

## **Kurczenie się, pękanie i płynięcie ośrodków porowatych podczas przemian termicznych i chemicznych. Wyprowadzenia i implementacja nowej biblioteki w środowisku OpenFOAM**

Czy ktoś nie zna czarującego ciepła i blasku ogniska? Prawdopodobnie każdy go doświadczył. Niewiele mniej osób doznało uczucia zawodu, gdy opał się skończył a ogień zgasł. Ale, gdzie się podział dorzucony do ogniska opał? Jak i kiedy?

W tym projekcie pogłębiamy zrozumienie sposobu, w jaki materiały porowate doznają przemieszczenia w trakcie obróbki cieplnej i chemicznej. Zajmujemy się przykładami pirolizy, zgazowania i spalania, w których zachodzi transport zarówno energii jak i materii. Są to procesy ważne w z punktu widzenia odnawialnych źródeł energii, syntezy petrochemicznej, czystej utylizacji odpadów oraz katastrof naturalnych takich jak pożary. Inne ważne przykłady ośrodków porowatych, w których zachodzą zmiany w strukturze to (pozornie bardzo odmienne) formowanie się jaskiń czy dostarczanie składników odżywczych w głąb żywych tkanek.

Konstruujemy modele matematyczne oraz narzędzia komputerowe, które są niezbędne, żeby przekonać się co z tych modeli matematycznych wynika. Chociaż modele matematyczne są uproszczoną i zwięzłą formą zapisu obserwowanych zjawisk, w tym przypadku są i tak zbyt złożone aby analizować je bez obliczeń komputerowych. Program, nad którym pracujemy, ma otwarte źródło tak, żeby każdy zainteresowany mógł z niego skorzystać. Stanie się też częścią większej biblioteki o otwartym źródle OpenFOAM, która jest popularnym narzędziem do obliczeń mechaniki płynów.

Pierwszym celem projektu jest zrozumienie ewolucji pojedynczej cząstki biomasy. Eksperymenty pokazują, że drewniany walec (np. zapalka), jeśli go podpalimy, kurczy się, wygina, czasem puchnie a kiedy indziej się rozpada. Mniej znanym faktem jest, że jeśli do dostatecznie gorącego paleniska wrzuci się dostatecznie dużą szczapkę drewna, to ona eksploduje. Matematyczny model, który wiąże ze sobą skład chemiczny materiału, temperaturę, wewnętrzne naprężenia i przemieszczenia powinien precyzyjnie wyjaśnić znaczenie słowa „dostatecznie” i określić czynniki istotne dla stabilności struktury. Modele, które opracowujemy opierają się na pomiarach nawet tak szczegółowych jak zdjęcia skaningowego mikroskopu elektronowego powierzchni próbek oraz mikrotomografii wnętrza próbek. Można na nich dostrzec zmiany rozmiarów poszczególnych porów.

Drugim zadaniem realizowanym w projekcie jest zbadanie dynamiki złoża cząstek, które zachowują się tak jak pojedyncza cząstka biomasy. Szczególnym przykładem takiego złoża jest właśnie ognisko. Świeże szczapy drewna dorzuca się na wierzch. Spalając się podróżują w dół kopca jednocześnie zmieniając swój kształt aż w końcu opadają na sam spód w postaci popiołów, które mają objętość około 1% początkowej szczapy. Reszta masy jest unoszona do atmosfery jako CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>O oraz inne produkty reakcji chemicznych. Pomimo, że proces ten jest bardzo zwyczajny, składa się z wielu interesujących i stanowiących nie lada wyzwanie zjawisk fizycznych: pękanie i rozpad, ruch ośrodków granularnych, fluidyzacja a nawet pełzanie. Warto zwrócić uwagę, że podczas ruchu, w złożu ośrodka porowatego ani masa ani objętość cząstek nie jest zachowana. Czyni to je bardzo ciekawym obiektem badań z punktu widzenia mechaniki płynów.

W rezultacie otrzymamy otwartą platformę obliczeniową, w której będzie można zaimplementować realistyczne modele ruchu ośrodków porowatych a także modele takiego ruchu w reakcji na przemiany termiczne i chemiczne. Modele pogłębią naszą zrozumienie dynamiki ośrodków porowatych, które jest bardzo potrzebne w badaniach pożarniczych, środowiskowych i przemysłowych. Wyzwaniem, które stoi przed dobrym modelem jest na przykład inspirowanie strategii na obniżenie emisji CO<sub>2</sub> wskutek pożarów. Platforma natomiast stanowi pomoc dla badaczy i praktyków, którzy sami badają dynamikę ośrodków porowatych i projektują maszyny.