

Prof. dr hab. Krzysztof Warmuziński
Instytut Inżynierii Chemicznej PAN
ul. Bałtycka 5, 44-100 Gliwice

7 stycznia 2015

RECENZJA

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

Ocena rozprawy

Rozprawa doktorska Pani mgr inż. Aliny Żogały dotyczy ważnego problemu konwersji węgla do gazu syntezowego w oparciu o proces podziemnego zgazowania. Zagadnienie to mieści się w obszarze tak zwanego *precombustion decarbonization*, polegającego na stosownej transformacji paliwa pierwotnego w obecności tlenu lub pary wodnej (lub obu tych czynników łącznie) do gazu syntezowego bądź, ostatecznie, do mieszaniny wodoru i dwutlenku węgla. Gaz syntezowy może być z kolei wykorzystany do szeregu ważnych syntez chemicznych lub, po usunięciu CO₂, jako czyste źródło energii.

Tematyka podjęta przez doktorantkę jest więc niezwykle aktualna, o olbrzymim potencjale aplikacyjnym, a jednocześnie bardzo złożona. Proces podziemnego zgazowania węgla (PZW) jest bowiem silnie niestacjonarny, zachodzi

w środowisku o niejednoznacznej i niejednorodnej charakterystyce chemicznej i strukturalnej, z utrudnionym dostępem do obszaru reakcyjnego.

Mgr inż. Alina Żogała jasno formułuje cel pracy – jest nim maksymalizacja wartości opałowej wytwarzanego gazu syntezowego przez odpowiedni dobór zawartości pary wodnej i tlenu w mieszaninie zgazowującej. Doktorantka nie poprzestaje na analizie tylko tego jednego parametru, określając dodatkowo relacje między składem czynnika zgazowującego a temperaturą spalania produktu, granicami zapłonu i minimalnym zapotrzebowaniem powietrza do spalania, oraz badając wpływ ciśnienia i temperatury.

Rozprawę podzielić można na dwie zasadnicze części. Część pierwsza (Rozdział I) zawiera obszerny przegląd literatury dotyczącej podstawowych zagadnień związanych z badanym procesem. Doktorantka przedstawia charakterystykę PZW i uzyskiwanego gazu syntezowego oraz omawia zagadnienia dotyczące modelowania procesu. Opis ilościowy uwzględnia model równowagowy, model kinetyczny oraz model oparty na obliczeniowej dynamice płynów. Rozdział I jest bardzo dobrym wprowadzeniem do kolejnej części, zawierającej już konkretne wyniki uzyskane z zastosowaniem omawianych modeli (Rozdziały II i III). Rozdział II dotyczy równowagowego modelu zgazowania, opartego na szeregu założeń upraszczających związanych przede wszystkim z chemizmem procesu. Obliczenia wykonano wykorzystując komercyjny pakiet obliczeń numerycznych Mathematica dla czterech polskich węgla – węgla brunatnego z kopalni Bełchatów oraz węgla kamiennych z kopalni Bobrek, Bielszowice oraz Ziemowit. Doktorantka stwierdza między innymi, że z punktu widzenia wartości opałowej produktu najmniej efektywnym czynnikiem zgazującym jest powietrze. Kaloryczność gazu syntezowego silnie rośnie w wyniku konwersji w atmosferze czystej pary wodnej i czystego tlenu. Istotny

jest także wpływ ciśnienia i temperatury – podwyższenie temperatury procesu i obniżenie ciśnienia korzystnie wpływają na wartość opałową produktu.

Kolejny fragment rozprawy poświęcony został analizie procesu PZW z wykorzystaniem obliczeniowej dynamiki płynów (CFD). Obliczeniowa dynamika płynów jest gałęzią mechaniki płynów, stosującą metody numeryczne do rozwiązywania problemów związanych z przepływem gazów i cieczy. W szczególności, obliczeniowa dynamika płynów umożliwia określenie pól prędkości, ciśnień i stężeń w układach o złożonej geometrii. Podstawą ilościową CFD są równania Navier-Stokesa, oparte na zasadzie zachowania masy i pędu poruszającego się płynu. Choć historia tych równań ma już blisko 200 lat, pozostają one wciąż poważnym problemem matematycznym, a ich rozwiązanie (poza najprostszymi przypadkami) możliwe jest jedynie na drodze numerycznej. Należy podkreślić, że jakość obliczeń CFD, a tym samym ich walor poznawczy i użytkowy, zależy w znacznym stopniu właśnie od jakości wprowadzanych danych. Doktorantka jest tego w pełni świadoma i do wyboru danych podchodzi niezwykle starannie, starając się nie wykraczać poza dopuszczalny margines błędów. Mgr inż. Alina Żogała zdaje sobie zarazem sprawę z faktu, że konieczne jest dokonanie pewnych wstępnych założeń upraszczających mających na celu zapewnienie, z jednej strony, funkcjonalności modelu CFD, zaś z drugiej – wiarygodności obliczeń.

Stosowne dane wprowadzono do pakietu obliczeniowego ANSYS Fluent, umożliwiającego modelowanie procesu w oparciu o fundamentalne równania i zależności CFD. Stosując to narzędzie doktorantka uzyskuje ważne praktycznie wnioski ilościowe. Przede wszystkim okazuje się, że choć istnieje pewien optymalny poziom stężeń tlenu i pary wodnej w czynniku zgazowującym, dla których kaloryczność gazu syntezowego osiąga maksimum, to wyliczane maksimum jest stosunkowo płaskie. Funkcję celu powinny więc

raczej stanowić inne parametry (np. zawartość tlenku węgla lub wodoru). Co więcej, okazuje się, że dla przyjętych danych wejściowych i analizowanego węgla (węgiel kamienny z kopalni Bielszowice), podwyższenie zawartości pary wodnej powyżej pewnej wartości (ok. 75%) prowadzi do pogorszenia jakości produktu z punktu widzenia stosowanych kryteriów.

Istotnym wkładem doktorantki jest zatem wskazanie możliwości obliczeniowych tkwiących w dostępnych pakietach numerycznych (Mathematica, ANSYS Fluent) w zastosowaniu do procesu o wysokim stopniu złożoności – podziemnego zgazowania węgla. Mgr inż. Alina Żogała umiejętnie stosuje oba te narzędzia, uzyskując jednocześnie szereg ciekawych wniosków praktycznych. Rozprawa napisana jest dobrym językiem, z dużą dbałością o szatę graficzną i edycję tekstu. W połączeniu z wagą i aktualnością tematyki daje to pracę, która posiada wszelkie wymagane atrybuty rozprawy doktorskiej.

Przedstawione dalej uwagi są dyskusyjne i nie obniżają pozytywnej oceny pracy, stanowiąc raczej naturalną konsekwencję znacznego stopnia złożoności analizowanych zagadnień.

(1) Zbyt obszerne są fragmenty nie stanowiące własnego wkładu autorki. Powielanie znanych równań, definicji i omówień, zapożyczonych z innych źródeł, nie wydaje się konieczne dla zachowania przejrzystości i spójności pracy. Brak jest również krytycznego omówienia cytowanych źródeł.

(2) W porównaniu modeli kinetycznych z modelami równowagowymi (str. 43) brak jest najbardziej istotnego elementu różniącego te ujęcia: tylko te pierwsze umożliwiają określenie wielkości aparatu niezbędnej do ilościowej realizacji określonego procesu (separacji faz, reakcji chemicznej lub biochemicznej), a

więc tylko one mają walor projektowy. Modele równowagowe tej wartości użytkowej są pozbawione.

(3) Komentarza wymaga równanie transportu pędu (Tabela I.13, str. 47). Operator div stosowany jest tam do pola skalarnego, natomiast grad – do pola wektorowego, tymczasem dywergencja powinna dotyczyć pola wektorowego (jest ona skwarem), a gradient – pola skalarnego (jest on wektorem). Równanie to wydaje się ponadto niespójne, bowiem pierwszy człon po lewej stronie zależności jest wektorem, natomiast pozostałe człony są skwarem. Problem ten nie występuje już w formalnie pokrewnych, pozostałych równaniach w Tab. I.13, gdzie wszystkie człony są skwarem. Wskazane byłoby też ujednolicenie symboliki (np. div , grad występują na str. 47 i 87, ale na str. 89 pojawia się operator ∇).

(4) Nie można zgodzić się ze stwierdzeniem, że *...modele matematyczne PZW opierają się na równaniach i stałych kinetycznych **lub też** na prawach i zasadach mechaniki płynów* (str. 105) – oba te elementy łącznie powinny stanowić ilościową podstawę modelu, nawet za cenę pewnych uproszczeń. Jak pisze sama doktorantka na str. 88, istotna jest relacja między szybkością procesów chemicznych a szybkością procesów transportu (masy, ciepła i pędu), zatem wyeliminowanie któregoś z tych elementów musi być poprzedzone staranną analizą ich szybkości względnych.

(5) Pewnym mankamentem pracy jest brak dyskusji stosowanych założeń upraszczających. Doktorantka nie uzasadnia np. wyboru układu reakcyjnego w modelu równowagowym (cztery reakcje (str. 56) spośród 13 najważniejszych (str. 13)); brak jest także obszerniejszej analizy wpływu przyjętych uproszczeń na uzyskane wyniki (choć lukę tę częściowo wypełniają rozważania w Dodatkach A i B).

(6) Niedosyt pozostawia brak porównania uzyskanych wyników z danymi eksperymentalnymi. Złożone narzędzia numeryczne, jakimi posługiwała się doktorantka, wymagają wstępnej walidacji – przynajmniej częściowej, dotyczącej najważniejszych modułów pakietu. Brak konfrontacji z realiami doświadczalnymi zmusza do dodatkowej ostrożności w interpretacji czysto numerycznych wniosków.

(7) Nie jest oczywiste, dlaczego w obliczeniach CFD uwzględniono tylko węgiel z kopalni Bielszowice. Włączenie pozostałych węgli umożliwiłoby przynajmniej jakościową ocenę wpływu podstawowych parametrów strukturalnych i chemicznych surowca na właściwości gazu syntezowego (przede wszystkim na położenie maksimum wartości opałowej).

(8) Cennym elementem pracy jest lista propozycji dalszych badań. Tę listę należałoby jednak uzupełnić o optymalizację kosztową lub optymalizację opartą na całkowitej emisji dwutlenku węgla. Zgazowanie czynnikiem o wysokiej zawartości tlenu podnosi oczywiście kaloryczność produktu, ale wymaga dodatkowych nakładów energetycznych na przygotowanie tak wzbogaconego czynnika.

(9) Praca napisana jest bardzo starannie, z dbałością o stronę językową i typograficzną. Niektóre z nielicznych usterek edytorskich wymieniono poniżej:

- *Fishera-Tropscha* zamiast, poprawnie, *Fischera-Tropscha* (Rys. I.5 i Tab. I.1, str. 18), *rektorze* zamiast *reaktorze* (str. 25, 31), *usuniecie* zamiast *usunięcie* (str. 26)
- *stała reakcji* zamiast *stała równowagi reakcji* (str. 32)

- formy osobowe z *by* pisane osobno (*należało by* zamiast, poprawnie, *należałoby* (str. 38)), *mogło by* zamiast *mogłoby* (str. 55), *więzało by się* zamiast *więzałoby się* (str. 116)
- T jest temperaturą, a nie czasem; E_R powinno mieć wymiar kJ/kmol (str. 40)
- V jest ilością wydzielonych części lotnych *po czasie t*, a nie *w chwili t* (str. 41)
- *dwu-etapowy* zamiast *dwuetapowy* (str. 41), *progresive* zamiast *progressive* (str. 42), *przestawić* zamiast *przedstawić* (str. 47), *Jasieńka* zamiast *Jasieńko*, *Krishan* zamiast *Krishnan* (str. 109)
- prawidłowym terminem jest *lepkość wirowa* (*eddy viscosity*), a nie *lepkość turbulencji* (str. 86, 87)

Wniosek końcowy

Przedstawiona do oceny rozprawa skonstruowana jest w sposób logiczny i konsekwentny, dowodząc sprawności badawczej kandydatki, jej wiedzy i umiejętności korzystania ze złożonych narzędzi numerycznych. Zarówno od strony teoretycznej, jak i praktycznej wnioski zaproponowane przez mgr inż. Alinę Żogałę stanowią postęp w opisie złożonych procesów podziemnego zgazowania węgla, przyczyniając się do wzbogacenia wiedzy o tej klasie technologii.

W tej sytuacji, zgodnie z Ustawą z dnia 14 marca 2003 o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. Nr 65, poz. 595, z późn. zm.) oraz w Ustawie z dnia 27 lipca 2005 – Prawo o szkolnictwie wyższym (Dz.U. Nr 164, poz. 1365, z późn. zm.), bez zastrzeżeń wnoszę o dopuszczenie kandydatki do publicznej obrony rozprawy doktorskiej.

