

**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  $(c_{\text{O}}, c_{\text{O}_2}, c_{\text{O}_3})^{\text{T}} = (1.0, 0.0, 0.0)^{\text{T}}$  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)	$b$	$E_{\text{a}}$ / kJ mol <sup>-1</sup>
$\text{O} + \text{O} + \text{M} \rightarrow \text{O}_2 + \text{M}$	$2.90 \times 10^{17}$	-1.0	0.0
$\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{M}$	$6.81 \times 10^{18}$	-1.0	496.4
$\text{O}_3 + \text{M} \rightarrow \text{O} + \text{O}_2 + \text{M}$	$9.50 \times 10^{14}$	0.0	95.0
$\text{O} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O}_3 + \text{M}$	$3.32 \times 10^{13}$	0.0	-4.9
$\text{O} + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2$	$5.20 \times 10^{12}$	0.0	17.4
$\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O}_3$	$4.27 \times 10^{12}$	0.0	413.9

---