

Indice

1	I fondamentali	1
1.1	Introduzione	1
1.2	Bilanci di materia	3
1.2.1	Una premessa: le variabili intensive e estensive	3
1.2.2	Bilanci di materia di sistemi reagenti	5
1.2.3	Stechiometria della reazione	5
1.2.4	Grado di avanzamento e conversione	6
1.2.5	Ragionando in termini di concentrazioni	10
1.2.6	Consistenza di dati sperimentali	12
1.2.7	Reazioni multiple	14
1.2.8	Reazioni indipendenti	17
1.2.9	Valutazione dei gradi di avanzamento da dati sperimentali	18
1.2.10	Sistemi eterogenei	22
1.3	Bilanci di energia	25
1.3.1	Reattori a flusso in stato stazionario	26
1.3.2	Reattori batch	34
R1	Il Reforming	36
2	I limiti termodinamici	41
2.1	Introduzione	41
2.2	Determinazione delle condizioni di equilibrio, note le reazioni indipendenti che evolvono nel sistema	43
2.2.1	Stati di riferimento, costanti di equilibrio e sistemi multifase . . .	52
2.3	Determinazione delle condizioni di equilibrio, note le specie chimiche che si formare	54
2.4	Calcolo delle energie libere nello stato di riferimento e della costante di equilibrio della reazione	56
2.5	Determinazione delle condizioni di equilibrio in un reattore adiabatico .	58
R2	Il Reforming	64

3	Un po' di cinetica chimica	87
3.1	Introduzione	87
3.2	Velocità di reazione	88
3.3	Espressione cinetica intrinseca e apparente	88
3.4	Espressione cinetica intrinseca	90
3.5	Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura	91
3.6	Reazioni reversibili	93
3.6.1	Espressione della velocità di reazione in funzione della conversione.	94
3.6.2	Espressione della velocità di reazione in funzione della conversione e della temperatura	96
R3	Il Reforming	100
4	Reattori ideali	111
4.1	Introduzione	111
4.2	Reattori a flusso perfettamente miscelati funzionanti in condizioni stazionarie	114
4.2.1	Calcolo di progetto e di verifica	115
4.3	Reattori perfettamente miscelati funzionanti in condizioni non stazionarie	120
4.4	Reattori a flusso a pistone	128
4.4.1	Calcolo di progetto e di verifica	129
4.5	Un confronto tra CSTR e PFR	140
4.6	Tempo di riempimento, "space time", "space velocity" e altro	145
4.7	Tempo di permanenza e distribuzione dei tempi di permanenza	147
R4	Il Reforming	150
5	Ancora sui reattori ideali	155
5.1	Introduzione	155
5.2	Sistemi di reattori	156
5.3	Reattori con riciclo	156
5.4	Reazioni multiple	163
5.4.1	Reazioni in parallelo	165
5.4.2	Reazioni in serie	166
5.5	Analisi di un caso complesso	171
5.5.1	Reattore CSTR	172
5.5.2	Reattore PFR	173
R5	Il Reforming	174
6	Effetti termici	181
6.1	Introduzione	181
6.2	Reattori perfettamente miscelati	182
6.2.1	Funzionamento in stato stazionario	182
6.2.2	Scambio termico nei reattori perfettamente miscelati	183
6.2.3	Calcolo di progetto	186
6.2.4	Simulazione del funzionamento di un reattore CSTR	192
6.2.5	Molteplicità di stati stazionari	196

6.2.6	Risposta del reattore alla variazione delle condizioni operative . .	199
6.2.7	Funzionamento del reattore in stato non stazionario	205
6.3	Reattori a flusso a pistone	212
6.3.1	Scelta della temperatura di funzionamento per un reattore in condizioni isoterme	213
6.3.2	Funzionamento adiabatico	214
6.3.3	Reattore PFR raffreddato mediante scambio termico con un fluido a temperatura T_f	218
6.3.4	Sensibilità alle condizioni operative	222