

SOUHRN

Potřeba hlubšího zužitkování ropné suroviny vede ke hledání nových katalytických procesů. Krakování nižších olefinů na žádaný propylen a ethylen patří k těmto nadějným technologiím.

Cílem této práce bylo vytvoření variant simulačních matematických modelů v programu Aspen Plus, které by popisovaly štěpné a izomerační reakce probíhající při katalytickém krakování nižších alkenů na propylen a ethylen.

Pozornost byla soustředěna na krakování modelové látky 1-hexenu. Výsledky simulací byly porovnány s experimenty provedenými pro různé katalyzátory na pokusné základně Chemopetrolu Litvínov. Z kritického zhodnocení experimentů vyplynulo, že data vedle kinetických parametrů jsou také silně ovlivněna chemickou rovnováhou, což značně komplikovalo východisko pro počítačovou simulaci.

Řešení muselo zahrnout výběr reakčního schématu, volbu vhodných modelů chemických reaktorů v Aspen Plus zahrnující rovnováhu, kinetiku a jejich kombinace a nelineární optimalizaci při identifikaci neznámých parametrů modelů.

Výsledkem jsou parametry mocninové kinetiky pro charakterizaci použitých katalyzátorů a předpověď selektivity a výtěžku při různém zatížení reaktoru.

Název diplomové práce: Katalytické přeměny uhlovodíků – krakování nižších alkenů

Studijní obor: Technologie organických látek

Diplomantka: Petra Heroutová

Vedoucí práce: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.