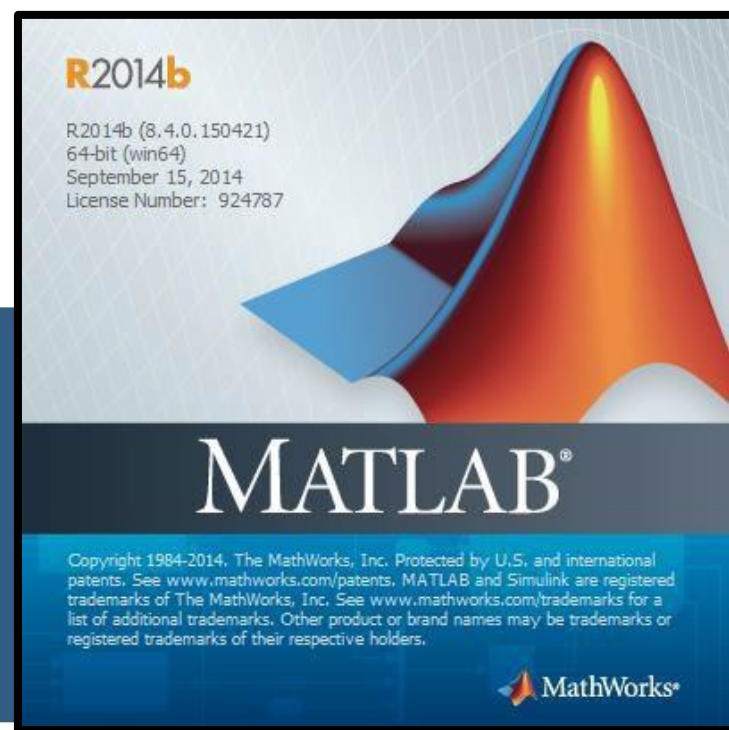




 POLITECNICO DI MILANO



Esercitazione 2 - Soluzioni

Corso di Strumentazione e Controllo di impianti chimici

Prof. Davide Manca

PSE-Lab



2.1

Ese 2.1 – Crescita della biomassa

Un processo biologico condotto in un reattore batch è caratterizzato dalla crescita della biomassa (B) a scapito del substrato (S). I bilanci materiali per le due specie sono:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = \frac{k_1 BS}{k_2 + S} \\ \frac{dS}{dt} = -\frac{k_3 k_1 BS}{k_2 + S} \end{cases}$$

$$k_1 = 0.5 \text{ h}^{-1}$$

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

$$k_3 = 0.6$$



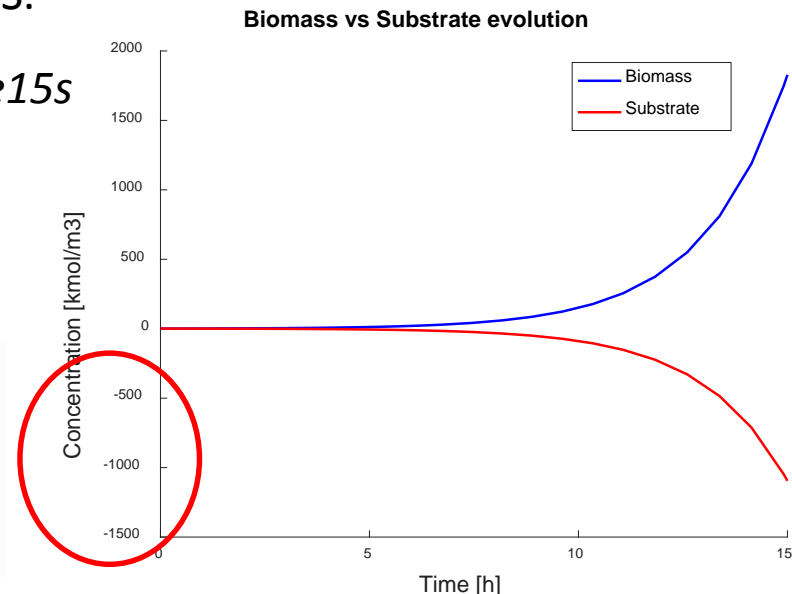
Ordine di grandezza molto diverso: potrebbe essere un problema **stiff**.

Determinare la dinamica delle concentrazioni di B ed S.

Azione suggerita: Usa un risolutore *stiff*, i.e. *ode23s*, *ode15s*

```
[t,s] = ode23s(@SisDiff,tspan,c0);
```

Risultato: La concentrazione diventa **negativa**.





Integration error control

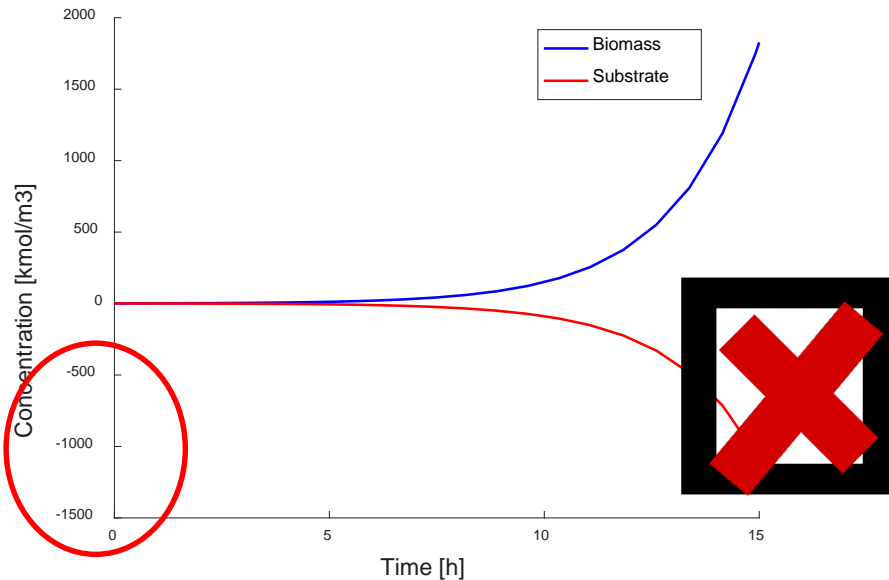


Impostare dei valori troppo alti di tolleranza sull'errore di integrazione può portare a risultati numerici non corretti. Per evitare che ciò accada è possibile settare valori diversi da quelli di default (10^{-3} per *RelTol* e 10^{-6} per *AbsTol*).

```
optionsODE = odeset('RelTol',1e-10,'AbsTol',1e-12);  
[t,s] = ode23s(@SisDiff,tspan,c0,optionsODE);
```

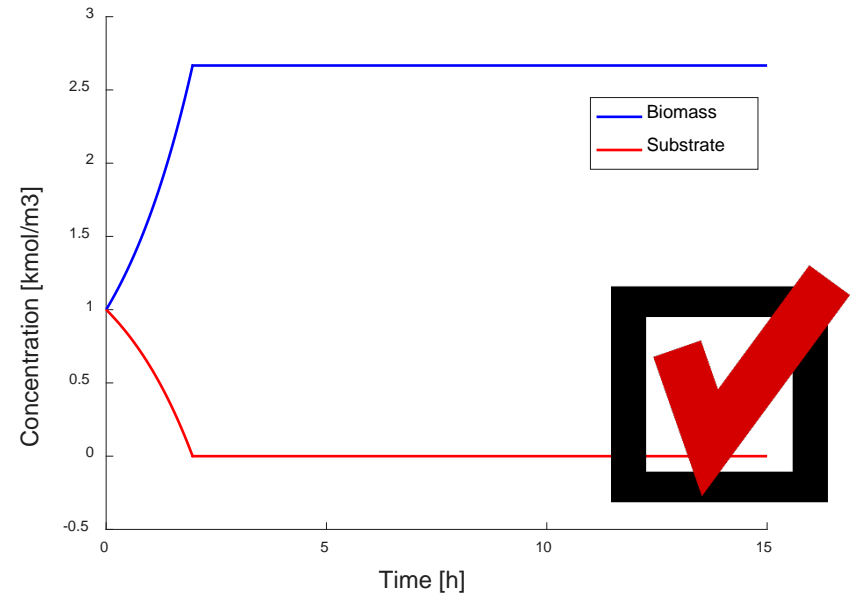
Valori di default:

Biomass vs Substrate evolution



Nuovi valori settati con options:

Biomass vs Substrate evolution





Script



```
function Biomassa % E 2.1 Questa function contiene il comando di risoluzione delle ODEs,i
dati di input, e le istruzioni per il grafico
clc % cancello quello che c'è scritto sulla Command Window
clear all % cancello le variabili salvate nel Workspace
close all % Chiudo le figure aperte

global k1 k2 k3 % Passo i valori da questa function a quella che contiene il sistema ODE
% Dati input
k1 = 0.5; %[h^-1]
k2 = 1e-7;% [kmol/m3]
k3 = 0.6; % [-]

c0 = [1 1]; % [kmol/m3] Valori iniziali per la biomassa e il substrato
tspan = [0 15]; %[h] intervallo di integrazione

% Comando
optionsODE = odeset('RelTol',1e-10,'AbsTol',1e-14);
[t,s] = ode23s(@SisDiff,tspan,c0,optionsODE);
B = s(:,1); % Concentrazione biomassa, prima colonna di s
S = s(:,2); % Concentrazione substrato, seconda colonna di s
% Grafico figure(1)
hold on % Voglio rappresentare più grafici nella stessa figura
plot(t,B,'b','LineWidth',1.3) % grafico profilo di concentrazione di B
plot(t,S,'r','LineWidth',1.3) % grafico profilo di concentrazione di S
xlabel('Time [h]','FontSize',16) % Rinomino l'asse x
ylabel('Concentration [kmol/m3]','FontSize',16) % Rinomino l'asse y
title('Biomass vs Substrate evolution','FontSize',16) % Dò un titolo alla figura
legend('Biomass','Substrate') % Definisco la legenda
end % Chiudo la function
```



Script



Output = Valore della derivata

La ODE è funzione del tempo t e dell'incognita y

```
function ds = sisDiff(t,y)
% Contiene il sistema di equazioni differenziali

global k1 k2 k3 % Passo il valore delle costanti dalla
function principale

% Ridefinisco i nomi delle incognite (per comodità)
B = y(1);
S = y(2);

ds(1,:) = (k1*B*S)/(k2 + S); % bilancio Biomassa
ds(2,:) = - k3* (k1*B*S)/(k2+S); % bilancio Substrato

end % Chiudo la function
```

NB. La `function` Biomassa e la `function` `SisDiff` fanno parte dello stesso script. È possibile scriverle in due script separati a patto che questi si trovino nella stessa cartella e i nomi delle `function` corrispondano ai nomi con cui sono salvati i file.



2.2

Ese 2.2 – Variazione della temperatura in un serbatoio

Si consideri un serbatoio di accumulo intermedio perfettamente miscelato (CST) e riscaldato. Valutare la dinamica della temperatura in uscita qualora si abbia un disturbo a gradino (supponiamo a $t = 150$ s) di 30°C sulla temperatura in ingresso.

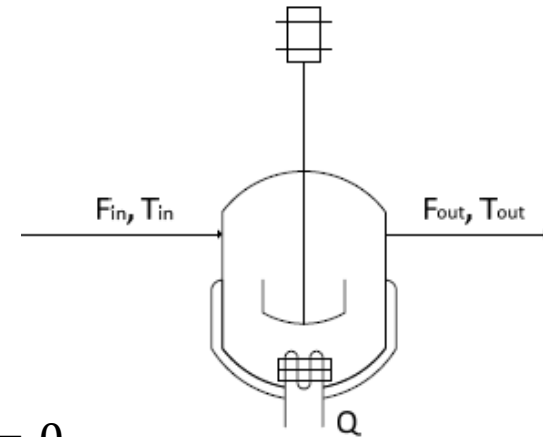
$$\dot{Q} = 1 \text{ MW}$$

$$T_{in} = 300 \text{ K}$$

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

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

$$m = 1000 \text{ kmol}$$



$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dm}{dt} = F_{in} - F_{out} = 0 \\ \frac{dH}{dt} = \dot{H}_{in} - \dot{H}_{out} + \dot{Q} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{dm}{dt} = F_{in} - F_{out} = 0 \\ \frac{mdh}{dt} + \cancel{\frac{hdm}{dt}} = \dot{H}_{in} - \dot{H}_{out} + \dot{Q} \end{array} \right.$$

Il bilancio entalpico finale ci permette di valutare la dinamica della temperatura in uscita:

$$\frac{m c_p dT}{dt} = F_{in} c_p T_{in} - F_{out} c_p T + \dot{Q}$$



Ese 2.2 – Variazione della temperatura in un serbatoio

Si consideri un serbatoio di accumulo intermedio perfettamente miscelato (CST) e riscaldato. Valutare la dinamica della temperatura in uscita qualora si abbia un disturbo a gradino (supponiamo a $t = 150$ s) di 30°C sulla temperatura in ingresso.

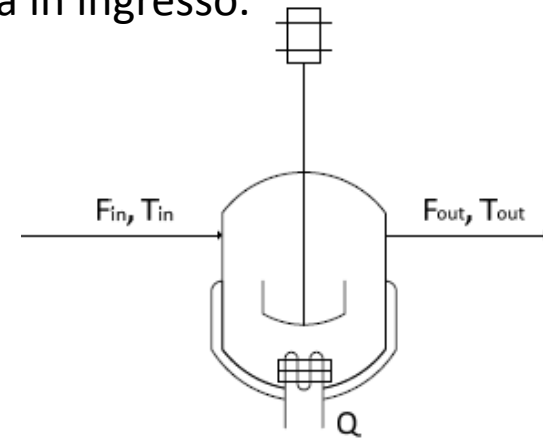
$$\dot{Q} = 1 \text{ MW}$$

$$T_{in} = 300 \text{ K}$$

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

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

$$m = 1000 \text{ kmol}$$



Il bilancio entalpico finale ci permette di valutare la dinamica della temperatura in uscita:

$$\frac{m c_p dT}{dt} = F_{in} c_p T_{in} - F_{out} c_p T + \dot{Q}$$

Azione suggerita: Usa il ciclo **if** per implementare il disturbo a gradino.



Script



```
function dT = dinamicaT(t,T) % Contiene l'equazione ODE

global Q Fin Fout n cp T0 % Passo il valore dalla funciton
principale

if t < 150
    Tin = 300; % La temperatura vale 300 fino al momento in
cui ho il disturbo a gradino
elseif t >= 150
    Tin = T0 + 30; % La temperatura vale 330 dal momento in
cui ho il disturbo
End % Chiudo il ciclo if

dT(1,:) = (Fin*cp*Tin - Fout*cp*T + Q)/(n*cp);

end % Chiudo la function
```

Implemento un ciclo if



Script



```
function SerbatoioRiscaldato % E 2.2
% function Main: contiene i dati di input, il comando per la risoluzione della ODE
% e le istruzioni per i grafici
clc
clear all
close all
global Q Fin Fout n cp T0 % Passo i valori da una function all'altra
% Dati input
Q = 1e3; % kW
Fin = 8; % kmol/s;
Fout = Fin;
n = 100; % kmol
cp = 2.5; % kJ/kmol K
T0 = 300; % K

% Comando
optionsODE = odeset ('RelTol',1e-8,'AbsTol',1e-10);
[t,Tout] = ode15s(@dinamicaT,[0 300],T0,optionsODE);

% continua nella prossima diapositiva
```



Script



```
% Grafico 1 : dinamica della T in uscita
figure(1)
subplot(2,1,1) % vedi diapositiva 11
plot(t,Tout,'b','LineWidth',1.3) % grafico profilo della T in uscita
xlabel('Time [s]','FontSize',18) % Rinomino l'asse x
ylabel('Tout [K]','FontSize',18) % Rinomino l'asse y
title('Temperature dynamics in a vessel','FontSize',18) % Dò un titolo alla figura
ylim([300 390]) % Limiti asse y

% Costruisco il vettore T in ingresso per graficarlo
index = find(t >= 150); % La funzione find permette di trovare gli indici che corrispondono al
vettore tempo dal momento in cui ho il disturbo a gradino.

% Grafico 2 : dinamica della T in ingresso
subplot(2,1,2)
for i = 1:length(t) % Il ciclo for mi permette di creare un vettore T_feed della stessa lunghezza
di t
    if i < index(1) % La Tin vale 300 fino al momento in cui ho il disturbo a gradino (150 s)
        T_feed(i) = 300;
    else % La Tin vale 330 dal momento in cui ho il disturbo a gradino (150 s)
        T_feed(i) =
330;
    end % chiudo il ciclo if
end % chiudo il ciclo for
plot(t,T_feed,'r','LineWidth',1.3)
title('Inlet temperature profile','FontSize',18)
xlabel('Time [s]','FontSize',18)
ylabel('Tin [K]','FontSize',18)
end % chiudo la function SerbatoioRiscaldato
```



Soluzione



`subplot(n,m,p)` →

Questo comando mi permette di incolonnare o mettere nella stessa riga più grafici nella stessa figura, come si vede sotto.

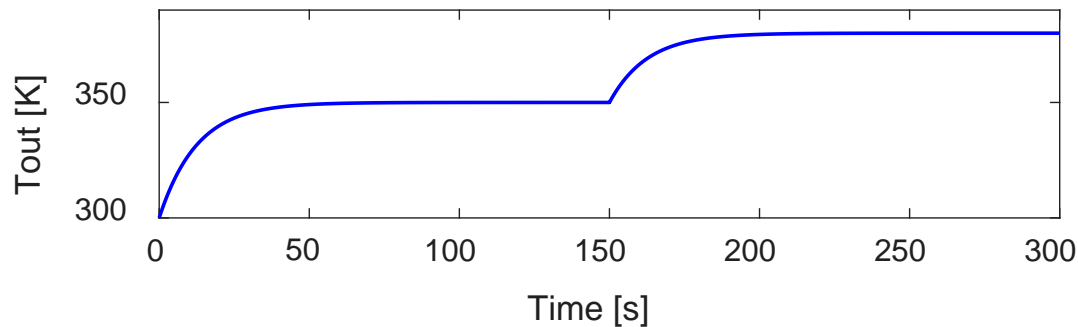
`n` righe

`m` colonne

`p` posizione

Colonna 1

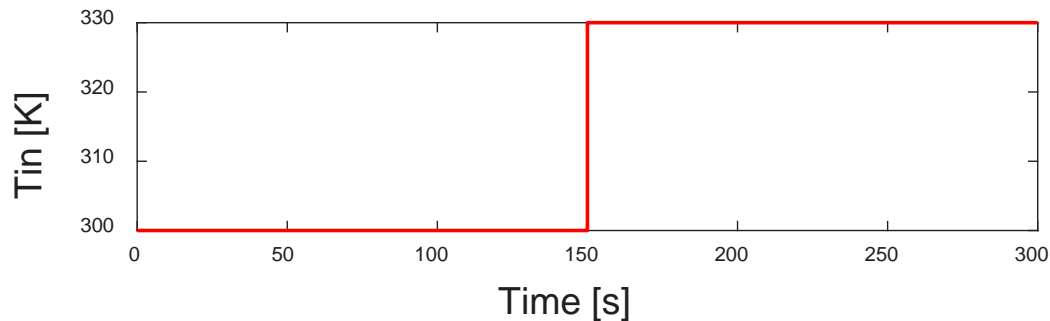
Temperature dynamics in a vessel



Riga 1

Posizione 1

Inlet temperature profile



Riga 2

Posizione 2



2.3



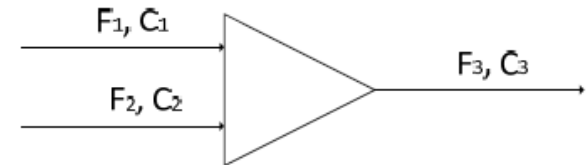
Ese 2.3 – Miscelazione di due correnti

Si consideri la miscelazione di due correnti a differente concentrazione dello stesso composto. Si determini la dinamica della concentrazione in uscita.

$$F_1(t = 0) = 2 \text{ kmol/m}^3 \quad F_1(t) = 2 + 0.04t \text{ kmol/m}^3$$

$$F_2 = 10 \text{ kmol/m}^3 \quad F_{1,max} = 20 \text{ kmol/m}^3$$

$$V = 0,5 \text{ m}^3$$



Per risolvere scriviamo il seguente bilancio, che descrive la dinamica della concentrazione in uscita:

$$\begin{cases} \frac{VdC_3}{dt} = F_1(t)C_1 + F_2C_2 - F_3C_3 \\ C_{30} = \frac{(F_1(t = 0)C_1 + F_2C_2)}{F_3} \end{cases}$$

Azione suggerita: Usa l'operatore **min** per limitare la portata di F1.



Script



```
function dC = DynamicConc(t,C3) % Contiene l'equazione ODE

global F2 C1 C2 V

    F1 = 2 + 0.04*t; % La portata F1 varia con il tempo
    F1_max = 20; % Definisco il valore massimo
    F1 = min(F1,F1_max); % F1 ha il valore più piccolo tra
20 e il risultato dell'espressione dipendente dal tempo
    F3 = F1 + F2;

dC(1,:) = (F1*C1+F2*C2-F3*C3)/V;

end
```



Script



```
function Mixing % ESE 2.3 Contiene il comando di risoluzione
dell'equazione ODE, I dati di input e le istruzioni per i grafici
clc
clear all
close all
global F2 C1 C2 V
% Dati input
F10 = 2; %m3/h
F2 = 10; %m3/h
C1 = 0.5; % kmol/m3
C2 = 6; %kmol/m3
V = 0.5; %m3
F3 = F10 + F2;

tspan = [0 600]; % intervallo di integrazione
c30 = (F10*C1 + F2* C2)/F3; % condizione iniziale

% Comando
optionsODE = odeset ('RelTol',1e-8,'AbsTol',1e-12);
[t,c3] = ode23s(@DynamicConc,tspan,c30,optionsODE);

% continua nella prossima diapositiva
```



Script



```
figure(1)
subplot(2,1,1) % Grafico della dinamica della concentrazione alla posizione 1
plot(t,c3,'b','LineWidth',1.3)
title('Dynamics of the concentration','FontSize',12)
xlabel('Time [h]','FontSize',12)
ylabel('Concentration [kmol/m3]','FontSize',12)

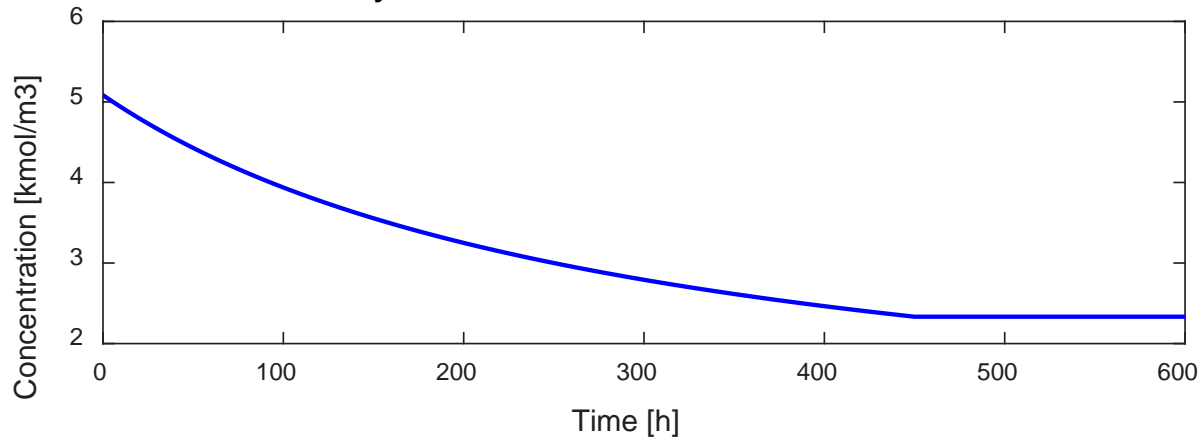
F1dyn_max = 20;
F1dyn = 2 + 0.04*t; % noto t, posso costruire il vettore F1
F1dyn = min(F1dyn,F1dyn_max); % limite F1
subplot(2,1,2)
plot(t,F1dyn,'r','LineWidth',1.3) % Grafico della dinamica della portata in
ingresso alla posizione 2
title('Dynamics of the inlet flow','FontSize',12)
xlabel('Time [h]','FontSize',12)
ylabel('F1 [kmol/h]','FontSize',12)
end
```



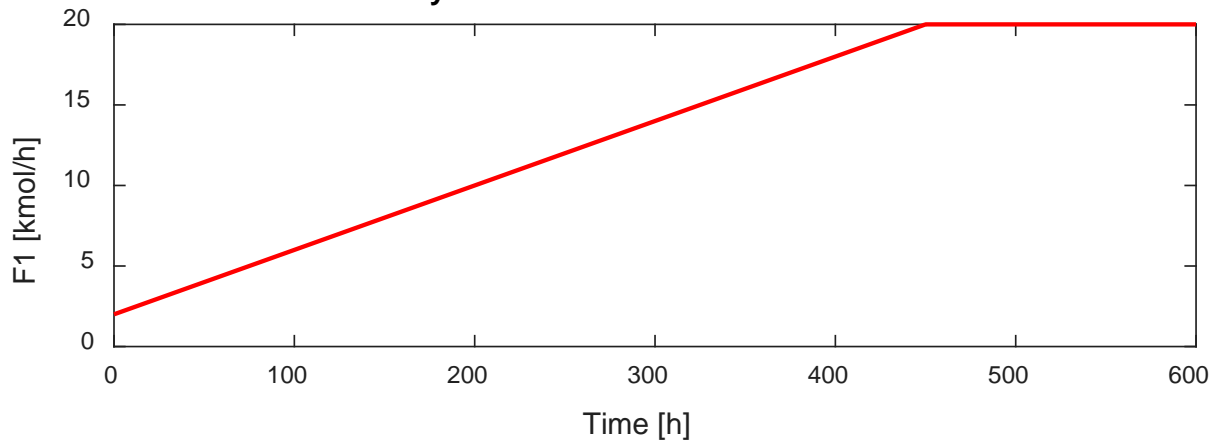
Soluzione



Dynamics of the concentration



Dynamics of the inlet flow



→ !
Limite portata massima
su F1



2.4



Ese 2.4 – Sensitività di reazione in un serbatoio di stoccaggio

In un serbatoio di stoccaggio avviene una reazione indesiderata. La variazione di conversione (z) e la temperatura (θ) possono essere descritte mediante le seguenti correlazioni:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dz}{dt} = \frac{\Psi}{B} (1 - z)^n h(\theta) \\ \frac{d\theta}{dt} = \Psi (1 - z)^n h(\theta) - \theta \\ C.I. z(0) = 0 \\ C.I. \theta(0) = 1 \end{array} \right. \quad h(\theta) = \exp\left(\frac{\theta}{1 + \varepsilon\theta}\right)$$

In tali relazioni, B rappresenta il calore di reazione; n l'ordine di reazione; β il rapporto tra il calore di reazione e il calore asportato per scambio termico; ε rappresenta l'energia di attivazione della reazione; h il termine esponenziale della cinetica di reazione. Tutte le variabili sono opportunamente adimensionalizzate. Si valuti la dinamica di temperatura al variare del parametro β tra 0.35 e 0.65.

$$n = 1$$

$$\beta = 20$$

$$\varepsilon = 0,05$$



2.4



Ese 2.4 – Sensitività di reazione in un serbatoio di stoccaggio

In un serbatoio di stoccaggio avviene una reazione indesiderata. La variazione di conversione (z) e la temperatura (θ) possono essere descritte mediante le seguenti correlazioni:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dz}{dt} = \frac{\Psi}{B} (1 - z)^n h(\theta) \\ \frac{d\theta}{dt} = \Psi (1 - z)^n h(\theta) - \theta \\ C.I. z(0) = 0 \\ C.I. \theta(0) = 1 \end{array} \right. \quad h(\theta) = \exp\left(\frac{\theta}{1 + \varepsilon\theta}\right)$$

Azione suggerita: Usa un ciclo **for** per valutare la dinamica di temperatura e concentrazione a diversi valori di Ψ compresi tra 0.35 e 0.65.



Script



`function` ReazioneInSerbatoio % E 2.4 Contiene I dati di input, il comando delle ODEs e le istruzioni per I grafici

```
clc
clear all
close all
```

```
global Psi n B epsi
```

```
% Dati input
```

```
n = 1;
B = 20;
epsi = 0.05;
```

```
c0 = [0 1];
tspan = [0 100];
```

```
% Comando
```

```
for Psi = 0.35:0.05:0.65
    optionsODE = odeset ('RelTol',1e-8,'AbsTol',1e-12);
    [t,Z] = ode23s(@SistemaDiff,tspan,c0,optionsODE);
```

```
% continua nella diapositiva successiva
```

Il comando ode e i grafici si trovano all'interno del ciclo **for**





Script



```
% Istruzioni grafici
figure (1) % Grafico dell'andamento della conversione
hold on
plot (t,Z(:,1),'LineWidth',1.3);
title ('andamento conversione','FontSize',18)
xlabel ('Time','FontSize',18)
ylabel ('Conversion','FontSize',18)
xlim([0 30]) % Limiti asse x

figure (2) % Grafico dell'andamento della temperatura
hold on
plot (t,Z(:,2),'LineWidth',1.3);
title ('andamento Temperatura','FontSize',18)
xlabel ('Time','FontSize',18)
ylabel ('Temperature','FontSize',18)
xlim([0 30])
end % Chiudo il ciclo for

end % Chiudo la function
```



Script



```
function dz = SistemaDiff(t,z) % Contiene il Sistema ODE

global Psi n B epsi

X = z(1); % conversione
T = z(2); % temperatura

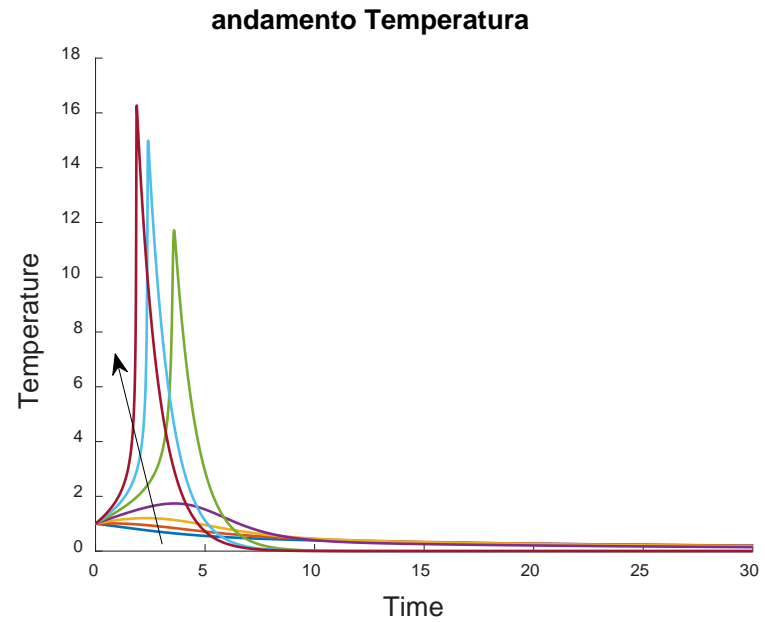
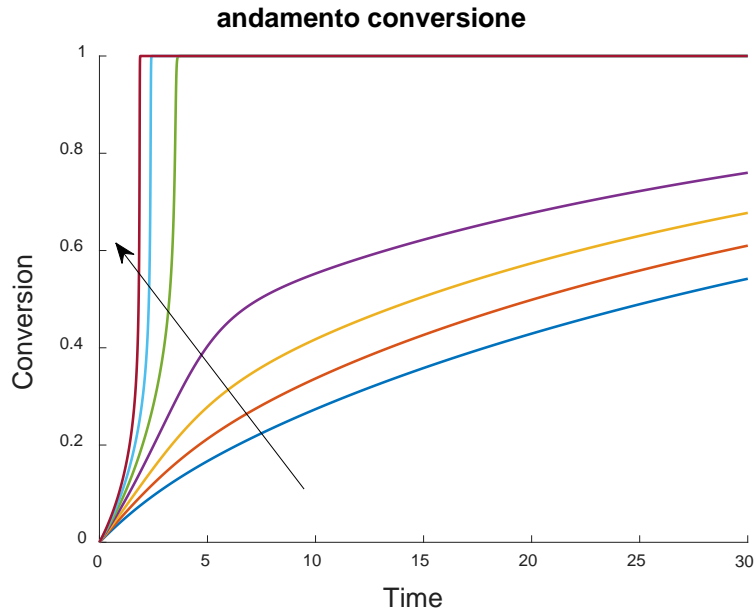
h = exp(T/(1+(epsi*T)));

dz(1,:) = Psi/B*((1-X)^n)*h;
dz(2,:) = Psi*((1-X)^n)*h - T;

end % Chiudo la function
```



Soluzione



NB. La freccia indica il verso dell'aumento di Ψ . La reazione indesiderata è infatti favorita dall'aumento di temperatura