

## SOUHRN

Diplomová práce se zabývá matematickým modelováním průmyslové pyrolýzy uhlovodíků. K modelování byl zvolen empirický model umělých neuronových sítí a mechanistický model založený na detailním popisu radikálových reakcí.

V literární části jsou popsány publikované empirické modely a jejich vývoj od jednodušších modelů po modely složitější. Dále jsou uvedeny základy teorie umělých neuronových sítí a metody optimalizace jejich parametrů. Pro mechanistický model odkazuje teoretická část na tři reprezentativní publikované radikálové mechanismy, které popisují průmyslovou či laboratorní pyrolýzu různých surovin. Pozornost je věnována také analytickým metodám, které se běžně používají pro stanovení parametrů kinetických rovnic radikálových reakcí.

V experimentální části jsou prezentována data získaná z provozních měření na ethylenové jednotce v Chemopetrolu Litvínov. Data zahrnují pyrolýzu ethanu, lehkých zkapalněných rafinérských plynů, benzinu, atmosférických plynových olejů, a vakuových destilátů z hydrokrakování. V experimentální části jsou dále analyzovány plány provozních měření z hlediska použitých provozních podmínek.

Empirický model na bázi neuronových sítí byl vyvinut pro predikci výtěžků pyrolýzy ethanu, lehkých zkapalněných rafinérských plynů, benzinů, atmosférických plynových olejů a vakuových destilátů z hydrokrakování. Pro charakterizaci složení bylo použito zastoupení různě substituovaných uhlíkových atomů v surovině a byla otestována schopnost predikce výtěžků produktů neznámých surovin při různých podmínkách.

Mechanistický model byl vyvinut pro užší spektrum suroviny. Počáteční hodnoty parametrů byly převzaty z literatury. K optimalizaci parametrů mechanistického modelu bylo použito šest typů surovin. Byla ověřena schopnost extrapolace v závislosti na změně složení, teploty, nástřiku a ředění. Dále byl mechanistický model využit pro vypočítání profilů látek a radikálů s literárními daty.

Název diplomové práce:	Empirické a mechanistické modely průmyslové pyrolýzy uhlovodíků
Studijní obor:	Technologie organických látek
Diplomant:	Robert Žiak
Vedoucí práce:	Ing. Petr Zámostný Ph.D.

Práce byla odevzdána dne 14.5.2002