

Übungen 3 zur Modellierung und Simulation IV (SS 2013)

[http://www.uni-ulm.de/mawi/mawi-numerik/lehre/sommersemester-2013/
vorlesung-modellierung-und-simulation-4.html](http://www.uni-ulm.de/mawi/mawi-numerik/lehre/sommersemester-2013/vorlesung-modellierung-und-simulation-4.html)

Aufgabe 3.1 (Ozon-Zersetzung: Kinetik)

Implementieren und integrieren Sie das Ozon-Modell aus Tabelle 1 mit den Matlab-Codes vom letzten Semester. Als Startwert können Sie $(c_{\text{O}}, c_{\text{O}_2}, c_{\text{O}_3})^{\top} = (1.0, 0.0, 0.0)^{\top}$ nutzen.

Tabelle 1: Ozon-Zersetzungs-Mechanismus nach U. Maas und J. Warnatz, Zeitschr. für Phys. Chem., vol. 161, p. 61, 1989. doi: 10.1524/zpch.1989.161.Part_1_2.061. Kollisionseffizienzen für M: $\alpha_{\text{O}} = 1.14$, $\alpha_{\text{O}_2} = 0.40$, $\alpha_{\text{O}_3} = 0.92$. Temperatur: $T = 1000$ K

Reaktion	A / (cm, mol, s)	b	E_a / kJ mol ⁻¹
$\text{O} + \text{O} + \text{M} \rightarrow \text{O}_2 + \text{M}$	2.90×10^{17}	-1.0	0.0
$\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{M}$	6.81×10^{18}	-1.0	496.4
$\text{O}_3 + \text{M} \rightarrow \text{O} + \text{O}_2 + \text{M}$	9.50×10^{14}	0.0	95.0
$\text{O} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O}_3 + \text{M}$	3.32×10^{13}	0.0	-4.9
$\text{O} + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2$	5.20×10^{12}	0.0	17.4
$\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O}_3$	4.27×10^{12}	0.0	413.9
