

AUTOREFERAT

A. Dane Podstawowe

1. Imię i Nazwisko

Robert Grzywacz

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej

1. Magister inżynier chemik o specjalności inżynieria chemiczna, Politechnika Krakowska, Wydział Chemiczny 1988. Temat pracy magisterskiej: „*Modelowanie reaktora biochemicznego do utleniania D-sorbitolu do L-sorbozy*”.
2. Doktor nauk technicznych w dyscyplinie inżynieria chemiczna, Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny 1996. Temat pracy doktorskiej: „*Studia nad dynamiką węzła krakingu katalitycznego*”.

3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

1. 01.10.1988 - 01.06.1990; asystent stażysta w Instytucie Inżynierii Chemicznej i Chemii Fizycznej w Zakładzie Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Krakowskiej
2. 27.09.1990 – 01.06.1996; asystent naukowo - dydaktyczny w Instytucie Inżynierii Chemicznej i Chemii Fizycznej w Zakładzie Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Krakowskiej
3. 01.06.1996 – do chwili obecnej; adiunkt naukowo – dydaktyczny w Instytucie Inżynierii Chemicznej i Procesowej w Katedrze Reaktorów Chemicznych i Kinetyki Ruchu Masy Politechniki Krakowskiej

B. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.)

a) tytuł osiągnięcia naukowego:

Właściwości stacjonarne bioreaktorów barbotażowych typu airlift

b) Podstawą do ubiegania się przeze mnie o uzyskanie stopnia doktora habilitowanego nauk technicznych w dyscyplinie inżynieria chemiczna jest monografia:

Robert Grzywacz „Właściwości stacjonarne bioreaktorów barbotażowych typu airlift”,

Wydawnictwo PK, Kraków 2012, ISSN 0860-097X

w której zebrałem i rozszerzyłem wyniki badań opublikowanych w następujących artykułach (spis prac w porządku chronologicznym, numer pozycji z Wykazu opublikowanych prac naukowych):

[I.B.1] B.Tabiś, J.Handzlik, R.Grzywacz, *Badanie i modelowanie hydrodynamiki reaktora heterogenicznego gaz - ciecz typu barbotażowego z recyrkulacyjną rurą centralną*, Inż.Chem.Proc. 4, 515 (1994).

[I.B.2] R.Grzywacz, *Analiza stanów stacjonarnych reaktora biochemicznego typu airlift dla różnych struktur hydrodynamicznych przepływu mediów*, Inż.Chem.Proc., 22, 493-498, (2001).

[I.B.3] R.Grzywacz, *Metody wyznaczania stanów stacjonarnych bioreaktora airlift dla wybranych struktur hydrodynamicznych fazy ciekłej*, Inż.Chem.Proc, 24, 567-587, (2003).

[I.B.4] R.Grzywacz, P.Lubaś, *Effect of operational conditions on the aeration of an airlift reactor. Analysis of the steady states*, Chem.Proc.Eng., 27, 1361-1376 (2006).

[I.B.5] R.Grzywacz, *Metoda wyznaczania strefowych współczynników dyspersji cieczy w reaktorze airlift*, IICCh PAN Gliwice, Prace Naukowe 2006.

[I.B.6] R.Grzywacz, *Weryfikacja doświadczalna modelu hydrodynamiki reaktora airlift*, Czasopismo Techniczne – Mechanika, 105, 151-158 (2008).

[I.B.7] R. Grzywacz, *Wpływ parametrów konstrukcyjnych i procesowych na wartości współczynników zatrzymania gazu w strefie opadania dla reaktorów airlift*, Inż.Ap.Chem, 48, 76-78 (2009).

[I.B.8] R.Grzywacz, *Wpływ warunków napowietrzania na pracę bioreaktora airlift*, Przemysł Chemiczny, 7, 1326-1330 (2011).

- [I.B.9] R.Grzywacz, *Biodegradacja fenolu w reaktorze airlift*, Rozdział w monografii 51-59, Postępy w Inżynierii i Technologii Chemicznej, praca zbiorowa pod redakcją Z. Kowalskiego, Wydawnictwo PK, Kraków 2011.
- [I.B.10] R.Grzywacz, *Continuous mathematical models of airlift bioreactors: families, affinity, diversity and modelling for single-substrate kinetics*, Chem.Proc.Eng., 33, 291-309 (2012).
- [I.B.11] R.Grzywacz, *Airlift bioreactor*, Wydawnictwo PK, Kraków 2013.

oraz prezentowałem w następujących materiałach konferencyjnych (spis prac w porządku chronologicznym, numer pozycji z Wykazu opublikowanych prac naukowych):

- [III.B.2] B.Tabiś, J.Handzlik, R.Grzywacz, *Metoda badania i modelowania hydrodynamiki cieczy w reaktorze air-lift*, Materiały Konferencyjne I Międzynarodowej Konferencji Naukowej, Inżynieria Chemiczna - Współczesne Kierunki Badawcze w Aspektach Praktycznych, Kraków, Tom II, 159 (1994).
- [III.B.5] Robert Grzywacz, *Metoda wyznaczania stanów stacjonarnych reaktora biochemicznego typu air-lift*, Konferencja SITPChem., Rzeszów 1999.
- [II.L.5] R.Grzywacz, P.Lubaś, *Wpływ warunków na napowietrzanie reaktora airlift. Analiza stanów stacjonarnych*, I Ogólnopolskie Sympozjum „Reaktory Wielofazowe i Wielofunkcyjne”, Ustroń 2006.
- [II.L.6] R.Grzywacz, *Metoda wyznaczania strefowych współczynników dyspersji cieczy w reaktorze airlift*, I Ogólnopolskie Sympozjum „Reaktory Wielofazowe i Wielofunkcyjne”, Ustroń 2006.
- [II.L.7] R.Grzywacz, *Ocena warunków odgazowania strefy opadania w reaktorze airlift*, XIX Ogólnopolska Konferencja Inżynierii Chemicznej i Procesowej, Rzeszów 2007.
- [II.L.8] R.Grzywacz, *Experimental verification of hydrodynamics model of airlift reactor*, 17 International Conference Process Engineering and Chemical Plant Design, Kraków 2008.
- [III.B.8] R.Grzywacz, *Wpływ parametrów konstrukcyjnych i procesowych na wartości współczynników zatrzymania gazu w strefie opadania dla reaktorów airlift*, IX Ogólnopolska Konferencja Przepływów Wielofazowych, Gdańsk 2009.
- [III.B.9] R.Grzywacz, *Bioreaktor airlift – porównanie wyników badań doświadczalnych i symulacyjnych*, III Ogólnopolskie Sympozjum “Reaktory Wielofazowe i

Wielofunkcyjne dla Procesów Chemicznych i Ochrony Środowiska”, Warszawa 2012.

[III.B.10] R.Grzywacz, Sz.Skoneczny, *Właściwości numeryczne modeli matematycznych bioreaktorów airlift*, III Ogólnopolskie Sympozjum “Reaktory Wielofazowe i Wielofunkcyjne dla Procesów Chemicznych i Ochrony Środowiska”, Warszawa 2012.

c) omówienie celu naukowego w/w prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania.

Modelowanie reaktorów chemicznych i biochemicznych oraz analiza ich właściwości stacjonarnych i dynamicznych należą do obszaru moich zainteresowań od początku mojej działalności naukowej. W swojej pracy magisterskiej zajmowałem się modelowaniem i badaniem bioreaktora do utleniania D-sorbitolu do L-sorbozy. Wyniki tych badań przedstawiłem w pracy [II.E.1] oraz zaprezentowano w materiałach konferencyjnych [II.L.1]. Następnym etapem mojej pracy naukowej były kontaktowe reaktory fluidyzacyjne. Wyniki tych badań stanowiły tezy mojej dysertacji pt. „Studia nad dynamiką węzła krakingu katalitycznego”, którą obroniłem 28.02.1996 na Wydziale Chemicznym Politechniki Śląskiej. Zostały one opublikowane w następujących artykułach naukowych [II.E.2 – 6], a także w materiałach konferencyjnych [II.L.2, III.B.1, III.B.3].

Kolejnym etapem moich badań stały się bioreaktory airlift. Aparaty te znane są w technice od końca lat pięćdziesiątych dwudziestego wieku. Powstały jako modyfikacja aparatów flotacyjnych, polegająca na wprowadzeniu do ich wnętrza rury wymuszającej cyrkulację mediów za pomocą powietrza. Ich zastosowanie do procesów mikrobiologicznych datuje się na późne lata siedemdziesiąte. Podstawowe rozwiązania konstrukcyjne, ich wady i zalety oraz główne obszary zastosowań omówiłem szeroko w publikacjach [I.A, I.B.11].

Do dnia dzisiejszego ukazało się wiele publikacji opisujących badania hydrodynamiki oraz wymiany masy i ciepła w aparatach typu airlift. Ukazały się także artykuły, w których przedstawiono pewne modele matematyczne tych aparatów. Jednak wiele zagadnień, związanych szczególnie z nieliniowymi właściwościami stacjonarnymi tych aparatów, nie zostało do dzisiaj rozwiązanych. Kierując się powyższymi przesłankami, sformułowałem program badawczy, mający na celu poszerzenie tego obszaru wiedzy. Program ten można podzielić na kilka wzajemnie uzupełniających się wątków tematycznych. Pierwszy z nich skupia się na modelu hydrodynamiki aparatu airlift z wewnętrzną rurą cyrkulacyjną. Kolejne zagadnienia to: modelowanie matematyczne mikrobiologicznego procesu aerobowego w

bioreaktorze airlift, analiza nieliniowa stanów stacjonarnych bioreaktora oraz weryfikacyjne badania empiryczne biodegradacji aerobowej węglowego związku toksycznego w aparacie airlift.

Analizując hydrodynamikę omawianego aparatu stwierdzamy, iż reaktor airlift jest modyfikacją wieżowego reaktora barbotażowego. Modyfikacja ta polega na wymuszeniu wewnętrznej cyrkulacji mediów za pomocą przepływającej przez aparat fazy gazowej. Zasada działania tak zmodyfikowanego aparatu jest następująca. Media podawane są w dolnej części reaktora. Powstająca mieszanina gazowo – ciekła, o średniej gęstości mniejszej niż ciecz, wznosi się do górnej części aparatu. Tam następuje jej częściowe bądź całkowite odgazowanie. Odgazowana ciecz opada poprzez wydzieloną strefę cyrkulacji do dolnej części reaktora, gdzie miesza się ze świeżym surowcem. W ten sposób realizowane są jednocześnie: napowietrzanie i cyrkulacja mediów. W aparacie można wyróżnić cztery strefy hydrodynamiczne. Strefę I (*riser*) czyli tzw. strefa wznoszenia, strefę II (*downcomer*) tzw. strefa opadania oraz strefę III zwaną strefą odgazowania i przydenną strefę mieszania (IV).

Na charakter pracy oraz strukturę przepływu fazy ciekłej i gazowej, poza uwarunkowaniami wynikającymi z konstrukcji bioreaktora, decydujący wpływ ma natężenie zasilania podawanych mediów. Można wyróżnić trzy obszary hydrodynamiczne, w których pracuje reaktor. Przy małych natężeniach gazu podawanego do aparatu, cyrkulacja cieczy między strefą wznoszącą i opadającą jest niewielka, a faza gazowa jest obecna tylko w strefie wznoszącej (tzw. obszar „A”). Wraz ze wzrostem prędkości podawanego gazu rośnie intensywność cyrkulacji cieczy w strefie opadającej i następuje stopniowe jej wypełnianie pęcherzami gazowymi (tzw. obszar „B”). Dalsze zwiększanie prędkości gazu powoduje osiągnięcie takiego stanu, gdy faza gazowa zaczyna cyrkulować między strefą wznoszącą i opadającą (tzw. obszar „C”).

Poprawne sformułowanie modelu matematycznego dowolnego aparatu, w którym przebiega proces chemiczny bądź mikrobiologiczny, wymaga przyjęcia modelu hydrodynamicznego opisującego przepływ mediów przez reaktor. Przedstawiona powyżej fizyczna charakterystyka pracy reaktora airlift ukazuje dużą złożoność zjawisk hydrodynamicznych zachodzących w tym aparacie. Sformułowany model hydrodynamiczny musi umożliwiać wyznaczenie podstawowych wielkości parametrów hydrodynamicznych, tj. stopnia zatrzymania fazy gazowej w każdej ze stref oraz prędkości przepływu fazy gazowej i ciekłej, a co za tym idzie ich czasów przebywania w każdej ze stref. Dodatkowo model musi poprawnie odwzorowywać każdy z wymienionych obszarów hydrodynamicznych oraz być łatwym w implementacji numerycznej w celu jego zintegrowania z algorytmami służącymi do

symulacji procesów mikrobiologicznych. Mając na uwadze te elementy, zaproponowano modyfikację znanego z literatury modelu opartego na tzw. bilansie pędu. W pierwotnej postaci równania modelu stosowane były jedynie dla obszaru hydrodynamicznego „C”. Zostały one przeze mnie przystosowane tak, aby opisywały pozostałe obszary hydrodynamiczne. Sformułowany w ten sposób model spełnia wszystkie przedstawione powyżej warunki. Aby stwierdzić, czy poprawnie opisuje hydrodynamikę reaktora zweryfikowano go empirycznie z użyciem aparatów airlift w skali laboratoryjnej i ćwierćtechnicznej. Uzyskane wyniki potwierdzają zasadność jego zastosowania. Postać równań modelu oraz jego weryfikacja doświadczalna została zamieszczona w publikacjach naukowych [I.A, I.B.6, I.B.7, I.B.10, I.B.11], a także zaprezentowana na kilku konferencjach naukowych [II.L.6 – 8, III.B.8].

Kolejnym wątkiem mojego programu badawczego było modelowanie matematyczne bioreaktora airlift dla procesów aerobowych. Mając na uwadze opisaną powyżej jego konstrukcję i związany z tym podział na strefy hydrodynamiczne oraz charakter pracy czyli obecność różnych obszarów hydrodynamicznych, należy stwierdzić, iż liczba możliwych do zastosowania rodzajów modeli matematycznych jest stosunkowo duża. Wiąże się to z dużą liczbą możliwych do przyjęcia struktur strumieni mediów. Analizując doniesienia literaturowe można zauważyć, iż największa liczba zastosowanych struktur strumieni mediów to aproksymacja przepływu dyspersyjnego za pomocą kaskady reaktorów zbiornikowych ze strumieniami zwrotnymi bądź bez tych strumieni. Modele ciągłe pojawiają się stosunkowo rzadko. Związane jest to ze znacznymi trudnościami w uzyskiwaniu ich rozwiązań numerycznych.

Ponieważ reaktor airlift, którego pracę analizowałem, stosuje się do prowadzenia procesów mikrobiologicznych, dodatkowym utrudnieniem, na które napotyka się podczas formułowania jego modelu matematycznego, jest rodzaj przyjętej do opisu procesu kinetyki mikrobiologicznej. W pracy analizowałem proces mikrobiologicznej degradacji substratu węglowego bakteriami tlenowymi. W takim przypadku do opisu kinetyki procesu można stosować dwa rodzaje równań kinetycznych. Pierwszy to tzw. kinetyka jednosubstratowa. Przyjmuje się założenie, że proces biodegradacji przebiega w warunkach pełnego natlenienia środowiska reakcyjnego. Jeżeli tak nie jest, to szybkość procesu zależy nie tylko do stężenia substratu węglowego, ale także od stężenia tlenu rozpuszczonego w środowisku reakcji. Do opisu takiego procesu stosuje się tzw. kinetykę dwusubstratową. Użyty model matematyczny powinien uwzględniać szybkość przenoszenia tlenu z fazy gazowej do ciekłej.

Mając na uwadze opisane powyżej uwarunkowania, sformułowalem dwie rodziny ciągłych modeli matematycznych, tj. takich, w których równania bilansowe formułowane są dla różniczkowych objętości środowiska reakcyjnego. Każda rodzina modeli została utworzona zarówno dla obszaru hydrodynamicznego „A”, jak i dla obszaru hydrodynamicznego „C”. Pominięcie obszaru hydrodynamicznego „B” wynika z analizy pracy przemysłowych bioreaktorów airlift. Można bowiem rozróżnić dwie realizacje konstrukcyjne reaktora airlift. Pierwsza, to tzw. reaktory z wewnętrzną cyrkulacją cieczy. Takie reaktory pracują zwykle w obszarze hydrodynamicznym „C”. Druga realizacja konstrukcyjna, to reaktory z zewnętrzną cyrkulacją cieczy. Takie aparaty pracują w obszarze hydrodynamicznym „A”.

Pierwsza rodzina zaproponowanych modeli matematycznych, to tzw. modele pseudohomogeniczne jednosubstratowe. W publikacjach [I.A, I.B.2, I.B.3, I.B.10] przedstawiono 4 modele z przepływem dyspersyjnym faz oraz 8 modeli granicznych, tj. z założeniem całkowitego wymieszania bądź z przepływem tłokowym faz. Druga rodzina modeli to modele heterogeniczne dwusubstratowe [I.A, I.B.4, I.B.11]. Podobnie jak poprzednio, sformułowano 4 modele z przepływem dyspersyjnym faz oraz 8 modeli granicznych.

Dla każdego z modeli zaproponowano i uruchomiono algorytmy ich rozwiązywania. Za pomocą utworzonych modeli matematycznych można przeprowadzić dwa rodzaje obliczeń symulacyjnych. Pierwszy z nich polega na określeniu gałęzi stanów stacjonarnych. Są one numeryczną i graficzną reprezentacją zależności parametrycznej bioreaktora. Drugi rodzaj obliczeń, to symulacje stanów stacjonarnych polegające na wyznaczaniu profili stężeń reagentów względem długości reaktora. Efektywnym sposobem wyznaczania gałęzi stanów stacjonarnych jest metoda kontynuacji rozwiązań stacjonarnych względem wybranego parametru modelu. Spośród wielu algorytmów kontynuacyjnych wybrano metodę parametryzacji lokalnej. W publikacjach [I.A, I.B.11] opisano sposób przekształcenia równań modeli do postaci odpowiednich do zastosowania algorytmu kontynuacyjnego.

Przeprowadzając obliczenia symulacyjne z zastosowaniem wyprowadzonych modeli matematycznych, napotkano na trudności związane z charakterem numerycznym otrzymanych układów równań różniczkowych. Są one związane z doбором początkowych przybliżeń dla procedur numerycznych jak również z samym całkowaniem utworzonych równań różniczkowych.

Pierwszy problem ujawniał się dla pewnych zakresów danych procesowych, dla których zaplanowano wyznaczenie profili stężeń reagentów. Objawiał się on dużą czułością na liczbę

miejsce znaczących przyjmowanych wartości startowych. Przykładowo, przyjmując wartości startowe dla zastosowanej metody numerycznej z dokładnością sześciu miejsc po przecinku, nie osiągnano zbieżności, natomiast przyjęcie siódmego miejsca po przecinku, zapewniało zbieżność. Dla modeli o dużej liczbie zmiennych, dla których należy określić początkowe przybliżenia wektora rozwiązań, stanowi to znaczną trudność. Problem ten rozwiązano poprzez zastosowanie do doboru warunków startowych metody kontynuacyjnej. Algorytm przeprowadzanych obliczeń był następujący. Rozpoczynano je ze stanu stacjonarnego wyznaczonego dla obszaru o małej czułości na liczbę miejsc znaczących, aby następnie dotrzeć - poprzez kontynuację - do obszaru o dużej czułości. Zauważono, iż trudność doboru wartości startowych rośnie wraz ze wzrostem takich parametrów jak stężenie substratu węglowego w strumieniu zasilającym, czy też czas przebywania fazy ciekłej.

Drugi problem numeryczny występuje podczas całkowania utworzonych równań różniczkowych. Wykazano, że układy te cechują się bardzo dużymi wartościami liczby sztywności. Przez liczbę sztywności rozumie się parametr zdefiniowany jako stosunek maksymalnej do minimalnej części rzeczywistej wartości własnej macierzy Jacobiego prawych stron układu równań różniczkowych. Jest ona jedną z podstawowych cech numerycznych układów równań różniczkowych. Dodatkowym utrudnieniem podczas procedury całkowania jest fakt, iż liczba sztywności chaotycznie oscyluje podczas prowadzenia procedury całkowania układu równań różniczkowych. Jest to zjawisko dotychczas nieznanie w literaturze. Analizę pojawiania się oscylacji liczby sztywności względem długości reaktora przedstawiono w pracach [I.A, II.A.6, III.B.10]. Przedstawiono tam hipotezę, że wystąpienie wysokiej liczby sztywności oraz oscylacje jej wartości względem długości reaktora wynika z kinetyki procesu biochemicznego i pojawia się już dla prostych kinetyk jednosubstratowych. Z oddzielnych badań własnych wynika, że wykresy zmian liczby sztywności względem długości reaktora dla procesów opisanych klasycznymi kinetykami chemicznymi są funkcjami gładkimi, nie wykazującymi żadnych oscylacji.

Należy stwierdzić, iż sformułowanie ciągłych modeli matematycznych reaktora airlift, opracowanie i wdrożenie algorytmów ich rozwiązywania oraz przekształcenie ich do postaci odpowiednich dla kontynuacji stanów stacjonarnych uwieńczone zostały pełnym sukcesem.

Następnym etapem badań była analiza nieliniowa stanów stacjonarnych bioreaktora airlift. Aby dokonać takiej analizy, należy określić proces mikrobiologiczny, który będzie przebiegał w badanym reaktorze oraz dobrać jego kinetykę. Aby jednak do symulacji numerycznych nie używać kinetyki abstrakcyjnej, wybrano konkretny, aerobowy proces mikrobiologiczny, a mianowicie biodegradację fenolu za pomocą bakterii *Pseudomonas putida*. Można podać dwa

uzasadnienia tego wyboru. Pierwsze z nich jest związane z ochroną środowiska i problemem oczyszczania ścieków fenolowych. Drugie uzasadnienie związane jest z własnościami kinetycznymi mikrobiologicznej degradacji fenolu. Jest to proces aerobowy przebiegający z inhibicją substratem. W zależności od właściwości środowiska w którym przebiega, budowy bioreaktora, czy też parametrów procesowych, może być opisywany kinetykami jedno- bądź dwusubstratowymi. Niesie to ze sobą możliwość przeprowadzenia wielopoziomowych analiz procesowych. Nie bez znaczenia jest fakt, iż w literaturze są dostępne jedno- i dwusubstratowe modele kinetyczne tego procesu z użyciem różnych gatunków i szczepów mikroorganizmów. Ponieważ planowano sprawdzić doświadczalnie poprawność wyznaczonych stanów stacjonarnych, należało spośród cytowanych modeli kinetycznych wybrać właściwy. W tym celu wykonano dodatkowe badania biodegradacji fenolu w reaktorze laboratoryjnym i porównano uzyskane wyniki z wynikami modelowymi uzyskanymi dla różnych kinetyk. Taka procedura wyłoniła kinetykę dwusubstratową, która została zastosowana do obliczeń symulacyjnych [I.A, I.B.11].

W kolejnym etapie realizacji programu badawczego spośród sformułowanych modeli matematycznych wybrano dwa, które zastosowano do wykonania analizy nieliniowej stanów stacjonarnych. Były to modele z dyspersyjnym przepływem mediów z rodziny modeli dwusubstratowych, opisujące pracę reaktora w obszarach hydrodynamicznych „A” i „C”. Wyboru dokonano po wykonaniu badań identyfikacyjnych na stanowisku laboratoryjnym w skali ćwierćtechnicznej. W trakcie tych badań wykazano, iż można zaobserwować dużą zmienności charakteru przepływu cieczy w poszczególnych strefach bioreaktora w zależności od natężenia przepływu cieczy i gazu. Jest to wniosek o istotnym znaczeniu przy modelowaniu i symulacji pracy bioreaktora airlift. Podczas wyznaczania gałęzi stanów stacjonarnych względem takich parametrów jak prędkość pozorną gazu czy prędkość pozorną cieczy i innych, od których zależą parametry hydrodynamiczne, zachodzi bowiem potrzeba obliczania aktualnej charakterystyki hydrodynamicznej aparatu. Jest to dodatkowa trudność techniczna. Jedyne modelem hydrodynamicznym, który umożliwia przeprowadzenie symulacji dla szerokiego zakresu zmian tych parametrów jest model dyspersyjny. Wyniki badań identyfikacyjnych zamieszczono w publikacjach [I.A, I.B.5, I.B.11].

Wybór kinetyki procesu oraz reprezentatywnych modeli matematycznych umożliwił wykonanie analizy nieliniowej stanów stacjonarnych bioreaktora airlift. Podstawową właściwością stacjonarną reaktorów airlift, związaną z ich nieliniowością jest zmiana krotności stanów stacjonarnych powodowana zmianą parametrów procesu. Zjawisko wielokrotności stanów stacjonarnych w obiektach, w których przebiega proces

mikrobiologiczny związane jest z możliwością ustalenia się jednego lub więcej stanów stacjonarnych w zależności od parametrów fizykochemicznych, procesowych, bądź konstrukcyjnych. W takiej sytuacji zbiór wartości parametrów modelu dzieli się na obszary o ustalonej krotności stanów stacjonarnych.

Zobrazowanie struktury stanów stacjonarnych analizowanego bioreaktora airlift wykonano w postaci dwóch rodzajów wykresów. Pierwszy z nich przedstawiał gałęzie stanów stacjonarnych jako zależności zmiennych stanu od wybranego parametru modelu. Drugi rodzaj wykresów, to gałęzie punktów bifurkacyjnych przedstawione na wybranej dwuwymiarowej przestrzeni parametrów. Są to tzw. przekroje katastroficzne. W ramach badań własnych analizowałem położenie gałęzi punktów zwrotnych oraz gałęzi punktów bifurkacji statycznej. Gałęzie stanów stacjonarnych oraz przekroje katastroficzne wyznaczono względem kilku wybranych parametrów procesowych i konstrukcyjnych.

Jak wspomniano, obliczenia przeprowadzono dla obydwóch obszarów hydrodynamicznych, tj. obszaru A i C. Dla każdego z obszarów hydrodynamicznych obserwuje się obecność pojedynczych, podwójnych i potrójnych stanów stacjonarnych. Ponadto w obszarze hydrodynamicznym A wykryto także istnienie pięciokrotnych stanów stacjonarnych. Określono wpływ wybranych parametrów procesowych i konstrukcyjnych na strukturę stanów stacjonarnych oraz na jakościowe i ilościowe cechy gałęzi stanów stacjonarnych. Wykazano, iż w obszarze hydrodynamicznym A, w zakresie przebadanych parametrów, kształtuje się bardziej złożona struktura stanów stacjonarnych, niż w obszarze hydrodynamicznym C.

Analizując wyniki obliczeń symulacyjnych zauważono ponadto, iż dla każdej wartości stężenia substratu węglowego istnieje wartość czasu przebywania cieczy, dla której obserwuje się minimum stężenia tlenu rozpuszczonego w cieczy. Wystąpieniu głębokich minimów stężenia tlenu sprzyja wysokie stężenie substratu węglowego w strumieniu zasilającym oraz małe natężenie przepływu powietrza podawanego do reaktora. Niebezpieczeństwo niedotlenienia występuje szczególnie wtedy, gdy strefa opadania nie jest nagazowana (obszar hydrodynamiczny A).

Wykonane badania numeryczne umożliwiają także sformułowanie wniosku, iż dla wysokich stężeń substratu węglowego w strumieniu zasilającym, biodegradację należy prowadzić w aparacie pracującym w obszarze hydrodynamicznym C. Wtedy akceptowalne stopnie przemiany substratu węglowego uzyskuje się dla stosunkowo niskich czasów przebywania cieczy. Gdy istnieje konieczność pracy w obszarze hydrodynamicznym A (np. dla bioreaktora z zewnętrzną cyrkulacją cieczy), to wówczas należy zwiększyć udział

objętości strefy wznoszenia (I), zapewnić maksymalnie dobre napowietrzenie oraz długi czas przebywania cieczy. Pełne wyniki przeprowadzonej analizy nieliniowej obejmujące również poruszane tu zagadnienia przedstawiono w publikacji [I.A].

Podsumowaniem programu badawczego bioreaktora airlift było wykonanie szeregu doświadczeń procesu biodegradacji fenolu w laboratoryjnym bioreaktorze airlift. Metodykę przeprowadzonych badań, sposób wykonywania pomiarów oraz uzyskane wyniki przedstawiono w publikacjach [I.B.8, I.B.9, I.B.11, III.B.9]. Eksperymenty zaplanowano tak, aby warunki ich przeprowadzenia pokryły się z zbiorami warunków przyjętych do symulacji cyfrowych. Oznacza to, że pomiary zaplanowano tak aby sprawdzić, czy wartości stopnia przemiany substratu węglowego (fenolu) i stężenia tlenu rozpuszczonego w cieczy leżą na gałęziach stanów stacjonarnych uzyskanych na drodze rachunkowej. Porównania wyników doświadczeń laboratoryjnych z wynikami uzyskanymi za pomocą symulacji komputerowych dokonano zestawiając je na wspólnych wykresach. Analizując przedstawione wykresy można stwierdzić, iż wyniki doświadczalne dobrze pokrywają się z wynikami obliczeń symulacyjnych. Co więcej, pomiary wykazały również wystąpienie zjawiska niedotlenienia fazy ciekłej dla niskich wartości prędkości pozornej gazu.

Średnia różnica między wartościami teoretycznymi i eksperymentalnymi wyznaczona dla stopnia przemiany substratu węglowego na wypływie ze strefy I wynosi mniej niż 10%, natomiast dla bezwymiarowego stężenia tlenu średnia różnica wynosi mniej niż 5%. Ponieważ zgodność tak przeprowadzonych eksperymentów z wynikami teoretycznymi jest zadawalająca, na tej podstawie wysunięto hipotezę, iż zaproponowany model matematyczny dobrze odzwierciedla rzeczywisty proces mikrobiologiczny. Można zatem stwierdzić, iż wykonana analiza nieliniowa stanów stacjonarnych bioreaktora airlift dobrze odzwierciedla jego cechy jakościowe i ilościowe.

Podsumowując wykonany program badawczy, do moich oryginalnych osiągnięć mogę zaliczyć:

1. Sformułowanie dwóch rodzin ciągłych modeli matematycznych (w sumie 24 modele) opisujących aerobowy proces mikrobiologiczny przebiegający w bioreaktorze airlift. Problem ten nie był dostatecznie dobrze do tej pory rozwiązany. Dla każdego z modeli opracowałem algorytm jego rozwiązywania oraz algorytm wyznaczania stanów stacjonarnych metodą kontynuacyjną. Opracowane algorytmy zostały następnie z sukcesem zaprogramowane i zastosowane do obliczeń symulacyjnych.
2. Modyfikacja istniejącego modelu hydrodynamiki reaktora airlift dla szerokiego zakresu parametrów procesowych. Model ten, w aktualnej postaci, opisuje wszystkie stany pracy

badanego bioreaktora oraz jego dwie podstawowe realizacje aparaturowe tj. reaktor z wewnętrzną i zewnętrzną cyrkulacją cieczy. Równania modelu stosowane do tej pory, opisywały jedynie jeden obszar hydrodynamiczny pracy reaktora airlift. Sformułowany model hydrodynamiki został zweryfikowany doświadczalnie na dwóch, różniących się skalą, stanowiskach laboratoryjnych. Jego zaletą jest łatwa aplikacja numeryczna i co ważne, łatwa integracja z algorytmami symulującymi proces mikrobiologiczny w reaktorze.

3. Określenie specyficznej cechy numerycznej modeli matematycznych sformułowanych dla obiektów o zmiennych rozłożonych z przepływem dyspersyjnym, w których prowadzone są procesy mikrobiologiczne. Stwierdzono występowanie chaotycznych oscylacji liczby sztywności wzdłuż długości reaktora. Oscylacje te obserwowane są zarówno dla kinetyk jedno- jak i dwusubstratowych i występują zarówno w obszarach wysokich jak i niskich stężeń reagentów. Wykryte zjawisko ma szczególny wpływ na obliczenia symulacyjne powodując ich znaczne utrudnienie.
4. Wykonanie analizy nieliniowej stanów stacjonarnych reaktora airlift. Wyniki takich analiz nie były do tej pory opublikowane. Wydaje się zatem, że są unikatowe dla analizowanego bioreaktora. Ukazują one wiele złożonych, nieliniowych cech jakościowych i ilościowych, procesów biodegradacji aerobowej prowadzonej w reaktorze airlift. Mają zatem podstawowe znaczenie poznawcze. Przeprowadzona analiza, otrzymane wyniki i sformułowane wnioski stanowią podstawę do właściwego doboru parametrów konstrukcyjnych oraz procesowych bioreaktorów airlift. Właściwy dobór wartości tych parametrów umożliwia uniknięcie szczególnie niekorzystnego dla procesu aerobowego zjawiska niedotlenienia mikroorganizmów, a co za tym idzie obniżenia wydajności pracy reaktora lub też całkowitego zatrzymania procesu. Wykonana analiza nieliniowa wykazała istnienie obszarów parametrów procesowych, dla których możliwe jest wystąpienie niedotlenienia środowiska procesu. Poza praktycznym, ważny jest także w mojej ocenie, uzyskany cel poznawczy. Do tej pory nie wykonano podobnej analizy dla tak złożonego procesu mikrobiologicznego.

W mojej ocenie, ważnym efektem wykonanej pracy jest także określenie sposobu i metodologii wykonania badań oraz przeprowadzenia analizy nieliniowej stanów stacjonarnych. Przedstawione systematyczne podejście, zastosowane do konkretnego typu reaktora i konkretnego typu procesu mikrobiologicznego, może stanowić wzorzec wykonania podobnych badań dla innych typów obiektów reagujących chemicznie bądź biochemicznie.

C. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo – badawczych i dydaktycznych

Poza przedstawionym głównym obszarem mojej pracy naukowo – badawczej, zajmowałem się badaniami, które można podzielić na kilka wątków tematycznych.

Pierwszy dotyczył analizy właściwości stacjonarnych i dynamicznych kaskady reaktorów zbiornikowych z recyklem. Badania miały charakter teoretyczny. Prowadzone były zarówno dla klasycznych procesów chemicznych, jak i dla procesów mikrobiologicznych. Ich wyniki zamieściłem w publikacjach [II.A.1 - 4] oraz przedstawiłem w materiałach konferencyjnych [II.L.3, II.L.4, III.B.4, III.B.6, III.B.7]. Badając dynamikę klasycznych reaktorów chemicznych skupiłem się przede wszystkim na wpływie opóźnienia transportowego w pętli recyklu na zachowania dynamiczne kaskad takich reaktorów ze szczególnym uwzględnieniem możliwości generacji zjawisk chaotycznych. Prace teoretyczne dotyczące bioreaktorów i procesów mikrobiologicznych dotyczyły natomiast wpływu obecności podwójnego poziomu troficznego oraz istnienia kryjówek mikrobiologicznych i zagęszczania biomasy na nieliniowe zjawiska stacjonarne kaskady bioreaktorów. Analizowałem także wpływ tych parametrów na krótko- i długoczasowe zachowania dynamiczne.

Kolejnym obszarem moich zainteresowań naukowych były badania mające na celu poznanie stacjonarnych właściwości kolumnowych reaktorów barbotażowych, w których przebiegają aerobowe procesy mikrobiologiczne. Wyniki tych badań zamieściłem w publikacjach [II.B.5, II.B.6] oraz w materiałach konferencyjnych [II.L.9]. W pracach tych analizowałem właściwości statyczne bioreaktorów barbotażowych z uwzględnieniem takich zjawisk jak wpływ obecności pętli recyklu i zatrzymania biomasy. W toku tych badań określono możliwości i wyznaczono bezpieczne obszary prowadzenia procesu mikrobiologicznego w takich reaktorach. Możliwość skutecznego prowadzenia procesu mikrobiologicznego w kolumnowym reaktorze barbotażowym nawet w warunkach braku recyklu została przeze mnie także potwierdzona doświadczalnie.

Następnym wątkiem tematycznym własnych badań naukowych była analiza właściwości numerycznych wybranych modeli matematycznych o zmiennych rozłożonych wybranych bioreaktorów barbotażowych i homofazowych, pracujących w różnych konfiguracjach technologicznych. Ten cykl badawczy obejmował również procesy mikrobiologiczne w biofilnie. Wyniki tych badań zamieszczono w publikacji [II.B.6] dotyczącej obliczeń numerycznych prowadzonych podczas symulacji barbotażowych bioreaktorów kolumnowych oraz [II.B.7] opisujących aproksymacje skończone wymiarowe modelu biofilmów powstałych na drobnoziarnistych nośnikach inertnych. Badania właściwości numerycznych

modeli matematycznych związane były z optymalnym sposobem prowadzenia symulacji oraz zastosowaniem aproksymacji skończonej wymiarowej jako metody przybliżenia modeli ciągłych.

Podczas swojej pracy w Instytucie Inżynierii Chemicznej i Procesowej uczestniczyłem w trzech projektach badawczych (dwóch jako wykonawca i jednym jako kierownik tematu) oraz zrealizowałem jeden grant inwestycyjny [II.J.1 – 4]. Granty, w których byłem wykonawcą dotyczyły analizy dynamiki reaktorów chemicznych ze szczególnym uwzględnieniem dynamiki chaotycznej. Natomiast grant inwestycyjny oraz projekt, którego byłem kierownikiem zaowocował wybudowaniem laboratorium bioprocessowego, w którym prowadzone były badania doświadczalne opisane w publikacjach dotyczących analizy nieliniowej reaktora airlift. Wykonano tam badania hydrodynamiki, badania związane z doбором kinetyki procesu mikrobiologicznego, weryfikację modelu matematycznego oraz badania biodegradacji fenolu w kolumnowym bioreaktorze barbotażowym oraz w reaktorze airlift. Laboratorium jest w pełni wyposażone w nowoczesną aparaturę pomiarową i umożliwia prowadzenie badań z zakresu inżynierii bioprocessowej.

W obszarze zagadnień związanych z szeroko pojętym procesem dydaktycznym, podczas mojej pracy na stanowisku adiunkta, byłem promotorem 26 prac magisterskich i 4 inżynierskich, przygotowałem program 8 wykładów autorskich oraz jestem współautorem jednego skryptu akademickiego [III.I.1].

