POLITECNICO DI MILANO

Lab





Esercitazione 2
Esercizi con Equazioni Differenziali

Corso di Strumentazione e Controllo di Impianti Chimici

Prof. Davide Manca

Tutor: Giuseppe Pesenti

Esercizio 1.2 – Problema

Esempio: Esercizio 1.2 – Reazioni in serie all'interno di un reattore batch

$$c_A^0 = 3\ [mol/m^3] \qquad c_B^0 = 0\ [mol/m^3] \qquad c_C^0 = 0\ [mol/m^3]$$

$$\mathbf{A} \xrightarrow[r_1 = k_1 c_A]{} \mathbf{B} \xrightarrow[r_2 = k_2 c_B]{} \mathbf{C}$$

$$k_1 = 0.5\ [1/s] \qquad k_2 = 0.3\ [1/s]$$

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A$$

$$\frac{dc_B}{dt} = k_1 c_A - k_2 c_B$$

$$\frac{dc_C}{dt} = k_2 c_B$$

$$\bar{t}\,? \quad c_B(t = \bar{t}) = max$$

E' necessario risolvere un sistema di equazioni differenziiali

Risoluzione di sistemi di equazioni differenziali

Risolvere sistemi di equazioni:

- **Integratori ode suite**

L'obiettivo è integrare un sistema di equazioni che sono funzione di una variabile indipendente (t).
Si definisce un'**unica funzione contenente tutte le equazioni** del sistema:

```
function vettoreoutput = sistemaeq(t, vettoreinput)
…
vettoreoutput = …
```

- riceve come input **t** e un **unico vettore** contenente le altre variabili
- ha come output un **unico vettore** con tutte le equazioni differenziali
- il vettore output della funzione deve essere un **vettore colonna**

Per utilizzare un integratore ode (**ode45**, ode23, ode113, **ode15s**, **ode23s**, …):

```
>>    [tode, yode] = ode45(handlesistemaeq, rangeintegrazionet, valoriiniziali)
```

Memorizza i risultati in un vettore per t e una matrice per le altre variabili lungo t

Esercizio 1.2 – Risoluzione sistema eq. diff.

Esempio: Esercizio 1.2 – Reazioni in serie all'interno di un reattore batch

```
k1=0.5; % [1/s]
k2=0.3; % [1/s]
y0=[3 0 0]; % A, B, C [mol/m^3]
tspan=[0 25]; % [s]
handle=@(t,y) sistdiff(t,y,k1,k2);
[t,y]=ode45(handle,tspan,y0);
```

```
function vetdiff = sistdiff(~, vetconc, k1, k2)

concA=vetconc(1);
concB=vetconc(2);
concC=vetconc(3);

r1=k1*concA;
r2=k2*concB;

vetdiff=zeros(3,1); % l'integratore ode
                    % richiede un vettore colonna
vetdiff(1)=-r1;
vetdiff(2)=r1-r2;
vetdiff(3)=r2;
```

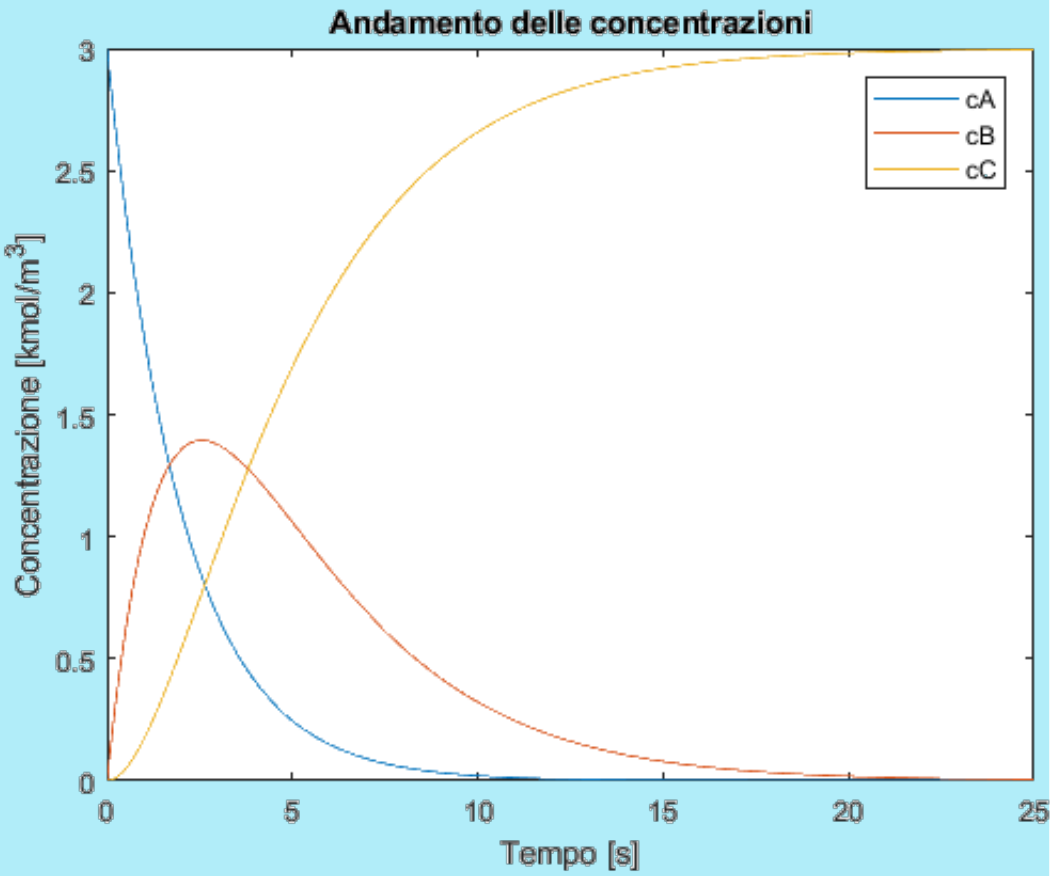
```
function vetdiff = sistdiff(~, vetconc, k1, k2)

vetdiff=zeros(3,1);
vetdiff(1)=-k1*vetconc(1);
vetdiff(2)=k1*vetconc(1)-k2*vetconc(2);
vetdiff(3)=k2*vetconc(2);
```

funzione equivalente, più efficiente: **minore allocazione di memoria**

Esercizio 1.2 – Diagrammare i risultati

Esempio: Esercizio 1.2 – Reazioni in serie all'interno di un reattore batch

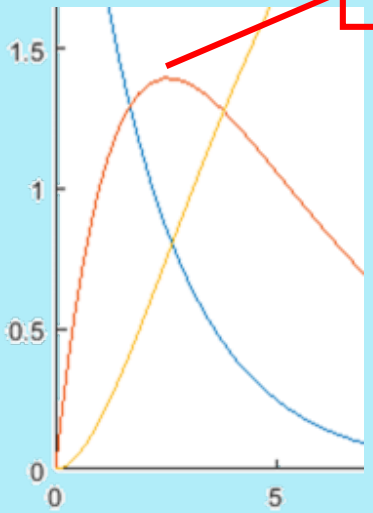
```
k1=0.5; % [1/s]
k2=0.3; % [1/s]
y0=[3 0 0]; % A, B, C [mol/m^3]
tspan=[0 25]; % [s]
handle=@(t,y) sistdiff(t,y,k1,k2);
[t,y]=ode45(handle,tspan,y0);
plot(t,y)
xlabel('Tempo [s]')
ylabel('Concentrazione [kmol/m^3]')
title('Andamento delle concentrazioni')
legend('cA','cB','cC')
```



Esercizio 1.2 – Ricerca del massimo di c_B

Esempio: Esercizio 1.2 – Reazioni in serie all'interno di un reattore batch

$\bar{t}\,?\quad c_B(t=\bar{t}) = max$




```
cB=y(:,2);
maxindex=find(cB==max(cB));
maxcB=cB(maxindex);
tmax=t(maxindex);
disp(tmax)
disp(maxcB)
```

→ 2.4462
1.3931

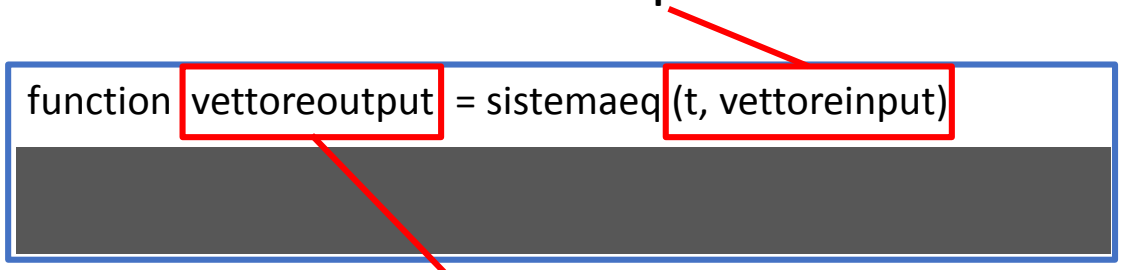
```
disp(['cB massima di ',num2str(maxcB), ' mol/m^3 raggiunta dopo ',num2str(tmax),' s'])
```

→ cB massima di 1.3931 mol/m^3 raggiunta dopo 2.4462 s

Integratore ode: chiamata alla funzione

Partendo dai valori iniziali di t e delle altre variabili:

- l'integratore stabilisce la lunghezza del passo di integrazione corrente h=Δt
- a seconda del metodo, l'integratore effettua **una o più chiamate** alla funzione con input diversi
  - chiama la funzione fornendo come **input** i **valori** di t e del vettore di variabili



  - la funzione restituisce in **output** il vettore di **valori** delle variabili
  - l'integratore vede la funzione come una **black-box**
    - **può conoscere soltanto** gli **output** per gli **input** di ogni chiamata effettuata
- l'integratore arriva a **stimare il valore** delle variabili ad un passo successivo **t+h**

Stima passo successivo: adaptive stepsize

L'integratore gestisce l'**integrazione lungo il range specificato**.

A ogni step n:

- decide la lunghezza del passo di integrazione h
- stima la soluzione allo step successivo $n+1$

- **calcola l'incertezza** della soluzione trovata

$$t_n, y(t_n) \longrightarrow t_n+h, y(t_n+h)$$

$$t_n, y(t_n) \longrightarrow t_n+h/2, y(t_n+h/2) \longrightarrow t_n+h, y(t_n+h)$$

$$\Delta y \approx \text{stima errore}$$

- **confronta** la stima dell'errore locale con la **tolleranza** impostata (default: 10^{-3} relativa, 10^{-6} assoluta)

  - se la tolleranza **non** è rispettata: **riduce il passo h** e riparte per cercare una nuova soluzione
  - se la tolleranza è rispettata: la **soluzione** trovata è **valida** per il presente step
    - se l'errore era estremamente ridotto, **aumenta h** per il prossimo step

Integratore ode: options odeset (1/3)

Il comando **odeset** mostra le **impostazioni predefinite** degli integratori ode

```
>> odeset
```

```
AbsTol: [ positive scalar or vector {1e-6} ]
   RelTol: [ positive scalar {1e-3} ]
    NormControl: [ on | {off} ]
   NonNegative: [ vector of integers ]
    OutputFcn: [ function_handle ]
    OutputSel: [ vector of integers ]
      Refine: [ positive integer ]
       Stats: [ on | {off} ]
   InitialStep: [ positive scalar ]
     MaxStep: [ positive scalar ]
       BDF: [ on | {off} ]
    MaxOrder: [ 1 | 2 | 3 | 4 | {5} ]
    Jacobian: [ matrix | function_handle ]
    JPattern: [ sparse matrix ]
   Vectorized: [ on | {off} ]
       Mass: [ matrix | function_handle ]
MStateDependence: [ none | {weak} | strong ]
     MvPattern: [ sparse matrix ]
  MassSingular: [ yes | no | {maybe} ]
  InitialSlope: [ vector ]
       Events: [ function_handle ]
```

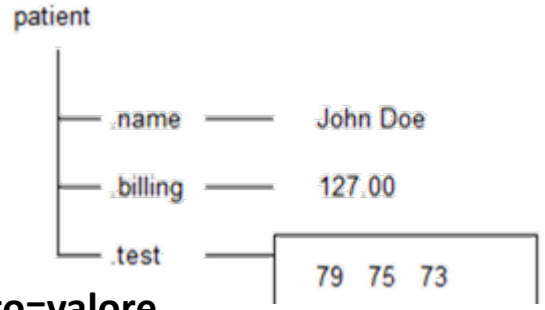
Per **creare un set di opzioni**:

```
>> opzioniprova=odeset();
>> disp(opzioniprova)
```

AbsTol: []	NonNegative: []
BDF: []	NormControl: []
Events: []	OutputFcn: []
InitialStep: []	OutputSel: []
Jacobian: []	Refine: []
JConstant: []	RelTol: []
JPattern: []	Stats: []
Mass: []	Vectorized: []
MassSingular: []	MStateDependence: []
MaxOrder: []	MvPattern: []
MaxStep: []	InitialSlope: []

- Crea una **struttura** contenente come *campi* le impostazioni disponibili
- Alle impostazioni **non sono assegnati valori**

Integratore ode: options odeset (2/3)



Una struttura è un **tipo di dati** che raggruppa i dati in elementi.

Per accedere a un elemento e assegnare un valore: **struttura.elemento=valore**

Esempio: nella struttura opzioni della suite ode, assegnare all'elemento AbsTol il valore 1e-12:

```
>> opzioniprova2=odeset;
>> opzioniprova2.AbsTol=1e-12;
>> disp(opzioniprova2)
>> opzioniprova3=odeset('AbsTol', 1e-12)
```

```
AbsTol: 1.0000e-12
BDF: []
Events: []
ecc
```

In alternativa, gli elementi possono essere assegnati già durante la creazione della struttura:

```
>> opzioniprova=odeset('elemento1',valore1,'elemento2',valore2)
```

La struttura con il set di opzioni può essere fornita all'integratore ode con la sintassi:

```
>> [tout, yout] = ode45(handlefunz, intervallo, valoriiniz, opzioniprova )
```

Integratore ode: options odeset (3/3)

L'integratore ode utilizza le opzioni fornite

- La soluzione di ogni step deve rispettare le tolleranze **AbsTol** e **RelTol**.
- Se un elemento è **senza valore**, utilizza il valore di **default** (mostrato dal comando odeset)

Esempio: risolvere il sistema di equazioni differenziali dell'esercizio precedente 1.2 con tolleranza relativa 1e-10 e tolleranza assoluta 1e-12

```
k1=0.5; % [1/s]
k2=0.3; % [1/s]
y0=[3; 0; 0]; % A, B, C [mol/m^3]
tspan=[0 25]; % [s]
handle=@(t,y) sistdiff(t,y,k1,k2);
[t,y]=ode45(handle,tspan,y0);
```

1.3931 mol/m^3 dopo 2.4462 s

i vettori t e y hanno **89 elementi**

```
k1=0.5; % [1/s]
k2=0.3; % [1/s]
y0=[3; 0; 0]; % A, B, C [mol/m^3]
tspan=[0 25]; % [s]
handle=@(t,y) sistdiff(t,y,k1,k2);
opzioniode=odeset('RelTol',1e-10,'AbsTol',1e-12);
[t,y]=ode45(handle,tspan,y0,opzioniode);
```

1.3943 mol/m^3 dopo 2.5519 s

i vettori t e y hanno **1357 elementi**

Esercizio 2.1 – Derivazione equazioni (1/2)

Biomassa di batteri nel volume di un reattore.

B indica la concentrazione di batteri, assunta uniforme, in kmol/m^3

$B(t)$
$B(t+\Delta t)$

$$\frac{dB(t)}{dt} = r(t)$$

$$B(t+\Delta t) - B(t) \approx r \cdot \Delta t$$

$$r(t) = k(\,) \cdot B(t)$$

r rappresenta il tasso di crescita della popolazione di batteri

$$r(t) = k(S) \cdot B(t)$$

I batteri per crescere e moltiplicarsi consumano un **substrato *S***, con concentrazione in kmol/m^3

$\boldsymbol{k(S)}$?

$$k(S) = k' \cdot S$$

$$k(S) = \frac{k_1 \cdot S}{k_2 + S}$$ *Eq. di Michaelis-Menten*

S piccolo: $k(S) = k' \cdot S$
S grande: $k(S) \to \infty$

$$r = k' \cdot S \cdot B$$

S piccolo: $k(S) \sim \frac{k_1}{k_2} S = k' \cdot S$
S grande: $k(S) \sim \frac{k_1 \cdot S}{S} = k_1$

$$r = \frac{k_1 \cdot S}{k_2 + S} \cdot B$$

Esercizio 2.1 – Derivazione equazioni (2/2)

Riproduzione batteri:

$$B + \alpha S \underset{k_2}{\overset{k_1}{\leftrightarrow}} BS \overset{k_3}{\rightarrow} B + B$$

Rate di crescita:

$$r = k_3 \cdot c_{BS}$$

Bilancio su BS:

$$\frac{dc_{BS}}{dt} = k_1 c_B c_S - k_2 c_{BS} - k_3 c_{BS}$$

Ipotesi quasi steady-state per BS

$$\frac{dc_{BS}}{dt} \sim 0$$

$$c_{BS} = \frac{k_1 c_B c_S}{k_2 + k_3} = \frac{c_B c_S}{K_M}$$

$$K_M = \frac{k_2 + k_3}{k_1}$$

In ogni istante:

$$c_B^{tot} = c_B + c_{BS}$$

$$c_{BS} = \frac{(c_B^{tot} - c_{BS})\, c_S}{K_M}$$

$$c_{BS} = \frac{c_B^{tot} \cdot c_S}{K_M + c_S}$$

$$\frac{dc_B^{tot}}{dt} = r = k_3 \cdot \frac{c_B^{tot} \cdot c_S}{K_M + c_S}$$

$$\frac{dc_S^{tot}}{dt} = -\alpha \cdot r = -\alpha \cdot k_3 \cdot \frac{c_B^{tot} \cdot c_S}{K_M + c_S}$$

Esercizio 2.1 – Crescita della biomassa

$$\frac{dc_B^{tot}}{dt} = r = k_3 \cdot \frac{c_B^{tot} \cdot c_S}{K_M + c_S} \qquad \frac{dc_S^{tot}}{dt} = -\alpha \cdot r = -\alpha \cdot k_3 \cdot \frac{c_B^{tot} \cdot c_S}{K_M + c_S}$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1 \cdot \frac{B \cdot S}{k_2 + S} \qquad \frac{dS}{dt} = -k_3 \cdot k_1 \cdot \frac{B \cdot S}{k_2 + S}$$

k_1=0.5 h^{-1}

k_2=10^{-7} kmol/m^3

k_3=0.6

B(t=0) = 1 kmol/m^3

S(t=0) = 1 kmol/m^3

Esercizio 2.1 Determinare l'evoluzione di B e S nel temp.

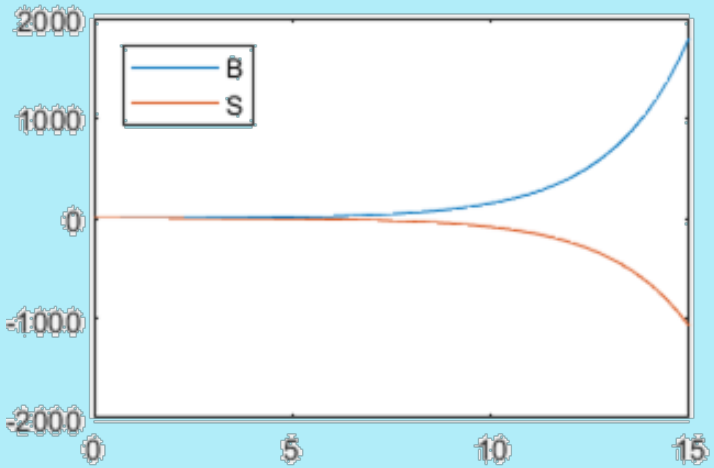
Un'equazione differenziale è detta **stiff** (rigida, difficile) se i metodi di risoluzione sono numericamente instabili a meno di utilizzare step di integrazione estremamente piccoli.

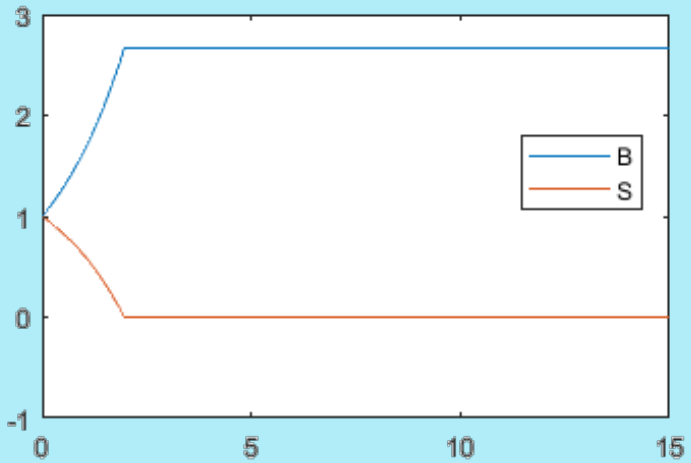
- **ode45**, ode23, ode113 — adatte a problemi non stiff
- **ode15s**, **ode23s** — adatte a problemi **stiff**

Esercizio 2.1 – Soluzione

Utilizzando **ode45**:

```
>>  [tout,yout]=ode45(@crescitabatteri,ranget,y0);
>>  [tout,yout]=ode45(@crescitabatteri,ranget,y0,odeset('AbsTol',1e-6,'RelTol',1e-3));
```





Trovare la soluzione corretta con ode45 è in teoria possibile:

```
>>  [tout,yout]=ode45(@crescitabatteri,ranget,y0,odeset('AbsTol',1e-12,'RelTol',1e-10));
```

Ma richiede di impostare tolleranze molto ridotte, con passi estremamente piccoli: **problema stiff**.

Utilizzando **ode23s**:

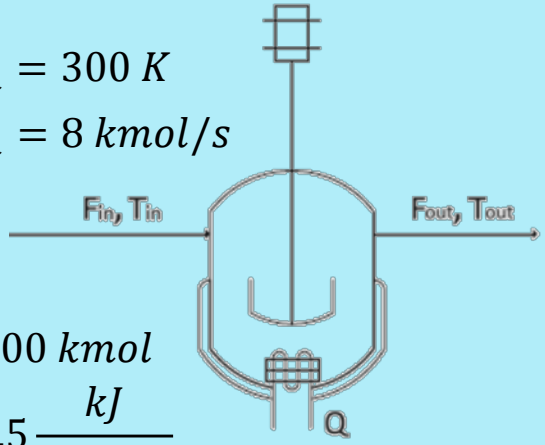
```
>>  [tout,yout]=ode23s(@crescitabatteri,ranget,y0,odeset('AbsTol',1e-12,'RelTol',1e-10));
```

Esercizio 2.2 – Serbatoio miscelato e riscaldato

Esercizio 2.2 – Variazione della temperatura in un serbatoio

$T_{in} = 300\ K$

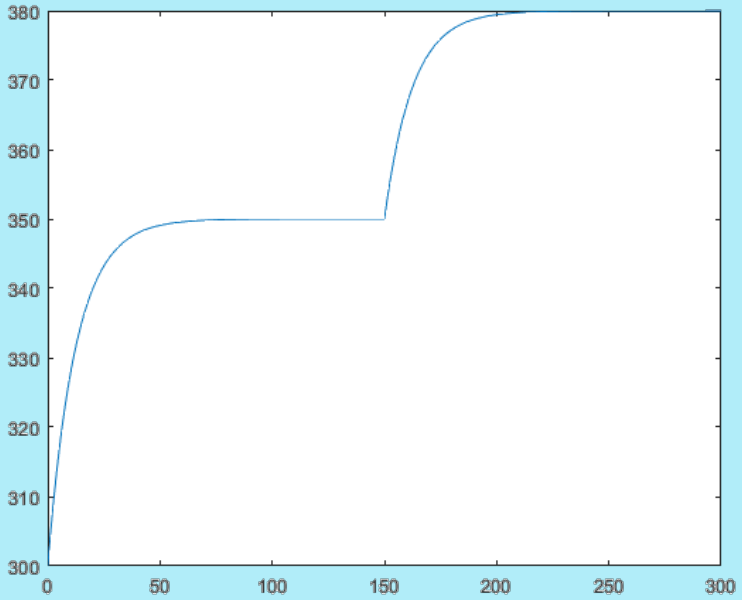
$F_{in} = 8\ kmol/s$



$n = 100\ kmol$

$c_p = 2.5 \frac{kJ}{kmol\ K}$

$\dot{Q} = 1\ MW$



$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = F_{in} - F_{out} \\ \frac{dE}{dt} \approx \frac{dH}{dt} = \dot{H}_{in} - \dot{H}_{out} + \dot{Q} \end{cases}$$

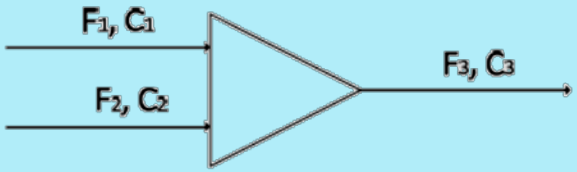
$$\frac{dn}{dt} = 0 \qquad F_{in} = F_{out} = F$$

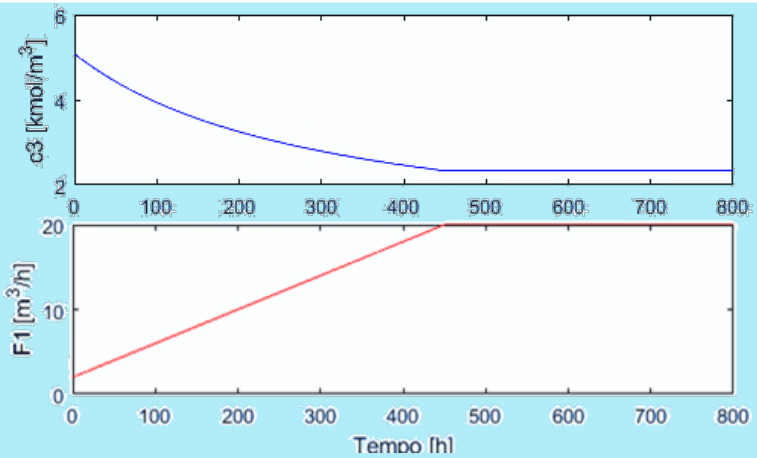
$$\frac{nc_P dT}{dt} = F_{in} c_P T_{in} - F_{out} c_P T + \dot{Q} = F c_P (T_{in} - T) + \dot{Q}$$

Studiare l'effetto di un disturbo a gradino di + 30°C su T_{in}

Esercizio 2.3 – Serbatoio miscelato e riscaldato

Esercizio 2.3 – Miscelazione di due correnti





$$\frac{dn_{tot}}{dt} = F_1 + F_2 - F_3 = 0$$ Il miscelatore non si riempie né si svuota $$F_3 = F_1 + F_2$$

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{V dc_i}{dt} = F_1 c_i^1 + F_2 c_i^2 - F_3 c_i$$

$V = 0.5\ m^3$

$c_i^1 = 0.5\ kmol/m^3$

$c_i^2 = 6\ kmol/m^3$

$$c_i^3(t=0) = \frac{F_1(t=0)c_i^1 + F_2 c_i^2}{F_3(t=0)}$$

$F_2 = 10\ m^3/h$

$F_1(t=0) = 2 m^3/h$

$F_1(\mathrm{t}) = F_1(\mathrm{t}=0) + 0.04 \cdot \mathrm{t}\ m^3/h$

$F_{1,max} = 20\ m^3/h$

$$F_1(\mathrm{t}) = \min(2 + 0.04 \cdot \mathrm{t}, 20)\ m^3/h$$

Esercizio 2.4 – Reazione in serbatoio stoccaggio

Esercizio 2.4 – Reazione indesiderata in un serbatoio

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = \frac{\Psi}{B}(1 - z)^n \cdot h(\theta) \\ \frac{d\theta}{dt} = \Psi(1 - z)^n \cdot h(\theta) - \theta \end{cases}$$

$$C.I. \quad \begin{cases} z(0) = 0 \\ \theta(0) = 1 \end{cases}$$

$$h(\theta) = \exp\left(\frac{\theta}{1 + \varepsilon\theta}\right)$$

$$n = 1 \quad B = 20 \quad \varepsilon = 0.05$$

$$\Psi = 0.35 \div 0.65$$

Studiare la dinamica di z e θ al variare di Ψ