Politechnika Śląska
Wydział Chemiczny
ul. Ks. M. Strzody 7
44-100 Gliwice

Gliwice, 2013.09.19

Dr hab. inż. Jan Thullie prof. Pol. Śl.

O C E N A

Pracy doktorskiej mgr inż. Agaty Małysiak pt.:" Wybrane zagadnienia przenoszenia skali w krystalizatorach z wewnętrzną cyrkulacją zawiesiny" wykonanej pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Piotra Synowca

Zagadnienia przenoszenia skali w Inżynierii Procesowej są sprawą trudną. Połączenie ich z procesem krystalizacji, który do dnia dzisiejszego nie jest jeszcze w pełni opanowany, świadczy o dużej odwadze i ambicjach Doktorantki. Podjęcie tego tematu uważam za zadanie trudne i w pełni uzasadnione.

Merytoryczna ocena pracy

Przedłożona praca składa się z czternastu rozdziałów o zróżnicowanej wartości i spisu literatury. Pierwszym rozdziałem jest wprowadzenie, w którym Doktorantka opisuje sposoby powiększania skali krystalizatorów w ich historycznym rozwoju. Zauważa, że powiększanie skali jest szczególnie trudne w przypadku aparatów zbiornikowych z mieszadłem. Jeżeli w takim zbiorniku prowadzona jest krystalizacja, to wymuszona cyrkulacja zawiesiny powoduje nierównomierny rozkład wartości parametrów procesowych, a dodatkowo występują takie zjawiska jak ścierania i łamanie cyrkulujących kryształów. W efekcie proste metody przenoszenia skali w tym przypadku zupełnie zawodzą.

Osobną sprawą jest nieliniowość obserwowanych zjawisk np. zależność szybkości nukleacji czy szybkości wzrostu kryształów od przesycenia. Jednym z narzędzi, które wykorzystuje się w celu badania wymienionych zjawisk są metody CFD, które dzięki stałemu postępowi w rozwoju komputerów stają się coraz bardziej powszechne. Konkluzją wprowadzenia jest stwierdzenie, że wykorzystanie technik CFD do symulacji hydromechaniki wraz z opracowaniem odpowiednich metod postępowania może znacznie ułatwić proces projektowania. W świetle prac opublikowanych w literaturze, stwierdzenie to jest w pełni uzasadnione.

W rozdziale drugim zatytułowanym „ Przenoszenie skali – rozważania wstępne" Doktorantka przedstawia przegląd literatury z tego zakresu. Następnie kontynuuje go w rozdziale trzecim zatytułowanym „Metody przenoszenia skali". Przegląd ten jest moim zdaniem dość chaotyczny, gdyż trudno mi określić kryterium dlaczego pewne prace omawiane są wcześniej, a inne później. Naturalnym kryterium wydawałby się rok publikacji, co niestety nie jest zachowane.

W przeglądzie Doktorantka nie ogranicza się tylko do przenoszenia skali w krystalizatorach, ale rozważa również prace dotyczące przenoszenia skali w reaktorach dwufazowych. W moim odczuciu jest to postępowanie właściwe, gdyż pewne idee mogą być wspólne i warto to przeanalizować.

W podsumowaniu, które Doktorantka umieszcza w osobnym rozdziale o numerze cztery stwierdza, że przenoszenie skali jest zagadnieniem skomplikowanym, a krystalizatory o różnej konstrukcji nie zachowują się tak samo przy jej powiększaniu. Co więcej dla różnych substancji podlegających krystalizacji, ten sam krystalizator może zachowywać się odmiennie. Doktorantka zauważa również fragmentaryczność badań i brak danych dotyczących skali przemysłowej. Są to uwagi w pełni słuszne i całkowicie się z nimi zgadzam. Szkoda jednak, że Autorka nie dokonała krytycznej oceny proponowanych kryteriów i tym samym nie określiła precyzyjnie punktu startowego swoich badań.

Moim zdaniem, rozdział czwarty, który zajmuje tylko jedną stronę tekstu, można było włączyć do rozdziału trzeciego jako podrozdział. Umieszczenie bowiem rozdziału zatytułowanego „Podsumowanie" w środku pracy może wydawać się dziwne, tym bardziej że taki sam tytuł nosi rozdział czternasty.

W rozdziale piątym Doktorantka przedstawia w zwięzły sposób metody CFD. Rozdział ten napisany jest w oparciu o znane monografie i nie stanowi o wartości pracy, jest jedynie wprowadzeniem dla osób nie znających tej tematyki.

W rozdziale szóstym sformułowano cel pracy, który przedstawiono w sześciu punktach. Jako pierwszy wymieniono określenie wpływu wybranych parametrów kinetycznych i hydrodynamicznych na zmianę czasu cyrkulacji w aparacie w trakcie przenoszenia skali.

Na tym etapie oczekiwałbym raczej bardziej precyzyjnego określenia celu tzn. wymienienia konkretnych parametrów jakie będą badane. Cel numer trzy, dotyczący częściowej walidacji wyników obliczeń numerycznych, też można było opisać precyzyjnie. W moim odczuciu celem pracy było określenie możliwości przenoszenia skali w krystalizatorze DTM z użyciem metod CFD.

Rozdział siódmy pod ogólnym tytułem „Rozważania teoretyczne" jest bardzo istotny dla dalszych etapów pracy. W prosty sposób udowodniono w nim, że zachowanie podobieństwa geometrycznego oraz powszechnie stosowanych kryteriów jak stałej jednostkowej mocy mieszania, bądź stałej prędkości obwodowej łopatki mieszadła wpływa na znaczne wydłużenie czasu cyrkulacji pierwotnej (PCT). Z kolei wzrost wielkości czasu cyrkulacji

pierwotnej wpływać będzie negatywnie na kinetykę krystalizacji. Podważa to zasadę zachowania podobieństwa geometrycznego przy przenoszeniu skali krystalizatorów. Rozdział ten zawiera również bardzo ciekawe zestawienie tabelaryczne stanowiące podsumowanie przeglądu literaturowego na temat przebadanych krystalizatorów. Doktorantka zestawiła w nim warunki hydrauliczne oraz parametry kinetyczne przebadanych procesów.
Z przedstawionych rozważań teoretycznych wynika, że istotnym parametrem hydrodynamicznym wpływającym na kinetykę procesu jest PCT i zachowanie stałości tego parametru przy powiększaniu skali może mieć decydujące znaczenie dla jakości produktu. Tą śmiałą tezę Doktorantka stara się udowodnić w kolejnych rozdziałach, przeprowadzając szereg symulacji za pomocą pakietu FLUENT.

W rozdziale ósmym przedstawiono różne typy krystalizatorów przemysłowych, ze szczególnym uwzględnieniem krystalizatorze DTM. Krystalizator ten był już badany w celu optymalizacji jego wymiarów. Badania były prowadzone dla kryształów siarczanu amonu i ałunu glinowo-potasowego. Podsumowanie tych dokonań przedstawiono w Tabeli 8.1. Doktorantka zauważa jednak, ze nie przeanalizowano wpływu wszystkich parametrów geometrycznych.

Rozdział dziewiąty poświęcony jest badaniom doświadczalnym. Wykonano pomiary czasu cyrkulacji dla trzech geometrycznie podobnych zbiorników cylindrycznych. Badania miały na celu wykazanie wpływu dwóch kryteriów przenoszenia skali u_t = const oraz ε = const na czas cyrkulacji. Rozdział ten, aczkolwiek skromny potwierdza przewidywania teoretyczne rozdziału siódmego.

Rozdział dziesiąty dotyczy modelowania komputerowego i jest niezmiernie istotny dla całości pracy. W rozdziale tym powinny się znaleźć dane odnośnie siatki, jak i stosowanego standardowego modelu turbulencji k-ε. Niestety dane te nie zostały podane, co uważam za brak, który przy publikacji wyników na pewno zostanie usunięty.

Kolejne dwa rozdziały dotyczą obliczeń numerycznych przy pełnym podobieństwie geometrycznym (Rozdział 11) oraz gdy podobieństwo geometryczne nie jest zachowane (Rozdział 12). W szczególności przeprowadzono obliczenia przy pełnym podobieństwie geometrycznym aparatów przy stałości prędkości obwodowej łopatki mieszadła oraz stałej jednostkowej mocy mieszania. Przeprowadzono również obliczenia w sytuacji, gdy zarzucone zostaje pełne podobieństwo geometryczne, a zachowana jest stała szczelina nadłopatkowa. Kolejno poszukiwano optymalnej szerokości szczeliny nadłopatkowej. W wyniku obliczeń Doktorantka stwierdziła, że dla każdej skali powiększanego krystalizatora istnieje pewien optymalny zakres szerokości szczeliny nadłopatkowej, w którym czas cyrkulacji pierwotnej osiąga minimalną wartość. Jest to wynik istotny, tym bardziej że potwierdzony eksperymentalnie przez Bunikowską i Rokitę.

Rozdział trzynasty to rozważania końcowe, w którym Doktorantka określa zalecany na podstawie przeprowadzonych badań sposób powiększania skali. Wydaje się, że jest on właściwy gdyż mimo nowości zaleca dużą ostrożność.

Rozdział czternasty to podsumowanie wyników pracy. Podsumowanie jest zwięzłe i podkreśla istotne osiągnięcia Doktorantki.

Ocena ogólna

Doktorantka wykazała się dużą wiedzą teoretyczną i praktyczną, a poziom merytoryczny pracy oceniam jako bardzo dobry. Przedstawione przykłady świadczą, że zaproponowane metody są użyteczne dla projektowania i tym samym cel pracy został osiągnięty. Najistotniejszym osiągnięciem pracy jest stwierdzenie, że zasadność stosowania podobieństwa geometrycznego aparatów jako kryterium przenoszenia skali jest wątpliwa. W świetle przedstawionych badań wniosek ten uważam za w pełni uzasadniony. Zauważył to już między innymi Myerson w swojej książce z 1993 roku, co Doktorantka podaje na str. 79. Drugim istotnym osiągnięciem pracy jest przyjęcie stałej wartości cyrkulacji pierwotnej PCT, jako nowego kryterium przenoszenia skali. W pracy udowodniono zasadność tego kryterium. Choć w tym przypadku powinna być zalecana pewna ostrożność, gdyż przy tak bardzo skomplikowanym problemie jakim jest powiększanie skali krystalizatorów, prawdopodobnie potrzebne będą jeszcze inne parametry. Tym nie mniej wniosek ten należy uznać za interesujący i bardzo wartościowy. Trzecim osiągnięciem równie ważnym jak poprzednie jest określenie bezpiecznej granicy powiększania skali w oparciu o symulacje CFD. Ten limit został określony jako pięciokrotne powiększenie skali. Pragnę też podkreślić, że Doktorantka posiada dużą wiedzę teoretyczna i umiejętność posługiwania się wyspecjalizowanym narzędziem, jakim jest pakiet FLUENT, a także umiejętność przeprowadzania ciekawych badań eksperymentalnych. Ogólnie merytoryczna wartość pracy góruje nad formą jej przedstawienia, która na pewno będzie poprawiona przy przygotowaniu publikacji.

Uwagi krytyczne i dyskusyjne

Z uwag krytycznych chciałbym wyróżnić kilka spraw, które w żadnej mierze nie wpływają na moją ocenę pracy.

- Tytuł pracy jest moim zdaniem trochę zbyt ogólny. Proponowałbym raczej : „ Wykorzystanie metod CFD do przenoszenia skali w krystalizatorach DTM .” Oczywiście jest to sprawa dyskusyjna. Większa część pracy poświęcona jest modelowaniu z pomocą procedur CFD i dobrze by było zaznaczyć to już w tytule pracy.

- Na str. 63 do modeli turbulencji zaliczona została metoda Large Eddy Simulation. Nie jest to ścisłe gdyż modelem turbulencji jest zestaw równań wyrażających relację pomiędzy nieokreślonymi członami fluktuacyjnymi występującymi w równaniach RANS, ze znanymi wielkościami. W przypadku LES nie mamy już równań RANS lecz nieco inny rodzaj uśrednienia, stąd metoda LES podobnie jak DNS jest równoważna do metod RANS, a przez to nie można jej uważać za model turbulencji.
- W pracy bardzo niewiele powiedziano o wygenerowanej siatce niestrukturalnej. Nie podano nawet liczby węzłów siatki przy pomocy której dokonano obliczeń. Spodziewam się, że odpowiednia walidacja została dokonana w celu określenia liczby węzłów, przy których można prowadzić wiarygodne obliczenia. Prosiłbym o naświetlenie tego problemu.
- Metody CFD nie są niestety narzędziem doskonałym. Przyjęcie np. metody RANS wraz z modelem turbulencji k-ε, z góry eliminuje możliwość symulacji pewnych rzeczywistych struktur (struktury koherentne), a zatem oddala nas od rzeczywistego zjawiska. Jak ocenia Pani możliwość wystąpienia błędów z powodu stosowania tego uproszczenia ? .
- W pracy stosowano standardowy model turbulencji k-ε, jednakże nie podano dokładnie jakie były jego parametry. Nie podano również sposobu obliczeń warstwy granicznej. Dane te są ważne dla osób kontynuujących badania w celach ewentualnych porównań.
- Uważa się, że standardowy model k-ε zaniża wartość kinetycznej energii turbulencji oraz jej dyssypację. Jaki to może mieć wpływ na uzyskane wyniki ?

Uwagi formalne

- Sporo rysunków przedstawionych w pracy jest zbyt mała wymiarowo i wymaga powiększenia dla dokładnej analizy. Przykładowo dotyczy to w szczególności Rys 9.4 - 9.8, czy Rys 11.1 – 11.10.
- Zgrupowanie wszystkich rysunków na końcu rozdziału nie jest moim zdaniem zabiegiem szczęśliwym, gdyż utrudnia odbiór pracy.
- Tytuły rozdziałów powinny informować o ich treści. Niestety w pracy jest wiele ogólnych tytułów, a o treści rozdziału czytelnik dowiaduje się z jego lektury. Np. „ Rozważania teoretyczne". „Modelowanie komputerowe". „Rozważania końcowe".

- Błąd korekty na str 54 „W niniejszej pracy przedstawione zostaną postaci różniczkowe jako te, do których odwołuje się używany program." Prawdopodobnie należy wstawić „ ....w postaci różniczkowej jako tej....."
- Czasami stosowana jest składnia angielska. Np. na str. 52"Wraz ze zwiększającą się ilością pamięci operacyjnej i coraz bardziej złożonymi procesorami o większej szybkości coraz bardziej wyrafinowane modele mogły być zastosowane."
- Niektóre sformułowania nie są właściwe np. na str. 62 „gładkość wyników"
- Sformułowanie „dawców technologii" (str. 82) proponowałbym zamienić na „właścicieli technologii", gdyż w języku potocznym zbyt często używane jest określenie „dawcy narządów", a stąd niepotrzebne skojarzenie.
- We wzorze (5.8) na str. 56 brakuje nawiasu, a w kolejnym (5.9) dodatkowo różniczkowej objętości dV.
- Rys. 7.1 oraz Rys. 8.2 niewiele się różnią, stąd wystarczyłoby jako Rys. 7.1 zamieścić Rys. 8.2 (podający jeden wymiar więcej) i zaoszczędzić trochę miejsca.

Te uwagi krytyczne nie umniejszają w niczym wartości pracy, która napisana jest jasno i zrozumiale. Również korekta została przeprowadzona względnie starannie.

Ocena końcowa

Reasumując, praca prezentuje bardzo dobry poziom naukowy i w pełni odpowiada wymaganiom stawianym rozprawom doktorskim przez „Ustawę o tytule naukowym i stopniach naukowych". Z satysfakcją stawiam wniosek o przyjęcie rozprawy przez Radę Naukową Wydziału Chemicznego Politechniki Śląskiej i dopuszczenie mgr inż. Agaty Małysiak do publicznej obrony przedłożonej pracy.