

Oponentský posudok dizertačnej práce

Názov: **Matematické modelovanie etanolýzy tukov a olejov**
Autor: **Ing. Jakub Husár**

Charakteristika práce

Predložená dizertačná práca je venovaná matematickému modelovaniu etanolýzy tukov a olejov s cieľom vytvoriť model etanolýzy zahŕňajúci aj vedľajšiu reakciu saponifikáciu. Tento model je následne využitý na simuláciu, optimalizáciu reakčných podmienok a návrh PID a MPC riadenia prietokového reaktora.

Aktuálnosť zvolenej témy

Téma predkladanej dizertačnej práce zameraná na modelovanie etanolýzy tukov a olejov a skúmanie možnosti riadenia tohto procesu je veľmi aktuálna, pretože modelovanie a riadenie procesu etanolýzy a výroby esterov mastných kyselín má veľký potenciál pri riešení problémov hľadania alternatívnych zdrojov energie a pri výrobe rozmanitých produktov potravinárskeho, farmaceutického a chemického priemyslu.

Analýza súčasného stavu skúmanej problematiky

Analýza súčasného stavu skúmanej problematiky, ktorá je opísaná v 2. kapitole práce, je spracovaná komplexne a opiera sa celkovo o 107 literárnych zdrojov. Z nich 31 odkazuje na publikácie z ostatných 10 rokov, ale len 9 zdrojov odkazuje na publikácie z ostatných 5 rokov, čo do určitej miery skresľuje analýzu súčasného stavu skúmanej problematiky.

Ciele dizertačnej práce a ich splnenie

Ciele dizertačnej práce sú sformulované v 3. kapitole. Tieto ciele vyplývajú z analýzy súčasného stavu skúmanej problematiky a jasne poukazujú na snahu vyriešiť dosiaľ neriešené resp. nepublikované problémy modelovania etanolýzy tukov a olejov vrátane vedľajšej reakcie saponifikácie a využitia navrhnutého modelu reakcie pre hľadanie optimálnych reakčných podmienok a návrhu riadenia etanolýzy v chemickom reaktore. Ciele dizertačnej práce majú široký rozsah a sú orientované do oblasti modelovania, experimentálnej identifikácie, optimalizácie, simulácie a riadenia procesov. Všetky vytyčené ciele dizertačnej práce boli splnené.

Metódy zvolené na dosiahnutie cieľov dizertačnej práce

Metódy zvolené na dosiahnutie cieľov dizertačnej práce sú spracované vo 4. kapitole, ktorá tvorí teoretický rámec práce. Matematické modelovanie etanolýzy v štyroch rôznych typoch reaktorov je riešené na základe opisu reakčnej kinetiky a materiálových bilancií reagujúcich zložiek. Na simuláciu kinetických modelov sú využité funkcie programového prostredia MATLAB a simulačného prostredia Simulink. Experimentálna identifikácia využíva laboratórne a poloprevádzkové experimenty. Získané experimentálne dáta sú vyhodnocované plynovou chromatografiou a novo navrhnutými analytickými metódami založenými na meraní indexu lomu, vodivosti a IČ spektroskopii s Fourierovou transformáciou (FTIR). Validácia navrhnutých modelov sa realizuje pomocou funkcií v programovom prostredí MATLAB. Na

riadenie chemického reaktora, v ktorom prebieha etanolýza, bolo zvolené konvenčné riadenie pomocou PID regulátorov a pokročilé MPC riadenie a na simuláciu riadenia sa využívajú funkcie v prostredí MATLAB-Simulink.

Zvolené metódy spracovania sú v súlade so stanovenými cieľmi a v súlade s aktuálnymi trendmi v oblasti modelovania, experimentálnej identifikácie, optimalizácie, simulácie a riadenia procesov. Dosiahnuté výsledky potvrdzujú správnosť zvolených prístupov a zvolených metód spracovania.

Hlavné výsledky dizertačnej práce

Hlavné autorom získané výsledky opisuje 5. kapitola práce. Tieto výsledky zahŕňajú návrh a validáciu kinetického modelu etanolýzy s určením číselných hodnôt parametrov pre výpočet rýchlostných konštánt. Bol navrhnutý originálny model etanolýzy zahŕňajúci aj saponifikáciu. Na základe simulácie a optimalizácie výrobného procesu autor vybral vhodný typ reaktora, optimálne reakčné podmienky a vhodnú akčnú veličinu na laboratórne a poloprevádzkové experimenty. Ďalej boli navrhnuté a overené tri metódy sledovania priebehu reakcie založené na meraní indexu lomu, vodivosti a IČ spektroskopie s Fourierovou transformáciou a detailne boli analyzované ich výhody, nevýhody a možnosti ich využitia pri on-line pri riadení procesu. Praktickým výsledkom je reálny prietokový chemický reaktor. Na základe vyhodnotenia na ňom realizovaných experimentov autor konštatuje vhodnosť použitia navrhnutého modelu. K výsledkom v oblasti riadenia procesov patria výsledky získané simuláciou PID riadenia a MPC riadenia bez uvažovania a aj s uvažovaním porúch v systéme.

Prínos výsledkov pre vedu a prax

Autorom získané výsledky sú prínosom pre vedu i prax. V oblasti modelovania autor navrhol a validoval model etanolýzy zahŕňajúci i saponifikáciu. Tento model je originálny a inými autormi dosiaľ nepublikovaný. Navrhnutý model je využiteľný pre ďalší výskum v oblasti optimalizácie reakčných podmienok a návrhu riadiacich systémov pre proces etanolýzy prebiehajúcich v rôznych typoch reaktorov. V oblasti experimentálnej identifikácie bola navrhnutá metóda zisťovania koncentrácie produktov etanolýzy založenú na meraní indexu lomu, ktorá je využiteľná pri ďalšom výskume kinetiky etanolýzy, a metóda infračervenej spektroskopie s Fourierovou transformáciou umožňujúca on-line monitorovanie priebehu reakcie, ktorá je využiteľná pri riadení reálnych procesov v praxi. V oblasti riadenia procesov autor navrhol a simulačne overil možnosti PID a MPC riadenia procesu etanolýzy v prietokovom chemickom reaktore, čo dáva základ pre reálne riadenie procesu v laboratórnych, poloprevádzkových a prevádzkových podmienkach.

Publikačná činnosť doktoranda

Ing. Husár je prvým autorom a spoluautorom 2 článkov v časopisoch patriacich do Q1 [P.1 a P.3] a spoluautorom 1 článku v časopise patriaceho do D1 [P.2]. Je spoluautorom článku v periodiku [P.4] a spoluautorom patentu [P7]. Je tiež spoluautorom 8 článkov v zborníkoch z konferencií, z toho dvakrát prvý autor, a spoluautorom 5 výskumných správ. Je prvým autorom článku odoslaného na publikovanie v časopise Q1 a pripravuje ďalšie 2 príspevky na odoslanie do časopisov Q1 a D1. Podieľal sa na vývoji 2 technológií.

Publikačná činnosť Ing. Husára je veľmi kvalitná a svedčí o význame výsledkov dosiahnutých autorom dizertačnej práce.

Formálna stránka dizertačnej práce

Po formálnej stránke je práca, ktorá má 139 strán vrátane príloh, členená na abstrakt v slovenskom a anglickom jazyku, 7 kapitol vrátane úvodu a záveru, zoznamy použitej literatúry, obrázkov, tabuliek, použitých skratiek, prílohy a životopis autora so zoznamom

publikovaných prác. Členenie práce je logické. Text, obrázky a tabuľky sú po formálnej stránke spracované na veľmi dobrej úrovni.

K formálnej stránke mám niekoľko pripomienok.

Do zoznamov v práci by bolo bývalo vhodné zaradiť aj zoznam použitých symbolov veličín aj s jednotkami, pretože niektoré symboly v práci nie sú vysvetlené alebo sú vysvetlené až v ďalšom texte, napr. E_A , T v rovniciach opisujúcich reakčné rýchlosti, τ v modeloch reaktorov. V práci napísanej v slovenskom jazyku sa vyskytuje niekoľko preklepov, nesprávne napísaných veľkých písmen, nesprávne alebo nespisovne použitých pojmov, napr. etyl ester, manuskript, dotaz, prietokový reaktor, odpadné oleje, vo vodnej lázni, nesprávne skloňovanie slov, napr. reaktor, vzorka. Uvedené nedostatky však neznižujú zrozumiteľnosť textu ani kvalitu obsahovej stránky práce.

Citácia literatúry [17], [18], [34], [52], [87], [105] je neúplná, v prípade literatúry [32], [33], [38], [39] by pomohlo uvedenie zdroja vo forme URL adresy.

Pripomienky a otázky k práci

K práci mám okrem už uvedenej analýzy niekoľko konkrétnych pripomienok a otázok.

- Autor sa pri uvádzaní matematických modelov reaktorov mohol zmieniť, prečo sú modely tvorené len materiálovými bilanciami a prečo netreba uvažovať tepelnú bilanciu reakčnej zmesi.
- V prílohe B tabuľky s váhovými koeficientami nemajú hlavičky. Toto ušetrenie jedného riadku je na úkor prehľadnosti, i keď je po prečítaní práce jasné, k čomu sú jednotlivé váhové koeficienty priradené.
- Z textu na str. 42 nie je jasné, aký model je reprezentovaný číslom 01 – 12. Na zistenie tejto skutočnosti je potrebné detailne pozrieť skripty modelov uvedených v prílohe A. Prehľadnosť textu by bola pomohla tabuľka, kde by bolo špecifikované, čím sa líšia modely 01 – 12.
- Konštatovanie „Tieto parametre boli použité na vykreslenie simulácie procesu“ na str. 42 nie je korektné, autor mal zrejme na mysli, že parametre boli použité na simuláciu procesu a vykreslenie výsledkov získaných simuláciou.
- Text v opisoch obrázkov: „Porovnanie Experimentálnych dát (body) so simuláciou modelu“ by bol správny v tvare: „Porovnanie experimentálnych dát (body) s dátami získanými simuláciou pomocou navrhnutého modelu“.
- Na str. 49 je uvedené: „Za účelom zistenia závislosti prietoku reakčnej zmesi na konverzii bola vypracovaná statická charakteristiku na obr. 5.7“. Obr. 5.7 však prezentuje závislosť konverzie od prietoku.
- Na obr. 5.28 a ani v texte k obrázku nie je uvedený význam červenej, modrej a zelenej farby použitej na vykreslenie kriviek a dát.
- Na str. 14 sa uvádza: „Slabý výkon PID regulátorov pri aplikácii na nelineárne systémy spoločne s vývojom pokročilých algoritmov riadenia procesov viedli k nahradeniu PID regulátorov modernejšími spôsobmi riadenia“. Mohli by ste špecifikovať, čo rozumiete pod pojmom „slabý výkon PID regulátora“?
- Z akého dôvodu sa pri modelovaní prietokového reaktora (kap. 4.1.3 tab. 4.1, kap. 4.1.4 tab. 4.2) predpokladala určitá koncentrácia mydlovej zložky vo vstupnom prúde reakčnej zmesi?
- Navrhnutý model etanolýzy a saponifikácie bol získaný na základe experimentálnych dát v rozsahu teplôt 40 - 60 °C a koncentrácie katalyzátora 0.05 - 0.20 mmol/g NaOH. Simulačne boli získané optimalizované podmienky 70 °C, 0.05 mmol/g NaOH. Nebolo možné tieto podmienky overiť aj experimentálne?
- Prečo je koncentrácia mydla (c_{SOAP}) v obr. 5.5 bezrozmerná veličina?

- V texte na str. 64 je konštatované: „Kvôli obmedzenému počtu referenčných analýz GC, v porovnaní s počtom FTIR spektier, bola použitá interpolácia pomocou mechanizmu reakčnej kinetiky n-tého rádu, ako je ilustrované na Obr. 5.20.“ Mohli by ste detailnejšie vysvetliť postup pri interpolácii pomocou mechanizmu reakčnej kinetiky n-tého rádu?
- Pri simulácii riadenia etanolýzy v prietokovom reaktore pomocou PID regulátorov a aj pomocou MPC boli položené nasledovné požiadavky na riadenie: „(a) vysoká rýchlosť odozvy a veľká robustnosť, (b) nižšia robustnosť a rýchla odozva, a (c) agresívne riadenie s pomalšou odozvou.“ Ako sú tieto požiadavky reprezentované konkrétnymi číselnými hodnotami parametrov regulátorov? Prácu by bolo bývalo vhodné doplniť napr. tabuľkami s číselnými hodnotami parametrov regulátorov alebo s číselnými hodnotami parametrov použitých pri nastavovaní regulátorov.
- Výsledky riadenia reaktora sú spracované slovným opisom. Na posúdenie kvality riadenia existujú exaktné ukazovatele kvality. Na porovnanie PID a MPC riadenie by bolo bývalo vhodné použiť niektoré z týchto ukazovateľov kvality. Vedeli by ste niektoré špecifikovať?

Záverečné konštatovanie

Autor preukázal svojou prácou spôsobilosť tvorivo pracovať. Predložená dizertačná práca spĺňa požiadavky kladené na práce tohto druhu. Ciele dizertačnej práce považujem za splnené. Dizertačnú prácu odporúčam na obhajobu.

V Bratislave 17.09.2024

Oponentský posudek

Autor disertační práce: Ing. Jakub Husár

Název disertační práce: Matematické modelovanie etanolýzy tukov a olejov

Školitel: doc. Ing. Jiří Pecha, Ph.D.

Oponent: doc. Ing. Pavel Hrnčířík, Ph.D.

Předložená disertační práce se věnuje vysoce aktuálnímu tématu matematického modelování etanolýzy tuků a olejů, včetně zahrnutí klíčového vlivu vedlejší reakce – saponifikace, které nebyla v dosud publikovaných modelech věnována odpovídající pozornost. V rámci řešení byl navržen a validován kvantitativní matematický model procesu dosahující velmi dobrých výsledků ve smyslu odchylky od experimentálních dat. Následně byl tento model využit pro simulační účely, zejména pak pro optimalizaci a řízení daného procesu (PID a MPC regulace).

Použité vědecké metody zpracování jsou na vysoké odborné úrovni a plně odpovídají stanoveným cílům disertační práce. Na velmi dobré úrovni je i formální úprava textu práce. V návaznosti na výše uvedené **DOPORUČUJI** doktorandem Ing. Jakubem Husárem předloženou disertační práci k obhajobě.

Připomínky a náměty k diskuzi v rámci obhajoby práce:

1. Na straně 34 je uvedena nepříliš srozumitelná věta týkající se koeficientu determinace R^2 : „Avšak v praxi, R^2 môže byť aj negatívny, ak je model horší než priemer hodnôt závislej premennej.“ Co je myšleno termínem, že R^2 může být i „negativní“?
2. Str. 36 a poté implementace na str. 78: V případě v práci použitého PID regulátoru nejsou v textu uvedeny hodnoty konstant regulátoru a jeho další parametry (např. parametry filtru). Bylo v rámci studie zvažováno také použití PI regulátoru jako jednodušší alternativy k PID? Lze v této souvislosti konkrétněji diskutovat přínosy (i možné nevýhody) D složky nasazeného PID regulátoru pro kvalitu výsledné regulace?
3. Str. 38 a 78: Jak byla ověřována stabilita systému?
4. Str. 39: Bylo by možné v rámci simulační studie MPC regulace uvažovat i nějakou vhodnou měřenou poruchu, která by mohla přispět k zvýšení kvality MPC regulace? Např. variabilitu v průtoku V2 či složení - obojí je sice v modelu uvažováno konstantní, platí to ale i pro reálnou praxi?
5. Str. 70-71: Metoda PLS (partial least squares) je zde porovnávána s MLR (multiple linear regression) - je ale možné považovat použité vstupní veličiny za lineárně nezávislé, resp. jejich vzájemné závislosti zanedbat? V rámci spektrálních dat tyto vzájemné závislosti mohou být obecně zanedbatelné, z textu přitom nevyplývá, že by byla taková analýza provedena. Bylo by možné pro daný konkrétní případ uvažovat (v případě korelovanosti vstupů) o dalších vhodných metodách (např. ridge regression nebo PCR (principle component regression)) jako možných alternativách k PLS a MLR?
6. Str. 78-79: Pracovní body, ve kterých byla provedena linearizace pro potřeby nastavení PID a MPC regulátorů nejsou v textu bohužel explicitně popsány, chybí zde konkrétní číselné údaje.
7. Str. 87: Autor konstatuje, že oproti publikovaným výsledkům obdobných studií, v rámci popisované simulační studie nebyla MPC regulace výrazně lepší než PID. Toto zjištění by zasloužilo podrobnější analýzu a diskuzi. V této souvislosti je také třeba zmínit, že v tomto

případě nebyl plně využit potenciál MPC regulace (absence signálu měřené poruchy, absence signálu budoucího (plánovaného) průběhu žádané hodnoty). MPC regulátor realizovaný MPC blokem v Simulinku zde tak fakticky fungoval pouze jako alternativní zpětnovazební regulátor s modelem, bez plného využití všech možností MPC regulace.

V Praze dne 16. září 2024

doc. Ing. Pavel Hrnčířík, Ph.D.

Posudek disertační práce

Název práce: Matematické modelovanie etanolýzy tukov a olejov

Doktorand: Ing. Jakub Husár
Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta aplikované informatiky

Obor: Automatické řízení a informatika

Školitel: doc. Ing. Jiří Pecha, Ph.D.
Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta aplikované informatiky

Konzultant: prof. Ing. Karel Kolomazník, DrSc.
Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta aplikované informatiky

Oponent: prof. Ing. Marek Kubalčík, Ph.D.
Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta aplikované informatiky

Předložená dizertační práce se zabývá vysoce aktuálním tématem matematického modelování etanolýzy tuků a olejů. Téma je velmi aktuální zejména v kontextu klimatických změn, nedávné globální energetické krize a žádoucí transformace na nízkouhlíkovou ekonomiku.

Po zmapování současného stavu v oblasti modelování a řízení výroby esterů mastných kyselin si disertační práce klade šest hlavních dílčích cílů: návrh modelu pro kvantitativní popis reakčního systému založený na studiu reakcí probíhajících při etanolýze, experimentální identifikace - naměření kinetických dat etanolýzy, validace navrženého modelu zahrnujícího saponifikaci, optimalizace reakčních podmínek pomocí modelu, simulace výrobního procesu v průmyslovém typu reaktoru, zhodnocení a ověření možnosti sledování průběhu reakce, posouzení aplikace získaných poznatků pro řízení reesterifikačního reaktoru.

Disertant navrhl komplexní matematický model procesu a následně tento model verifikoval na základě naměřených experimentálních dat. Prezentované výsledky potvrzují vhodnost vyvinutého matematického modelu pro popis procesu etanolýzy. S využitím navrženého modelu potom simuloval řízení procesu v prostředí Matlab/Simulink pomocí PID regulátoru a prediktivního regulátoru. Prokázal možnost řízení procesu etanolýzy těmito regulátory dle požadavků standardně kladených na řízení takových procesů. Použité metody a postupy odpovídají dané problematice a cílům disertační práce. Je možno konstatovat, že stanovené cíle práce byly splněny. Závěr práce také obsahuje představu autora o rozvoji

tématu disertační práce v dalším výzkumu. Disertační práce je psána přehledně a srozumitelně, jednotlivé kapitoly na sebe logicky navazují a svým obsahem jsou vyvážené. Formální úprava práce včetně vložených obrázků je na vysoké úrovni.

V seznamu publikací disertanta jsou uvedeny celkem tři publikace v impaktovaných časopisech indexovaných v databázi Web of Science a jedna publikace v časopise indexovaném v databázi SCOPUS, dále potom osm publikací ve sbornících konferencí evidovaných v databázi SCOPUS. Disertant je také spoluautorem dvou poloprovozů a jednoho patentu. Publikační aktivity studenta jsou na velmi dobré úrovni.

Otázky a náměty do diskuse:

1. Model procesu byl navržen jako systém se dvěma vstupy a jedním výstupem. Řízení procesu však bylo simulováno pouze jako řízení systému s jedním vstupem a jedním výstupem, kdy jeden vstup byl nastaven jako konstantní. Proč jste tedy řízení nenavrhoval a nesimuloval jako řízení systému se dvěma vstupy a jedním výstupem?
2. Pro realizaci dynamických systémů popsaných soustavou diferenciálních rovnic prvního řádu v prostředí Matlab/Simulink se standardně používá S-funkce, která umožňuje modelovat rovněž dynamiku stavů systému. Vy jste dynamický systém realizoval jako M-funkci, která je pouze vstupně-výstupní bez možnosti modelovat stavy a za blok reprezentující systém jste zařadil integrátor. Věděl jste o možnosti realizace bloků pomocí S-funkce? Pokud ano, proč jste tento přístup nezvolil?
3. Proč v práci nejsou uvedeny modely, na základě kterých nástroje PID designer a MPC designer provedly návrhy regulátorů?
4. Prediktivní regulátor je regulátor diskrétní. Jaká byla perioda vzorkování při řízení? Délky predikčního a řídicího horizontu uvádíte pouze v časových jednotkách, není tedy zřejmý počet vzorkovacích kroků jednotlivých horizontů. Byly délky horizontů nastaveny automaticky nástrojem MPC designer nebo jste je volil?
5. Zahrnovalo řešení optimalizační úlohy u prediktivního řízení omezení akční veličiny? V simulačním schématu s prediktivním regulátorem máte blok pro saturaci akční veličiny, který by tam při správném fungování prediktivního řízení se zahrnutím omezení do optimalizační úlohy nemusel být. Jakým způsobem řeší nástroj MPC designer optimalizaci?

Výsledky prezentované v předložené disertační práci Ing. Jakuba Husára, jakož i rozsah a kvalita jeho publikační činnosti potvrzují jeho velmi dobrou odbornou a vědeckou úroveň. Předložená disertační práce splňuje všechny požadavky kladené na tyto práce a přináší nové poznatky.

Disertační práci doporučuji k obhajobě a po úspěšné obhajobě doporučuji udělit Ing. Jakubu Husárovi titul Ph.D.

Ve Zlíně, 12. 9. 2024

prof. Ing. Marek Kubačík, Ph.D.