

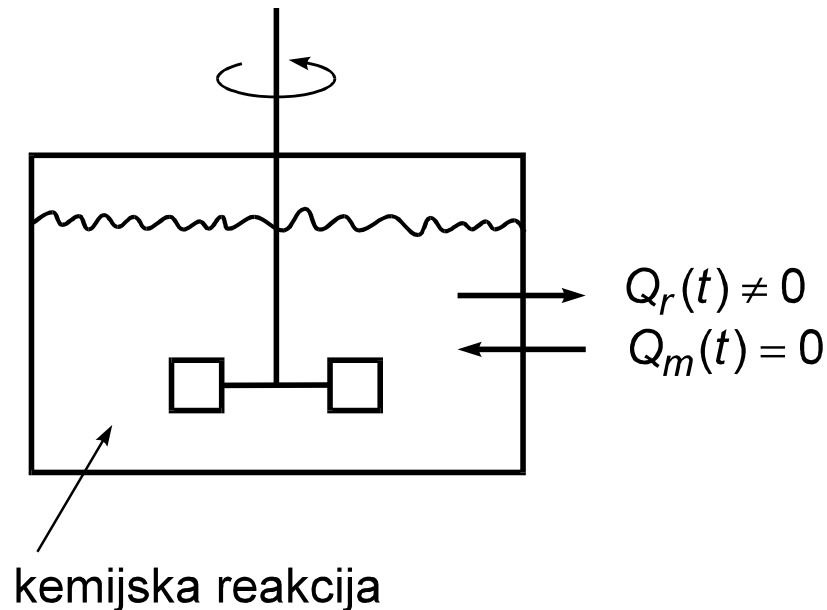
KOTLASTI REAKTORI

akad.god. 2025./26.

- To je **najstarija poznata vrsta reaktora** (npr. proizvodnja piva i sapuna, nađena u Pompejima).
- I danas, mnogi korisni produkti dobivaju se najekonomičnije u kotlastim reaktorima.
- **Jednostavnost izvedbe i prilagodljivost promijenjenim uvjetima i zahtjevima** čini kotlaste reaktore nezamjenjivim procesnim jedinicama u mnogim kemijskim industrijama.
- Kotlasti reaktori se često koriste **za proizvodnju manjih količina produkata**, npr. lijekova, organskih bojila i drugih kemikalija (*fine chemicals industry*).

OSNOVNE ZNAČAJKE

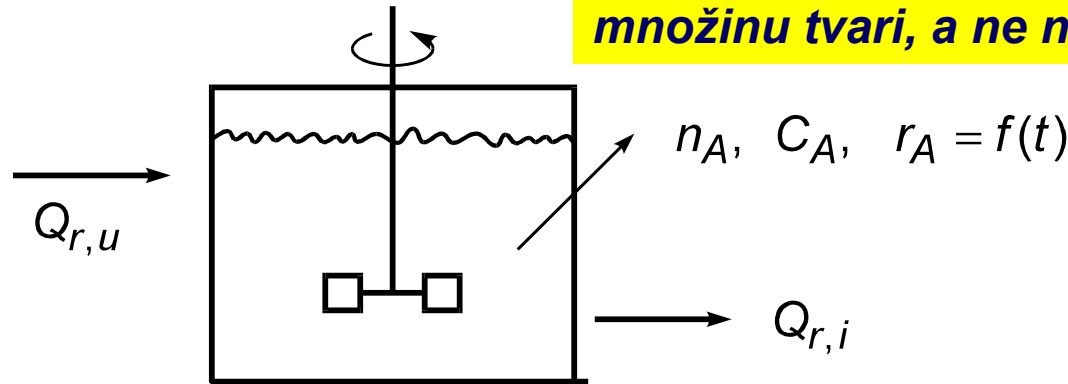
a) Kotlasti reaktor kao zatvoreni sustav



- Za vrijeme kemijske reakcije **ne izmjenjuje se sadržaj odnosno reakcijska smjesa s okolinom** $\Rightarrow$ sva količina reakcijske smjese u KR unese se na početku reakcije, reakcija započinje, traje izvjesno vrijeme i završava, i tek po završetku reaktor se prazni
- **Toplina se može izmjenjivati s okolinom**

b) Kotlasti reaktor kao nestacionarni sustav

pojam nestacionarnosti odnosi se na množinu tvari, a ne na ukupnu masu!



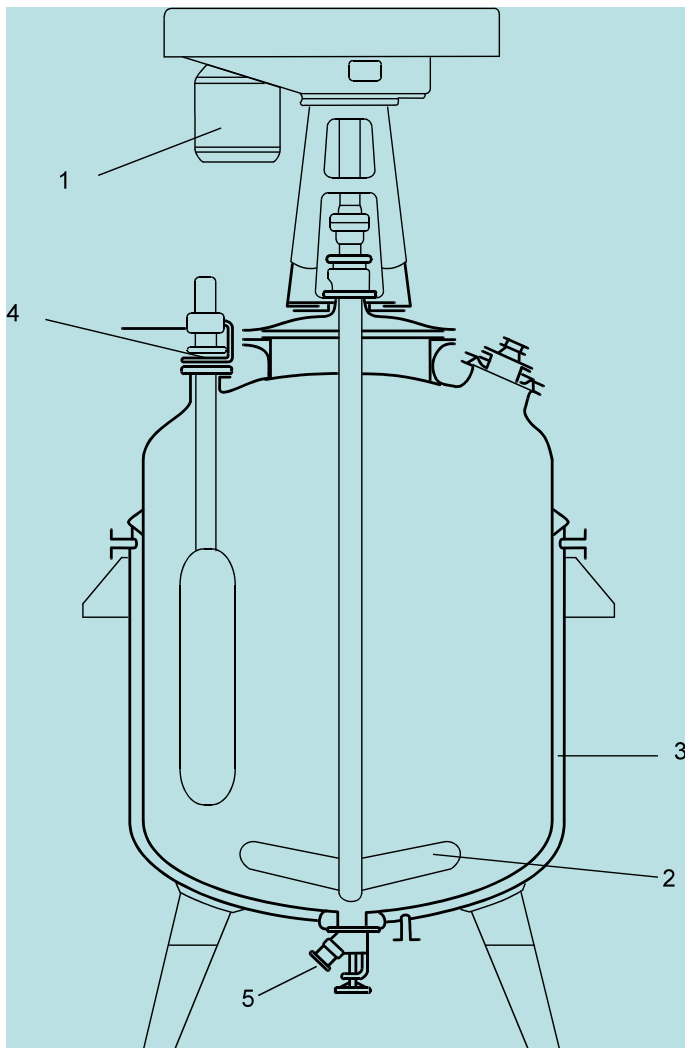
- U kotlastom reaktoru **sve veličine stanja zavise o vremenu, t.** Prema tome sastav reakcijske smjese, brzina kemijske reakcije i količina oslobođene (utrošene) topline uslijed kemijske reakcije su vremenski promjenljive veličine.
- Kod idealnog kotlastog reaktora jedino se temperatura u reaktoru ne mijenja s vremenom, jer se pretpostavlja izotermni rad.
- Model "idealnog" kotlastog reaktora sadrži također pretpostavku da je volumen reakcijske smjese stalan i nezavisan o vremenu tj. da nema promjene gustoće.

c) s obzirom na stalnost veličina stanja i parametara sustava

- Vrijednosti parametara i zavisnih veličina (veličina stanja) **nezavisne su od položaja unutar reaktorskog prostora** $\Rightarrow$ kotlasti reaktori su reaktori s ***homogenim sastavom*** odnosno ***dobrim ili idealnim miješanjem***
- Mnoge značajke kotlastih reaktora *zajedničke* su s onima od PKR reaktora: miješanje i izmjena topline s okolinom - grijanje ili hlađenje.
- Oba tipa reaktora uglavnom se koriste za provedbu reakcija u kapljevitoj fazi.
- Za plinskofazne reakcije češće se koriste PKR reaktori, a za višefazne sustave češće se koriste PKR reaktori u nestacionarnom radu.

- Temperatura se općenito može lako održavati na željenoj vrijednosti, odnosno može se kontrolirati ⇒ **dobro miješanje poboljšava prijenos topline kroz reakcijski medij i kroz stijenke uređaja za izmjenu topline.**
- Vrlo sitne čestice katalizatora mogu se dobro i jednolično suspendirati u kapljevitoj fazi i tako ostvariti dobar kontakt s reaktantima.
- Konstruktivno su kotlasti reaktori uglavnom valjkaste posude sa zaobljenim dnom i uređajima za prijenos topline i miješanje.
- Snabdjeveni su s potrebnim cjevovodima i ventilima za unos i izvođenje reakcijske smjese, kontrolnim i mjernim osjetilima, sigurnosnim brtvama, oknima za gledanje, itd.

KOTLASTI REAKTOR



*Shematski prikaz
kotlastog reaktora s
bitnim značajkama*

*1 – motor,
2 – miješalo,
3 – plašt,
4 – ulaz,
5 – izlaz*

**valjkaste posude sa
zaobljenim dnom i
odgovarajućim
uređajima za prijenos
topline i miješanje**





Izvor: Central Fabricators, Inc.

- **Valjkasti oblik reaktora** uvjetovan je uglavnom konstruktivnim razlozima, namijenjen je lakšoj proizvodnji, mogućnosti postizavanja višeg tlaka, boljim miješanjem kao i čišćenjem.
- Kotlasti reaktori se osim za **reakcije u kapljevitom sustavu** koriste i **za provedbu reakcije u heterogenom sustavu kapljevina - kruti katalizator** koji je suspendiran u reakcijskoj smjesi malog promjera čestica ($< 0,1$ mm).
- **Prilagodljiviji su promjeni reakcijskih uvjeta od kontinuiranog načina vođenja reakcije** (odnosno PKR i cijevnih reaktora). Najznačajniji razlozi tome su:
 - ⇒ dodavanje reaktanata lako se može količinski i vremenski programirati,
 - ⇒ temperatura se također može lako mijenjati, odnosno programirati za vrijeme reakcije tako da bude optimalna s obzirom na selektivnost jednog produkta (to vrijedi za složene reakcije),
 - ⇒ vrijeme trajanja reakcije lako se može mijenjati u vrlo širokim granicama, a što ima posredan utjecaj i na izvedbu prijenosa topline.

- Kotlasti reaktor koristi se **u procesima sa složenim kemijskim reakcijama, različitih, promjenljivih značajki, za dobivanje produkata koji nisu uobičajeni i koji su posebne, specifične namjene.** To danas posebno dolazi do izražaja u tzv. "visokim tehnologijama" - npr. pri proizvodnji kompozitnih materijala.
- U kotlastim reaktorima uglavnom se proizvode **manje količine produkata po radnom ciklusu**, tj. volumeni nisu veliki. Izuzetak su reaktori za dobivanje nekih polimera u suspenziji, volumena do 30 m³.
- Često se koriste **na početku proizvodnje** određenog produkta, odnosno smatraju se nekom vrstom pokusnog reaktora. Kasnije se veće proizvodne jedinice, obično PKR ili cijevni reaktori projektiraju na osnovi dobivenih znanja u radu s kotlastim reaktorom.

REAKTORSKI MODELI

- Općenito, reaktorski model je sastavljen od
bilanci množine tvari i
bilanci topline
- Modeli su jednostavni za pojedinačne reakcije - dovoljne su dvije bilance (množine tvari i topline).
- Za složene reakcije modeli su složeni iz niza bilanci za množine tvari (toliko, koliko ima nezavisnih reakcija) i bilance topline.
- Ako reaktor radi izotermno dovoljna je samo bilanca množine tvari za njegovo dimenzioniranje.

Opća bilanca množine tvari

Količina tvari A nestala
kemijskom reakcijom u
reaktorskom volumenu = Akumulacija tvari A
u reaktorskom volumenu

Opća bilanca topline

Količina nastale (nestale)
topline kem. reakcijom u
reaktorskom volumenu i
jediničnom vremenu = Akumulacija topline
u reaktorskom volumenu
i jediničnom vremenu + Toplina koja se
prenese u okolinu u
jediničnom vremenu

- Uobičajena izvedba kotlastih reaktora pretpostavlja **približno idealno miješanje**, a s tim u vezi **izoternost reaktorskog prostora**. Tada je **opći oblik bilance tvari**:

$$\frac{dn_A}{dt} = -Vr_A(T, n_i)$$

odnosno, uz formalnu integraciju:

$$t = - \int_{n_{A0}}^{n_A} \frac{dn_A}{Vr_A}$$

- Mogu se izvesti drugi ekvivalentni izrazi.

Uz konverziju:

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{V}{n_{A0}} r_A \quad \Rightarrow \quad t = n_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{V r_A}$$

Uz $V = \text{konst.}$,

$$\frac{dC_A}{dt} = -r_A \quad \Rightarrow \quad t = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{r_A}$$

i $\frac{dX_A}{dt} = \frac{1}{C_{A0}} \quad , \quad \Rightarrow \quad t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{r_A}$

- Kada se za vrijeme reakcije mijenja broj molova vrijedi relacija

$$V = V_0 \left(1 + \varepsilon X_A \right) \frac{P T_0}{P_0 T}$$

ε - značajka proširenja
(ekspanzije)

$$\varepsilon_A = \frac{V_{x_A=1} - V_{x_A=0}}{V_{x_A=0}}$$

- odnosno uz P i $T = konst.$,

$$V = V_0 \left(1 + \varepsilon X_A \right)$$

- U praksi je obično potrebno izračunati **volumen reaktora** (pravilnije: volumen reakcijske smjese).
- U pravilu **volumen koji zauzima reakcijska smjesa iznosi 2/3 ukupnog volumena reaktora**.
- Volumen se računa prema

$$V = \frac{n_{A0}}{t} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{r_A}$$

- ili

$$V = \frac{n_{A0}}{t} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1 + \varepsilon X_A) r_A}$$

- Opća bilanca topline:

$$G_t C_p \frac{dT}{dt} = (-\Delta H_r) r_A V + Q_r$$

ako reaktor radi izotermno!

* $G_t = V\rho$
 G_t - ukupna masa u reaktoru

(umjesto G_t može se koristiti ukupan broj molova, n_V)

Q_r - toplina koja se izmjenjuje s okolinom

$Q_r = ?$

S obzirom da se toplina oslobođena kem. reakcijom mijenja s vremenom, t

⇒ izmijenjena toplina je također funkcija vremena, tj. $f(t)$; (promjena ulazne T medija ili promjenom protoka medija)

- Uz idealno strujanje medija kroz plašt te izmjenu topline kroz stijenku, dobiva se:

$$Q_r(t) = UA_s (T_r(t) - T_0(t))$$

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{(-\Delta H_r) r_A V}{V \rho C_p} - \frac{UA_s}{V \rho C_p} (T_R - T_0)$$

$$T = f(t)$$

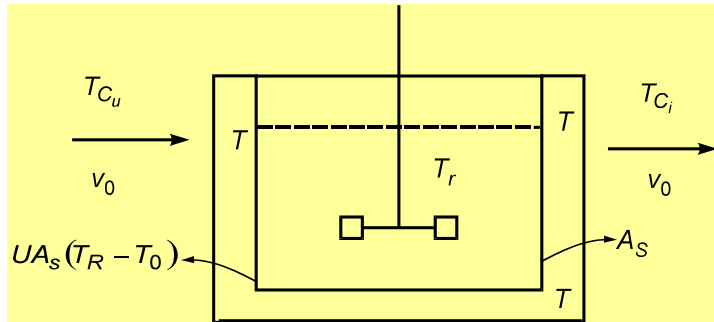
U - ukupni koeficijent prijenosa topline, $\text{kJ s}^{-1}\text{m}^{-2}\text{K}^{-1}$

A_s - površina prijenosa (ili A_p), m^2

T_r - temperatura unutar reaktora, K

T_0 (ili T_p)- temperatura ogrjevnog ili rashladnog medija u plaštu, K

a) Prijenos topline kroz plašt kotlastog reaktora uz pretpostavku da je medij u plaštu dobro miješanje (odn. temperatura unutar plašta je svuda ista)



$$G_p c_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = g_p c_{p,p} (T_{u,p} - T_p) + UA_p (T_p - T_r) \quad **$$

G_p – masa medija u plaštu, $c_{p,p}$ – specifična toplota medija u plaštu, g_p – maseni protok medija u plaštu, T_p – temperatura u plaštu, $T_{u,p}$ – temp. medija na ulazu u plašt, A_p – površina izmjene topline

Ukupni koeficijent prijenosa topline, U:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{\alpha_k} + \frac{dA_{sk}}{\lambda A_{sr}} + \frac{1}{\alpha_r} \frac{A_{sk}}{A_{sr}}$$

α_k = koeficijent prijenosa topline sa strane reakcijske smjese, $\text{kJ}/(\text{m}^2 \text{ h K})$,

A_{sk} = površina prijenosa sa strane reakcijske smjese, m^2

α_r, A_{sr} = isto kao gore, samo sa strane medija za odvođenje ili dovođenje topline,

λ = vodljivost topline kroz stijenku reaktora, $\text{kJ}/(\text{m h K})$,

d = debljina stijenke, m

Bilanca topline za reaktor (*) i bilanca topline za plašt () povezane su konstitutivnom relacijom:**

$$Q_r(t) = UA_s (T_r(t) - T_0(t))$$

Određivanje koeficijenata prijenosa topline, α_k

- Koeficijenti prijenosa topline procjenjuju se iz **empirijskih korelacija**, npr.

$$\frac{\alpha_k d_r}{\lambda_f} \left(\frac{\mu_w}{\mu} \right)^{0.14} = 0.36 \left(\frac{d_m^2 N \rho_L}{\mu} \right)^{0.66} \left(\frac{c_p \mu}{\lambda} \right)^{0.33}$$

Chilton, Drew,
Jebens (1944)

0.87 (koef. za zmijaču)

d_r – promjer reaktora, m

λ_f – toplinska vodljivost reakc. smjese, kJ/(m h K)

μ_w – viskoznost reakc. smjese na temperaturi stijenke, kg/(mh)

μ – viskoznost smjese na temperaturi reakcije

d_m – promjer mješala, m

N – broj okretaja mješalice, o/h

Određivanje koeficijenta prijenosa topline, α_r

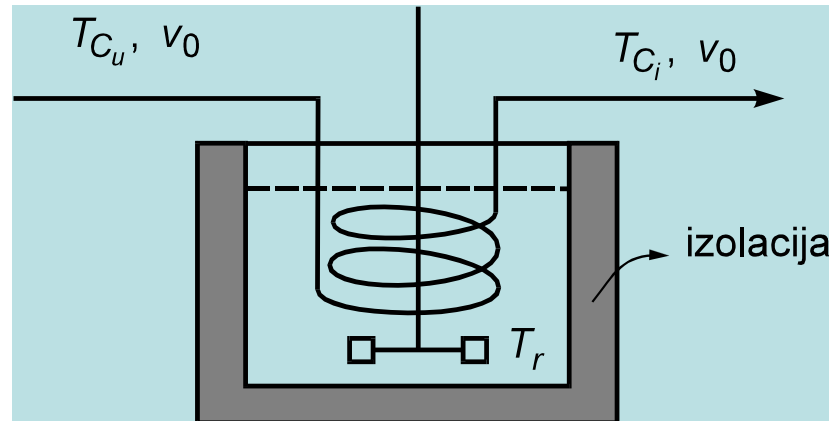
$$\frac{\alpha_r d_r}{\lambda_f} = 0.023 \left(\frac{d_r Q_m}{\mu} \right)^{0.8} \left(\frac{c_p \mu_w}{\lambda_f} \right)^{0.4} \Phi$$
$$\Phi = 1 + 3.5 \frac{d_r}{d_z}$$

d_r – promjer reaktora, m

d_z – promjer zmijače, m

Q_m – maseni protok, kg s^{-1}

b) Prijenos topline kroz zmijaču, idealno strujanje kroz cijevi



izmijenjena toplotina
 $T = f(t, \text{položaja unutar zmijače})$

$$Q_r = \int_0^L U A_s (T_c - T_r) dl \quad \text{Izmijenjena toplotina s okolinom}$$

T_c - temperatura medija,

T_r - temperatura u reaktoru

- Prijenos topline kroz zmijaču ili kroz navarene polucijevi oko plašta reaktora. U tom slučaju medij za izmjenu topline uglavnom struji na način idealnog strujanja.

Rektorski modeli kotlastih reaktora

- Barem jedna ***bilanca množine tvari*** (ako se samo jedna reakcija odigrava u reaktoru)

$$\frac{dn_A}{dt} = -Vr_A(T, n_i)$$

- Barem jedna ***bilanca topline zavisno o toplinskom režimu*** rada (adijabatski, izotermni ili neadijabatsko-neizotermni)

$$G_t c_p \frac{dT}{dt} = (-\Delta H_r) r_A V + Q_r$$

- ***Bilanca topline za medij u plaštu ili zmijači*** kojom se odvodi ili dovodi toplina u slučaju da reaktor ne radi adijabatski

Opći slučaj

Postoji izmjena topline medijem u plaštu ili zmijači

- Bilanca tvari

$$\frac{dn_A}{dt} = -Vr_A(T, n_i)$$

- Bilanca topline za reaktor

$$G_t c_p \frac{dT}{dt} = (-\Delta H_r) r_A V + Q_r$$

($Q_r = 0$, adijabatski rad)

G_t – ukupna masa u reaktoru:

$$G_t = \rho V$$

- Bilanca topline za medij:

a) za medij **u plaštu**, idealno miješanje u plaštu:

$$G_p c_p^p \frac{dT_p}{dt} = Q_m^p c_p^p (T_u^p - T_p) + UA_p (T_p - T_r)$$

oznaka "p" odnosi se na veličine u plaštu,
a "z" u zmijači!

b) za medij **u zmijači**, idealno strujanje

$$\frac{\partial T_z}{\partial t} = u \frac{\partial T_z}{\partial z} + \frac{2U}{r \rho c_p^z} (T_z - T_r) \quad *$$

Reaktor u izotermnom radu

- Bilanca množine tvari:
$$\frac{dn_A}{dt} = -Vr_A(T, n_i)$$
- Bilanca topline za reaktor:
$$(-\Delta H_r)r_A(t)V = Q_r(t)$$

Količina topline razvijene reakcijom mijenja se s vremenom, t
 $\Rightarrow$ izmjena topline s okolinom također je funkcija vremena!
- Bilanca za medij:

a) *izmjena kroz plašt:* *toplinski tok*

$$(-\Delta H_r)r_A(t)V = Q_r(t) = UA_p(T_p(t) - T_r)$$

b) *Izmjena kroz zmijaču* *toplina koja se mora prenijeti iz ili u reaktor*

$$(-\Delta H_r)r_AV = Q_r = \int_0^L q_r dz \quad *$$

desni član - ukupna topline koja se izmijeni kroz zmijaču mora biti u svakom trenutku jednaka reakcijskoj entalpiji da se zadrži izoternost rada!

specifični toplinski tok

a) Temperatura u plaštu koja se mora postići da bi se osigurao uvjet izoternosti:

$$(-\Delta H_r) r_A(t) V = Q_r(t) = UA_p (T_p(t) - T_r)$$

$$T_p(t) = T_r - \frac{V(-\Delta H_r)}{UA_p} r_A(t)$$

Potrebno je poznavati i kinetički model reakcije!

Izoternost rada postiže se dobrom regulacijom:

- promjenom ulazne temperature uz stalan protok ili
- recirkulacijom medija kroz plašt uz dodatno grijanje ili hlađenje medija kroz dodatni izmjenjivač (češće se koristi u praksi)

Ako se radi o reakciji prvog reda:

$$\frac{dC_A}{dt} = -r_A(T_r, c_i) = kC_A$$

$$r_A(t) = kC_A = kC_{A0} \exp(-kt)$$

$$T_p(t) = T_r - \frac{V(-\Delta H_r)}{UA_p} r_A(t) = T_r - \frac{V(-\Delta H_r)}{UA_p} kC_{A0} \exp(-kt)$$

U slučaju da se izraz za brzinu reakcije ne može riješiti analitički zbog složenog kinetičkog modela, brzina reakcije određuje se numeričkim rješavanjem.

Deriviranjem prethodnog izraza za T_p po vremenu dobiva se:

$$\frac{dT_p}{dt} = -\frac{V(-\Delta H_r)}{UA_p} k \frac{dC_A}{dt}$$

Uvrštenjem izraza:

$$\frac{dT_p}{dt} = -\frac{V(-\Delta H_r)}{UA_p} k \frac{dC_A}{dt}$$

u bilancu za medij u plaštu:


$$G_p c_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = g_p c_{p,p} (T_{u,p} - T_p) + UA_p (T_p - T_r)$$

dolazi se do izraza:

$$g_p c_{p,p} (T_{u,p} - T_p) + UA_p (T_p - T_r) = G_p c_{p,p} \frac{V(-\Delta H_r) r_A}{UA_p}$$

pri čemu se **protok medija kroz plašt** računa iz sljedećeg izraza:

$$g_p(t) = \frac{G_p V(-\Delta H_r)}{UA_p (T_{p,u} - T_p(t))} k \frac{dC_A}{dt} + \frac{UA_p}{c_{p,p} (T_{u,p} - T_p(t))} (T_p(t) - T_r)$$

b) Na sličan način moguće je izračunati **temperaturu medija na ulazu u zmijaču**, $T_{z,u}$ za određeno vrijeme zadržavanja, $\tau = z/u$ odnosno **protok kroz zmijaču** uz pretpostavku da je ulazna temperatura zadana veličina, kao i **izlaznu temperaturu iz zmijače**.

Općenito vrijedi:

- grijanje/hlađenje zmijačom koristi se u slučajevima kada je potrebno osigurati dobar prijenos topline na reakcijsku smjesu; to je osobito važno ako se koriste reaktori velikog volumena kada se omjer između površine vanjskog plašta i volumena reaktora znatno smanjuje,
- prolaz medija kroz zmijaču opisuje se uglavnom laminarnim ili idealnim strujanjem – to uzrokuje razlike temperature unutar medija zmijače od ulaza do izlaza, odnosno temperatura unutar zmijače nije svugdje ista već se mijenja po dužini zmijače, kao i po vremenu (ako je uvjet da se zadrži izotermnost rada reaktora),
- održanje stalne temperature unutar reaktora može se postići bilo promjenom protoka uz stalnu ulaznu temperaturu, bilo promjenom ulazne temperature medija za grijanje/hlađenje uz stalni protok medija ili s izmjenom topline kroz dodatni izmjenjivač topline (slično kao kod regulacije prijenosom topline kroz vanjski plašt.

Reaktor u adijabatskom radu (npr. reaktor je izoliran, pa nema izmjene s okolinom); T u reaktoru na kraju reakcije može biti ili viša ili niža od početne.

- Bilanca množine tvari:
$$\frac{dn_A}{dt} = -Vr_A(T, n_i)$$
- Bilanca topline - ako se umjesto brzine reakcije u bilancu za toplinu unutar reaktora uvrsti reaktorski model,

$$r_A = n_{A_0} \frac{dX_A}{dt}$$

$$G_t c_p \frac{dT}{dt} = (-\Delta H_r) r_A V$$

dobiva se

$$G_t c_p (T - T_0) + (-\Delta H_r) n_{A_0} X_A = \int_0^t Q_r dt$$

- Uz adijabatski rad reaktora **bilanca topline** je:

$$T - T_0 = \frac{(-\Delta H_r) n_{A_0}}{G_t c_p} X_A$$

$$T - T_0 = \frac{(-\Delta H_r) n_{A_0}}{\sum_j n_j C_{pj}} X_A$$

- Za $X_A = 1$ (100 %) dobiva se **adijabatska značajka**, maksimalna temperaturna razlika

$$T - T_0 = A_f = \frac{(-\Delta H_r)n_{A_0}}{G_t c_p}$$

Adijabatska značajka

- Zavisnost temperature o konverziji je **linearna**

$$T = T_0 + (\Delta T)_{ad} X_A$$

$$(\Delta T)_{ad} = T_{ad} - T_0 = A_f$$

Ili

- Uz bilancu tvari:
$$\frac{dc_A}{dt} = -r_A(T_r, c_i)$$

- I bilancu topline:
$$G_t c_{p,r} \frac{dT}{dt} = (-\Delta H_r) r_A V_R$$

Slijedi:

$$G_t c_p \frac{dT}{dt} = -(\Delta H_r) V_R \frac{dc_A}{dt}$$

$$G_t c_p (T - T_0) = -(\Delta H_r) V (c_A - c_{A0})$$

Odnosno:

$$T - T_0 = \frac{(-\Delta H_r) V}{G_t c_p} (c_A - c_{A0}) = \frac{(-\Delta H_r)}{\rho c_p} (c_A - c_{A0})$$

Iz prethodnog izraza slijedi da je u adijabatskom radu kotlastog reaktora zavisnost temperature i koncentracije linearna. Konačna temperatura koja se može postići u reaktoru postiže se kada je konverzija 100%, odnosno kada je na kraju reakcije koncentracija reaktanta jednaka nuli. Ta temperatura iznosi:

$$T = T_0 - \frac{(-\Delta H_r)}{\rho c_p} c_{A0}$$

Adijabatska značajka

Toplinska bilanca za neadijabatski kotlasti reaktor

- temperatura se mijenja kao funkcija vremena reakcije

$$\int_0^{X_A} \Delta H_r n_{A0} dX_A + \int_0^t Q dt = \int_{T_0}^T \sum_j n_j \overline{C_{pj}} dT$$

izmijenjena toplina
 $Q = f(U)$

$$UA_s (T - T_s) = \Delta H_r n_{A0} X_A + \sum_j n_j \overline{C_{pj}} (T - T_0)$$

T_s – temperatura medija za hlađenje/grijanje

T – temperatura reakcije

T_0 – početna temperatura u sustavu

Općenito

- Za veće iznose reakcijske entalpije, izotermni rad u kotlastom reaktoru nije lako izvesti (*sustav za miješanje, sastav reakc. smjese, geometrija reaktora, tip i smještaj mješala u reaktoru utječu na uspješnost miješanja!*)
- **Izmijenjena toplina kroz plašt ili zmijaču mora biti funkcija vremena $\Rightarrow$**
- To se izvodi:
 - a) ***promjenom ulazne temperature*** rashladnog, odnosno zagrjevnog medija ili
 - b) ***promjenom protoka*** tog medija.
- Potrebna je ***posebna bilanca*** za rashladni (zagrjevni) medij, a koja se veže uz bilancu množine tvari.

Temperatura reakcije

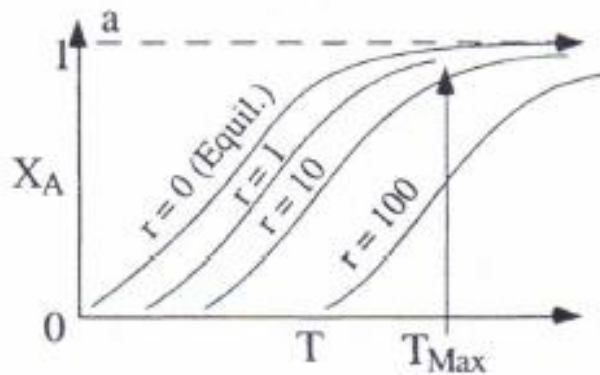
Nalaženje optimalne temperature:

- A) određivanje ***jedne stalne temperature*** kod koje će konverzija biti maksimalna i
- B) određivanje optimalnog ***vremenskog temperaturnog profila*** u kojem će konverzija biti maksimalna.

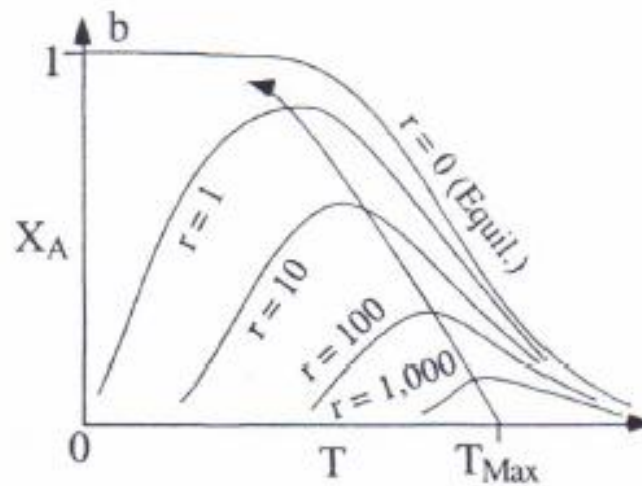
Kriterij optimalnosti obično je ili maksimalna konverzija ili minimalno vrijeme reakcije (ili minimalni volumen).

Optimalna, ali stalna temperatura zavisi od vrste reakcije:

- A) Reakcije su ***nepovratne***. Tada je optimalna radna temperatura ujedno i ***maksimalno moguća***, odnosno dozvoljena radna temperatura.
- B) Reakcije su ***povratne i endotermne***. I u ovom slučaju je najviša dozvoljena temperatura ujedno i optimalna.
- C) Reakcije su ***povratne i egzotermne***. Kod ovih reakcija obično uvijek postoji određeni ***temperaturni maksimum za optimalnu konverziju*** (npr. sinteza amonijaka); viša temperatura može pogodovati brzini kem. reakcije, ali ujedno smanjiti ravnotežnu konverziju, X_{Ae} . Zbog toga je mogući izbor ***promjena (smanjenje) temperature s vremenom (konverzijom)***.



a) optimalni temperaturni profili za povratnu endotermnu reakciju



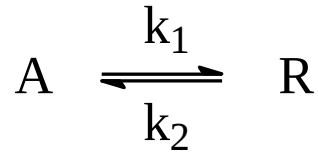
b) optimalni temperaturni profili za povratnu egzotermnu reakciju

- **Optimalna temperatura u bilo kojoj radnoj točki** nalazi se iz uvjeta da je

$$\frac{\partial r_A}{\partial T} = 0$$

- Promjenom temperature za vrijeme egzotermne povratne reakcije može se ***skratiti vrijeme*** reakcije ili ***povećati konverzija***.
- ***Promjena temperature s vremenom*** lako se izvodi korištenjem ***kompjutorskog načina vođenja procesa***.

Izračunavanje optimalne temperature za povratnu egzotermnu reakciju prvog reda



Kinetički model:

$$\begin{array}{c} \downarrow \qquad \downarrow \\ r_A = k_1 C_A - k_2 C_R = C_A A_{r1} \exp\left[-\frac{E_{a1}}{R_g T}\right] - C_R A_{r2} \exp\left[-\frac{E_{a2}}{R_g T}\right] \end{array}$$

$$\frac{\partial r_A}{\partial T} = C_A A_{r1} \frac{E_{a1} R_g}{T^2} \exp\left[-\frac{E_{a1}}{RT}\right] - C_R A_{r2} \frac{E_{a2} R_g}{T^2} \exp\left[-\frac{E_{a2}}{RT}\right] = 0$$

$$T_{opt.} = \frac{E_{a1} - E_{a2}}{\ln \frac{A_{r1} E_{a1} C_A}{A_{r2} E_{a2} C_R} R_g}$$