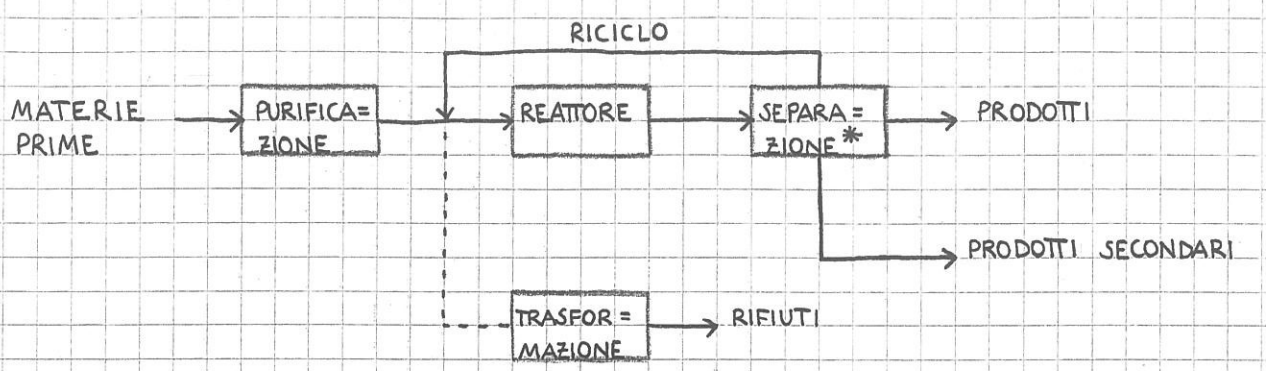
INTRODUZIONE

Quando c'è un processo chimico:



* esempi: distillazione, estrazione con solvente...

REATTORI

I MODELLI DI REATTORE sono un'idealizzazione di ciò che avviene nella realtà.

I REATTORI REALI sono la "somma" dei reattori ideali.

TIPI DI REATTORE:

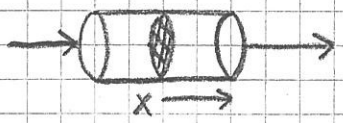
- BATCH

  È un reattore DISCONTINUO e viene idealizzato come se fosse perfettamente agitato, quindi, in ogni punto del V, la [ ] è costante;

- CSTR (REATTORE CONTINUO AGITATO)

  È un reattore CONTINUO e viene idealizzato come se fosse perfettamente agitato;

- PFR (REATTORE A FLUSSO A PISTONE TUBOLARE)



  Ogni "fetta" di questo reattore viene idealizzata come se fosse perfettamente miscelata (quindi è radiale). Più si va avanti lungo la sezione più T e [ ] variano.

Per risolvere i processi chimici si fanno i bilanci di materia e di energia.

INTRODUZIONE

C_J, T, P	VARIABILI DIPENDENTI DEL SISTEMA
$t, x(v)$	VARIABILI INDIPENDENTI DEL SISTEMA

dove $x(v)$ è la coordinata assiale del PFR.

STECHIOMETRIA

REAZIONI CHIMICHE E STECHIOMETRIA

- $2\,NO + O_2 \rightleftharpoons 2\,NO_2$
  $A_1 \quad A_2 \quad A_3$

Le specie vengono chiamate con $A_1, _, A_n$ per poter scrivere le reazioni come:

$$\sum_{J=1}^{Ns} \nu_J A_J = 0 \qquad \text{dove} \quad \nu_J \begin{cases} > 0 \rightarrow \text{PRODOTTI} \\ = 0 \rightarrow \text{INERTI} \\ < 0 \rightarrow \text{REAGENTI} \end{cases}$$

i = reazioni
J = specie

In questo caso: $-2A_1 - A_2 + 2A_3 = 0$

- $H_2O + CO \rightleftharpoons H_2 + CO_2$
  $H_2O + H\cdot \rightleftharpoons H_2 + OH\cdot$
  $OH\cdot + CO \rightleftharpoons CO_2 + H\cdot$

$A_1 = H\cdot$ $\quad A_3 = OH\cdot$ $\quad A_5 = CO$
$A_2 = H_2$ $\quad A_4 = H_2O$ $\quad A_6 = CO_2$

$$\Rightarrow \quad -A_4 - A_5 + A_2 + A_6 = 0$$
$$-A_4 - A_1 + A_2 + A_3 = 0$$
$$-A_3 - A_5 + A_6 + A_1 = 0$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & +1 & 0 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & -1 & 0 & -1 & +1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$\underline{\underline{\nu}}$ $\qquad$ $\underline{A}$ $\qquad$ $\underline{0}$

$$\Rightarrow \quad \underline{\underline{\nu}} \cdot \underline{A} = \underline{0} \qquad \underline{\underline{\nu}} \in \mathbb{R}^{nr \times ns}$$

In $\underline{\underline{\nu}}$ si possono scambiare sia righe che colonne.

REAZIONI INDIPENDENTI

$\underline{M} = \begin{bmatrix} M_1 \\ | \\ M_{ns} \end{bmatrix}$ = VETTORE DEI PESI MOLECOLARI

$\Rightarrow \quad \underline{\underline{r}} \cdot \underline{M} = \underline{0}$ | LEGGE DI CONSERVAZIONE DELLA MASSA

$\underline{\underline{r}}$ non è una matrice quadrata e non si può fare il determinante.

$\underline{M} \in \text{Kernel}(\underline{\underline{r}})$.

$\text{rank}(\underline{\underline{r}})$ = n° max di righe o colonne linearmente indipendenti.

$\text{rank}(\underline{\underline{r}}) \leq \min\{n_r, n_s\}$

Se $\underline{\underline{r}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e se $\det(\underline{\underline{r}}) \neq 0 \Rightarrow$ la matrice non è singolare e quindi si ha rank max.

Se $\text{rank}(\underline{\underline{r}})$ è max $\Rightarrow \text{rank}(\underline{\underline{r}}) = n_r \leq n_s$

DIM. PER ASSURDO:

Si supponga che la matrice abbia più righe che colonne.

n_s $\begin{bmatrix} \overbrace{\underline{\underline{Q}}}^{n_s} \\ \end{bmatrix}$ Si consideri il sottoinsieme quadrato $\underline{\underline{Q}}$.

$\underline{\underline{Q}} \in \mathbb{R}^{n_s \times n_s}$

$\det(\underline{\underline{Q}}) \neq 0$

$\Rightarrow \quad \underline{\underline{Q}} \cdot \underline{M} \neq 0 \quad \Rightarrow$ non si rispetta il bilancio di massa.

$\Rightarrow$ non ci possono essere più reazioni che specie.

□

PROBLEMA

Date n_s specie trovare il n° n_r max di reazioni linearmente indipendenti.

- Si ordinano n_s specie $\longrightarrow$ [composti, elementi, nuovi elementi]

1) Scrivere tutte le reazioni di formazione dei composti (possono comparire nuovi elementi);
2) Scrivere $\underline{\underline{\tilde{r}}}$ e fare "una specie di eliminazione di Gauss" per far sparire i nuovi elementi;
3) Togliere le righe e le colonne dei nuovi elementi per ottenere $\underline{\underline{r}}$.

master COPY COPISTERIA

$\underline{\underline{A}} = [\, CO_2,\ H_2O,\ CH_4,\ CO,\ H_2,\ O_2 \,]^T \quad \Rightarrow n_S = 6$

$\Rightarrow \quad \underline{\underline{\tilde{A}}} = [\, CO_2, H_2O, CH_4, CO, H_2, O_2, C \,]^T$

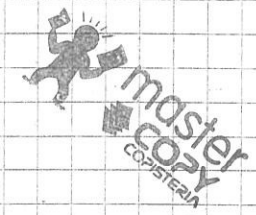
1) Reazioni di formazione:

$$C + O_2 \rightleftharpoons CO_2$$

$$2H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O$$

$$C + 2H_2 \rightleftharpoons CH_4$$

$$2C + O_2 \rightleftharpoons 2CO$$



2)

CO_2	H_2O	CH_4	CO	H_2	O_2	C
+1	0	0	0	0	−1	−1
0	+2	0	0	−2	−1	0
0	0	+1	0	−2	0	−1
0	0	0	+2	0	−1	−2

$= \underline{\underline{\tilde{r}}}$

$\text{rank}(\underline{\underline{\tilde{r}}}) = 4$

$\Rightarrow$

+1	0	−1	0	+2	−1	0
0	+2	0	0	−2	−1	0
0	0	+1	0	−2	0	−1
0	0	0	+2	0	−1	−2

$\times 2$



3) $\underline{\underline{r}}$

$\Rightarrow$

+1	0	−1	0	+2	−1	0
0	+2	0	0	−2	−1	0
0	0	+2	−2	−4	+1	0
0	0	0	+2	0	−1	−2

$\Rightarrow \quad n_r = 3.$