

VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO TECHNOLOGICKÁ
FAKULTA CHEMICKÉ TECHNOLOGIE

HABILITAČNÍ PRÁCE

Syntetický přístup k návrhu chemických procesů

Ing. Jiří Trejbal, PhD.

Praha, Leden 2022

Prohlašuji, že jsem původní text předložené habilitační práce „Syntetický přístup k návrhu chemických procesů“ vypracoval samostatně s uvedením všech použitých literárních pramenů. Byl jsem seznámen s tím, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon). Souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách, ve znění pozdějších předpisů.

V Praze, den 14. ledna 2022

Ing. Jiří Trejbal, PhD.

PODĚKOVÁNÍ

Rád bych především poděkoval své rodině za pochopení a trpělivost. Bez jejich velké podpory bych se nemohl věnovat práci, která mě baví a naplňuje.

Rád bych velmi poděkoval panu profesorovi Josefu Paškovi a panu inženýrovi Paulu Krajníkovi za dlouhodobou spolupráci na mnoha skvělých projektech a ochotu sdílet se mnou své profesní i životní zkušenosti.

Dále bych chtěl poděkovat svým nejbližším spolupracovníkům, Martinu Zapletalovi, Tomáši Sommerovi, Miroslavu Petriskovi, Elišce Vyskočilové a Ivě Paterové za neustálou podporu. Můj dík patří také všem současným, ale i bývalým členům Ústavu organické technologie za vytváření kolegiálního prostředí.

SOUHRN

Předložená práce se zabývá moderními přístupy k návrhu chemických procesů. Hlavní součástí návrhu chemických procesů současnosti je počítačová simulace jednotlivých aparátů, nebo celých technologických celků. Moderním trendem je zapojení výpočetní techniky již od počátku výzkumu a vývoje nové technologie. V práci je na mnoha příkladech ukázáno, jak postupuje vývoj nového procesu se zapojením simulačních programů a jaká je filozofie návrhu současných procesů a jeho propojení s ekonomickými parametry. Dále je v práci popsáno jaké součásti obsahují podklady pro proces a jaké jsou další fáze realizace nové technologie. Na několika příkladech realizací autora je dokumentován reálný přístup k návrhu nových procesů.

SUMMARY

The presented work deals with modern approaches to chemical processes design. Today's main part of the design of chemical processes is a computer simulation of individual apparatuses or entire technological units. The modern trend is to involve computer technology from the beginning of research and development of new technology. The work shows many examples of developing new processes involving simulation programs, the philosophy of the design of current processes, and its connection with economic parameters. Furthermore, the work describes what components contain the process know-how and the following stages in implementing new technology. The real approach to the design of new processes is documented in several examples of the author's realizations.

Obsah

1	Úvod.....	1
2	Simulační programy	3
3	Přístupy k návrhu chemických procesů.....	7
3.1	Empirický přístup a postupné zvětšování měřítka.....	7
3.2	Syntéza procesu	9
4	Fáze vývoje nového procesu	11
4.1	Posouzení ekonomického základu nového procesu.....	12
4.2	Experimentální výzkum a vývoj při návrhu nového procesu	17
4.3	Tvorba podkladů pro proces	23
4.3.1	Základní údaje o procesu.....	23
4.3.2	Definice hranic objektu	24
4.3.3	Popis technologie a schémata.....	25
4.3.4	Látková a entalpická bilance	26
4.3.5	Aparáty	27
4.3.6	Analytické metody a řízení procesu	28
5	Realizace nového procesu	29
5.1	Příprava dokumentace projektu	30
5.2	Výstavba a spuštění technologie.....	31
6	Fyzikální data pro návrh procesů	33
6.1	Rekonstrukce benzenové kolony	36
6.2	Rekonstrukce methylanilinové kolony	40
7	Experimentální ověřování simulačních modelů.....	45
7.1	Kolona azeotropické destilace benzenu.....	45
7.2	Mokrý oxidace sulfidových louhů	49
7.3	Výroba kyanurfluoridu	54

8	Závěr.....	58
9	Shrnutí tvůrčího přínosu autora.....	59
10	Literatura a projekty	60
11	Seznam příloh.....	62

1 Úvod

Chemie se jako tradiční oblast vědy dále dělí na mnoho oborů. Některé obory, jako je například fyzikální chemie nebo obecná chemie, jsou zaměřeny svým zájmem i výsledky více teoretickým směrem a patří do oblasti, která je označována jako základní výzkum. Jiné obory, jako je chemické nebo korozní inženýrství, mají většinou přímý praktický dopad a patří do segmentu aplikovaného výzkumu. Navrhování chemických procesů je pak samostatný multidisciplinární obor, patřící do aplikovaného výzkumu, který v sobě zahrnuje celou řadu směrů, i mimo oblast chemických věd. Pro práci v oboru navrhování chemických procesů jsou proto dále potřeba určité znalosti ze strojírenství, elektrotechniky, znalosti legislativních požadavků, schopnost komunikace a práce v týmu a v neposlední řadě i ekonomické dovednosti.

Je velký rozdíl mezi pojetím chemického inženýrství a procesního inženýrství – procesního designu. Chemické inženýrství se věnuje bilancování systému, nebo výpočtů a návrhu jednotlivých aparátů. Procesní design jde ještě dál a v podstatě se snaží donutit hmotu, aby se vyskytovala v určitém množství, na určitém místě, v určitém stavu a kvalitě, v určitém časovém horizontu a to vše za určitou cenu. Procesní design není návrh jednotlivých aparátů, ale je to komplexní návrh celého technologického celku. To již není triviální úkol a navrhování procesů tak vyžaduje, kromě pevného teoretického základu a určitých experimentálních schopností, také určitou zkušenost v oboru. Praktická zkušenost je nezbytná a v mnoha ohledech bohužel nepřenositelná. Pokud se někdo chce stát excelentním kuchařem, obvykle nestačí pořídit kuchařské knihy. Teprve v kuchyni s opravdovým mistrem, kde je možnost nasát vůni a zjišťovat chuť, je možnost profesně růst. Stejný přístup pak platí i pro návrh chemických procesů.

Navrhování procesů je neustálé bilancování tří složek a to hmoty, energie a financí, přičemž tyto složky jsou vzájemně propojeny a obvykle také mohou přecházet jedna v druhou. Moderní návrh chemických procesů se dnes již prakticky neobejde bez využití výpočetní techniky, ovšem je stále užitečné mít na paměti, že simulační programy jsou pouhý nástroj a nikoliv cíl. V tomto ohledu výpočetní technika umožňuje výrazně urychlit vývoj, ale nedokáže sama (zatím) rozhodnout o správném řešení celého problému.

Procesní design, jelikož spadá do kategorie aplikovaného výzkumu a vývoje, který úzce souvisí s konkrétním partnerem v průmyslu, přináší určitá specifika práce. V základním výzkumu hraje čas velmi malou roli, zatímco v aplikovaném je řešení poptáváno v určitém časovém horizontu, mnohdy přesně daném včetně etap řešení. Výsledky základního výzkumu

nezavdávají vznik příliš velké zodpovědnosti a v nejhorším případě mohou být jinými autory zpochybněny. V procesním designu je naopak velká zodpovědnost za výsledky s ohledem na potencionální výši investic a tomu odpovídá i kontrola kvality výsledků ze strany partnera, přičemž v základním výzkumu se kontrola omezuje spíše na kvantitativní ukazatele. Další samostatnou kapitolou je práce s informacemi a jejich zveřejňování. U základního výzkumu, který je z většiny placen z veřejných rozpočtů, je zveřejnění všech výsledků samozřejmé a žádoucí. Procesní design je navázán na privátní finance a zde je možnost publikování zajímavých výsledků, byť i pouze jejich částí omezena, nebo přímo smluvně zakázána. To v akademickém prostředí představuje určitý handicap. Tento fakt jako červená nit prochází celou touto prací, kdy je sice cílem autora představit čtenáři svou práci v oblasti návrhu chemických procesů, ale jistě zajímavé detaily musí zůstat skryty.

2 Simulační programy

Počátky využití výpočetní techniky k návrhu chemických procesů se datují na počátek 60. let. První využití spočívalo v manuálním programování matematických vztahů, které byly odvozeny ve fyzikální chemii a chemickém inženýrství. Pro tento účel se nejvíce využíval programovací jazyk Fortran (FORmula TRANslator), který obsahuje velkou knihovnu nejrůznějších matematických metod a našel uplatnění v široké oblasti techniky, nejenom v procesní chemii. Fortran prošel vývojem od pilotních verzí, přes první standardizovanou verzi Fortran77, která se stala základem pro vývoj mnoha dalších programovacích jazyků, až po poslední Fortran 2008.

Fortran⁷⁷

Asi nejznámější a nejpoužívanější balík simulačních programů současnosti je AspenOne[®], který vyvíjí firma Aspen Technology, Inc., známá také pod označením AspenTech. Firma AspenTech vznikla v roce 1981 ve spolupráci MIT (Massachusetts Institute of Technology) a Ministerstva energetiky USA, přičemž započala vývoj softwaru pod názvem **A**dvanced **S**ystem for **P**rocess **E**ngineering (ASPEN) Project. Balík AspenOne[®] obsahuje celou řadu nástrojů, které umožňují pokročilou simulaci stacionárních ale i dynamických stavů, konstrukční design různých aparátů a celkové vedení procesních projektů. Zajímavostí je, že software umožňuje vkládání vlastní uživatelských modelů, které ovšem musí být vytvořeny v jazyce Fortran⁷⁷.



V roce 1996 byl na trh uveden program HYSYS[®], který vyvinula kanadská firma Hyprotech Inc. Software vznikl jako produkt vývojářů z veřejné university v Calgary (University of Calgary). Software se stal velmi konkurenční vůči produktům firmy AspenTech a v roce 2002 nakonec došlo k převzetí firmy Hyprotech firmou AspenTech. Jelikož sloučením dvou největších firem na poli procesní simulace vznikla velká nerovnováha na trhu s monopolním postavením, byla firma AspenTech nucena po zásahu federální obchodním úřadem USA (Federal Trade Commission) odprodat zdrojové kódy k programu HYSYS[®].

Kupcem kódů byla nadnárodní společnost Honeywell, kam přešla i část vývojářů a dále software rozvíjí pod obchodním označením UniSim®.



Honeywell
UniSim Design Suite

Dalším hojně používaným systémem je program firmy Chemstations. Jeho počátky se datují do roku 1968, kdy ve spolupráci Houstonské university a námořnictva spojených států byl položen základ programu CHESS (**C**hemical **E**ngineering **S**imulation **S**ystem), který je od roku 1985 na trhu pod označením ChemCAD®.



Evropským zástupcem v procesních simulacích je francouzská firma ProSim, která vznikla v roce 1989 jako výsledek vývoje, který probíhal v 80. letech na universitě v Toulouse (National Polytechnic Institute of Toulouse). V současné době dodává firma celý balík simulačních programů, včetně úzce specializovaných, jako je například ProSimPlus HNO₃® určený pro simulaci procesu kyseliny dusičné.



Kromě uvedených programů existují další řádově stovky větších či menších programů, které jsou třeba na některý segment procesního návrhu specializované. Existuje i mnoho webových stránek pro různé výpočty, bohužel většinou nelze dohledat, na základě jakých matematických modelů fungují a pro technickou praxi je jejich použití určitým rizikem.

Nezávisle na dodavateli simulačních programů, lze u jejich produktů vysledovat určitou podobnost. To není překvapivé, protože fyzikální zákony jsou platné všeobecně a matematické modely používané pro jejich popis jsou v současné době už „ustálené“.

Simulační programy současnosti obsahují vždy databázi látek spolu s jejich fyzikálními vlastnostmi. Jsou to buď teplotně nezávislé údaje jako jsou kritické veličiny (T_c , P_c , V_c , Z_c) nebo různé entalpie (slučovací, Gibbsova, atd.), případně teplotně závislé veličiny, jejichž závislost je popsána nějakým matematickým modelem. Pak databáze obsahuje numerické parametry těchto modelů, mnohdy na výběr v několika sítích, podle zdroje dat (vlastní regrese literárních dat, převzaté spočtené parametry z literatury, parametry z různých databází jako je NIST a DECHEMA, atd.). Dále databáze látek simulačních programů obsahují někdy i binární parametry pro popis chování směsí, opět v mnoha sítích.

Simulační programy umožňují výběr fyzikálního popisu, který určuje chování látek. Na výběr obvykle jsou různé popisy neideálního chování látek v kapalně i v plynné fázi jako je například rovnice NRTL (Non Random Two Liquids) pro kapalnou fázi a Hayden-O'Connellovu rovnici pro parní fázi. Dále pak různé stavové rovnice jako je například Soave-Redlich-Kwongova nebo Peng-Robinsonova rovnice.

Simulační programy obsahují již předdefinované matematické modely aparátů, jako jsou například reaktory (CSTR, s pístovým tokem, rovnovážné, atd.), rektifikační kolony, extraktory a dekantéry, výměníky a mnoho dalších. Tyto jednotkové bloky lze následně spojovat technologickými proudy do větších celků, včetně recyklačních proudů a sestavit tak simulaci celých procesů. Výsledkem simulace pak je látková, entalpická a při znalosti a zadání cen i ekonomická bilance. Dalším výsledkem jsou ověřené, případně spočtené parametry jednotlivých aparátů.

Dlužno podotknout, že firmy dodávající simulační software si uvědomují, z jakého prostředí vzešly, že to bylo většinou z univerzit a také kdo mohou být jejich budoucí zákazníci, nebo dokonce zaměstnanci. Proto většina firem má licenční program pro university za velmi výhodných podmínek, oproti velmi drahým komerčním licencím. Využití simulačních programů je tak dnes nedílnou součástí výuky studentů na univerzitách po celém světě. To umožňuje nový náhled na aplikaci přírodních zákonů do praxe, kdy si studenti mohou pomocí simulačních programů testovat základy fyzikální chemie a chemického inženýrství.

Na druhou stranu to vede k určitému zjednodušení práce, kdy není nutné příslušné matematické vztahy znát a náročně je programovat. To v sobě skrývá určité riziko, kdy uživatel

ovládá práci se softwarem, ale bez dobrých teoretických základů, přičemž paleta možností použití různých fyzikálních modelů a různých popisů aparátů je velmi široká, může být výsledek jeho práce nesmyslný, kdy uživatel nedokáže posoudit reálnost výsledku a oprávněnost svého přístupu k problému.

3 Přístupy k návrhu chemických procesů

3.1 Empirický přístup a postupné zvětšování měřítka

Přístup založený na postupném zvětšování měřítka patří mezi tradiční postupy, které se historicky vyvinuly od prvopočátků průmyslové chemie. Tento přístup je dnes už překonán, ale dost často je možné se s ním v praxi stále setkávat. Zvětšování měřítka je časově, ale hlavně finančně náročné a výsledky takto získané nejsou vždy přenositelné. To je dáno tím, že zmenšený model má například jiný poměr plochy zařízení k objemu a ztráty tepla mohou být tak významné, že i exotermní procesy je nutné pro udržení teploty otápět. Přenosem na větší měřítko, kde ztráty významné nejsou, se pak může proces stát i nebezpečný.

Postupné zvětšování měřítka je běžné u výroby chemických specialit, kde se z baňky jde do malého kotlíku a následně už do většího zařízení. Jde většinou o výrobu látek s velkou přidanou hodnotou, kde v čele vývoje stojí chemik a procesní inženýrství je omezeno na minimum a mnohdy není využito vůbec. To často vede k neefektivitě procesů, kde se žehrá na to, že na finálním produktu je dostatečná marže a i nevhodné vedlejší procesy jako třeba regenerace rozpouštědel nejsou důležité.

To lze demonstrovat na příkladu výroby textilního barviva GRX [1]. Syntéza probíhá v roztoku toluenu a anilinu, kde na konci syntézy se větší část toluenu atmosférickou destilací odstraní a následně se produkt sráží zavedením do methanolu. Směs se následně filtruje a produkt se proplachuje také methanolem. Matečné a proplachové roztoky se pak rektifikují a regeneruje se tak methanol. Při vývoji technologie se při zvětšování měřítka testovala pouze reakční část a filtrace, regenerace vsádkovou rektifikací se navrhla pouze na papíře, kde na základě bodu varu látek (methanol 64 °C, toluen 110 °C a anilin 184 °C) byla předpokládána dobrá dělitelnost látek. Následně po zavedení do výroby bylo ale zjištěno, že lze regenerovat pouze část methanolu, protože přední frakce jsou znečištěny toluenem, který s methanolem tvoří azeotrop s minimem bodu varu. Ztráta methanolu, který musel být jako odpad spalován, tak činila 3 kg/kg produktu, což při produkci v řádech tisíců tun ročně už byla významná položka nákladů. Nakonec byl problém vyřešen zavedením vakuové destilace na konci reakčního kroku, kde došlo k dokonalému odstranění toluenu ještě před prvním kontaktem

reakční směsi s methanolem. Pokud by byl procesní inženýr přizván do projektu už na počátku, zřejmě by k takové situaci vůbec nedošlo.

Empirický přístup byl historicky dostatečný pro mnoho západních firem, které působily v oblasti chemických specialit, kde možnost vysokých marží nezavdávala důvod ke komplexním inženýrským řešením. Teprve přesun chemických výroby do Asie, kde po čase začaly vznikat lokální firmy schopné cenou konkurovat, donutil západní firmy k přehodnocení přístupu a například regenerace rozpouštědel, které byly posílány k externímu zpracování (obvykle ke spálení), se stala důležitou interní potřebou.

Jako příklad lze uvést dva případy z výroby textilních barviv. V prvním případě [2] se odpadní voda z proplachu pevného produktu na filtru s obsahem 6 % methanolu a 5 % pyridinu vedla na stripovací kolonu, kde se získal destilát s obsahem 50 % vody, který se bez dalšího zpracování posílal na spálení. Následně byla navržena a postavena nová rektifikační kolona (obrázek 1), která umožňuje na hlavě získávat bezvodý methanol a zároveň je bočním odtahem v parách získávána 50 % vodný roztok pyridinu, který se následně pomocí NaOH snadno odvodňuje. Zároveň nová kolona vyřešila i ekologický problém, kdy na starém zařízení měla odcházející odpadní voda ještě 100 ppm pyridinu, zatímco nově pod 1 ppm.



Obrázek 1 Spodek nové stripovací kolony s výměníkem, firma Huntsman, Quingdao, Čína (fotoarchiv autora).

Druhým příkladem [3] je zpracování matečného roztoku z výroby barviv. Roztok obsahoval 85 % methanolu, 10 % xylenu a 5 % vody a byl dalšího zpracování odvážen na spálení. Pro zpracování tohoto roztoku byla následně navržena soustava extrakční a rektifikační

kolony (obrázek 2), která umožňuje získat čistý xylen a bezvodý methanol s obsahem asi 1 % xylenu. Odpadem je pouze voda s obsahem organiky pod 1 ppm.



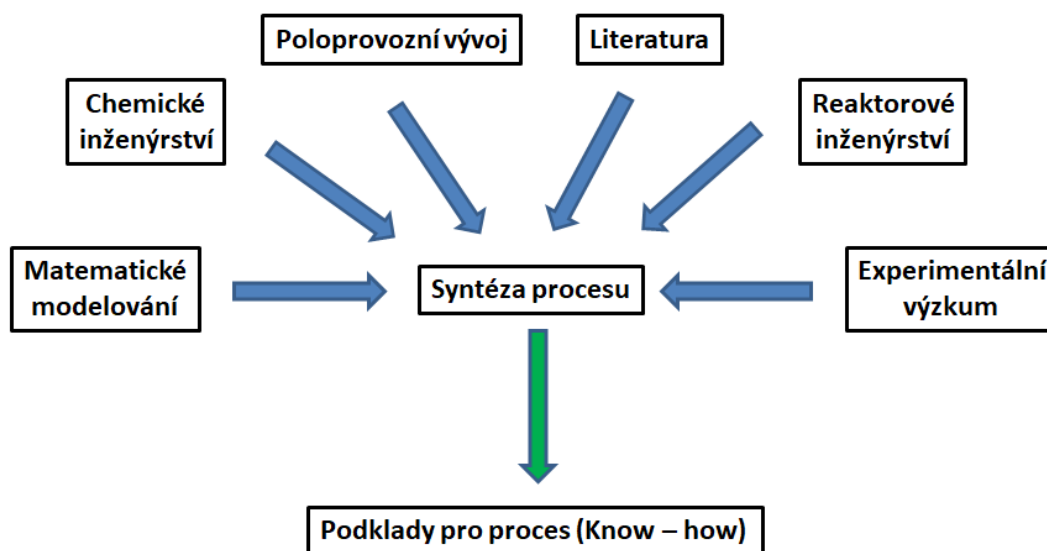
Obrázek 2 Extrakční a rektifikační kolona, firma Huntsman, Atoto, Mexiko (fotoarchiv autora).

Přesto má zvětšování měřítka z laboratoře do většího modelu někdy smysl. Testujeme na vhodném modelu jen určitou část výsledné technologie a cílem je sběr určitých dat, například dlouhodobou stabilitu katalyzátorů. Nebo testování není možné provádět v laboratoři a je nutná nějaká minimální velikost zařízení kvůli kontinuálnímu provedení.

3.2 Syntéza procesu

Moderní přístup k navrhování procesů je založen na využívání mnoha zdrojů informací (obrázek 3), kde hlavní úlohu hraje matematické modelování. Cílem práce je sestavení podkladů pro proces, což je obsáhlý dokument (bude diskutován dále v textu) a tento dokument je doslova syntetizován z různých informací. Na rozdíl od empirického přístupu zde procesní

inženýr získává na modelech data a informace, která nelze získat výpočtem. Tento přístup velmi šetří čas a finance a při správném provedení vede i návrhu nového procesu, který je spolehlivý z hlediska bezpečnosti i funkčnosti.



Obrázek 3 Schéma vstupů do syntézy nového procesu

4 Fáze vývoje nového procesu

Vývoj nového procesu začíná stanovením si cíle takového vývoje. Mohlo by se zdát, že cílem je jednoduše nový proces, to je ovšem velmi široký pojem a už na začátku je nutné se zamyslet nad tím, čeho chceme dosáhnout. Je nutné také rozlišit, jestli půjde o vývoj skutečně nového procesu, nebo pouze vylepšení některé z jeho částí, například vývoj nového katalyzátoru. Vývoj procesu má totiž mnoho fází a mělo by být od začátku definované, kam až bude sahat naše aktivita a posoudit jestli disponujeme skutečně potřebnými schopnostmi a zkušenostmi. Vývoj procesu začíná u prvotní myšlenky a končí náběhem a provozem nové technologie a na této cestě je mnoho milníků, se kterými je potřeba se vypořádat.

Na počátku vývoje je vždy prvotní nápad, který vychází buď z nových výsledků základního výzkumu, nebo je to poptávka z komerční sféry daná na základě průzkumu trhu, mnohdy tím, kde už je konkurence, nebo dost často jako výsledek změny legislativy.

Pokud se v základním výzkumu podaří nový výsledek, který má potenciál podnítit vývoj nového procesu, je žádoucí svěřit takový vývoj zkušeným procesním inženýrům. Situace, kdy vědec, dlouhodobě působící v základním výzkumu, se snaží svůj nový objev sám uvést do praxe, v drtivé většině případu končí neradostně a velkou ztrátou času a peněz.

Komerční poptávka po nové technologii je obvykle lépe cílena a směřuje směrem k vlastním firemním vývojovým týmům, případně směřuje na ověřená univerzitní pracoviště.

Pokud není vývoj nového procesu svázán s komerční sférou a to tak, že odtud přišla poptávka na vývoj, nebo se pro výsledek základního výzkumu podařilo najít partnera, tak nelze příliš mluvit o skutečném vývoji nového procesu. Ten je totiž vždy spojen s konkrétním uživatelem, který má určité technické možnosti, je mířen na určitou lokaci, má předem danou kapacitu a především nastavené ekonomické meze procesu. Ekonomické parametry se prolínají vývojem nového procesu od začátku do konce a bez nich nemá takový vývoj smysl.

4.1 Posouzení ekonomického základu nového procesu

Posouzení ekonomického smyslu projektu musí předcházet jakémukoliv experimentálnímu vývoji a to z toho důvodu, že ekonomické posouzení stojí čas a práci člověka, zatím co experimentální vývoj kromě času a práce má ještě další nemalé materiálové náklady. Prvním krokem posouzení nového procesu je sběr všech dostupných informací z odborné literatury, patentů a v dnešní době i všech informací které může poskytnout internet.

Na základě studia odborné literatury získáváme několik typů informací. Důležitým údajem jsou informace o chemických přeměnách ve zkoumaném systému, kdy získáváme povědomí o vznikajících produktech, ale také o dalších vedlejších látkách. Dále jsou někdy dostupná data o kinetice chemických reakcí a také o jejich rovnováze. Pokud máme k dispozici již soubor látek, které se pravděpodobně budou vyskytovat v systému, je možné k nim dohledat jejich fyzikální data, případně informace o chování směsí jako jsou rovnováhy kapalina – pára a kapalina – kapalina. Dalším cenným údajem jsou informace o analytických metodách, které se sice využijí až v experimentální fázi projektu, ale mnohdy informace o analytice definují možnosti řízení kvality.

Zde je nutné poznamenat, že získané informace mnohdy nemají potřebnou kvalitu. Obvykle chybí fyzikální data některých látek, nebo jsou změřena mimo technologicky zajímavou oblast. Publikace dost často sledují chemickou přeměnu hlavních látek a nezabývají se vznikem vedlejších látek, které pak zcela nedefinovaně zahrnou pod označení „others“. Použité analytické metody, ale i experimentální uspořádání, kdy mnohdy nejsou analyzovány a někdy ani uvažovány některé proudy, vede k tomu, že není předkládána důsledná látková bilance.

Patentová literatura poskytuje informace o vývoji v dané oblasti obvykle za mnoho desítek let zpětně. Dále zde lze najít informace o tom, které firmy se ve zkoumané oblasti pohybovali nebo stále pohybují, pokud jsou patenty ještě aktivní. Je účelné si uvědomit, že patent je právní dokument, který má za úkol ochránit postup přihlašovatele a není účelem patentu poskytnout informace o pravé povaze vynálezu. Při podání patentu se zkoumá pouze novost a nikoliv funkčnost. To vede k tomu, že příklady v patentu jsou mnohdy těžko reprodukovatelné, spisy obsahují nesmyslně vyčíslené stechiometrické rovnice atd.. Přes to všechno informace, že vůbec něco lze je i tak cenná.

Užitečným zdrojem informací jsou veřejně přístupná data na internetu. Zde lze dohledávat firmy, které v oboru působí, třeba podle provedené patentové rešerše. Lze získat specifikaci produktů, ale i surovin, které se již vyskytují na trhu. Informace o kvalitě, která je požadována trhem, patří k naprostým základům vývoje. Dále lze získat určité povědomí o cenách látek, i když zde jsou možnosti již omezené a u speciálních chemikálií nezjistitelné. Pokud jsme schopni dohledat firmu, která námi vyvíjenou technologii již provozuje (i když třeba na jiné bázi), je možné využít všechny dostupné vizuální informace, jako jsou fotografie z různých prospektů firmy, letecké pohledy na danou lokalitu, které dnes běžně mapy umožňují, dokonce s možností měření vzdáleností (třeba šířky aparátů). Na základě těchto dat a další dostupných informací dokáže zkušený procesní inženýr odhadnout, jak asi konkurenční technologie vypadá.

Poslední a neméně důležitý zdroj informací je spolupráce s komerčním partnerem, který je schopen některé nedostupné informace opatřit. To se týká třeba cen surovin a produktů, například formou přímé poptávky. Dále nám partner poskytuje informace o svých technických možnostech, jako je třeba tlak v rozvodu páry, možnosti chladicí vody, třeba její maximální letní teplota atd. Dále partner předává svoji představu o kapacitě procesu a základní ekonomické mantinely návrhu.

Druhým krokem v posouzení ekonomiky procesu je sestavení, na základě všech získaných dat, prvotního návrhu nového procesu. Obvykle je možné počítat se několika variantami, někdy dokonce i s různými vstupními surovinami. Zde je možné vyloučit evidentně neschůdné varianty. Například chlorované uhlovodíky fungují v mnoha procesech jako vynikající rozpouštědla, ovšem díky jejich toxikologickým vlastnostem stoupá legislativní tlak na omezení jejich používání. Je pak značně nejisté vyvíjet proces s takovým rozpouštědlem.

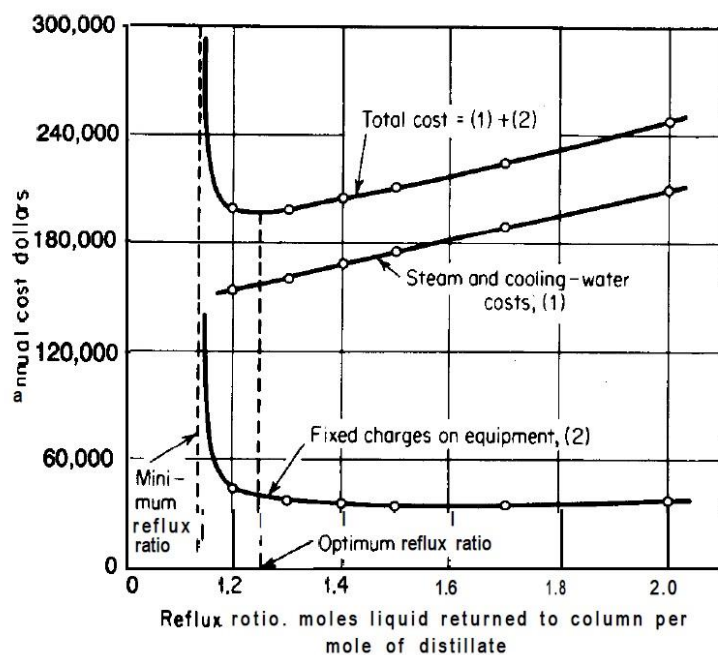
Třetí krok je vytvoření látkové, entalpické a ekonomické bilance. Látková a entalpická bilance se v současné době prakticky výhradně vytváří za pomoci některého ze simulačních programů. Činíme tak s vědomím, že obvykle nemáme úplně přesné informace, třeba o chování látek a správná obsluha simulačního programu je sama o sobě složitou disciplínou.

Simulační programy umožňují v krátkém časovém horizontu vytvořit mnoho verzí jednotlivých variant a ty pak následně porovnat. Se znalostí cen surovin a energií je možné z vytvořených bilancí získat informace o provozních nákladech (OPEX - **Operating Expense**) s poměrně dobrou přesností na úrovni $\pm 10\%$.

Dalším krokem je odhad investičních nákladů (CAPEX - **C**apital **E**xpenditures). K tomu je nutné vytvořit základní procesní schéma na úrovni PFD (**P**rocess **F**low **D**iagram), kde jsou již všechny uvažované aparáty, včetně čerpadel (obvykle zdvojených). Po vytvoření schématu se vytváří seznam aparátů s jejich základními parametry. Zde opět vstupuje do vývoje simulační software, kdy na základě znalosti toků můžeme odhadnout kapacity čerpadel, na základě simulace rektifikačních kolon dokážeme odhadnout jejich základní rozměry a vnitřní uspořádání, atd..

Když je seznam dokončen, je pro každý aparát odhadnuta jeho cena. Některé simulační programy nabízejí odhad cen, ovšem zkušenost ukazuje, že indikovaná cena je obvykle diametrálně odlišná od ceny na trhu. V odhadu cen je dobré se spolehnout na vlastní zkušenost nejlépe na základě databáze cen aparátů z minulých projektů, zkušenost komerčního partnera, který obvykle má také dobré povědomí o cenách. Dále je možné požádat o spolupráci při ocenění nějakou projekčně – inženýrskou organizaci, která má obvykle o aktuálních cenách nejlepší přehled, případně je schopna formou poptávky ceny zjistit. Nouzovým řešením je použití různých databází cen aparátů, které jsou k dispozici na webu (např. www.matche.com).

Existuje také mnoho monografií, které se oceňování investic v chemii věnují, ale mnohdy je představa autorů mírně řečeno vzdálena realitě. Jako příklad lze uvést demonstraci vlivu refluxního poměru rektifikační kolony na náklady [4]. Pro určité požadované dělení látek existuje nutný minimální refluxní poměr, přičemž v jeho blízkosti roste počet teoretických pater nade všechny meze. Pak je lépe pracovat reálně v určité vzdálenosti od tohoto poměru, přičemž s rostoucím refluxním poměrem počet nutných teoretických pater klesá. Na obrázku 4 je ukázána závislost provozních nákladů (pára a chladicí voda) a dále pak závislost ceny zařízení na refluxním poměru. Zatím co závislost provozních nákladů je v pořádku, cena zařízení realitě neodpovídá, kdy zpočátku klesá a pak je na refluxním poměru nezávislá. Pokud je vyšší refluxní poměr, postačuje nižší počet pater a kolona je kratší. Na druhou stranu při vyšší poměru teče kolonou více par a ta musí být tak širší. Pro vyšší tok par je nutný větší vařák a zároveň i kondenzátor. S rostoucí refluxním poměrem tak cena zařízení pouze stoupá.



Obrázek 4 Závislost nákladů na refluxním poměru (Peters a Timmerhaus, 1991)

Následně se provede odhad celkové investice. To se obvykle provádí poměrovou metodou, která spočívá v odvození jednotlivých cen dalších položek na základě znalosti cen aparátů. V tabulce 1 je předloženo rozpětí procentuálních podílů platné pro instalace ve střední Evropě, získané několika několika lety praxe na mnoha projektech. V zásadě lze říci, že cena investice je zhruba tří až čtyř násobek ceny aparátů. Například u projektů v Asii, s ohledem na nižší cenu práce se cena investice pohybuje na úrovni dvojnásobku až trojnásobku ceny aparátů. S ohledem na určité rozpětí v oceňování investice, je přesnost odhadu na úrovni $\pm 50\%$.

V posledním kroku dochází k výpočtu výrobní ceny produktu, která již zahrnuje provozní náklady ale i odpisy zařízení, odvozené od výše investice. Pak dochází k posouzení reálnosti záměru, který je věcí komerčního partnera, který si provádí posouzení návratnosti investice, ale třeba i možnosti financování investice. Pokud je výsledek posouzení nadějný, je zahájen experimentální výzkum a vývoj nového procesu.

Tabulka 1 Odhad investičních nákladů odvozené od cen aparátů

Položka	Náklady	Dodávky	Montáže
Item	Cost (%)	Materials (%)	Labor (%)
<i>Stroje a zařízení - Equipment Delivered</i>	120-125	100	15-25
<i>Instrumentace - Instrumentation</i>	35-50	20-30	15-20
<i>Potrubí - Piping</i>	16-24	6-10	10-12
<i>Základy & OK - Foundation & Steel Structure</i>	10-14	4-6	6-8
<i>Isolace & nátěry - Insulation & Painting</i>	6-9	2-3	4-6
<i>Elektro - Electrical</i>	14-22	4-8	10-14
<i>Stavební část - Construction</i>	16-30	10-20	6-10
<i>Příprava staveniště - Site Preparation</i>	1-2		
<i>Pomocné instalace - Auxiliaries</i>	15-25		
Cena za výrobní jednotku - Physical-plant Cost	228-301		
<i>Projekty a inženýring - Engineering & Home Office</i>	15-25		
<i>Zajišťování stavby - Field Expense</i>	10-15		
Přímé náklady stavby - Direct Plant Cost	253-341		
<i>Marže kontraktora - Contractor's Fee</i>	10-20		
<i>Rezerva - Contingency</i>	20-25		
CAPEX	283-386		

4.2 Experimentální výzkum a vývoj při návrhu nového procesu

Cílem experimentálních prací je doplnění informací potřebných pro návrh procesu, které nemohou být získány z veřejně dostupných zdrojů. Dochází ke zkoumání reakční části, kdy se měří kinetika, případně rovnováha reakcí a to vždy v technologicky důležité oblasti. Nelze se spolehnout na data například získaná při nízké teplotě a následně extrapolovat. V tomto ohledu vůbec není přípustné jakékoliv přebírání kinetických dat z literatury. Probíhá důsledná analytická kontrola a vytváří se hmotnostní bilance, kde se sledují všechny látky existující v daném systému. Dále se měří fyzikální vlastnosti látek, které jsou v systému a jejichž vlastnosti v literatuře chybí, případně se existující data ověřují, aby byla jistota, že následný návrh bude proveden korektně. V tomto bodě se provede revize původního návrhu a z původních několika variant procesu se vybere jedna, která se následně detailně rozpracuje.

Důležité je při experimentální činnosti používat pro výzkum reálné suroviny jaké jsou na trhu a budou potencionálně použity ve výrobě. Mohou totiž obsahovat příměsi, jako jsou isomery nebo katalytické jedy, které mohou mít vliv na výsledný proces. Stejně tak je důležité používat příslušný existující technologický proud, pokud se ho řešení nějak dotýká.

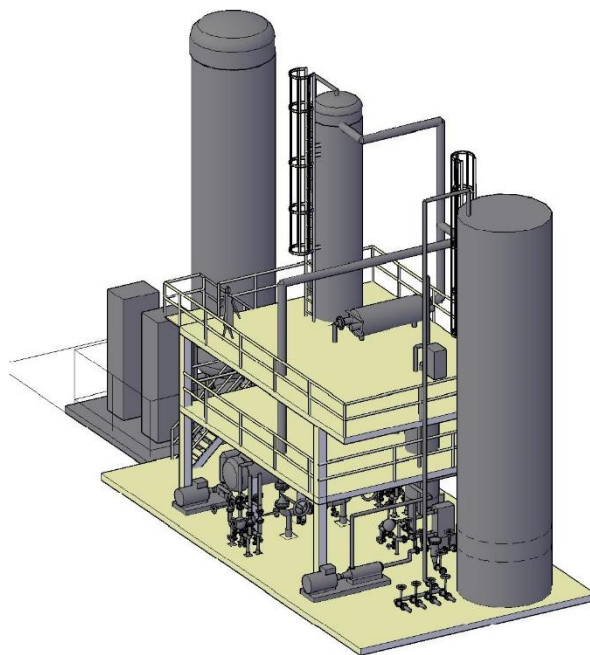
Důležitost výše popsaného pravidla lze ukázat na následujícím příkladu [5]. Společnost VUAB Pharma zadala k řešení problém regenerace acetonu z proplachu filtračního koláče při výrobě Nystatinu. Proplach obsahoval 55 % acetonu, 25 % methanolu, 2 % butanolu a zbytek vody, přičemž tvořil odpad ke spálení v množství 250 tun ročně. Od společnosti byl několikrát dodán provozní vzorek, u nějž byla provedena důkladná analýza a dále pak také modelové vsádkové rektifikace, aby bylo možné pozorovat případnou tvorbu pevných úsad nebo pění směsi. Se znalostmi z experimentálních testů a s ohledem na chování látek, kdy aceton tvoří s methanolem azeotrop s minimem bodu varu, byla navržena rektifikační kolona pro extraktivní destilaci pomocí vody. Kolonu se podařilo úspěšně zprovoznit a bylo dosahováno požadovaných hodnot dělení a regenerovaný aceton byl úspěšně použit ve výrobě. Provozem kolony byl však zjištěn problém s tvorbou úsad ve spodní části kolony a v chladiči destilačního zbytku. To bylo překvapující, protože v laboratoři nikdy nebyl pozorován vznik pevné fáze. Následně se zjistilo, že chyba nastala již při odběru vzorků pro experimenty, které byly vždy odebrány z cisterny před odvozem na spálení. Vzorek byl odebrán po delší době od naplnění a navíc z boku cisterny, přičemž se ukázalo, že na dně cisterny je sedimentovaná pevná fáze a na hladině se odděluje organická velmi viskózní fáze a tím byl odebrán nereprezentativní vzorek.

Následně se problém podařilo vyřešit předřazením vhodného filtru před kolonu. Příklad ukazuje, že i správný odběr vzorku může mít zásadní vliv na výslednou funkčnost procesu.

V určité fázi vývoje je nutné rozhodnout, jestli bude potřeba některé části technologie testovat na poloprovozu. Obvyklá představa je taková, že se postaví poloprovoz a na základě dat z poloprovozu se navrhuje výsledný proces. Správný přístup je opačný. Nejprve se vytvoří na základě studia literatury, vlastní experimentální činnosti a simulací celková detailní představa o novém procesu. V návrhu pak zůstávají některé nezodpovězené otázky, jako například vlhkost filtračního koláče z průmyslového filtru nebo životnost katalyzátoru.

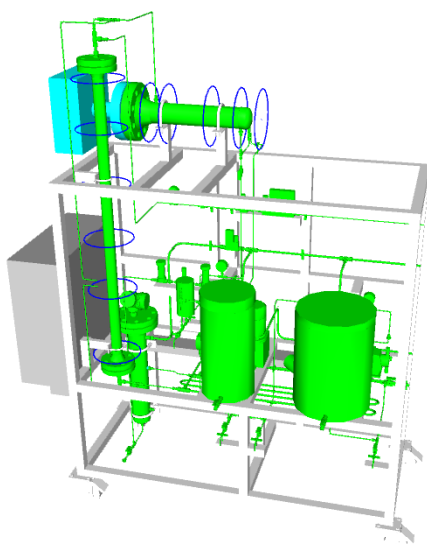
Pokud se v procesu vyskytují pouze plynné a kapalné proudy, lze obvykle proces navrhnout s využitím zásad chemického inženýrství a simulačních programů. V případě, že je procesu také pevná fáze, nezbyvá než provést poloprovozní testy. Pevná fáze může být přítomna ve formě suspenzí, které je nutné filtrovat nebo odstřeďovat. Pak se musí testovat na reálných aparátech, přičemž výrobci zařízení jsou na to připraveni a mají na zapůjčení modely s malou kapacitou, která je i tak v řádech stovek litrů za hodinu a to už nelze dělat v laboratoři. Dále za pevnou fázi je možné považovat i heterogenní katalyzátor, kdy je nutné zkoumat jeho dlouhodobou životnost, což je také v laboratoři obtížně proveditelné.

Příkladem takového poloprovozního testování je vývoj katalyzátoru pro proces mokré oxidace [6]. Mokrý oxidace je metoda likvidace odpadních vod, které z důvodu velkého zatížení (vysoké CHSK), nebo z důvodu toxicity nemohou být zpracovány na čistírně. Obě podmínky splňuje odpadní voda z výroby akrylátů společnosti Synthomer v Sokolově. Mokrý oxidace probíhá při teplotě nad 220 °C a tlaku 5 MPa v prostředí čistého kyslíku. Nejprve byl po důkladné rozvaze proveden experimentální výzkum v laboratoři, který zahrnoval vývoj nového katalyzátoru. Následně byl proveden návrh celého procesu (obrázek 5).



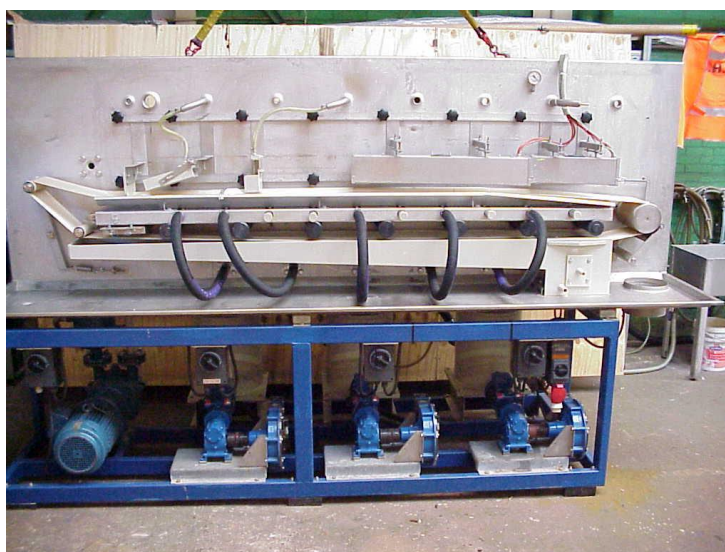
Obrázek 5 3D návrh jednotky mokré oxidace (projekce Pento spol. s r.o.)

Následně bylo přistoupeno k důkladnému otestování vyvinutého katalyzátoru na poloprovozní jednotce (obrázek 6), která byla postavena a umístěna přímo v závodě potenciálního uživatele, kdy se proces testuje přímo na provozních odpadních vodách. Je tak zajištěna přenositelnost výsledků a určitá jistota dlouhodobého chování systému.



Obrázek 6 Návrh a výsledná realizace poloprovozní jednotky mokré oxidace (projekce Pento spol. s r.o. a fotoarchiv autora)

Dalším příkladem může být poloprovozní testování při vývoji technologie 1,4-diabicyklo [2.2.2] oktanu (DABCO) [7]. Produkt vzniká z ethylendiaminu sekvencí čtyř následných reakcí v plynné fázi při teplotě 360 °C na zeolitovém katalyzátoru ZSM-5 s výtěžkem až 95 %, což je samo o sobě v oblasti organické chemie za takových podmínek mimořádné. Přesto je nutné následně DABCO izolovat velmi čistý, což se dosahuje krystalizací destilované frakce z MTBE. Aby bylo možné technologii kompletně otestovat a navrhnout, bylo nutné postavit poloprovozní jednotku s kapacitou 12 DABCO kg/ h. Zde se testoval jednak katalyzátor a dále pak samotná izolace, přičemž pro navrženou kapacitu 1000 tun/rok přicházel v úvahu jedině pásový filtr. Toto uspořádání bylo ve spolupráci s výrobcem testováno na modelovém filtru (obrázek 7). Další smysl poloprovozu, což je obecně platné i pro vývoj jiných technologií, byl v malotonažní produkci DABCO a jeho dodávání potencionálním zákazníkům, kterým v tomto případě byl Gumotex Břeclav po dobu jednoho roku. Tím se pomocí poloprovozu dělá průzkum trhu a testuje se za u zákazníků za reálných podmínek kvalita budoucího produktu.

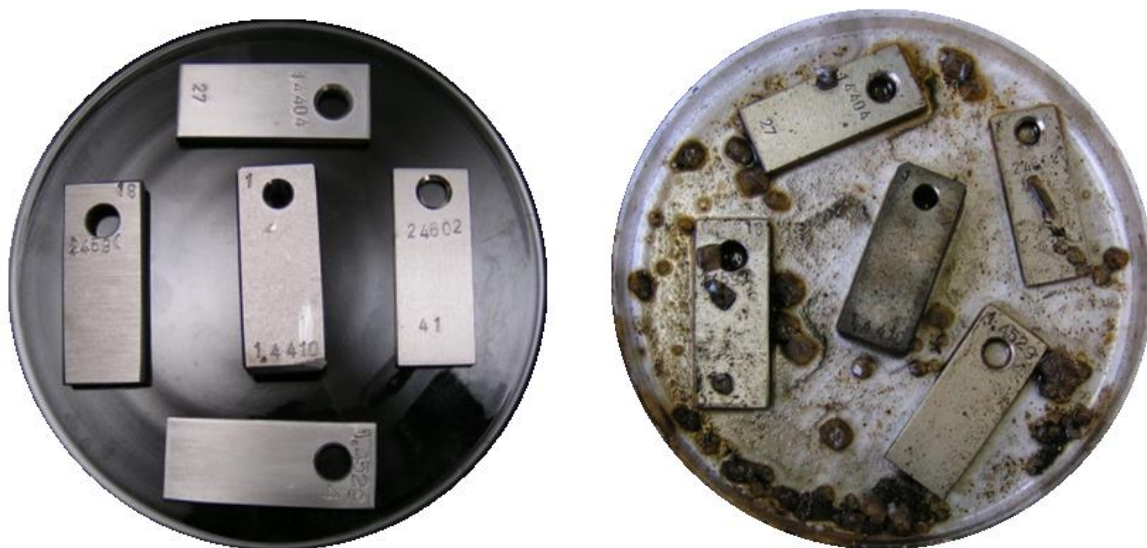


Obrázek 7 Poloprovozní pásový filtr firmy Larox při testování separace DABCO z roztoku MTBE (BC-MCHZ Ostrava, fotoarchiv autora)

Z povahy látek lze někdy už dopředu rozhodnout, jaké konstrukční materiály budou pro nový proces vhodné. Buď je možné dohledat doporučené materiály pro dané látky, nebo je od začátku předpokládáno korozní působení a tak se už předpokládá použití odolných materiálů jako je smalt, teflon nebo grafit. Někdy jsme ovšem na pomezí a pak je nutné provádět při

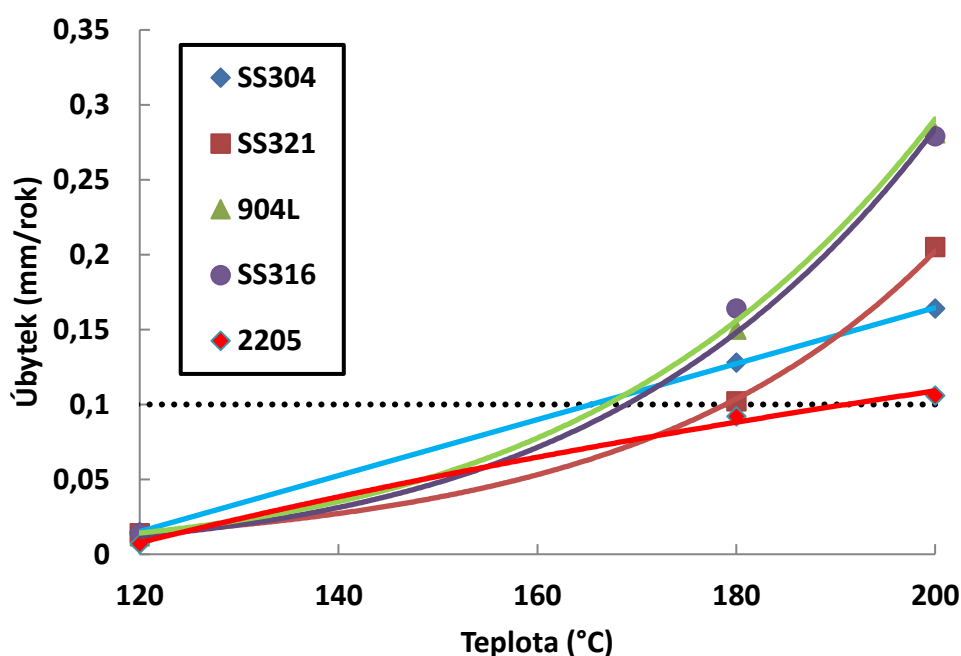
experimentálním vývoji i korozní testy. Většinou se provádí jednoduché testy se vzorky slitin, exponované po nějakou dobu do prostředí za uvažovaných procesních podmínek. Výsledkem pak bývá spočtený úbytek materiálu v mm za rok, kdy se jako hranice uvažuje úbytek 0,1 mm. To může být někdy nedostatečné a i přes malý úbytek materiálu, je možné následně zjistit problém, třeba ve formě bodové koroze. Je vždy lepší pro posouzení výsledků testů do týmu přizvat korozního specialistu.

Korozní podmínky procesu mnohdy definují jeho uspořádání. Ve spolupráci s firmou Huntsman byl vyvíjen proces pro solidifikaci odpadních vod z výroby textilních barviv pro závod ve městě Atoto v Mexiku [8]. Podnět vycházel z požadavku na splnění nových legislativních norem, přičemž v poslední době se princip „zero discharge“ stává oficiální politikou v mnoha zemích světa, které jsou silně zatíženy průmyslovou výrobou, jako je Indie, Čína, Singapur a další. Odpadní voda obsahovala asi 10 % solí, převážně chloridů a 1 % netěkavé organiky. Na základně korozních testů bylo zjištěno, že běžné slitiny jsou nevyhovující a vhodným konstrukčním materiálem je titan při teplotách do 80 °C. To mělo vliv na celkovou koncepci, kdy proces byl navržen jako kaskáda vakuových odparek, kde teplota vlivem snížení tlaku nepřekročuje 70 °C. Dále s ohledem na zvolený materiál a jeho vyšší cenu, byly použity deskové výměníky tepla. Zbytek zařízení (potrubí, nádoby, atd.) byl proveden v plastu.



Obrázek 8 Příklad testování konstrukčních materiálů v odpadní vodě z výroby textilních barviv, vlevo před testem, vpravo po testu (fotoarchiv autora)

Dalším příkladem korozního hodnocení může být vývoj procesu mokré oxidace sulfidových louhů z rafinerie Unipetrolu Litvínov [9]. Sulfidové louhy vznikají vypírkou benzinů pomocí vodného roztoku NaOH, přičemž vzniká bazický roztok sulfidu sodného se zbytkovým obsahem NaOH. Roztok sulfidu podléhá snadno oxidaci kyslíkem a to buď čistým, nebo vzduchem a to i při laboratorní teplotě. Oxidace probíhá ve dvou stupních a to na thiosíran velmi snadno a na síran při teplotách nad 120 °C. Aby byl proces, co nejvíce efektivní, je vhodné pracovat při nejvyšší možné teplotě, aby mohl být objem reaktoru co nejmenší. S vyšší teplotou ovšem klesá odolnost materiálů a za účelem posouzení byly provedeny příslušné korozní testy (obrázek 9). Na základě výsledků byl proces navržen při teplotě zhruba 150 °C, kdy již dochází k totální oxidaci, přičemž je ještě odolná běžná konstrukční ocel SS304.



Obrázek 9 Vliv teploty na stabilitu materiálů v sulfidovém roztoku

Výsledkem všech dosavadních prací je návrh nového procesu, který je předkládán ve formě podkladů pro proces, někdy také označených jako know-how.

4.3 Tvorba podkladů pro proces

Ten, kdo dokáže sestavit podklady pro proces, může se prohlásit za autora návrhu (dokud se nerealizuje tak je to skutečně jen návrh) nové technologie. To není v akademickém prostředí zatím zažitý názor a lze se stále setkat s představou, že několik laboratorních experimentů, byť zajímavých, znamená vytvoření nové technologie. Je nutné si uvědomit, že technologie vznikne teprve fyzickou instalací a aby k ní mohlo dojít, je nutné připravit podklady, na základě kterých projekčně – inženýrská organizace dokáže takovou instalaci provést.

Další zažitou představou je, že se výsledky experimentů předají projektantům a ti už to nějak dotáhnou do konce. I toto je v praxi chybná úvaha, protože v projekčních firmách nejsou obvykle zaměstnání lidé vyškolení pro navrhování procesů (není to jejich profese) a jsou naopak zvyklí pracovat na základě předaných podkladů. V chemii je běžné, že projekční firmy pro svého zákazníka nakupují know-how třeba spolu s licencí a následně podle dodaných podkladů zákazníkovi projekt realizují. Představa, že na základě experimentů projekční firma navrhne, jak má vypadat reaktor a jak má vypadat rektifikační linka pro izolaci produktů je tedy mylná a je to zodpovědností autora návrhu.

Podklady pro proces mají několik částí, jejichž rozsah je víceméně v oboru procesní chemie uznáván, i když ne přímo definován. Každá projekčně – inženýrská organizace má navíc interně nastavené požadavky na minimální obsah podkladů. Platí, že čím jsou podklady detailnější, tím je situace lepší. Je mnoho úrovní projekce, ale než je projekt převzat projekčně – inženýrskou firmou měl by být autorem návrh nové technologie dopracován na úroveň, pro kterou se vžilo označení „Conceptual design“.

4.3.1 Základní údaje o procesu

První částí podkladů jsou základní údaje o procesu, kde se zjednodušenou formou vysvětluje princip procesu. To je velmi důležité, protože je nutné si uvědomit, že podklady přebírají ve firmách i pracovníci, kteří nemají specializované chemické vzdělání, jako jsou strojní, elektro a stavební inženýři, přičemž i jim musí být jasný záměr projektu. Dalšími údaji jsou kapacita procesu, fond pracovní doby, rozvržení procesu do sekcí, základní prostorové nároky, přesná lokace a klimatické podmínky v místě.

Jak důležité je uvažování přesné lokace při sestavování podkladů ilustruje následující příklad již výše uvedené spolupráce s firmou Huntsman při vývoji proces pro solidifikaci odpadních vod z výroby textilních barviv pro závod ve městě Atoto v Mexiku [8]. S ohledem na úsporu času a jednoduchost byly experimenty prováděny pracovníky firmy v místě a výsledky následně předávány. Zde byla u všech experimentů deklarována počáteční teplota varu odpadních vod na počátku 96 °C, což bylo považováno s ohledem na složení za nereálný údaj. Byla provedena simulace, přičemž bylo zjištěno, že odpovídající teplota je 101 °C. Následně byla namíchána směs o stejném složení a experimentálně byla zjištěna také teplota 101 °C. Pak byl partner požádán o novou kalibraci teploměrů a opakování experimentů, kde byla ovšem znovu zjištěna teplota 96 °C. Teprve pak bylo odhaleno, že Atoto leží na náhorní plošině ve výšce 1500 m nad mořem, kde atmosférický tlak není pro nás běžných 100 kPa, ale pouze 84 kPa, což vedlo ke snížení bodu varu. Projekt byl následně úspěšně dokončen a jednotka, sestávající z kaskády cirkulačních odparek, spuštěna v roce 2011 (obrázek 10).

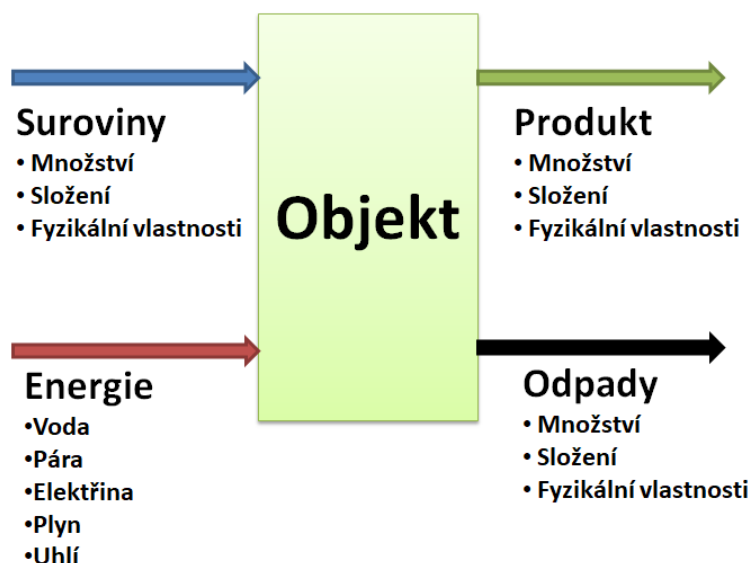


Obrázek 10 Jednotka na solidifikaci odpadní vody v závodě Huntsman, Atoto, Mexiko (fotoarchiv autora)

4.3.2 Definice hranic objektu

Druhou kapitolou je definice hranic objektu nebo jak se v praxi používá „Battery Limit“. Tato kapitola určuje rozhraní nového procesu, kterým je napojen na existující infrastrukturu, nebo přímo určuje, jaká nová infrastruktura se musí vybudovat. Jsou zde deklarovány všechny vstupní a výstupní proudy (ne vnitřní), jejich množství a parametry (teploty, tlaky, složení, atd.).

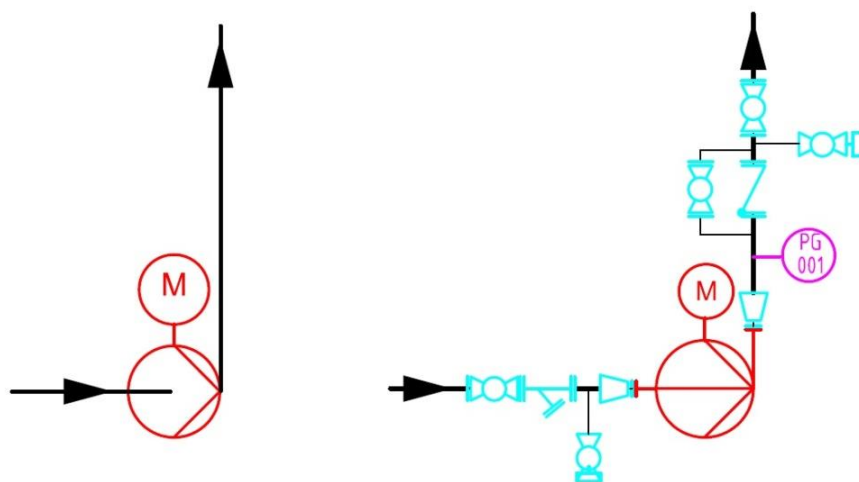
Dále jsou definovány vstupy a výstupy energií jako je pára, chladicí voda, topný plyn, atd.. Tato kapitola je důležitá také z toho důvodu, že se stává podkladem pro podání žádosti o EIA (Environmental Impact Assessment) a pro stavební řízení.



Obrázek 11 Vstupy a výstupy na hranicích objektu

4.3.3 Popis technologie a schémata

Další částí podkladů a v podstatě tou hlavní, je popis technologie, který se váže na technologická schémata. Praxe rozlišuje schémata na úrovni PFD (**P**rocess **F**low **D**iagram) a PID (**P**rocess and **I**nstrument **D**rawing). V podkladech na úrovni Conceptual design se předpokládá předložení minimálně PFD, zatímco PID schémata vytváří již projekční firma. Rozdíl mezi PFD a PID schémata zobrazuje obrázek 12. Oba druhy schémat znázorňují aparáty, jejich vzájemné propojení s vyznačenými prvky instrumentace - MaR (**M**ěření a **R**egulace). Schémata na úrovni PID jsou ovšem již mnohem detailnější s vyznačením světlosti potrubí, všech ručních armatur a místních prvků měření.



Obrázek 12 Porovnání znázornění čerpadla na schématu PFD (vlevo) a PID (vpravo)

Popis procesu je nutné udělat velmi detailně tak, aby bylo jasně definované, co se bude odehrávat. Ukázkou popisu může být následující výsek „...roztok o koncentraci 55 – 60 % methanolu ve vodě o teplotě 40 °C s v množství asi 1500 kg/h se ze zásobníku T-401 s vlečnou regulací LIC – FIC pomocí čerpadla P-404 nastříkuje na hlavu kolony C-402...“. Popisují se ustálené stavy procesu, ale i nestacionární stavy jako je najíždění, odstavení, havarijní stavy, aktivace katalyzátoru, atd.. Samostatnou položkou je popis vsádkových operací, kde se detailně popisuje každý krok (otevře se tento ventil, pak se zapne toto míchadlo, atd.) a tvoří se tak postup jak operace provést. Z výše uvedeného je zřejmé, že tvorba technologických schémat a popisu technologie vyžaduje již poměrně velkou zkušenost a předpokládá i základní znalosti z oboru MaR.

4.3.4 Látková a entalpická bilance

Další kapitolou podkladů pro proces je látková a entalpická bilance. Zatím co chemika zajímá výtěžek 98 %, procesní inženýr si obvykle pokládá otázku, co jsou zbylá 2 % a jak tyto látky z produktu odstranit. Z toho plyne, že látková bilance musí být detailní, zahrnovat všechny látky, i zcela minoritní a bilancovat se musí všechny technologické proudy, včetně recyklů. Z bilance musí být zřejmé, jak do procesu látky vstupují, jak se přeměňují a jak proces opouštějí, nic nemůže mizet nebo se akumulovat. Podle zpracování látkové bilance lze rozpoznat kvalitu přeloženého návrhu procesu. Pokud je v bilanci podezřele málo látek, nebo se bilancují jen hlavní látky, jde obvykle o nedopracovaný návrh, který by realizací mohl

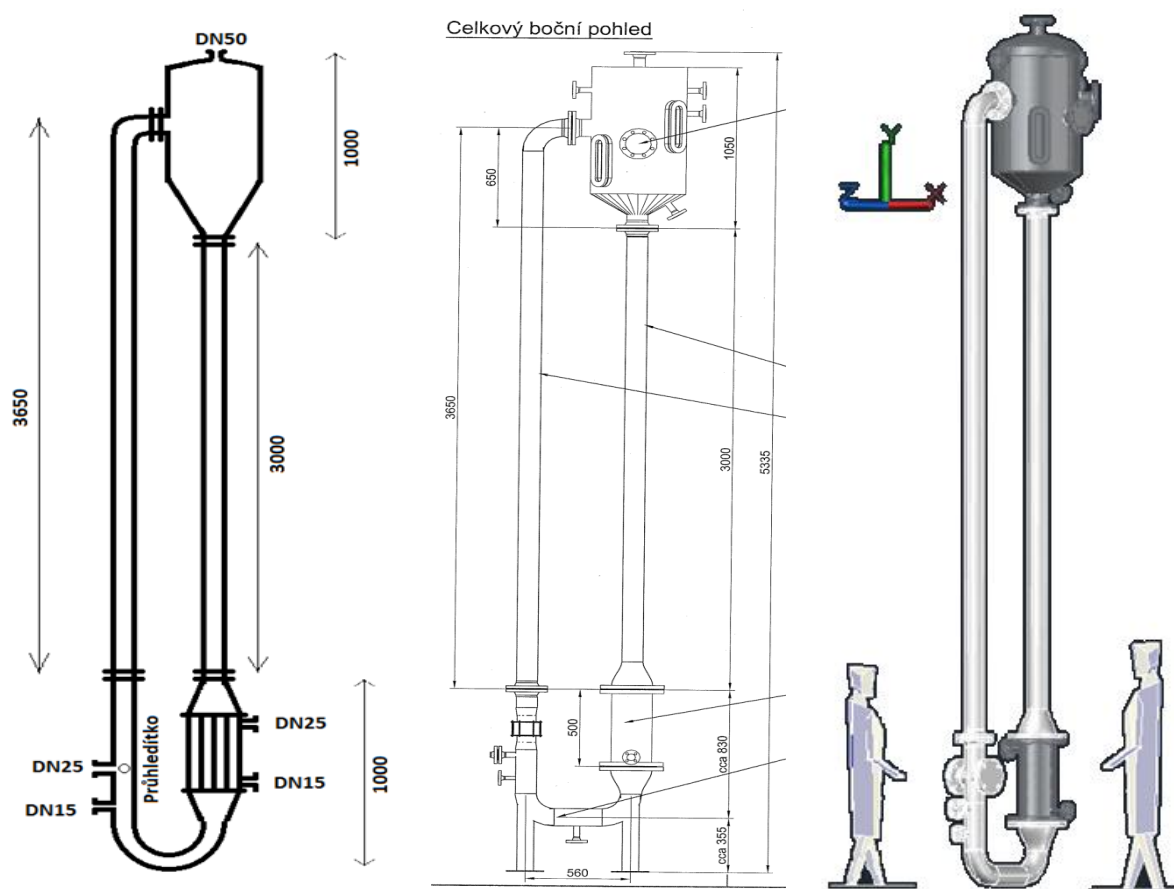
investorovi přinést nepříjemná překvapení. Dost často v návrzích chybí například odpadní proudy a po jejich doplnění se mnohdy ukáže počáteční ekonomická rozvaha chybná a projekt nereálný.

Kromě složení se u proudů udávají i fyzikální vlastnosti jako je teplota, tlak, hustota, viskozita, obsah pevné fáze a celkový tok. Tyto údaje se následně používají pro návrh potrubních tras. Pro sestavení látkové bilance se s výhodou používají simulační programy, přičemž je nutné podotknout, že mnohé vlastnosti proudů (hustota a viskozita u kapalin) získané ze simulačního programu neodpovídají realitě a je nutné je experimentálně ověřit. To je nezbytné, protože tyto údaje se také používají pro návrh instrumentace a armatur, přičemž špatné údaje mohou způsobit naprostou nefunkčnost výsledného celku.

4.3.5 Aparáty

Aparáty jsou nedílnou součástí návrhu nového procesu. Zde již přichází ke slovu naplno celkové metody chemického inženýrství a jeho speciální části jako je například reaktorové inženýrství. Každý aparát (čerpadlo, výměník, kolona, reaktor, atd.) musí být přesně definován, včetně použitých materiálů. V tomto ohledu je velkou pomocí simulační software, který umožňuje návrh aparátů efektivně provést. U typizovaných aparátů jako jsou čerpadla, postačuje uvádět základní parametry jako je kapacita, výtlačná výška a podle použití druh čerpadla. U dalších aparátů jako jsou výměníky, nebo aparáty pro výměnu hmoty (kolony, extraktory, absorbéry, atd..) je nutné dodat konstrukční návrh, což znamená přesné dimenze aparátů, vnitřní uspořádání, případně i dodavatele kritických částí. To platí samozřejmě i pro reaktory, protože neexistuje něco jako typizovaný reaktor, pro každou chemickou reakci je vhodné jiné uspořádání.

U zvláštních aparátů je odpovědností autora dodat i zjednodušený konstrukční náčrt, tak aby při další fázi projekce měli strojní inženýři možnost provést detailní návrh. Jako příklad konstrukčního návrhu (obrázek 13) je možno uvést design poloprovozního aparátu pro srážení biopolymeru [10] z roztoku chloroformu nástřikem do horké vody. Aby byl nástřik veden kontinuálně do velkého přebytku vody, byl aparát navržen jako cirkulační smyčka, pracující na termosifonovém principu. Roztok chloroformu přivedený do spodu smyčky se okamžitě v přebytku vody odpařuje, dochází k vysrážení polymeru, který je kapalino – parní směsí unášen do hlavového odlučovače. Pro návrh systému byly provedeny bilanční a hydraulické výpočty v simulačním programu a vzešlý návrh byl pak detailně rozpracován projekční firmou.



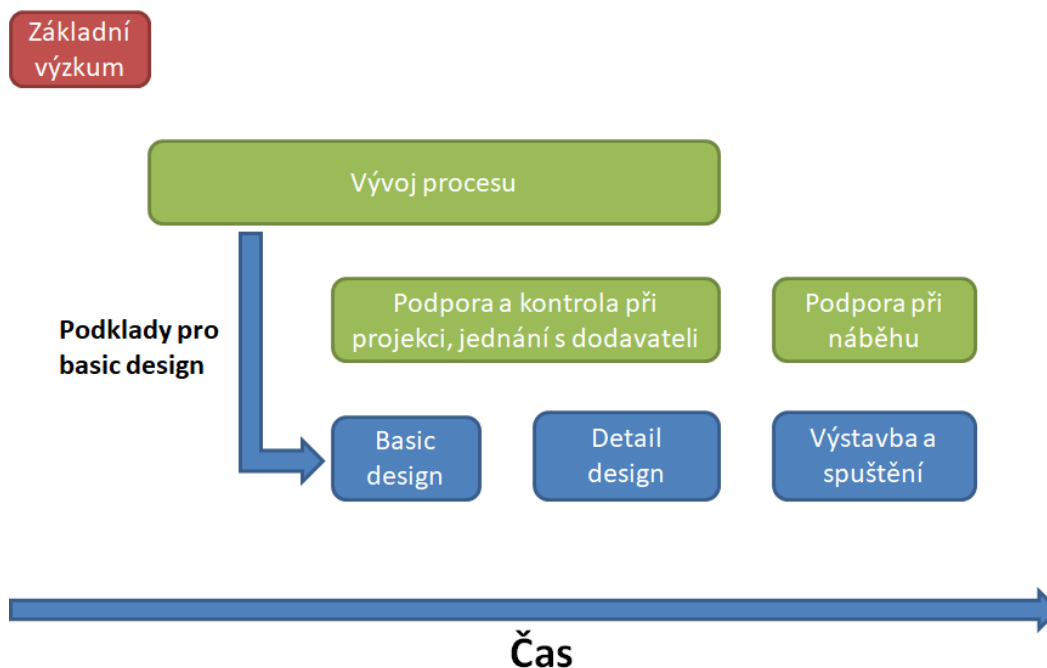
Obrázek 13 Stupně projekce aparátů, vlevo Conceptual desing (autor), ve středu a vpravo firemní projekce (Chemoprojekt a.s.)

4.3.6 Analytické metody a řízení procesu

Analytické metody a řízení procesu jsou poslední kapitolou podkladů pro proces. Každý technologický proces vyžaduje důslednou analytickou kontrolu, přičemž způsob této kontroly musí být již zahrnut v podkladech, aby se při projekci počítalo s vytvořením podpůrné infrastruktury a jejím rozsahem (velikost laboratoří). Během výzkumu a vývoje se postupně vyvíjejí i analytické metody a následně jsou přeneseny do podkladů. Dále je součástí podkladů „sample list“ kde je definován odběr vzorků, metoda analýzy, četnost odběru a místo odběru, které je zároveň vyznačeno na PFD. S analytikou úzce souvisí řízení procesu, kdy je definováno v jakém rozmezí se mohou pohybovat stanovované hodnoty. Dále jsou popsány zásahy do technologie, které je nutné provést, pokud se hodnoty od stanoveného rozsahu odchylují.

5 Realizace nového procesu

Vytvoření nového procesu vždy stojí na počátku na výsledcích, které poskytuje základní výzkum. Pak následuje procesní výzkum a vývoj a v určité fázi jsou vytvořeny podklady pro nový proces. Vytvořením podkladů pro nový proces však účast autora v projektu zdaleka nekončí. Po předání podkladů projekčně - inženýrské organizaci probíhá práce na projektu ve dvou směrech.



Obrázek 14 Časová osa vývoje nového procesu

Prvním směrem je spolupráce s pracovníky projekční firmy, která se skládá z kontroly a oponování vznikajících projekčních materiálů a z doplňování údajů podle požadavků projektantů. Zde je nutný alespoň základní přehled přes několik oborů jako je měření a regulace, strojnictví, stavebnictví tak, aby byl autor schopen se svými protějšky komunikovat. To samozřejmě nelze očekávat od čerstvého absolventa university a vyžaduje to určitý čas a praxi v oboru.

Je nutné si uvědomit, že autor do podkladů o procesu dává všechny informace, které považuje za důležité, přičemž má další spoustu informací a zkušeností z vývoje dané technologie, které se obvykle ukazují užitečné až při projekci, nebo samotné výstavbě. Nefunguje zde tedy žádné předávání štafetového kolíku, přičemž autor – procesní inženýr stojí v čele projektu od začátku až po najetí. Mnohdy projekce představuje i vyjednávání s dodavateli

konkrétních zařízení, přičemž přítomnost autora je oboustranně užitečná. Jednak autor přispívá k jednání svými zkušenostmi a návrh se tak upřesňuje. Účast na těchto jednání je velmi užitečná také pro samotného autora, který má možnost se potkat se zkušenými zaměstnanci dodavatelů a načerpat od nich praktické informace, které nelze jinak nikde vyčíst a zúročí se v budoucích projektech.

Druhým směrem činnosti autora obvykle bývá další prohlubování poznatků o procesu, protože i během projekce se mohou parametry procesu dále zlepšovat. Například vývoj katalyzátoru pro proces je nikdy nekončící práce, kdy i po realizaci procesu jsou stále vyvíjeny nové generace katalyzátoru.

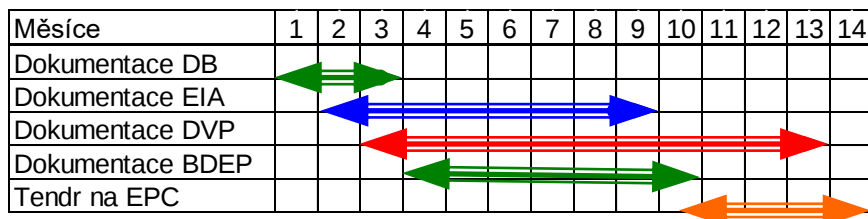
Každá investiční akce má dvě samostatné fáze, které na sebe navazují a to přípravu dokumentací k projektu a následnou výstavbu.

5.1 Příprava dokumentace projektu

První dokumentací, která je podkladem pro ostatní je obecně nazývána Design basis (DB). Jsou zde shrnuty základní materiálové toky, zjednodušená bloková schémata a popis procesu, která slouží jako podklad pro podání žádostí o Vyhodnocení vlivů na životní prostředí (EIA) a stavební povolení. Doba pro vypracování obvykle nebývá delší než 3 měsíce (obrázek 10). Dále následuje samotné podání žádosti EIA a následné vypořádání připomínek dotčených institucí. Zde jsou již lhůty podstatně delší. Následně se vypracuje a odešle příslušným institucí dokumentace pro veřejnoprávní posouzení (DVP). To zahrnuje sloučenou žádost o stavební povolení a žádost o územní rozhodnutí. Tato část trvá obvykle nejdéle. Souběžně s vypořádáváním legislativních požadavků probíhá také tvorba základní projekce – Basic Design Engineering Package (BDEP). Poslední částí je příprava podkladů pro tendr na generálního dodavatele ve formě EPC kontraktu (Engineering – Procurement – Construction).

Některé projekty jsou realizovány od začátku do konce jedním dodavatelem a pak tendr odpadá. Má to tu výhodu, že se neztrácí čas ani informace při předávání projektu. V praxi je u velké části projektů nutné při následné fázi upravovat BDEP nebo dělat nový od znova, protože na trhu je mnoho firem, které se k zakázkám dostávají nízkou nabídkovou cenou, a výsledná kvalita tomu pak odpovídá. Naopak některé firmy, na základě interních pravidel nemají jinou možnost, než tendr uspořádat. Například největší firma v chemii v ČR Unipetrol využívá

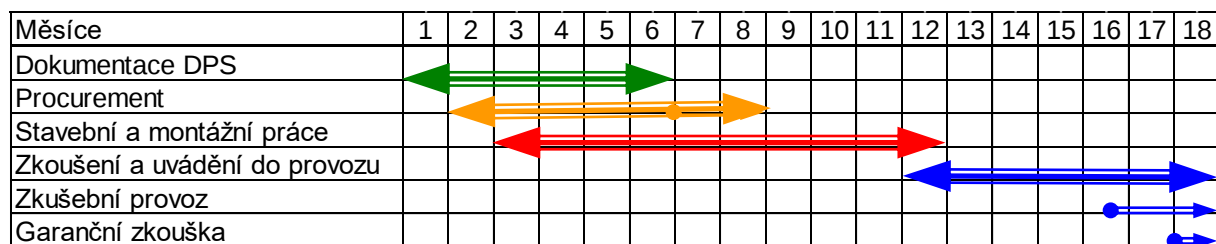
systém Connect (connect.orlen.pl), přes který soutěží zakázky, třeba i formou internetové aukce na nejnížší nabídkovou cenu.



Obrázek 15 Časový rozsah jednotlivých fází přípravy dokumentací projektu

5.2 Výstavba a spuštění technologie

Poslední fází u nové technologie je její výstavba a spuštění. Nejprve se zahájí zpracovávání Dokumentace provádění stavby (DPS) označované také jako Detail Design. V ní se nejdříve řeší stavební část, tak aby mohla být stavba co nejdříve zahájena a dále pak specifikace aparátů s nejdelší dodací lhůtou, aby mohly být včas objednány. Ještě v průběhu tvorby DPS už probíhá hodnocení nabídek a objednávání jednotlivých komponentů stavby (aparáty, armatury, stavební a konstrukční materiál, atd.), přičemž tato fáze je běžně označována jako Procurement. Dále následuje již fáze výstavby a to ve sledu stavba konstrukcí, instalace technologií a potrubí, elektromontáže, osazení instrumentace a až nakonec se vytváří řídicí systém. Po kolaudaci stavby je přikročeno k individuálním zkouškám zařízení, následované komplexními testy s náhradním médiem, až po celkové najetí technologie do zkušebního provozu. Ten je obvykle zakončen smluvně předepsanou garanční zkouškou.



Obrázek 16 Časový rozsah jednotlivých fází výstavby nového procesu

Během náběhu technologie je znovu důležitá spolupráce autora, protože se obvykle projeví nějaké nedostatky návrhu a odchylky od předpokládaného stavu, které je nutné odstranit. Při najetí je nutná velká analytická podpora projektu nad rámec běžné provozní kontroly a právě vývojové pracoviště je schopno obvykle takovou podporu zajistit.

V tomto ohledu je nutno podotknout, že náběh nového procesu je pro autora hmatatelným finálním zakončením dlouholeté snahy a jistý pocit zadostiučinění. Na druhou stranu, přítomnost autora při najíždění je pro něj samotného i velmi stresující, protože při problémech, a ty se objeví vždy v různé intenzitě, okolí očekává od autora řešení vzniklé situace (nejlépe hned). Projekty v chemii začínají finančně v řádech desítek milionů korun a končí v řádech miliard. Z toho je patrné, že vývoj nového procesu od prvotní myšlenky a po spuštění procesu klade na autory nových procesů obrovskou zodpovědnost za výsledek a to je možná i důvod, proč se oboru procesního designerství věnuje tak málo lidí.

Pokud sečteme obvyklé doby pro přípravu projektu a jeho finální realizaci, tak v ideálním případě se dostáváme na délku 2,5 roku od předání podkladů. U jednodušších projektů se můžeme dostat na 2 roky, ale kratší doba realizace je nemožná. Dost často se v praxi stává, že méně znalí manažeři a majitelé firem mají naprosto nereálnou představu o potřebných dobách, s požadavkem do roka začít něco vyrábět, když ještě nezačal ani vývoj.

6 Fyzikální data pro návrh procesů

Design průmyslových procesů, nejenom v chemii, dnes závisí především na matematickém modelování, kdy je využit příslušný software. To neznamena, že cokoliv, co výpočetní program prezentuje jako výsledek, je automaticky správné, proto je nutné znát limity jeho používání.

Každý matematický model, byť sebelepší, představuje určité zjednodušení reálného chování přírodních sil. Je také důležité umět si vybrat ze široké palety modelů, které mají simulační programy implementovány v sobě, ten pro danou situaci nejvhodnější. Další nepřesnost do výpočtu zanáší použité numerické metody. Po zvolení nejvhodnějšího modelu a dostatečně robustních numerických metod zbývá to nejdůležitější a to je zvolení nebo nalezení správných parametrů modelu.

Tyto parametry jsou obvykle získávány na základě regrese vhodných experimentálních dat. Jako příklad lze uvést model NRTL pro popis aktivitních koeficientů složek v kapalně fázi (rovnice 1). Model má nastavitelné parametry a až f a simulační programy obvykle obsahují databázi těchto hodnot, mnohdy i několik různých setů na výběr, další je možné nalézt v odborné literatuře. V podstatě lze říci, že co autor, to vlastní soubor hodnot parametrů.

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j x_j \tau_{ji} G_{ji}}{\sum_k x_k G_{ki}} + \sum_j \frac{x_j G_{ij}}{\sum_k x_k G_{kj}} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_m x_m \tau_{mj} G_{mj}}{\sum_k x_k G_{kj}} \right)$$

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \tau_{ij})$$

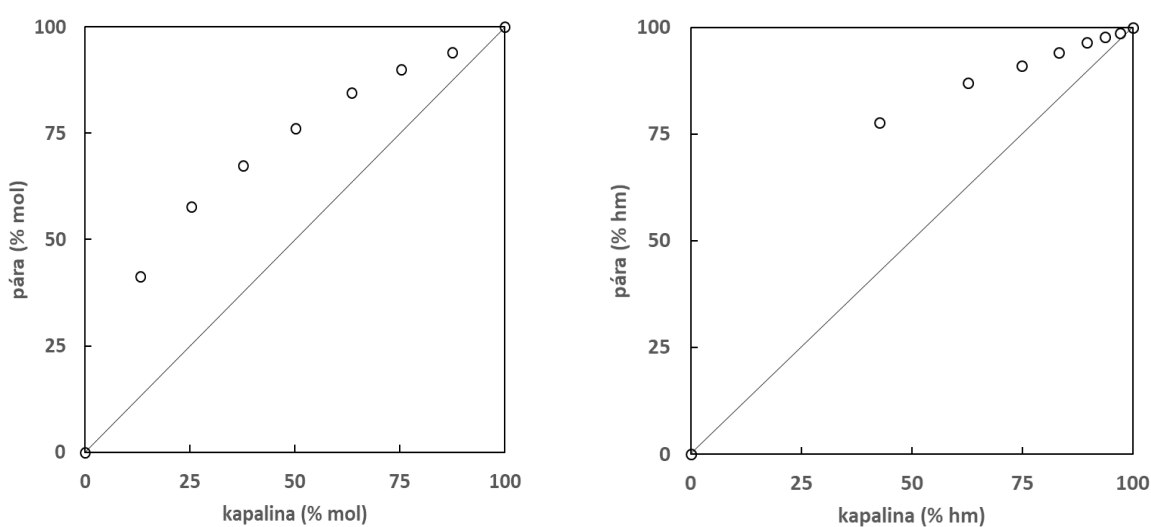
$$\tau_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T} + e_{ij} \ln T + f_{ij} T$$

$$\alpha_{ij} = c_{ij} + d_{ij} (T - 273.15)$$

Rovnice 1 Ukázka popisu aktivitního koeficientu složky modelem NRTL, a až f jsou parametry modelu získávané regresí experimentálních dat.

V technické praxi je tedy nezbytné začít od primárních dat a podrobit je kritické analýze. Dost často nastává situace, kdy data v literatuře chybí a pak je nezbytné je změřit. I když jsou data v literatuře dostupná, mnohdy jsou nedostačující, třeba rozsahem a způsobem měření. To lze ukázat na příkladu dat VLE binárního systému voda – dimethylaminoethanol (DMAE) [11].

Rovnováhy kapalina – pára se vyhodnocují v molárních zlomcích a proto se i rozsah měření volí tak, aby byla v tomto ohledu pokryta celá křivka (obrázek 17 vlevo). Pokud ale jsou v systému dvě látky s velkým rozdílem v molárních hmotnostech, což je u vody splněno prakticky vždy, tak po přepočtu na hmotnostní procenta (obrázek 17 vpravo) je vidět, že v rozmezí 0 až zhruba 40 hmotnostních % obsahu vody nemáme žádnou informaci o chování směsi. Je běžné, že látky jsou vyráběny o čistotě 99,9 % a vyšší, přičemž běžné publikace obvykle rozsah 99 – 100 % vůbec experimentálně nepokrývají a pak je výpočet v této oblasti určitou extrapolací mimo prověřený interval, a jak bude ukázáno dále, látky se mnohdy nechovají, jak model založený na celém rozsahu koncentrací předpokládá.



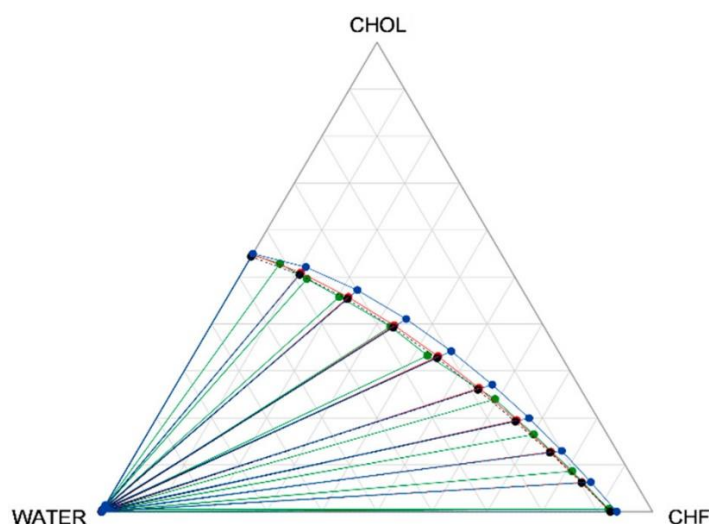
Obrázek 17 x-y diagramy směsi voda (1) – dimethylaminoethanol (2) při 90 °C, vlevo v molárních a vpravo v hmotnostních procentech

Pokud dále nahlédneme do zmíněné publikace [11], tak zjistíme, že roztoky o známém složení byly temperovány na danou teplotu (celkem 8 teplot 20 – 90 °C) a byla změřena tenze par roztoku. Složení v parní fázi pak nebylo stanoveno experimentálně, ale počítáno pouze teoreticky ze změn Gibbsových energií. Takový přístup je sice možný, ale zanáší do dat pro technickou praxi značnou nejistotu. To se ve výsledku projeví tak, že pokud podle parametrů NRTL, které spočítali autoři a které převzal simulační program, spočítáme rovnováhu kapalina – pára při atmosférickém tlaku, zjistíme, že vodu a DMAE lze od sebe dělit. Přitom reálně tyto látky tvoří azeotrop s minimem bodu varu o obsahu 8,1 % DMAE (vlastní měření).

Dalším nedostatkem, kterým trpí některé publikace, které se věnují fázovým rovnováhám je měření v úzkém intervalu teplot, nebo dokonce jen při jedné teplotě. Aktivitní koeficient je funkcí složení a teploty, přičemž i rovnice pro jeho popis (rovnice 1) jsou takto

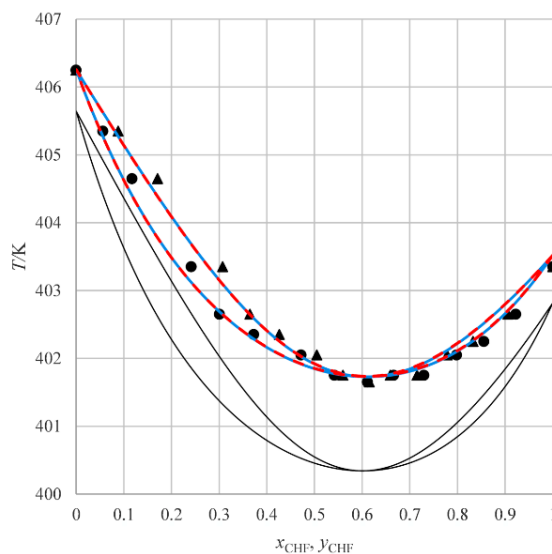
koncipovány. Pokud je provedeno měření pouze při jedné teplotě, tak popis získaný regresí dat je platný pouze za dané teploty.

To lze demonstrovat porovnáním vlastních experimentálních výsledků [12 a 13] s prací Steyera a kol. [14]. V prvním případě jde o měření rovnováhy kapalina-kapalina směsi cyklohexanol – cyklohexyl formiát – voda. Zatímco na VŠCHT bylo provedeno měření v rozsahu teplot 25 – 65 °C, Steyer měřil pouze při teplotě 25 °C. Obě skupiny vyhodnotily parametry modelu NRTL, ale zatímco model VŠCHT popisuje přiléhavě experimentální body v celém rozsahu teplot, tak Steyerův model funguje dobře pouze při 25 °C, pokud se použije pro jiné teploty (obrázek 18), tak už selhává.



Obrázek 18 Proložení experimentálních dat rovnováhy kapalina-kapalina směsi cyklohexanol – cyklohexyl formiát – voda při 65 °C různými modely: zelená experimentální data, červená NRTL, černá UNIQUAC, modrá NRTL Steyer a kol.

Druhý příklad porovnává měření rovnováhy kapalina – pára provedené isobaricky v systému cyklohexanol – cyklohexyl formiát. Steyer měřil pouze při tlaku 10 kPa a s ohledem na blízké body varu látek byla změna teploty při měření do 5 °C. Naproti tomu na VŠCHT bylo měřeno při třech tlacích (10, 25 a 40 kPa), což už představuje změnu teploty o asi 40 °C. Jak následně opět ukázal výpočet podle modelu, tak popis získaný na VŠCHT dobře prokládá experimentální body při všech tlacích, zatímco Steyerův popis mimo 10 kPa má značnou chybu (obrázek 19).



Obrázek 19 T - x - y binárního systému cyklohexanol – cyklohexyl formiat při 40 kPa: černé ●, bod varu; černé ▲, rosný bod; červenomodrá čára NRTL model autora; černá čára, NRTL model Steyera a kol.

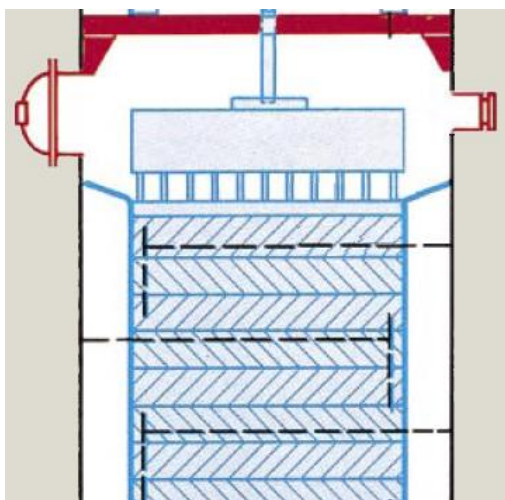
Někteří autoři sice měří v určitém rozsahu teplot, ale následně pro každou teplotu separátne vyhodnotí parametry příslušných modelů. Takové výsledky jsou pro technickou praxi bezcenné a následně je nutné udělat vlastní regresi primárních dat.

Mít správné modely se správnými parametry je tedy při výpočtech klíčový předpoklad úspěšného návrhu procesu. Dále budou uvedeny praktické příklady z realizací, kde chybná data v simulačním programu musela být nahrazena.

6.1 Rekonstrukce benzenové kolony

Kolona D201 ve společnosti DEZA a.s. se používá na izolaci benzenu od ostatních aromátů. Zároveň se odstraňují C8 nearomáty a hlavní část methycyklohexanu (MCHX), který je klíčovou látkou pro posouzení kvality dělení. C5 a C6 přecházejí do benzenového destilátu. Heptan a jeho isomery se na koloně nedělí od benzenu. Na koloně D201 se produkovaly dvě kvality benzenu a to kvalita B s obsahem MCHX asi 800 ppm a kvalita A s obsahem MCHX pod 500 ppm. Kolona pracuje za tlaku 370 kPa (rosný bod 128 °C), aby se páry kondenzujícího benzenu mohly využít k vytápění jiné kolony.

V minulosti prošla kolona D201 několika rekonstrukcemi. V 90. letech se ve spolupráci s VŠCHT v původní patrové koloně nahradila patra třemi sekcemi orientované výplně Sulzer Mellapak 500.Y, každá o výšce 5 m. Vzhledem k šíři původní kolony 3170 mm byla zvolena varianta vložení košilek o průměru 1900 mm (obrázek 20), aby se ušetřilo za v té době poměrně drahou výplň. Následně se provozem ukázalo, že kolona nemá předpokládanou účinnost a byl na původní kolonu přidán ještě nástavec 1970 mm s výškou výplně 5 m, čímž se účinnost o něco zlepšila.



Obrázek 20 Náskres výměny pater za orientovanou výplň s vložením košilky

Cílem rekonstrukce v roce 2015, na které se VŠCHT opět podílela [15], bylo zvýšit kapacitu kolony o 40 % a celoroční výroba kvality A. To lze realizovat náhradou staré výplně za účinnější typ a to v celém průřezu kolony. Otázkou zůstávalo jakou výplň vybrat, jaké provozní parametry očekávat, s ohledem na nutné úpravy dalšího zařízení. Další otázkou, kterou bylo nutné vyřešit, byl návrh šířky nového nástavce na kolonu, protože původní by již určitě kapacitně nepostačoval.

Na tyto otázky měla odpovědět simulace kolony, přičemž byla snaha platnost simulačního modelu ověřit porovnáním s existující kolonou při různých provozních stavech. Záhy se zjistilo, že ani kolona s účinností 100 teoretických pater (TP) nedokáže spolehlivě popsat reálný stav, přičemž maximální katalogová účinnost výplně Mellapak 500.Y je v dané výšce 80 TP. To je ovšem údaj pro atmosférický tlak, přičemž je obecně známo, že při

zvýšeném tlaku dochází k poklesu účinnosti výplně. Tuto disproporci bylo možné vysvětlit pouze špatným popisem rovnováhy kapalina – pára v simulačním programu.

Klíčové složky pro dělení jsou n-heptan a MCHX, což jsou nepolární uhlovodíky, které s benzenem, který má polarizovatelnou strukturu, vytváří neideální směsi. Fázové chování těchto směsí je v literatuře popsáno v širokém rozmezí koncentrací. V případě kolony D201 je na vstupu pouze 0,2 % MCHX a 0,06 % n-heptanu, přičemž destilát obsahuje pod 0,08 % obou. V oblasti takto nízkých koncentrací nebyla dostupná žádná data a bylo nutné v příslušném rozmezí data změřit, což bylo provedeno při několika tlacích (snížených oproti atmosféře) tak, aby získaný model dobře reagoval na teplotu.

Následně byly znovu provedeny simulace s opraveným modelem. Byl simulován běžný provozní stav (tabulka 2) a byla zjištěna účinnost kolony 40 TP. Dále byl simulován stav se sníženým nástřikem (tabulka 3) s účinností 60 TP. Nakonec byl proveden provozní experiment s nástřikem nestandardní směsi (tabulka 4), kde byla opět zjištěna účinnost 40 TP. Ke všem provozním stavům byly provedeny také hydraulické výpočty v programu Sulcol od výrobce výplně. Bylo zjištěno, že při prvním a posledním provozním stavu je kolona na hydraulickém limitu (přes 95 %) což vede ke snížení účinnosti, zatímco druhý provozní stav byl kapacitně na 50 % a zde se projevilo pouze snížení účinnosti z předpokládaných 80 na 60 TP vlivem vyššího tlaku. Z těchto zjištění vyplynulo, že při výběru nové výplně se bude muset počítat se snížením její účinnosti vlivem tlaku oproti katalogu o zhruba 25 %.

Tabulka 2 Porovnání simulace a provozních dat ze dne 29. 10. 2013, standardní podmínky

40 TP		Zbytek		Destilát	
	Nástřik	Provoz	Sim	Provoz	Sim
Teplota (°C)	114,6	174,1	173,7	128,5	128,5
Tlak (bar)	4		3,74	3,55	3,7
Průtok (m ³ /h)	24,6		6,3		17,4
	% hm.				
Benzen	72,5800	1,52	1,5418		97,6761
n-Heptan	0,0648	0,03	0,0317	0,07	0,0765
Methylcyklohexan	0,2226	0,56	0,6032	0,087	0,0881
Reflux (m ³ /h)	35				

Tabulka 3 Porovnání simulace a provozních dat ze dne 30. 10. 2013, nástřík snížený o 40 %

60 TP		Zbytek		Destilát	
	Nástřík	Provoz	Sim	Provoz	Sim
Teplota (°C)	115,8	176,3	175,4	130,8	129,6
Tlak (bar)	4		3,84	3,45	3,8
Průtok (m ³ /h)	15,6		4,4		11,5
	% hm.				
Benzen	72,4500	1,13	1,0752		97,6799
n-Heptan	0,0641	0,05	0,0445	0,07	0,0710
Methylcyklohexan	0,2224	0,612	0,6186	0,08	0,0824
Reflux (m ³ /h)	21,2				

Tabulka 4 Porovnání simulace a provozních dat ze dne 31. 10. 2013, nástřík nestandardní suroviny a vysoký refluxní tok

40 TP		Zbytek		Destilát	
	Nástřík	Provoz	Sim	Provoz	Sim
Teplota (°C)	114	167	166,5	131,6	130,2
Tlak (bar)	4		3,84	3,45	3,8
Průtok (m ³ /h)	15,6		12,7		3,9
	% hm.				
Benzen	25,2600	0,55	0,5869		99,4441
n-Heptan	0,2300	0,24	0,2228	0,22	0,2516
Methylcyklohexan	3,0000	3,58	3,9899	0,024	0,0238
Reflux (m ³ /h)	51				

Firma Sulzer jako budoucí dodavatel nové výplně také provedla simulace, ale s odlišným přístupem. Sulzer předpokládal konstantní katalogovou účinnost 80 TP nezávisle na hydraulických podmínkách. Následně, aby bylo dosaženo simulací stejných hodnot, jako měly provozní stavy, byl pro každou simulaci použit jiný soubor parametrů (tak aby to vyšlo). Výsledkem tak byly pro tři provozní stavy tři fyzikální reality. Tento zjevně nevhodný postup byl pracovníky DEZA odmítnut a celá rekonstrukce byla designována na základě modelu VŠCHT.

Výsledkem projektu byla výměna výplně za MellapakPlus 752.Y o celkové délce 21 m a náhrada horního nástavce za nový o průměru 2600 mm. Předpokládaná účinnost nové kolony, i se započtením vlivu tlaku byla 80 TP, což se po najetí potvrdilo. Zvýšení účinnosti kolony na

dvojnásobek umožnilo snížit spotřebu tepla a investice v řádu desítek milionů korun se tak vrátila za 8 měsíců provozu.



Obrázek 21 Rekonstrukce benzenové kolony ve společnosti DEZA, vlevo 1995, vpravo 2015 (fotoarchiv autora)

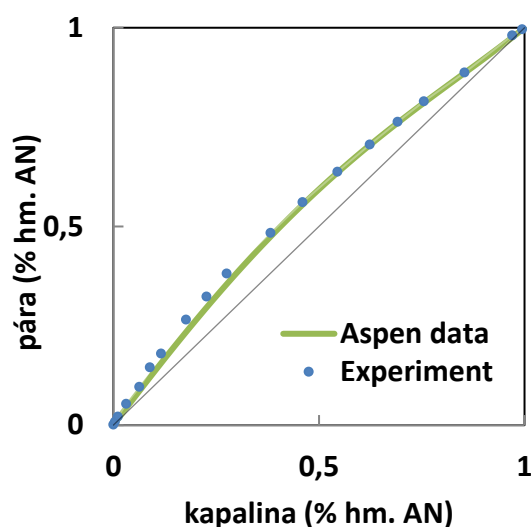
6.2 Rekonstrukce methylanilinové kolony

Dalším příkladem, kdy bylo nutné opravovat data v simulačním programu, je rekonstrukce kolony K2 u firmy Pigment Tambov, Ruská federace. Na koloně K2 se dělí směs anilin (AN), N-methylanilin (MMA) a N,N-dimethylanilin (DMA) jako hlavních složek. Nástrík obsahuje asi 88 % MMA, 9 % AN, 2 % DMA a zbytek tvoří minoritní látky, přičemž tato směs se získává katalytickou methylací AN methanolem v plynné fázi. Hlavním produktem je MMA, který z kolony odchází v parách asi 2 TP nad vařákem a používá se jako přísada do benzínu pro zvýšení oktanového čísla. AN spolu s částí DMA odchází vrchem kolony a vrací se jako recykl zpět do reaktoru. Cílem rekonstrukce bylo zvýšit kapacitu kolony a to tak, že se provozní tlak zvýší z 9 kPa na hlavě kolony na 38 kPa, čímž se s ohledem na menší objem par zvýší průchodnost kolony.

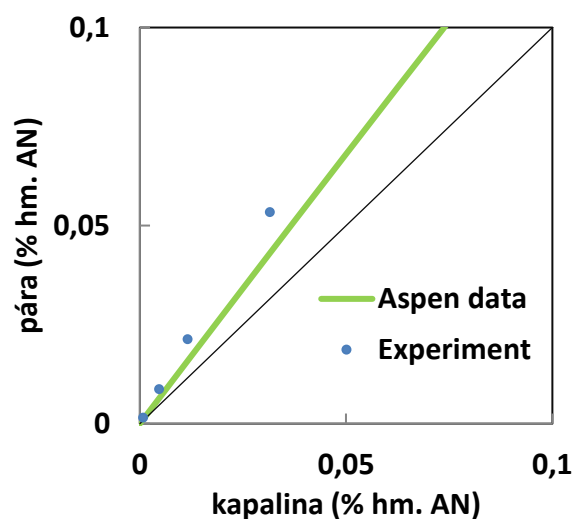
Kolona byla vyplněna dvěma vrstvami (2x 3,4 m) orientované výplně Sulzer Mellapak 452.Y a třemi vrstvami (3x 3,4 m) Mellapak 352.Y. V tomto designu lze dosáhnout účinnosti zhruba 50 TP. Byla provedena simulace několika provozních stavů, ale bylo zjištěno, že ani při

použití 100 TP se výpočtem nezíská odpovídající dělení látek. Z toho bylo vyvozeno, že model v simulačním programu není správný.

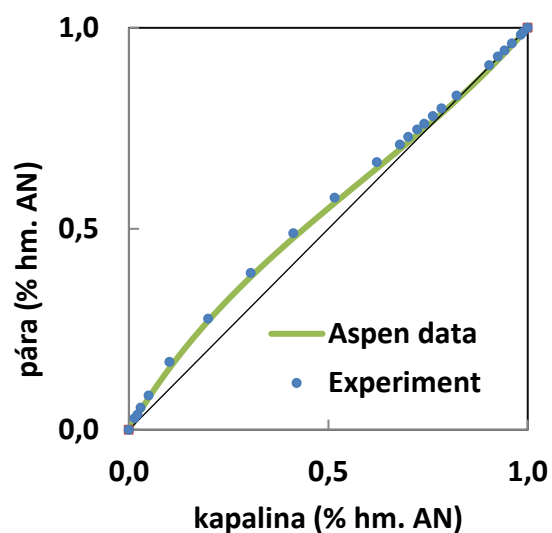
Bylo nutné změřit [16] příslušné rovnováhy kapalina – pára a experimentální data byla následně porovnána s výsledky simulačního programu. Měření proběhla v rozsahu tlaků 9 až 38 kPa, aby byla pokryta aktuální oblast provozování, ale i plánované zvýšení tlaku. Bylo zjištěno, že bináry AN-MMA (obrázky 22 a 23) a AN-DMA (obrázky 24 a 25) vykazují skutečně značnou odchylku od výsledků simulačního programu.



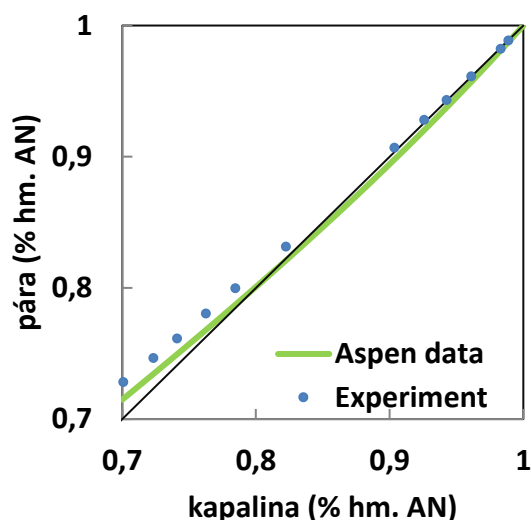
Obrázek 22 Porovnání experimentálních dat rovnováhy kapalina – pára směsi anilin – N-methylanilin při tlaku 9 kPa s NRTL popisem rovnováhy v simulačním programu



Obrázek 23 Porovnání experimentálních dat rovnováhy kapalina – pára směsi anilin – N-methylanilin při tlaku 9 kPa s NRTL popisem rovnováhy v simulačním programu, nízké koncentrace anilinu

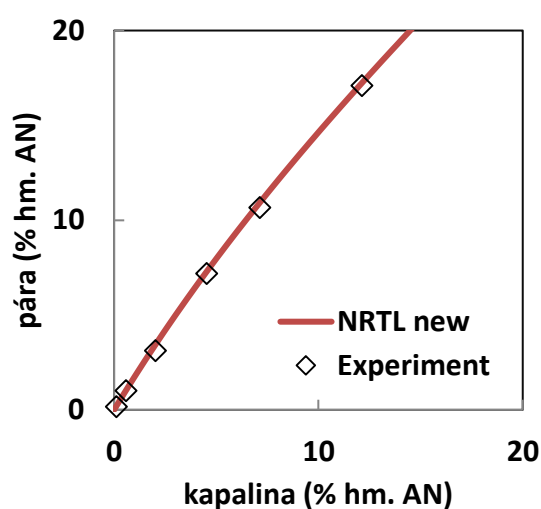


Obrázek 24 Porovnání experimentálních dat rovnováhy kapalina – pára směsi anilin – N,N-dimethylanilin při tlaku 38 kPa s NRTL popisem rovnováhy v simulačním programu



Obrázek 25 Porovnání experimentálních dat rovnováhy kapalina – pára směsi anilin – N,N-dimethylanilin při tlaku 38 kPa s NRTL popisem rovnováhy v simulačním programu, vysoké koncentrace anilinu

Nově získaná experimentální data byla následně regresně zpracována a byly tak získány nové parametry modelu NRTL (obrázek 26). S novým popisem byly znovu provedeny simulace kolony K2 (tabulka 5) a bylo zjištěno, že průměrná účinnost kolony se pohybuje na úrovni 40 TP. Nižší účinnost oproti předpokládané (50 TP) byla následně přisouzena provozování kolony mimo výrobcem doporučený rozsah vnitřních distributorů, kdy nedokonalé skrápění snížilo účinnost.



Obrázek 26 Porovnání experimentálních dat rovnováhy kapalina – pára směsi anilin – N-methylanilin při tlaku 9 kPa s novým NRTL popisem rovnováhy, nízké koncentrace anilinu

Tabulka 5 Porovnání provozního měření a simulace s novými parametry modelu NRTL

Datum	31/10/2012	Simulace
Produkt (kg/h)	2100	2100
MMA (% hm.)	97	96.6
DMA (% hm.)	2	2.4
AN (% hm.)	0.9	0.7
Destilát (kg/h)	410	408
MMA (% hm.)	48.7	50.2
DMA (% hm.)	12.9	8.6
AN (% hm.)	38.9	40

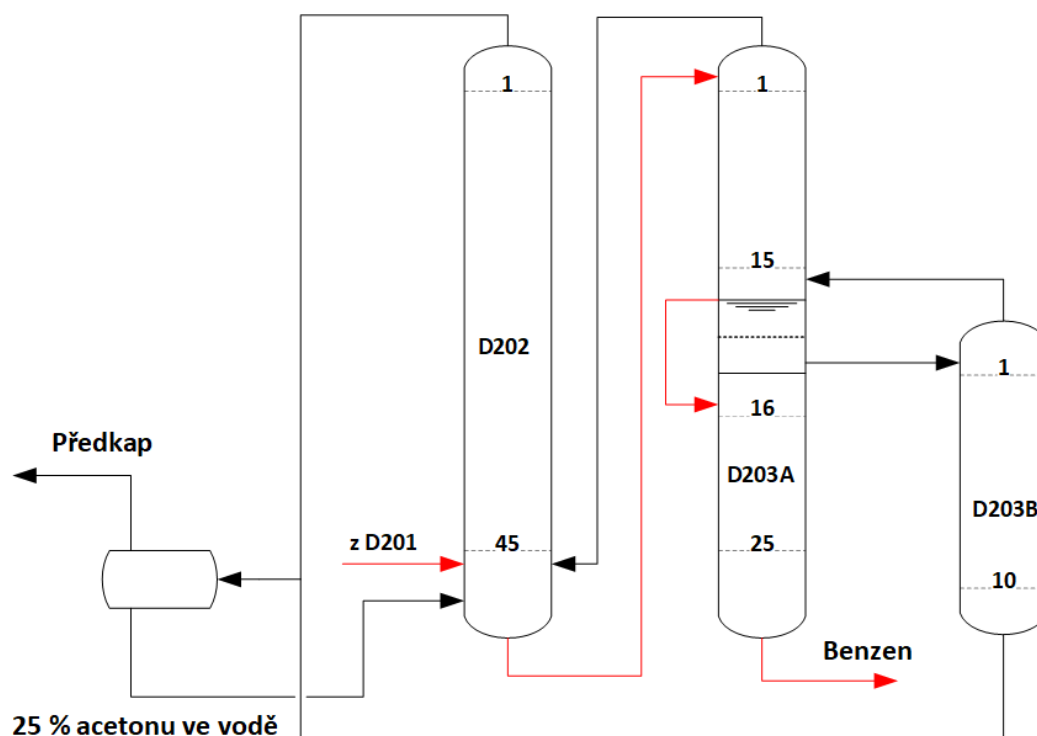
Výsledkem rekonstrukce, spočívající ve výměně distributorů a zvýšení tlaku, bylo zvýšení kapacity o 30 %. Zvýšení tlaku navíc umožnilo využít teplo kondenzujícího AN pro výrobu nízkotlaké páry, využitelné v jiných procesech závodu.

7 Experimentální ověřování simulačních modelů

Za pomoci různých experimentálních dat, lze doplnit fyzikální modely a sestavit v simulačním programu poměrně věrný obrázek zamýšlené technologie. Existují ale někdy situace, kdy je i takto sestavený model technologie vhodné experimentálně ověřit a ujistit se, že model dává reálné výsledky. Dále je uvedeno několik příkladů, kdy se model před finálním využitím pro návrh procesu experimentálně testoval.

7.1 Kolona azeotropické destilace benzenu

Benzen získaný na koloně D201 (kap 6.1) ve společnosti DEZA dále postupuje na finální čištění, které se provádí pomocí azeotropické destilace s acetonem (obrázek 27). Destilát z D201 se mísí s vodně - acetonovou směsí a takto vzniklá směs je nastříkováána do paty kolony D202. Kolona D202 měla 45 tunelových pater. Hlavou kolony odchází aceton obohacený o uhlovodíky, které s ním tvoří azeotrop. Destilát je veden do extrakce, kde se pomocí vody regeneruje aceton (vzniká tak vodně - acetonová směs). Z extrakce odpadá směs uhlovodíků označovaná jako předkap. Patový proud z D202 je veden na hlavu kolony D203A, která je rozdělena na dvě části. Horní část má 15 pater, pak je dělička fází, ze které organická fáze přepadává do spodní části kolony kde je 10 pater. Vodná fáze je vedena na hlavu kolony D203B, kde dochází ke stripování acetonu, přičemž pára z kolony D203B jsou vedeny nad děličku v D203A. Voda z D203B jde do extrakce. Z paty D203A odchází benzen jako finální produkt.



Obrázek 27 Systém azeotropického čištění benzenu.

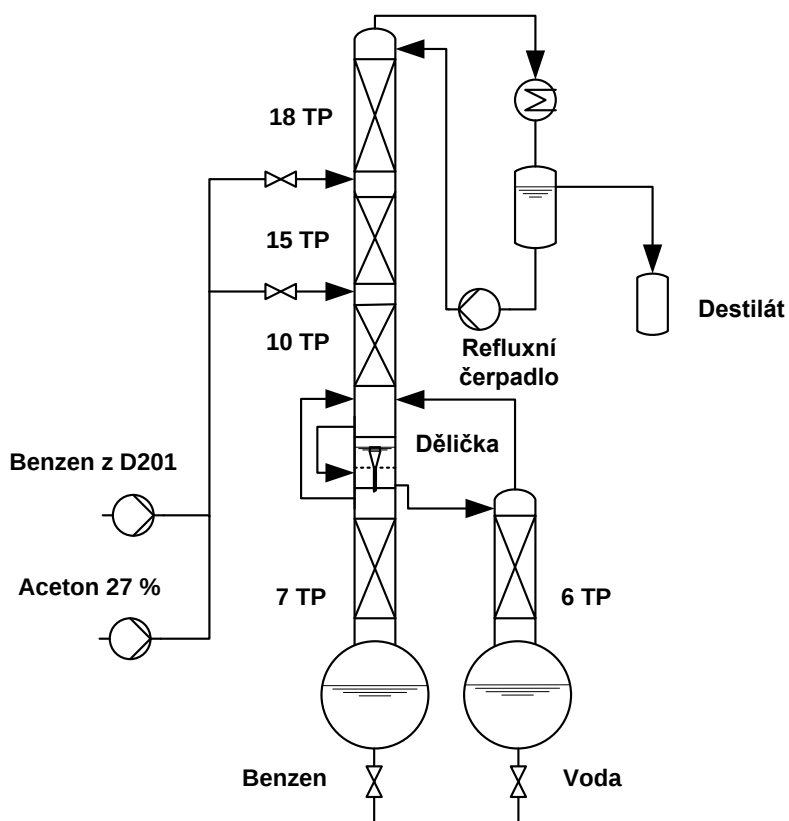
Cílem práce [17] bylo navrhnout náhradu už nevyhovujících pater kolony D202 za orientovanou výplň. To mělo umožnit snížit spotřebu energie a dále snížit obsah benzenu v předkapu, kde je ho až 14 %, který je spalován a to tvoří ztrátu benzenu.

Byla provedena simulace celého systému, i s využitím dat popsanych v kapitole 6.1, pro několik provozních stavů. Bylo zjištěno, že při předpokládané účinnosti pater 60 % simulace dobře popisuje provozní data. Dále by provedena simulace předpokládající náhradu pater kolony D202 třemi sekcemi výplně a bylo zjištěno, že by bylo vhodné oproti současnému stavu změnit nástřikové místo a to z vařáku D202 na nejspodnější sekci výplně. To již znamená značný zásah do technologie (nové trubky, čerpadla na vyšší výtlačnou výšku, atd.). Dále se objevily pochybnosti, jestli orientovaná výplň bude mít, s ohledem na třífázovou směs (kapalina – kapalina – pára) uvažovanou účinnost (i když už zde byla uvažována kvůli vodě účinnost 60 % oproti katalogu). Nakonec se vyjevila i zažitá představa pracovníků DEZA, že existují kvartérní azeotropické směsi voda – benzen – aceton – nearomáty, které znemožňují snížení obsahu benzenu v destilátu, jak předpokládal simulační model.

U vývoje nové technologie si můžeme dovolit určitou nejistotu návrhu, kterou řešíme dostatečnou rezervou a v případě problémů je možné ještě zařízení upravit. To sice nese další

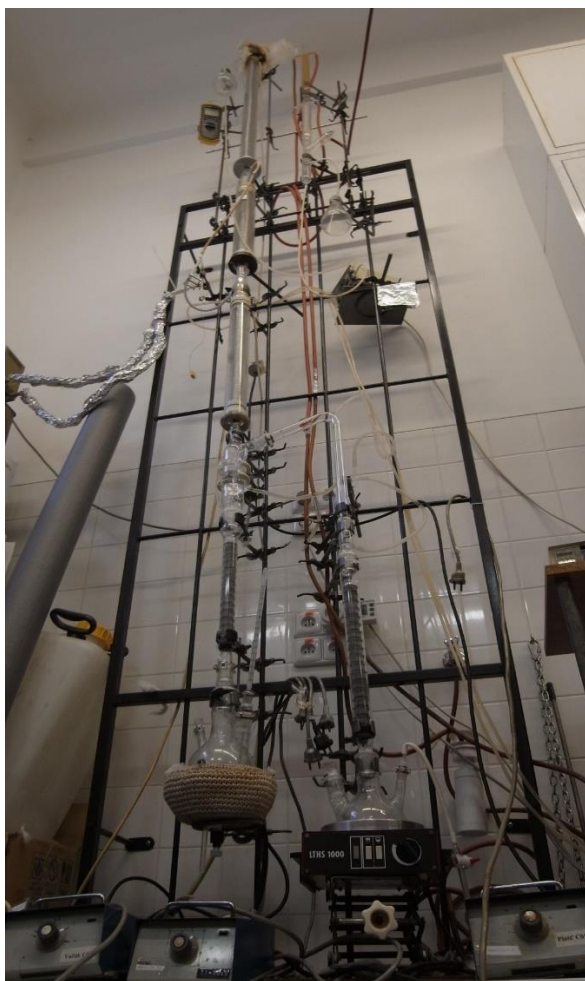
náklady a čas, ale ten obvykle není kritický, s tím že se může nájezd technologie protáhnout, se obvykle v plánu počítá. Jiná situace je u úpravy existující technologie, kde musí vše proběhnout v řádu týdnů během odstávky a následné znovu najetí musí být garantované. Jinak by hrozila ztráta už existujících zákazníků, což může být pro firmu i likvidační.

Simulace celého procesu čištění benzenu je již poměrně složitá (několik kolon, děličky, třířázové rovnováhy, atd.) a i z důvodů popsaných v odstavcích výše bylo přistoupeno k testování simulačního modelu v laboratoři. Za tímto účelem byl v laboratoři sestavena soustava kolon, která v principu odpovídá reálnému zařízení (obrázky 28 a 29). Všechny části byly opatřeny orientovanou výplní Sulzer EX.

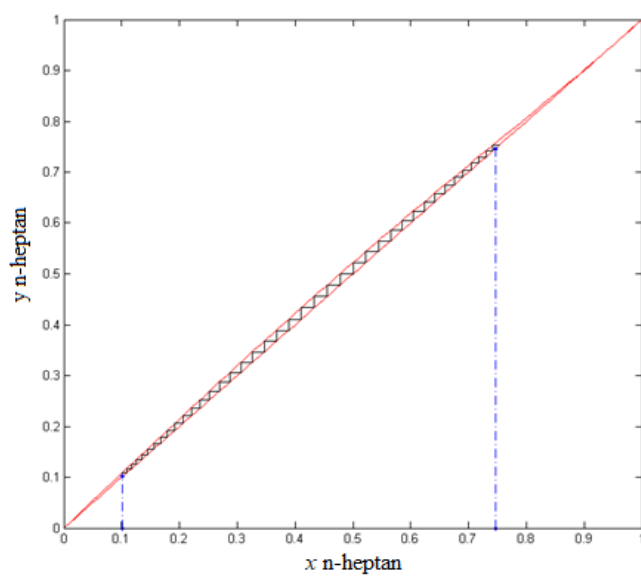


Obrázek 28 Schéma zapojení laboratorního systému

Účinnost jednotlivých částí kolon byla ověřena na dělení modelové směsi n-heptan – methylcyklohexan jejichž rovnováha kapalina – pára je v literatuře dobře popsána (obrázek 30) a běžně se k tomuto účelu používá.



Obrázek 29 Skutečná sestava laboratorních kolon (vlevo) a detailní pohled na děličku fází (vpravo)



Obrázek 30 Výpočet počtu teoretických pater v programu Matlab

Následně byl model provozován v kontinuálním uspořádání s reálným vzorkem surového benzenu z kolony D201, přičemž byla testována různá poloha nástřiku. Bylo zjištěno, že experimentálně získané výsledky velice dobře odpovídají simulaci laboratorního systému. Nebyla pozorována tvorba žádného kvartérního azeotropu a bylo zjištěno, že na účinné lze získat čistý benzen a přitom dosahovat obsahu benzenu v destilátu pod 0,1 %.

Na základě simulací byl následně proveden návrh rekonstrukce kolony D202, kam bylo místo pater vloženo 3x 5,5 m Výplně MellapakPlus 452.Y a nástřik byl změněn z paty kolony na nejspodnější výplň. Provozem se ukázalo, že lze snížit obsah benzenu v předkapu ze 14 % na 0,5 %, což znamenalo roční úsporu ve výši asi 20 mil Kč. Dalším benefitem byla možnost snížení refluxu a tím snížení nákladů na teplo.

7.2 Mokrý oxidace sulfidových louhů

Mokrý oxidace (wet oxidation) je hydro termický proces, vhodný pro oxidaci organický i anorganických látek obsažených ve vodných roztocích. Proces probíhá za zvýšené teploty a tlaku. Obecně platí, čím je vyšší teplota při reakci, tím je dosaženo vyššího stupně oxidace. Aby mohla reakce probíhat v kapalném stavu, je za potřeby zvýšeného tlaku. Pro stupeň oxidace je rovněž důležitý parciální tlak kyslíku, reakční doba a případná přítomnost katalyzátoru. Proces je využíván pro úpravu nebezpečných, nebo neobdouratelných látek z odpadních vod z chemických provozů. Upravená voda je vhodná k dočištění v biologické čistírně odpadních vod. Průmyslově je proces využíván od 50. let 20. století při využití různých typů reaktorů i aplikací samotného procesu.

V rafinérských provozech se zachyt sírovodíku z plyných proudů obvykle řeší vypírku pomocí vodného roztoku hydroxidu sodného. Sírovodík je takto převeden do roztoku jako hydrogen sulfát (NaHS), což je dáno disociačními konstantami do první a druhého stupně. Louhový roztok v závislosti na vypíraných prouděch obvykle obsahuje několik komponent Kromě NaHS a zbytkového NaOH může obsahovat určitý podíl Na_2CO_3 , merkaptanů (NaSR) a organiku ve formě vyšších uhlovodíků.

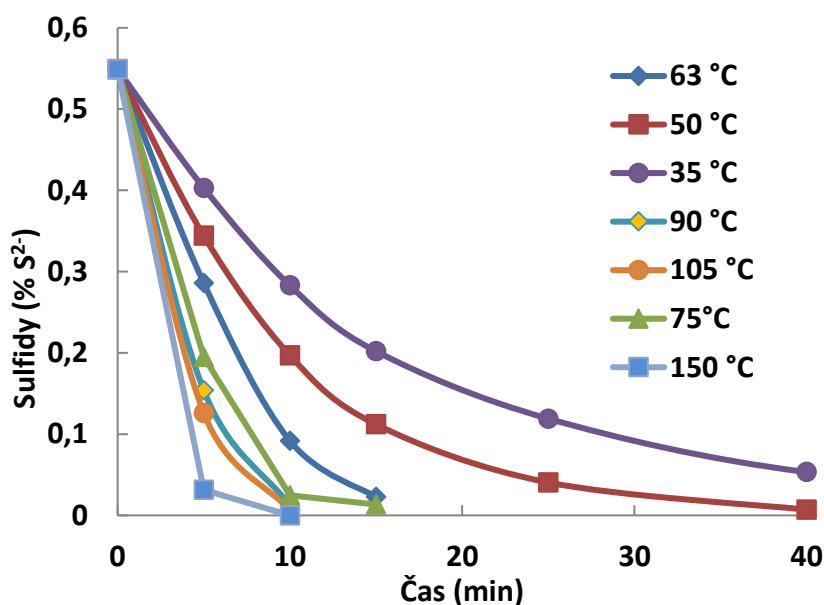
Látky obsažené v sulfidovém louhu se oxidují podle následujících rovnic:

1. $2 \text{NaHS} + 2 \text{O}_2 \gg \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{O}$
2. $\text{NaHS} + 3/2 \text{O}_2 \gg \text{NaHSO}_3$

3. $\text{NaHS} + 2 \text{O}_2 \ggg \text{NaHSO}_4$
4. $\text{NaSR} + \text{O}_2 \ggg \text{NaHSO}_4 + \text{RCOOH}$

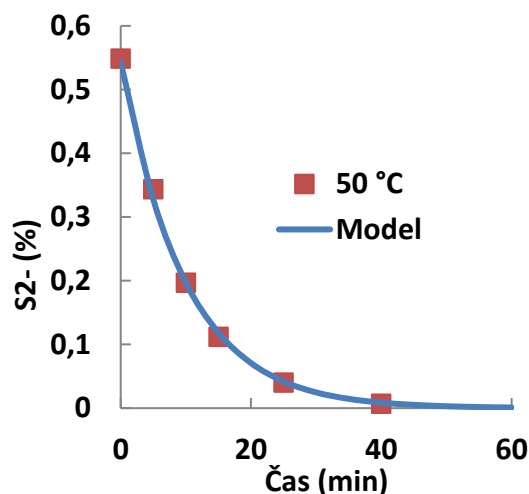
Reakce 1 a 2 probíhají dostatečně rychle za nízkých teplot (i laboratorních), reakce 3 a 4 vyžadují již vyšší teploty. Při oxidacích pod 150 °C se získává směs síranu se zbytky thiosíranu a siřičitanu. Pokud se prodlouží reakční čas do řádů hodin, zvýší se parciální tlak kyslíku a teplota, lze dosáhnout kompletní konverze na sírany. Konverze přítomné organiky již vyžaduje teploty nad 190 °C.

Sulfidové louhy z praní benzinů vznikají ve společnosti Unipetrol v množství asi 550 l/h s obsahem S^{2-} asi 50 g/l a CHSK_{Cr} 120 000 mg/l. Byl proveden experimentální vývoj procesu mokré oxidace, který v prvním kroku spočíval v měření kinetiky reakcí. Bylo zjištěno, že sulfidy se oxidují velmi ochotně (obrázek 31).



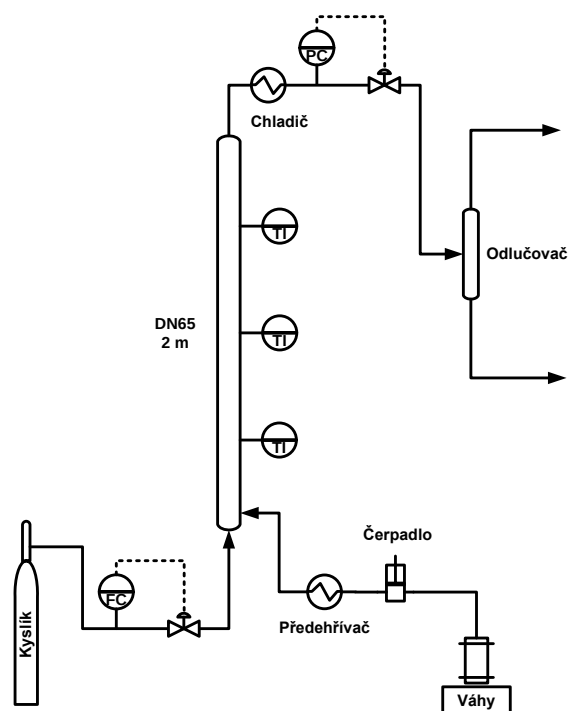
Obrázek 31 Pokles koncentrace sulfidů za různých teplot při tlaku 0,3 MPa (0,7 MPa při 150 °C)

Dále na základě získaných dat byl sestaven kinetický model a provedena regrese experimentálních dat, za účelem získání parametrů modelu. Získaný model byl implementován do simulačního programu a byla zjištěna dobrá shoda výpočtu s experimenty (obrázek 32).



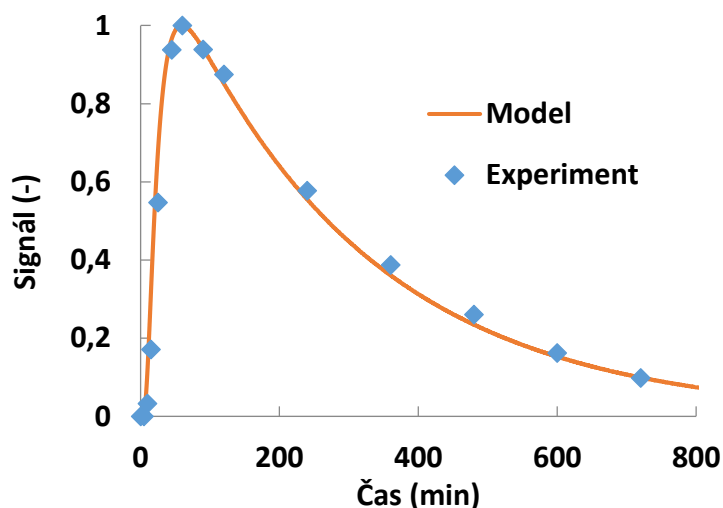
Obrázek 32 Porovnání kinetického modelu s experimentálními daty pro oxidaci sulfidů při 50 °C a tlaku 0,3 MPa

Jako vhodné řešení se jevil probublávaný věžový reaktor. Po získání kinetického modelu je sice možné provádět výpočty reaktoru, ale je zde ještě několik nejistot, které se týkají hydraulických podmínek v zamýšleném reaktoru. Reálný reaktor má určitou zádrž plynu (bublinky stoupající vzhůru) a tím i určitou zádrž kapaliny, z čehož vychází i doba jejího zdržení v reaktoru. Dále v těchto typech reaktorů je vždy v určité míře přítomno axiální promíchávání. Aby se mohl udělat alespoň přibližný odhad těchto fenoménů, bylo nutné v laboratoři postavit pilotní reaktor (obrázek 33). Na tomto reaktoru byly následně provedeny experimenty při různých nástřicích, teplotách a tlacích.



Obrázek 33 Celkové schéma pilotního reaktoru

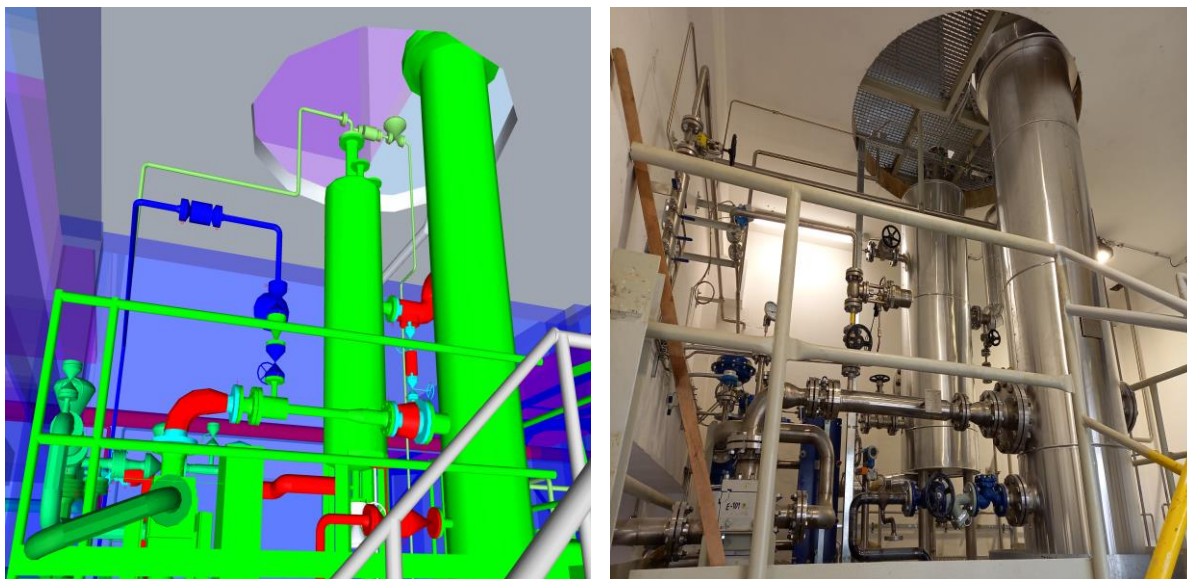
Během experimentů byla také měřena distribuce doby zdržení (RTD) v reaktoru. Měření probíhalo tak, že se do nástřiku zavedl puls (10 ml) 15% roztoku LiNO_3 . Lithiový ani dusičnanový iont nemají vliv na mokrou oxidaci a lithium slouží jako značkovací látka. Na výstupu z reaktoru byly v určitých časových intervalech odebírány vzorky a měřena metodou AAS koncentrace lithia. Pro proložení dat byl použit buňkový model (10 členů), který předpokládal zpětné promíchávání, přičemž model byl sestaven v programu ChemCAD. Výpočtem modelu bylo zjištěno, že model dobře popisuje experimentální data (obrázek 34) a zadrž kapalin v reaktoru byla při všech měřeních zhruba 80 %. Dále bylo zjištěno, že lze počítat se značným axiálním promícháváním.



Obrázek 34 Porovnání RTD s modelem pro nástřik kyslíku 1,46 Nl/min při 150 – 160 °C, tlaku 30 bar a průtoku kapaliny 0,66 l/h

Výsledky experimentů byly použity pro výpočty reaktoru, který byl simulován jako pětičlenná kaskáda CSTR se zpětnými toky a určitým poměrem parní a kapalné fáze v každém stupni. Pro zvýšení účinnosti a vyšší využití kyslíku byl vymyšlen systém s recirkulací plynu pomocí ejektoru [18]. Pro projektovou výstupní koncentraci sulfidů 1 mg/l (požadavek investora 10 mg/l), tlak 25 bar a teplotu ve spodu reaktoru 150 °C vyšla šířka reaktoru 500 mm a délka 8 m. Dále simulace ukázala, že na konci reaktoru lze očekávat teplotu asi 175 °C.

Návrh řešení úspěšně prošel tendrem ve společnosti Unipetrol a zařízení bylo postaveno (obrázek 35). Při provozu bylo zjištěno, že při teplotě 150 °C ve spodu dostupí teplota na konci reaktoru pouze na 165 °C a obsah sulfidů byl pod 0,01 mg/l. To ukazuje, že provozní reaktor byl navržen s dostatečnou rezervou a má asi nižší zpětné a tím i zkratové toky, než se předpokládalo při výpočtech [9].

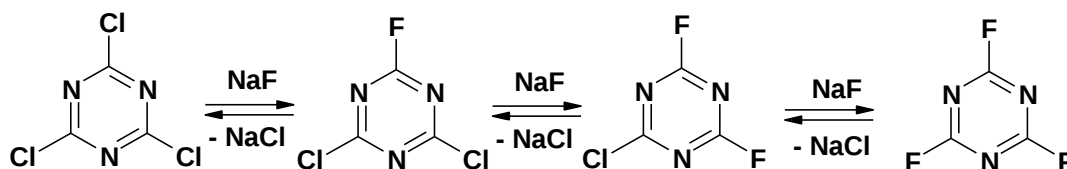


Obrázek 35 Projekční 3D model části reaktoru s ejektorem (vlevo, projekce Pento spol. s r.o.) a výsledná realizace (vpravo, fotoarchiv autora)

7.3 Výroba kyanurfluoridu

VŠCHT byly oslovena firmou Huntsman pro provedení experimentálního výzkumu a vývoje a následného designu jednotky na výrobu kyanurfluoridu (CF_3), který je meziproduktem pro výrobu velmi stabilních textilních barviv (F-dyes). Firma historicky vyráběla CF_3 ve svém závodě v Basileji reakcí HF s kyanurchloridem (CC) v plynné fázi na aktivním uhlí jako katalyzátoru. Následně bylo nutné přesunout výrobu do Asie, přičemž bylo rozhodnuto, že s ohledem na možná rizika a schopnosti personálu v místě bude vyvinuta nová technologie založená na reakci CC s NaF v sulfolanu.

CF_3 vzniká z CC soustavou reakcí, kdy se postupně nahrazují atomy chloru za atomy fluoru (rovnice 2). CC je pevná látka s bodem varu $192\text{ }^\circ\text{C}$ a i tak jsou její páry velmi dráždivé pro oči (ihned po otevření lahve). CF_3 je látka s bodem varu $74\text{ }^\circ\text{C}$ a tedy velmi těkavá, reagující okamžitě se vzdušnou vlhkostí za vzniku HF . Z toho je zřejmé že celý systém zahrnuje velmi toxické látky, čemuž odpovídal postup vývoje, i konečné řešení designu a způsob najíždění a zaškolování obsluhy.



Rovnice 2 Soustava rovnic vzniku kyanurfluoridu

Všechny experimenty byly provedeny v reaktoru o velikosti 10 ml, kde byla především měřena kinetika reakcí, vlivy poměrů látek a kvalita vstupních surovin. Následně se znalostí tenzí látek z literatury a s výsledky experimentů byly provedeny simulace procesu. S ohledem na bezpečnost byl proces koncipován jako semi kontinuální reaktivní vakuová destilace s okamžitým odtahem vznikajícího CF₃. Na konci vývoje byly firmě předány kompletní podklady pro proces.

Před realizací bylo ještě rozhodnuto, že se udělají testy ve větším měřítku (reaktor 1 L), aby se ověřilo dělení látek, které bylo zřejmé pouze na základě simulací. Firma za tímto účelem postavila model (obrázek 36), kde bylo dbáno až přehnaně na bezpečnost, přičemž autorem návrhu byl velmi schopný organický chemik, ovšem bez znalostí procesního designu. Výsledná aparatura byla velmi sofistikovaná, ale absolutně nefunkční, kde během půl roku nebyla získána žádná užitečná data. Následně bylo testování opět svěřeno VŠCHT, kde jednoduchá laboratorní aparatura umístěná v digestoři během jednoho měsíce splnila svůj účel a prokázala funkčnost simulačního modelu.

Zde je možné ukázat i příklad vysoké zodpovědnosti autorů procesního designu za výsledek v privátní sféře zmíněné již v úvodu. Výše zmíněný pracovník firmy, který tak nešťastně koncipoval testovací jednotku, byl nucen firmu opustit a ještě zaplatit pokutu.



Obrázek 36 Sofistikovaný, ale nefunkční model výroby CF3 (fotoarchiv autora)

Z důvodu bezpečnosti byla celá jednotka navržena s vysokou mírou automatizace, tak aby potřebné zásahy obsluhy byly omezeny na minimum. Celé zařízení bylo umístěno v budově v uzavřeném kontaintentu (obrázek 37). Plánovaná jednotka byla následně postavena a před jejím spuštěním byla obsluha cvičena na náhradním mediu, přičemž s ohledem na blízký bod varu s CF3 byl vybrán ethanol. Teprve po důkladném zaškolení byl zahájen reálná provoz.



Obrázek 37 Jednotka pro výrobu kyanurfluoridu, Mahachai, Thajsko (fotoarchiv autora)

Vyvinutou technologii [19] lze považovat asi v současnosti za nejlepší na světě, co se týče výtěžku, který se blíží 100 %, tak z hlediska bezpečnosti. Konkurenční firmy, které bylo následně možné navštívit, a jejich řešení vidět jsou na jiné úrovni. Indická firma Colourtex pracuje s výtěžkem 94 % a čínská firma Hubei Color Root Technology už pouze 90%, přičemž bezpečnost obou provozů byla diskutabilní.

8 Závěr

Moderní návrh chemického procesu s pomocí výpočetní techniky, která je do vývoje zapojena od samého začátku, je multidisciplinární obor, který prochází neustálým vývojem. Jak bylo ukázáno na mnoha příkladech z praxe, využití syntetického přístupu pro návrh technologií, který v sobě zahrnuje jak pohled technický, tak i ekonomický, začíná ve světě dominovat.

Podnikání v chemii, jakož i v jiných oborech lidské činnosti, je mnohdy o příležitosti být na trhu jako první, nebo být schopen rychle zaplnit mezeru, která se na trhu vytvořila. Správné využití simulačních programů pro prvotní odhad technologie, možnost plánování experimentální činnosti na základě simulací, až po finální design nových procesů podstatnou měrou zkracuje čas potřebný na dosažení výsledku, šetří nemalé peníze a dává možnost příležitosti naplno využít.

9 Shrnutí tvůrčího přínosu autora

Za posledních 20 let jsem měl možnost účastnit se, nebo přímo vést vývoj desítek nových technologií, přičemž mnohé z nich byly dotaženy až do realizace. V průběhu této doby jsem vyvinul určitý inovativní postup, jak přistoupit k výzkumu a vývoji s použitím simulačních programů. Klasický způsob vývoje nových technologií, který se široce používá, se odvíjí po lince literatura > experiment > výpočty > design procesu. Oproti zavedené praxi jsem položil základ inovativního postupu, který je založen na používání simulačních programů od prvopočátku až po finální návrh procesu.

Zažitý způsob, kdy se na základě experimentální činnosti následně provádí výpočty a design, mnohdy vede k nutnosti návratu k experimentům, pokud se zjistí, že laboratorní postup je do praxe nepřenositelný. Naopak nový postup zahrnuje nejprve simulace a design, kdy se ověří realizovatelnost a následně to umožňuje přesné zacílení experimentů pro ověření návrhu. Nová praxe umožňuje velkou úsporu času a peněz, přičemž směřuje k jistějšímu výsledku. Simulace procesu je pak neustálou součástí vývoje.

Nový směr jsem úspěšně mnohokrát využil a to především při návrhu procesu kyanurfluoridu [19], protože zde byla velmi omezená možnost provádět experimenty s ohledem na toxicitu látek. Použití simulací před prvním experimentem výrazně omezilo rozsah podmínek, které bylo nutné experimentálně prověřit.

Na světových univerzitách bývá studium obvykle rozděleno na dva směry a to chemii a inženýrství, přičemž na VŠCHT Praha takové dělení historicky není a oba směry se prolínají. Použití inovativního postupu návrhu technologií vyžaduje takové propojení obou směrů a VŠCHT Praha je tak ideálním místem pro výchovu studentů v tomto oboru, o což se již dlouhodobě snažím.

10 Literatura a projekty

- [1] Trejbal J.: Optimalizace procesu GRX, úprava technologie, 2014. Realizace: Huntsman Textile Effects, Atotonilquillo, Jalisco, Mexiko
- [2] Trejbal J.: Nová stripovací kolona, úprava technologie, 2010. Realizace: Huntsman Textile Effects, Quingdao, Čína.
- [3] Trejbal J.: Linka pro regeneraci rozpouštědel, Ověřená technologie, 2019. Realizace: Huntsman Textile Effects, Atotonilquillo, Jalisco, Mexiko
- [4] Peters M. S., Timmerhaus K. D.: Plant design and economics for chemical engineers, McGraw-Hill, Inc. 1991
- [5] Trejbal J.: Návrh nové linky pro zpracování acetonu, Ověřená technologie, 2015. Realizace: VÚAB Roztoky, ČR
- [6] Trejbal J.: Návrh poloprovozní jednotky pro katalytickou mokrou oxidaci, Ověřená technologie, 2020. Realizace: Synthomer Sokolov, ČR
- [7] Trejbal J., Pašek J., Petrisko M., Maršolek P.: Způsob výroby 1,4-diazabicyklo[2.2.2]oktanu z ethylendiaminu, CZ 300798, (2005).
- [8] Trejbal J.: Návrh linky pro solidifikaci odpadních vod. Ověřená technologie, 2011. Realizace: Huntsman Textile Effects, Atotonilquillo, Jalisco, Mexiko
- [9] Trejbal J.: Návrh nové linky pro zpracování sulfidových louhů metodou mokré oxidace, Ověřená technologie, 2021. Realizace: Unipetrol Litvínov, ČR
- [10] Trejbal J., Zapletal M.: Method of isolation of polyhydroxyalkanoates from biomass fermented by microorganisms producing polyhydroxyalkanoates and/or from biomass containing at least one crop-plant producing polyhydroxyalkanoates, WO2015185024 (A1) (2017)
- [11] Chiali-Baba-Ahmed, N.; Dergal, F.; Negadi, L.; Mokbel, I.: J. Chem. Thermodyn., 63, 44-51 (2013)
- [12] Sommer T., Zapletal M., Trejbal J., Measurements and Correlation of Liquid-Liquid Equilibria for the Ternary System Cyclohexanol + Water + Cyclohexyl Formate at 298.2-338.2 K, J. Chem. Eng. Data, 64, 3, 1195 (2019).

- [13] Sommer T., Zapletal M., Trejbal J.: Measurements and Correlation of Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for the Binary Systems of Cyclohexanol + Cyclohexyl Formate and Cyclopentanol + Cyclopentyl Formate under Various Pressures, *J. Chem. Eng. Data*, 65, 5, 2291 (2020)
- [14] Steyer, F.; Sundmacher, K.: VLE and LLE Data Set for the System Cyclohexane + Cyclohexene + Water + Cyclohexanol + Formic Acid + Formic Acid Cyclohexyl Ester. *J. Chem. Eng. Data*, 50, 1277– 1282, (2005).
- [15] Trejbal J.: Rekonstrukce benzenové kolony, Ověřená technologie, 2015. Realizace: DEZA a.s., ČR.
- [16] Trejbal J., Pospíšil R., Zapletal M.: Rovnováha kapalina-pára v systému anilin, N-methylanilin a N,N-dimethylanilin, poster, 65. zjazd chemikov Vysoké Tatry (2013).
- [17] Trejbal J., Zapletal M.: Rekonstrukce kolony azeotropického čištění benzenu, Ověřená technologie, 2017. Realizace: DEZA a.s., ČR.
- [18] Trejbal J.: Systém s recirkulací plynu pro kontinuální vedení reakcí mezi kapalinou a plynem ve věžovém reaktoru, CZ23770U1 (2018).
- [19] Trejbal J., Zapletal M.: Výroba kyanurfluoridu, Ověřená technologie, 2012. Realizace: Huntsman Textile Effects, Mahachai, Thajsko.

11 Seznam příloh

- I. Trejbal J.: Optimalizace procesu GRX, úprava technologie, 2014. Realizace: Huntsman Textile Effects, Atotonilquillo, Jalisco, Mexiko.
- II. Trejbal J.: Nová stripovací kolona, úprava technologie, 2010. Realizace: Huntsman Textile Effects, Quingdao, Čína.
- III. Trejbal J.: Linka pro regeneraci rozpouštědel, Ověřená technologie, 2019. Realizace: Huntsman Textile Effects, Atotonilquillo, Jalisco, Mexiko.
- IV. Trejbal J.: Návrh nové linky pro zpracování acetonu, Ověřená technologie, 2015. Realizace: VÚAB Roztoky, ČR.
- V. Trejbal J.: Návrh poloprovodní jednotky pro katalytickou mokrou oxidaci, Ověřená technologie, 2020. Realizace: Synthomer Sokolov, ČR
- VI. Trejbal J., Pašek J., Petrisko M., Maršolek P.: Způsob výroby 1,4-diazabicyklo[2.2.2]oktanu z ethylendiaminu, CZ 300798, (2005).
- VII. Trejbal J.: Návrh linky pro solidifikaci odpadních vod. Ověřená technologie, 2011. Realizace: Huntsman Textile Effects, Atotonilquillo, Jalisco, Mexiko.
- VIII. Trejbal J.: Návrh nové linky pro zpracování sulfidových louhů metodou mokré oxidace, Ověřená technologie, 2021. Realizace: Unipetrol Litvínov, ČR.
- IX. Trejbal J., Zapletal M.: Method of isolation of polyhydroxyalkanoates from biomass fermented by microorganisms producing polyhydroxyalkanoates and/or from biomass containing at least one crop-plant producing polyhydroxyalkanoates, WO2015185024 (A1) (2017)
- X. Sommer T., Zapletal M., Trejbal J., Measurements and Correlation of Liquid-Liquid Equilibria for the Ternary System Cyclohexanol + Water + Cyclohexyl Formate at 298.2-338.2 K, J. Chem. Eng. Data, 64, 3, 1195 (2019).
- XI. Sommer T., Zapletal M., Trejbal J.: Measurements and Correlation of Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for the Binary Systems of Cyclohexanol + Cyclohexyl Formate and Cyclopentanol + Cyclopentyl Formate under Various Pressures, J. Chem. Eng. Data, 65, 5, 2291 (2020).
- XII. Trejbal J.: Rekonstrukce benzenové kolony, Ověřená technologie, 2015. Realizace: DEZA a.s., ČR.
- XIII. Trejbal J., Zapletal M.: Rekonstrukce kolony azeotropického čištění benzenu, Ověřená technologie, 2017. Realizace: DEZA a.s., ČR.

- XIV. Trejbal J.: Systém s recirkulací plynu pro kontinuální vedení reakcí mezi kapalinou a plynem ve věžovém reaktoru, CZ23770U1 (2018).
- XV. Trejbal J., Zapletal M.: Výroba kyanurfluoridu, Ověřená technologie, 2012.
Realizace: Huntsman Textile Effects, Mahachai, Thajsko.