



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

FAKULTA STROJNÍ

Ústav procesní a zpracovatelské techniky

Posudek habilitační práce

Název práce: **Syntetický přístup k návrhu chemických procesů**
Autor: Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.
Pracoviště: Vysoká škola chemicko-technologická
Fakulta chemické technologie
Ústav organické technologie
Habilitační obor: Organická technologie

Předložená habilitační práce v rozsahu 70 stránek bez příloh je rozdělená do 11 kapitol včetně seznamu literatury a projektů a seznamu příloh a je zaměřená na vývoj nových procesů a technologií pomocí simulačních procesů s minimalizací experimentální části vývoje. Navržený přístup je dokumentován na řadě technologií, které autor řešil.

K aktuálnosti tématu habilitační práce

Tématem habilitační práce je vývoj nových procesů a technologií pomocí simulačních procesů s minimalizací experimentální části vývoje. Navržený přístup dokumentuje na řadě aplikací, které řešil. Dokumentuje výhody přístupu zejména v případě výroby nebo zpracování toxických látek. Vzhledem k současným trendům v oblasti udržitelnosti, minimalizace energetické náročnosti, tvorby odpadů, minimalizace nákladů považují téma za aktuální.

K původnosti a vědecké hodnotě práce

Klasický způsob vývoje nových technologií, který se používá, má následující fáze: literární rešerše > experiment > výpočty > design procesu. V případě, že se při tomto postupu zjistí, že laboratorní postup je do praxe nepřenositelný, je nutno navrhnout a provést nové experimenty, což vede k prodloužení času a nákladů vývoje. Autor přichází s konceptem, který je založen na používání simulačních programů od prvopočátku až po finální návrh procesu. Prvotní simulace ověří realizovatelnost, následně umožní přesné zacílení experimentů pro ověření návrhu a na základě těchto výsledků a opakovaných simulací se provede finální návrh. Navržený koncept pak následně dokumentuje na řadě aplikací, které řešil. V rámci řešení pak byla získána cenná data v oblasti kinetiky a fázových rovnováh kapalina-pára pro řešené soustavy.

Přínos habilitační práce a dosažených výsledků

Práce je zaměřena na návrh chemického procesu pomocí výpočetní techniky. Prezентovaný přístup v sobě zahrnuje syntetický přístup pro návrh technologií a zahrnuje v sobě jak pohled technický tak ekonomický. Autor uvádí, že tak jako v jiných oborech lidské činnosti, tak i v chemickém průmyslu, úspěch často záleží na tom být na trhu první nebo rychle zaplnit mezeru, která se na trhu vytvořila. Na základě této úvahy pak formuluje hypotézu, že správné využití simulačních programů pro prvotní odhad technologie, možnost plánování experimentální

činnosti na základě simulací, a následně finální design nových procesů pomocí simulačních programů podstatnou měrou zkracuje čas potřebný na dosažení výsledku, snižuje finanční náklady, a poskytuje možnost příležitost naplno využít. Tuto hypotézu pak dokládá a dokumentuje řadou technologií, které realizoval. Detailněji pak výhody přístupu dokumentuje při návrhu procesu kyanurfluoridu, kdy možnost provádět experimenty byla velmi omezená vzhledem k toxicitě látek.

Oceňuji tento komplexní přístup autora. V případě vývoje a návrhu malotonažních výrob speciálních chemikálií je navržený přístup pravděpodobně jediný konkurenceschopný.

K didaktické hodnotě práce

Práce je napsána přehledně a čtivě, s logickým členěním kapitol. Z didaktického hlediska oceňuji, že navržený koncept je dokumentován jasně a srozumitelně na mnoha příkladech. Čtenáři to prakticky v přímém přenosu umožňuje uvědomit si nejrůznější aspekty jak technické tak ekonomické, které je nutno při návrhu technologie respektovat, problémy, které mohou nastat, a jak je úspěšně vyřešit.

Otázky a připomínky do diskuse k textu práce

o Zvětšování měřítka

a) V práci uvádíte (str. 7), že přístup založený na zvětšování měřítka je dnes už překonán, a výsledky takto získané nejsou vždy přenositelné. Uvádíte příklad přenosu tepla u reaktoru s exotermickou reakcí. Ano, toto je klasický příklad, který by měl každý absolvent procesního inženýrství znát, ale to, dle mého názoru, nedokazuje, že koncept zvětšování měřítka je již překonaný, což sám připouštíte na str. 9. V tomto kontextu by mě zajímalo, jaké je Vaše hodnocení metody inspekční analýzy.

b) Na str. 9 také připouštíte, že je někdy nutné postavit zařízení o nějaké minimální velikosti (následně uvádíte na str. 19 poloprovozní jednotku mokré oxidace a na str. 51 věžový probublávaný reaktor). Zajímalo by mě, co to je ta „minimální“ velikost, na čem závisí a jak se určí. Dále by mě zajímalo, zda takto získané výsledky jsou použitelné pro libovolnou velikost zařízení nebo zde existuje i maximální velikost. A pokud ano, na čem závisí a jak se určí.

c) Věžový probublávaný reaktor (DN 65, H = 2 m) - str. 51– na str. 53 uvádíte, že provozní reaktor má asi nižší zpětné a tím i zkratové toky, než se předpokládalo při výpočtech. Zajímalo by mě, co bylo podle Vašeho názoru příčinou tohoto nesouladu.

o Věřohodnost výsledků simulace

a) Navržený koncept stojí na preferenci simulačních programů. Na str. 5-6 připouštíte rizika práce se softwarem, kdy výsledek práce může být nesmyslný. V práci dokumentujete nutnost úpravy dat a modelů pro rovnováhu a kinetiku (str. 33 a dále). Ale vůbec se nezmiňujete o modelech aparátů (přenos tepla a hydrodynamika ve výměnících, kolonách atp.). Jak moc věříte modelům aparátů? Jak myslíte, že tyto modely byly získány a validovány?

b) Na str. 45 uvádíte, že existují situace, kdy je sestavený model technologie v simulačním programu vhodně experimentálně ověřit a ujistit se, že model dává reálné výsledky. Zajímalo by mě, jak (event. na základě jakých kritérií) se tyto situace poznají?

o Přístup k návrhu reaktoru

V práci zmiňujete důležitost správného návrhu aparátů (str. 27). Jaký přístup byste zvolil pro návrh mechanicky míchaného reaktoru kapalina – plyn s probíhající chemickou reakcí katalyzovanou tuhým katalyzátorem ve formě částic?

Závěr:

Práce je zaměřena na komplexní návrh chemického procesu včetně ekonomiky pomocí výpočetní techniky. Autor přichází s konceptem, který je založen na používání simulačních programů od prvopočátku až po finální návrh procesu. Tuto hypotézu pak dokládá a dokumentuje řadou technologií, které realizoval. Detailněji pak výhody přístupu dokumentuje při návrhu procesu kyanurfluoridu, kdy možnost provádět experimenty byla velmi omezená vzhledem k toxicitě látek.

Práci doporučuji přijmout jako základ habilitačního řízení a po úspěšném habilitačním řízení doporučuji udělit Ing. Jiřímu Trejbalovi, PhD. titul *docent* v oboru *Organická technologie*.

V Praze 18. dubna 2022



doc. Ing. Radek Šulc, Ph.D.

