



RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr inż. Grzegorza Tyla pt.:
"Application of Population Balance Equations for Modelling of Liquid-solid Dispersion Systems"

zrealizowanej w Zakładzie Inżynierii i Dynamiki Reaktorów Chemicznych
Wydziału Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej
pod kierunkiem dr hab. inż. Magdaleny Jasińskiej, prof. PW

Aktualność tematyki i cel pracy

Dwufazowe układy rozproszone znajdują częste zastosowanie w różnych dziedzinach przemysłu chemicznego, spożywczego, czy farmaceutycznego. Szczególne zastosowanie znajdują układy typu ciało stałe-płyn, czy to w formie zawiesin w cieczy, czy układów unoszących się w gazach. Modelowanie matematyczne takich układów, w których oddziaływania między cząsteczkami ciała stałego występują relatywnie rzadko i wykazują pewne zachowania losowości jest niezwykle trudne. Dotychczasowe metody modelowania procesów agregacji, aglomeracji, czy koalescencji w układach rozproszonych opierały się głównie o modele stochastyczne, zaś symulacje komputerowe takich układów najczęściej wykonywane są w oparciu o podejście Lagrange'a. Taki schemat obliczeń, ze względu na podstawowe założenia, nie pozwala na pełne odzwierciedlenie interakcji między rozproszonymi drobinami. Przedstawione w literaturze próby modelowania CFD procesów agregacji cząstek w układach rozproszonych w większości musiały dokonywać dużych uproszczeń i nie pokazywały jednoznacznej metody wykonywania takich obliczeń w celu przewidzenia finalnego rozkładu średnic cząstek w zawiesinach. Wydają się zatem uzasadnione próby wykorzystania Modeli Bilansu Populacji, szeroko stosowane w przypadku zjawisk zachodzących w fazach ciągłych granulometrycznych, np. w procesach

fluidyzacji. Przedstawione w literaturze próby przeniesienia zastosowania Modeli Bilansu Populacji do obliczeń zmian w rozkładzie średnic cząstek w układach rozproszonych w większości przedstawiały wyniki znacznie odbiegające od wyników eksperymentalnych, np. koalescencja i aglomeracja podczas rozpylania i suszenia roztworów w suszarkach rozpyłowych. Zjawiska towarzyszące procesowi agregacji cząstek są niezwykle złożone, co znajduje odzwierciedlenie w trudnościach opisów matematycznych takich zjawisk. Wybrana zatem przez Pana mgr inż. Grzegorza Tyla tematyka badań jest jak najbardziej uzasadniona.

Ocena merytoryczna rozprawy

Przedstawiona przez Pana mgr inż. Grzegorza Tyla metoda modelowania matematycznego układów rozproszonych, skupiająca się głównie na układach zawiesin koloidalnych krzemionki, jest pod względem nowości naukowej niezwykle ciekawa. Autor podzielił pracę na dwa główne etapy: modelowania zjawisk fizycznych, w którym skupia się na określeniu zjawisk zachodzących w układach koloidalnych krzemionki oraz modelowania numerycznego, w którym przedstawia metody wypracowania algorytmu obliczeniowego zastosowania równań Modelu Bilansu Populacji.

W pierwszym etapie autor przedstawia metody modelowania zjawisk fizycznych, zachodzących podczas agregacji cząstek krzemionki w zawieszynie wodnej. Uwzględniono występowanie sił elektrostatycznych i oddziaływań międzycząsteczkowych dzięki teorii DLVO, rozbudowanej o dodatkowe efekty wynikające z występowania dodatkowych sił hydrofobowych. Zbadano i opisano matematycznie także wpływ hydrodynamiki przepływu zawiesiny koloidalnej na częstość zderzeń cząstek.

W drugim etapie prac skupiono się na metodach numerycznych zastosowania i domknięcia układów równań Modeli Bilansów Populacji. Przedstawiono metodę obliczeń wzrostu i rozpadu cząstek krzemionki w procesie Ostwalda, bazującą na rozwinięciu równań w szereg Grama-Charliera. Wyniki obliczeń porównano z wynikami eksperymentalnymi.

Stwierdzam, że mgr inż. Grzegorz Tyl zrealizował wyznaczone w pracy cele, wykazał się umiejętnością planowania i realizacji prac badawczych, a przedstawione przez doktoranta metody symulacji stanowią duży wkład w rozwój zastosowania metod numerycznych w inżynierii chemicznej. Praca posiada elementy nowości naukowej.

Wyniki przedstawione w pracy opublikowane zostały w sześciu publikacjach naukowych, punktowanych przez MNiSW: Chemical and Process Engineering (w 2017 IF: 0.892 Punkty MNiSW: 30), Chemical Engineering Reserch and Design (w 2018 IF: 3.073 Punkty MNiSW: 140), Inżynieria i Aparatura Chemiczna (czasopismo

spoza listy MNI^{SW}, jego umieszczenie w podstawie monografii ma uzasadnienie merytoryczne), Chemical Engineering & Technology (w 2019 IF: 3.742 Punkty MNI^{SW}: 70), Chemical Engineering Reserch and Design (w 2020 IF: 3.739 Punkty MNI^{SW}: 140), Chemical and Process Engineering (w 2021 IF: 0.679 Punkty MNI^{SW}: 100).

Należy zwrócić uwagę, że podane przez doktoranta wartości IF w latach, w których ukazały się publikacje, odbiegają od wartości podawanych przez czasopisma. Sumaryczna wartość IF wynosi: 12.125 (błąd na korzyść doktoranta), zaś sumaryczna wartość punktów MNI^{SW}, uwzględniając przeliczenie za publikacje sprzed 2019r., wynosi: 570.

Za najważniejsze osiągnięcia naukowe przedstawionej do recenzji rozprawy doktorskiej Pana mgr inż. Grzegorza Tyla uważam:

1. opracowanie ulepszanego algorytmu agregacji, umożliwiającego prawidłowe przewidywanie szybkości zderzeń cząstek w obecności silnych sił międzycząstkowych, poprzez rozbudowę modelu o siły hydrofobowe;
2. opracowanie wyrażeń na określenie prawdopodobieństwa agregacji z uwzględnieniem powierzchniowej reakcji chemicznej;
3. opracowanie algorytmów numerycznych opartych na kubaturze Gaussa oraz rozwinięciu w szereg Grama-Charliera w celu numerycznego rozwiązania Modeli Populacji w celu przewidywania rozkładu średnic cząstek w zawiesinie koloidalnej;
4. potwierdzenie hipotezy, że za wzrost cząstek w początkowym okresie produkcji krzemionki odpowiedzialny jest w głównej mierze proces starzenia Ostwalda.

Struktura pracy

Rozprawę przedstawiono jako autoreferat oparty o sześć monotematycznych publikacji, w których doktorant jest pierwszym autorem. Treści artykułów są ze sobą powiązane tematycznie. Całość przedstawionej pracy obejmuje 389 stron, w czego skład wchodzi autoreferat, oświadczenia współautorów oraz pełne treści artykułów naukowych, stanowiących podstawę dysertacji.

Autoreferat, liczący 80 stron, zaczyna się krótkim, acz treściwym wstępem do pracy, po którym doktorant zdefiniował cel i zakres przedstawionej do recenzji rozprawy (rozdział 2). Rozdziały 3-5 stanowią opis i charakterystykę układów koloidalnych oraz metody modelowania matematycznego dyspersji cząstek krzemowych w zawiesinie, wzrostu cząstek oraz ich degradacji oraz zastosowania Modeli Bilansu

Populacji w symulowaniu własności układów koloidalnych, w tym zmian w rozkładzie średnic cząstek. Bardzo wyraźnie zaznaczono powiązania tematyczne pomiędzy poszczególnymi publikacjami, których doktorant jest współautorem. Rozdział 6 stanowi krótki przewodnik po publikacjach doktoranta, stanowiących podstawę dysertacji. W rozdziale 7 doktorant podsumował i wypunktował główne osiągnięcia przedstawionej rozprawy. Przegląd literatury obejmuje 137 właściwie dobranych anglojęzycznych pozycji literaturowych. Odwołania do literatury wykonane są w sposób poprawny. Niestety do pracy nie załączono żadnego nośnika danych z cyfrową wersją rozprawy.

Rozprawa doktorska napisana jest w języku angielskim, co stanowi jej dodatkowy atut. Praca napisana jest poprawnie językowo i stylistycznie, ma estetyczną szatę graficzną. Zamieszczone liczne rysunki i schematy są czytelne. Liczne równania pojawiające się tekście są poprawnie sformatowane i ponumerowane. Autor nie uniknął jednak błędów edytorskich, które występują nielicznie w przedstawionym manuskrypcie:

1. brak nomenklatury symboli używanych w równaniach przedstawionych w manuskrypcie. Czytelnik zmuszony jest do szukania oznaczeń w odpowiednich artykułach załączonych do monografii;
2. niekiedy błędne zastosowanie przedimków *a*, *an* i *the*, co jest częstym problemem podczas pisania prac, których język rodzimy autora takich części zdania nie posiada;
3. w kilku miejscach pracy zaobserwowałem nagłe zmiany stosowanego czasu lub formy pisania np. zmiana z czasu przeszłego prostego na stronę bierną.

Powyższe uwagi nie umniejszają jednak merytorycznej wartości pracy. Lektura rozprawy nasunęła kilka pytań, mających na celu dyskusję zagadnień będących przedmiotem rozprawy.

1. Na rysunkach 5.10 w autoreferacie i odpowiadającym im rysunkom 11 i 12 w publikacji P5 przewidywana wartość średniej średnicy cząstek zawiesiny d_{10} dla skrajnych czasów wytrącania się, znacząco odbiega od wartości mierzonych. Co może być przyczyną takiej rozbieżności?
2. W literaturze przedmiotu można znaleźć symulacje CFD procesów agregacji, bądź rozpadu cząstek w fazie ciągłej za pomocą implementacji równań PBE. Czy opracowane w pracy algorytmy mogą też posłużyć do takich symulacji w układach Euler-Euler lub Euler-Lagrange'a?

Wniosek końcowy

Rozprawa doktorska Pana mgr inż. Grzegorza Tyla nie budzi zastrzeżeń, zarówno pod względem formalnym, jak i merytorycznym. Rozprawa została sformułowana poprawnie i wnosi wiele elementów nowości naukowej. Rozprawa napisana jest świetnym, profesjonalnym językiem. Opracowanie edytorskie i forma graficzna pracy jest wzorowa. Przedstawione wyniki poszerzają wiedzę na temat sposobów modelowania oraz symulacji zachowań i własności fazy rozproszonej z zastosowaniem Modelu Bilansów Populacji. Przedstawione opracowania stanowią oryginalny i samodzielny dorobek naukowy autora.

Stwierdzam, że rozprawa doktorska Pana mgr inż. Grzegorza Tyla spełnia wymagania formalne w odniesieniu do pracy doktorskiej oraz spełnia wymogi stawy - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku. W związku z powyższym wnioskuję do Rady Dyscypliny Inżynierii Chemicznej Politechniki Warszawskiej o przyjęcie pracy i dopuszczenie mgr inż. Grzegorza Tyla do dalszych etapów postępowania doktorskiego.

Biorąc pod uwagę bardzo wysoki poziom merytoryczny recenzowanej pracy i istotny wkład w stan wiedzy naukowej wnioskuję o wyróżnienie recenzowanej rozprawy doktorskiej.

Dr hab. inż. Maciej Jaskulski

.....