



Katowice, 15.01.2015

Dr hab. inż. Stanisław Gil
Zespół Energetyki Procesowej
Instytut Technologii Metali

RECENZJA

pracy doktorskiej mgr inż. Aliny Żogały
pt. „Symulacja komputerowa wpływu wody i tlenu w czynniku
zgazowującym na parametry gazu syntezowego”

Podstawy formalne wydania recenzji

Recenzję pracy doktorskiej mgr inż. Aliny Żogały opracowano na zlecenie Naczelnego Dyrektora Głównego Instytutu Górniczego z dnia 28.11.2014 r. wystawionego na podstawie uchwały Rady Naukowej GIG.

Ogólna charakterystyka, celowość podjęcia tematu badawczego oraz merytoryczna ocena pracy doktorskiej

Recenzowana praca doktorska została wykonana w Głównym Instytucie Górniczym podczas Interdyscyplinarnych Studiów Doktoranckich w Zakresie Czystych Technologii Węglowych pod kierunkiem dr hab. inż. Józefa Kabiesza, prof. GIG.

Jedną z przyszłościowych technologii przetwórstwa węgla jest jego zgazowanie, które można realizować w reaktorach z złożem stałym i fluidalnym, w reaktorze przepływowym oraz jako podziemne zgazowanie węgla. Technologia podziemnego zgazowania węgla w ostatnim czasie przyciąga coraz większą uwagę badaczy, ze względu na potencjalne korzyści techniczne i ekonomiczne, a także na ograniczenie szkodliwego oddziaływania tego

surowca na środowisko w konwencjonalnych procesach spalania. Zakres wykorzystania gazu z podziemnego zgazowania węgla jest dość szeroki. Jego produkcję można ukierunkować na wytwarzanie: amoniaku, wodoru, paliw ciekłych i gazowych oraz reduktorów do procesów metalurgicznych.

Dotychczasowe doświadczenia dowodzą, że dalsze doskonalenie technologii podziemnego zgazowania węgla wymaga pogłębienia znajomości mechanizmów zachodzących w tym procesie, a także opracowania dokładnych modeli matematycznych opisujących jego przebieg. Bardzo przydatnymi do tego celu narzędziami są programy z dziedziny numerycznej mechaniki płynów umożliwiające analizę zagadnień przepływu płynów, transportu ciepła i masy z uwzględnieniem reakcji chemicznych, a także zmiany własności gazu wynikające z turbulencji. Przeprowadzone w tych programach symulacje zjawisk fizycznych czy procesów technologicznych pozwalają na ich dokładne odwzorowanie oraz ograniczenie liczby kosztownych eksperymentów.

Właśnie tym zagadnieniom symulacji doktorantka poświęciła swoją rozprawę doktorską stawiając tezę, że istnieje możliwość uzyskania maksymalnej wartości opałowej gazu syntezowego poprzez odpowiedni dobór stężenia wody i tlenu w czynniku zgazującym, tak by można go było wykorzystać do celów energetycznych. Temat rozprawy dotyczy skomplikowanych i wielowątkowych problemów fizykochemicznych, nie do końca poznanych na obecnym poziomie rozwoju nauki, a rozwiązanie zagadnienie symulacji wymaga zastosowania nowoczesnych narzędzi numerycznych opisanych powyżej. Podjęcie się przez doktorantkę realizacji prezentowanej w pracy tematyki badawczej, należy uznać za bardzo celowe i potrzebne z punktu widzenia rozwoju technologii zgazowania węgla, zaś poziom i elementy naukowe wykonanych symulacji w pełni uzasadniają ich przyjęcie jako przedmiotu rozprawy doktorskiej.

Praca zawiera 115 stron, nie licząc załączników oraz streszczenia w języku polskim i angielskim, 17 tablic umieszczonych w tekście i 3 załączone w dodatkach, a także 44 rysunki. Zakres prac badawczych wykonanych przez doktorantkę jest bardzo obszerny i obejmuje między innymi:

- przegląd przedmiotowej literatury zawierający 81 zacytowanych pozycji, z których w rozprawie przedstawiono charakterystykę procesu podziemnego zgazowania węgla, czynniki wpływające na zgazowanie, uwagi o modelowaniu procesu PZW, modele: równowagowy, kinetyczny i CFD oraz omówiono narzędzia wspierające modelowanie procesów zgazowania węgla;

- w części praktycznej zaprezentowano wyniki modelowania w układzie równowagowym procesu zgazowania węgla, a także rezultaty symulacji zgazowania węgla bazujące na numerycznej mechanice płynów.

W części dotyczącej przeglądu literatury rozprawę rozpoczyna analiza dotycząca dokonań w badaniach nad podziemnym zgazowaniem węgla, gdzie przedstawiono między innymi: reakcje chemiczne zgazowania węgla, etapy procesu zgazowania, podstawowe założenia procesu PZW oraz znaczenie przemysłowe tego procesu. Następnie zostały omówione czynniki wpływające na skład chemiczny gazu procesowego, podano parametry paliw gazowych, przedstawiono analizę grup modeli matematycznych opisujących proces PZW oraz zaprezentowano przykłady oprogramowania wykorzystywanego w symulacjach tego procesu, co w konsekwencji umożliwiło doktorantce wybór odpowiednich modeli i pakietów komputerowych do realizacji rozprawy. Ten obszerny materiał obejmujący prawie ok. 50% pracy, zawierający wyczerpujące omówienie złożonych, wielostronnie uwarunkowanych procesów, umożliwił sformułowanie interesującego celu rozprawy. Autorka charakteryzuje się dużą dociekliwością oraz obiektywnym krytycyzmem w odniesieniu do informacji zawartych w publikacjach literaturowych.

Znaczna część pracy dotyczyła wstępnej analizy procesu z zastosowaniem równowagowego modelu PZW, gdzie rozważono szeroki zakres: temperatury, ciśnienia oraz składu czynnika zgazowującego, co w konsekwencji pozwoliło zawęzić zakres zmiennych wejściowych do modelu opracowanego w CFD. Wyniki modelowania umożliwiły także sporządzenie dodatkowych charakterystyk: wartości opałowej, temperatury adiabatycznego spalania, zapotrzebowania powietrza do spalania, granic zapłonu oraz efektywności energetycznej procesu zgazowania. Podsumowując rozdział Autorka podkreśliła, że skład gazu syntezowego z procesu PZW zależy od wielu zmiennych, takich jak: ciśnienie i temperaturę w reaktorze, skład zastosowanego czynnika zgazowującego, sposób jego doprowadzania, charakterystyka paliwa, czynniki geologiczne oraz sposób udostępniania pokładu i geometria reaktora.

Trzeci rozdział pracy poświęcony został opracowaniu interesującego modelu procesu podziemnego zgazowania węgla w wykorzystaniu CFD oraz przeprowadzeniu symulacji dla zmieniającego się zakresu udziałów pary wodnej i tlenu w czynniku zgazującym. Rezultatem wykonanych symulacji był skład gazu procesowego oraz temperatura na wylocie kanału ogniowego, co pozwoliło na określenie roli, jaką odgrywa para wodna w procesie PZW oraz wytypowanie takiego jej udziału, który umożliwi wytworzenie gazu

o maksymalnej wartości opałowej, czym doktorantka udowodniła postawioną tezę rozprawy doktorskiej. Powyższy model pozwolił także Autorce na przeprowadzenie szczegółowej analizy procesu PZW w czasie i przestrzeni, co dało sposobność zdefiniowania faz procesu oraz wyodrębnienie poszczególnych stref przestrzeni reakcyjnej. Przy pomocy modelu CFD doktorantka uzyskała maksymalną wartość opałową gazu syntezowego, gdy skład czynnika zgazowującego na wlocie do reaktora wynosił 70 % tlenu i 30 % pary wodnej. Zdaniem Autorki, dla analizowanych parametrów reaktora i procesu, wprowadzenie pary wodnej do czynnika zgazowującego jest korzystne i nie powinno przekraczać 75 % udziału molowego.

Uwagi do rozprawy doktorskiej

Praca została zredagowana bardzo starannie. Napisana jest zwięzłym językiem, a podawane stwierdzenia są dobrze wyważone. Podczas jej czytania nasunęło mi się stosunkowo niewiele uwag merytorycznych. Zauważyłem także niewiele błędów formalnych i drukarsko-redakcyjnych. Dla kompletności recenzji poniżej przytaczam ważniejsze z nich:

- ❑ w spisie oznaczeń na stronie 9 oznaczenie „ c_p ” jest wyjaśnione jako „ciepło właściwe”, a jest to pojemność cieplna właściwa przy niezmiennym ciśnieniu, natomiast ciepło właściwe to iloczyn pojemności cieplnej właściwej i temperatury; na stronie 11 oznaczenie „ ν ” jest przedstawione jako „lepkość kinematyczna”, a oznaczenie „ μ ” jako „lepkość dynamiczna”, a powinno być kinematyczny i dynamiczny współczynnik lepkości;
- ❑ w tabelicy I.4. na stronie 23 wartość opałowa podawana jest $kcal\ m^{-3}$, a należałoby ją przeliczyć na kJ , ponieważ obecnie obowiązującym układem jednostek jest układ SI, ponadto wartość opałową podaje się na m^3_n , dotyczy to także tabelicy na str. 59, podanych jednostek w tekście (np. str. 24) oraz opisów rysunków na str. 63, 66 i dalszych;
- ❑ na stronie 40 autorka oznacza czas jak „ T ”, a w spisie oznaczeń jako „ t ”;
- ❑ na stronie 45 w opisie rys. I.11. jest podany „ $\log k_R$ ”, który to współczynnik szybkości reakcji „ k_R ” ma wymiar; chciałbym prosić o wyjaśnienie, jaka będzie jednostka po wykonaniu operacji logarytmowania tego współczynnika, bo moim zdaniem nie można logarytmować wielkości mianowanej, bo temu służą wielkości zredukowane;

- ❑ na stronie 47 w tablicy I.13. i na stronie 86 w równaniu zachowania pędu w wyrażeniu „ $\text{div}(\mu \text{grad} \vec{u})$ ” podany jest gradient wektor prędkości elementu płynu „ $\text{grad} \vec{u}$ ”, a powinna być dywergencja „ $\text{div} \vec{u}$ ”, gdyż gradient dotyczy wielkości skalarnych;
- ❑ na stronie 57 we wzorach aproksymacyjnych dla współczynników przy wyrazie drugim i kolejnych powinny być podane jednostki, to dotyczy również wzoru na pojemność cieplną właściwą węgla na str. 92;
- ❑ na stronie 57 w tablicy II.1. raz jest wartość kaloryczna, a cztery wiersze poniżej jest wartość opałowa;
- ❑ na stronie 21 i 60 podana jest ta sama grupa wzorów stechiometrycznych spalania, wystarczy się powołać na str. 60 na wzory ze str. 21;
- ❑ na rys. II.5. str. 66 i rys. II.13. str. 77 ciśnienie podane jest w atmosferach fizycznych, a ze względu na układ SI powinno być Pa ;
- ❑ na rysunkach na str. 75, 77, 79-81 brak jest jednostek temperatury adiabatycznego spalania i minimalnego zapotrzebowania powietrza do spalania;
- ❑ w rozdziale III dotyczącym modelu procesu zgazowania węgla należałoby podać warunki brzegowe zdefiniowane w programie „Ansys-Fluent” oraz przeprowadzić studium wrażliwości na gęstość siatki;
- ❑ nieliczne usterki stylistyczne i błędy literowe zaznaczyłem w dostarczonym egzemplarzu pracy i z tego powodu nie będę ich zamieszczał w tym miejscu.

Przytoczone powyżej uwagi mają w większości charakter dyskusyjny lub mówią jedynie o niedociągnięciach i w niczym nie pomniejszają zasadniczej wartości pracy.

Podsumowanie pracy

Recenzowana praca przedstawia wiele oryginalnych elementów naukowych i poznawczych, a także zawiera wiele wątków i wymaga szczegółowego opisu występujących zjawisk fizykochemicznych, co stanowi trudne wyzwanie dla autora. Za największe osiągnięcie doktorantki uważam opracowanie matematycznego modelu procesu podziemnego zgazowania węgla z użyciem numerycznej mechaniki płynów, gdzie wykazała się dużą znajomością symulacji przepływu płynów w środowisku reagującym chemicznie

wykorzystując pakiet komercyjny „Ansys-Fluent”. Podsumowując uważam, iż postawiony w pracy ambitny cel został osiągnięty, a uzyskane wyniki stanowią cenny materiał uzupełniający dotychczasową wiedzę dotyczącą podziemnego zgazowania węgla.

Wniosek końcowy

Stwierdzam jednoznacznie, że zgodnie z ustawą o stopniach i tytułach naukowych, praca doktorska mgr inż. Aliny Żogały w pełni spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim i stawiam wniosek o jej dopuszczenie do publicznej obrony przed Radą Naukową Głównego Instytutu Górnictwa.

