

**AGH**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Inżynierii Mechanicznej i Robotyki

dr hab. inż. Paweł Madejski, prof. AGH
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
Wydział Inżynierii Mechanicznej i Robotyki
Katedra Systemów Energetycznych
i Urządzeń Ochrony Środowiska
al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
e-mail: pawel.madejski@agh.edu.pl

Kraków, 18.07.2021 r.

RECENZJA

rozprawy doktorskiej autorstwa mgr inż. Jakuba Mularskiego
zatytułowanej **“CFD modeling of the gasification process of solid fuels”**
wykonanej na Wydziale Mechaniczno-Energetycznym pod opieką promotora
dr hab. inż. Norberta Modlińskiego, prof. PWr

1. Podstawa opracowania

Recenzja wykonana na zlecenie Przewodniczącego Rady Dyscypliny Naukowej Inżynieria Środowiska, Górnictwo i Energetyka Politechniki Wrocławskiej, Pana dr hab. inż. Roberta Króla, prof. PWr – zgodnie z pismem nr RDND08/42/2021.

2. Zasadność podjęcia tematu

Praca jest poświęcona problematyce modelowania procesu zgazowania paliw stałych z zastosowaniem Komputerowej Mechaniki Płynów (CFD – Computational Fluid Dynamics). Procesy zgazowania, a w szczególności zgazowanie strumieniowe, jest jedną z najbardziej obiecujących technologii, charakteryzujących się wysoką sprawnością i niską szkodliwością dla środowiska. Ponieważ ciągle zdecydowana większość energii na świecie jest wytwarzana z paliw kopalnych, rozwój technologii ograniczających negatywny wpływ na środowisko jest konieczny i nieunikniony. Stosowanie paliw gazowych w miejsce paliw stałych jest jednym z rozwiązań wykorzystanych w wielu gałęziach przemysłu, zarówno do produkcji energii elektrycznej jak również do wytwarzania produktów znajdujących zastosowanie w innych gałęziach przemysłu np. do produkcji paliw płynnych.

Akademia Górniczo-Hutnicza | Wydział Inżynierii Mechanicznej i Robotyki

al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków,

tel. +48 12 617 39 59

www.agh.edu.pl

Regon: 000001577 NIP: 6750001923

Wydział Mechaniczno-Energetyczny

W9/654/2021

Wpłynęło dnia 28.07.2021

Bardzo złożone zjawiska zachodzące w trakcie procesu zgazowania nie zostały jeszcze dokładnie poznane na poziomie fundamentalnym. W literaturze można znaleźć wiele modeli opisujących ten proces, na co wskazuje m.in. bardzo dokładny przegląd literatury przeprowadzony przez autora w rozdziale 2. Opracowywane modele matematyczne, pozwalają na otrzymanie wyników na dużym poziomie uogólnienia i wymagają weryfikacji eksperymentalnej lub szeregu symulacji potwierdzających ich wiarygodność. Poszukiwanie dokładnych modeli lub procedur pozwalających poprawić dokładność wyników na etapie projektowania, optymalizacji pracy lub modernizacji reaktorów jest aktualnie dużym wyzwaniem, którego podjął się Pan mgr inż. Jakub Mularski w trakcie realizacji swojej rozprawy doktorskiej.

Zadanie badawcze podjęte przez Doktoranta wymaga szerokiej wiedzy z zakresu teorii procesów i zjawisk w trakcie zgazowania, modelowania numerycznego z CFD, ale związanej także z głęboką znajomością problematyki, technologii oraz warunków pracy reaktorów. Temat należy uznać za trudny, aktualny, związany z wypełnieniem luki w dotychczasowych pracach badawczych. W związku z powyższym wybór poruszanej w rozprawie mgr inż. Jakuba Mularskiego problematyki badawczej uznaje za trafny oraz interesujący z naukowego, w tym także z aplikacyjnego punktu widzenia.

3. Zakres rozprawy

Przedstawiona do oceny rozprawa doktorska Pana mgr inż. Jakuba Mularskiego posiada 176 stron, 7 rozdziałów, które stanowią główną część pracy, streszczenie, zestawienie skrótów wykorzystywanych w pracy, spis rysunków i tablic oraz bibliografię złożoną z 247 pozycji literaturowych. Całość napisana jest w języku angielskim, a rozdziały nr 2, 4, 5 i 6 posiadają bezpośrednie odniesienia do publikacji autora, opublikowanych w renomowanych międzynarodowych czasopiśmie o wysokim wskaźniku cytowalności.

Na rozdział 1 zatytułowany „Introduction” składa się 11 stron wprowadzenia dla uzasadnienia naukowego problemu przedstawionego w rozprawie. W rozdziale autor omawia technologie gazyfikacji, trendy na rynku energii ukierunkowane na ograniczaniu poziomu emisji i metodach ograniczania emisji CO₂, gazyfikacji paliw węglowych z przedstawieniem typów reaktorów do ich zgazowania. W rozdziale 1 znajduje się również krótkie wprowadzenie do metod Komputerowej Mechaniki Płynów (CFD – Computational Fluids Dynamics). Rozdział składa się z 8 rysunków, 1 tabeli.

W rozdziale 2 autor dokonał obszernego przeglądu literaturowego w zakresie modelowania kluczowych elementów w całym procesie zgazowania: procesów odgazowania

wraz z opisem mechanizmów stosowanych w jego analizie, modelowania fazy gazowej i jej spalania, modelowania reakcji powierzchniowych. Dodatkowo w rozdziale 2 znaleźć można cel rozprawy doktorskiej wraz z jego zakresem. Celem rozprawy jest **zbadanie najczęściej stosowanych podejść do modelowania odgazowania, fazy gazowej i konwersji koksu oraz zaproponowanie technik optymalizacji, które pozwolą na uzyskanie unikalnych parametrów kinetycznych ważnych tylko dla badanych warunków i które poprawią dokładność symulacji CFD.**

Cały rozdział (57 stron) zawiera 15 rysunków, 14 tabel i bazuje na pracy autora:

[31] Mularski J, Pawlak-Kruczek H, Modliński N. A review of recent studies of the CFD modelling of coal gasification in entrained flow gasifiers, covering devolatilization, gas-phase reactions, surface reactions, models and kinetics. *Fuel* 2020;271:1–36. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117620>. MNiSW (2019-2021): 140 pts, IF (2019): 5.578.

Rozdział 3 przedstawia opis zastosowanego modelu CFD pozwalającego symulować proces zgazowania strumieniowego węgla. Wprowadzenie do wyboru zastosowanego modelu jest poświęcone opisowi metod modelowania przepływów turbulentnych, modelowania transportu fazy gazowej poprzez szczegółowy opis równań zachowania masy, pędu i energii, modelowania transportu cząstek i ich interakcji z fazą gazową. W rozdziale znajduje się również opis metod modelowania radiacyjnej wymiany ciepła w symulacjach CFD. Rozdział zawiera 3 rysunki, składa się z 11 stron i brak w nim zestawień tabelarycznych.

W rozdziale 4 omówione zostały procedury optymalizacyjne dla procesu odgazowania, optymalizacja parametrów kinetycznych, optymalizacja składu części lotnych, stosowane w celu poprawy dokładności symulacji CFD. Wyniki przeprowadzonych prac optymalizacyjnych zostały przedstawione w postaci porównania wyników uzyskanych na drodze modelowania i badań eksperymentalnych osobno dla procesu odgazowania i pirolizy węgla. Rozdział 4 składa się z 31 stron, zawiera 28 rysunków, 13 tabel i bazuje na następującej pracy autora:

[224] J. Mularski, N. Modliński, Entrained flow coal gasification process simulation with the emphasis on empirical devolatilization models optimization procedure, *Appl Therm Eng* 2020;175:1–14. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.115401> MNiSW (2019-2021): 140 pts, IF (2019): 4.725.

Rozdział 5, dotyczący badań nad fazą gazową, omawia matematyczne modele zastosowane w opracowanym modelu CFD, które najdokładniej odwzorowują proces

zgazowania. Przeprowadzono analizy z wykorzystaniem dwóch typów reaktorów oraz analizę CFD w celu zbadania wpływu mechanizmów reakcji chemicznych i ich interakcji z modelem turbulencji na zgazowanie węgla w reaktorach typu strumieniowego.

Rozdział 5 składa się z 26 stron, zawiera 23 rysunki, 10 tabel i bazuje na następującej pracy autora:

[241] Mularski J., Modliński N. Impact of Chemistry – Turbulence Interaction Modeling Approach on the CFD Simulations of Entrained Flow Coal Gasification. *Energies* 2020;13:6467. <https://doi.org/10.3390/en13236467> MNiSW (2019-2021): 140 pts, IF (2019): 2.702.

W rozdziale 6 autor opisuje procedurę optymalizacyjną procesu konwersji koksu w celu poprawy dokładności symulacji. Opracowany model numeryczny został zweryfikowany na podstawie danych eksperymentalnych z reaktora BYU, a zastosowane parametry kinetyczne wykazały bardzo istotny wpływ na symulacje procesu zgazowania.

Rozdział 6 składa się z 27 stron, zawiera 32 rysunki, 5 tabel i bazuje na następującej pracy autora:

[245] Mularski J., Modliński N. Entrained-flow Coal Gasification Process Simulation with the Emphasis on Empirical Char Conversion Models Optimization Procedure. *Energies* 2021;14:1729. <https://doi.org/10.3390/en14061729> MNiSW (2019-2021): 140 pts, IF (2019): 2.702.

Rozdział 7 przedstawia bardzo ogólne wnioski oraz plany dalszych prac nad procedurami optymalizacyjnymi.

Podsumowując, omówiony powyżej podział rozprawy na poszczególne rozdziały jest właściwy, chronologicznie omawia prowadzone przez kandydata badania. Przedstawiony cel pracy jest zgodny z tematem rozprawy a wymieniony zakres wyczerpuje tematykę przedstawioną w tytule rozprawy.

4. Uwagi krytyczne i redakcyjne

Poniżej przedstawiam uwagi krytyczne, które powinny zostać poddane dyskusji i omówieniu w trakcie obrony rozprawy.

- W opisach równań występują błędne jednostki np. J/mol/K w równaniu (2.1), a powinno być J/(mol·K), albo jest po prostu ich brak np. w równaniu (2.9) E_D - the mean activation Energy (-). Generalnie brak pełnego spisu oznaczeń wraz z jednostkami, w pracy z tak

bogatym zapleczem matematycznym i wieloma równaniami opisującymi modele dla złożonych zjawisk i procesów, jest sporym brakiem utrudniającym studiowanie rozprawy.

- Autor prezentuje szereg wyników w postaci wykresów np. rysunki 4.16 – 4.22, jednak brakuje dla tych wyników interpretacji i wniosków. Na stronie 101 Autor pisze "Figure 4.16, Figure 4.18, Figure 4.22, Figure 4.19, Figure 4.20, Figure 4.21 and Figure 4.22 present the concentration of the main species in seven radial traverses". Rysunek 4.17 nie został nigdzie wskazany. Nasuwa to pytanie, czy wszystkie wyniki są ważne i należy je pokazywać, czy należało rozbudować ich opis oraz ich interpretację.

- W jaki sposób można porównywać wyniki symulacji w postaci krzywej z pojedynczym punktem z badań eksperymentalnych (rys. 5.18, 5.19). Czy porównywanie wyników wybranych modeli w tym wypadku jest uzasadnione? W mojej ocenie pozwala to tylko na wskazanie poprawności w założeniach dla stosowanych modeli.

- Praca posiada bardzo krótkie i zbyt ogólne podsumowanie (rozdział 7), nie współmierne do szeregu analiz i wyników w postaci wykresów, ale także tabelarycznych zestawień błędów w analizowanych przypadkach. Wnioski takie jak:

„Zoptymalizowane modele odgazowania i konwersji zwęglonych zdołały zwiększyć poziom dokładności w odniesieniu do danych eksperymentalnych. Jeśli chodzi o fazę gazową, zbadane mechanizmy reakcji i podejścia do interakcji turbulencja-chemia okazały się mieć istotny wpływ na proces zgazowania.” (The optimized devolatilization and char conversion models managed to increase the level of accuracy with respect to the experimental data. As regards the gas phase, the investigated reaction mechanisms and turbulence-chemistry interaction approaches turned out to have a substantial impact on the gasification process.)

wymagają podparcia liczbami, które w pracy można odnaleźć, jako wyniki szeregu symulacji i analiz. Sugeruję aktualizację tej części pracy (rozdział 7), a w trakcie publicznej obrony przedstawienia i rozwinięcia tej kwestii.

Wszystkie wymienione uwagi mają charakter dyskusyjny i nie wpływają na wysoką ocenę przedstawionej rozprawy.

Poniżej uwagi o charakterze redakcyjnym:

- W pracy można znaleźć w kilku miejscach formę osobową np. „postanowiłem” „położyłem”. Powinny to być formy bezosobowe.

- wiele rysunków (w tym rysunków autora pochodzących z publikacji) ma wygląd i jakość skanu.

- Na stronie 109 pusta przestrzeń pomiędzy odniesieniem do tabeli 4.8 a 4.9.

- Brak odwołania w tekście do Rysunku 4.17 (str. 101).

- Na stronie 104, Autor odwołuje się do Rysunku 4.26a i 4.26b, podczas gdy Rysunek 4.26 nie posiada zaznaczonego podziału na a i b.

- Brak odniesienia w tekście do Rys. 5.1.

- Na stronie 122, autor odwołuje się do Rysunku 5.6a, 5.6b i 5.6c, podczas gdy Rysunek 5.6 nie posiada zaznaczonego podziału na a, b i c.

5. Ocena rozprawy i wnioski końcowe

Jako osiągnięcia Doktoranta w przedstawionej do recenzji rozprawie należy, moim zdaniem, wskazać:

1. Budowę modelu numerycznego CFD dla badań procesu zgazowania, uwzględniającego bardzo złożone zjawiska fizyczne, poprawnie odwzorowane, zamodelowane oraz zweryfikowane na podstawie dostępnych danych eksperymentalnych.
2. Opracowanie procedur i przeprowadzenie prac optymalizacyjnych dla parametrów kinetycznych, jak również konwersji koksu mających na celu poprawę dokładności wyników modelowania.

W podsumowaniu opinii informuję, że przedstawione uwagi krytyczne nie podważają pozytywnej oceny całej rozprawy, a Doktorant zrealizował postawione sobie podstawowe cele, przedstawił oryginalne rozwiązanie problemu naukowego dla założonego celu **zbadania najczęściej stosowanych podejść do modelowania odgazowania, fazy gazowej i konwersji koksu oraz zaproponowanie technik optymalizacji, które pozwolą na uzyskanie unikalnych parametrów kinetycznych ważnych tylko dla badanych warunków i które poprawią dokładność symulacji CFD.**

Autor rozprawy, mgr inż. Jakub Mularski, wykazał się ogólną wiedzą teoretyczną w zakresie związanym z problematyką zgazowania paliw stałych oraz modelowania CFD procesów zachodzących w trakcie zgazowania, niezbędną do przygotowania pracy doktorskiej. Wynika to zarówno z treści rozprawy jak i z jego dorobku publikacyjnego (10 publikacji, 603 pkt. wg. MNiSW, IF=15.707).

Rozprawa doktorska Jakuba Mularskiego pt. „*CFD modeling of the gasification proces of solid fuels*” będąca przedmiotem recenzji i oceny, **stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego oraz potwierdza ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w Dyscyplinie Naukowej Inżynieria Środowiska, Górnictwo i Energetyka wraz z umiejętnościami samodzielnego prowadzenia pracy naukowej.** Spełnia w całości warunki i wymagania stawiane rozprawom doktorskim, określone w Art. 13 Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 r. (Dz. U. Nr 65, poz. 595 z późn. zm.).

W oparciu o powyższe stawiam wniosek do Rady Dyscypliny Naukowej Inżynieria Środowiska, Górnictwo i Energetyka Politechniki Wrocławskiej o dopuszczenie doktoranta do kolejnych etapów przewodu doktorskiego.

Paweł Madejski