{C_A} = 1 + 15,4 + \frac{15,4^2}{4}$$

OPPURE + COMODO USARE SUBITO z_A

$$-C_{A0} \frac{dz_A}{dt} = k C_{A0}^{3/2} (1-z_A)^{3/2}$$

$$\int_0^{z_A} \frac{dz_A}{(1-z_A)^{3/2}} = k C_{A0}^{1/2} t = k \sqrt{C_{A0}} t$$

Applicazione di Laguerre n = 6

xi	f(xi)	wi	wi*f(xi)
0,2228466041	0,86443	0,45896467	0,39674
1,1889321016	0,99030	0,41700083	0,412956
2,9927363260	0,99827	0,11337338	0,11317
5,7751435691	0,999516	0,01039920	0,01039
9,8374674183	0,9998302	0,00026102	0,000260
15,9828739806	0,99993504	0,00000090	0,000000899
			0,93353

NUMERICAL ANALYSIS

923

ABSCISSAS AND WEIGHT FACTORS FOR LAGUERRE INTEGRATION

Table 25.9

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

$$\int_0^{\infty} g(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i e^{x_i} g(x_i)$$

Abscissas = x_i (Zeros of Laguerre Polynomials)

Weight Factors = w_i

x_i	w_i	$w_i e^{x_i}$			
n=2			n=8		
0.58578 64376 27	(-1) 8.53553 390593	1.53332 603312	0.17027 96323 05	(-1) 3.69188 589342	0.43772 34104 93
3.41421 35623 73	(-1) 1.46446 609407	4.45095 733505	0.90370 17767 99	(-1) 4.18786 780814	1.03386 934767
n=3			n=9		
0.41577 45567 83	(-1) 7.11093 009929	1.07769 285927	2.25108 66298 66	(-1) 1.75794 986637	1.66970 976566
2.29428 03602 79	(-1) 2.78517 733569	2.76214 296190	4.26670 01702 88	(-2) 3.33434 922612	2.37692 470176
6.28994 50829 37	(-2) 1.03892 565016	5.60109 462543	7.04590 54023 93	(-3) 2.79453 623523	3.20854 091335
n=4			n=10		
0.32254 76896 19	(-1) 6.03154 104342	0.83273 91238 38	10.75851 60101 81	(-5) 9.07650 877336	4.26857 551083
1.74576 11011 58	(-1) 3.57418 692438	2.04810 243845	15.74067 86412 78	(-7) 8.48574 671627	5.81808 336867
4.53662 02969 21	(-2) 3.88879 085150	3.63114 630582	22.86313 17368 89	(-9) 1.04800 117487	8.90622 621529
9.39507 09123 01	(-4) 5.39294 705561	6.48714 508441			
n=5			n=12		
0.26356 03197 18	(-1) 5.21755 610583	0.67909 40422 06	0.15232 22277 32	(-1) 3.36126 421798	0.39143 11243 16
1.41340 30591 07	(-1) 3.98666 811083	1.63848 787360	0.80722 00227 42	(-1) 4.11213 980424	0.92180 50285 29
3.59642 57710 41	(-2) 7.59424 496817	2.76944 324237	2.00513 51556 19	(-1) 1.99287 525371	1.48012 790994
7.08581 00058 59	(-3) 3.61175 867992	4.31565 690092	3.78347 39733 31	(-2) 4.74605 627657	2.08677 080755
12.64080 08442 76	(-5) 2.33699 723858	7.21918 635435	6.20495 67778 77	(-3) 5.59962 661079	2.77292 138971
n=6			n=11		
0.22284 66041 79	(-1) 4.58964 673950	0.57353 55074 23	9.37298 52516 88	(-4) 3.05249 767093	3.59162 606809
1.18893 21016 73	(-1) 4.17000 830772	1.36925 259071	13.46623 69110 92	(-6) 6.59212 302608	4.64876 600214
2.99273 63260 59	(-1) 1.13373 382074	2.26068 459338	18.83359 77889 92	(-8) 4.11076 933035	6.21227 541975
5.77514 35691 05	(-2) 1.03991 974531	3.35052 458236	26.37407 18909 27	(-11) 3.29087 403035	9.36321 823771
9.83746 74183 83	(-4) 2.61017 202815	4.88682 680021			
15.98287 39806 02	(-7) 8.98547 906430	7.84901 594560			
n=7			n=11		
0.19304 36765 60	(-1) 4.09318 951701	0.49647 75975 40	0.13779 34705 40	(-1) 3.08441 115765	0.35400 97386 07
1.02666 48953 39	(-1) 4.21831 277862	1.17764 306086	0.72945 45495 03	(-1) 4.01119 929155	0.83190 23010 44
2.56787 67449 51	(-1) 1.47126 348658	1.91824 978166	1.80834 29017 40	(-1) 2.18068 287612	1.33028 856175
4.90035 30845 26	(-2) 2.06335 144687	2.77184 863623	3.40143 36978 55	(-2) 6.20874 560987	1.86306 390311
9.18215 34445 63	(-3) 1.07401 014328	3.84124 912249	5.55249 61400 64	(-3) 9.50151 697518	2.45025 555808
73418 02917 98	(-5) 1.58654 643486	5.38067 820792	8.33015 27467 64	(-4) 7.53008 388588	3.12276 415514
39572 78622 63	(-8) 3.17031 547900	8.40543 248683	11.84378 58379 00	(-5) 2.82592 334960	3.93415 269556
n=12			n=10		
0.11572 21173 58	(-1) 2.64731 371055	0.29720 96360 44	16.27925 78313 78	(-7) 4.24931 398496	4.99241 487219
0.61175 74845 15	(-1) 3.77759 275873	0.69646 29804 31	21.99658 58119 81	(-9) 1.83956 482398	6.57220 248513
1.51261 02697 76	(-1) 2.44082 011320	1.10778 139462	29.92069 70122 74	(-13) 9.91182 721961	9.78469 584037
2.83375 13377 44	(-2) 9.04492 222117	1.53846 423904			
4.59922 76394 18	(-2) 2.01023 811546	1.99832 760627			
6.84452 54531 15	(-3) 2.66397 354187	2.50074 576910			
9.62131 68424 57	(-4) 2.03231 592663	3.06532 151828			
13.00605 49933 06	(-6) 8.36505 585682	3.72328 911078			
17.11685 51874 62	(-7) 1.66849 387654	4.52981 402998			
22.15109 03793 97	(-9) 1.34239 103052	5.59725 846184			
28.48796 72509 84	(-12) 3.06160 163504	7.21299 546093			
37.09912 10444 67	(-16) 8.14807 746743	10.54383 74619			

Esercitazione 3

Esercizio 5

Dell'anidride carbonica (A) viene assorbita a 15 bar in una soluzione 1 N di NaOH (B) in una colonna impaccata in controcorrente. La reazione ha cinetica $R_A = -k_2 C_A C_B$ (con $\nu_A = 1$ e $\nu_B = 2$).

Le frazioni molari di CO_2 nella fase gassosa sono pari all'1% in ingresso e allo $5 \cdot 10^{-3}\%$ in uscita.

Valutare l'altezza della colonna facendo le seguenti ipotesi semplificative:

1. flusso del liquido e del gas a Pistone;
2. resistenza in fase gas trascurabile;
3. Area effettiva di scambio pari a $0,5 Q_v$ secca del riempimento;

Dati

$P = 15 \text{ bar}$ $T = 20^\circ\text{C}$

Diametro della colonna: $0,52 \text{ m}$

Q_v : Area volumica del riempimento (Raschig Rings 1"): $220 \text{ m}^2 / \text{m}^3$

Area volumica effettiva della superficie di scambio: $110 \text{ m}^2 / \text{m}^3$

Portata di gas alimentata: $50.000 \text{ m}^3 / \text{d}$ (NTP, 1 bar, 0°C)

Portata di liquido alimentata: $2,5 \text{ m}^3 / \text{h}$

$k_G = 15,7 \text{ mm/s}$

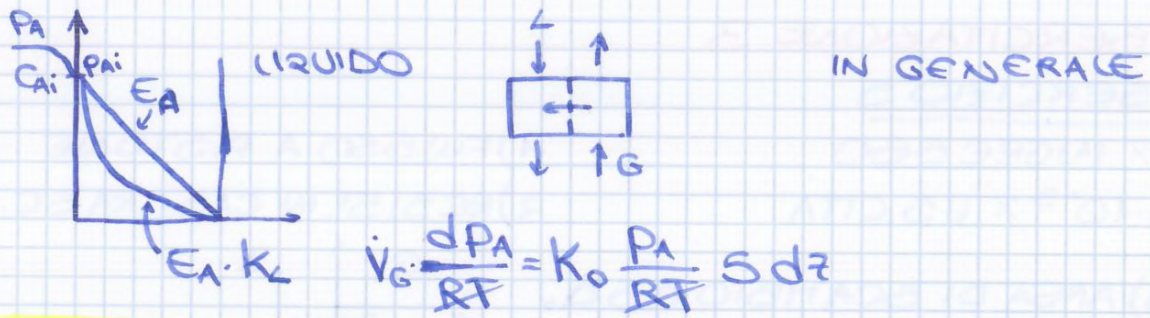
$k_L = 0,37 \text{ mm/s}$

$k_2 = 5700 \text{ m}^3 / \text{kmol/s}$

$D_A = D_B = 1,77 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 / \text{s}$

$$C_{A,i} = \frac{K \cdot p_{A,i}}{RT} \quad \text{con } K = 1/m = 0,535 \quad C_{A,i} = K C_{A,g,i}$$

ATTENZIONE A COSA DA'



$$\frac{1}{K_0} = \frac{1}{k_G a} + \frac{m}{k_L a E_A} \rightarrow \text{CONDIZ. EQUILIBRIO}$$

NEL NOSTRO CASO $(k_G a) \rightarrow \infty$ QUINDI:

$$K_0 = k_L a E_A / m$$

$$E_A = ?$$

$$C_{A,liq} = \frac{p_{Ai} K}{RT} \Rightarrow m = \frac{1}{K}$$

$$\int_0^z \frac{dp_A}{p_A E_A} = \left(\frac{k_L a S}{m V_G} \right) z \rightarrow \text{ALTEZZA COLONNA}$$

X DETERMINARE E_A IPOTIZZIAMO (DA VERIFICARE) REAZIONE DI PSEUDO 1°-ORDINE

$$E_A = \phi ?$$

CALCOLIAMO IL NUMERO DI HATTA

$$\phi = \frac{\sqrt{(k_2 \bar{C}_B) D_A}}{k_L}$$

$$k_L = \frac{D_A}{\delta}$$

REAZIONE PSEUDO 1° ORDINE:

$$2 < \phi < \frac{1}{10} E_A^* = \frac{1}{10} \left[\frac{D_B \bar{C}_B D_A}{D_A C_{Ai} D_B} \right]$$

$$C_{Ai} = \left(\frac{p_{Ai}}{RT} \right) K = K \left(\frac{p_A}{RT} \right)$$

VERIFICA IN ② TESTA DELLA COLONNA

$$\phi_2 = \frac{\sqrt{(k_2 \bar{C}_{B2}) D_A}}{k_L} = \frac{\sqrt{5700 [\text{m}^3/\text{kmol} \cdot \text{s}] \cdot 1 [\text{M}] \cdot 1,77 \cdot 10^{-9} [\text{m}^2/\text{s}]}}{0,37 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}} = 8,585 > 2 \rightarrow \text{OK!}$$

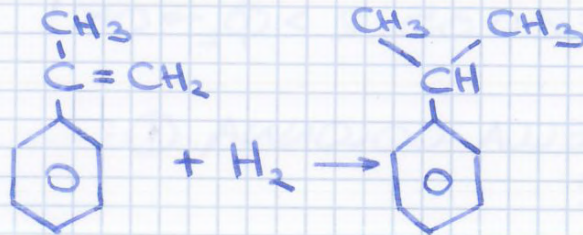
ESERCITAZIONE 4

ESERCIZIO 6

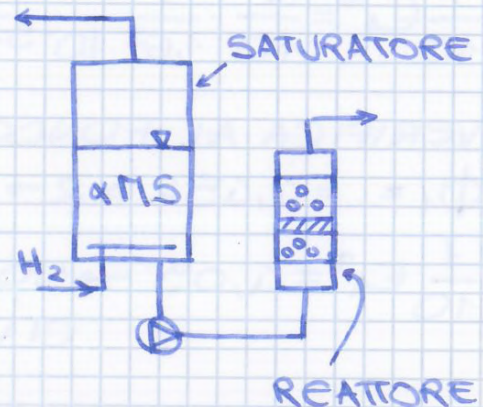
REATT. BIFASICO LIQUIDO - SOLIDO

α M STIRENE

CUMENE



SENZA CATAL. $V \approx 0$



IL CATALIZZATORE OCCUPA SOLO UNA PICCOLA PARTE, IL RESTO SONO SFERETTE DI VETRO



(H_2) REAGENTE CHIAVE \rightarrow REAZIONI DI 1° ORDINE RISPETTO AD A

$$Z_A = 0,21$$

$$R_A' = -k C_A'$$



CATALIZZATORE SOLIDO

$$m_{\text{CAT}} = 1g$$

$$D_s = 3g/cm^3$$

$$E_i = 0,5 \text{ PARTICELLA}$$

$$E_o = 0,4 \text{ POROSITA' LETTO}$$

• EQUAZIONE BILANCIO DEL REATTORE \rightarrow MACROKINETICA

$$K_o \rightarrow k_{-a}$$

$$V dC_A = R_A dV_r = K_o C_A dV_r$$

$$\frac{1}{K_0} = \frac{1}{k_2 a} + \frac{1}{k' \eta (1 - \epsilon_0)}$$

η = EFFECTIVENESS

NEL CASO ISOTERMICO K_0 È COST.

$$\epsilon_n \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right) = -K_0 \frac{V_r}{V} = -K_0 \tau$$

$$\epsilon_n (1 - z_A) = -K_0 \frac{V_r}{V}$$

$$a_2 = \frac{\text{SUP. TOT. PARTIC.}}{V_{\text{REATTORE}}}$$

$$V_r = \frac{\eta_{\text{cat}}}{D_5 (1 - \epsilon_0) (1 - \epsilon_i)} = 1,11 \text{ [cm}^3\text{]}$$

$$\frac{V_r}{V} = \tau = 0,555 \text{ [s]}$$

$$K_0 = -\frac{V}{V_r} \cdot \frac{1}{\epsilon_n (1 - z_A)} = 0,6263 \text{ [s}^{-1}\text{]}$$

$$\frac{1}{K_0} = \frac{1}{k_2 a} + \frac{1}{k' \eta (1 - \epsilon_0)} \Rightarrow (k' \eta) = 1,228 \text{ [s}^{-1}\text{]}$$

$$\eta = \frac{3}{\psi^2} \left(\frac{\psi}{\tau R \psi} - 1 \right)$$

$$k' \eta = \frac{k' \cdot 3 D_e}{R^2 k'} \left(\frac{\psi}{\tau R \psi} - 1 \right)$$

$$\eta = \frac{3}{\psi^2} \left(\frac{\psi}{\tau R \psi} - 1 \right)$$

$$\psi = R \sqrt{\frac{k'}{D_e}}$$

$$1,228 = \frac{3 D_e}{R^2} \left(\frac{\psi}{\tau R \psi} - 1 \right)$$

$$1,837 \cdot 10^{-2} \left(\frac{\psi}{\tau R \psi} - 1 \right) = 1,228$$

$$\frac{\psi}{\tau R \psi} = 67,86$$

SE PRENDO $\psi > 10 \rightarrow \tau R \psi = 1 \Rightarrow \psi = 67,86$

$$\psi = 67,86 = R \sqrt{\frac{k'}{D_e}} \Rightarrow k' = 28,19 \text{ [s}^{-1}\text{]}$$

$$\eta = 0,0436$$

$$k_2 a = 1$$

$$k' (1 - \epsilon_0) \eta = 0,737 \text{ [s}^{-1}\text{]}$$

Esercitazione 5

Esercizio 8

Stimare la conversione dell' NH_3 e la distribuzione della temperatura in un bruciatore catalitico in cui una miscela gassosa di NH_3 e aria passa attraverso tre griglie di Platino poste in successione. *Stimare la T_i massima.*

A regime il reattore ha comportamento autotermico con alimentazione di gas freddo.

Nelle condizioni operative stazionarie la temperatura delle griglie è *molto alta*. In queste condizioni la cinetica della reazione è così veloce che la conversione dell' NH_3 è condizionata interamente dalla velocità del trasporto del reagente in difetto (NH_3) alla superficie della griglia.

Sono dati i seguenti parametri operativi:

- $P=1$ bar
- Temperatura della miscela gassosa in ingresso: $T_0=60$ °C
- Frazione molare dell' NH_3 in ingresso: $y_{A0}=0.11$
- Numero di griglie: $N=3$
- Diametro dei filamenti di Platino: $d=60 \cdot 10^{-6}$ m
- Superficie di Platino/Superficie griglia: $a\Delta z=1.2$ m²/m² (dove Δz è lo spessore della griglia)
- Velocità massica del gas: $\rho v=0.4$ kg/m²/s
- Entalpia di reazione: $\Delta H_r=-226 \cdot 10^3$ kJ/kmol
- Calore specifico della miscela gassosa: $c_p=31.8$ kJ/kmol/°C fra 60 e 900°C
- $Le=0.84$

$$\frac{\beta d}{D} = 0.42 \left(\frac{v}{D}\right)^{0.2} + 0.37 \left(\frac{\rho v d}{\mu}\right)^{0.5} \left(\frac{v}{D}\right)^{0.33}$$

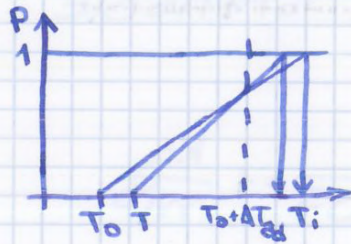
For average film temperatures of about 400°C (first gauze) and 800°C (third gauze), this produces with the physical properties indicated:

	400°C	800°C	
μ	31	42	10 ⁻⁶ kg/m s
ρ	0.49	0.31	kg/m ³
$Sc = \nu/D$	0.63	0.63	—
$Re = \rho v d / \mu$	0.775	0.570	—
$Sh = \beta d / D$	0.82	0.75	—
β	1.37	2.7	m/s
$\beta \rho$	0.67	0.83	kg/m ² s
$\beta \rho A_v \Delta z / \rho v$	2.01	2.5	—

$$\beta \rightarrow k_g \quad A_v \rightarrow a$$

$$\frac{T_i - T}{T_0 + \Delta T_{ad} - T} = \frac{1}{Le^{2/3}} \quad (*)$$

LA SUP. DEL CATALIZZATORE T_i SUPERA $T_0 + \Delta T_{ad}$
(IL GAS INVECE NO)



$T_{i \max} \rightarrow T_0$ PER $Le < 1$
CONTA DI + LA REAZIONE CHE
PRODUCE Q CHE LA T DEL GAS
 \rightarrow MAX R_A

USO RELAZIONE (*) CON $T = T_0 = 60^\circ C$

$$\frac{T_{i_0} - T_0}{T_0 + \Delta T_{ad} - T_0} = \frac{1}{Le^{2/3}} \rightarrow T_{i_0} = \frac{\Delta T_{ad}}{Le^{2/3}} + T_0 = 938^\circ C$$

ALL'INTERFACCIA \leftarrow E' MEGLIO IL TRASP. DI MATERIA
IN INGRESSO CHE QUELLO DI CALORE

$$A \ z=0 \quad \begin{cases} T_0 = 60^\circ C \\ T_{i_0} = 938^\circ C \end{cases}$$

$$T_0 + \Delta T_{ad} = \text{MAX } T_{\text{GAS}} = 60 + 782 = 842^\circ C < 938^\circ C!$$

$$\ll T_{u_3} \rightarrow z_{A_3} \approx 1$$