



Poznań, dnia 23 kwietnia 2025 roku

Recenzja rozprawy doktorskiej

mgr inż. Mariusza Tyrańskiego

*pt. „Numerical analyses of fertiliser industrial-scale unit operations:
ammonia synthesis, ammonia oxidation and droplet removal using
computational fluid dynamics modelling with detailed reaction kinetics.”*

1. Podstawa wykonania recenzji

Recenzję wykonałem na podstawie pisma Pana Przewodniczącego Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Chemiczna Politechniki Warszawskiej prof. dr. hab. inż. Tomasza Sosnowskiego z dnia 3 marca 2025 roku oraz uchwały Rady RNDICh.2-28.2025 z dnia 18 lutego 2025 roku.

2. Wybór tematyki badawczej

Tematyka rozprawy doktorskiej związana jest z numeryczną analizą operacji jednostkowych stosowanych w przemyśle nawozów sztucznych, ze szczególnym uwzględnieniem procesów związanych z syntezą amoniaku oraz jego utlenianiem. Amoniak jest podstawowym surowcem dla większości nawozów azotowych, a jego produkcja i przetwarzanie odbywają się przy dużym zużyciu energii. Operacje jednostkowe związane z jego syntezą, transportem czy konwersją odgrywają kluczową rolę w całym procesie. Numeryczne modelowanie tych jednostek daje realne możliwości poprawy ich efektywności i obniżenia kosztów operacyjnych. W szczególności umożliwia to analizę wpływu warunków procesowych na wydajność, a także badanie scenariuszy trudnych do przetestowania eksperymentalnie co może mieć znaczenie również w kontekście budowania bliźniaków cyfrowych procesów i spełnianiu kamieni milowych Przemysłu 4.0.

Amoniak staje się również, w ostatnich latach, alternatywą dla magazynowania wodoru stanowiąc jego nośnik. W odróżnieniu od wodoru magazynowanie amoniaku nie wymaga stosowania skomplikowanej infrastruktury, może on być łatwo skroplony i rozkładany do wodoru w miejscu wykorzystania. Ponadto infrastruktura amoniaku jest dobrze rozwinięta i poznana.

Utlenianie amoniaku z kolei jest istotnym zagadnieniem ze względów technologicznych jak i ochrony środowiska. W tym wypadku modelowanie matematyczne i symulacje CFD umożliwiają lepsze zrozumienie przebiegu reakcji w reaktorze i optymalizację pracy instalacji pod kątem zwiększenia selektywności czy redukcji emisji. Uważam, że ujęcie tego procesu w pracy badawczej jest uzasadnione i potrzebne.

Dodatkowo Doktorant w rozprawie doktorskiej podejmuje zagadnienia związane z analizą działania odkraplaczy. Stanowią one nieodłączną część instalacji i aparatury, w których mamy do czynienia z przepływem układów dwufazowych ciecz-gaz i zwykle są w stanie wyłapywać krople większe niż 10-20 μm . Do najpopularniejszych odkraplaczy zalicza się odkraplacze żaluzjowe, w których rozdzielanie zachodzi wskutek bezpośredniego i bezwładnościowego zderzenia z przegrodą.

Uważam, że tematyka pracy została dobrana w sposób ciekawy, łącząc z sobą inżynierię chemiczną, termodynamikę czy modelowanie procesowe. Takie podejście zwykle stwarza możliwości opracowania praktycznych rozwiązań technologicznych oraz nawiązanie współpracy z firmami przemysłowymi działającym w obszarze wykorzystania amoniaku.

3. Ocena struktury pracy

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska liczy aż 293 strony i zawiera dziewięć rozdziałów, sto dwadzieścia cztery rysunki, czterdzieści osiem tabel oraz osiemdziesiąt pięć pozycji literaturowych.

Pierwszy rozdział stanowi wstęp do pracy a kolejne trzy omawiają motywacje, którymi kierował się Doktorant przy podejmowaniu tematyki rozprawy, podstawy teoretyczne oraz stan wiedzy i metodykę stosowaną w pracy. Kolejne rozdziały przedstawiają wyniki modelowania CFD dla promieniowo-osiowego reaktora syntezy amoniaku w oparciu o model kinetyczny Temkina-Fijcewa (rozdział 5), modelowania pilotażowego przemysłowego reaktora syntezy amoniaku (rozdział 6), modelowania reaktora utleniania amoniaku (rozdział 7), modelowania zjawiska degradacji katalizatora w reaktorze utleniania amoniaku (rozdział 8) oraz modelowania CFD skuteczności wyłapywania kropeł w odkraplaczu żaluzjowym (rozdział 9). Ostatni rozdział stanowi podsumowanie i przedstawia wnioski z pracy.

W rozdziale 3 Doktorant przedstawia teorię związaną z przemysłową syntezą amoniaku (proces Habera-Boscha), jego utlenianiem (proces Ostwalda) oraz odkraplaczami. Część poświęcona procesowi Habera-Boscha rozpoczyna się omówieniem tła historycznego, ukazując problemy związane z pozyskiwaniem związków azotu na początku XX wieku. W dalszej części rozdziału doktorant przedstawił ewolucję technologii syntezy amoniaku i jej komercyjnych wariantów takich jak ICI, Topsoe, Kellog i Braun z wskazaniem różnic w konstrukcji reaktorów, kierunku przepływu gazu przez złoża katalityczne, systemach chłodzenia oraz strategiach odzysku ciepła. Doktorant uwzględnił także aspekty związane z wyborem katalizatorów, w szczególności tych opartych na tlenku żelaza a także omówił znaczenie bilansowania reakcji chemicznej w warunkach rzeczywistych oraz zależność szybkości syntezy od temperatury, ciśnienia i stosunku składników w mieszaninie gazowej. Znajomość tych zależności jest kluczowa dla późniejszych analiz CFD, których celem jest zwiększenie wydajności i optymalizacja reaktora chemicznego.

W drugiej części rozdziału trzeciego mgr inż. Mariusz Tyrański omawia proces utleniania amoniaku, stanowiący etap przejściowy w produkcji kwasu azotowego. Doktorant opisał wkład Wilhelma Ostwalda, który opracował efektywną metodę katalitycznego utleniania amoniaku z użyciem siatek platynowych. W tej części mgr. inż. Mariusz Tyrański zwraca uwagę na istotne wyzwania technologiczne: degradację siatek katalitycznych (głównie z platyny i rodu) oraz związane z tym straty cennych metali szlachetnych. Rozdział zawiera przegląd dostępnych rozwiązań ograniczający ten problem – od zastosowania aktywnych siatek wychwytyjących, przez filtry szklane lub ceramiczne, po nowoczesne metody odzysku platyny ze strumienia gazowego. Doktorant w części tej omawia również budowę reaktorów do utleniania amoniaku – ich rozkłady temperaturowe, konstrukcję katalizatora i złożoność procesu, który zachodzi na bardzo krótkim odcinku drogi przepływu gazu.

W trzeciej części rozdziału trzeciego Doktorant skupia się na teoretycznych podstawach działania urządzeń do separacji cieczy z gazów. Autor wyróżnił trzy główne mechanizmy działania takie jak bezpośrednie przechwycenie, przechwycenie bezwładnościowe czy dyfuzja Browna. W dalszej części omawia budowę odkraplaczy płytowo-żaluzjowych, których skuteczność zależy od geometrii kanałów, prędkości przepływu gazu oraz właściwości fizykochemicznych kropeł cieczy. Rozdział kończy się wskazaniem kierunków optymalizacji konstrukcji odkraplaczy – m.in. przez kształtowanie profilu

przepływu, eliminowanie stref recyrkulacyjnych oraz zastosowanie specjalnych kanałów odprowadzających kondensat. Należy podkreślić, że przedstawiona analiza ma charakter podstawowy co skutkuje tym, że punkt 3.1.1 oparty jest w zasadzie na publikacji [13], punkty 3.1.2-3.1.8 oparte na [15] a 3.3.1-3.3.3 na publikacji [61]. Podobnie jest w przypadku punktów 3.2.2-3.2.5 - na [57]. Skorzystanie z większej liczby źródeł literaturowych niewątpliwie wzbogaciłoby tę część rozprawy.

Rozdział czwarty prezentuje aktualny stan wiedzy w zakresie wykorzystania metod obliczeniowej mechaniki płynów do modelowania złożonych procesów chemicznych, ze szczególnym uwzględnieniem przemysłowych operacji jednostkowych. Na wstępie Autor przytacza podstawowe równania przepływu – równania Naviera-Stokesa, bilansu masy, pędu i energii – oraz opisuje ich zastosowanie w kontekście symulacji układów wielofazowych. Szczególną uwagę poświęca sposobom modelowania obiektów porowatych oraz zagadnieniom związanym z reakcjami chemicznymi zachodzącymi w złożach katalitycznych.

W kolejnych podrozdziałach mgr inż. Mariusz Tyrański omówił zagadnienia dotyczące implementacji równań w programach symulacyjnych, m.in. wykorzystanie metody objętości skończonych (FVM) oraz roli warunków brzegowych. Uwzględnił także modele burzliwości i transportu dyfuzyjnego, a także zagadnienia związane z opisem zjawisk zachodzących w katalizatorze w skali mezo. Doktorant przedstawił także argumenty za wyborem konkretnych modeli numerycznych. Autor podkreśla znaczenie dostosowania modelu do rzeczywistych warunków procesowych oraz wyzwań związanych z zachowaniem stabilności numerycznej.

Podobnie jak w rozdziale trzecim, ta część pracy ma charakter wiedzy podstawowej i podobnie jak w poprzednim rozdziale niektóre punkty oparte są na pojedynczych pozycjach literaturowych np. punkty 4.1.1-4.2.2 na podstawie [63].

W rozdziale piątym mgr inż. Mariusz Tyrański koncentruje się na analizie przemysłowego reaktora do syntezy amoniaku, charakteryzującego się przepływem osiowo-promieniowym. Autor analizuje wpływ jego geometrii i warunków procesowych na wydajność układu. Symulacje przeprowadzono dla różnych rozmiarów cząstek katalizatora oraz różnych wartości porowatości. Doktorant analizował rozkład temperatury, ciśnienia i stężeń wzdłuż złoża. Otrzymane wyniki pozwoliły wskazać strefy obniżonej reaktywności i strefy nadmiernego nagrzewania, oraz zaproponować zmiany w wypełnieniu w celu poprawy wydajności. Rozdział kończy się porównaniem wyników numerycznych z danymi literaturowymi, potwierdzając zgodność modelu z obserwacjami przemysłowymi.

W rozdziale szóstym Autor przeprowadził walidację zaproponowanego modelu CFD z wykorzystaniem danych eksperymentalnych pochodzących z reaktora półtechnicznego firmy Yara Technology and Projects. Weryfikacja oparta była na porównaniu profili temperatur oraz stężeń amoniaku, uzyskanych w trakcie rzeczywistych pomiarów z wynikami symulacji numerycznych. Model uwzględniał rzeczywistą geometrię reaktora, a także warunki procesowe, w tym ciśnienie, skład mieszaniny gazowej oraz sposób zasilania.

Rozdział siódmy zawiera analizę CFD dla przemysłowego reaktora utleniania amoniaku. Doktorant wziął pod uwagę krytyczne parametry jak szybkość reakcji utleniania, selektywność, wpływ stężenia i wydajności procesu. Analiza CFD miała na celu określenie wpływu krytycznych parametrów, takich jak czas kontaktu i temperatura wlotowa na szybkość reakcji, selektywność i wydajność produktu. Dzięki tej analizie Autor uzyskała profile prędkości, temperatury i stężenia. Symulacje pozwoliły również na określenie kluczowych rozkładów lokalnej szybkości reakcji jak również selektywności na powierzchni siatki i wydajności powstawania tlenków azotu NO i N₂O.

W rozdziale ósmym mgr inż. Mariusz Tyrański podjął analizę zmian zachodzących na siatce katalizatora związanych z odrywaniem się cząstek katalizatora i ponownym osadzaniu się w kolejnych

warstwach siatki. Doktorant przeprowadził analizy dla dwóch wariantów geometrycznych siatek katalitycznych i określił obszary o zmniejszonej prędkości przepływu za drutami tworzącymi siatkę katalizatora, co jest ważne ze względu na ograniczanie reaktywności procesu oraz zmiany czasu kontaktu gazów z siatką katalizatora. Mgr inż. Mariusz Tyrański określił również rozkład temperatury na powierzchni siatki oraz trajektorie poruszania się cząstek katalizatora oderwanych z jego powierzchni.

W rozdziale dziewiątym Doktorant podjął analizę CFD dla odkraplacza żaluzjowego. Analizy te przeprowadził dla różnej geometrii odkraplacza badając wpływ szerokości kanału przy łopatkce oraz kąt wychylenia łopatki i jej szerokość. W wyniku przeprowadzonej analizy CFD Autor określił wpływ prędkości wlotowej gazu oraz spadku ciśnienia i geometrii łopatki na wielkość siły oddziaływującej na wychyloną łopatkę oraz sprawność oczyszczania z kropel cieczy. Na podstawie wszystkich wyników uzyskanych w tym rozdziale mgr inż. Mariusz Tyrański zaproponował najlepszą konfigurację geometryczną odkraplacza.

Przedstawiona do recenzji praca zatem ma strukturę klastyczną i nie ma do niej uwag. Niewątpliwą zaletą jest stopniowe wprowadzanie czytelnika w zagadnienia związane syntezą i utlenianiem amoniaku oraz w zagadnienia numerycznej mechaniki płynów. Autor nie ustrzegł się błędów i pomyłek natury edytorskiej, które nie wpływają na ocenę merytoryczną pracy. Niektóre z nich przedstawiam poniżej:

- str. 41, drugi wiersz od dołu: nieprawidłowa referencja: powinno być [35] zamiast [34]
- str. 60, powinno być „gauzes” zamiast „gazes”
- str. 61, drugi paragraf, drugi wiersz: zbędna kropka przed [57], str. 74, dziewiąty wiersz od góry: zbędna kropka przed [63]
- str. 68: powinno być „solid particles” zamiast „sold particles”
- brak konsekwencji w stosowaniu symboli utrudnia orientację w stosowanych równaniach, np. g raz jest przyspieszeniem ziemskim a raz koncentracją, e jest koncentracją energii i jednocześnie energią wewnętrzną, prędkość raz jest oznaczana jako u i v
- równanie (16) jest w zasadzie powtórzeniem równania (15)

4. Ocena przeprowadzonych badań i wyników

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska mgr inż. Mariusza Tyrańskiego ma charakter analizy numerycznej procesów wykorzystywanych w przemyśle nawozów sztucznych. Doktorant skupia się na analizie syntezy amoniaku w osiowo-promieniowym reaktorze oraz reaktorze przemysłowym, utlenianiu amoniaku, analizie degradacji siatek katalizatora oraz analizie usuwania kropel w odkraplaczu żaluzjowym. Należy zaznaczyć, że zakres wykonanej przez Doktoranta analizy jest bardzo szeroki.

W pierwszej analizie Autor przeprowadził symulację przepływu i przebiegu reakcji chemicznej w przemysłowym reaktorze amoniakalnym Topsoe z przepływem osiowo-promieniowym. Obliczenia zostały przeprowadzone w środowisku Ansys Fluent, korzystając z odwzorowania pierwszego złoza katalitycznego.

Doktorant wykorzystał model kinetyczny zaproponowany przez Dysona i Simona [35], będący z kolei modyfikacją modelu kinetycznego Temkina-Fijcewa. W modelu Dysona i Simona [35] wprowadzono współczynnik korekcyjny stosowany dla ziaren katalizatora większych niż 6-10 mm, a który uwzględnia efekty związane z dyfuzją zachodzącą w porach warstwy katalizatora.

Dla analizowanego przypadku mgr inż. Mariusz Tyrański zastosował siatkę numeryczną o gęstości ok. 90000 komórek obliczeniowych. Symulacje zostały przeprowadzone w warunkach stanu

ustalonego. Do modelowania turbulencji użyto modelu SST k- ω oraz metody SIMPLE do powiązania ciśnienia i prędkości. Doktorant przeprowadził weryfikację zastosowanego modelu na podstawie danych eksperymentalnych pochodzących z publikacji Panahandeha i współpracowników [29]. Polegała ona na porównaniu wartości końcowych stężeń produktów oraz temperatury. Maksymalna różnica pomiędzy symulacją a danymi doświadczalnymi nie przekroczyła 0,32%, co potwierdza wysoką dokładność odwzorowania procesu.

W rozdziale szóstym mgr inż. Mariusz Tyrański przeprowadził analizę CFD fizycznego reaktora pilotażowego syntezy amoniaku. Doktorant wykorzystał model kinetyczny Dysona i Simona [35] stosowany we wcześniejszej analizie. Aby uwzględnić różnice w właściwościach zastosowanego katalizatora, Doktorant zmodyfikował równanie szybkości reakcji, wprowadzając współczynnik korekcyjny uwzględniający różnice w powierzchni właściwej katalizatora wykorzystanego przez Dysona i Simona, i Nielsena oraz katalizatora stosowanego przez firmę Yara Technology and Projects ($BET_{Yara}/BET_{Nielsen} = 11,9/8,57$).

Doktorant zastosował siatkę trójwymiarową, adaptacyjną, zagęszczoną w rejonach spodziewanych dużych gradientów, m.in. w pobliżu wlotów. Użyto elementów heksaedralnych i tetraedralnych. Szczegółowa charakterystyka nie została przedstawiona liczbowo, lecz Autor zaznacza, że optymalizacja gęstości siatki wynikała z oczekiwanego rozkładu parametrów i ograniczeń sprzętowych.

Walidację wyników została przeprowadzona na podstawie przeprowadzonych eksperymentów w reaktorze przemysłowym. Autor porównywał średnie stężenia amoniaku na wylocie oraz profile temperatur w warstwach katalizatora. Maksymalny błąd dla stężenia NH_3 nie przekroczył 2,3%, a dla temperatury 6,61%. Różnice te uznano za akceptowalne, wskazujące na dobrą zbieżność modelu z danymi eksperymentalnymi.

W rozdziale siódmym Autor skoncentrował się na modelowaniu przepływu i kinetyki reakcji w reaktorze do przemysłowego utleniania amoniaku. Symulacje objęły obszar z siatką katalityczną, przy czym domena obliczeniowa została zbudowana z uwzględnieniem fizycznej geometrii kilku warstw siatek platynowych, typowo stosowanych w przemyśle nawozów sztucznych. Autor wykorzystał rozbudowany model powierzchniowy, zawierający dziesięć reakcji elementarnych obejmujących adsorpcję i desorpcję amoniaku, tlenu i tlenków azotu. W przeciwieństwie do poprzednich analiz, reakcje opisano jako reakcje powierzchniowe, a nie objętościowe. Każda reakcja miała przypisane wartości energii aktywacji i współczynników preekspontencjalnych pochodzących z literatury (Haas [8,75]). Uwzględniono równowagę pomiędzy konkurującymi procesami adsorpcji i desorpcji, jak również reakcje odwrotne dla głównych etapów syntezy NO.

Mgr inż. Mariusz Tyrański analizował wpływ czasu kontaktu na szybkość reakcji, temperaturę oraz selektywność tworzenia NO. Analizy wykazały znaczną zmienność intensywności reakcji pomiędzy warstwami siatek. Dla niektórych reakcji (np. R6 i R7) zanotowano istotną przewagę reakcji adsorpcji nad desorpcją, co wynikało z warunków cieplnych i lokalnego stężenia reagentów. Walidacja wyników symulacji CFD została przeprowadzona przez porównanie modelu numerycznego z wynikami doświadczalnymi Handfortha i Tilley [77]. Uwzględniono średnie wartości stężeń produktów oraz ich rozkład przestrzenny. Uzyskane wyniki wykazały zgodność z trendami literaturowymi, zarówno w zakresie wydajności produkcji NO, jak i selektywności względem N_2 i N_2O co potwierdza słuszność obranego modelu CFD (SST k- ω).

W rozdziale ósmym Autor przeanalizował wpływ geometrii warstw katalitycznych na zjawisko erozji i redystrybucji platyny w przemysłowym procesie utleniania amoniaku. W ramach analizy Doktorant uwzględnił trajektorie cząstek oderwanych z powierzchni siatek katalitycznych. W tym celu zastosował model DPM, pozwalający na śledzenie trajektorii cząstek platyny w polu przepływu gazów. Geometrie analizowanych wariantów siatek różniły się między innymi kątem nachylenia oraz przesunięciem kolejnych warstw siatek, co miało wpływ na lokalne warunki przepływu i strefy stagnacyjne.

Obliczenia przeprowadzono w domenie trójwymiarowej, zagęszczonej w obszarach kluczowych dla transportu cząstek. Choć dokładna liczba komórek nie została podana, zaznaczono konieczność zastosowania dużej rozdzielczości w strefach przylegających do siatek katalitycznych i powierzchni depozycji. Wyniki symulacji umożliwiły porównanie skuteczności alternatywnych geometrii siatek w ograniczaniu strat platyny. Wariant oznaczony jako Geometria B wykazał wyraźnie lepsze właściwości w zakresie przechwytywania cząstek, co wskazuje na możliwości poprawy trwałości układu katalitycznego bez obniżenia jego aktywności chemicznej. Walidację przeprowadzono pośrednio, poprzez porównanie charakterystyk przepływu i stref depozycji z obserwacjami przemysłowymi.

W kolejnym, dziewiątym rozdziale, Autor skoncentrował się na modelowaniu zjawiska separacji cieczy z fazy gazowej w odkraplaczach żaluzjowych. Wykorzystano podejście dwufazowe, w którym faza gazowa opisana została równaniami Naviera-Stokesa z wykorzystaniem modelu turbulencji SST k- ω , natomiast ruch kropeł cieczy modelowano z użyciem modelu DPM. Zastosowano również model dyspersji turbulentnej zgodny z podejściem zaproponowanym przez Ruiza i współpracowników [85].

W modelu zastosowano trójwymiarową siatkę obliczeniową o zróżnicowanej gęstości, z istotnym zagęszczeniem w rejonie przewężonych kanałów i strefy zmiany kierunku przepływu. Szczególna uwaga została poświęcona interakcji kropeł z powierzchnią płyt, ich opadaniu oraz ponownemu unoszeniu. Weryfikację skuteczności modelu przeprowadzono poprzez porównanie efektywności separacji uzyskanej w obliczeniach z danymi Galletti i współpracowników [24]. Symulowane wartości wykazały zadowalającą zgodność z wynikami eksperymentalnymi, w szczególności w zakresie średnich rozmiarów cząstek (6–21 μm), co potwierdza trafność przyjętych założeń i parametrów obliczeniowych.

Za najważniejsze osiągnięcia mgr inż. Mariusza Tyrańskiego przedstawione w recenzowanej rozprawie doktorskiej uważam:

1. Opracowanie modelu CFD dla przemysłowego reaktora syntezy amoniaku (Topsoe converter) z dwuwymiarową reprezentacją geometryczną pierwszego złoża katalitycznego. Analiza umożliwiła wskazanie stref bliskich równowadze chemicznej, co pozwoliło na zaproponowanie nowych wariantów geometrii złoża katalitycznego, pozwalających na osiągnięcie takiej samej wydajności przy niemal dwukrotnie mniejszej objętości złoża
2. Opracowanie dzięki współpracy z Yara Technology and Projects modelu CFD reaktora półtechnicznego. Model ten pełni funkcję wirtualnego prototypu i może być wykorzystywany do testowania zmian parametrów procesowych bez konieczności ingerencji w fizyczną instalację
3. Przeanalizowanie wpływu geometrii siatek katalitycznych na trajektorie i depozycję cząstek platyny. Opracowany przez Doktoranta model umożliwił identyfikację stref stagnacji przepływu oraz rejonów intensywnego osadzania metalu, co dostarcza podstaw do zaprojektowania bardziej efektywnych układów siatek ograniczających erozję katalizatora.
4. Zaproponowanie zoptymalizowanej geometrii kanałów odkraplacza, która przyczyniła się do poprawy skuteczności separacji, przy zachowaniu lub nawet obniżeniu spadków ciśnienia.

W trakcie czytania pracy nasunęły mi się również spostrzeżenia i uwagi. Najważniejsze z nich przedstawiam poniżej:

1. Str. 96, równanie (96): w mianowniku widnieje liczba Reynoldsa odniesiona do cząstek ciała stałego Re_p podniesiona do potęgi -24. Z czego wynika wartość tej potęgi?
2. W tabeli 9.2 na str. 239 Doktorant podaje parametry fizykochemiczne powietrza w temperaturze 15°C. Zgodnie z tymi danymi gęstość powietrza wynosi około 1,225 kg/m³ co jest słuszne dla ciśnienia około 101 kPa. Z kolei w tabeli 9.3 na str. 241 Doktorant podaje warunki brzegowe dla analizy zgodnie z którymi nadciśnienie na wlocie do odkraplacza wynosiło 5 MPa. Jaką gęstość Doktorant przyjął w tej analizie? Czy gęstość była stała? Czy uwzględniano jej zmianę w zależności od ciśnienia? Proszę o komentarz.

3. Na str. 104 w równaniu (113) zastosowano współczynnik efektywności który należy uwzględnić w równaniu szybkości reakcji w przypadku, gdy katalizator posiada ziarna o średnicy większej niż 6 mm. Doktorant wspomina o potrzebie jego stosowania ze względu na ograniczenia dyfuzyjne. Nie znalazłem informacji jakie ograniczenia należy brać pod uwagę i w jaki sposób będą one wpływać na dokładność modelu? Proszę o komentarz w tej sprawie.
4. Jakie kryterium przyjął Doktorant, w trakcie walidacji uzyskanych wyników symulacji, do stwierdzenia dobrej zgodności? Czy w przypadku wyników dla pilotażowego reaktora syntezy amoniaku błąd względny <2,3% dla stężenia i <6,61% dla temperatury jest wystarczający z punktu widzenia zastosowań przemysłowych? Czy przeprowadzono analizę wrażliwości modelu?
5. Jak ograniczenia i uproszczenia przyjęte w modelach CFD mogą wpływać na wyniki analiz prowadzonych dla reaktorów przemysłowych? Które z nich mogą mieć największy wpływ na dokładność otrzymanych wyników? Jak Doktorant ocenia je biorąc pod uwagę praktyczne zastosowanie modelu?
6. Czy zaproponowane modele obliczeniowe reaktorów wymagałyby dopracowania, rozwinięcia w przyszłości? Które aspekty wymagałyby poszerzenia, np. geometria reaktora lub symulacje dla warunków nieustalonych? Proszę o komentarz

5. Wniosek końcowy

Napisana przez mgr inż. Mariusza Tyrańskiego rozprawa doktorska świadczy o dużej wiedzy Autora z zakresu modelowania CFD i przebiegu reakcji w reaktorach amoniakalnych i działaniu odkraplaczy żaluzjowych. Doktorant doskonale poradził sobie z implementacją modeli kinetycznych i przeprowadzeniem niezbędnych doświadczeń eksperymentalnych. Na podkreślenie zasługuje duża ilość przeprowadzonych analiz CFD i zapewne, choć Autor o tym nie wspomina, ich czasochłonność. Cel pracy określony przez Doktoranta został zrealizowany a uzyskane wyniki w sposób istotny wzbogacają stan wiedzy w zakresie pracy reaktorów syntezy amoniaku, jego utleniania i zjawisk zachodzących w warstwach katalizatora. Należy również podkreślić, część wyników uzyskanych w ramach rozprawy doktorskiej zostało opublikowanych w renomowanych czasopismach m.in. Chemical Engineering Research and Design (M=140 pkt.) czy Energies (M=140 pkt.). Na uwagę zasługuje również współpraca Doktoranta z otoczeniem gospodarczym - w ramach pracy doktorskiej Doktorant współpracował z Yara Technology and Projects – Technology (Yara International ASA) co umożliwiło przeprowadzenie badań eksperymentalnych i walidację stosowanych modeli obliczeniowych. Współpraca ta zaowocowała również 3-miesięcznym stażem w siedzibie firmy w Norwegii. Jest to niezwykle cenne z punktu widzenia dalszego rozwoju naukowego Autora.

Uważam, że recenzowana rozprawa reprezentuje bardzo dobry poziom naukowy, zawiera elementy nowości naukowej i przede wszystkim posiada walory aplikacyjne. Doktorant uzyskała szereg ciekawych rezultatów, a przedstawione wyniki analiz CFD zostały zweryfikowane eksperymentalnie bądź na podstawie publikacji, co jest niezwykle ważne i świadczy o dojrzałym podejściu do stosowania metod CFD przez Doktoranta.

Reasumując stwierdzam, że rozprawa mgr inż. Mariusza Tyrańskiego „Numerical analyses of fertiliser industrial-scale unit operations: ammonia synthesis, ammonia oxidation and droplet removal using computational fluid dynamics modelling with detailed reaction kinetics” spełnia wymogi stawiane rozprawom doktorskim w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych. W związku z powyższym, na podstawie art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2018 r. poz. 1668 z późn. zm.), wnioskuję o przyjęcie pracy i dopuszczenie mgr inż. Mariusza Tyrańskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Ponadto biorąc pod uwagę wysokie walory naukowe rozprawy doktorskiej i potencjał aplikacyjny stosowanych rozwiązań jak również dobry dorobek naukowy Doktoranta wnoszę do Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Chemiczna Politechniki Warszawskiej o wyróżnienie pracy doktorskiej mgr inż. Mariusza Tyrańskiego.



dr hab. inż. Szymon Woźniowski, prof. PP