

Marcel Sulkowski 320990

Prowadzący: dr. inż. Mateusz Żbikowski

Politechnika Warszawska
Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa
Instytut Techniki Ciepłej

Metody Komputerowe w Spalaniu

Wpływ współczynnika ekwiwalencji mieszanek wodorowo-powietrznych na temperaturę oraz skład spalin

30.05.2024

Wstęp

Projekt obejmuje napisanie kodu w języku programowania Python z użyciem biblioteki Cantera wykonującego obliczenia stanu spalin (temperatury i składu) reakcji spalania adiabatycznego w warunkach stałego ciśnienia mieszanek wodoru z powietrzem.

Warunki początkowe

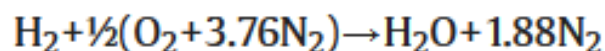
$$T = 300\text{K}$$

$$p = 1\text{atm}$$

Obliczenia

Obliczenia opierają się na zdefiniowaniu współczynnika ekwiwalencji, będącego stosunkiem stężenia molowego paliwa w mieszance założonej, do tego w mieszance stechiometrycznej.

Równanie reakcji spalania mieszanki stechiometrycznej



Przy użyciu funkcji biblioteki Cantera zasymulowane były wspomniane wcześniej reakcje dla 50 różnych wartości współczynnika ekwiwalencji w zakresie od 0,5 do 2. W wyniku zarejestrowane zostały adiabatyczna temperatura spalin oraz stężenie poszczególnych ich składników, których stężenie przekraczało 10^{-6} .

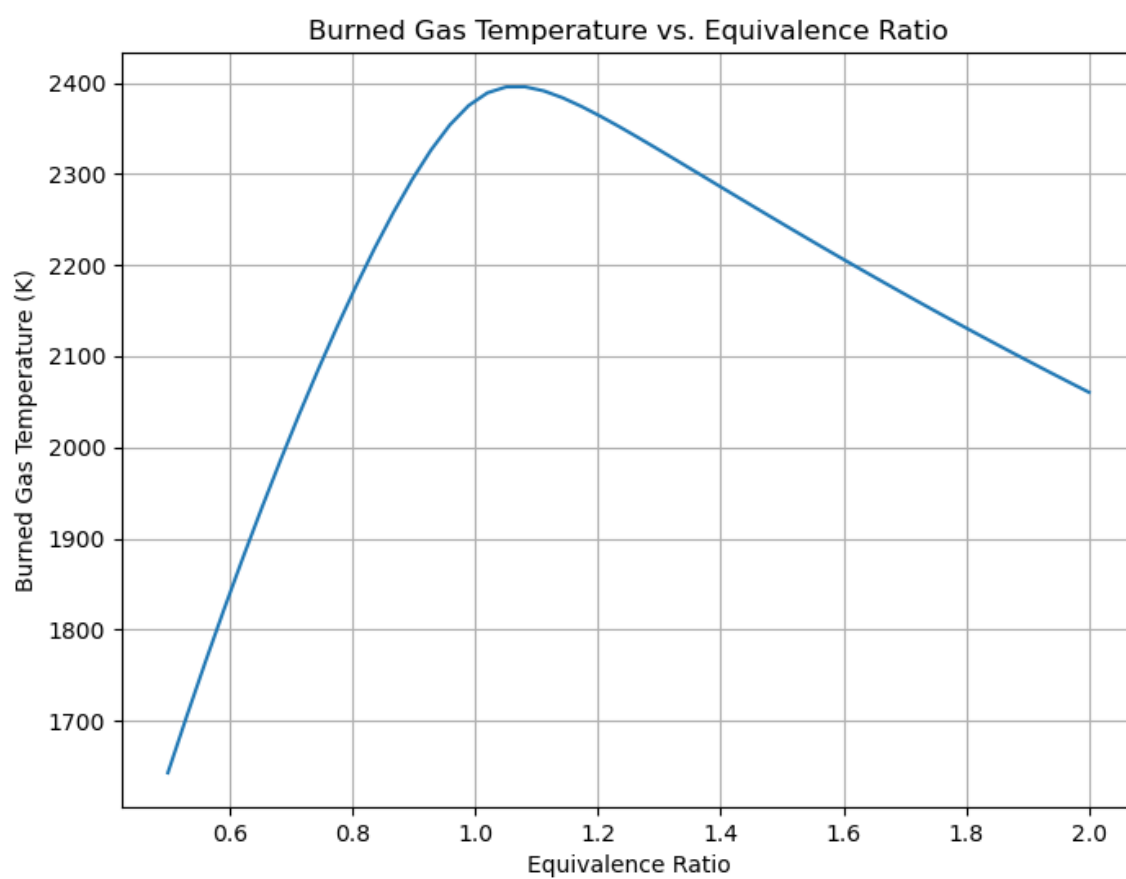
Wyniki obliczeń

Uzyskane wyniki zostały następnie umieszczone na wykresach ukazujących kolejno temperaturę, stężenia głównych składników (z wyłączeniem azotu oraz stężenia głównych szkodliwych substancji).

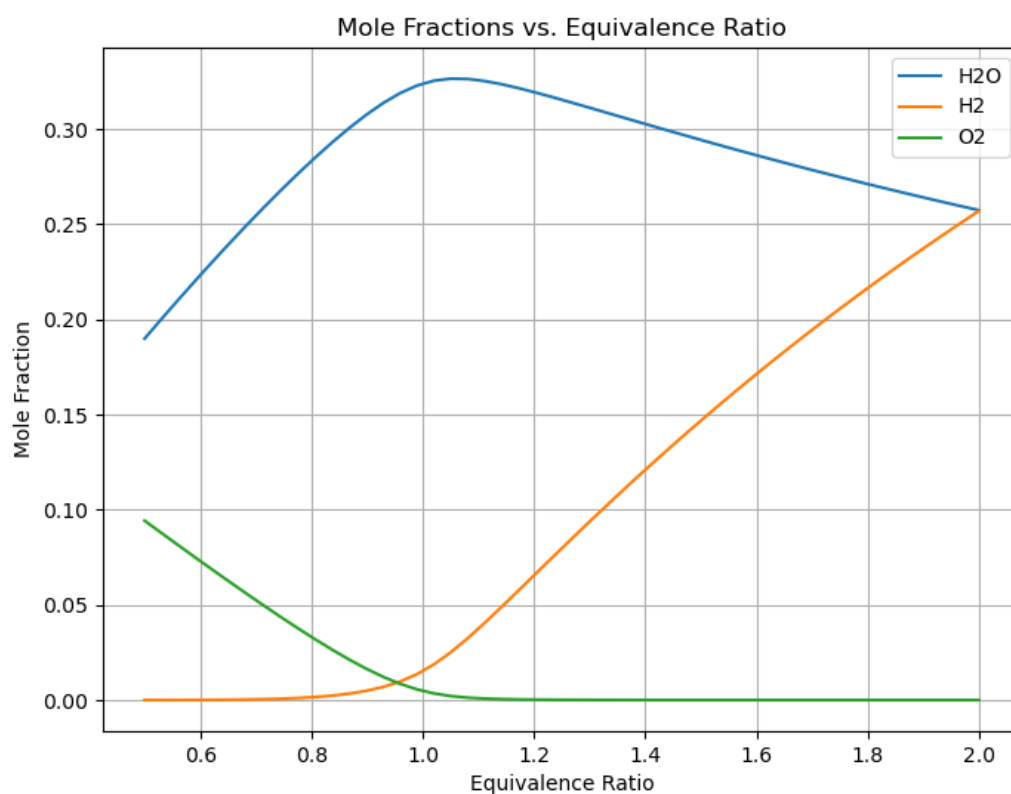
Grafika1. Przykładowy wynik

```
Equivalence Ratio: 1.33  
Burned Gas Temperature: 2313.12 K  
Burned Gas Composition:  
H2: 1.029e-01  
H: 3.325e-03  
O: 3.586e-05  
O2: 4.485e-05  
OH: 1.632e-03  
H2O: 3.084e-01  
NO: 2.035e-04  
N2: 5.834e-01
```

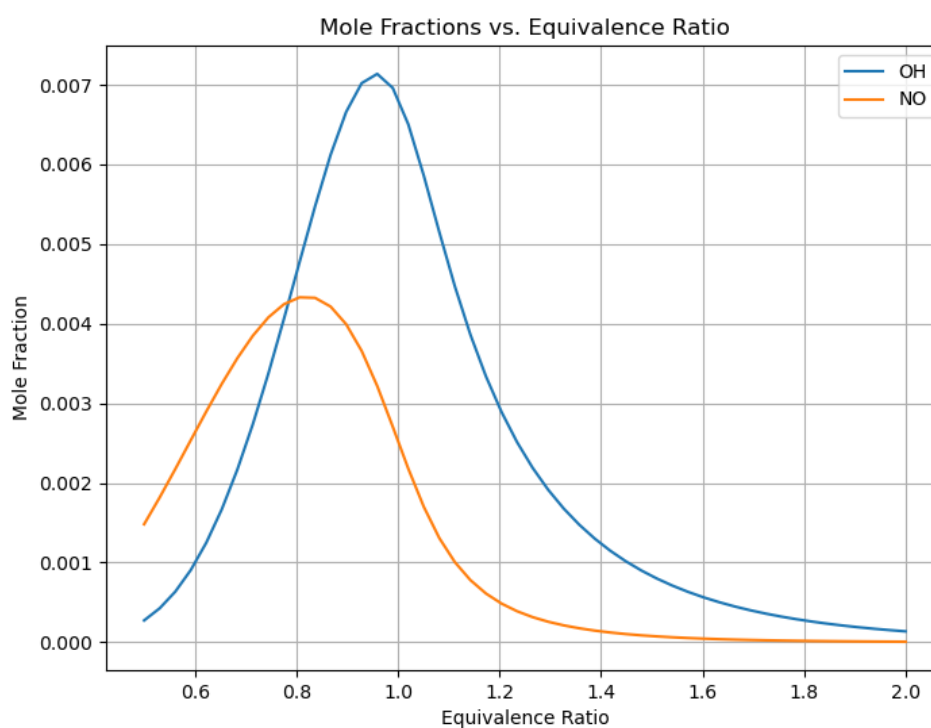
Grafika2. Temperatura



Grafika3. Główne składniki



Grafika4. Główne szkodliwe substancje



Wnioski

Maksymalna adiabatyczna temperatura spalania jest osiągana dla $\varphi = 1,08$ i wynosi 2395,87K.

W okolicach wartości $\varphi = 1$ zauważalny jest początek wzrostu stężenia niespalonego wodoru i spadku niezużytego do utlenienia tlenu, co jest spowodowane niedostatkim powietrza.

Maksymalne stężenia NO oraz OH znajdują się w mieszkankach nieco ubogich, w granicach 0,8 do 0,95, co może być powodowane nadmiarem powietrza przy jednoczesnej względnie dużej temperaturze reakcji.

Załączony kod

```
import cantera as ct

import numpy as np

import matplotlib.pyplot as plt

gas = ct.Solution('gri30.yaml')

def calculate_burned_mixture(equivalence_ratio, gas):

    fuel = 'H2'

    oxidizer = 'O2:1.0, N2:3.76'

    gas.set_equivalence_ratio(equivalence_ratio, fuel, oxidizer)

    gas.TP = 300, ct.one_atm

    gas.equilibrate('HP')

    burned_temperature = gas.T

    burned_composition = gas.X

    return burned_temperature, burned_composition

equivalence_ratios = np.linspace(0.5, 2.0, 50)

temperatures = []

h2o_mole_fractions = []

h2_mole_fractions = []

oh_mole_fractions = []

o2_mole_fractions = []

no_mole_fractions = []
```

```

for phi in equivalence_ratios:
    temperature, composition = calculate_burned_mixture(phi, gas)
    temperatures.append(temperature)
    h2o_mole_fractions.append(composition[gas.species_index('H2O')])
    h2_mole_fractions.append(composition[gas.species_index('H2')])
    oh_mole_fractions.append(composition[gas.species_index('OH')])
    o2_mole_fractions.append(composition[gas.species_index('O2')])
    no_mole_fractions.append(composition[gas.species_index('NO')])

    print(f'Equivalence Ratio: {phi:.2f}')
    print(f'Burned Gas Temperature: {temperature:.2f} K')
    print('Burned Gas Composition:')
    for species, mole_fraction in zip(gas.species_names, composition):
        if mole_fraction > 1e-6:
            print(f' {species}: {mole_fraction:.3e}')
    print()

plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(equivalence_ratios, temperatures, marker='')
plt.xlabel('Equivalence Ratio')
plt.ylabel('Burned Gas Temperature (K)')
plt.title('Burned Gas Temperature vs. Equivalence Ratio')
plt.grid(True)
plt.show()

plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(equivalence_ratios, h2o_mole_fractions, marker='', label='H2O')
plt.plot(equivalence_ratios, h2_mole_fractions, marker='', label='H2')
plt.plot(equivalence_ratios, o2_mole_fractions, marker='', label='O2')
plt.xlabel('Equivalence Ratio')
plt.ylabel('Mole Fraction')
plt.title('Mole Fractions vs. Equivalence Ratio')

```

```
plt.legend()  
plt.grid(True)  
plt.show()
```

```
plt.figure(figsize=(8, 6))  
plt.plot(equivalence_ratios, oh_mole_fractions, marker="o", label='OH')  
plt.plot(equivalence_ratios, no_mole_fractions, marker="o", label='NO')  
plt.xlabel('Equivalence Ratio')  
plt.ylabel('Mole Fraction')  
plt.title('Mole Fractions vs. Equivalence Ratio')  
plt.legend()  
plt.grid(True)  
plt.show()
```