

ТЕХНОЛОШКО-МЕТАЛУРШКИ
ФАКУЛТЕТ
35/11
(Број захтева)

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ВЕЋЕ НАУЧНИХ ОБЛАСТИ ТЕХНИЧКИХ НАУКА
(Назив већа научне области и коме се захтев упућује)

29.01.2016.
(Датум)

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на предлог теме докторске дисертације

Молимо да, сходно члану 46. ст. 5. тач. 3. Статута Универзитета у Београду („Гласник Универзитета“, број 131/06), дате сагласност на предлог теме докторске дисертације:

„Периодичне операције-евалуација и анализа применом методе нелинераног фреквентног одзива“

„Forced periodically operated chemical reactors-evaluation and analysis by the nonlinear frequency response method

(пун назив предложене теме докторске дисертације)

НАУЧНА ОБЛАСТ: **ХЕМИЈА И ХЕМИЈСКА ТЕХНОЛОГИЈА**

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ:

1. Име, име једног од родитеља и презиме кандидата:

ДАЛИБОРКА (Слободан)) НИКОЛИЋ ПАУНИЋ, дипл. инж.

2. Назив и седиште факултета на коме је стекао високо образовање: **Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет**

3. Година дипломирања: **2003.**

4. Назив магистарске тезе кандидата: /

Студент је уписан на докторске студије шк. 2005/2006. године.

5. Назив факултета на коме је магистарска теза одбрањена: /

6. Година одбране магистарске тезе: /

Обавештавамо Вас да је **Наставно-научно веће,**
(назив надлежног тела Факултета)

на седници одржаној **28.01.2016. године** размотрило предложену тему и закључило да је тема подобна за израду докторске дисертације.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

ДП

На основу чл. 128. Закона о високом образовању и чл. 129. Статута ТМФ-а, на седници Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета од 28.01.2016. године, донета је

О Д Л У К А
о прихватању Реферата Комисије за оцену подобности теме и кандидата
за израду докторске дисертације

1. Прихвата се Реферат Комисије за оцену подобности теме и кандидата и одобрава израда докторске дисертације **ДАЛИБОРКЕ НИКОЛИЋ-ПАУНИЋ**, дипл. инж., под називом на српском и енглеском језику:

„Периодичне операције-евалуација и анализа применом методе нелинераног фреквентног одзива“

„Forced periodically operated chemical reactors-evaluation and analysis by the nonlinear frequency response method“.

Одобрава се докторанду да докторски рад пише се на енглеском језику.

За ментора се одређује **др Менка Петковска**, редовни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет.

2. Ставља се ван снаге Одлука Наставно-научног већа Факултета број 35/334 од 26.10.2012. године којом је одобрена тема за израду докторске дисертације Далиборке Николић-Паунић под називом наведеним у овој Одлуци под 1 на српском језику.

3. Предлаже се Већу научних области техничких наука Универзитета у Београду да стави ван снаге Одлуку 02 број 06-21043/16-12 од 19.11.2012. године којом је дата сагласност на предлог теме докторске дисертације на српском језику и донесе нову одлуку о давању сагласности на предлог теме на српском и на енглеском језику

Одлуку доставити: Универзитету у Београду на сагласност, кандидату, ментору, Служби за наставно студентске послове и архиви Факултета.

Д Е К А Н

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ

за кандидата Далиборку Николић-Паунић

Име и презиме ментора: Менка Петковска

Звање: Редовни професор

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. Petkovska M. and Do D.D., "Nonlinear frequency response of adsorption systems: Isothermal batch and continuous flow adsorber", *Chem. Eng. Sci.*, 53 (1998), 3081-3097, ISSN 0009-2509, IF 0.998
2. Petkovska, M., Markovic A., „Fast Estimation of Quasi-Steady States of Cyclic Nonlinear Processes Based on Higher-Order Frequency Response Functions. Case Study: Cyclic Operation of an Adsorption Column“, *Ind. Eng. Chem. Res.* 45 (2006), 266-291, ISSN 0888-5885, IF 1.518
3. Ilić, M., Petkovska, M., Seidel-Morgenstern, A., "Estimation of single solute adsorption isotherms applying the nonlinear frequency response method using non-optimal frequencies", *Journal of Chromatography A* 1200 (2008), 183-192, ISSN 0021-9673, IF 3.758
4. Vidaković-Koch, T.R., Panić, V.V., Andrić, M., Petkovska, M., Sundmacher, K., "Nonlinear frequency response analysis of the ferrocyanide oxidation kinetics. Part I. A theoretical analysis", *Journal of Physical Chemistry C*, 115 (2011), 17341-17351. ISSN 1932-7447, IF 5.049
5. Petkovska, M., Marković, A., Lazar, M., Seidel-Morgenstern, A., "Investigation of gas transport through porous membranes based on nonlinear frequency response analysis", *Adsorption*, 17 (2011), 75-91, ISSN 0929-5607, IF 2.215

Заокружити одговарајућу опцију (А, Б, В или Г):

А) У случају менторства дисертације на докторским студијама у групацији техничкотехнолошких, природно-математичких и медицинских наука ментор треба да има најмање три рада са SCI, SSCI, AHCI или SCIE листе, као и Math-Net.Ru листе.

Б) У случају менторства дисертације на докторским студијама у групацији друштвено-хуманистичких наука ментор треба да има најмање три рада са релевантне листе научних часописа (Релевантна листа научних часописа обухвата SCI, SSCI, AHCI и SCIE листе, као и ERIH листу, листу часописа које је Министарство за науку класификовало као M24 и додатну листу часописа коју ће, на предлог универзитета, донети Национални савет за високо образовање. Посебно

се вреднују и монографије које Министарство науке класификује као M11, M12, M13, M14, M41 и M51.)

В) У случају израде докторске дисертације према ранијим прописима за кандидате који су стекли академски назив магистра наука ментор треба да има пет радова (референци) које га, по оцени Већа научних области, квалификују за ментора односне дисертације.

Г) У случају да у ужој научној области нема квалификованих наставника, приложити одлуку Већа докторских студија о именовању редовног професора за ментора.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Датум: 18.01.2016.

М.П.

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

NASTAVNO – NAUČNOM VEĆU

Predmet: Podobnost teme i kandidata Daliborke Nikolić Paunić za izradu doktorske disertacije

**PERIODIČNE OPERACIJE HEMIJSKIH REAKTORA – EVALUACIJA I ANALIZA
PRIMENOM METODE NELINEARNOG FREKVENTNOG ODZIVA
(FORCED PERIODICALLY OPERATED CHEMICAL REACTORS – EVALUATION
AND ANALYSIS BY THE NONLINEAR FREQUENCY RESPONSE METHOD)**

Odlukom br. 35/319 od 20.09.2012. godine, imenovali smo članove Komisije za ocenu i podobnosti teme i kandidata Daliborke Nikolić Paunić za izradu doktorske disertacije i naučne zasnovanosti teme

**PERIODIČNE OPERACIJE HEMIJSKIH REAKTORA – EVALUACIJA I ANALIZA
PRIMENOM METODE NELINEARNOG FREKVENTNOG ODZIVA
(FORCED PERIODICALLY OPERATED CHEMICAL REACTORS – EVALUATION
AND ANALYSIS BY THE NONLINEAR FREQUENCY RESPONSE METHOD)**

Na osnovu materijala priloženog uz Zahtev kandidata, Komisija podnosi sledeći

R E F E R A T

1. Podaci o kandidatu

1.1. Biografski podaci

Daliborka Nikolić Paunić, dipl. inž. tehnologije, rođena je 12. aprila 1978. godine u Beogradu. Osnovnu školu i Petu beogradsku gimnaziju završila je odličnim uspehom u Beogradu. Diplomirala je na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu na Katedri za hemijsko-inženjerstvo 2003. godine. Odbranila je diplomski rad na temu „*Teorijska analiza nelinearnog frekventnog odziva hromatografske kolene za slučaj binarne adsorpcije*“. Prosečna ocena u toku osnovnih studija je 9,24. Govori, čita i piše engleski jezik.

Od februara 2005. do decembra 2005. godine bila je zaposlena u Gradskoj upravi grada Beograda, u Upravi za vode Sekretarijata za komunalno-stambene poslove, na poslovima zaštite i praćenja kvaliteta voda na teritoriji grada Beograda. Od decembra 2005. godine do januara 2007. godine je bila zaposlena u Istraživačkoj jedinici za tehnološki razvoj Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju (IHTM – ITR), a od januara 2007. godine je zaposlena u Naučnoj ustanovi IHTM u Beogradu.

1.2. Stečeno naučno istraživačko iskustvo

Daliborka Nikolić Paunić je doktorske studije upisala na Tehnološko-metalurškom fakultetu školske 2005/2006 godine na Katedri za hemijsko-inženjerstvo i položila sve ispite prosečnom ocenom 10. Spisak položenih ispita na doktorskim studijama dat je u sledećoj tabeli:

Predmet
1. Fenomeni prenosa
2. Odabrana poglavlja matematičke analize
3. Specijalna poglavlja prenosa mase
4. Hemijska kinetika
5. Viši kurs termodinamike
6. Industrijska ekologija
7. Analiza i razvoj nestacionarnih precesa i tehnika
8. Prenos toplote i energetska integracija
9. Viši kurs dinamike i upavljanja procesima
10. Završni ispit

Daliborka Nikolić Paunić je učestvovala u naučnoistraživačkom projektu kao stipendista Ministarstva za nauku i zaštitu životne sredine na Tehnološko-metalurškom fakultetu u periodu od 2004-2005 godine (Evidencioni broj projekta 1700). Zatim, kao istraživač pripravnik i/ili istraživač saradnik učestvuje u naučnoistraživačkim projektima finansiranim od strane nadležnog Ministarstva od 2005. godine (i dalje) (Evidencioni brojevi projekata: TR-6721, 146021, 19059, III45001) u ustanovi u kojoj je zaposlena.

Daliborka Nikolić Paunić je u periodu od 2010 do 2011. godine učestvovala na međunarodnom projektu Bilateralne saradnje između Republike Srbije i Nemačke pod nazivom: „Analiza periodičnih procesa zasnovana na nelinearnom frekventnom odzivu“. U tom periodu ostvarila je dva studijska boravka na Maks-Planck institutu za dinamiku složenih tehničkih sistema u Magdeburgu (Nemačka).

Učestvovala je nastavi (vežbe) kursa Osnova automatskog upravljanja na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu u školskoj, 2011/2012 godini.

U toku doktorskih studija bila je na dva porodiljska bolovanja (dve godine), na trudničkom bolovanju (polu godine) i na bolovanju zbog posebne nege deteta (godinu dana).

Daliborka Nikolić Paunić je autor četiri rada u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21), i koautor jednog rada u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21). Učesnik je i više međunarodnih skupova (M34).

Radovi u vrhunskim međunarodnim časopisima (M21)

1. M. Petkovska, D. Nikolic, A. Markovic, A. Seidel-Morgenstern. *Fast evaluation of periodic operation of a heterogeneous reactor based on nonlinear frequency response analysis*. Chemical Engineering Science 65 (2010), p. 3632-3637. **(M21), ISSN: 0009-2509, IF 2,674**
2. Daliborka Nikolic Paunic, Menka Petkovska. *Evaluation of periodic processes with two modulated inputs based on nonlinear frequency response analysis. Case study: CSTR with modulation of the inlet concentration and flow-rate*. Chemical Engineering Science 104 (2013), p. 208-219. **(M21), ISSN: 0009-2509, IF 2.674**
3. Daliborka Nikolic, Andreas Seidel-Morgenstern, Menka Petkovska. *Nonlinear frequency response analysis of forced periodic operation of non-isothermal CSTR using single input modulations. Part I: Modulation of inlet concentration or flow-rate*. Chemical Engineering Science 117 (2014), p.71-84. **(M21), ISSN: 0009-2509, IF 2,674**

4. Daliborka Nikolic, Andreas Seidel-Morgenstern, Menka Petkovska. *Nonlinear frequency response analysis of forced periodic operation of non-isothermal CSTR using single input modulations. Part II: Modulation of inlet temperature or temperature of the cooling/heating fluid*. Chemical Engineering Science 117 (2014), p.31-44. (M21), ISSN: 0009-2509, IF 2,674.
5. Nikolić, D., Seidel-Morgenster, A., Petkovska, M. *Nonlinear frequency response analysis of forced periodic operation of non-isothermal CSTR with simultaneous modulation of inlet concentration and inlet temperature*, Chemical Engineering Science 2015, 137, 40-58. (M21), ISSN: 0009-2509, IF 2.674

Saopštenja sa međunarodnih skupova štampano u izvodu (M34)

1. D. Nikolic Paunic, M. Petkovska. *Evaluation of periodic processes with two modulated inputs based on nonlinear frequency response analysis*, EPIC 2011, Treća evropska konferencija intenzifikacije procesa, 20 – 23. jun 2011., Mančester, Velika Britanija (M34).
2. D. Nikolic Paunic, M. Petkovska, A. Seidel-Morgenstern. *Analysis of forced periodic operations of non-isothermal CSTR with modulation of inlet concentration and temperature. ECCE 2011*. Osmi evropski kongres hemijskih inženjera, 25.-29. septembar 2011., Berlin, Nemačka (M34).
3. D. Nikolic Paunic, M. Petkovska, *Application of nonlinear frequency response method for investigation of periodically operated chemical reactors*, Simpozijum Nelinearna dinamika –Multi i interdisciplinarne primene, SNDMIA 2012, 1.-5. oktobar 2012., Beograd.

1.3. Ocena podobnosti kandidata za rad na predloženoj temi

Na osnovu dosadašnjeg rada i pokazanih rezultata Nikolić Paunić Daliborka je pokazala interes, sklonost i sposobnost za bavljenje naučno-istraživačim radom. Tema doktorske disertacije pripada oblasti iz koje je objavila naučne radove i saopštenja na međunarodnim skupovima, što ukazuje da je podobna za rad na predloženoj temi doktorske disertacije.

2. Predmet i cilj istraživanja

Predmet istraživanja predložene teme doktorske disertacije bi bila evaluacija performansi hemijskih reaktora pri periodičnom režimu rada primenom nove, nelinearne metode frekventnog odziva (NMFO). Cilj istraživanja je razvoj nelinearne metode za brze proračune periodičnih procesa i njena primena na analizu periodičnog rada hemijskih reaktora sa realnim reakcionim mehanizmima koji imaju praktičan značaj za hemijsku industriju.

Periodični režim rada podrazumeva periodičnu promenu jedne ili više ulaznih promeljivih sistema oko izabrane stacionarne vrednosti. Kada se ulazna/e promeljiva/e kod nelinearnog sistema periodično menja/ju, izlazi iz sistema će se takođe periodično menjati, a srednja vrednost izlaza se razlikuje od vrednosti izlaza pri stacionarnom režimu. Od prirode samog procesnog sistema zavisi na koji način će se menjati izlazi. Analizom izlaza iz sistema i upoređivanjem sa izlazom iz sistema pri stacionarnom režimu rada određuje se uticaj periodičnih operacija na performanse procesnog sistema [1,2]. U nekim slučajevima, periodični režim rada može biti superiorniji od rada u

optimalnom stacionarnom stanju [12], dok u drugim slučajevima periodični režim rada može da bude nepovoljan.

Postoji veliki broj mogućnosti pri primeni periodičnog režima rada, pre svega u zavisnosti od izbora ulaza koji se periodično menjaju (npr. protok, sastav, temperatura, pritisak, temperatura rashladnog/grejnog fluida, pravac toka itd.), od broja manipulisanih ulaza kao i od načina njihove promene i ostalih parametara koje određuju periodični režim rada.

Periodične operacije procesa u hemijskom inženjerstvu, posebno hemijskih reaktora su predmet istraživanja mnogih istraživačkih grupa u poslednjih 50 godina [1-14], [17,18,19]. Mnoga teorijska i eksperimentalna ispitivanja su pokazala da je primenom nestacionarnog režima rada kod hemijskih reaktora moguće ostvariti povećanje konverzije, selektivnosti, prinosa, efikasnosti kao i bolju raspodelu proizvoda, bolju katalitičku aktivnost itd [12].

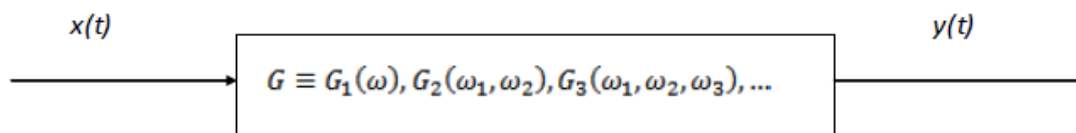
Iako postoje različiti optimizacioni i kontrolni kriterijumi za evaluaciju mogućeg poboljšanja procesa pri periodičnom režimu rada, oni nisu u širokoj primeni. Razlog za to leži u kompleksnosti njihove primene i neizvesnosti u vezi njihove pouzdanosti. Iz ovih razloga još uvek postoji potreba za razvijanjem jednostavne i pouzdane metode za kvantitativnu evaluaciju mogućeg poboljšanja procesa, brzo i u ranijim fazama istraživanja kao i metode za izbor optimalnih parametara periodičnog režima rada [17].

U ovoj doktorskoj disertaciji će biti prezentovan nov, brz i jednostavan koncept za evaluaciju performansi sistema pri periodičnom režimu rada tzv. nelinearna metoda frekventnog odziva (NMFO). Ovaj koncept je zasnovan na frekventnim prenosnim funkcijama (FPF) višeg reda, Voltera redovima i na generalizovanoj Furijeovoj transformaciji i predstavlja vrlo povoljan alat za analizu blago nelinearnih sistema [15,17,18]. Primenom NMFO će biti ispitivano koji režim rada je superiorniji kod hemijskih reaktora, a dobijene rezultate za svaki od posmatranih sistema će biti urađena i verifikacija predložene metode poređenjem sa rezultatima koji su dobijeni numeričkim rešavanjem, kao i sa eksperimentalnim rezultatima koji su dostupni u literaturi.

Frekventni odziv blago nelinearnog sistema, pored osnovnog harmonika, sadrži i neperiodični član (DC) i beskonačan broj harmonika višeg reda:

$$y(t) = y_s + y_{DC} + y_I + y_{II} + y_{III} + \dots \\ = y_s + y_{DC} + B_I \cos(\omega t + \varphi_I) + B_{II} \cos(2\omega t + \varphi_{II}) + B_{III} \cos(3\omega t + \varphi_{III}) + \dots$$

Nelinearni model (G) može biti zamenjen beskonačnim nizom frekventnih prenosnih funkcija različitih redova ($G_1(\omega_1), G_2(\omega_2), G_3(\omega_1, \omega_2, \omega_3), \dots$) koje su u direktnoj vezi sa DC komponentom i višim harmonicima odziva sistema (Slika 1).



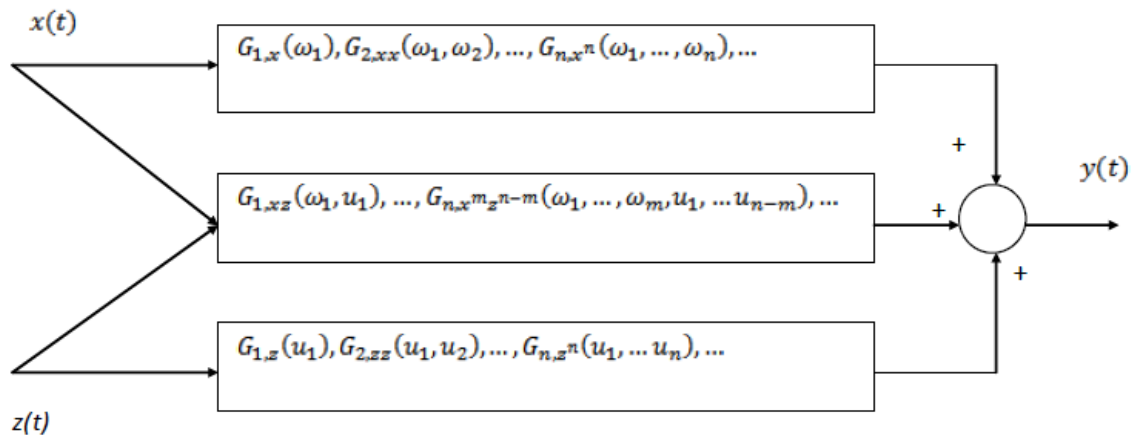
Slika 1 – Blok dijagram blago nelinearnog sistema

Važno je napomenuti da DC komponenta određuje usrednjen odziv pri periodičnom režimu rada. Dok je sa druge strane, dominantni član DC komponente proporcionalan asimetričnoj frekventnoj prenosnoj funkciji drugog reda $G_2(\omega, -\omega)$, te se približna vrednost DC komponente može odrediti određivanjem vrednosti ove funkcije

$$y_{DC} \approx 2 \left(\frac{A}{2} \right)^2 G_2(\omega, -\omega)$$

Znak asimetrične FPF-je drugog reda određuje znak DC komponente na osnovu čega se dolazi do zaključka da li rad je rad u nestacionarnom, periodičnom režimu superiorniji od rada u stacionarnom režimu [17,18].

Nelinearna metoda frekventnog odziva se može primeniti i kod procesnog sistema kod kog se periodično menja više ulaznih promenljivih. Da bi definisali ovakav sistem potrebno je definisati više serija FPF-ja koje povezuju svaki izlaz iz sistema sa svakim pojedinačnim ulazom i serije unakrsnih FPF-ja koje povezuju svaki izlaz sa nekoliko ulaza. Npr., na Slici 2 je prikazan blok dijagram nelinearnog sistema koji ima jednu izlaznu promenljivu kada se periodično menjaju dva ulaza. Za ovaj sistem je potrebno definisati tri serije FPF-ja: dve serije koje povezuju izlaz sa svakom ulaznom promenljivom pojedinačno i jednu seriju unakrsnih FPF-ja koja povezuje izlaz sa obe ulazne promenljive. Serija unakrsnih FPF-ja sadrži samo funkcije drugog i višeg reda [20].



Slika 2 – Blok dijagram nelinearnog sistema sa dva manipulisana ulaza i jednim izlazom

Na Slici 2 korišćene su sledeće oznake: G_{n,x^n} i G_{n,z^n} su FPF-je n -tog reda koje povezuju izlaz sa pojedinačnim ulazima x i z , dok je $G_{n,x^m z^{n-m}}$ unakrsna FRF-ja n -tog reda, m -tog reda u odnosu na ulaz x i $n-m$ -tog reda u odnosu na ulaz z . Za ovako definisan sistem, DC komponenta izlaza zavisi od asimetričnih FPF-ja drugog reda koje povezuju izlaz sa pojedinačnim ulazima ali i od unakrsne asimetrične FPF-je ($G_{2,xx}(\omega, -\omega)$, $G_{2,zz}(\omega, -\omega)$, $G_{2,xz}(\omega, -\omega)$) i od faznog ugla φ između ovih periodičnih promena.

$$y_{DC} \approx 2 \left(\frac{A}{2} \right)^2 G_{2,xx}(\omega, -\omega) + 2 \left(\frac{B}{2} \right)^2 G_{2,zz}(\omega, -\omega) + \left(\frac{A}{2} \right) \left(\frac{B}{2} \right) \cos(\varphi) (G_{2,xz}(\omega, -\omega) + G_{2,xz}(-\omega, \omega))$$

Da bi odredili koji je režim rada superiorniji za izabrani procesni sistem kod koga se periodično menjaju dva ulaza potrebno je odrediti vrednost ovih FPF-ja.

Stoga, u cilju određivanja da li je periodičnih režim rada hemijskih reaktora superiorniji i za koje vrednosti parametara periodičnog režima rada, primenom nelinearne metode frekventnog odziva, potrebno je izvesti i analizirati asimetrične FPF-je drugog reda.

- [1] Douglas, J.M., Rippin, D.W.T. (1966). Unsteady state process operation, *Chemical Engineering Science*, 21, p. 305-315.
- [2] Douglas, J.M. (1967). Periodic reactor operation, *I and EC process Design and Development* 6(1), p. 43-48.
- [3] Horn, F.J.M., Lin, R.C. (1967). Periodic Processes: A variational approach, *I and EC process Design and Development* 6(1), p. 20-30.
- [4] Ritter A.B., Douglas J.M. (1970). Frequency Response of Nonlinear Systems, *I&EC Fundamentals*, Vol. 9 No.1.
- [5] Bailey, J.E., Horn, J.M. (1971). Comparison Between Two Sufficient Conditions for Improvement of an Optimal Steady-State Process by Periodic Operation, *Journal of Optimization Theory and Applications* 7(5), p.378-384.

- [6] Renken, A. (1972). The use of periodic operation to improve the performance of continuous stirred tank reactors, *Chemical Engineering Science* 27, p. 1925-1932.
- [7] Bailey, J. E. (1973). Periodic operation of chemical reactors: A review, *Chem. Eng. Commun.*, 1, pp. 111-124.
- [8] Silveston, P.L. (1987). Periodic operation of chemical reactors - a review of the experimental literature *Sadhana*, Vol. 10, Part 1&2, p.217-246.
- [9] Sterman L.E., Ydstie B.E. (1990) Unsteady-state multivariable analysis of periodically perturbed systems, *Chemical Engineering Science*, 45(3), p.737-749.
- [10] Sterman L. E., Ydstie B.E (1991)., Periodic forcing of the CSTR: an Application of the Generalized Π -Criterion, *AIChE Journal*, Vol. 37, No. 7, p. 986-996.
- [11] Silveston, P., Hudgins, R., Renken, A. (1995). Periodic operation of catalytic reactors – introduction and overview, *Catalysis Today* 25. p. 91-112.
- [12] Silveston, P.L. (1998). *Composition Modulation of Catalytic Reactors*. Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam.
- [13] Silveston, P. L., Hudgins, R. R. (2004). Periodic temperature forcing of catalytic reactions, *Chemical Engineering Science*, 59, p. 4043-4053.
- [14] Aida, T., Silveston, P. L. (2005). *Cyclic Separation Reactors*. Blackwell Publishing Ltd, Oxford.
- [15] Petkovska, M. i Seidel-Morgenstern, A. (2005). "Nonlinear frequency response of a chromatographic column. Part I: Application to estimation of adsorption isotherms with inflection points." *Chem. Eng. Commun.* 192, p.1.
- [16] Weiner D.D., Spina J.F., *Sinusoidal analysis and modelling of weakly nonlinear systems*, Van Nostrand Reinhold, New York, 1980
- [17] Markovic A., Seidel Morgenstern A., Petkovska M., Evaluation of the potential of periodically operated reactors based on the second order frequency response function, *Chemical Engineering Research and Design*, 86 (2008), pp. 682-691.
- [18] M.Petkovska, D.Nikolić, A. Marković, A. Seidel-Morgenstern, *Fast Evaluation of Periodic Operation of a Heterogeneous Reactor Based on Nonlinear Frequency response Analysis*, *Chemical Engineering Science* 65 (2010) 3632 – 3637.
- [19] Parulekar S.J. , Systematic performance analysis of continuous processes subject to multiple input cycling, *Chemical Engineering Science* 58 (2003) 5173-5194.
- [20] Petkovska, M. i Markovic, A. (2006). "Fast Estimation of Quasi-Steady states of Cyclic Nonlinear Processes Based on Higher-Order Frequency Response Functions. Case study: Cyclic Operation of an Adsorption Column." *Ind. Eng. Chem. Res.* 45, p.266.

3. Polazne hipoteze

Polazna hipoteza predložene doktorske disertacije je da se promena performansi kod proizvoljno izabranih reaktora u kojima se odigravaju različiti reakcioni mehanizmi pri nestacionarnim operacijama, može odrediti pouzdano i brzo, primenom nelinearne frekventne metode. Za različite tipove reaktora u kojim se odigravaju proizvoljno izabrane hemijske reakcije, će biti izvedene FPF-je pri periodičnoj promeni jedne ili više ulaznih promenljivih. Iz vrednosti asimetričnih FPF-ja ćemo određivati vrednost DC komponente izlaza za definisane parametre ulazne promene. Očekujemo da ovako određena vrednost bude približna vrednosti koja je dobijena numeričkim rešavanjem jednačina modela. NMFO će biti testirana i na realnim sistemima koji su relevantni za hemijsku industriju. Pored predviđanja mogućeg poboljšanja performansi hemijskih reaktora pretpostavlja se da će primenom NMFO biti moguće izvršiti i optimizaciju periodičnog režima rada.

4. Naučne metode istraživanja

Za izvođenje asimetričnih frekventnih prenosnih funkcija drugog reda koristićemo se analizom nelinearnog frekventnog odziva kao i analitičkim matematičkim alatima kao što su Voltera redovi i generalizovana Furijeova transformacija.

Za teorijsku verifikaciju predložene metode procesa će se koristiti osnovni principi matematičkog modelovanja i simulacije. Matematički modeli ovog procesa koji se najčešće dobijaju u obliku spregnutih sistema nelinearnih običnih i/ili parcijalnih diferencijalnih jednačina koji će biti rešavani numeričkom integracijom za izabrani set parametara i ulaznih funkcija do postizanja cikličnog stacionarnog stanja korišćenjem programskog paketa MATLAB.

Postoji mogućnost da će u saradnji sa Maks Plank institutom biti rađena eksperimentalna ispitivanja periodičnih operacija hemijskih reaktora koja bi bila pogodna za verifikaciju dobijenih teorijskih rezultata, ali u ovom trenutku ne postoje tačne informacije koji bi to eksperimentalni sistem bio.

5. Očekivani naučni doprinos

Periodične operacije predstavljaju jedan od osnovnih pravaca intenzifikacije procesa, dok intenzifikacija procesa predstavlja jedan od osnovnih trendova savremenog hemijskog inženjerstva. Obzirom da je primenom periodičnog režima moguće ostvariti znatno poboljšanje performansi procesnog sistema ovaj režim rada ima dobre predispozicije za industrijsku primenu. Razvoj nove metode čijom primenom bi na brz i jednostavan način bio moguć proračun periodičnih procesa predstavlja direktan doprinos u oblasti intenzifikacije procesa, zbog čega je ova oblast veoma aktuelna.

Trenutno veliki broj istraživačkih grupa u svetu se bavi ispitivanjem periodičnih operacija i optimizacije periodičnog režima rada u cilju poboljšanja performansi procesnih sistema. Uobičajene metode koje se koriste u ovoj oblasti su zasnovane na dugotrajnim numeričkim rešavanjima nelinearnih jednačina modela. Za eksperimentalno ispitivanje periodičnih operacija je, kao i za numeričke simulacije, uglavnom potrebno dosta vremena i sredstava. Iz tog razloga je razvoj teorijskih pristupa i metoda za određivanje efekata periodičnog režima rada hemijskih procesa kao i izbor optimalnih parametara, veoma aktuelno pitanje.

Očekuje se da rezultati ove doktorske disertacije doprinesu razvoju metode nelinearnog frekventnog odziva i da potvrde njenu primenjivost za određivanje performansi hemijskih reaktora pri periodičnom režimu rada. Izvođenjem asimetričnih frekventnih prenosnih funkcija drugog reda za različite reakcione mehanizme i različite modele reaktora će se kreirati neka vrsta baze ovih funkcija, koje kasnije mogu biti primenjivane za optimizaciju rada industrijskih reaktora i realnih sistema koji su relevantni za hemijsku industriju. Procedure koje će biti razvijene mogu poslužiti kao polazna osnova za ispitivanje dinamike nekih drugih procesa u hemijskom inženjerstvu, primenom nelinearne metode frekventnog odziva.

6. Plan istraživanja i struktura rada

Primenom metode nelinearnog frekventnog odziva biće urađena analiza za koje hemijske reaktore i pod kojim uslovima je nestacionarni, periodični režim rada povoljniji od stacionarnog režima rada tj. koji režim rada obezbeđuje bolje performanse (konverziju, selektivnost, prinos, brzinu hemijske reakcije itd.) i pod kojim uslovima. Za svaki pojedinačni sistem promena performansi će biti određena i numeričkim rešavanjem jednačina modela za izabrani set parametara i ulaznih funkcija, čime će se testirati primenjivost NMFO.

Planirana je fazna teorijska analiza periodičnih operacija:

- reaktora sa koncentrisanim parametrima (protočnog reaktora sa mešanjem) i,
- reaktora sa raspoređenim parametrima (cevnog reaktora sa klipnim strujanjem i cevnog reaktora sa disperznim mešanjem),

pri

- izotermnim ili

- neizotermnim uslovima,

kada se u njima odigravaju

- jednostavne nepovratne hemijske reakcije različitih redova ,
- paralelne i uzastopne hemijske reakcije,
- povratne hemijske reakcije,
- ili uzastopno-paralelne hemijske reakcije

kada se periodično menja

- jedna
- ili više ulaznih, manipulisanih promeljivih

u obliku

- kosinusne funkcije i/ili
- kvadratne promene

za različite

- parametre ulazne promene (amplitude, frekvencije, fazne razlike itd.)

Znak asimetrične FPF-je drugog reda, iz kog se može izvesti zaključak da li periodični režim rada superorniji, će biti analiziran za svaki pojedinačni slučaj, u zavisnosti od različitih parametara (reda reakcije, frekvencije ulazne promene, amplitude, fazne razlike između dve ulazne promenljive koje se periodično menjaju itd.).

Neki od teorijskih rezultata koji su dobijeni primenom NMFO, biće upoređivani sa eksperimentalnim rezultatima koji su dostupni u literaturi. Ukoliko budu rađena eksperimentalna ispitivanja periodičnih operacija hemijskih reaktora u saradnji sa Maks Plank institutom, rezultati će biti korišćeni za verifikaciju dobijenih teorijskih rezultata NMFO.

7. Zaključak i predlog

Na osnovu izložene analize podobnosti teme doktorske disertacije Komisija smatra da je predložena tema **“Periodične operacije hemijskih reaktora – Evaluacija i analiza primenom metode nelinearnog frekventnog odziva” („Forced periodically operated chemical reactors – Evaluation and analysis by the nonlinear frequency response method“)** naučno zasnovana i predlaže Nastavno-naučnom veću da je prihvati. Za mentora se predlaže prof. Menka Petkovska, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu. Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Hemija i hemijska tehnologija.

U Beogradu, 21.01.2016.

ČLANOVI KOMISIJE

Dr Menka Petkovska, redovni profesor
Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu

Dr Irena Žižović, vanredni profesor
Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu

Dr Nikola Nikačević, vanredni profesor
Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu

Dr Vladimir Panić, naučni savetnik
NU Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju,
Univerzitet u Beogradu