

ТЕХНОЛОШКО-МЕТАЛУРШКИ
ФАКУЛТЕТ
35/652
(Број захтева)

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

09.01.2017.
(Датум)

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на предлог теме докторске дисертације

Молимо да, сходно члану 47. ст. 5. тач. 3. Статута Универзитета у Београду („Гласник Универзитета“, број 131/06), дате сагласност на предлог теме докторске дисертације:

„Методологија за синтезу реактора заснована на концептима интензификације процеса и примени метода оптимизације (A methodology for reactor synthesis based on process intensification concepts and application of optimization methods)“

(пун назив предложене теме докторске дисертације)

НАУЧНА ОБЛАСТ: ТЕХНОЛОШКО ИНЖЕЊЕРСТВО

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ:

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

ЛУКА (Владимир) ЖИВКОВИЋ, дипл. инж. технологије

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

3. Година дипломирања: 2011.

Обавештавамо Вас да је Наставно-научно веће, на седници одржаној 29.12.2016. године размотрило предложену тему и закључило да је тема подобна за израду докторске дисертације.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

Прилог:

1. Предлог теме докторске дисертације са образложењем
2. Акт надлежног тела факултета о подобности теме за израду докторске дисертације
3. Подаци о ментору.

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ

за кандидата **Луку Живковића**

Име и презиме ментора: **Никола Никачевић**

Звање: Ванредни професор

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. Živković L.A., **Nikačević N.M.** A method for reactor synthesis based on process intensification principles and optimization of superstructure consisting of phenomenological modules, *Chemical Engineering Research and Design*, 113 (2016), 189-205, ISSN: 0263-8762, (IF(2015)=2,525)
2. Živković L.A., Pohar A., Likozar B., **Nikačević N.M.** Kinetics and reactor modeling for CaO sorption-enhanced high-temperature water–gas shift (SE–WGS) reaction for hydrogen production, *Applied Energy*, 178 (2016):, 844-855, ISSN: 0306-2619 (IF(2015)=5,746)
3. Todić, B., Ordonsky, V. V., **Nikačević, N. M.**, Khodakov, A. Y., Bukur, D. B. Opportunities for intensification of Fischer-Tropsch synthesis through reduced formation of methane over cobalt catalysts in microreactors, *Catalysis Science and Technology*, 5(3) (2015) 1400-1411, ISSN: 2044-4753 (IF(2015)= 5,426)
4. **Nikačević N.M.**, Huesman A.E.M., Van den Hof P.M.J., Stankiewicz, A.I. Opportunities and challenges for process control in process intensification, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 52 (2012), 1-15, ISSN:0255-2701 (IF(2012)= 1,950)
5. **Nikačević N.**, Jovanović M., Petkovska M. Enhanced ammonia synthesis in multifunctional reactor with in situ adsorption, *Chemical Engineering Research and Design*, 89(4) (2011), 398-404, ISSN:0263-8762, (IF(2011)= 1,968)

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

А) У случају менторства дисертације на докторским студијама у групацији техникотехнолошких, 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: 30.12.2016.

М.П.

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

ДП

На основу чл. 30. став 3. Закона о високом образовању, чл. 40. Статута ТМФ-а и чл. 32. Правилника о докторским студијама ТМФ, на седници Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета од 29.12.2016. године, донета је

О Д Л У К А

о прихватању Реферата Комисије за оцену подобности теме и кандидата
за израду докторске дисертације

Прихвата се Реферат Комисије за оцену подобности теме и кандидата и одобрава израда докторске дисертације ЛУКИ ЖИВКОВИЋУ, дипл. инж. технологије, под називом: „Методологија за синтезу реактора заснована на концептима интензификације процеса и примени метода оптимизације (A methodology for reactor synthesis based on process intensification concepts and application of optimization methods)“.

Одобрава се докторанду да рад пише на енглеском језику.

Одлуку о давању сагласности на предлог теме докторске дисертације доноси Универзитет у Београду.

За ментора се одређује др Никола Никачевић, ванредни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет.

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

Д Е К А Н

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

UNIVERZITET U BEOGRADU
Tehnološko-metalurški fakultet
NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU

Predmet: Podobnost teme i kandidata Luke Živkovića, diplomiranog inženjera tehnologije za izradu doktorske disertacije

Odlukom Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu br. 35/467 od 29.09.2016. godine, imenovani smo za članove Komisije za ocenu podobnosti teme i kandidata Luke Živković za izradu doktorske disertacije i naučne zasnovanosti teme pod nazivom „Metodologija za sintezu reaktora zasnovana na konceptima intenzifikacije procesa i primeni metoda optimizacije (A methodology for reactor synthesis based on process intensification concepts and application of optimization methods)“.

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

Luka Živković, dipl. inž. tehnologije, rođen je 21.03.1984. godine u Beogradu, gde je završio tri godine prirodno-matematičkog smera Treće beogradske gimnazije. 2003. godine je završio srednju školu „*Mercer Area High School*“, u Pensilvaniji (SAD). Iste godine je upisao Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu, smer Hemijsko inženjerstvo. Fakultet je završio 2011. godine sa prosečnom ocenom 9,64, a završni rad „Primena nelinearne frekventne metode na ispitivanje kinetike elektrohemijske vodonične reakcije – Teorijska analiza“ odbranio je sa ocenom 10,00 nakon boravka na Maks Plank institutu za ispitivanje dinamike složenih tehničkih sistema (*Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme*) u Magdeburgu (Nemačka).

Školske 2011/2012. godine upisao je doktorske studije na Tehnološko-metalurškom fakultetu Univerziteta u Beogradu, na studijskom programu Hemijsko inženjerstvo. Izabran je u zvanje istraživač pripravnik u februaru 2013. Krajem 2014. godine dobija stipendiju u okviru Basileus V projekta, Erasmus Mundus programa Evropske unije. Zahvaljujući ovoj stipendiji narednih šest meseci provodi u Laboratoriji za reakciono inženjerstvo i katalizu, Hemijskog instituta u Ljubljani. U novembru 2016. godine je izabran u zvanje istraživač saradnik. Pored istraživačkog rada, kandidat je pomagao i u nastavi, držeći vežbe iz Osnova automatskog upravljanja, Sistema automatskog upravljanja procesima, Upravljanja procesima u farmaceutskoj industriji, Merenja i upravljanja procesima, Matematičkog modelovanja i optimizacije procesa, kao i u realizaciji više završnih i master radova. Kandidat se u svom radu koristi osnovnim i naprednim softverskim paketima, kao što su Matlab i gPROMS. Tečno govori engleski jezik i služi se nemačkim jezikom.

1.2. Stečeno naučno-istraživačko iskustvo

Luka Živković je u okviru doktorskih studija položio sve ispite (12) predviđene studijskim programom, sa prosečnom ocenom 9,92. Završni ispit pod nazivom „*Metoda za konceptualnu sintezu reakcionog sistema bazirana na dinamičkoj optimizaciji*“ je odbranio u oktobru 2013. godine sa ocenom 10 pred komisijom u sastavu: dr Nikola Nikačević, van. prof., dr Menka Petkovska, red. prof. i dr Aleksandar Orlović, red. prof. Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu.

Položeni ispiti i ostvareni bodovi u okviru doktorskih studija:

Redni broj	Naziv predmeta	ESPB	Ocena
1.	Odabrana poglavlja matematičke analize	5	10
2.	Hemijska kinetika	5	10
3.	Analogije fenomena prenosa	5	9
4.	Prenos toplote i energetska integracija	5	10
5.	Ekonomika energetike	4	10
6.	Viši kurs termodinamike	5	10
7.	Heterogena kataliza	4	10
8.	Analiza rada i projektovanje višefaznih hemijskih reaktora	5	10
9.	Analiza i razvoj nestacionarnih procesa i tehnika	5	10
10.	Intenzifikacija procesa	4	10
11.	Inženjerstvo tkiva	5	10
12.	Završni ispit – pristupni rad za izradu doktorske disertacije	30	10
	Ukupno	82	9,92

Luka Živković, dipl. inž. tehnologije, od početka 2012. godine je angažovan na projektu Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije, br. 172007, pod nazivom: „Razvoj efikasnijih hemijsko-inženjerskih procesa zasnovanih na istraživanjima fenomena prenosa i principima intenzifikacije procesa“.

Iz oblasti istraživanja kojoj pripada predložena tema doktorske disertacije, Luka Živković je autor dva rada objavljena u časopisima od međunarodnog značaja (oznaka grupe **M20**: vrsta rezultata **M21a** - 1 rad, **M21** - 1 rad) i jednog saopštenja prikazanog na međunarodnom skupu (oznaka grupe **M30**: vrsta rezultata **M34** - 1 saopštenje).

Spisak objavljenih radova i saopštenja:

Radovi objavljeni u naučnim časopisima međunarodnog značaja (M20)

Rad u međunarodnom časopisu izuzetnih vrednosti (M21a)

L.A. Živković, A. Pohar, B. Likozar, N.M. Nikačević (2016): Kinetics and reactor modeling for CaO sorption-enhanced high-temperature water–gas shift (SE–WGS) reaction for hydrogen production. Applied Energy, 178, 844-855, ISSN: 0306-2619, (IF(2015)=5.746)

Rad u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21)

L.A. Živković, N.M. Nikačević (2016): A method for reactor synthesis based on process intensification principles and optimization of superstructure consisting of phenomenological modules. Chemical Engineering Research and Design, 113, 189-205, ISSN: 0263-8762, (IF(2015)=2.525)

Zbornici međunarodnih naučnih skupova (M30)

Saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u izvodu (M34)

L. Živković, A. Pohar, B. Likozar, N. Nikačević, Optimization of hydrogen production through water-gas shift reaction intensification with in situ chemisorption of carbon dioxide, 5th European Process Intensification Conference, 27.09–01.10.2015, Nice, France, Abstract

1.3. Ocena podobnosti kandidata za rad na predloženoj temi

Na osnovu dosadašnjeg rada i ostvarenih rezultata tokom doktorskih studija, Luka Živković je pokazao izuzetnu sklonost i sposobnost za bavljenje naučnoistraživačkim radom. Do sada je objavio dva rada u vrhunskim međunarodnim časopisima, kao i jedno saopštenje na evropskom kongresu za hemijsko inženjerstvo. Shodno navedenom, Komisija smatra da kandidat ispunjava sve potrebne uslove za rad na predloženoj temi doktorske disertacije.

2. Predmet i cilj istraživanja

Predmet naučnog istraživanja ove disertacije je razvijanje i primena nove metodologije za sintezu reaktorskih sistema. Metodologija se zasniva na konceptima intenzifikacije procesa (*PI, process intensification*), i povezuje ih sa tehnikama korišćenim u oblasti teorije i analize procesnih sistema (*PSE, process system engineering*). Simbioza ove dve oblasti dovodi do jedinstvenog konceptualnog načina postavlke i rešavanja problema koji kao krajnji rezultat daje optimalnu strukturu reaktorskog sistema i njegov režim rada, a u cilju značajnih tehnoloških poboljšanja.

Pregledom literature je utvrđen veliki broj različitih naučnih, ali i praktičnih metoda iz oblasti *PSE* i *PI* koje su razvijene u toku prethodnog veka zarad povećanja efikasnosti reaktora, te smanjenja troškova proizvodnje [1,2]. Primenom *PI* ili *PSE* tehnika, zasebno, je postignut značajan doprinos u konceptualnom dizajniranju novih tipova reaktora i njihovom poboljšanom režimu rada, kao i poboljšanju efikasnosti celokupnih postrojenja. [3-29] Jedinstvena kombinacija i integracija konceptata *PI* i tehnika *PSE* u cilju pronalaženja najboljeg rešenja za strukturu i način rada reaktora je upravo fokus istraživanja ove doktorske disertacije.

Metodologija za sintezu reaktora, predložena u ovoj temi, zasniva se na konceptima intenzifikacije procesa i primeni metoda optimizacije i sastoji se od tri stepena: (1) Pregled i analiza reakcije (*Reaction Screening*), (2) Matematičko modelovanje superstrukture reaktorskog sistema (*Reactor System Superstructure and Mathematical Modeling*) i (3) Optimizacija (*Optimization*). U okviru prvog stepena se definišu fenomenološki moduli. Pri tome će biti ispitani i iskorišćeni koncepti intenzifikacije procesa. Moduli dobijeni u prvom stepenu, predstavljaju gradivne „čelije“ superstrukture koja se u narednom stepenu matematički formuliše za različite slučajeve strukture reaktora i operativne režime rada. U poslednjem stepenu se postavlja i vrši optimizacija formulisane superstrukture.

Cilj ove doktorske disertacije je da se razvije i primeni opisana opšta metodologija za sintezu reaktora dajući maksimalnu teorijsku efikasnost. Metodologija će biti primenjena na jednom opštem primeru iz hemijskog inženjerstva, a potom i na industrijski relevantan proces dobijanja vodonika u reakciji vodenog gasa (*WGS, water-gas shift reaction*).

Literatura

- [1] Freund, H., Sundmacher, K., 2008. Towards a methodology for the systematic analysis and design of efficient chemical processes. Part 1. From unit operations to elementary process functions. *Chem. Eng. Process.* 47 (12), 2051–2060.
- [2] Stephanopoulos, G., Reklaitis, G.V., 2011. Process systems engineering: from solvay to modern bio- and nanotechnology. A history of development, successes and prospects for the future. *Chem. Eng. Sci.* 66 (19), 4272–4306.
- [3] Moulijn, J.A., Stankiewicz, A., Grievink, J., Górak, A., 2008. Process intensification and process systems engineering: a friendly symbiosis. *Comput. Chem. Eng.* 32 (1–2), 3–11.
- [4] Lutze, P., Gani, R., Woodley, J.M., 2010. Process intensification: a perspective on process synthesis. *Chem. Eng. Process.* 49, 547–558.
- [5] Nikačević, N.M., Huesman, A.E.M., Van den Hof, P.M.J., Stankiewicz, A.I., 2012. Opportunities and challenges for process control in process intensification. *Chem. Eng. Process.* 52, 1–15.
- [6] Achenie, L.E.K., Biegler, L.T., 1986. Algorithmic synthesis of chemical reactor networks using mathematical programming. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 25 (4), 621–627.
- [7] Achenie, L.K.E., Biegler, L.T., 1990. A superstructure based approach to chemical reactor network synthesis. *Comput. Chem. Eng.* 14 (1), 23–40.
- [8] Almeida-Rivera, C.P., Grievink, J., 2008. Process design approach for reactive distillation based on economics, exergy, and responsiveness optimization. *Ind. Eng. Chem. Res.* 47 (1), 51–65.
- [9] Bauer, M.H., Stichlmair, J., 1996. Superstructures for the mixed integer optimization of nonideal and azeotropic distillation processes. *Comput. Chem. Eng.* 20 (Suppl. 1), S25–S30.

- [10] Bayat, M., Hamidi, M., Dehghani, Z., Rahimpour, M.R., Shariati, A., 2014. Hydrogen/methanol production in a novel multifunctional reactor with in situ adsorption: modeling and optimization. *Int. J. Energy Res.* 38 (8), 978–994.
- [11] Cecilia, R., Kunz, U., Turek, T., 2007. Possibilities of process intensification using microwaves applied to catalytic microreactors. *Chem. Eng. Process.* 46 (9), 870–881.
- [12] Commenge, J., Falk, L., Corriou, J., Matlosz, M., 2005. Analysis of microstructured reactor characteristics for process miniaturization and intensification. *Chem. Eng. Technol.* 28(4), 446–458.
- [13] Dragomir, R.M., Jobson, M., 2005. Conceptual design of single-feed kinetically controlled reactive distillation columns. *Chem. Eng. Sci.* 60 (18), 5049–5068.
- [14] Farsi, M., Jahanmiri, A., 2012. Methanol production in an optimized dual-membrane fixed-bed reactor. *Chem. Eng. Process.* 50 (11–12), 1177–1185.
- [15] Floudas, C.A., Paules, I.V.G.E., 1988. A mixed-integer nonlinear programming formulation for the synthesis of heat-integrated distillation sequences. *Comput. Chem. Eng.* 12 (6), 531–546.
- [16] García-Lario, A.L., Grasa, G.S., Murillo, R., 2015. Performance of a combined CaO-based sorbent and catalyst on H₂ production, via sorption enhanced methane steam reforming. *Chem. Eng. J.* 264, 697–705.
- [17] Harmsen, G.J., 2007. Reactive distillation: the front-runner of industrial process intensification. A full review of commercial applications, research, scale-up, design and operation. *Chem. Eng. Process.* 46 (9 SPEC. ISS.), 774–780.
- [18] Koch, K., Sudhoff, D., Kreiß, S., Górak, A., Kreis, P., 2013. Optimisation-based design method for membrane-assisted separation processes. *Chem. Eng. Process.* 67, 2–15.
- [19] Kokossis, A.C., Floudas, C.A., 1994. Optimization of complex reactor networks – II. Nonisothermal operation. *Chem. Eng. Sci.* 49 (7), 1037–1051.
- [20] Lutze, P., Babi, D.K., Woodley, J.M., Gani, R., 2013. Phenomena based methodology for process synthesis incorporating process intensification. *Ind. Eng. Chem. Res.* 52, 7127–7144.
- [21] Moulijn, J.A., Stankiewicz, A., 2004a. Re-engineering the chemical processing plant – process intensification. In: Stankiewicz, A., Drinkenburg, A.A.H. (Eds.), *Process Intensification: History, Philosophy, Principles*. Marcel Dekker, New York, NY, pp. 25–45.
- [22] Peschel, A., Freund, H., Sundmacher, K., 2010. Methodology for the design of optimal chemical reactors based on the concept of elementary process functions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 49 (21), 10535–10548.
- [23] Zondervan, E., Nikacevic, N., Khajuria, H., Pistikopoulos, E.N., de Haan, A.B., 2012. Integrated operation and design of a simulated moving bed reactor. *Comput. Aided Chem. Eng.* 30, 642–646.
- [24] Herder, P. M., Turk, A. L., Subrahmanian, E., Westerberg, A. W., 2000. Challenges for process systems engineering in infrastructure design. *Comp. Chem. Eng.* 24(2-7), 1775-1780.
- [25] Klatt, K., Marquardt, W., 2009. Perspectives for process systems engineering-personal views from academia and industry. *Comput. Chem. Eng.* 33 (3), 536–550.
- [26] López-Negrete, R., Biegler, L. T., 2012. A moving horizon estimator for processes with multi-rate measurements: A nonlinear programming sensitivity approach. *J. Proc. Control.* 22 (4), 677–688.
- [27] Allgor, R. J., Barton, P. I., 1999. Mixed-integer dynamic optimization I: Problem formulation. *Comput. Chem. Eng.* 23 (4-5), 567–584.
- [28] Choi, Y., Stenger, H. G., 2003. Water gas shift reaction kinetics and reactor modeling for fuel cell grade hydrogen. *J. Power Sources.* 124, 432–439.
- [29] Nikulshina, V., Gálvez, M. E., Steinfeld, A., 2007. Kinetic analysis of the carbonation reactions for the capture of CO₂ from air via the Ca(OH)₂–CaCO₃–CaO solar thermochemical cycle. *Chem. Eng. J.* 129, 75–83.

3. Polazne hipoteze

Aktivnosti unutar projektovanja procesnih sistema uključuju dizajn, optimalni raspored i planiranje operacija sistema, i optimalno upravljanje ovakvim sistemima. Većina PSE metoda opisuje ponašanje sistema u celini i naglašava kako pojedinačne komponente sistema i njihov međusobni uticaj doprinose povećanju ili smanjenju efikasnosti sistema. Prva hipoteza od koje se polazi je da se sam reaktor ili reaktorski sistem može posmatrati kao proces koji bi trebalo osmisliti tj. sintetisati, dizajnirati i kontrolisati. Rad ove disertacije je usredsređen na sintezu reaktora.

Tradicionalno, izbor tipa reaktora se u industriji zasniva na iskustvu tj. heuristici. Po pitanju režima rada, taj izbor se najčešće svodi na dve osnovne klase reaktora: sa šaržnim ili kontinualnim režimom. Po strukturi

kontinualni se najčešće svrstavaju u reaktore sa mešanjem, ili proticanjem u cevima, kroz nepokretne sloj ili u fluidizovanom sloju, a izbor strukture i rada se vrši na osnovu predhodnih iskustava [25]. Druga hipoteza ove disertacije je da je moguće osmisliti način, tj. metodologiju, koja bi primenom različitih matematičkih i inženjerskih tehnika dala preporuku za strukturu i način rada reaktora. Ova preporuka se ne bi zasnivala na heuristici, već na analizi svih praktično mogućih struktura reaktora i njegovih režima rada, primenom rigorozne optimizacije.

Treća hipoteza je da se kao gradivni elementi reaktorskog sistema mogu koristiti elementi u kojima se odigravaju različiti fenomeni: hemijska reakcija (homogena ili heterogena), prenos mase (konvekcija ili difuzija), prenos toplote (konvekcija, kondukcija, radijacija, ili neki toplotni izvor/ponor), promena faze (topljenje, kondenzacija, isparavanje, sublimacija ili kristalizacija), kao i površinski fenomeni (adsorpcija, desorpcija, kapilarni efekti, adhezija, abrazija, aglomeracija itd.). U metodologiji će se fenomeni koji odgovaraju posmatranoj reakciji i reaktorskom okruženju grupisati u elemente koji su nazvani fenomenološki moduli. Pri formiranju modula će se razmatrati moguće opcije za poboljšanje ili prevazilaženje ograničenja, zasnovane na konceptima intenzifikacije procesa (*PI*).

Četvrta hipoteza ove doktorske disertacije je da se svi fenomeni od interesa koji su prikazani kao fenomenološki moduli, tj. gradivne jedinice reaktorskog sistema, mogu matematički opisati i da se sam reaktor može predstaviti matematičkim modelom ili modelima superstrukture koji neće prejudicirati strukturu, tj. raspored ovih modula niti režim rada reaktora.

Peta hipoteza disertacije je da će izvedeni matematički model biti dovoljno robustan za primenu različitih optimizacionih metoda, a sve sa ciljem dobijanja optimalne strukture i režima rada reaktora koji daje teorijski najveću efikasnost.

U skladu sa navedenim hipotezama, prvi deo disertacije će činiti razvijanje opšte metodologije za sintezu reaktora. Drugi deo disertacije će biti predstavljanje metodologije na opštoj paralelnoj endotermnoj reakciji u tečnosti, a treći i poslednji deo primena na WGS reakciji. Svemu ovome će prethoditi pregled literature za svaku od navedenih oblasti.

4. Naučne metode istraživanja

Metode istraživanja obuhvaćene ovom disertacijom se mogu podeliti u teorijske i eksperimentalne.

4.1. Teorijske metode istraživanja

Teorijske metode pripadaju oblasti intenzifikacije procesa (*PI*) i teorije i analize procesnih sistema (*PSE*) što podrazumeva različite tehnike optimizacije. [26]

Budući da će prvi stepen metodologije podrazumevati pregled i analizu reakcije (*Reaction Screening*), istraživanje u ovom delu će se najpre baviti prikupljanjem svih teorijskih podataka koji definišu i limitiraju posmatranu reakciju. Ovo podrazumeva, sve reakcije (glavnu i sporedne) i njihov mehanizam, zatim faze u kojima se one odigravaju, postojanje hemijske ravnoteže, prisustvo katalizatora, rastvarača, sorbenta itd., termodinamičke i fazne ravnoteže, toplote reakcije i ostalih fizičkih i hemijskih osobina koje definišu reakcije od interesa. Sledeći korak ovog stepena metodologije će biti definisanje svih fizički mogućih fenomenoloških, strukturnih i dinamičkih varijacija koje bi poboljšale tok i brzinu reakcije i doprinele povećanju efikasnosti prenosa, odnosno smanjile otpore prenosu mase i toplote. To podrazumeva identifikaciju svih *PI* opcija koje bi se mogle primeniti u sistemu. U trećem i poslednjem koraku prvog stepena će biti definisani fenomenološki moduli u dva nivoa. Prvi, viši nivo će činiti faze koje mogu biti prisutne u sistemu, a drugi, tj. niži nivo će biti

elementarni moduli koji opisuju prisutne fenomene na makroskopskom nivou (reakcija, prenos mase, energije, promena faze i površinski fenomeni).

Drugi stepen metodologije će činiti povezivanje definisanih faza i modula u strukturu i njen matematički opis. Iz ovog proističe da će se koristiti tehnike iz teorije sistema i modelovanja, kako bi se dobila matematički formulisana superstruktura reaktorskog sistema koju je moguće simulirati i optimizovati.

Treći i poslednji stepen metodologije će biti optimizacija i primena *PSE* tehnika. Optimizacioni problemi se mogu podeliti na one sa kontinualnim i diskretnim promenljivama. Optimizacije sa kontinualnim promenljivama uključuju linearno programiranje ili *LP* algoritam i nelinearno programiranje ili *NLP* algoritam. [27] Problemi sa diskretnim promenljivama će se rešavati pomoću linearnog programiranja sa mešovitim celim brojevima (*MILP* algoritam) ili nelinearnog programiranja sa mešovitim celim brojevima (*MINLP* algoritam). [28] Budući da će se predložiti metodologija koji bi trebalo da dovede do optimalne strukture reaktora koja može biti složena, koristiće se i stohastička optimizacija, tačnije genetski algoritam (*Genetic Algorithm*), za pronalaženje globalnog minimuma / maksimuma. Navedene tehnike će se koristiti u okviru dva softverska paketa, gPROMS i Matlab.

4.2. Eksperimentalne metode istraživanja

U eksperimentalne metode koje će se koristiti spadaju metode određivanja kinetičkih parametara reakcije vodenog gasa (*WGS*) [29] za dobijanje vodonika, sa katalizatorom na bazi gvožđa i hroma. Osim toga određiće se i parametri kinetike *WGS* reakcije, uz paralelnu hemisorpciju CO_2 u česticama kalcijum oksida (CaO) [30], tzv. *SEWGS* (sorption-enhanced water-gas shift reaction). Za obe reakcije će najpre biti urađen dizajn eksperimenta za ispitivanje kinetike korišćenog katalizatora i sorbenta i kalibracija svih korišćenih uređaja (upravljačkog sistema, GC uređaja, TC uređaja itd.). Sav eksperimentalni deo će biti obavljen u Laboratoriji za katalizu i reakciono inženjerstvo, Hemijskog instituta u Ljubljani.

WGS reakcija će biti analizirana u pakovanom sloju koji čine inert i katalizator. Analiza će se sastojati od serije eksperimenata u stacionarnom stanju za različite operative uslove reakcije (sastave reaktanata i temperature). Svi eksperimenti će biti isplanirani, programirani i automatizovani, što će omogućiti prikupljanje velikog broja podataka za različite vrednosti operativnih parametara, tj. preko 2400 eksperimentalnih tačaka. Eksperimenti će biti rađeni u laboratorijskom reaktoru za analizu katalitičke mikroaktivnosti, a rezultati sastava gasne faze na izlazu izmereni na gasnom hromatografu (490 Micro GC, Agilent Technologies).

Eksperimenti na *SEWGS* reakciji će biti dinamički jer zavise od tačke zasićenja korišćenog hemisorbenta, kalcijum oksida. Biće rađeni u pakovanom sloju koji čini sorbent i katalizator. Pored visoko-frekventnog merenja sastava izlazne struje gasa, takođe će biti obavljeni i eksperimenti analize ukupnog sastava ugljenika. Ovim će se utvrditi približna vrednost konverzije sorbenta za određene eksperimentalne serije. Uradiće se i kvalitativni testovi prisustva karbonatnih anjona i uglja na uzorcima sorbenta nakon eksperimenata. U tu svrhu će biti primenjena rendgenska strukturna analiza uzoraka (*XRD*), kao i temperaturno kontrolisana oksidacija (*TPO*). Za *SEWGS* reakciju će biti urađena 41 serija eksperimenata. Svaku seriju će činiti od 15 do 300 eksperimentalnih tačaka u zavisnosti od brzine sorpcije.

Svi dobijeni eksperimentalni podaci za *WGS* i *SEWGS* reakciju će biti analizirani i upotrebljeni za estimaciju kinetičkih i difuzionih parametara. Eksperimentalno dobijeni parametri će se koristiti u delu disertacije za optimizaciju *WGS* reakcije.

5. Očekivani naučni doprinos

Očekuje se da će istraživanja planirana u okviru ove doktorske disertacije dati višestruko značajan naučni doprinos, pri čemu se može izdvojiti sledeće:

- razvijena nova metodologija za (konceptualnu) sintezu reaktora
- optimizovana struktura i način rada reaktora (simultano)
- određeni parametri brzine hemijske reakcije za visoko-temperaturnu WGS reakciju
- određeni parametri brzine reakcije WGS i hemisorpcije CO₂ na CaO česticama (SEWGS reakcije)
- primenjena metodologija na WGS reakciji, te prikazana mogućnost za značajna poboljšanja u procesu dobijanja vodonika
- doprinos saznanjima o povećanju efikasnosti reaktorskih sistema primenom optimizacionih metoda i koncepta intenzifikacije procesa

6. Plan istraživanja i struktura rada

Planira se da će doktorska disertacija imati sledeća poglavlja: *Uvod*, *Pregled dosadašnjih istraživanja*, *Opis metodologije*, *Primena metodologije na opštoj paralelnoj reakciji*, *Primena metodologije na reakciji vodenog gasa*, *Zaključak*, *Literatura*.

U poglavlju *Uvod* će biti definisani glavni ciljevi disertacije, predmet istraživanja i njegov doprinos.

Poglavljje *Pregled dosadašnjih istraživanja* će činiti pregled literature iz *PI* i *PSE* primenjenih na oblast sinteze reaktora i povećanja efikasnosti.

U okviru poglavlja *Opis metodologije* će biti predstavljena metodologija za sintezu reaktora zasnovana na konceptima *PI* i primeni metoda optimizacije.

U poglavlju *Primena metodologije na opštoj paralelnoj reakciji* će metodologija biti prikazana na tipičnom primeru iz hemijskog inženjerstva.

Poglavljje *Primena metodologije na reakciji vodenog gasa* će činiti eksperimentalni deo WGS i SEWGS reakcije, i teorijski deo primene metodologije na ove reakcije. Biće prikazani rezultati eksperimenata, estimacije parametara kao i diskusija rezultata primene metodologije, u cilju poboljšanja procesa proizvodnje vodonika.

U poglavlju *Zaključak* će biti izdvojeni svi dobijeni rezultati od interesa i izvedeni stavovi o mogućnosti primene metodologije na druge reakcione sisteme.

Svi citirani navodi, kao i radovi koji su objavljeni u toku istraživanja i rada na ovoj doktorskoj disertaciji će se nalaziti u poglavlju *Literatura*.

7. Zaključak i predlog

Na osnovu izloženog Komisija smatra da kandidat Luka Živković ispunjava sve potrebne uslove za rad na predloženoj temi doktorske disertacije. Takođe, na osnovu iznetih podataka, Komisija smatra da je tema predložene doktorske disertacije pod naslovom: „**Metodologija za sintezu reaktora zasnovana na konceptima intenzifikacije procesa i primeni metoda optimizacije (A methodology for reactor synthesis based on process intensification concepts and application of optimization methods)**” naučno utemeljena. Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Tehnološko inženjerstvo, uža naučna oblast hemijsko inženjerstvo, za koju je matičan Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu. Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu da kandidatu Luki Živković odobri izradu doktorske disertacije pod navedenim naslovom. Za mentora se predlaže prof. dr Nikola Nikačević, vanredni profesor Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurškog fakulteta.

U Beogradu, 19.12.2016. godine

ČLANOVI KOMISIJE

1. Dr Nikola Nikačević, vanredni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

2. Dr Menka Petkovska, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

3. Dr Aleksandar Jovović, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Mašinski fakultet