



Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

Teze habilitační práce

**Matematické modelování a simulace recyklačních
procesů**

Mathematical modelling and simulation of recycling processes

Autor: **Ing. Jiří Pecha, Ph.D.**

Obor: **Řízení strojů a procesů**

Zlín, prosinec 2021

© Jiří Pecha

Vydala **Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně**, v edici **Habilitation Thesis**
Publikace byla vydána v roce 2021.

Klíčová slova: *Recyklace, matematické modelování, simulace, proces, protein, tuk, odpad*

Key words: *Recycling, mathematical modelling, simulation, process, protein, fat, waste*

Práce je dostupná v Knihovně UTB ve Zlíně.

ISBN 978-80-7678-038-5

RESUMÉ

Habilitační práce je zaměřena na kvantitativní popis recyklačních procesů, které byly vyvíjeny za účelem zpracování odpadních tuků a proteinů. Zpracování odpadní vstupní suroviny je obvykle komplikováno jejím proměnlivým složením a přítomností doprovodných cizorodých látek. Zatímco uvedené překážky jsou ve většině případů technologicky řešitelné, pro praktickou aplikovatelnost procesů je nutné kromě robustnosti a flexibility zajistit také jejich ekonomickou životaschopnost. To je důvodem, proč vnitřní popis studovaných systémů – recyklačních procesů v práci představených – často zahrnuje stanovení základních ekonomických ukazatelů.

Po formální stránce je habilitační práce tvořena souborem vybraných uveřejněných vědeckých a inženýrských prací doplněných komentářem. První část práce tvoří ucelený soubor recyklačních procesů řešících rafinaci odpadních tuků a olejů až po přípravu základní oleochemikálie z rafinované suroviny. Druhá část práce je zaměřena na matematické modely procesů určených pro zpracování proteinového podílu vstupní suroviny, pozornost byla věnována také optimalizaci aplikačních podmínek výsledných produktů recyklační technologie.

Práce se zabývá deterministickými modely založenými na popisu klíčového fyzikálně-chemického mechanismu studovaného procesu, které umožnily odhadnout stav systému, simulovat a optimalizovat pracovní podmínky i bez nutnosti přesné fyzické realizace procesu. Vybrané modely byly experimentálně verifikovány a získané výsledky práce napomohly úspěšnému ověření recyklačních technologií v poloprovozním i provozním měřítku. Vyvinuté modely jsou cenné také v oblasti řízení procesů. Svou povahou představují jednak výchozí bod pro návrh řízení daného systému a zejména modely kvantifikující ekonomickou stránku procesu pak mohou tvořit vhodnou součást nadřazené řídicí vrstvy či řídicího algoritmu.

SUMMARY

Habilitation thesis is aimed at quantitative description of recycling processes which were investigated in order to facilitate processing of waste fats and proteins. Processing of waste input feedstock is usually impeded by its fluctuating composition and presence of wide variety of impurities. While said obstacles usually can be overcome by technological means, it is the economic viability which is to be fulfilled in order to achieve application of recycling processes in praxis, apart from ensuring of their flexibility and robustness in regard to unstable feedstock properties. Consequently, mathematical models of studied systems – recycling processes treated in the thesis – often include determination of basic economic parameters.

From the formal point of view, the habilitation thesis is constituted by a collection of published scientific and engineering papers supplemented by

a commentary. A set of recycling processes dealing with refining of waste fats and oils accompanied by a process for utilization of final raffinate to basic oleochemical forms first part of the thesis. Its second part is aimed at mathematical modelling of processes devoted to utilization of protein fraction of the input feedstock. Additionally, this part focused on optimization of application conditions of final products of recycling technology.

Thesis deals with development of deterministic models of studied processes based on first principles which were capable of estimation of system states, simulation of its behaviour, and optimization of processing conditions even without the necessity of exact physical realization of the process under investigation. Selected models were experimentally verified and gained results supported pilot-plant and even plant scale successful testing and scale-up of recycling technologies. Developed models are valuable also in the area of recycling processes control. They present an initial point for design of studied processes control; especially models quantifying economic parameters are to present suitable component of higher level of the control system or control algorithm.

OBSAH

1. ÚVOD.....	7
2. KOMENTÁŘ K UVEŘEJNĚNÝM VĚDECKÝM A INŽENÝRSKÝM PRACÍM.....	11
2.1 Modelování a simulace zpracování odpadních tuků a olejů	13
2.2 Modelování a simulace zpracování odpadních bílkovinných materiálů.	21
3. PŘÍNOS PRÁCE PRO VĚDU A PRAXI.....	29
4. ZÁVĚR.....	31
5. SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ.....	33
POUŽITÁ LITERATURA VYJMA VLASTNÍCH PRACÍ AUTORA	35
PŘEHLED PUBLIKAČNÍ AKTIVITY AUTORA	41
ODBORNÝ ŽIVOTOPIS AUTORA	55

1. ÚVOD

Jak je patrné z názvu, habilitační práce je zaměřena na matematické modelování a simulace recyklačních procesů. Zatímco matematické modelování a jeho využití pro následné simulace procesů a jejich optimalizaci s jistým přesahem i do oblasti řízení uvedených procesů představují soubor nástrojů, recyklace je ústřední motivací a cílem předložené práce. I v Bibli je psáno, že „na počátku bylo Slovo“ [1], zastavme se tedy na chvíli u slova „recyklace“. Je složené ze slova cyklus pocházejícího z řeckého *kýklos* nesoucího význam „kruh, kolo, oběh“ [2] a latinské předpony *re-* znamenající „znovu, opět“ [2]. Recyklovat, tj. uvést znovu do oběhu, představuje v případě odpadů vznešený cíl – ideál, který se v soudobé společnosti stal jakýmsi kánonem a ke kterému se autor předložené habilitační práce snaží svým dílem přispět.

V technické praxi by však jakékoliv ideály měly být nejprve podrobeny racionálnímu zkoumání a hodnocení, než dojde k jejich často dogmatickému uplatňování za všech okolností a bez výjimek. Recyklace odpadů naráží při praktickém uplatnění na řadu překážek, zmiňme z pohledu autora habilitační práce tyto stěžejní:

1. Ekonomika zpracovatelského procesu: zatímco zpracování odpadní suroviny zpět na výchozí látku (produkt) nebo alternativní látku (produkt) obvykle nepředstavuje neřešitelný problém, zajištění ziskovosti, a tedy ekonomické udržitelnosti, zpracovatelské technologie je až příliš často klíčovou výzvou, která rozhoduje o úspěchu zpracovatelské technologie. Výjimku představují odpady, jejichž zpracování je z důvodu jejich toxicity nevyhnutelné bez ohledu na ekonomické hledisko.

2. Složení odpadní suroviny: odpadní surovina je většinou kontaminována přítomností rozličných cizorodých a doprovodných látek, které je nutné vhodným způsobem separovat od cenných využitelných složek. Zde také vyvstává podstatná otázka, zda případná zpracovatelská technologie nebude produkovat znatelné množství dalších nežádoucích odpadů.

3. Kolísání vlastností odpadní suroviny: častá značná nestálost ve vlastnostech a složení vstupní odpadní suroviny představuje zvýšené nároky na zpracovatelskou technologii, která tak musí být dostatečně flexibilní a také robustní, což velmi úzce souvisí i se způsobem řízení jednotlivých zpracovatelských procesů v průmyslovém měřítku.

4. Dostupnost suroviny: pro racionální a ekonomické zpracování odpadů je obvykle nutné mít k dispozici jejich dostatečný a relativně stabilní zdroj. S uvedeným úzce souvisí problematika dopravy odpadů na vytipovanou zpracovatelskou lokalitu.

Recyklační procesy diskutované v habilitační práci jsou zaměřeny na zpracování dvou cenných složek přírodního původu – bílkovin a tuků. Zde se

k výše uvedeným překážkám přidává ještě komplikace v podobě obvykle snadného a rychlého biologického rozkladu vstupní odpadní suroviny, který s sebou nese znehodnocení cenné složky, kvůli níž je recyklace odpadní suroviny prováděna. Uvedené zaměření práce vyplývá z historie výzkumného týmu vedeného prof. Karlem Kolomazníkem, jehož je autor členem. Původní motivací byla racionalizace procesů koželužského průmyslu skrz jejich kvantitativní popis a návrh řešení odpadů produkovaných tímto průmyslem, později se okruh rozšířil, jak je ostatně patrné z přehledu vybraných projektů, jak grantových, tak i projektů smluvního výzkumu pro jednotlivé průmyslové partnery (viz oddíl O v kapitole „Přehled publikační aktivita autora“).

Po formální stránce je předložená habilitační práce tvořena souborem vybraných uveřejněných vědeckých a inženýrských prací doplněných komentářem.

Předmětem práce je pak vnitřní popis studovaných systémů – tj. recyklačních procesů vč. zohlednění případného výrobního zařízení, v němž je proces realizován. Jelikož ambicí bylo vyvíjené procesy nejen simulovat, ale prakticky realizovat, představené modely obvykle vycházejí z experimentálních pozorování a v řadě případů je součástí práce experimentální verifikace navržených matematických modelů. Provedení experimentů, zpracování a vyhodnocení dat je v tomto přístupu nedílným prvkem matematického modelování a tedy habilitační práce. Samotné modely pak byly často zaměřeny na odhad provozních nákladů, lze je tedy využít i pro simulaci ekonomických ukazatelů recyklačních procesů za různých provozních podmínek a zejména pro jejich ekonomickou optimalizaci, což je z praktického pohledu klíčovým úkolem.

Představené matematické modely studovaných systémů obvykle vycházejí z principu modelování *ab initio* [3], v anglosaské literatuře jsou označovány také jako modely založené na principu „bílá skříňka“ (white-box) [4–7], jehož opakem je v teorii řízení obvyklejší přístup založený na principu „černá skříňka“ (black-box) [5–8]. Základním prvkem modelů jsou zákony zachování doplněné o příslušné fyzikálně-chemické vztahy. Jelikož je obvykle velmi obtížné, až nemožné, předpovědět dynamiku reálných chemických systémů pouze na základě teoretických výpočtů [9, 10, 48], bylo nutné do modelů začlenit parametry, které jsou určeny na základě experimentálních měření – například se jednalo o rychlostní konstanty, zdánlivé aktivační energie apod. Tento přístup byl rovněž volen s ohledem na zmíněnou zamýšlenou aplikaci modelů v praxi – odvození zdánlivě velmi přesných a složitých modelů je mnohdy kontraproduktivní, neboť tyto modely obsahují řadu parametrů (nehledě na otázku nalezení řešení samotných modelů), které jsou často jen s obtížemi teoreticky i experimentálně identifikovatelné. Příliš mnoho stupňů volnosti totiž nutně neznamená, že model bude lepší či přesnější, jak ostatně dokládají i výsledky habilitační práce. Slovy citátu připsaného Enricem Fermim matematikovi Johnu von Neumannovi [11]: „Se čtyřmi parametry dokážu proložit slona a s pěti ho přinutím kývat chobotem“.

Jinými slovy, na určité úrovni rozlišení modelu je na probíhající děje dané úrovně pohlíženo jako na černou skříňku. Při rozhodnutí, jak moc „hluboko“, a tedy podrobně, má být model rozpracován bylo voleno praktické hledisko, tj. účel a cíl modelování v daném případě. Výsledné modely tak představují formu označovanou jako „šedá skříňka“ (grey-box) [5, 7], jakýsi mezistupeň kombinující oba hraniční, a do jisté míry extrémní, přístupy spočívající v uplatnění přístupu výhradně „bílé“ nebo „černé skříňky“. Struktura modelů byla ve většině případů určena ze známých zákonů zachování hmoty a energie, jednotlivé parametry pak byly identifikovány na základě experimentů. Pro úplnost dodejme, že práce je zaměřena na deterministické modely systémů.

Výhodou popsaného přístupu je možnost simulovat studované procesy bez nutnosti jejich přesné fyzické realizace [12, 13, 48], ve vybraných případech (založených zejména na přístupu „bílé skříňky“) je rovněž možno s jistou obezřetností provádět extrapolaci chování systému mimo oblast jeho experimentální identifikace [13, 14]. V tomto smyslu uveďme, že zejména u procesů chemického průmyslu je jejich škálování náročné a výsledky – hodnoty výstupních veličin – získané např. na zmenšené kopii výrobního zařízení mohou být významně odlišné než u zařízení provozní velikosti [15], nehledě na náklady i bezpečnostní aspekty experimentální práce v provozním měřítku [13, 16].

Kromě diskutovaného hlediska lze vyvinuté modely využít také v oblasti řízení recyklačních procesů. Svou povahou představují jednak výchozí bod pro návrh řízení, kdy standardními úpravami (linearizací modelů, jejich převedením do odchylkového tvaru apod.) lze získat obvyklý tvar stavového popisu řízeného systému [8]. Ve většině případů v práci diskutovaných nebyl ve fázi návrhu a vývoje recyklačního procesu k dispozici provozní aparát, a proto bylo výhodné, že díky deterministické povaze lze pomocí modelu proces škálovat do provozního měřítku a simulačními výpočty dle navržených modelů odhadnout chování reálného provozního systému už ve fázi jeho návrhu. Modely kvantifikující ekonomickou stránku recyklačních procesů pak mohou představovat vhodnou součást nadřazené řídicí vrstvy či řídicího algoritmu a určovat optimální zpracovatelské podmínky [16], za nichž je i při kolísání jakosti a složení vstupní odpadní suroviny a kolísání cen energií či pomocných látek zpracovatelská technologie provozována v oblasti ekonomického optima. V neposlední řadě uveďme, že i modely založené především na přístupu „bílé skříňky“ byly úspěšně testovány [4, 16, 17, 48] a využity jako součást řízení reálných procesů [16, 18].

2. KOMENTÁŘ K UVEŘEJNĚNÝM VĚDECKÝM A INŽENÝRSKÝM PRACÍM

Vybrané uveřejněné publikace tvořící podstatu habilitační práce jsou členěny do dvou samostatných celků – práce zabývající se zpracováním odpadních tuků a olejů (Příloha I až V) a práce zaměřené na zpracování odpadních bílkovin (Příloha VI až X) – a to s ohledem na logickou návaznost studovaných systémů. Jedná se o publikace, k nimž autor habilitační práce přispěl významným podílem a je jejich prvním či druhým autorem. Celkový příspěvek autora je vyjádřen mentálním podílem (% MP) a především podrobněji shrnut pomocí v dnešní době standardního formátu rolí autorů – CRediT (Contributor Roles Taxonomy) [51].

Habilitační práci konkrétně tvoří následující zveřejněné publikace, které tvoří přílohy plné verze habilitační práce:

- I [C1] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA (30 % MP), Jiří, BAŘINOVÁ, Michaela, ŠÁNEK, Lubomír. Economic aspects of biodiesel production from tannery waste fats. *Journal of the American Leather Chemists Association*, 2010, roč. 105, č. 10, s. 327-333. ISSN 0002-9726. (2010: IF 0,54; Q3)

Příspěvek autora habilitační práce: Provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, vizualizace, sepsání výchozího manuskriptu

- II [C2] PECHA (30 % MP), Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, BAŘINOVÁ, Michaela, ŠÁNEK, Lubomír. HIGH QUALITY BIODIESEL AND GLYCERIN FROM FLESHINGS. *Journal of the American Leather Chemists Association*, 2012, roč. 107, č. 10, s. 312-322. ISSN 0002-9726. (2012: IF 0,64; Q3)

Příspěvek autora habilitační práce: Provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, validace, supervize, vizualizace, sepsání výchozího manuskriptu

- III [C8] ŠÁNEK, Lubomír, PECHA (35 % MP), Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, BAŘINOVÁ, Michaela. Biodiesel production from tannery fleshings: Feedstock pretreatment and process modeling. *Fuel*, 2015, roč. 148, s. 16-24. ISSN 0016-2361. (2015: IF 3,61; Q1)

Příspěvek autora habilitační práce: Provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, validace, vizualizace, psaní manuskriptu – revize a editace

- IV [C7] ŠÁNEK, Lubomír, PECHA (45 % MP), Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Simultaneous determination of main reaction components in the reaction mixture during biodiesel production. *Journal of Separation Science*, 2013, roč. 36, č. 6, s. 1029-1036. ISSN 1615-9306. (2013: IF 2,59; Q2)

Příspěvek autora habilitační práce: Koncept výzkumu, formální analýza dat, metodika, supervize, vizualizace, sepsání výchozího manuskriptu

- V [C9] PECHA (50 % MP), Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, FÜRST, Tomáš, KOLOMAZNÍK, Karel. A kinetics study of the simultaneous methanolysis and hydrolysis of triglycerides. *Chemical Engineering Journal*, 2016, roč. 288, s. 680-688. ISSN 1385-8947. (2016: IF 6,22; D1)

Příspěvek autora habilitační práce: Koncept výzkumu, provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, software, validace, vizualizace, sepsání výchozího manuskriptu

- VI [D3] BAŘINOVÁ, Michaela, PECHA (40 % MP), Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Mathematical model of protein sorption and evaluation of its validity in deproteination of chrome-tanned wastes. *International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2014, roč. 8, č. 1, s. 281-290. ISSN 1998-0140. (2014: SJR 0,13; Q3)

Příspěvek autora habilitační práce: Provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, vizualizace, supervize, psaní manuskriptu – revize a editace

- VII [C4] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA (40 % MP), Jiří, FRIEBROVÁ, Veronika, JANÁČOVÁ, Dagmar, VAŠEK, Vladimír. Diffusion of biostimulators into plant tissues. *Heat and Mass Transfer: Waerme- und Stoffuebertragung*, 2012, roč. 48, č. 9, s. 1505-1512. ISSN 0947-7411. (2012: IF 0,84; Q3)

Příspěvek autora habilitační práce: Provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, software, vizualizace, sepsání výchozího manuskriptu

- VIII [C3] PECHA (50 % MP), Jiří, FÜRST, Tomáš, KOLOMAZNÍK, Karel, FRIEBROVÁ, Veronika, SVOBODA, Petr. Protein biostimulant foliar uptake modeling: The impact of climatic conditions. *AIChE Journal*, 2012, roč. 58, č. 7, s. 2010-2019. ISSN 0001-1541. (2012: IF 2,49; Q1)

Příspěvek autora habilitační práce: Provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, supervize, validace, vizualizace, sepsání výchozího manuskriptu

- IX [D4] PECHA (40 % MP), Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, JELÍNEK, Miloš, HUSÁR, Jakub, KOLOMAZNÍK, Karel. Mathematical Modelling of a Process-Economic of Protein Hydrolyzate Production from Lupine Flour. *WSEAS Transactions on Applied and Theoretical Mechanics*, 2019, roč. 14, s. 164-172. ISSN 1991-8747. (2019: SJR 0,15; Q4)

Příspěvek autora habilitační práce: Koncept výzkumu, provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, supervize, software, validace, vizualizace, psaní manuskriptu – revize a editace

- X [H7] PECHA (50 % MP), Jiří, HUSÁR, Jakub, MILOŠ, Jelínek, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Optimization of lupine hydrolyzate separation. In *MATEC Web of Conferences*. Les Ulis: EDP Sciences, 2019, ISSN 2261-236X.

Příspěvek autora habilitační práce: Koncept výzkumu, provedení výzkumu, formální analýza dat, metodika, supervize, software, vizualizace, psaní manuskriptu – revize a editace

2.1 Modelování a simulace zpracování odpadních tuků a olejů

Jak bylo řečeno výše, zpracování odpadních surovin se ve většině případů v praxi potýká s několika základními problémy, z nichž dva následující bývají obzvláště palčivé – proměnlivé složení vstupní odpadní suroviny a ziskovost, resp. ekonomická životaschopnost zpracovatelské technologie. Druhá otázka – ekonomické parametry recyklační technologie – navíc většinou velmi úzce souvisí také s proměnlivým složením vstupní odpadní suroviny. Pro racionální rozhodnutí o příjmu či nákupu vstupní odpadní suroviny a jejímu následnému zpracování je potřeba uvedenou otázku kvantifikovat a vyhodnotit na kvantitativní úrovni. Kvantitativní vztahy jsou pak cenné jak v oblasti rozhodování, kdy mohou být včleněny do vyšší úrovně řídicího algoritmu, tak

i v oblasti ekonomické optimalizace zpracovatelské technologie, kterou je rovněž vhodné zohlednit v systému řízení výrobního procesu.

Diskutovanou otázkou se zabývá práce [C1], její plný text viz Příloha I. Z hlediska zpracování odpadních tuků a olejů připadá v úvahu výroba několika energetických produktů – tepelné energie přímým spalováním, plynného paliva – bioplynu – anaerobním rozkladem odpadní suroviny či příprava methyl esterů vyšších mastných kyselin (MEMK), které mohou sloužit jednak jako palivo do vznětových motorů či jako prekurzor řady látek produkovaných oleochemickým průmyslem [19]. Rozbor v práci [C1] ukazuje, že materiálové využití odpadních tuků a olejů (MEMK) skýtá největší ekonomický potenciál a je proto blíže rozpracováno. Dodejme, že zpracování odpadních tuků na MEMK je zvláště racionální v porovnání s do jisté míry kontroverzním standardním postupem, kdy jsou MEMK vyráběny z jedlých tuků a olejů [20]. Tato otázka je zvláště palčivá, pokud jsou MEMK využity jako palivo do vznětových motorů.

Pro přípravu MEMK je nutno odpadní tuky rafinovat – odstranit pevné nečistoty, vodu a především volné mastné kyseliny, aby bylo možno z rafinovaného tuku připravit MEMK konvenční technologií založenou na bazicky katalyzované reesterifikační reakci. Jak lze očekávat, tržní cena vstupní odpadní suroviny závisí na její jakosti, se zvyšující se jakostí se zvyšuje i cena vstupní suroviny. Tato závislost je nelineární, viz obrázek 2 v publikaci [C1]. Nižší cena i jakost odpadních tuků a olejů je pochopitelně vykoupena vyššími náklady na jejich rafinaci. V citované práci byl jako klíčový ukazatel jakosti zvolen obsah volných mastných kyselin (VMK), náklady na rafinaci jsou pak určeny především aktuální cenou a spotřebou látky navržené jako přímé esterifikační činidlo VMK – tetramethylammonium hydroxidu (TMAH), jejímž působením lze nežádoucí VMK převést na výsledný produkt, MEMK. Jelikož závislost tržních cen tuku na jeho jakosti lze kvantifikovat vhodnou funkcí a závislost spotřeby činidla TMAH vyplývá z chemismu reakce, lze sestavit matematický model, který postihuje dvě dominantní složky výrobních nákladů MEMK z odpadních tuků a olejů – cenu vstupní suroviny a cenu rafinace v závislosti na aktuální jakosti vstupní suroviny. Při známých aktuálních cenách MEMK na trhu pak lze snadno odhadnout provozní zisk a určit optimální jakost vstupní odpadní suroviny, jak dokládají výsledky simulačních výpočtů prezentovaných v práci [C1].

Minimální požadavek smysluplnosti zpracování odpadních tuků a olejů pak vyplývá z jednoduché úvahy – součet nákladů na vstupní odpadní surovinu a nákladů na její rafinaci musí být nižší, než je aktuální cena čistých rostlinných olejů. Navržený ekonomický model umožňuje tuto relaci stanovit a s jeho pomocí tak lze racionálně rozhodnout, zda je přínosné zpracovat odpadní surovinu o specifickém složení za aktuální situace na trhu.

Zpracování odpadních tuků a olejů je však ovlivněno nejen ekonomickými, ale i technologickými parametry. Se vzrůstajícím podílem tuků, které obsahují méně nenasycených vazeb, roste i bod zákalu a související teplota tuhnutí MEMK.

Pokud mají být výsledné MEMK použity jako palivo do vznětových motorů, je nutné zajistit, aby bod zákalu nepřekročil limitní hodnotu, která je dána místními legislativními předpisy, které jsou v Evropské unii navázány na normu kvality [21]. Jednou z racionálních cest snížení bodu zákalu je zvýšení obsahu nenasycených vazeb, ideálně smísením vhodného odpadního rostlinného oleje, který má vyšší obsah nenasycených vazeb, s odpadním tukem. Jak dokládají simulační výpočty v práci [C1] (obrázek 8), lze volbou jakosti rostlinného oleje při technologicky určeném poměru odpadního oleje k odpadnímu tuku optimalizovat hlavní provozní náklady rafinační technologie, které v tomto případě představují kompromis mezi nízkoteplotními vlastnostmi MEMK a ekonomikou výrobního procesu.

Jak bylo podotknuto výše, ziskovost či ztrátovost výroby MEMK z odpadních tuků a olejů je odvislá od rafinační technologie, jejíž aplikace je v drtivé většině praktických případů nutná pro zajištění potřebné jakosti výstupního rafinovaného tuku pro následnou reesterifikační reakci. Rozsah a způsob rafinace přitom pochopitelně závisí na specifickém složení odpadního tuku. Při vývoji recyklačních procesů odpadních tuků a olejů autor často pracoval s tzv. mázdrou, což je odpadní tuk produkovaný koželužským průmyslem. Z pohledu přípravy MEMK se jedná o zvláště obtížnou surovinu, neboť obsahuje značné množství vody, podkožního vaziva (tj. bílkovinného materiálu) a také konzervačních látek, zejména chloridu sodného. Ještě náročnější surovinu pak představuje obdobný odpad koželužského průmyslu – vápněná mázdra – té se však v následující diskuzi věnovat nebudeme. Kromě toho, že je mázdra díky přítomnosti podkožního vaziva obtížně zpracovatelná, lze přítomnost bílkoviny chápat také jako určitou výhodu, pokud je rafinační a zpracovatelská technologie schopna zpracovat i tuto frakci odpadní suroviny vedle frakce tukové. Výzkum byl soustředěn na řešení uvedeného úkolu, na jeho základě byl navržen unikátní postup odstranění bílkovinného podílu ze vstupní odpadní suroviny. Tento postup získal průmyslově-právní ochranu, nejprve ve formě českého [J1] a následně i evropského [J3] patentu. Byť je možno bílkovinný podíl úspěšně odstranit, jeho využitelnost je omezena díky přítomnosti konzervační látky – chloridu sodného.

Za účelem zvýšení jakosti bílkovinného podílu mázdry, a tím ekonomické životaschopnosti recyklačního procesu, se autor zabýval odstraněním chloridu sodného před samotnou separací bílkovinného podílu. Jelikož chlorid sodný je rozpustný ve vodě a samotná mázdra jen velmi omezeně, bylo testováno vypírání (extrakce) konzervačního prostředku do studené vody jakožto specifický proces rafinace koželužské mázdry. Komplexní výsledky zpracování mázdry na MEMK a jakostní bílkovinný podíl shrnuje publikace [C2], jejíž plný text tvoří Přílohu II habilitační práce. Publikace se zaměřuje právě na proces vypírání konzervačního prostředku, jeho kvantitativní popis, simulaci a optimalizaci a dopad aplikace odstranění konzervačního prostředku na jakost výstupních produktů.

Podstatou extrakce chloridu sodného do prací lázně je difuze koncentrovaného roztoku chloridu sodného z pórů částic mázdry do okolního prostředí míchané prací lázně o nižší koncentraci chloridu sodného. Proces je ukončen v okamžiku dosažení rovnováhy, tedy shodné koncentrace chloridu sodného v pórech částic mázdry a prací lázně. Zatímco rovnovážné složení je relativně jednoduché vypočítat, z praktického hlediska je rozhodující také rychlost (kinetika) celého procesu, neboť ta určuje jak měrný výkon výrobního pracího zařízení – a tím nutné investiční náklady – tak se významnou měrou podílí na provozních nákladech procesu. Jelikož rychlost difuze je malá a částice mázdry mají rozměr v řádu jednotek až desítek milimetrů, v částicích mázdry se v průběhu vypírání tvoří nestacionární koncentrační pole. Matematický model vypírání konzervačního prostředku popsáný v práci [C2] díky tomu představuje vnitřní popis systému s rozloženými parametry a je tedy reprezentován parciální diferenciální rovnicí. Model zahrnuje diskutovanou porozitu systému, za účelem zjednodušení popisu byl učiněn předpoklad ideálního míchání prací lázně a tedy absence jakýchkoli koncentračních polí v kapalně prací lázni a dále byly částice mázdry aproximovány sférickou geometrií s jedinou střední hodnotou poloměru idealizované sférické částice mázdry. S využitím Laplaceovy transformace bylo vypočítáno analytické řešení modelu, které dále bylo využito v ekonomické optimalizaci procesu. Simulační výpočty dokládají existenci minima provozních nákladů, které je za daných podmínek (např. aktuálních cen vstupních surovin a energií, hodnoty efektivního difuzního koeficientu či porozity částic mázdry) závislé na požadované účinnosti odstranění konzervačního prostředku a spotřebě prací kapaliny. Matematický model tak umožňuje nejen provést simulační výpočty rafinačního procesu, ale s jeho pomocí je možno proces řídit – stanovit optimální provozní podmínky v závislosti na požadované účinnosti procesu. Výsledky práce [C2] zároveň dokládají, že úspěšným odstraněním konzervačního prostředku studovaným procesem se podstatně zvyšuje jakost získané bílkovinné frakce vstupní odpadní suroviny a tím její praktická využitelnost.

Dílní výsledky výzkumu odstranění konzervačního prostředku včetně diskuze kvantitativního popisu tohoto procesu byly dále publikovány a shrnuty v pracích [B1, D2 a H5].

Rafinačními procesy odpadních tuků a olejů se zabývá také navazující publikace [C8], která tvoří Přílohu III habilitační práce. V tomto případě byl výzkum zaměřen na odstranění volných mastných kyselin (VMK) na úroveň, která umožňuje využití standardní technologie – bazicky katalyzované reesterifikace – pro přípravu MEMK. Uvedený přístup je přínosný i s ohledem na praktickou stránku zpracování odpadních tuků a olejů. Pokud lze odpadní tuk/olej rafinovat do jakosti potřebné pro standardní přípravu MEMK za cenu nižší, než je cena čistého rostlinného oleje, může producent odpadních tuků a olejů takto rafinovaný tuk či olej prodávat výrobcí MEMK a pro zpracování odpadní suroviny dostupné např. v relativně menším objemu není nutno budovat

investičně náročnou část zpracovatelské technologie, jejímž účelem je právě příprava MEMK z rafinovaného tuku.

Zatímco úvodní a výše diskutovaná práce [C1] (Příloha I) se soustředí na ekonomickou stránku věci, práce [C8] popisuje naopak technologické aspekty odstranění VMK ve smyslu návrhu kvantitativního popisu použitého rafinačního procesu, jeho verifikace a srovnání několika variant rafinace pomocí simulačních výpočtů založených na experimentálně získaných parametrech navrženého stavového popisu procesu. Pro rafinaci tuku byl vyvinut unikátní postup spočívající v neutralizaci VMK, při které z VMK vznikají mýdla, tento krok je následovaný selektivní extrakcí mýdel do nevodného rozpouštědla – methanolu. Popsaná podstata rafinačního procesu je chráněna patentem [J4].

Zatímco v předchozím případě odstranění konzervačního prostředku – chloridu sodného – matematický model uvažoval pouze jedinou složku – samotný konzervační prostředek, nyní bylo nutné uvažovat vícesložkovou extrakci a vypočítat distribuci jednotlivých složek extrakčního procesu mezi vzájemně omezeně mísitelnými fázemi – polární methanolovou a nepolární tukovou fází. V případě, kdy je míra odstranění VMK nízká z technologického pohledu, je extrakce opakována. Soubor nutných vstupních dat představují tzv. rozdělovací koeficienty – ty určují podíl rovnovážných koncentrací dané složky (tuku, methanolu, VMK, mýdel aj.) ve fázi methanolové k jejich rovnovážným koncentracím ve fázi tukové. Koeficienty jsou stanoveny experimentálně a dané množství tuku k rafinaci se specifickým obsahem VMK lze extrahovat prakticky libovolným množstvím methanolu. Jelikož všechny složky jsou přítomny v obou fázích, nelze přímo a jednoduše vypočítat složení systému a hmotnost obou fází po ukončení extrakce. Tyto klíčové údaje jsou totiž v látkové bilanci tvořící podstatu matematického modelu přítomny pouze implicitně. Přesněji řečeno, matematický model představuje soustavu algebraických rovnic. Za účelem nalezení řešení soustavy rovnic popisující vícesložkovou extrakci byl zvolen iterační postup, jak je popsáno v diskutované práci [C8] – model byl nejprve upraven do tvaru, kdy je neznámým hledaným parametrem výstupní poměr hmotností tukové a methanolové fáze. Ten je nejprve zvolen, na základě jeho volby je pak vypočítán z bilančních vztahů a je zjištěn rozdíl mezi hmotnostním poměrem fází zvoleným a vypočteným. Následně se v jednotlivých krocích iteračního algoritmu rozdíl snižuje, až do dosažení požadované přesnosti výpočtu. Lze ukázat, že hledané řešení je v technologicky přijatelném rozsahu hmotnostních poměrů obou fází jednoznačné. Pro praktickou realizaci simulačních výpočtů byl naprogramován software [L6] ve výpočetním prostředí Matlab®. Pro úplnost dodejme, že jako optimalizační algoritmus pro nalezení řešení modelu rafinačního procesu byla zvolena metoda půlení intervalu. Model umožňuje vypočítat klíčové technologické parametry procesu – účinnost odstranění VMK a ztráty tuku. Před použitím modelu pro simulaci a řízení rafinační operace v laboratorním a poloprovozním měřítku byla provedena jeho verifikace, výsledek je patrný z obrázku 1 diskutované publikace [C8].

Matematický model adekvátně popisuje složení fází a to i za rozdílných počátečních podmínek daných odlišným počátečním složením studovaného systému (odlišné neutralizační prostředky, jiné poměry extrakčního činidla vůči vstupní odpadní surovině, rozdílné koncentrace VMK). Odchylky byly dány především rozptylem experimentálně zjištěných hodnot rozdělovacích koeficientů. Verifikovaný model byl dále použit pro simulační výpočty srovnávající účinnost a ztráty extrakčního rafinačního procesu pro jednotlivá neutralizační činidla a pro v praxi známou variantu extrakce bez použití neutralizačních činidel. Výsledky prokázaly, že navržený patentovaný postup je podstatně účinnější než běžný způsob odstranění VMK extrakcí čistým rozpouštědlem.

Navržený a ověřený model rafinace tuku umožňuje optimalizovat studovaný proces, s jeho pomocí lze tedy určit optimální technologické podmínky (poměr extrakčního činidla vůči vstupní odpadní surovině, počet cyklů extrakce) pro dosažení požadované míry odstranění VMK. Jeho aplikace je zvláště výhodná pro odpadní surovinu, jejíž složení (obsah vody a VMK) často značně kolísá a navržený model implementovaný v nadřazené řídicí vrstvě recyklačního procesu (řídicím algoritmu) je schopen pro každou specifickou dodávku odpadní suroviny určit vhodné technologické podmínky při známém složení vstupní odpadní suroviny zadané operátorem např. na základě laboratorního rozboru jejího složení. Takto byl manuálním způsobem (simulační výpočty řízené operátorem) představený model implementovaný v softwaru [L6] využíván pro odhad optimálních podmínek a simulaci rafinačního procesu před jeho fyzickou realizací při vývoji a testování ověřené technologie přípravy MEMK z odpadních tuků a olejů [K1].

Následující publikace [C7], tvořící Přílohu IV habilitační práce není přímo zaměřena na matematické modelování a simulaci některého z recyklačních procesů zpracování odpadních tuků a olejů, ale velmi úzce s touto tematikou souvisí. Tato práce popisuje vývoj analytické metody pro stanovení složení reakční směsi při reesterifikaci tuků a olejů a její podrobnou a obsáhlou validaci. V práci jsou dále diskutovány lineární rozsahy měření jednotlivých složek reakčního systému a prezentována spolehlivost stanovení na odlišných koncentračních úrovních jednotlivých kvantifikovaných složek studovaného systému. Je přitom zřejmé, že vnitřní popis systému, zejména pokud se jedná o chemickou reakci, lze jen velmi obtížně a s omezenou přesností založit na teoretických údajích. V řadě případů sice lze poměrně spolehlivě vypočítat rovnovážné složení, tj. stav systému na konci reakce (viz např. [22]), avšak v drtivé většině praktických případů je nutné dynamiku systému, tj. kinetiku chemické reakce, studovat experimentálně [9, 10, 48]. Rovněž pro smysluplnou verifikaci navržených matematických modelů popisujících dynamiku chemických reakčních systémů je nutno určit stav systému v daném čase, což vyžaduje spolehlivou experimentální metodiku, která v případě reesterifikace není triviální

záležitostí. Z uvedených důvodů autor habilitační práce považuje vývoj a validaci analytické metody umožňující určit stav systému za klíčovou podmínku matematického modelování reesterifikační reakce.

Samotná experimentální metodika popsána v práci [C7] je založena na využití plynové chromatografie, kdy vyvinutá metoda umožňuje stanovit 5 klíčových složek reakčního systému vedle sebe, tj. v jedné analýze. Konkrétně se jedná o glycerol a MEMK jako zástupce produktů a acylglyceroly – tri-, di- a monoacylglyceroly jako zástupce meziproduktů a výchozího rafinovaného tuku či oleje. Z hlediska přesnosti a spolehlivosti metody představuje náročný požadavek skutečnost, že v průběhu reesterifikace se koncentrace výchozí tuku mění od počátečních téměř 100 % do konečných 0,1 %, příp. ještě méně, a koncentrace MEMK naopak narůstá z 0 % do konečných prakticky 100 %. Pro posouzení spolehlivosti a linearity měření byla vypracována citlivostní analýza (viz obrázek 5 v práci [C7]), která ukazuje změnu a kolísání odezvy detektoru v závislosti na koncentraci stanovované složky reakčního systému, u většiny složek je pro větší přehlednost koncentrace prezentována v logaritmických souřadnicích. Kupříkladu odezva detektoru při stanovení MEMK (tj. FAME v anglickém textu práce [C7]) kolísá do 5 % střední hodnoty v rozsahu změny 2 řádů koncentrace (10 až 1000 $\mu\text{g/mL}$) a v rozsahu 3 řádů (1 až 1000 $\mu\text{g/mL}$) je odchylka nízkých hodnot nižší než ještě přijatelných 10 % střední hodnoty.

Metoda byla validována na třech koncentračních úrovních s využitím reálných vzorků (viz tabulka 4 v práci [C7]) a byly stanoveny limity kvantifikace a detekce jednotlivých složek reakčního systému. Získané údaje o spolehlivosti stanovení byly dále zohledněny v navazujícím matematickém modelování reesterifikační reakce. Samotnou metodu by bylo možné dále modifikovat a využít v tzv. „online“ chromatografu [23, 24] pro průběžné sledování stavu transesterifikační reakce. Praktické provedení by vyžadovalo automatizovanou přípravu vzorků, což dnes již nečiní problémy [24] a dále optimalizaci vyvinuté metody s ohledem na maximální snížení času analýzy a z toho plynoucího dopravního zpoždění.

Publikace [C9] tvořící Přílohu V habilitační práce je zaměřena na návrh vnitřního popisu samotné reesterifikační reakce. Studovaný systém je komplikovaný hned z několika důvodů: MEMK jsou z tuků a olejů syntetizovány nikoli jedinou reakcí, ale sérií následných reakcí [25], u kterých se obvykle v literatuře uvádí, že jsou vratné [26, 27], viz reakční schéma (1) v práci [C9]. Reakční systém je heterogenní (kapalina-kapalina), v literatuře je doposud spekulováno o jeho podrobném fázovém chování [28, 49], které obvykle zahrnuje více etap [28, 29] a toto fázové chování má pochopitelně vliv na pozorovanou dynamiku systému [28, 30]. Dále probíhají nežádoucí bočné reakce, konkrétně se jedná především o hydrolýzu acylglycerolů, tedy tuků a olejů, která má za následek dezaktivaci katalyzátoru reesterifikace [31, 32], z čehož plynou změny v reakční rychlosti, navíc se těmito reakcemi tvoří mýdla, jejichž přítomnost v systému znesnadňuje, až znemožňuje, ekonomické zpracování výsledné reakční

směsi [33]. Samotná kvantifikace podrobného stavu systému v aktuálním čase reakce také není triviální záležitostí, reakci je nutno zastavit, aby mohly být provedeny následné analýzy. Z tohoto důvodu byla kromě výše zmíněné metody plynové chromatografie (publikace [C7], Příloha IV) vyvinuta vlastní metoda právě pro zastavení reakce a dále pro stanovení koncentrace katalyzátoru a míry jeho dezaktivace (obsahu mýdel) založená na volumetrické analýze. Ačkoli z představeného popisu plyne velký teoretický a praktický význam porozumění dezaktivaci katalyzátoru, v literatuře byly tyto jevy studovány pouze výjimečně. Jako příklad je možné citovat [31, 34].

Hlavním záměrem práce [C9] bylo pokusit se navrhnout matematický model, který bude dostatečně přesný, aby postihoval dynamiku systému a umožnil jeho studium, optimalizaci a případně mohl sloužit jako výchozí bod pro návrh řízení reesterifikačního reaktoru. Na druhé straně zde byla snaha vyhnout se situaci, kdy navržený model bude obsahovat příliš mnoho stupňů volnosti a bude natolik komplikovaný, že identifikace jeho parametrů bude nespolehlivá a díky jejich značnému počtu a časté související náročnosti jejich experimentálního stanovení, bude praktický význam zdánlivě dokonalého modelu jen omezený. Za tímto účelem byla přijata řada zjednodušujících předpokladů, které však mnohdy vyplývaly přímo z experimentálních pozorování a tyto jsou v práci [C9] podrobně diskutovány. Zde zmiňme jen předpoklad „pseudo-homogenity“ systému plynoucí z rychlé tvorby stabilní emulze a dále předpoklad nevratnosti reakcí za studovaných experimentálních podmínek. I přes přijatá zjednodušení výsledný stavový popis zahrnuje soustavu sedmi nelineárních diferenciálních rovnic.

Pro samotnou identifikaci parametrů modelu byl naprogramován vlastní software [L8] ve výpočetním prostředí Matlab®, optimální hodnoty parametrů byly hledány pomocí simplexové metody (Nelder-Mead, implementovaná ve funkci „fminsearch“ prostředí Matlab®). Jako účelová funkce byl zvolen součet čtverců vážených relativních odchylek, kdy každý experimentální bod měl přidělenou váhu, dle přesnosti analýzy v daném koncentračním rozsahu. Rozptyl optimálních hodnot parametrů byl určen metodou Bootstrap [35]. Na tomto místě je vhodné zmínit, že výpočetní software pracoval s celým datovým souborem zahrnujícím stovky experimentálních bodů, namísto v chemické kinetice obvyklému přístupu spočívajícímu ve vyhodnocení jednotlivých experimentálních sérií a následnému hledání korelace mezi jednotlivými sériemi.

Obrázek 5 v práci [C9] názorně dokládá, že navržený matematický model je schopen adekvátně popsat stavy systému a to i při přímém srovnání významně odlišných experimentálních podmínek. Průměrná relativní odchylka jednoho experimentálního bodu činila 11 % a byla srovnatelná s celkovou chybou experimentálního postupu (viz obrázek 1 v práci [C9]). Při vývoji byla testována řada alternativních modelů, avšak kupříkladu model představený v doprovodném textu k práci [C9], který je součástí Přílohy V, nedosáhl lepšího výsledku, ačkoli obsahoval dvojnásobný počet parametrů oproti výslednému modelu. Práce dále diskutuje vzájemnou korelaci jednotlivých parametrů modelu, byla provedena

také křížová validace a citlivostní analýza jednotlivých parametrů modelu, opět viz doprovodný text publikace [C9].

Výše diskutované práce zabývající se kvantitativním popisem procesů recyklace odpadních tuků a olejů od rafinace vstupní odpadní suroviny až po její zužitkování pro přípravu MEMK byly využity při návrhu celkové zpracovatelské technologie [K1], která byla ověřena mimo jiné na poloprovozní jednotce postupně vybudované v koželužně Tarex, s.r.o. v Otrokovicích (viz publikace [C10]) a která zahrnovala i základní řízení [L5]. Při testech byla postupně úspěšně zpracována řada reálných vzorků o značně variabilním složení a právě simulační výpočty často napomohly zvolení optimálních podmínek zpracování dané specifické suroviny. Při vývoji technologie se podařilo získat řadu patentů, a to i mezinárodních [36, 37, J1–J4], a technologie získala kolektivní ocenění v prestižní soutěži Werner von Siemens Excellence Award v kategorii Nejlepší výsledek vývoje/inovace [R1].

Získané zkušenosti a vyvinuté modely byly dále využity pro návrh syntézy pomocného přípravku do potravinářského průmyslu založeného na bázi mastných kyselin, tedy suroviny přírodního původu. Tyto neveřejné práce byly završeny sérií značně rozsáhlých provozních testů [O23, O30, O33, O36] tvořících podklad dvou ověřených technologií [K3 a K4]. Ověřená technologie [K4], a tedy výroba zmíněných pomocných přípravků, byla realizována v průmyslové praxi [O38].

2.2 Modelování a simulace zpracování odpadních bílkovinných materiálů

Zpracováním bílkovinných odpadů se pracoviště autora habilitační práce dlouhodobě zabývá, jako příklad uveďme recyklační proces bílkovinných odpadů obsahujících sloučeniny chromu. Tyto odpady jsou produkovány koželužským průmyslem a z důvodu obsahu chromu představují odpad rizikový [38, 39]. Pro jejich zpracování byla navržena technologie [40], která představuje modifikovaný postup popsáný např. v [41]. Tato technologie byla implementována v průmyslovém měřítku ve společnosti Kortan, spol. s r. o. v Hrádku nad Nisou [40]. Principem této technologie, a také většiny alternativních postupů, je selektivní hydrolýza bílkovinné frakce odpadů, kdy vzniká vodorozpustný bílkovinný hydrolyzát, který je obvykle separován od koncentrovaného chromitého podílu (kalu) filtrací. Bílkovinný hydrolyzát nachází aplikace především v zemědělství jako organické dusíkaté hnojivo a induktor rezistence (biostimulátor), dále ve stavebním, gumárenském průmyslu a dalších odvětvích. Pro chromitý podíl byla navržena a testována řada využití, zde uveďme jen stěžejní, kdy je chromitý podíl recyklován do koželužského procesu a je využit pro přípravu bazických činicích solí [40], tímto způsobem je možno dosáhnout uzavřeného cyklu chromu v koželužské výrobě [42]. Uveřejněné publikace tvořící druhou část habilitační práce – Přílohy VI až X – navazují na tuto tematiku

a zabývají se řešením nejen samotného recyklačního procesu, ale také aplikací výsledných produktů. Získané zkušenosti při vývoji hydrolyzačních procesů jsou uplatněny dále v oblasti přípravy potravinářských produktů pro výrobu proteinové výživy na bázi netradičních zdrojů bílkovin. I v této oblasti jsou vybrané publikace založeny na kvantitativním přístupu, kdy je hledán adekvátní vnitřní popis studovaných systému, který umožňuje recyklační procesy nejen simulovat či optimalizovat, ale umožňuje porozumět jejich vnitřním vazbám a souvislostem.

Práce [D3] zaujímající Přílohu VI se týká zpracování odpadního chromitého podílu, ve formě chromitého kalu, získaného po dvoustupňové hydrolyze chromitých postružin – typického zástupce koželužských odpadů. Dvoustupňová hydrolyza spočívá v alkalické hydrolyze odpadu v prvním stupni, která je následována hydrolyzou katalyzovanou enzymy, tímto postupem je možno dosáhnout lepší výtěžnosti bílkovinné frakce. Separovaný chromitý kal nicméně obsahuje poměrně vysoký podíl zbytkové bílkoviny v sušině, který většinou komplikuje jeho další využití. Za účelem odstranění co největší části bílkovin z chromitého kalu byla zkoumána desorpce bílkovinného materiálu, neboť po hydrolyze je bílkovina v chromitém kalu přítomna jak ve volné, tak i ve vázané formě, zejména pomocí koordinačních vazeb. Praktické provedení desorpce pak spočívalo v extrakci (praní) bílkovinné frakce kalu do vodné prací lázně.

Vnitřní popis systému tedy zahrnuje jak samotný proces sorpce a desorpce, tak bilanční vztahy dané uvažovanou realizací procesu v extrakčním zařízení. Pro adekvátní popis systému bylo testováno využití nelineárního vztahu – Langmuirovy sorpční izotermy – a dále zjednodušeného vztahu předpokládajícího lineární závislost mezi volnou a sorpčně vázanou bílkovinou. Práce [D3] zahrnuje rovněž rozbor chyby plynoucí z využití zjednodušeného lineárního vztahu. Byly testovány dvě základní uspořádání procesu – tzv. lážňové praní [43], tj. jednostupňová extrakce do konstantního objemu lázně a dále dekantační praní [43], kdy vstupní surovina je prána opakovaně obvykle v menším podílu prací lázně. Zatímco popis lážňového praní zahrnoval nelineární vztah mezi volnou a vázanou bílkovinou, popis dekantačního praní z důvodu zjednodušení zahrnoval pouze závislost lineární. Zpracování experimentálních dat ukázalo, že nelineární vztah je schopen adekvátně vystihnout průběh reálného procesu, avšak zjednodušený model dekantačního praní nikoli.

Model zahrnující nelineárnost sorpce je tedy vhodný pro simulaci procesu a po rozšíření o ekonomické ukazatele i pro optimalizaci zpracování chromitého kalu. Samotná práce pak ukázala, že lze dosáhnout podstatné míry snížení bílkovinného podílu navrženým procesem.

Práce [C4] (Příloha VII) se naopak soustředí na porozumění a optimalizaci aplikace výsledného produktu zpracovatelské technologie – bílkovinného hydrolyzátu. Jak bylo ukázáno Ústavem experimentální botaniky Akademie věd

České republiky ve společném projektu [O4], jsou některé proteinové hydrolyzáty schopny působit jako induktory rezistence (biostimulátory) – zjednodušeně řečeno tyto látky povzbudí imunitní systém rostliny a ta je pak schopna lépe odolávat chorobám i stresovým faktorům vnějšího prostředí. Účinky však nebývají srovnatelné např. při aplikaci ve skleníku a v polních podmínkách. Z popsaného mechanismu působení induktorů rezistence je zřejmé, že aby byla látka účinná, musí projít (penetrovat) do těla rostliny. Diskutovaná práce [C4] se zabývá právě popisem tohoto procesu s cílem mu porozumět, potvrdit jeho význam, kvantifikovat jej a dospět k vnitřnímu popisu, který umožní optimalizaci způsobu a podmínek aplikace tak, aby byla zajištěna co nejvyšší účinnost aplikovaných biostimulátorů. Netřeba dodávat, že otázka je významná i z ekonomického hlediska, neboť aplikací biostimulátorů za nevhodných, zejména klimatických, podmínek přichází vniveč většina vynaložených nákladů.

Studovaný systém je mimořádně složitý, výzkum mechanismu penetrace jednotlivých látek do těla rostlin je stále aktuální [44, 50], zdá se však, že penetrace hydrofilních molekul (jako jsou bílkovinné hydrolyzáty) probíhá odlišným mechanismem od látek lipofilních (jako jsou tuky a řada pesticidů a podobných přípravků). Samotná živá rostlina má řadu vlastních regulačních mechanismů, které jsou citlivé na okolní podmínky, jako je vlhkost, světlo a další. Z aktuálních poznatků však vyplývá, že na pokožku rostliny lze pohlížet jako na porézní membránu, což byl výchozí bod diskutované práce společně s empiricky potvrzeným pozorováním, že penetrují pouze látky v kapalném stavu (např. viz [45]). Jakmile je tedy odpařeno rozpouštědlo, kterým je voda v případě bílkovinných hydrolyzátů, penetrace ustává.

Navržený vnitřní popis systému je tedy založen na difuzi aktivní látky do těla rostliny, které je aproximováno porézní deskou, zde byl učiněn předpoklad, že hlavní plochou pro penetraci biostimulátoru jsou listy. V tomto případě se tedy jedná opět o stavový popis systému s rozloženými parametry. Okrajovými podmínkami je pak popsána změna koncentrace v povrchové vrstvě roztoku biostimulátoru zapříčiněná jednak jeho samotnou difuzí dovnitř těla rostliny a dále také odparem vody do okolního prostředí. Za účelem zjednodušení byl model řešen pro idealizovanou situaci, kdy nedochází k odparu vody z roztoku hydrolyzátu, tj. v podmínkách 100 % relativní vlhkosti. V praxi se uvedeným podmínkám blíží pěstování rostlin ve sklenících. Řešení modelu bylo získáno analyticky s využitím Laplaceovy transformace.

Dále byly provedeny simulační výpočty, za tímto účelem byla do modelu dosazena experimentálně zjištěná hodnota efektivního difuzního koeficientu biostimulátoru na bázi bílkovinného hydrolyzátu. V simulačních výpočtech bylo pracováno se střední integrální koncentrací biostimulátoru v tuhé fázi a to za účelem odhadu množství biostimulátoru, který penetroval dovnitř rostliny. Model umožňuje posoudit, jak dlouhý čas je nutný k absorpci minimálního účinného množství biostimulátoru za idealizovaných podmínek a změnou jakých faktorů lze tuto penetraci urychlit. Tímto přístupem lze identifikovat klíčové faktory

zajišťující penetraci účinné látky do těla rostliny a na kvalitativní úrovni řídit její dávkování při praktickém ošetření kulturních rostlin.

V navazující práci [C3] (Příloha VIII) byl matematický model popisující penetraci biostimulátoru do těla rostliny dále rozšířen a zpřesněn. Základ zůstal shodný – vnitřní model penetrace biostimulátoru je i zde založen na jednorozměrné difuzi popsané Fickovým zákonem, avšak model v tomto případě zahrnuje závislost rychlosti odparu vody z aplikovaného roztoku biostimulátoru jak na relativní vlhkosti vzduchu, tak na rychlosti větru a aktuální teplotě, která ovlivňuje tlak nasycených par vody. Závislost rychlosti odparu vody na rychlosti větru byla převzata z literatury, ve které byl použitý vztah získán na velmi rozsáhlé sadě dlouhodobých experimentálních měření. Matematický model a související simulační výpočty byly v tomto případě řešeny numerickým postupem na základě naprogramované rutiny ve výpočetním prostředí Matlab®. Řešení bylo hledáno v čase od počátku aplikace biostimulátoru (čas roven 0) do času konečného, kdy je vlivem okolních podmínek odpařena veškerá voda a difuze biostimulátoru do těla rostliny je díky tomu ukončena.

Řešení bylo vypracováno pro model v bezrozměrném tvaru, což značně usnadnilo a zpřehlednilo simulační výpočty, neboť uvedený přístup umožňuje podstatně redukovat počet proměnných majících vliv na studovaný systém, jak ostatně vyplývá z plného textu publikace [C3] dostupného v Příloze VIII. Rozšířený model byl opět propojen s reálným průběhem penetrace biostimulátoru pomocí experimentálně zjištěné hodnoty efektivního difuzního koeficientu. Do modelu byla dále zahrnuta integrální koncentrace biostimulátoru v těle rostliny jako vhodný ukazatel množství biostimulátoru, které penetrovalo dovnitř těla rostliny. Jak ukázaly počáteční simulační výpočty, model bylo dále vhodné přiblížit reálnému systému zahrnutím přítomnosti kutikuly – vnější ochranné bariéry rostlinného těla – do vyhodnocení získaných dat. Konkrétně byla uvažována pouze střední koncentrace biostimulátoru přítomná pod kutikulou jako množství látky, které může reálně interagovat s rostlinným organismem. To je v souladu s poznatky o funkci této bariéry tvořící vnější povrch nejen rostlinných organismů a zejména se jedná o běžnou praxi při experimentálním stanovení průběhu penetrace do těla rostlin [45, 46].

Simulace byly zaměřeny na srovnání účinnosti aplikace za odlišných povětrnostních podmínek, kdy bylo dokázáno, že za nepříznivých podmínek aplikace biostimulátoru nedochází k jeho penetraci do těla rostliny a látka tak nemůže účinkovat. Navazující část simulačních výpočtů byla zaměřena na analýzu vlivu jednotlivých proměnných na proces difuze biostimulátoru do těla rostlin, na těchto výsledcích je zřejmý výše zmíněný přínos zavedení bezrozměrných proměnných.

Na základě simulačních výpočtů byly i v tomto případě formulovány konkrétní doporučení k podmínkám aplikace biostimulátorů. Samotný model má potenciál využití v nadřazené řídicí vrstvě, která na základě znalosti aktuálních

povětrnostních podmínek, a nejlépe i jejich krátkodobé předpovědi, je schopna odhadnout, zda je racionální provádět aplikaci biostimulátoru.

Práce [D4] tvořící Přílohu IX je zaměřena na návrh procesně-ekonomického matematického modelu popisujícího přípravu bílkovinného hydrolyzátu potravinářské kvality z netradičního zdroje bílkovin – lupinové mouky. Zde tedy hydrolyzační proces není aplikován na odpadní materiál, ale naopak na poměrně cennou vstupní surovinu. Samotný způsob výroby je však obdobný, hydrolyzou za vhodných podmínek se získá jakostní vodorozpustný roztok bílkoviny (tj. hydrolyzát), který je separován od nerozloženého pevného podílu s vysokým obsahem vlákniny pomocí filtrace a v posledním kroku je bílkovinný hydrolyzát zahuštěn na požadovaný obsah sušiny.

Vnitřní popis systému je soustředěn na kvantifikaci hlavních provozních nákladů a souvisejících technologických parametrů. Hlavní provozní náklady jsou v tomto případě dány spotřebou elektrické energie nutné pro míchání obsahu reaktoru, ve kterém probíhá hydrolyza a dále náklady nutnými pro zahuštění hydrolyzátu. V navazujících simulačních výpočtech jsou srovnávány náklady měrné, které jsou vztaženy na jednotku hmotnosti výsledného produktu. Pro odhad uvedených nákladů je nutné do modelu zahrnout dynamiku chemické reakce, tj. její kinetiku, neboť ta určuje čas potřebný pro dosažení dané konverze chemické reakce, tj. čas míchání. Na konverzi dále závisí jak množství produktu, které se získá ze vstupního materiálu, tak i množství vody, které je nutné odpařit pro získání výstupního produktu o žádané koncentraci. Model uvažuje zjednodušený systém, v němž jsou přítomny čtyři složky reakčního systému. Situace je komplikována skutečností, že postupující hydrolyzou dochází ke zvýšení viskozity reakční směsi, což snižuje účinnost míchání. Samotné míchání je důležité nejen pro homogenizaci obsahu reaktoru, ale má přímý vliv na reakční rychlost, neboť hydrolyze se podrobuje tuhá fáze. Dostatečná úroveň míchání je také nutná pro zabránění tvorby nápeků a nežádoucích agregátů ve výsledném produktu. Vnitřní popis proto zahrnuje charakterizaci hydrodynamického režimu reaktoru a souvisejícího příkonu míchadla nutného k jeho zajištění a udržení v průběhu proměnlivého procesu. Reologické chování systému je velmi komplikované, reakční směs představuje neneutronovskou kapalinu, pro účely modelování bylo však žádoucí systém zjednodušit, proto byla uvažována pouze konstantní hodnota viskozity reakční směsi nezávislá na hydrodynamickém režimu, resp. aktuální hodnotě smykové rychlosti. Model však pracoval s experimentálně zjištěnou nelineární závislostí viskozity suspenze reakční směsi na koncentraci tuhé fáze převzatou z literatury. Syntézou diskutovaných vztahů byl získán finální model zahrnující všechny uvažované procesy výrobní technologie.

Pro účely simulačních výpočtů byl matematický model začleněn do programu napsaného ve výpočetním prostředí Matlab®. Výsledky simulací potvrdily, že v řadě případů daných konkrétními hodnotami technologických provozních

parametrů existuje ekonomické optimum, v němž je žádoucí provozovat zpracovatelskou technologii. Konkrétně byl posuzován vliv výstupní konverze, hydrodynamického režimu reaktoru i počáteční koncentrace tuhé fáze v reaktoru. Jmenované parametry představují vstupy do systému, kterými lze ovlivnit výstupní složení produktu, jeho množství a měrné provozní náklady. Simulace dále byly použity pro odhad nutného příkonu míchadla pro zajištění požadovaného hydrodynamického režimu a model tak umožňuje určit, kterých podmínek je v praxi reálné dosáhnout. Využití modelu je tak opět nejen v oblasti ekonomické či technologické optimalizace procesu, ale při začlenění dat platných pro specifickou surovinu může model tvořit součást nadřazené řídicí vrstvy, která určí vhodné podmínky zpracování. Lupinová mouka totiž představuje přírodní surovinu, jejíž vlastnosti kolísají, což úzce souvisí se změnou polohy optima výrobních nákladů.

Poslední příspěvek [H7] (Příloha X) zařazený do habilitační práce se týká opět kvantitativního popisu zpracování lupinové mouky. V tomto případě se práce soustředí na vnitřní popis separace pevné fáze od fáze kapalné po skončení procesu hydrolýzy. Separace byla provedena filtračně. Jádro modelu tvoří známý vztah popisující filtraci, který byl integrován za podmínky konstantního rozdílu tlaků. Za účelem vyhodnocení reálných dat byl naprogramován software, opět ve výpočetním prostředí Matlab®. Model byl použit pro srovnání několika postupů hydrolýzního zpracování vstupní suroviny i odlišných variant filtračního procesu. Ve všech testovaných případech bylo prokázáno, že použitý model je schopný adekvátně vystihnout reálná experimentální data. S experimentálně identifikovanými parametry modelu pak byly provedeny simulační výpočty.

Simulace byly zaměřeny na srovnání různých variant procesů s cílem vybrat variantu nejvhodnější a to s ohledem na její proveditelnost v reálném průmyslovém měřítku. Zde je rozhodující především velikost plochy provozního filtru nutná pro zpracování daného objemu suspenze, neboť ta udává jak investiční náklady, tak i dostupnost potřebného zařízení na trhu.

Matematický model dokládá, že čas potřebný pro filtraci je nelineární funkcí objemu získaného filtrátu. V praxi tedy může být výhodné filtrovat větší objem suspenze v několika krocích, kdy se zpracovává menší, dílčí, objem suspenze. Pochopitelně je při uvedené optimalizaci nutné zohlednit čas potřebný pro odstranění tuhého podílu – filtračního koláče – z filtru a dále čas potřebný pro údržbu a přípravu filtru pro další cyklus. Výsledky simulačních výpočtů dokládají, že uvedenou optimalizací filtrace lze podstatně snížit celkový čas nutný pro filtraci, a to až řádově – viz obrázek 5 v diskutované publikaci [H7]. Praktický dopad popsaného optimalizačního algoritmu na velikost filtru a související investiční náklady tak může být značný, v závislosti na velikosti odporu reálného filtračního koláče.

Práce týkající se lupinové mouky pomohly najít schůdnou cestu realizace výrobní technologie ve větším měřítku a byly mj. impulzem pro podání užitných vzorů chránících samotné produkty – [L3, L4]. Dodejme, že tyto výsledky byly úspěšně licencovány, tj. uplatněny v praxi.

Popsaný kvantitativní přístup k optimalizaci procesů byl také použit v projektech smluvního výzkumu pro společnost Tonak [O19, O20, O24, O26, O35, O42] týkajících se zpracování odpadů na bázi bílkovin této společnosti. Zde byl velmi přínosný pro uvedení vyvinutých procesů do provozní praxe, dodejme, že výsledné produkty recyklační technologie byly uvedeny na trh [47]. Z hlediska výsledků se jedná o ověřené technologie [K2, K5], s ohledem na téma habilitační práce uvedme, že při provozních testech a zahájení provozu výrobní technologie [K2] byly velmi nápomocné výsledky simulačních výpočtů získaných s vyvinutým softwarem [L9], který umožnil na kvantitativní úrovni simulovat celou výrobní technologii a optimalizovat vybrané klíčové procesy, kupříkladu filtraci.

3. PŘÍNOS PRÁCE PRO VĚDU A PRAXI

Podstatu habilitační práce tvoří deterministické matematické modely navržené za účelem odhadu stavů studovaných procesů, jejich simulaci a optimalizaci. Tyto modely společně s výsledky simulačních a optimalizačních výpočtů představují hlavní přínos práce nejen z hlediska vědeckého, ale zejména z hlediska praxe.

Pro konkrétní případy – recyklační procesy – lze přínosy práce shrnout do následujících bodů:

- Kvantitativní popis rafinace odpadních tuků a olejů zahrnuje proces odstranění konzervačního činidla. Matematický model systému s rozloženými parametry umožňuje v závislosti na technologicky požadované účinnosti procesu určit optimální provozní podmínky, za nichž je dosaženo minimálních provozních nákladů rafinačního procesu. Samotný proces pak umožňuje podstatně zvýšit hodnotu získané proteinové frakce vstupní suroviny. Navazující validovaný model odstranění volných mastných kyselin je schopen adekvátně simulovat reálný průběh procesu a srovnat účinnost rafinace v širokém rozsahu složení vstupní odpadní suroviny, a to i pro různá neutralizační (rafinační) činidla. Tento model tedy umožňuje řídit proces rafinace volných mastných kyselin – stanovit potřebné procesní podmínky, za nichž je zajištěna požadovaná jakost výstupního rafinovaného tuku pro šarže vstupní suroviny o různorodé kvalitě. Konečně model třetí, popisující ekonomickou stránku odstranění volných mastných kyselin, umožňuje stanovit optimální podmínky rafinace v závislosti na aktuální ceně vstupních surovin. Z praktického hlediska je aplikace tohoto modelu zvláště přínosná v situaci, kdy je nutné z technologických důvodů míchat odpadní tuk s odpadním olejem, aby byla získána směs s vyhovující teplotou bodu zákalu. Modely byly aplikovány na velké sérii poloprovozních testů zpracování různorodých odpadních tuků a olejů.
- Matematický model reesterifikace rafinovaných odpadních tuků a olejů byl v širokém měřítku validovaný, pro výzkum tohoto procesu byla navržena specifická měřicí metoda představující přínos práce k monitorování procesu a jeho dalšímu výzkumu. Tento model může sloužit jako výchozí bod k návrhu řízení reesterifikačního reaktoru, jako jeden z mála dostupných v soudobé literatuře popisuje také významnou boční reakci – hydrolýzu acylglycerolů – která má za následek deaktivaci katalyzátoru reesterifikační reakce. V tomto smyslu je přínosná také citlivostní analýza jednotlivých parametrů modelu prezentovaná v habilitační práci. Z vědeckého hlediska výsledky modelování společně s experimentálními pracemi ukázaly, že ve

studovaném systému lze probíhající reesterifikační reakce považovat za nevratné a že k hydrolyze methyl esterů mastných kyselin – výsledného produktu reakce – dochází jen v zanedbatelném měřítku, což představuje nové a originální poznatky o povaze studovaného systému.

- Modelování desorpce proteinové složky z chromitého kalu potvrdilo, že pro adekvátní popis procesu je nutné uvažovat nelineární sorpci. Výsledky zároveň ukazují, že lze dosáhnout podstatného snížení obsahu bílkovin navrženým extrakčním procesem, což je významné s ohledem na stále aktuální otázku řešení využití chromitého kalu – v praxi jsou totiž hydrolyzní metody běžně využívány, avšak vedlejší produkt zpracování – chromitý kal – je stále v celosvětovém měřítku likvidován zejména skládkováním, což je pochopitelně neuspokojivým stavem.
- Proteinové hydrolyzáty získané zpracováním bílkovinné frakce odpadní suroviny jsou účinnými a perspektivními biostimulátory (induktory rezistence) kulturních plodin. Fyzikální popis procesu jejich penetrace do těla rostlin představený v habilitační práci pak potvrdil významný vliv povětrnostních podmínek na tento děj, který je klíčový pro zajištění účinnosti aplikace biostimulátorů. Výsledky práce tak představují klíčový podklad pro řízení doby aplikace biostimulátorů v závislosti na povětrnostních podmínkách a dále potvrzují význam této otázky.
- Procesně ekonomické modely hydrolyzy bílkovinné frakce lupinové suroviny popisují optimalizaci reakčních podmínek celé základní zpracovatelské technologie, včetně klíčového kroku – separace finální reakční směsi filtrací. Práce tím umožňuje určit racionální zpracování vstupní suroviny ve větším měřítku, což bylo poloprovozně ověřeno. Představený přístup k optimalizaci filtračního procesu byl pak použit pro návrh procesu zpracování bílkovinných odpadů v komerční sféře.

4. ZÁVĚR

Esencí habilitační práce je kvantitativní popis recyklačních procesů zaměřených na zpracování odpadní suroviny obsahující tuky a proteiny, nejčastěji jejich směs. Pokud mají být cenné složky takové suroviny znovu uvedeny do oběhu, je žádoucí dosáhnout jejího komplexního zpracování, a toto východisko představuje implicitní prvek spojující jednotlivé procesy v práci diskutované.

Uvedené lze ilustrovat na příkladu odpadu koželužského průmyslu – mázdry. Ta obsahuje jak tukovou, tak i proteinovou složku, značné množství vody a další nežádoucí doprovodné látky. Aplikací procesů představených v habilitační práci lze v jednotlivých krocích mázdru nejprve rafinovat, poté oddělit proteinovou a tukovou složku. Z tukové složky jsou připraveny methyl estery mastných kyselin – základní oleochemikálie – reesterifikační reakcí, jejíž matematický model je v habilitační práci podrobně rozebrán. Proteinová složka je zpracována hydrolytickým postupem, a výsledný hydrolyzát nachází uplatnění kupříkladu v zemědělství jako induktor rezistence biologického původu (biostimulátor). Aby ovšem byla jeho aplikace efektivní, je nutné zajistit proniknutí biostimulátoru do těla rostliny, což je další proces, kterým se habilitační práce zabývá. Zatímco jednotlivé modelované procesy mají obvykle odlišnou fyzikální a chemickou podstatu, jejich spojením do jednoho celku – zpracovatelské technologie – lze dosáhnout zmíněné komplexní recyklace vstupní suroviny, což bylo základní motivací práce.

Z uvedeného vyplývá poměrně široká interdisciplinární povaha celé habilitační práce – pro návrh modelů bylo nutné zahrnout poznatky z několika různých oborů, studium systémů a verifikace navržených vztahů si vyžádaly návrh a vývoj specifických experimentálních metod, které jsou tak nedělitelnou součástí celé práce. Samotné matematické modely procesů tvořící zmíněnou esenci habilitační práce jsou výsledkem tohoto interdisciplinárního přístupu a jejich zásluhou bylo možno navrhnout praktické provedení realizace procesů v poloprovozním, příp. provozním měřítku, určit optimální provozní podmínky recyklační technologie a to i při proměnlivém složení vstupní odpadní suroviny. Uvedený přístup byl klíčový pro realizaci řady získaných poznatků v průmyslové praxi.

5. SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ

Symbol/zkratka	Popis
MEMK	Methyl estery mastných kyselin
TMAH	Tetramethylammonium hydroxid
VMK	Volné mastné kyseliny

POUŽITÁ LITERATURA VYJMA VLASTNÍCH PRACÍ AUTORA

- [1] Evangelium podle Jana, kapitola 1. verš 1
- [2] REJZEK, Jiří. *Český etymologický slovník*. Voznice: Leda, 2001, 752 s. ISBN 80-85927-85-3.
- [3] FRANCIS, Bruce A., SMITH, Malcolm C., WILLEMS, Jan C. *Control of Uncertain Systems: Modelling, Approximation, and Design: A Workshop on the Occasion of Keith Glover's 60th Birthday*. Berlin: Springer-Verlag, 2006, ISBN 978-3-540-31754-8.
- [4] PICARD, Damien, SOURBRON, Maarten, JORISSEN, Filip; CIGLER, Jiří, VÁŇA, Zdeněk; FERKL, Lukáš, and HELSEN, Lieve. Comparison of Model Predictive Control performance using grey-box and white box controller models. In *4th International High Performance Buildings Conference at Purdue 2016*, West Lafayette: Purdue University, 2016, ISBN: 978-1-5108-2874-2.
- [5] ESTRADA-FLORES, S., MERTS, I., DE KETELAERE, B., LAMMERTYN, J. Development and validation of “grey-box” models for refrigeration applications: A review of key concepts. *International Journal of Refrigeration*. 2006, roč. 29, č. 6, s. 931-946. ISSN 1879-2081.
- [6] JATEGAONKAR, Ravindra V. Flight Vehicle System Identification: A Time Domain Methodology. In *Progress in Astronautics and Aeronautics, Volume 216 – Chapter 1. Introduction*. Reston: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006. ISBN 1-56347-836-6.
- [7] LOVERA, Marco. *Control-Oriented Modelling and Identification - Theory and Practice*. London: Institution of Engineering and Technology, 2015, ISBN 978-1-84919-615-4.
- [8] CORRIOU, Jean-Pierre. *Process control: theory and applications*. London: Springer, 2004, 752 s. ISBN 1852337761.
- [9] KLIPPENSTEIN, Stephen J., PANDE, Vijay S., TRUHLAR, Donald G. Chemical kinetics and mechanisms of complex systems: a perspective on recent theoretical advances. *Journal of the American Chemical Society*. 2014, roč. 136, č. 2, s. 528-546. ISSN 1520-5126.
- [10] HABERSHON, Scott. Automated prediction of catalytic mechanism and rate law using graph-based reaction path sampling. *Journal of Chemical*

- Theory and Computation*. 2016, roč. 12, č. 4, s. 1786-1798. ISSN 1549-9626.
- [11] DYSON, Freeman. Meeting with Enrico Fermi. *Nature*. 2004, roč. 427, č. 6972, s. 297–297. ISSN 0028-0836.
- [12] DUCARD, Guillaume. *Modeling and Analysis of Dynamic Systems* [online]. 2017, Institute for Dynamic Systems and Control, ETH Zurich. [cit. 2019-10-26] URL <https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/mavt/dynamic-systems-n-control/idsc-dam/Lectures/System-Modeling/Slides_HS17/SysMod2017_Lect1.pdf>.
- [13] BARTON, Paul I. *Dynamic Modelling and Simulation* [online]. 1997, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge. 291 s. [cit. 2019-11-01] URL <<http://web.mit.edu/yoric-locker/BartonDynamicSimNotes.pdf>>.
- [14] MARLIN, Thomas E. *Process Control: Designing Processes and Control Systems for Dynamic Performances*. New York: McGraw-Hill, 1995, 954 s. ISBN 0070404917.
- [15] HORÁK, Josef a Josef PAŠEK. *Návrh průmyslových chemických reaktorů z laboratorních dat*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1980, 486 s.
- [16] PANTELIDES, Constantinos C., RENFRO, J. G. The online use of first-principles models in process operations: Review, current status and future needs. *Computers & Chemical Engineering*. 2013, roč. 51, s. 136-148. ISSN 1873-4375.
- [17] BRÁSIO, Ana S. R., ROMANENKO, Andrey, FERNANDES, Natércia C. P., SANTOS, Lino O. First principle modeling and predictive control of a continuous biodiesel plant. *Journal of Process Control*. 2016, roč. 47, s. 11-21. ISSN 1873-2771.
- [18] ŠULC, Jan, FERKL, Lukáš, CIGLER, Jiří, POŘÍZEK, Jan. Optimization-based control of ventilation in a road tunnel complex. *Control Engineering Practice*. 2017, roč. 69, s. 141-155. ISSN 1873-6939.
- [19] SHAHIDI, Fereidoon, BAILEY, Alton Edward. *Bailey's industrial oil and fat products*. 6th ed. New York: Wiley-Interscience, 2005, 6 sv. ISBN 9780471384601.
- [20] SIMS, Ralph E. H, MABEE, Warren, SADDLER, Jack N., TAYLOR, Michael. An overview of second generation biofuel technologies. *Bioresource technology*. 2010, roč. 101, č. 6, s. 1570-1580. ISSN 0960-8524.

- [21] ČSN EN 14214+A2. *Kapaln  ropn  v robky - Methylestery mastn ch kyselin (FAME) pro vzn tov  motory a topn  oleje - Technick  po adavky a metody zkou en *. Praha:  esk  agentura pro standardizaci, 2019.
- [22] J RKE, Andreas, SEIDEL-MORGENSTERN, Andreas, HAMEL, Christof. Isomerization of 1-decene: Estimation of thermodynamic properties, equilibrium composition calculation and experimental validation using a Rh-BIPHEPHOS catalyst. *Chemical Engineering Journal*. 2015, ro . 260, s. 513-523. ISSN 1385-8947.
- [23] MANKA, Dan P. *AUTOMATED STREAM ANALYSIS FOR PROCESS CONTROL, volume 1*. New York: Academic Press, Inc., 1982, 336 s. ISBN 978-0-12-469001-1.
- [24] DIAMANTIS, V.; MELIDIS, P.; AIVASIDIS, A. Continuous determination of volatile products in anaerobic fermenters by on-line capillary gas chromatography. *Analytica Chimica Acta*. 2006, ro . 573, s. 189-194. ISSN 1873-4324.
- [25] FREEDMAN, Bernard, BUTTERFIELD, Royden O., PRYDE, Everett H. Transesterification Kinetics of Soybean Oil. *Journal of the American Oil Chemists' Society*. 1986, ro . 63,  . 10, s. 1375–1380. ISSN 1558-9331.
- [26] BENDER, Myron L., GLASSON, William A. The Kinetics of Simultaneous Hydrolysis and Alcoholysis of Esters in Aqueous Alcohol Solutions. *Journal of the American Chemical Society*. 1959, ro . 81,  . 7, s. 1590–1597. ISSN 1520-5126.
- [27] HOOPS, Stephen C., VAN OOSTERDIEP, Joan, SCHOWEN, Richard L. Energetics of Carbonyl Addition and Elimination. Methoxide Ion with Esters. *The Journal of Organic Chemistry*. 1984, ro . 49,  . 3, s. 435–438. ISSN 1520-6904.
- [28] CSERNICA, Stephen N., HSU, James T. The Phase Behavior Effect on the Kinetics of Transesterification Reactions for Biodiesel Production. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2012, ro . 51,  . 18, s. 6340–6349. ISSN 1520-5045.
- [29] STAMENKOVI , Olivera S., TODOROVI , Zoran B., LAZI , Miodrag L., VELJKOVI , Vlada B., SKALA, Dejan U. Kinetics of Sunflower Oil Methanolysis at Low Temperatures. *Bioresource Technology*. 2008, ro . 99, s. 5, s. 1131–1140. ISSN 0960-8524.

- [30] NOUREDDINI, H., ZHU, D. Kinetics of Transesterification of Soybean Oil. *Journal of the American Oil Chemists' Society*. 1997, roč. 74, č. 11, s. 1457–1463. ISSN 1558-9331.
- [31] KOMERS, Karel, SKOPAL, František, STLOUKAL, Radek, MACHEK, Jaroslav. Kinetics and Mechanism of the KOH – Catalyzed Methanolysis of Rapeseed Oil for Biodiesel Production. *European Journal of Lipid Science and Technology*. 2002, roč. 104, č. 11, s. 728–737. ISSN 1438-9312.
- [32] VICENTE, Gemma, MARTÍNEZ, Mercedes, ARACIL, José. Integrated Biodiesel Production: A Comparison of Different Homogeneous Catalysts Systems. *Bioresource Technology*. 2004, roč. 92, č. 3, s. 297–305. ISSN 0960-8524.
- [33] VAN GERPEN, Jon. Biodiesel Processing and Production. *Fuel Processing Technology*. 2005, roč. 86, č. 10, s. 1097–1107. ISSN 0378-3820.
- [34] BOOCOCK, David G. B., KONAR, Samir K., MAO, V., LEE, C., BULIGAN, Sonia. Fast Formation of High-Purity Methyl Esters from Vegetable Oils. *Journal of the American Oil Chemists' Society*. 1998, roč. 75, č. 9, s. 1167–1172. ISSN 1558-9331.
- [35] EFRON, Bradley. Better Bootstrap Confidence Intervals. *Journal of the American Statistical Association*. 1987, roč. 82, č. 397, s. 171–185. ISSN 1537-274X.
- [36] Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. *Způsob předúpravy odpadních olejů a tuků s obsahem volných mastných kyselin pro alkoholickou výrobu bionafty*. Původci: KOLOMAZNÍK, Karel, KLEIN, Karel, VAŠEK, Vladimír, UHLÍŘOVÁ, Michaela, MYNAŘÍK, Alois. Česká republika, patentový spis č. 303071. 8. 2. 2012
- [37] Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. *METHOD FOR BIODIESEL PRODUCTION FROM FATS AND OILS*. Původci: KOLOMAZNÍK, Karel, KLEIN, Karel, VAŠEK, Vladimír, JANÁČOVÁ, Dagmar, JELÍNEK, Miloš, UHLÍŘOVÁ, Michaela, MYNAŘÍK, Alois. Mezinárodní - EPO, patentový spis č. EP 2238224. 7. 8. 2013
- [38] KOLOMAZNÍK, Karel, ADÁMEK, Milan, ANDĚL, Ivan, UHLÍŘOVÁ, Michaela. Leather waste – Potential threat to human health, and a new technology of its treatment. *Journal of Hazardous Materials*. 2008, roč. 160, č. 2-3, s. 514-520. ISSN 1873-3336.

- [39] ROSU, Liliana, VARGANICI, Cristian–Dragos, CRUDU, Andra–Manuela, ROSU, Dan, BELE, Adrian. Ecofriendly wet–white leather vs. conventional tanned wet–blue leather. A photochemical approach. *Journal of Cleaner Production*. 2018, roč. 177, s. 708-720. ISSN 1879-1786.
- [40] KOLOMAZNÍK, Karel, MLÁDEK, Milan, LANGMAIER, František, JANÁČOVÁ, Dagmar, TAYLOR, Maryann M. Experience in industrial practice of enzymatic dechromation of chrome shavings. *Journal of the American Leather Chemists Association*. 1999, roč. 94, s. 55-63. ISSN 0002-9726.
- [41] CABEZA, L. F., TAYLOR, M. M., DIMAIO, G. L., BROWN, E. M., MARMER, W. N., CARRIO, R., CELMA, P. J., COT, J. Processing of leather waste: pilot scale studies on chrome shavings. Isolation of potentially valuable protein products and chromium. *Waste management*. 1998, roč. 18, č. 3, s. 211-218. ISSN 0956-053X.
- [42] KOLOMAZNÍK, Karel, MLÁDEK, Milan, LANGMAIER, František, SHELLY, D. C., TAYLOR, Maryann M. Closed Loop for Chromium in Tannery Operations. *Journal of the American Leather Chemists Association*. 2003, roč. 98, č. 12, s. 487-490. ISSN 0002-9726.
- [43] KOLOMAZNÍK, Karel. *Modelování zpracovatelských procesů*. Brno: VUT, 1990, 191 s. ISBN 8021401141.
- [44] TREDENICK, Eloise C., FARRELL, Troy W., FORSTER, W. Alison. Mathematical Modeling of Diffusion of a Hydrophilic Ionic Fertilizer in Plant Cuticles: Surfactant and Hygroscopic Effects. *Frontiers in plant science*. 2018, roč. 9, příspěvek č. 1888, 21 s. ISSN 1664-462X.
- [45] SCHÖNHERR, Jörg. Cuticular penetration of calcium salts: effects of humidity, anions, and adjuvants. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*. 2001, roč. 164, č. 2, s. 225-231. ISSN 1522-2624.
- [46] BRAZEE, Ross D., BUKOVAC, Martin J., ZHU, Heping. Diffusion model for plant cuticular penetration by spray-applied weak organic acid bioregulator in presence or absence of ammonium nitrate. *Transactions of the ASAE*. 2004, roč. 47, č. 3, s. 629-635. ISSN 0001-2351.
- [47] *Přípravek TopStim N13* [online]. Tonak, a.s. c2013, [cit. 2021-05-06] URL < <http://www.bioforce.cz/vyrobky/>>.
- [48] WADE, Matthew J. Not Just Numbers: Mathematical Modelling and Its Contribution to Anaerobic Digestion Processes. *Processes*, 2020, roč. 8, č. 8, příspěvek 888. ISSN 2227-9717.

- [49] THOAI, D. Nguyen, CHANAKAEWSOMBOON, I., PRASERTSIT, K., PHOTAWORN, S., & TONGURAI, C. A novel inspection of mechanisms in conversion of refined palm oil to biodiesel with alkaline catalyst. *Fuel*, 2019, roč. 256, příspěvek 115831. ISSN 0016-2361.
- [50] TREDENICK, E. C.; FARQUHAR, G. D. Dynamics of Moisture Transport in Plant Cuticles: The Role of Cellulose. *arXiv preprint arXiv:2102.08666*, 2021.
- [51] *CRedit* – *Contributor Roles Taxonomy* [online]. CASRAI, [cit. 2021-05-06], URL< <https://casrai.org/credit/>>.

PŘEHLED PUBLIKAČNÍ AKTIVITY AUTORA

Přehled je zpracován ve členění předepsaném Směrnicí pro habilitační řízení a řízení ke jmenování profesorem na Fakultě aplikované informatiky – SD/05/20.

B. Kapitola v odborné knize

- [B1] KOLOMAZNÍK, Karel, BAŘINOVÁ, Michaela, PECHA, Jiří, JANÁČOVÁ, Dagmar. Rationalization of Salt-Related Processes in the Leather Industry as a Tool for Minimization of Their Environmental Impact. In *Advances in Environmental Research*. New York: Nova Science Publishers, 2014, s. 137-164. ISBN 978-1-63117-329-5.

C. Původní vědecké články v impaktovaném časopise (indexovaný v databázi WoS)

- [C1] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, BAŘINOVÁ, Michaela, ŠÁNEK, Lubomír. Economic aspects of biodiesel production from tannery waste fats. *Journal of the American Leather Chemists Association*, 2010, roč. 105, č. 10, s. 327-333. ISSN 0002-9726.
- [C2] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, BAŘINOVÁ, Michaela, ŠÁNEK, Lubomír. HIGH QUALITY BIODIESEL AND GLYCERIN FROM FLESHINGS. *Journal of the American Leather Chemists Association*, 2012, roč. 107, č. 10, s. 312-322. ISSN 0002-9726.
- [C3] PECHA, Jiří, FÜRST, Tomáš, KOLOMAZNÍK, Karel, FRIEBROVÁ, Veronika, SVOBODA, Petr. Protein biostimulant foliar uptake modeling: The impact of climatic conditions. *AIChE Journal*, 2012, roč. 58, č. 7, s. 2010-2019. ISSN 0001-1541.
- [C4] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, FRIEBROVÁ, Veronika, JANÁČOVÁ, Dagmar, VAŠEK, Vladimír. Diffusion of biostimulators into plant tissues. *Heat and Mass Transfer: Waerme- und Stoffuebertragung*, 2012, roč. 48, č. 9, s. 1505-1512. ISSN 0947-7411.
- [C5] BELTRÁN PRIETO, Juan Carlos, PECHA, Jiří, KAŠPÁRKOVÁ, Věra, KOLOMAZNÍK, Karel. Development of an HPLC method for the determination of glycerol oxidation products. *Journal of Liquid Chromatography & Related Technologies*, 2013, roč. 36, č. 19, s. 2758-2773. ISSN 1082-6076.
- [C6] BELTRÁN PRIETO, Juan Carlos, KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří. A Review of Catalytic Systems for Glycerol Oxidation: Alternatives for

Waste Valorization. *Australian Journal of Chemistry*, 2013, roč. 2013, 66, č. 5, s. 511-521. ISSN 0004-9425.

- [C7] ŠÁNEK, Lubomír, PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Simultaneous determination of main reaction components in the reaction mixture during biodiesel production. *Journal of Separation Science*, 2013, roč. 36, č. 6, s. 1029-1036. ISSN 1615-9306
- [C8] ŠÁNEK, Lubomír, PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, BAŘINOVÁ, Michaela. Biodiesel production from tannery fleshings: Feedstock pretreatment and process modeling. *Fuel*, 2015, roč. 148, s. 16-24. ISSN 0016-2361.
- [C9] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, FÜRST, Tomáš, KOLOMAZNÍK, Karel. A kinetics study of the simultaneous methanolysis and hydrolysis of triglycerides. *Chemical Engineering Journal*, 2016, roč. 288, s. 680-688. ISSN 1385-8947.
- [C10] ŠÁNEK, Lubomír, PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, BAŘINOVÁ, Michaela. Pilot-scale production of biodiesel from waste fats and oils using tetramethylammonium hydroxide. *Waste Management*, 2016, roč. 48, s. 630-637. ISSN 0956-053X.

D. Původní vědecké články v recenzovaném časopise indexovaném v databázi SCOPUS

- [D1] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, BAŘINOVÁ, Michaela, ŠÁNEK, Lubomír, FÜRST, Tomáš, JANÁČOVÁ, Dagmar. Potential of tannery fleshings in biodiesel production and mathematical modeling of the fleshing pre-treatment. *International Journal of Mathematics and Computers in Simulations*, 2012, roč. 6, č. 5, s. 456-464. ISSN 1998-0159.
- [D2] BAŘINOVÁ, Michaela, KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, HALAMKA, Petr, VAŠEK, Vladimír. Mathematical description of sodium chloride diffusion and its practical impact on the processing of animal fleshings. *International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2013, roč. 7, č. 7, s. 692-699. ISSN 1998-0140.
- [D3] BAŘINOVÁ, Michaela, PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Mathematical model of protein sorption and evaluation of its validity in deproteination of chrome-tanned wastes. *International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2014, roč. 8, č. 1, s. 281-290. ISSN 1998-0140.

- [D4] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, JELÍNEK, Miloš, HUSÁR, Jakub, KOLOMAZNÍK, Karel. Mathematical Modelling of a Process-Economic of Protein Hydrolyzate Production from Lupine Flour. *WSEAS Transactions on Applied and Theoretical Mechanics*, 2019, roč. 14, s. 164-172. ISSN 1991-8747.
- [D5] MATUŠINEC, Josef, HRABEC, Dušan, ŠOMPLÁK, Radovan, NEVRLÝ, Vlastimír, PECHA, Jiří, SMEJKALOVÁ, Veronika, REDUTSKIY, Yury. Cooking oil and fat waste management: A review of the current state. *Chemical Engineering Transactions*, 2020, roč. 81, s. 763-768. ISSN 2283-9216.

E. Původní vědecké články ve světovém jazyce v ostatních vědeckých a odborných časopisech, které nejsou indexovány v databázi WoS ani SCOPUS

- [E1] BELTRÁN PRIETO, Juan Carlos, SLAVÍK, Roman, KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří. Evaluation of Kinetics and Reaction Mechanism of Partial Oxidation of Glycerol. *International Journal of Automation and Power Engineering*, 2014, roč. Neuveden, č. 1, s. 72-75. ISSN 2161-5055.
- [E2] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří. Hygienic aspects of wearing shoes. *Health Education and Care*, 2017, roč. 2, č. 2, s. 1-4. ISSN 2398-8517.

G. Původní vědecké články ve sbornících, které jsou evidovány v databázi WoS nebo databázi SCOPUS

- [G1] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, JANÁČOVÁ, Dagmar, VAŠEK, Vladimír. Diffusion of Biostimulator in Curing Cultural Plants. In *Recent Researches in Energy & Environment*. Cambridge : WSEAS press, 2011, s. 32-34. ISSN 1792-8230. ISBN 978-960-474-274-5.
- [G2] HUSÁR, Jakub, PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Modelling and simulation of a triglyceride alcoholysis reaction. In *Proceedings - European Council for Modelling and Simulation, ECMS*. Madrid: European Council for Modelling and Simulation, 2019, ISSN 2522-2414

H. Původní vědecké články ve světovém jazyce ve sbornících z mezinárodních konferencí, které nejsou evidovány v databázi WoS ani v databázi SCOPUS

- [H1] KOLOMAZNÍK, Karel, UHLÍŘOVÁ, Michaela, VAŠEK, Vladimír, PECHA, Jiří. Low quality waste fats from tanneries as a valuable feedstock for biodiesel and glycerin production. In *1th International Leather*

Engineering Symposium "Leather Industry, Environment and Progressive Technologies". Izmir: Ege University, 2009, CD-ROM

- [H2] KOLOMAZNÍK, Karel, UHLÍŘOVÁ, Michaela, PECHA, Jiří. High quality biodiesel and glycerin from acid waste fats. In *R'09 Twin World Congress Resource Management and Technology for Material and Energy Efficiency*. St.Gallen: Empa Materials Science and Technology, 2009, s. CD ROM. ISBN 978-3-905594-54-6.
- [H3] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, BAŘINOVÁ, Michaela, JANÁČOVÁ, Dagmar. Mathematical modeling of waste fat pre-treatment for biodiesel production. In *Proceedings of the 14th WSEAS International Conference on Mathematical Methods, computational Techniques and Intelligent Systems*. Faro: WSEAS Press (PT), 2012, s. 256-260. ISSN 2227-4588. ISBN 978-1-61804-106-7.
- [H4] BELTRÁN PRIETO, Juan Carlos, PECHA, Jiří, KAŠPÁRKOVÁ, Věra, KOLOMAZNÍK, Karel. Determination of glycerol derivatives by High-Performance Liquid Chromatography. In *Advances in Environment, Biotechnology and Biomedicine*. Praha: WSEAS Press, 2012, s. 47-52. ISBN 978-1-61804-122-7.
- [H5] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, BAŘINOVÁ, Michaela, VAŠEK, Vladimír, HALAMKA, Petr. Modeling of Sodium Chloride Transport in the Hides and Its Application in the Desalting of Fleshings. In *Recent Researches in Mechanical Engineering, Proceedings of the 10th WSEAS International Conference on Heat and Mass Transfer*. Florence: WSEAS Press, 2013, s. 173-177. ISBN 978-1-61804-153-1.
- [H6] BAŘINOVÁ, Michaela, PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Modeling of protein sorption on chromium sludge as a tool for optimization of its deproteination. In *Latest Trends on Systems. Volume II*. Rhodes: Europment, 2014, s. 594-598. ISSN 1790-5117. ISBN 978-1-61804-244-6.
- [H7] PECHA, Jiří, HUSÁR, Jakub, MILOŠ, Jelínek, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Optimization of lupine hydrolyzate separation. In *MATEC Web of Conferences*. Les Ulis: EDP Sciences, 2019, ISSN 2261-236X.
- [H8] HUSÁR, Jakub, PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Modelling of the kinetics of transesterification reaction of rapeseed oil with different reactant dosing procedures. In *MATEC Web of Conferences*. Les Ulis: EDP Sciences, 2019, ISSN 2261-236X.

- [H9] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, MILOŠ, Jelínek, HUSÁR, Jakub, KOLOMAZNÍK, Karel. Design and development of a process-economic mathematical model of a lupine hydrolysis unit. In *MATEC Web of Conferences*. Les Ulis: EDP Sciences, 2019, ISSN 2261-236X
- [H10] ŠÁNEK, Lubomír, PECHA, Jiří, HUSÁR, Jakub, KOLOMAZNÍK, Karel. Mathematical modeling of transesterification process kinetics of triglycerides catalyzed by TMAH. In *MATEC Web of Conferences*. Les Ulis: EDP Sciences, 2019, ISSN 2261-236X.

I. Původní vědecké články ve sbornících ostatních konferencí v ostatních jazycích

- [I1] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, BĚLOHLAV, Zdeněk, JANÁČOVÁ, Dagmar, VAŠEK, Vladimír. Potenciální možnosti výroby bionafty z odpadních kyselých tuků a olejů. In *Sborník CHISA 2009*. Praha: Česká společnost chemického inženýrství, 2009, s. 5-10. ISBN 978-80-86059-51-8.
- [I2] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, BĚLOHLAV, Jiří. Využití koželužských odpadních tuků k výrobě bionafty a bioplynu. In *Aprochem 2009*. Praha: Český svaz vědeckotechnologických společností, 2009, s. 3417-3421. ISBN 978-80-02-02111-7
- [I3] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří. Možnosti využití odpadních tuků a olejů pro výrobu bionafty. In *Sborník přednášek a bulletin kongresu a výstavy Odpady – Luhačovice 2010*. 1. vyd. Luhačovice: Joga Luhačovice, 2010. s. 184–189. ISBN 978-80-904356-2-9
- [I4] FRIEBROVÁ, Veronika, KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří. Využití kolagenových odpadů pro výrobu induktorů rezistence kulturních rostlin. Odpadové fórum 13. - 15. dubna 2011, Kouty nad Desnou.
- [I5] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, BAŘINOVÁ, Michaela. Biodiesel from waste fat generated by the tanning industry. In *Proceedings of the 4th International Conference on Chemical Technology*. Praha: Czech Society of Industrial Chemistry, 2016, s. 114-119. ISSN 2336-811X. ISBN 978-80-86238-94-4.
- [I6] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří. Recycling of Natural Polymer Wastes. In *Book of Abstracts 9th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON FEEDSTOCK RECYCLING OF POLYMERIC MATERIALS*. Ostrava: VSB-Technical University of Ostrava, 2017, s. 15-16. ISBN 978-80-248-4057-4.

J. Patenty

- [J1] Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. *Způsob deproteinizace odpadních tuků a olejů*. Původci: KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, VAŠEK, Vladimír, FRIEBROVÁ, Veronika, PODZIMEK, Petr. Česká republika, patentový spis č. 303310. 13. 6. 2012
- [J2] Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. *Katalyzátor bazicky katalyzovaných reakcí a jeho použití*. Původci: KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, BAŘINOVÁ, Michaela, VAŠEK, Vladimír. Česká republika, patentový spis č. 304443. 26. 3. 2014
- [J3] Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. *METHOD FOR DEPROTEINIZATION OF WASTE FATS AND OILS*. Původci: KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, VAŠEK, Vladimír, FRIEBROVÁ, Veronika, PODZIMEK, Petr. Mezinárodní - EPO, patentový spis č. EP 2744351. 9. 12. 2015
- [J4] Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. *Optimalizovaný způsob předúpravy kyselých odpadních tuků a olejů*. Původci: KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, VAŠEK, Vladimír. Česká republika, patentový spis č. 305933. 30.3.2016
- [J5] C2P s.r.o. *Způsob výroby hydrolyzátu kvasničné bílkoviny*. Původci: HROMÁDKA, Róbert, KOLOMAZNÍK, Karel, JELÍNEK, Miloš, PECHA, Jiří, ŠANDRÍKOVÁ, Viera. Česká republika, patentový spis č. 306184. 3. 8. 2016
- [J6] C2P s.r.o. *Potravní kvasničný doplněk a způsob jeho výroby*. Původci: HROMÁDKA, Róbert, KOLOMAZNÍK, Karel, JELÍNEK, Miloš, PECHA, Jiří, ŠANDRÍKOVÁ, Viera. Česká republika, patentový spis č. 306270. 29. 9. 2016
- [J7] C2P s.r.o. *Potravní kvasničný doplněk a způsob jeho výroby*. Původci: HROMÁDKA, Róbert, KOLOMAZNÍK, Karel, JELÍNEK, Miloš, PECHA, Jiří, ŠANDRÍKOVÁ, Viera. Česká republika, patentový spis č. 306272. 29. 9. 2016
- [J8] C2P s.r.o. *Potravní kvasničný doplněk a způsob jeho výroby*. Původci: HROMÁDKA, Róbert, KOLOMAZNÍK, Karel, JELÍNEK, Miloš, PECHA, Jiří, ŠANDRÍKOVÁ, Viera. Česká republika, patentový spis č. 306271. 9. 11. 2016

K. Poloprovoz, ověřená technologie, prototyp

- [K1] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, ŠÁNEK, Lubomír, PLŠEK, Stanislav. Technologie výroby methylesterů z odpadních tuků a olejů. 2012 (Ověřená technologie)
- [K2] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Technologie výroby hnojiva TO Natural Nitrogen KE. 2015 (Ověřená technologie)
- [K3] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, ŠÁNEK, Lubomír. Technologie výroby pomocných přípravků. 2016 (Ověřená technologie)
- [K4] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Optimalizovaná technologie výroby pomocných přípravků. 2017 (Ověřená technologie)
- [K5] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, PAŠEK, Josef, HUSÁR, Jakub. Technologie zpracování keratinových odpadů. 2019 (Ověřená technologie)

L. Ostatní nepublikační (aplikované) výsledky (užitný vzor, průmyslový vzor, funkční vzorek, software, specializovaná mapa, metodika, databáze)

- [L1] C2P s.r.o. *Potravní kvasničný doplněk*. Původci: HROMÁDKA, Róbert, KOLOMAZNÍK, Karel, JELÍNEK, Miloš, PECHA, Jiří. Česká republika, užitný vzor č. 21894. 3. 3. 2011 (Užitný vzor)
- [L2] Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. *Emulzní reaktor*. Původci: KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, VAŠEK, Vladimír. Česká republika, užitný vzor č. 22804. 13. 5. 2011 (Užitný vzor)
- [L3] MARKUS LUPINUS s.r.o. *Potravní vlákninový doplněk*. Původci: JELÍNEK, Miloš, PECHA, Jiří, JELÍNEK, Jiří, HUBÁLOVSKÝ, Štěpán, KOLOMAZNÍK, Karel. Česká republika, užitný vzor č. 30718. 30. 5. 2017 (Užitný vzor)
- [L4] MARKUS LUPINUS s.r.o. *Potravní hydrolyzovaný doplněk*. Původci: JELÍNEK, Miloš, PECHA, Jiří, JELÍNEK, Jiří, HUBÁLOVSKÝ, Štěpán, KOLOMAZNÍK, Karel. Česká republika, užitný vzor č. 30719. 30. 5. 2017 (Užitný vzor)
- [L5] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, PLŠEK, Stanislav. Optimalizovaný systém předúpravy vstupních surovin. 2012 (Funkční vzorek)

- [L6] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, FÜRST, Tomáš. Software for simulation of fat deacidification by single contact extraction. 2011 (Software)
- [L7] FÜRST, Tomáš, PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Software for evaluation of triglyceride transesterification kinetics. 2011 (Software)
- [L8] PECHA, Jiří, FÜRST, Tomáš. Software pro vyhodnocení kinetických dat II - methanolýza a hydrolyza. 2014 (Software)
- [L9] PECHA, Jiří. TONNKEsim. 2015 (Software)
- [L10] ŽENČÁK, Pavel, FÜRST, Tomáš, PECHA, Jiří. Optimální řízení rozvozu a výroby. 2018 (Software)

N. Účelové publikace (disertační a habilitační práce)

- [N1] PECHA, Jiří. Kinetika transesterifikační reakce kyselých tuků a olejů pro výrobu bionafty. Praha, 2014. Disertační práce. Vysoká škola chemicko-technologická v Praze.

O. Projekty výzkumu a vývoje (s uvedením role ve výzkumném týmu)

Výzkumné projekty hrazené plně nebo částečně z veřejných zdrojů

- [O1] Modelování a řízení zpracovatelských procesů přírodních a syntetických polymerů. MŠMT, projekt č. MSM7088352102. 2006-2011 (účast od roku 2009, člen řešitelského týmu)
- [O2] Vývoj technologií a produktů mikrobiální biomasy jako zdroj hodnotných bílkovin a jejich hydrolyzátů. MPO, projekt č. FI-IM/195. 2008-2010 (účast od roku 2009, člen řešitelského týmu)
- [O3] Suchá fermentace biomasy a tříděného biodegradabilního odpadu s energetickým využitím bioplynu k výrobě elektrické energie. MPO, projekt č. FI-IM5/183. 2008-2010 (účast od roku 2009, člen řešitelského týmu)
- [O4] Biostimulátory a induktory rezistence biologického původu u obilovin a olejnin. Ministerstvo zemědělství, projekt č. QH72117. 2007-2011 (účast od roku 2009, člen řešitelského týmu)
- [O5] Centrum bezpečnostních, informačních a pokročilých technologií (CEBIA-Tech). MŠMT, projekt č. ED2.1.00/03.0089. 2011-2014 (člen řešitelského týmu)

- [O6] LIPIDIESEL - Adding value to lipid waste streams through a new production process for biodiesel. Eureka - Eurostars, projekt č. E!4829. (2009-2012) (člen řešitelského týmu)
- [O7] Rozvoj personálního zabezpečení vědecko-výzkumných činností Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně. MŠMT, projekt č. CZ.1.07/2.3.00/30.0035. 2013-2015 (člen řešitelského týmu)
- [O8] Optimalizace výrobních procesů firmy KVD. MPO - Inovační voucher (KVD spol. s r.o.). 2018 (odpovědný řešitel)
- [O9] Podpora udržitelnosti a rozvoje Centra bezpečnostních, informačních a pokročilých technologií (CEBIA-Tech). MŠMT, projekt č. LO1313. 2014-2019 (člen řešitelského týmu)
- [O10] Technologický projekt výroby organického dusíkatého hnojiva s biostimulačním účinkem. Zlínský kraj - Inovační voucher (ZDV Fryšták). 2019 (člen řešitelského týmu)
- [O11] Optimalizace spotřeby technologické vody, elektrické energie a tepla v procesech, v nichž se surová kůže mění na useň. MŠMT, projekt č. 8JCH1001. 2019-2020 (člen řešitelského týmu)
- [O12] Výzkum a vývoj procesů hydrolýzy mikrobiální biomasy pro přípravu komponent s vysokou biologickou hodnotou. MPO, projekt č. FV40233. 2019-2022 (zástupce vedoucího řešitelského týmu UTB)
- [O13] FERTI-MAIZE - Inovativní listové hnojivo pro kukuřici na bázi bílkovinných vedlejších produktů. MŠMT, INTER-EUREKA, projekt č. LTE219003 (E!12610). 2019-2022 (zástupce vedoucího řešitelského týmu UTB)
- Hrazené plně z neveřejných zdrojů (tzv. projekty smluvního výzkumu), uvedeny jen projekty, kde **objem finančních prostředků přesáhl 100 tis. Kč bez DPH**. Některé názvy projektů byly upraveny, neboť podléhají obchodnímu tajemství, je udán rok ukončení projektu*
- [O14] Vývoj pomocných látek I, 2011 (člen řešitelského týmu)
- [O15] Studium aplikačních vlastností pomocných látek, vývoj metod I, 2012 (člen řešitelského týmu)

- [O16] Studium aplikačních vlastností pomocných látek, vývoj metod II, 2013 (odpovědný řešitel)
- [O17] Studium aplikačních vlastností pomocných látek, vývoj metod III, 2013 (odpovědný řešitel)
- [O18] Vývoj technologie výroby doplňku krmiv s obsahem jódu, 2013 (odpovědný řešitel)
- [O19] Návrh využití odpadů - analýza ET1&ET2, 2013 (člen řešitelského týmu)
- [O20] Zpracování odpadů ET3, 2014 (člen řešitelského týmu)
- [O21] Testování metod pro určení aplikačních vlastností pomocných látek I, 2015 (odpovědný řešitel)
- [O22] Testování metod pro určení aplikačních vlastností pomocných látek II, 2015 (odpovědný řešitel)
- [O23] Čtvrtprovozní ověření technologie výroby pomocných látek, 2015 (odpovědný řešitel)
- [O24] Provozní testy zpracování odpadů, 2015 (odpovědný řešitel)
- [O25] Vývoj alternativních modifikátorů a jejich testování, 2015 (člen řešitelského týmu)
- [O26] Zpracování kolagenních odpadů - podklady pro provoz, 2016 (odpovědný řešitel)
- [O27] Testování metod pro určení aplikačních vlastností pomocných látek III - dlouhodobé testy, 2016 (odpovědný řešitel)
- [O28] Výzkum a vývoj vlastností obalů na bázi přírodních polymerů A, 2016 (odpovědný řešitel)
- [O29] Výzkum a vývoj vlastností obalů na bázi přírodních polymerů D, 2016 (odpovědný řešitel)
- [O30] Ověření technologie výroby pomocných látek, 2016 (odpovědný řešitel)
- [O31] Výzkum a vývoj vlastností obalů na bázi přírodních polymerů B, 2017 (odpovědný řešitel)

- [O32] Výzkum a vývoj vlastností obalů na bázi přírodních polymerů C, 2017 (odpovědný řešitel)
- [O33] Provozní testy a příprava vzorků - 7 navazujících projektů, 2017 (odpovědný řešitel)
- [O34] Stanovení kvalitativních parametrů pracovního prostředí, vývoj metod, 2017 (odpovědný řešitel)
- [O35] Návrh a vývoj zpracování keratinových odpadů, 2018 (odpovědný řešitel)
- [O36] Provozní testy a příprava vzorků II, 2018 (odpovědný řešitel)
- [O37] Vývoj a návrh nových pomocných látek, 2018 (odpovědný řešitel)
- [O38] Zavedení pomocných látek do maloobjemové výrobní praxe, 2018 (odpovědný řešitel)
- [O39] Zpracování odpadů koželužského průmyslu Vietnamu, 2019 (odpovědný řešitel)
- [O40] Vývoj akcelerované metody degradace, 2019 (odpovědný řešitel)
- [O41] Dlouhodobé průběžné testy pomocných látek, 2020 (odpovědný řešitel)
- [O42] Provozní testy a řízení výroby, 2020 (odpovědný řešitel)
- [O43] Využití odpadní syrovátky, 2020 (odpovědný řešitel)

Q. Další výsledky výzkumu a vývoje významné z hlediska uchazeče

Kategorie RIV V_{souhrn} - Souhrnná výzkumná zpráva

- [Q1] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, FRIEBROVÁ, Veronika. Stanovení metod pro vývoj pomocné látky. Devro s. r. o., 2012. 2. verze, 28 s.
- [Q2] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, FRIEBROVÁ, Veronika. Návrh a vývoj nové technologie přípravy krmných doplňků. Sabo Innovation, spol. s r. o., 2013. 1. verze, 44 s.

- [Q3] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří. Zpracování odpadů firmy Tonak ET1. Tonak, a.s., 2013. 1. verze, 23 s.
- [Q4] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, ŠÁNEK, Lubomír. Vývoj pomocných prostředků - predikce dlouhodobých vlastností. Devro s. r. o., 2013. 1. verze, 44 s.
- [Q5] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, FRIEBROVÁ, Veronika. Zpracování odpadů firmy Tonak ET2. Tonak a. s., 2013. 1. verze, 62 s.
- [Q6] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, BAŘINOVÁ, Michaela. Návrh a vývoj nové metody stabilizace. Devro s. r. o., 2013. 1. verze, 25 s.
- [Q7] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří. Specifické testy produktů zpracování odpadů. TONAK a.s., 2014. 1. verze, 31 s.
- [Q8] KOLOMAZNÍK, Karel, PECHA, Jiří, FRIEBROVÁ, Veronika. Zpracování odpadů ET3. TONAK, a.s., 2014. 1. verze, 80 s.
- [Q9] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Vývoj metody pro predikci degradace pomocných přípravků I. Devro s.r.o., 2015. 1.verze, 4 s.
- [Q10] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Vývoj metody pro predikci degradace pomocných přípravků II. Devro s.r.o., 2015. 1. verze, 23 s.
- [Q11] KOLOMAZNÍK, Karel, BAŘINOVÁ, Michaela, PECHA, Jiří, BELTRÁN PRIETO, Juan Carlos. Vývoj nových stabilizačních přípravků. Devro s.r.o., 2015. 1. verze, 48 s.
- [Q12] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Predikce expirační doby a průběhu degradace pomocných přípravků. Devro, s.r.o., 2016. 1. verze, 46 s.
- [Q13] KOCUREK, Pavel, PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Vývoj barevné směsi. Devro, s.r.o., 2016. 1. verze, 31 s.
- [Q14] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Technologie zpracování kolagenních odpadů. Tonak, a.s., 2016. 1. verze, 50 s.
- [Q15] ŠÁNEK, Lubomír, PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel. Výzkum senzorických vlastností. Devro, s.r.o. 2. verze, 41 s.

- [Q16] KOLOMAZNÍK, Karel, BELTRÁN PRIETO, Juan Carlos, PECHA, Jiří. Vývoj modifikace barevnosti produktů. Devro, s.r.o., 2017. 1. verze, 82 s.
- [Q17] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, KOLOMAZNÍK, Karel. Studie hygienických a aplikačních vlastností nových pomocných látek. Devro, s.r.o., 2017. 1. verze, 22 s.
- [Q18] PECHA, Jiří, PAŠEK, Josef, KOLOMAZNÍK, Karel, HUSÁR, Jakub, DVOŘÁK, Petr. Vývoj procesu pro zpracování keratinových i kolagenních odpadů. TONAK a.s., 2018. 4. verze, 27 s.
- [Q19] PECHA, Jiří, FÜRST, Tomáš, ŽENČÁK, Pavel, HUSÁR, Jakub. Optimalizace výrobních procesů. KVD spol. s r.o., 2018. 1. verze, 182 s.
- [Q20] PECHA, Jiří, KOLOMAZNÍK, Karel, ŠÁNEK, Lubomír, ACHBERGEROVÁ, Eva, HUSÁR, Jakub, HLÁVKA, Stanislav. Research of properties of new auxiliary agents. Devro s.r.o., 2018. 1. verze, 72 s.
- [Q21] PECHA, Jiří, ŠÁNEK, Lubomír, MIZERA, Aleš, HUSÁR, Jakub. Vývoj akcelerované metody degradace. Devro, s.r.o. Víchovská 830, 51401 Jilemnice, 2019. 1. verze, 58 s.

R. Významná ocenění získaná za výsledky ve vědecké a odborné činnosti

- [R1] **Werner von Siemens Excellence Award 2012** (2. až 3. místo) v kategorii „Nejvýznamnější výsledek v oblasti vývoje a inovací“ za návrh technologie pro komplexní zpracování koželužských tukových odpadů. Ocenění výzkumného týmu, hlavními autory jsou Karel Kolomazník a Jiří Pecha
- [R2] Zařazen do žebříčku časopisu **Forbes "30 pod 30"** (2014) mezi 5 talentovaných Čechů mladších 30 let působících v oblasti vědy a výzkumu
- [R3] **Bronzová Pamětní medaile Fakulty aplikované informatiky** za vědecko-výzkumnou činnost - spolupráce průmyslovými podniky (2016)

ODBORNÝ ŽIVOTOPIS AUTORA

Osobní a kontaktní údaje

Jméno a příjmení: Jiří Pecha
Datum narození: 15. 12. 1984
Kontaktní adresa: Nad Stráněmi 4511,
760 05 Zlín
Telefon: +420 57 603 5228
E-mail: pecha@utb.cz

Zaměstnání

01/2009 – dosud: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta aplikované informatiky, vědecko-výzkumný pracovník, zástupce vedoucího výzkumného týmu (od 2015)

Vzdělání

09/2010 – 02/2015: Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, obor Organická technologie, Ph.D.
09/2004 – 06/2009: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, obor Inženýrství polymerů, Bc. a Ing.

Pedagogická činnost

Přednášky: Modelování dynamických systémů (CZ/ENG) (od 2016)
Procesy v environmentálních technologiích (od 2019)
Semináře: Procesní inženýrství II (2008, 2015 – dosud)
Modelování dynamických systémů (2017 – 2019)
Procesy v technice budov (2016 – 2020)
Procesy v environmentálních technologiích (od 2019)

Tvůrčí a odborná činnost

Zástupce vedoucího výzkumného týmu (od 2015), odpovědný řešitel více než 35 výzkumných projektů pro průmysl (zahrnuje pouze projekty s rozpočtem vyšším než 100 tis. Kč bez DPH výhradně z neveřejných zdrojů), řešitel a spoluřešitel 13 grantových projektů, jak národních, tak i mezinárodních. Několik vyvinutých technologií bylo realizováno v praxi.

Autor a spoluautor více než 60 odborných textů, 8 patentů a 4 užitných vzorů.

Podrobný přehled tvůrčí a publikační činnosti viz předchozí kapitola "Přehled publikační aktivity autora"

Citační ohlas: 106 citací (dle WoS, bez autocitací)

H-index: 7 (dle WoS)

Vyznamenání a ocenění

Bronzová Pamětní medaile Fakulty aplikované informatiky za vědecko-výzkumnou činnost – spolupráci s průmyslovými podniky (2016)

Zařazen do žebříčku časopisu **Forbes "30 pod 30"** (2014) mezi 5 talentovaných Čechů mladších 30 let působících v oblasti vědy a výzkumu

Werner von Siemens Excellence Award 2012 (2. až 3. místo) v kategorii „Nejvýznamnější výsledek v oblasti vývoje a inovací“ za návrh technologie pro komplexní zpracování koželužských tukových odpadů. Ocenění výzkumného týmu, hlavními autory jsou Karel Kolomazník a Jiří Pecha

Ing. Jiří Pecha, Ph.D.

Matematické modelování a simulace recyklačních procesů

Mathematical modelling and simulation of recycling processes

Teze habilitační práce

Vydala Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně,
nám. T. G. Masaryka 5555, 760 01 Zlín.

Náklad: 50 výtisků

Sazba: Jiří Pecha

Publikace neprošla jazykovou ani redakční úpravou.

Rok vydání: 2021

Pořadí vydání: první

ISBN 978-80-7678-038-5