

Naziv predmeta	Analiza i modeliranje kemijskih reaktora
Broj sati nastave	20
Okvirni sadržaj predmeta/modula	<p>Kinetička analiza i izbor eksperimentalnog reaktora. Osnovni tipovi eksperimentalnih reaktora – integralni, diferencijalni, bezgradijentni i mikroreaktori. Metode kinetičke analize i obrade eksperimentalnih rezultata. Izbor modela i procjena parametara modela. Primjena ID algoritma (izmijenjena diferencijalna metoda) u procjeni parametara složenih kinetičkih modela. Kemijski reaktor kao procesni prostor. Izvođenje matematičkih modela reaktora na osnovi fizičke predodžbe i pretpostavki o zavisnostima veličina stanja i parametara o reaktorskom prostoru i vremenu. Analiza utjecaja složenosti kinetičkih modela kemijske reakcije i prijenosa tvari na složenost reaktorskog modela. Modeliranje složenih reakcijskih sustava. Analiza i modeliranje reaktora za provedbu reakcija u višefaznim sustavima. Optimiranje rada reaktora s obzirom na broj sudjelujućih reakcija i temperaturni režim. Raspodjela vremena zadržavanja, stabilnost i selektivnost, stacionarni i dinamički rad reaktora. Numeričke metode rješavanja reaktorskih modela prikazanih parcijalnim diferencijalnim jednadžbama. Primjeri: model pseudohomogenog dvodimenzijskog modela reaktora s nepokretnim slojem katalizatora, model fotokatalitičkog anularnog reaktora, model višefaznog reaktora plan-kapljevina (kolona s mjehurićima).</p> <p>Odabrani primjeri naprednih (strukturiranih) izvedbi reaktora:</p> <p>a) Mikroreaktori: Uvod u mikroreaktorsku tehnologiju (MRT) - „state of the art“, definicija mikroreaktora, prednosti kemijskih procesa na mikro razini, područja primjene, suvremene mikroproizvodne tehnike mikroreaktora. Protok fluida u mikrokanalu. Reakcijsko difuzijska dinamika u mikroreaktoru. Numerički eksperimenti i analiza. Primjeri: ekstrakcija steroida u mikrokanalu – teorija i eksperiment, katalizirana sinteza izoamil acetata sa lipazom u mikroreaktoru, mikroreaktor i ionska kapljevina.</p> <p>b) Monolitni reaktori</p> <p>Monolitne strukture, materijali i značajke. Usporedba s konvencionalnim katalitičkim reaktorima. Podjela i primjena monolitnih reaktora. Napredna primjena (dobivanje vodika u gorivim ćelijama, reforming vodenom parom, izučavanje katalizatora i kinetike reakcija). Hidrodinamika, prijenos mase i topline, kinetika, pad tlaka. Modeliranje monolitnih reaktora. Primjeri: usporedba 1D i 2D heterogenih modela monolitnih reaktora za katalitičku redukciju dušikovih oksida (NO<sub>x</sub>).</p>
Opis metoda provođenja nastave	predavanja, seminari i konzultacije
Opis način izvršavanja obveza	izrada seminarskog rada