

## SOUHRN

Cílem práce je vytvoření variabilních matematických modelů experimentální aparatury programem ASPEN Plus, který by popisoval štěpné a izomerační reakce uhlovodíků získávané z ropy. Pozornost je zaměřena na zpracování dat transalkylace pyrolýzní reformingové C9-frakce na xyleny a na katalytické štěpení vyšších alkenů na propen a ethylen.

Z teoretických poznatků a z možností nabízených programem byly vytvořeny pro modelovou směs ethylbenzenu s toluenem čtyři modely, tři modely pro směs C9-frakce s toluenem. Na základě porovnání výpočtů a experimentů byl určen model nejlépe popisující transalkylaci dané směsi. Pro modelovou směs ethylbenzenu s toluenem nejlépe experimentu odpovídají výpočty modelem rovnovážného reaktoru REquil, pro druhou směs C9-frakce s toluenem jsou nejvíce odpovídající výpočet modelem RCSTR.

Pro zhodnocení dat z katalytického krakování modelové směsi 1-hexenu bylo pro první sadu dat vytvořeno pět variant modelů, poslední dva modely byly použity ke zpracování druhého souboru dat. Výpočty byly porovnány s experimentem a byl označen model nejvhodnější k popisu katalytického krakování. Podklady pro výpočty vyhovují nejlépe co nejjednoduššímu modelu. Pro obě sady dat nejvíce experimentům odpovídají výpočty modelem trubkového reaktoru RPlug. Z porovnání kinetických výpočtů s experimentálními daty vyplývá, že kinetika musí být ovlivněna rovnováhou.

Na závěr jsou vytvořeny ještě dva simulační modely pro hypotetickou směs pentenů. Pro druhý z modelů jsou uvažovány další vedlejší reakce, porovnání výpočtů obou modelů ale dává podobné výsledky.

|                        |                                |
|------------------------|--------------------------------|
| Název diplomové práce: | Katalytické přeměny uhlovodíků |
| Studijní obor:         | Technologie organických látek  |
| Diplomant:             | Zuzana Kroupová                |
| Vedoucí práce:         | Doc.Ing. Vratislav Tukač, CSc. |

Práce byla odevzdána dne 10. května 2002