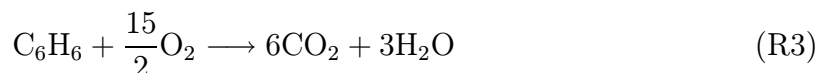
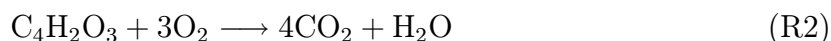
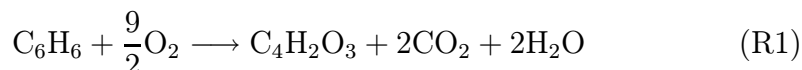
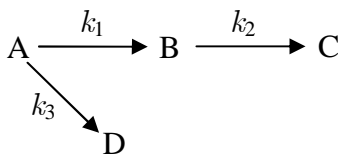


1 Zadání problému

Výroba maleinanhydridu ($\text{C}_4\text{H}_2\text{O}_3$) se provádí oxidací benzenu (C_6H_6) vzduchem v trubkovém reaktoru za přítomnosti katalyzátoru, oxidu vanadičného (V_2O_5). Reakce probíhají podle následujícího schématu.

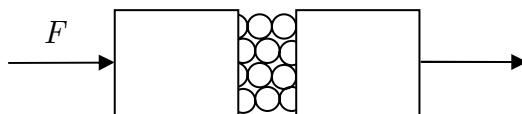


Protože jsou reakce prováděny v přebytku vzduchu, jsou změny objemu zanedbatelné. Uvedené reakce pak lze schematicky zapsat jako reakce pseudo-prvního řádu, kde A = benzen, B = malein anhydrid, C = produkty (CO_2 , H_2O), D = produkty (CO_2 , H_2O); viz. obr. 1.



Obrázek 1: Zjednodušené reakční schéma

Na obr. 2 je náčrtek reaktoru, ve kterém se výroba maleinanhydridu provádí. F označuje objemový průtok na vstupu do reaktoru.



Obrázek 2: Náčrtek reaktoru

2 Matematický popis problému

Reakční schéma lze popsat obyčejnými diferenciálními rovnicemi

$$F \frac{dc_A}{dW} = -k_1 c_A - k_3 c_A, \quad (2a)$$

$$F \frac{dc_B}{dW} = k_1 c_A - k_2 c_B, \quad (2b)$$

$$F \frac{dc_C}{dW} = k_2 c_B, \quad (2c)$$

$$F \frac{dc_D}{dW} = k_3 c_A, \quad (2d)$$

kde c_i jsou molární koncentrace jednotlivých látek podél reaktoru, W je hmotnost katalyzátoru podél reaktoru, k_i jsou rychlostní konstanty jednotlivých reakcí. Řešením jsou funkce $c_i(W)$.

3 Úkol 1 – Izotermní reaktor

Řešte rovnice (2) na intervalu $W \in \langle 0, 10 \rangle$, jestliže jsou zadány údaje z tabulky

údaj	hodnota	jednotka
F	0.0025	m^3/s
k_1	1.40×10^{-3}	$\text{m}^3/(\text{s} \cdot \text{kg KAT})$
k_2	1.46×10^{-3}	$\text{m}^3/(\text{s} \cdot \text{kg KAT})$
k_3	7.65×10^{-5}	$\text{m}^3/(\text{s} \cdot \text{kg KAT})$
$c_A(0)$	10	mol/m^3
$c_B(0)$	0	mol/m^3
$c_C(0)$	0	mol/m^3
$c_D(0)$	0	mol/m^3

Tabulka 1: Zadání izotermního reaktoru

a stanovte optimální hmotnost katalyzátoru v reaktoru (ve smyslu nejvyššího výtěžku maleinanhydridu). Výsledky zpracujte graficky.

4 Úkol 2 – Neizotermní reaktor

Předpokládejte, že rychlostní konstanty jsou funkcemi teploty T

$$k_1(T) = 4280 \exp(-12660/T), \quad (3a)$$

$$k_2(T) = 70100 \exp(-15000/T), \quad (3b)$$

$$k_3(T) = 26 \exp(-10800/T). \quad (3c)$$

Máme navíc rovnici pro teplotu podél reaktoru

$$\frac{dT}{dW} = -k_1 c_A H_1 - k_2 c_B H_2 - k_3 c_A H_3, \quad (4)$$

Řešte nyní **numericky** rovnice (2) a (4) jsou-li zadány následující údaje. Numericky získané výsledky vynesete do grafu.

údaj	hodnota	jednotka
F	0.0025	m ³ /s
H_1	-2000	K s/mol
H_2	-1000	K s/mol
H_3	-1500	K s/mol
$c_A(0)$	10	mol/m ³
$c_B(0)$	0	mol/m ³
$c_C(0)$	0	mol/m ³
$c_D(0)$	0	mol/m ³
$T(0)$	848	K

Tabulka 2: Zadání izotermního reaktoru