

**UNIVERZITET U BEOGRADU
TEHNOLOŠKO-METALURŠKI FAKULTET
NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU**

Predmet: Referat o urađenoj doktorskoj disertaciji kandidata **Luke Živković**, dipl. ing. tehnologije

Odlukom br. 35/195 od 30.05.2019. godine, imenovani smo za članove Komisije za pregled, ocenu i odbranu doktorske disertacije kandidata **Luke Živković**, dipl. ing. 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)**“. Posle pregleda dostavljene Disertacije i drugih pratećih materijala i razgovora sa Kandidatom, Komisija je sačinila sledeći

R E F E R A T

1. UVOD

1.1. Hronologija odobravanja i izrade disertacije

Kandidat Luka Živković, upisao je doktorske akademske studije na Tehnološko-metalurškom fakultetu, Univerziteta u Beogradu, studijski program Hemijsko inženjerstvo, školske 2011/2012. godine. Položio je sve ispite predviđene programom, uključujući i završni ispit.

19.09.2016. – Kandidat Luka Živković dipl. ing., predložio je temu doktorske disertacije 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)“.

29.09.2016. – Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu doneta je odluka (br. 35/467) o imenovanju Komisije za ocenu naučne zasnovanosti teme i podobnosti kandidata Luke Živković, dipl. ing. za izradu doktorske disertacije 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)“.

29.12.2016. – Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu doneta je odluka (br. 35/652) o prihvatanju Referata Komisije za ocenu naučne zasnovanosti teme i podobnosti kandidata i odobravanju izrade doktorske disertacije Luke Živković, dipl. ing., na engleskom jeziku, 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“), a za mentora ove doktorske disertacije je imenovan dr Nikola Nikačević, tada vanredni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu.

01.02.2017. – Na sednici Veća naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu doneta je odluka (br. 158/1) o davanju saglasnosti na predlog teme doktorske disertacije Luke Živković, dipl. ing., 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)“.

29.09.2017. – Na osnovu člana 93, Stav 4, Statuta Univerziteta u Beogradu i člana 66, Stav 4, Statuta Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu, doneto je rešenje (br. 20/109) o produženju roka za završetak studija za Luke Živković, dipl. ing., na lični zahtev.

28.09.2018. – Na osnovu člana 101, Statuta Univerziteta u Beogradu i člana 76, Stav 1, i Stav 4, Statuta Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu, kao i zahteva Luke Živković, dipl. ing., Dekan je doneo rešenje o produženju roka za završetak studija.

30.05.2019. – Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu doneta je odluka (br. 35/195) o imenovanju Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije Luke Živković, dipl. ing., 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)“.

1.2. Naučna oblast disertacije

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. Mentor dr Nikola Nikačević, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu je na osnovu objavljenih publikacija (30 u međunarodnim časopisima) i pedagoškog iskustva kompetentan da rukovodi izradom ove doktorske disertacije.

1.3. Biografski podaci o kandidatu

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, pod rukovodstvom Dr Blaža Likozara. Na osnovu rezultata iz Slovenije je objavljen rad u međunarodnom časopisu od izuzetne vrednosti i nastavljena saradnja sa slovenačkom grupom. 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.

2. OPIS DISERTACIJE

2.1. Sadržaj disertacije

Doktorska disertacija kandidata Luke Živković, dipl. ing. tehnologije, sadrži 241 strana (od kojih je 228 numerisano) u okviru kojih se nalazi 7 poglavlja, sa ukupno 55 slika, 26 tabela i 386 literaturna navoda. Doktorska disertacija je napisana na engleskom jeziku sa poglavljima: *Uvod – Motivacija i ciljevi, Pregled literature, Opis ReSyPIO metodologije, Primena ReSyPIO metodologije na slučaju generičke reakcije, Eksperimentalno istraživanje dobijanja vodonika u reakciji vodenog gasa poboljšanoj sorpcijom, Sinteza reaktora za proizvodnju vodonika reakcijom vodenog gasa poboljšanoj sorpcijom i membranskom separacijom, Zaključci, Literatura*. Na početku disertacije dati su izvodi na srpskom i engleskom jeziku. Kandidat je uz tekst disertacije priložio i biografiju i dodatke propisane pravilima Univerziteta o podnošenju doktorskih teza na odobravanje. Po svojoj formi i sadržaju, podneti rad zadovoljava sve standarde Univerziteta u Beogradu za doktorsku disertaciju.

2.2. Kratak prikaz pojedinačnih poglavlja

U poglavlju *Uvod – Motivacija i ciljevi* (eng. *Introduction – Motivation and Objectives*) su obrazloženi motiv, predmet i ciljevi istraživanja. Navedeno je pet hipoteza na kojima se zasniva disertacija, tj. predložena metodologija, koja je skraćeno označena ReSyPIO (A methodology for reactor synthesis based on process intensification concepts and application of optimization methods). Metodologija ReSyPIO je kratko predstavljena i dato je

obrazloženje po čemu ona predstavlja unapređenje u odnosu na postojeća rešenja za intenzifikaciju procesa. Takođe je diskutovana aktuelnost i značaj ovog istraživanja, kako u inženjerskim, tako i u širim društvenim okvirima. Na kraju poglavlja su ukratko navedeni očekivani naučni doprinosi disertacije.

U okviru drugog poglavlja, *Pregleda literature* (eng. *Literature Review*), je dat literaturni pregled oblasti koje su obuhvaćene disertacijom. Najpre su ukratko predstavljene dve glavne oblasti koje su zajedno primenjene u disertaciji, tj. oblast Intenzifikacije procesa (eng. *Process Intensification*) i oblast Procesnog sistemskog inženjerstva (eng. *Process System Engineering*). Nakon prikazane veze između sinteze reaktora i ove dve oblasti, dat je kratak istorijat Intenzifikacije procesa u hemijskom inženjerstvu. U naredna dva podpoglavlja su navedene definicije i nekoliko klasifikacija principa i metoda Intenzifikacije procesa, a potom je dat pregled radova iz ove oblasti. U drugom podpoglavlju je dat pregled radova iz oblasti Sinteze i projektovanja procesa (eng. *Process Synthesis and Design*). Prikazan je razvoj ove oblasti u dva pravca: sinteze jednofaznih i višefaznih sistema. Zatim su detaljnije prikazane metode sinteze procesa iz literature koje su u najbližoj vezi sa predloženom metodologijom iz ove disertacije. U poslednjem podpoglavlju su prikazani izazovi za oblast Procesnog sistemskog inženjerstva i dat je pregled perspektivnih pristupa, metoda i tehnika koji bi mogli da odgovore na te izazove.

U poglavlju *Opis ReSyPIO metodologije* (eng. *Description of the ReSyPIO Methodology*) je predstavljena metodologija koja obuhvata tri etape, a potom je u zasebnim podpoglavljima svaka od tri etape detaljno opisana:

- 1) *Pregled, analiza i odabir fenomena* (eng. *Phenomena Screening*) koja se sastoji od prikupljanja podataka o fenomenima koji se javljaju u ispitivanom reakcionom sistemu, i fenomena koji se mogu pridodati u cilju poboljšanja. U ovoj fazi se, analiziraju ograničenja procesa i mapiraju opcije za intenzifikaciju procesa, što na kraju rezultuje i kreiranjem fenomenoloških modula;
- 2) *Kreiranje superstrukture reaktora i matematičkog modela* (eng. *Reactor Structure and Mathematical Modeling*) u kojoj se kreirani moduli iz prve etape spajaju u potencijalnu superstrukturu, a potom se postavljaju jednačine modela koje opisuju tako definisan opšti reaktorski sistem;
- 3) *Optimizacija* (eng. *Optimization*) u okviru koje se biraju numeričke simulacione i optimizacione metode koje će biti korišćene, definišu funkcija/e cilja, ograničenja i optimizacioni parametri, odnosno broj optimizacionih stepeni slobode. Na kraju ova etapa obuhvata optimizaciju, analizu rezultata i preporuke za konceptualno projektovanje reaktora.

U okviru istog poglavlja su data četiri ilustrativna primera, za koje su izvedeni fenomenološki moduli, a potom za jedan od njih i grafički prikaz superstrukture reaktora.

ReSyPIO metodologija je detaljno primenjena na primeru dve paralelne reakcije sa jednim željenim i jednim neželjenim proizvodom u poglavlju *Primena ReSyPIO metodologije na slučaju generičke reakcije* (eng. *Application of the ReSyPIO methodology to a Generic*

Reaction Case). Primenjeno je više principa intenzifikacije procesa i metoda optimizacije. Optimizovana i analizirana su tri različita režima rada reaktora: polušaržni reaktor, kontinualni reaktor sa stacionarnim režimom rada i kontinualni reaktor sa nestacionarnim (periodičnim) režimom rada. Kao najefikasnije rešenje je predložen kontinualni reaktor sa stacionarnim režimom rada i 17 segmenata sa sopstvenim napojnim strujama za jedan reaktant i optimalnim količinama unete toplote po segmentima..

U poglavlju *Eksperimentalno istraživanje reakcije vodenog gasa poboljšane sorpcijom* (eng. *Experimental Study on Sorption-Enhanced Water-Gas Shift Reaction*) su predstavljeni rezultati eksperimentalne studije koja je rađena na Hemijskom Institutu u Ljubljani. Osnovni cilj eksperimentalnog dela disertacije je pribavljanje podataka i određivanje vrednosti parametara i konstanti za reakciju vodenog gasa poboljšanog hemisorpcijom, koji su zatim korišćeni za primenu ReSyPIO metodologije u sledećem poglavlju. Na početku poglavlja su navedeni materijali, oprema, opisane metode i tok eksperimenta, kao i operativni uslovi koji su korišćeni. Nakon analize eksperimentalnih rezultata je razvijen kinetički model za reakciju vodenog gasa, kao i proces hemisorpcije (reakcija i difuzija ugljen dioksida u česticama kalcijum oksida). Pokazano je da hemisorpcija na nepokretnim česticama omogućava uklanjanje CO₂ kao proizvoda reakcije i pomeranje ravnoteže, što intenzivira reakciju. Parametri kinetičkih modela su određeni na osnovu eksperimentalnih rezultata primenom optimizacionih metoda. Na kraju poglavlja je model korišćen za simulaciju cikličnog procesa koji bi se sastojao od nekoliko reaktora sa pakovanim slojem sa naizmeničnim radom u nestacionarnom procesu.

Sinteza reaktora za proizvodnju vodonika reakcijom vodenog gasa poboljšane sorpcijom i membranskom separacijom (eng. *Reactor Synthesis for Hydrogen Production Through Sorption- and Membrane-Enhanced Water-Gas Shift Reaction*) je poglavlje unutar kog je metodologija ReSyPIO primenjena na industrijskom slučaju. U poglavlju su, prateći predloženu metodologiju, formirani fenomenološki moduli, zatim superstruktura reaktora i njen model, a potom i optimizovani odabrani slučajevi upotrebom višeobjektne optimizacije (tzv. Pareto front). Pri tome su korišćeni podaci i parametri dobijeni iz eksperimentalnog istraživanja prikazanog u predhodnom poglavlju, kao i literaturni podaci za membransku separaciju. U poglavlju je data preporuka za optimalno i značajno poboljšano rešenje u odnosu na industrijsku praksu, sa dva modula u kojima se odvija reakcija vodenog gasa i sorpcija na pokretnim česticama CaO, bez upotrebe membrane. Na kraju poglavlja je data analiza kako bi uključivanje pada pritiska i eventualna optimizacija radnog pritiska uticala na rezultat i efikasnost reaktora.

U poglavlju *Zaključci* (eng. *Final Conclusions*) je prikazan doprinos razvoja ReSyPIO metodologije u okvirima Intenzifikacije procesa i Procesnog sistemskog inženjerstva. Potom su sagledane prednosti i nedostaci ReSyPIO metodologije i iznete preporuke i zaključci o mogućoj primeni.

3. OCENA DISERTACIJE

3.1. Savremenost i originalnost

Sa povećanjem potražnje za hemijskim i dugim proizvodima i energije sa jedne strane, a ubrzanim trošenjem neobnovljivih prirodnih resursa i ubrzavanjem negativnih efekata klimatskih promena sa druge strane, javlja se potreba za drastičnim unapređenjem procesa proizvodnje. U ovako zahtevnim okolnostima, principi intenzifikacije procesa i metode sistemskog inženjerstva, u sinergiji mogu dati ključni doprinos. Doktorska disertacija Luke Živković upravo za predmet ima razvijanje i primenu konceptualne metode za sintezu reakcionog sistema, kao centralnog dela proizvodnje hemijskih proizvoda, primenom metoda optimizacije i integracijom različitih koncepata intenzifikacije procesa, a u cilju značajnog poboljšanja procesa i postizanja maksimalne teorijske efikasnosti. Pregledom literature je ustanovljen veliki broj različitih tehnika, rešenja i metoda predloženih sa istim ciljem. Ono što razlikuje metodologiju ReSyPIO, razvijenu u okviru ove doktorske disertacije, u odnosu na ostale, je jedinstven pristup formulaciji, analizi i rešavanju problema, čime se podržava proces donošenja odluke, tj. davanja preporuke za konceptualni dizajn, koji se zasniva na istovremenoj optimizaciji strukture reaktora, njegovih operativnih parametara i režima rada. Do sada, nijedna od predloženih metodologija prikazanih u literaturi nije davala rešenje koje bi obuhvatalo sva tri navedena aspekta, uz upotrebu rigorozne optimizacije velikog broja promenljivih. Originalnost ReSyPIO metodologije se ogleda i u činjenici da ona pokriva sva četiri domena intenzifikacije procesa: strukturni, sinergetski, dinamički i energetski. Savremenost disertacije takođe proističe iz primera primene ReSyPIO metodologije, u inenzifikovanom procesu dobijanja vodonika. Vodonik je ključni element budućeg održivog energetskog sistema. Kao gorivo, vodonik se proizvodi na različite načine, a jedan od njih i u reakciji vodenog gasa, zastupljenoj u industriji. Upravo na ovoj reakciji je primenjena predložena metodologija, a kao rezultat je dobijena originalna preporuka za dizajn reaktora.

3.2. Osvrt na referentnu i korišćenu literaturu

U okviru doktorske disertacije kandidata Luke Živković, citiran je 361 literaturni navod, što je omogućilo da se prikaže stanje u oblasti intenzifikacije procesa, procesnog sistemskog inženjerstva, dizajna procesa i značaja primene numeričkih metoda za simulaciju i optimizaciju. Najveći broj citiranih radova čine članci iz međunarodnih časopisa objavljenih u poslednjih deset godina, sa tematikom značajnom za izradu doktorske disertacije. Savremena istraživanja objavljena u navedenim naučnim radovima su opisana, analizirana i diskutovana i izvedeni su zaključci koji su omogućili dobar uvid i mogućnost poređenja sa metodologijom predloženom u disertaciji. Literatura je korišćena u svim poglavljima sem u Sažetku i Zaključcima disertacije, i korišćena je ne samo za pregled relevantnih istraživanja već i prilikom diskutovanja dobijenih rezultata primene ReSyPIO metodologije. Treba napomenuti i da je dobar deo poglavlja koji se odnose na postavku i primenu ReSyPIO metodologije preuzet iz objavljenih radova autora disertacije, uz tačno navođenje izvora. Iz navedene literature koja je korišćena u istraživanju i pisanju disertacije, kao i u objavljenim

originalnim radovima autora, uočava se vrlo dobro poznavanje predmetnih oblasti i aktuelnog stanja istraživanja.

3.3. Opis i adekvatnost primenjenih naučnih metoda

U disertaciji su korišćene eksperimentalne, teorijske i numeričke metode.

Teorijske metode pripadaju oblasti i principima intenzifikacije procesa i teorije i analize procesnih sistema. Budući da prva etapa ReSyPIO metodologije podrazumeva pregled i analizu prisutnih fenomena u sistemu (eng. *Phenomena Screening*), istraživanje u ovom delu se najpre bavi prikupljanjem svih podataka koji definišu i limitiraju reaktorski sistem. Ovo uključuje sve reakcije i njihove mehanizme, faze u kojima se one odigravaju, postojanje hemijske ravnoteže, prisustvo katalizatora, rastvarača, sorbenta itd., podatke o termodinamičkoj i faznoj ravnoteži, vrednosti entalpija hemijskih reakcija i ostalih fizičkih i hemijskih osobina koje definišu reakcije od interesa. Sledeći korak ove etape je teorijska analiza u cilju definisanja svih fizički mogućih fenomenoloških, strukturnih i dinamičkih varijacija koje bi doprinele povećanju efikasnosti sistema. To podrazumeva identifikaciju svih opcija intenzifikacije koje bi se mogle primeniti u sistemu. U trećem i poslednjem koraku prve etape se definišu teorijski fenomenološki moduli, koji sadrže sve identifikovane faze i fenomene.

Unutar druge etape ReSyPIO metodologije se koriste tehnike teorije sistema i modelovanja kako bi se povezali definisani moduli, tj. formirala opšta superstruktura reakcionog sistema. Matematičko modelovanje je neophodno kako bi se superstruktura reaktora matematički formulisala, za dalje simulacije i optimizacije.

Numeričke metode za rešavanje matematičkih modela i optimizaciju se koriste unutar treće etape ReSyPIO metodologije. U disertaciji su korišćene optimizacione metode sa jednom i više funkcija cilja, kao i one sa kontinualnim i diskretnim promenljivama. Korišćene su i gradijentne metode, tzv. determinističke (nelinerano programiranje – NLP) i stohastičke metode (evolutivni algoritam). Optimizacioni problem sa jednom funkcijom cilja je upotrebljen za primer sa generičkom reakcijom, i to sa kontinualnim (NLP) i diskretnim promenljivama (MINLP). U ovom primeru je korišćena i stohastička optimizacija, tačnije genetski algoritam (eng. *Genetic Algorithm*), za pronalaženje globalnog minimuma. Navedene metode su inkorporirane u dva softverska paketa, gPROMS i Matlab, koji su korišćeni za optimizacije. U drugom primeru, za poboljšanje proizvodnje vodonika, korišćena je višeobjektna optimizacija (Pareto front), u kojoj je jedna funkcija cilja prinos proizvoda, a druga definiše fiksne troškove reaktora. Za višeobjektnu optimizaciju, tj. niz optimizacija koje se izvršavaju za jedan Pareto front, je korišćen takođe genetski algoritam uključen u Matlab softver. Za rešavanje diferencijalnih jednačina modela korišćen je numerički metod Runge-Kuta (*ode23s*) uključen u Matlab i gPROMS.

U eksperimentalnom delu doktorske disertacije ispitivane su brzine hemijskih reakcija: 1) vodenog gasa u reaktoru sa pakovanim slojem katalizatora na bazi gvožđa i

hroma 2) vodenog gasa i hemisorpcije CO₂ na česticama CaO u izmešanom pakovanom sloju. Eksperimenti su izvedeni u laboratorijskom automatizovanom sistemu za analizu katalitičke mikroaktivnosti (naziv: *Laboratory Reactor for Catalytic Microactivity Analysis, Mar*; proizvođač: *Process Integral Development Eng & Tech*), a analiza sastava gasne faze na mikro GC uređaju (naziv: *490 Micro GC*; proizvođač *Agilent Technologies*).

Za određivanje kinetičkih parametara reakcije vodenog gasa izvedene su serije eksperimenata u stacionarnom stanju za različite operativne uslove reakcije (sastave reaktanata i temperature). Svi eksperimenti su isplanirani, programirani i automatizovani, što je omogućilo prikupljanje velikog broja podataka za različite vrednosti operativnih parametara, tj. preko 2400 eksperimentalnih tačaka. Eksperimenti za ispitivanje reakcije vodenog gasa poboljšane hemisorpcijom ugljen dioksida su dinamički jer zavise od tačke zasićenja korišćenog hemisorbenta (kalcijum oksida). Pored učestalog merenja sastava izlazne struje gasa, takođe je određivan ukupni sastav ugljenika na TC uređaju. Ovim je utvrđena približna vrednost konverzije sorbenta za određene eksperimentalne uslove. Urađeni su i kvalitativni analitički testovi na prisustvo karbonatnih anjona i uglja na uzorcima sorbenta nakon eksperimenata. Primenjena je rendgenska strukturna analiza uzoraka (*XRD*), kao i temperaturno kontrolisana oksidacija (*TPO*). Za reakciju poboljšanu sorpcijom je urađena 41 serija eksperimenata, svaka sa 15 do 300 eksperimentalnih tačaka, u zavisnosti od brzine hemisorpcije. Svi dobijeni eksperimentalni podaci su analizirani i upotrebljeni za određivanje kinetičkih i difuzionih parametara.

3.4. Primenljivost ostvarenih rezultata

Rezultati istraživanja proistekli iz ove doktorske disertacije imaju doprinos u oblasti konceptualne sinteze i poboljšanja reakcionih sistema. ReSyPIO metodologiju mogu koristiti projektantske i konsultantske kompanije i razvojni instituti pri konceptualnom i glavnom projektovanju, kako bi ispitali moguća poboljšanja i došli do novih inovativnih rešenja. Pristup i metod prikazani u ovoj tezi su generalni (opšti) i mogu se primeniti na različite reakcione sisteme. To je ilustrovano na dva primerima. Prvi slučaj spore parelne reakcije u tečnoj fazi se sreće često u farmaceutskoj proizvodnji ili industriji specijalizovanih hemijskih proizvoda. Sa druge strane, metodologija se može primeniti i za hemijsku procesnu industriju i energetiku gde su prisutni veliki kapaciteti uređaja, što je prikazano u drugom primeru za poboljšanje proizvodnje vodonika u reakciji vodenog gasa. U oba primera su date preporuke za moguća inovativna rešenja, zasnovana na intenzifikaciji procesa i optimizaciji, koja bi primenom dovela do značajnih poboljšanja. Primeri se mogu proširiti i na druge reakcione sisteme značajne za hemijsku i procesnu industriju, kao i za primene u oblasti zaštite životne sredine, biohemijskog inženjerstva i dr. Stoga, potencijalna primena je vrlo široka.

3.5. Ocena dostignutih sposobnosti kandidata za samostalni naučni rad

Tokom izrade doktorske disertacije, kandidat Luka Živković je ispoljio izuzetnu sposobnost u konceptualnom, apstraktnom rešavanju problema, matematičkoj formulaciji sistema, inovativnosti u realizaciji eksperimenata i primeni numeričkih metoda, kao i analizi rezultata. Tokom svojih istraživanja, ispoljio je samostalnost i istrajnost u radu, sistematičnost i kreativnost, kao i samokritičnost. Luka Živković je razvio analitičan pristup u rešavanju problema i izvođenju eksperimenata kao i sposobnost da kompleksnu problematiku predstavi na razumljiv način. Vrlo dobro je radio u timu, zahvaljujući čemu je nastavljena saradnja sa grupom iz Slovenije gde je kandidat boravio. Na osnovu postignutih rezultata i zalaganja, te publikacija u vodećim naučnim časopisima i naučnih i stručnih doprinosa disertacije, Komisija je mišljenja da kandidat Luka Živković, dipl. ing. poseduje sve neophodne kvalitete za samostalan naučno-istraživački rad.

4. OSTVARENI NAUČNI DOPRINOS

4.1. Prikaz ostvarenih naučnih doprinosa

Rezultati do kojih se došlo u okviru ove disertacije daju naučni doprinos u više oblasti hemijskog inženjerstva: hemijskom reaktorskom inženjerstvu, projektovanju i optimizaciji procesa, intenzifikaciji procesa, modelovanju i numeričkom rešavanju problema. U disertaciji je predstavljena nova metodologija, ReSyPIO, za konceptualnu sintezu reaktora, što predstavlja osnovni naučni doprinos teze. ReSyPIO metodologija istovremeno sagledava tri važna aspekta reaktora: strukturu, operativne uslove i režim rada, što je prvi put objedinjeno, u odnosu na postojeće metodologije. Važan doprinos je ostvaren i u oblasti intenzifikacije procesa, jer ReSyPIO metodologija razmatra mogućnost intenzifikacije u sva četiri domena: strukturnom, sinergetskom, dinamičkom i energetsom, i sistematično ih integriše koristeći metode procesnog sistemskog inženjerstva u cilju optimalne sinteze reaktora (konceptualnog projektovanja).

Primenom ReSyPIO metodologije na industrijskom slučaju dobijanja vodonika u reakciji vodenog gasa poboljšanog hemisorpcijom ugljen dioksida je ostvaren značajan doprinos. Vodonik je važan element svakog energetskog sistema i vrlo verovatno gorivo budućnosti, budući da smanjuje štetne efekte po okolinu. Detaljno eksperimentalno istraživanje reakcije vodenog gasa na industrijskom katalizatoru je kao rezultat dalo novi i jednostavni kinetički model, što predstavlja naučni doprinos za buduća modelovanja i projektovanja industrijskih reaktora. Ekperimentalno ispitivanje reakcije vodenog gasa poboljšane hemisorpcijom je pokazalo da se komercijalni sorbent može efikasno koristiti, a da se na izlazu iz sistema može dobiti skoro čisti vodonik, kada je konverzija reaktanata potpuna, a ugljen dioksid skoro potpuno uklonjen in-situ sorpcijom. Ovo je povoljno kako sa ekonomskog aspekta (redukcija posebne sekcije za separaciju), tako i sa ekološkog (uklanjanje ugljen dioksida). Ispitivanje je rezultovalo novim kinetičkim modelom za hemisorpciju CO₂ na česticama kalcijum oksida, što takođe predstavlja naučni doprinos. Na kraju, ReSyPIO metodologija je primenjena na slučaj proizvodnje vodonika u reakciji

vodenog gasa poboljšanoj hemisorpcijom i membranskom separacijom vodonika, a rigorozna analiza i rezultati optimizacije su dali predloge za unapređenje ovog procesa i smernice za detaljno projektovanje.

4.2. Kritička analiza rezultata istraživanja

Rezultati doktorske disertacije su u velikoj meri potvrdili početnu hipotezu da je moguće postaviti i matematički formulisati konzistentnu metodologiju za sintezu hemijskih reaktora koja integriše različite koncepte intenzifikacije procesa i efikasno koristi numeričke metode optimizacije. Razvijena ReSyPIO metodologija je primenjena na dva veoma različita slučaja, što u zadovoljavajućoj meri demonstrira potencijal za opštu primenu. Rezultati su jasno pokazali mogućnosti za unapređenje analiziranih reakcionih sistema i dali preporuke za dalja istraživanja. Za generalnu primenjivost u reaktorskom inženjerstvu neophodno bi bilo primeniti ReSyPIO metodologiju na više, poželjno industrijski relevantnih primera, i po potrebi ga dodatno unaprediti. Eksperimentalni deo disertacije upotpunjuje istraživanje, daje zaseban naučni doprinos, ali i omogućava verifikaciju postavljenih modela za drugi slučaj proizvodnje vodonika.

U trenutnoj formi, direktna primena ReSyPIO metodologije umnogome zavisi od kvaliteta i dostupnosti podataka i parametara modela (eksperimentalno određenih ili preuzetih iz literature), kao i od efikasnosti dostupnih numeričkih metoda i softera. Stoga potencijalna primena može biti otežana za veoma kompleksne sisteme. Osim toga ReSyPIO metodologija zahteva zavidne veštine korisnika na polju modelovanja, numerike i izvođenja eksperimentalnih istraživanja, a takođe i vreme neophodno za implementaciju na željenu reakciju može biti dugačko. Na kraju, ReSyPIO metodologija kao rezultat daje preporuke za konceptualni dizajn reaktora, operativne uslove i režim rada. Preporuka se može razlikovati od finalnog dizajna reaktora i njegovih performansi, dobijenih nakon detaljne eksperimentalne, numeričke i ekonomske analize. U disertaciji i objavljenim naučnim radovima, jasno su izložene prednosti, nedostaci i ograničenja, kao i pravci daljeg razvoja metodologije.

4.3. Verifikacija naučnih doprinosa

Kandidat Luka Živković je rezultate istraživanja iz doktorske disertacije objavio u časopisima od međunarodnog značaja i saopštavanjem radova na međunarodnim skupovima. Iz oblasti istraživanja kojoj pripada predložena tema doktorske disertacije, Luka Živković je autor dva rada objavljena u časopisima od međunarodnog značaja: M21a - 1 rad, M21 - 1 rad i dva saopštenja prikazana na međunarodnim skupovima (M34 - 2 saopštenja):

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(2016)=7.182)

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(2016)=2.538)

Saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u izvodu (M34)

L.Živković, N. Nikačević, An optimization based reactor synthesis applied to intensified hydrogen production in water–gas shift reaction, 10th World Congress of Chemical Engineering, 01–05.10.2017, Barcelona, Spain, Abstract No. 26596

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 No. 1455.

Kandidat je takođe podneo naučni rad u časopis kategorije M21, koji je trenutno u postupku revizije nakon dobijenih recenzija (minor revision):

L. Živković, A. Pohar, B. Likozar, and N.M. Nikačević (2019), Reactor Conceptual Design by Optimization for Hydrogen Production through Sorption- and Membrane-enhanced Water–Gas Shift Reaction. *Chemical Engineering Science*, In revision, ISSN: 0009-2509, (IF(2017) = 3.306)

5. ZAKLJUČAK I PREDLOG

Na osnovu svega navedenog Komisija smatra da doktorska disertacija kandidata **Luke Živković**, dipl. ing. tehnologije, pod naslovom „**Metodologija za sintezu reaktora zasnovana na konceptima intenzifikacije procesa i primeni metoda optimizacije (eng. A methodology for reactor synthesis based on process intensification concepts and application of optimization methods)**“ predstavlja značajan i originalan naučni doprinos u datoj oblasti, što je i potvrđeno objavljivanjem radova u časopisima od međunarodnog značaja. Postavljeni predmet i ciljevi disertacije su u potpunosti ostvareni. Komisija je mišljenja da doktorska disertacija pod nazivom „**Metodologija za sintezu reaktora zasnovana na konceptima intenzifikacije procesa i primeni metoda optimizacije (eng. A methodology for reactor synthesis based on process intensification concepts and application of optimization methods)**“ u potpunosti ispunjava sve zahtevane kriterijume kao i da je kandidat tokom izrade disertacije pokazao izuzetnu naučno istraživačku sposobnost, originalnost i samostalnost u svim fazama izrade ove disertacije.

Imajući u vidu kvalitet, obim i naučni doprinos postignutih i prikazanih rezultata, Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću Tehnološko-metalurškog fakuleta, Univerziteta u Beogradu, da prihvati ovaj Referat, pruži na uvid javnosti podnetu doktorsku disertaciju kandidata **Luke Živković, dipl. ing.**, u zakonom predviđenom roku, kao i da Referat uputi Veću naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu i da nakon završetka procedure pozove kandidata na usmenu odbranu disertacije pred Komisijom u istom sastavu.

U Beogradu, 21.06.2019. godine.

ČLANOVI KOMISIJE:

Prof. dr Nikola Nikačević, redovni profesor
Univerzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

Prof. dr Menka Petkovska, redovni profesor
Univerzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

Dr Blaž Likozar, docent i viši naučni saradnik
Hemijski institut, Ljubljana, Slovenija