

Übungen 5 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 5.1 (C_p , H und S)

Im folgenden wollen wir eine Wasserstoff-Verbrennung simulieren. Dafür benötigen wir $\bar{C}_{p,s}^\circ(T)$, $\bar{H}_s^\circ(T)$ und $\bar{S}_s^\circ(T)$. Dazu wertet man die sog. NASA-Polynome für alle chemischen Spezies $s = 1, \dots, n_{\text{spec}}$ aus:

$$\begin{aligned}\frac{\bar{C}_{p,s}^\circ(T)}{R} &= a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \\ \frac{\bar{H}_s^\circ(T)}{R} &= a_6 + a_1T + \frac{a_2}{2}T^2 + \frac{a_3}{3}T^3 + \frac{a_4}{4}T^4 + \frac{a_5}{5}T^5 \\ \frac{\bar{S}_s^\circ(T)}{R} &= a_7 + a_1 \ln(T) + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4.\end{aligned}$$

Wir nutzen die Daten des GRI-Mech 3.0 Mechanismus, der im Internet veröffentlicht ist. Suchen Sie die benötigten Polynomkoeffizienten im Internet und implementieren Sie eine Funktion

```
function [Cpm,Hm,Sm] = thermodynamics(T,s);
```

in MATLAB, die zu einer Temperatur T und dem Index s einer Spezies die Werte $\bar{C}_{p,s}^\circ(T)$, $\bar{H}_s^\circ(T)$ und $\bar{S}_s^\circ(T)$ zurück gibt für die Spezies $s \in \{\text{O}, \text{O}_2, \text{H}, \text{OH}, \text{H}_2, \text{HO}_2, \text{H}_2\text{O}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{N}_2\}$.

Hinweis: Solche Polynome wertet man typischerweise über das Horner Schema aus, siehe <ftp://ftp.technion.ac.il/pub/supported/aetdd/thermodynamics/Introduction.pdf>

Aufgabe 5.2 (Gleichgewichtskonstante)

Als nächstes wollen wir die Rückwärts-Ratenkoeffizienten $k_{r,i}$ berechnen. Implementieren Sie in die gegebenen MATLAB-Funktionen die Berechnung von $k_{r,i}$ aus $k_{f,i}$ und den Gleichgewichtskonstanten.

Simulieren Sie dann das Modell für verschiedene Parameterwerte.
