

Ülesanne 1

Kasutades GRI30 (53 ainete kogumiku) simuleeri metaani ja propaani põlemisprotsessi erinevatel temperatuuridel. Koodi kirjutamisel tuleb kasutada MatLabi käsuakend. Koosta graafik, võrdle ja analüüsi saadud tulemused. Vasta küsimusele: „Kas antud keemiline reaktsioon on eksotermiline või endotermiline?“.

Lähteandmed:

- Kasutatav kogumik GRI30;
- Vali kolm temperatuuri näitajaid vahemikus 1000K – 2000K;
- Rõhk 1 MPa;
- Põlemine toimub hapniku keskkonnas, suletud süsteemis.

Õpiväljundid

Üliõpilane:

- seostab termodünaamika I seadust praktikaga;
- meenutab, mis on entalpia, siseenergia, entroopia ja Gibbsi vabaenergia;
- saab teada, kui palju energiat kulub metaani ja propaani põlemisprotsessile erinevatel tingimustel;
- õpib Cantera programmi kasutamist/koodi kirjutamist;
- õpib simulatsiooni tulemust analüüsimist ja tõlgendamist.

Ülesande lahendus

MatLabi käsuaknas tuleb sisestada kood:

```
>> g = GRI30
```

```
>> set(g, 'Temperature', 2000, 'Pressure', 1.e6, 'MoleFractions', 'CH4:1,O2:2'); (metaan)
```

Või

```
>> set(g, 'Temperature', 2000, 'Pressure', 1.e6, 'MoleFractions', 'C3H8:1,O2:2'); (propaan)
```

Tulemuste väljastamine >> g()

Tulemuste analüüs

```
>> gas1()

gri30:

    temperature 2000 K
    pressure    1e+05 Pa
    density     0.16044 kg/m^3
    mean mol. weight 26.68 kg/kmol
    phase of matter gas

           1 kg           1 kmol
-----
enthalpy   2.1459e+06     5.7251e+07 J
internal energy 1.5226e+06 4.0622e+07 J
entropy    10780         2.8762e+05 J/K
Gibbs function -1.9415e+07 -5.1798e+08 J
heat capacity c_p 2199.3     58676 J/K
heat capacity c_v 1887.6     50362 J/K

           mass frac. Y     mole frac. X     chem. pot. / RT
-----
O2         0.79956         0.66667         -29.184
CH4        0.20044         0.33333         -35.08
[ +51 minor] 0             0
```

Joonis 1. Metaani põlemisprotsessi tulemused.

Joonisel 38 on näha metaani põlemisprotsessi temperatuuril 2000K. Tudengil tuleb simuleerida metaani põlemist kolmel erinevatel temperatuuridel ning tulemuste abil saab võrrelda entalpia muutust ehk kui palju kulub energiat metaani põlemisele, lisaks saab võrrelda siseenergia, tiheduse, entroopia, Gibbsi vabaenergia ja soojusmahu muutust. Peale metaani põlemisprotsessi simuleerimist, tuleb katsetada ka propaani põlemist (samuti kolmel erinevatel temperatuuridel) ning kokkuvõttes tuleb näidata graafikute abil, millise gaasi põletamise peale kulub rohkem energiat.

Kasutades eelõpitut käske, püüa teha võrdlev analüüs tabelina, seejärel joonised.

LAHENDUS Kohe mitterähtav õpilasele

```
clear; clc;
```

```
%% Metaani ja propaani põlemise võrdlus kolmel temperatuuril Canteraga
```

```
% N: eeldab GRI30 mehhanismi olemasolu
```

%% 1. Gaasifaasi laadimine (proovi YAML, siis CTI/klassikaline GRI30)

```
gas = [];
```

```
try
```

```
    gas = Solution('gri30.yaml','gri30');
```

```
catch
```

```
    try
```

```
        gas = GRI30;          % vana stiil, kui olemas
```

```
    catch
```

```
        gas = IdealGasMix('gri30.cti','gri30');
```

```
    end
```

```
end
```

%% 2. Üldised seaded

```
P0 = 1e6;          % Rõhk (Pa) – sama mõlemal gaasil
```

```
T_list = [1500 2000 2500];    % Kolm vaadeldavat temperatuuri (K)
```

```
nT = numel(T_list);
```

% Stoihiomeetrilised segud O₂-ga (ilma N₂-ta, nagu sul varem CH₄:1,O₂:2)

```
comp_CH4 = 'CH4:1,O2:2';      % CH4 + 2 O2
```

```
comp_C3H8 = 'C3H8:1,O2:5';    % C3H8 + 5 O2
```

% Salvestame kõik omaduste muutused:

% rida: 1=h, 2=u, 3=rho, 4=s, 5=g, 6=cp

```
dMeth = zeros(6, nT); % metaan
```

```
dProp = zeros(6, nT); % propaan
```

```
%% 3. Abi-funktsioon omaduste võtmiseks (massipõhiselt)
```

```
getProps = @(g) struct( ...
```

```
    'h', enthalpy_mass(g), ...    % J/kg
```

```
    'u', intEnergy_mass(g), ...    % J/kg
```

```
    'rho', density(g), ...        % kg/m^3
```

```
    's', entropy_mass(g), ...     % J/(kg*K)
```

```
    'g', gibbs_mass(g), ...       % J/kg
```

```
    'cp', cp_mass(g);            % J/(kg*K)
```

```
%% 4. Tsükkel temperatuuride üle – metaan ja propaan
```

```
for k = 1:nT
```

```
    T = T_list(k);
```

```
    % --- METAAN ---
```

```
    % Algolek: CH4 + O2 segu enne põlemist
```

```
    set(gas, 'T', T, 'P', P0, 'X', comp_CH4);
```

```
    props_in = getProps(gas);
```

```
    % Tasakaalustatud põlemisproduktid (TP – T ja P fikseeritud, koostis muutub)
```

```
    equilibrate(gas, 'TP');
```

```
    props_eq = getProps(gas);
```

```

% Muutused (pärast – enne)

dMeth(:,k) = [ ...

    props_eq.h - props_in.h; ...

    props_eq.u - props_in.u; ...

    props_eq.rho- props_in.rho; ...

    props_eq.s - props_in.s; ...

    props_eq.g - props_in.g; ...

    props_eq.cp - props_in.cp];

% --- PROPAAAN ---

% Alglek: C3H8 + O2 segu enne põlemist

set(gas, 'T', T, 'P', P0, 'X', comp_C3H8);

props_in = getProps(gas);

% Tasakaalustatud põlemisproduktid

equilibrate(gas, 'TP');

props_eq = getProps(gas);

% Muutused (pärast – enne)

dProp(:,k) = [ ...

    props_eq.h - props_in.h; ...

    props_eq.u - props_in.u; ...

    props_eq.rho- props_in.rho; ...

```

```
    props_eq.s - props_in.s; ...  
    props_eq.g - props_in.g; ...  
    props_eq.cp - props_in.cp];  
end
```

%% 5. Graafikute joonistamine – metaan vs propaan

```
propNames = { ...  
    'Entalpia \Delta h', ...  
    'Sisemine energia \Delta u', ...  
    'Tihedus \Delta rho', ...  
    'Entroopia \Delta s', ...  
    'Gibbsi vabaenergia \Delta g', ...  
    'Soojusmahtuvus \Delta c_p'};
```

```
propUnits = { ...  
    'J/kg', ...  
    'J/kg', ...  
    'kg/m^3', ...  
    'J/(kg·K)', ...  
    'J/kg', ...  
    'J/(kg·K)'};
```

```
for i = 1:6
```

```

figure(i);

plot(T_list, dMeth(i,:), '-o', 'LineWidth',1.5); hold on;

plot(T_list, dProp(i,:), '-s', 'LineWidth',1.5);

grid on;

xlabel('Temperatuur T (K)');

ylabel(sprintf('%s [%s]', propNames {i}, propUnits {i}));

title(sprintf('%s muutus metaani ja propaani põlemisel', propNames {i}));

legend('Metaan', 'Propaan', 'Location','best');

end

%% 6. Lisainfo ekraanile – kummal on suurem entalpia muutus?

disp('--- Entalpia muutus (J/kg) ---');

disp(table(T_list.', dMeth(1,:).', dProp(1,:).', ...

'VariableNames', {'T_K','Delta_h_Metaan','Delta_h_Propaan'}));

```