Anwendung fortgeschrittener Mathematik-Software in der Thermodynamik

Prof. Dr. Marco Günther, Prof. Dr.-Ing. Michael Reimann

AG Mathematik und Fluidmechanik, Fakultät für Ingenieurwissenschaften

Hochschule für Technik und Wirtschaft des Saarlandes - University of Applied Sciences

MOTIVATION

- Moderne Lehre und Forschung kommt in der Regel nicht ohne aufwendige Berechnungen und numerische Simulationen aus.
- Viele Ingenieure verwenden noch häufig einfache Hilfen wie Tabellenkalkulationsprogramme, die den Anforderungen an den Rechenaufwand nicht gerecht werden.
- Aktuelle mathematische Software ist ausgereift, dass diese auf einfache Weise und direkt eingesetzt werden kann.
- Fünf Aufgabenstellungen im Umfeld der Thermodynamik werden mit vier mathematischen Programmen gelöst.

AUFGABEN

1. Einfache Integration, Funktionsdefinition

Welcher Luftdruck in **mmHg** bzw. in **bar** herrscht in einer Flughöhe von 11 km, wenn die Temperatur am Boden **0°C** und der Luftdruck 760 **mmHg** beträgt? Die Temperatur nimmt pro Kilometer Steighöhe linear um 6,5 **K** ab. Voraussetzung: Luft ist ein ideales Gas mit Gaskonstante **R**=0,287 **kJ/kg K**.

Theoretische Bearbeitung:
Der Druckverlauf wird durch die Differentialgleichung (DGL)

$$\frac{dp}{dz}(z) = -g\,\rho(z)$$

beschrieben (Gravitationskonstante **g**). Durch Anwenden des Idealen-Gasgesetzes und Integration der DGL erhalten wir

$$p(z) = p_0 \cdot \exp\left(-\frac{g}{R}\int_0^z \frac{1}{T(z)}\,dz\right),$$

wobei die Temperatur $T(z)$ durch $T(z) = T_0 + \gamma \cdot z$ (T_0 Temperatur am Boden) gegeben ist.
Mittels mathematischer Software soll der Druck numerisch wie analytisch berechnet werden, um den Wert in der Höhe $z_1 = 11\,\mathrm{km}$ zu gewinnen.

2. Analytische Entwicklung, Nichtlineares Gleichungssystem, Grafik

Für ein Van-der-Waals-Fluid ist das Zweiphasengebiet abzugrenzen. Die Sättigungslinie ist im **Π-Θ**-Diagramm und im **Π-X**-Diagramm unter Einzeichnung der Isothermen darzustellen.

Theoretische Bearbeitung:
Ausgehend von der thermischen Zustandsgleichung $\Pi(\Theta, X) = \frac{8\,\Theta}{3\,X-1} - \frac{3}{X^2}$ erhalten wir durch Integration die Helmholtz-Funktion

$$\Phi_r(\Theta, X) = \int \left(\frac{8\,\Theta}{3\,X-1} - \frac{3}{X^2}\right) dX.$$

Die zugehörige Gibbs-Funktion ist gegeben durch

$$\zeta_r(\Theta, X) = \Phi_r(\Theta, X) + \Pi(\Theta, X)\,X$$

In Abhängigkeit von der Temperatur Θ, können die beiden Volumina für gesättigte Flüssigkeit X_f und Sattdampf X_d als Lösung folgender Gleichungen gewonnen werden:

$$\Pi(\Theta, X_f) - \Pi(\Theta, X_d) = 0,$$
$$\zeta_r(\Theta, X_f) - \zeta_r(\Theta, X_d) = 0 \qquad (X_f < X_d)$$

Die mathematischen Programme sollen die Funktionen erstellen und eine Lösung des nicht-linearen Gleichungssystems finden. Anschließend sollen die Ergebnisse graphisch darsgestellt werden.

3. Große Datenmengen, Grafik

Für trockene Luft ist im Druckbereich zwischen 1 **bar** und 100 **bar** und im Temperaturbereich zwischen **−50°C** und **500°C** der Realgasfaktor **Z** in einem **p**-**t**-Diagramm als Konturplot darzustellen. Voraussetzung: Die Daten für das reale Gas trockene Luft werden mit dem Programmsystem CoolPack der Technischen Universität Kopenhagen berechnet.

Theoretische Bearbeitung:
Mit den Schrittweiten $\Delta t = 1\,\mathrm{K}$ und $\Delta p = 1\,\mathrm{bar}$ wird in CoolPack eine Matrix mit 55099 Zeilen generiert und als Datei abgespeichert. Die erste Spalte enthält die Temperatur, die zweite den Druck und die dritte das spezifische Volumen.
Um den Realgasfaktor zu erhalten, wird dieser berechnet durch:

$$Z = \frac{\text{Druck} \cdot \text{spez.Vol}}{R \cdot \text{Temp}}, \qquad R = \text{Gaskonstante}$$

4. Handhabung von Matrizen und Funktionen

Nach der Brennkammer wird einer Gasturbine Abgas der Zusammensetzung χ^{Abgas}=(N_2:73, 09%, O_2:12, 44%, CO_2:3, 57%,H_2O:10, 03%, Ar:0, 87%) mit einer Temperatur von $t_1 = 1200°C$ zugeführt. Das Druckverhältnis der Turbine beträgt $\Pi_T = 15,8$ und der innere Wirkungsgrad $\eta_{i,T} = 0,90$. Welche spezifische Arbeit wird der Turbine entnommen?
Voraussetzungen: Das Abgas ist ein Gemisch idealer Gase mit $c_p = c_p(T)$. Für die Komponenten $H_2, N_2, O_2, CO, CO_2, H2O, Ar$ wird eine Matrix von Koeffizienten **A** bereitgestellt. Ferner werden die molaren Massen der Komponenten in eine Matrix M gespeichert.

Theoretische Bearbeitung:
Die speziellen Koeffizienten für das Abgas werden berechnet durch die Matrizenoperation $a = A\,\chi^{Abgas}$ (χ Gaszusammensetzung in Vol-%). Die molare Wärmekapazität eines Gasgemischs wird durch $c_{p,m}^{Abgas}(T) = R \cdot \sum_{i=1}^{n} a_i\,T^i$ ausgedrückt. Die molare Enthalpie h_m^{Abgas} und der Temperaturterm der Entropie $s_{m,T}^{Abgas}$ sind definiert durch

$$h_m^{Abgas}(T) = \int_{T_0}^{T} c_{p,m}^{Abgas}(T)\,dT, \qquad s_{m,T}^{Abgas}(T) = \int_{T_0}^{T} \frac{c_{p,m}^{Abgas}(T)}{T}\,dT$$

(T_0 beliebige Bezugstemperatur). Mit Hilfe der Bedingung für isentrope Expansion

$$s_{m,T,2}^{Abgas} = s_{m,T}^{Abgas}(T_1) - R \cdot \ln(\Pi_T)$$

können wir die isentrope Temperatur nach der Expansion bestimmen durch Invertieren von $s_{m,T}^{Abgas}(T_{2,is}) = s_{m,T,2}^{Abgas}$. Die tatsächliche Temperatur T_2 erhalten wir durch

$$h_{m,2}^{Abgas} = h_m^{Abgas}(T_1) + \eta_{i,T} \cdot (h_m^{Abgas}(T_{2,is}) - h_m^{Abgas}(T_1))$$

und invertieren von $h_m^{Abgas}(T_2) = h_{m,2}^{Abgas}$. Die molare Arbeit der Entspannung erhalten wir aus $w_{t,m} = h_m^{Abgas}(T_2) - h_m^{Abgas}(T_1)$, sowie die spezifische Arbeit $w_t = \frac{w_{t,m}}{M^{Abgas}}$ (mit M^{Abgas} molare Masse Abgas).

5. Handhabung von Matrizen mit Funktionsausdrücken

In einer Anlage zur Erzeugung von Prozessdampf werden Holzhackschnitzel verbrannt. Die Elementaranalyse ergibt für die Zusammensetzung $\Psi_B = (c = 43,35\%, h = 5,07\%, o = 37,18\%, n = 0,00\%, s = 0,00\%, w = 15,00\%, a = 0,50\%)$. Der Heizwert beträgt $\Delta H_H = 15,51\,\mathrm{MJ/kg}$. Die der Feuerung zugeführte Luft hat die Zusammensetzung $\chi_L = (H_2 = 0,00\%, N_2 = 75,77\%, O_2 = 20,33\%, CO = 0,00\%, CO_2 = 0,00\%, H_2O = 2,96\%, Ar = 0,94\%)$ und eine eine Temperatur $t_U = 15°C$. Der Brennstoff wird mit $t_B = 10°C$ zugeführt. Die Verbrennungsgase haben eine Temperatur von $t_A = 1300°C$. Mit welcher Luftüberschusszahl λ wird die Verbrennung durchgeführt? Die Verbrennungsgase geben zur Dampferzeugung Wärme bis zu einer Temperatur von $t_N = 150°C$ ab. Wie groß ist die Nutzwärme pro kg Brennstoff?
Voraussetzungen: Die Verbrennung erfolgt vollständig. Luft und Verbrennungsgase sind Gemische idealer Gase mit temperaturabhängigen spezifischen Wärmekapazitäten. Brennstoff und Asche sind Festkörper mit den spezifischen Wärmekapazitäten $c_B = 2,5\,\mathrm{kJ/kg\,K}$ und $c_A = 1,0\,\mathrm{kJ/kg\,K}$.

Theoretische Bearbeitung:
Die Funktion für die molare Enthalpie der Luft $h_m^{Luft}(T)$ ist analog zur Enthalpie von Abgas in Aufgabe 4 definiert.
Der Sauerstoffbedarf für die Verbrennung ist wie folgt gegeben:

$$O_{min} = \frac{\Psi_{B,1}}{M_{B,1}} + \frac{1}{2}\frac{\Psi_{B,2}}{M_{B,2}} - \frac{\Psi_{B,4}}{M_{B,4}},$$

wobei $M_{B,i}$ die entsprechenden molaren Massen sind. Die Kennziffern der Verbrennung sind wie folgt gegeben:

$$\kappa_p = \frac{\Psi_{B,1}}{M_{B,1}}, \quad \sigma_p = O_{min}, \quad \omega_p = \frac{\Psi_{B,2}}{M_{B,2}} + \frac{\Psi_{B,6}}{M_{B,6}}, \quad L_{p,min} = \frac{O_{min}}{\chi_{L,3}}.$$

Zur Aufstellung der Verbrennung werden folgende Vektoren definiert:

$$\Lambda_{AV}(\lambda) = \begin{pmatrix} 0 \\ \lambda \frac{\chi_{L,1}}{\chi_{L,2}}\sigma_p \\ (\lambda - 1)\sigma_p \\ 0 \\ \kappa_p \\ \omega_p + \lambda \frac{\chi_{L,5}}{\chi_{L,2}}\sigma_p \\ \lambda \frac{\chi_{L,6}}{\chi_{L,2}}\sigma_p \end{pmatrix}, \qquad \varepsilon(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ h_m^{N_2}(T) \\ h_m^{O_2}(T) \\ 0 \\ h_m^{CO_2}(T) \\ h_m^{H_2O}(T) \\ h_m^{Ar}(T) \end{pmatrix}$$

Die Luftüberschusszahl erhält man als Lösung folgender Gleichung:

$$\Delta H_H + c_B\,(T_B - T_0) + \lambda\,L_{p,min}\,h_m^{Luft}(T_U)$$
$$-\Lambda_{AV}(\lambda) \cdot \varepsilon(T_A) - \Psi_{B,6}\,c_A\,(T_A - T_0) = 0$$

Die Nutzwärme pro kg Brennstoff berechnet sich mit

$$Q_{p,nutz}(\lambda) = \Lambda_{AV}(\lambda) \cdot (\varepsilon(T_N) - \varepsilon(T_A))$$

Quelle:

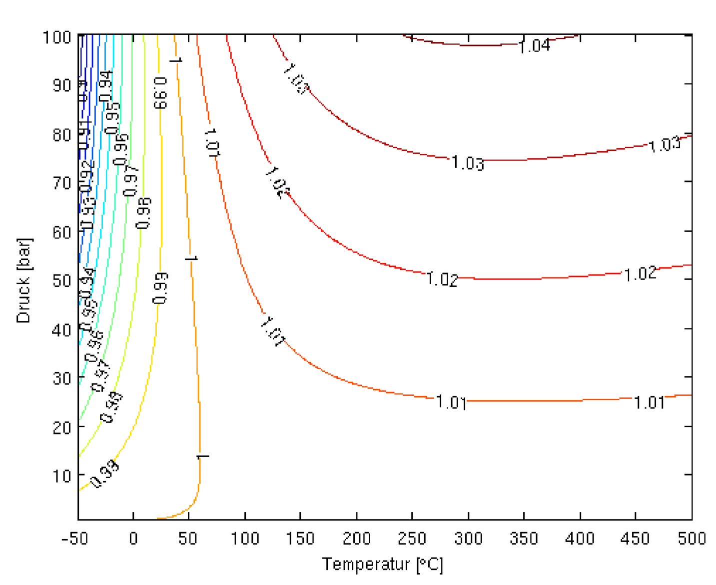
Die genaue Herleitung der Gleichungen und Formeln ist zu finden in Reimann, M.: Thermodynamik mit Mathcad, Oldenbourg Verlag, 2010

ERGEBNISSE

Alle Aufgaben können mit allen eingesetzten Programmen recht einfach gelöst werden. Moderne mathematische Software eignet sich bestens zur Untersuchung thermodynamischer Probleme. Die Skripte/Arbeitsblätter sind flexibel und kompakt, Parameter lassen sich leicht ändern und anpassen, so dass auf eine einfache Weise Studien durchgeführt werden können. Die Möglichkeit zur Visualisierung der Ergebnisse ist vorhanden. Mathematisch Ausdrücke lassen sich direkt eingeben und analytisch verarbeiten (z.B. Integrieren/Differenzieren). Bei Matlab (ohne Toolboxen)/Octave ist dies nicht möglich, da diese auf Numerik optimiert sind.

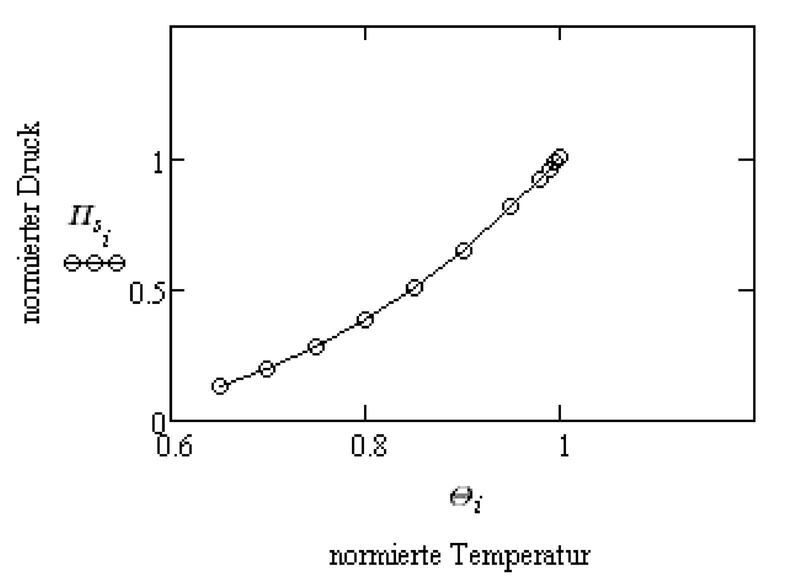
MATLAB / Octave

- rein numerisch
- schnell
- Octave kostenlos
- abgestimmt für Matrizenverabeitung



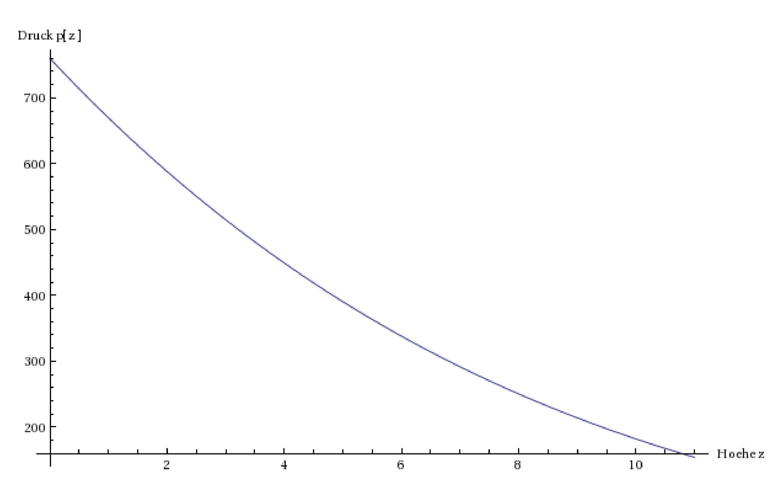
MATHCAD

- weniger zur Programmierung geeignet
- keine Syntax erforderlich
- volle GUI-Unterstützung
- als Arbeitstool einsetzbar



MAXIMA

- langsame Berechnungen
- etwas schwierige Syntax
- kostenlos
- alle Aufgaben gelöst



MATHEMATICA

- Arbeitsblatt
- großer Befehlssatz
- guter Umgang mit analytischen Ausdrücken