

# prikazi i priopćenja iz prakse

Radionica:

## Modeliranje i numeričke metode u kemijskom inženjerstvu

Ž. Ujević Andrijić

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije  
Zavod za mjerenja i automatsko vođenje procesa  
Savska cesta 16/5A, 10000 Zagreb

U vijećnici Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19 u Zagrebu, održana je 4. i 5. studenog 2010. radionica pod imenom *Modeliranje i numeričke metode u kemijskom inženjerstvu*. Organizacijski odbor su činili prof. dr. sc. Zoran Gomzi (voditelj), prof. dr. sc. Želimir Kurtanjek, doc. dr. sc. Gordana Matijašić, doc. dr. sc. Nenad Bolf, doc. dr. sc. Vanja Kosar.

Razvojem suvremenih računala i pripadajućih softverskih alata omogućeno je rješavanje složenih problema koji proizlaze iz opisa različitih kemijskih procesa i pojava. U svakom području kemijskog inženjerstva procesi se mogu modelirati i simulirati, te je bilo zanimljivo vidjeti kako tko od sudionika pristupa modeliranju i kojim se metodama modeliranja koristi u svom radu. Cilj održavanja radionice bio je okupiti znanstvenike FKIT-a koji se bave ili se imaju namjeru baviti modeliranjem, optimiranjem i simuliranjem kemijskih procesa te da se uz predavanja i aktivnu raspravu potakne razmjena znanja i vještina kao i moguće buduće suradnje.

Pored prof. Ž. Kurtanjeka s Prehrambeno-biotehnološkog fakulteta u Zagrebu radionici je prisustvovalo još nekoliko zaposlenika sa spomenutog fakulteta, koji su predstavili svoj rad i iskustva iz domene modeliranja.

S obzirom na to da je po prvi put na FKIT-u održana radionica s temom modeliranja procesa, odaziv je bio zadovoljavajuć (35 prijavljenih sudionika). Sudionici su pokazali veliko zanimanje tijekom izlaganja te su pitanjima i primjerima iz svojeg iskustva uvelike doprinijeli uspjehu radionice.



Slika 1 – Iskusi dvojac u trenutku dijeljenja savjeta, profesori Ž. Kurtanjek i Z. Gomzi

Na prvom danu radionice održana su sljedeća predavanja iskusnih predavača iz područja modeliranja kemijskih procesa:

1. Uloga i važnost matematičkog modeliranja u kemijskom inženjerstvu, *Zoran Gomzi*
2. Procjena i identifikacija parametara u modelima, *Želimir Kurtanjek, Zoran Gomzi*
3. Numeričke metode, *Želimir Kurtanjek, Zoran Gomzi*
4. Primjena modela za vođenje procesa, *Nenad Bolf*

Predavanja su imala pregledni i savjetodavni karakter, dajući osvrt na metodologije razvoja modela, mnogobrojne numeričke metode i metode identificiranja parametara u modelima. Sve faze razvoja modela, počevši od definiranja značajnih faktora (varijabli i parametara) do evaluacije i vrednovanja modela pokazane su na odgovarajućim primjerima iz područja kemijskog inženjerstva. Sudionici su aktivno raspravljali o važnosti i primjeni modeliranja, prednostima i nedostacima određene metode modeliranja. Dan je osvrt i na primjenu suvremenih programskih paketa, njihovu dostupnost i mogućnosti.

Drugi dan radionice bio je posvećen raznovrsnim primjerima modeliranja iz kemijskog inženjerstva. Održana su sljedeća predavanja:

1. *Željka Ujević Andrijić*: "Primjer modeliranja nestacionarnog prijenosa topline i procjena parametara"
2. *Tomislav Bolanča*: "Modeliranje gradijentne elucije u ionskoj kromatografiji"
3. *Sanja Martinez i Gordana Pustaj*: "Računalno modeliranje u korozijskom inženjerstvu"
4. *Anita Šalić i Ana Tušek*: "Modeliranje biotransformacija u mikroreaktorima"
5. *Neven Ukrainczyk*: "3D modeliranje prijenosa tvari u cementnim (poroznim) materijalima"
6. *Gordana Matijašić*: "Populacijske bilance – alat u kemijskom inženjerstvu"
7. *Ante Agić*: "Numeričko modeliranje na višestrukoj skali"
8. *Igor Dejanović*: "Modeliranje kemijskih procesa uz pomoć procesnih simulatora"

U navedenim predavanjima predstavljeni su različiti aspekti modeliranja u ovisnosti o području primjene i specifičnosti problema s kojima se kemijski inženjer može suočiti. Prezentirani su rezultati upotrebe sofisticiranih i robusnih programskih paketa za razvoj



Slika 2 – N. Ukrainczyk predstavlja trodimenzijsko modeliranje prijenosa tvari u cementnim materijalima

modela i simuliranje pojedinih pojava i procesa, kao i velike mogućnosti uporabe sudionicima već poznatih programskih alata i procesnih simulatora. Pri razvoju prezentiranih modela predavači su pokazali uspješnu primjenu fundamentalnih načela i jednadžbi kao i statističkih metoda te metoda umjetne inteligencije.

Na završnoj raspravi, zaključeno je kako je modeliranje u kemijskom inženjerstvu, bilo ono na makro- ili mikrorazini, neizbježno zbog složene prirode kemijskih procesa i pojava i da mu se u nastavi i na stručnim/znanstvenim okupljanjima treba pridavati veli-



Slika 3 – T. Bolanča predstavlja modeliranje gradijentne elucije u ionskoj kromatografiji

ka važnost. Predložena je i mogućnost budućih održavanja radionice s ciljem podučavanja sudionika radionice radu u određenom softverskom paketu.

Na kraju, može se zaključiti kako je nepobitna činjenica da se modeliranje i simuliranje procesa primjenjuje u velikoj mjeri na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije te kako je održavanje ovakve radionice pokazatelj kako se uz kreativnu razmjenu mišljenja mogu otkloniti nepoznanice i nadograditi trenutačna znanja. Radionica je u cijelosti ocijenjena vrlo korisnom i nedvojbeno je da se radujemo sljedećem susretu.