

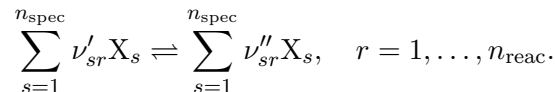
### Übungen 6 zur Modellierung und Simulation IV (SS 2013)

[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 6.1 (Gleichgewichtskonstante)

Wir betrachten die allgemeinen Elementarreaktionen



Für die Simulation einer Wasserstoff-Verbrennung mit einem Teil der Reaktionen des GRI-Mech 3.0 Mechanismus benötigen wir noch folgende Formeln für die Rückwärts-Ratenkoeffizienten  $k_{r,r}$  der  $r$ -ten Reaktion:

$$\frac{k_{f,r}}{k_{r,r}} = K_{c,r}.$$

Die Gleichgewichtskonstante in Konzentrationen:

$$K_{c,r} = K_{p,r} \left( \frac{p^\circ}{RT} \right)^{\nu_r}$$

mit

$$\nu_r := \sum_{s=1}^{n_{\text{spec}}} \nu_{sr}.$$

Die Gleichgewichtskonstante in Partialdrücken:

$$K_{p,r} := \prod_{s=1}^{n_{\text{spec}}} \left( \frac{p_s}{p^\circ} \right)_e^{\nu_{sr}}.$$

Diese bekommen wir aber stattdessen aus den thermodynamischen Größen

$$K_{p,r} = \exp \left( \frac{\Delta S_{r,r}^\circ(T)}{R} - \frac{\Delta H_{r,r}^\circ(T)}{RT} \right).$$

Dabei gilt (siehe Blatt 5):

$$\Delta H_{r,r}^\circ(T) := \sum_{s=1}^{n_{\text{spec}}} \nu_{sr} \bar{H}_s^\circ(T)$$
$$\Delta S_{r,r}^\circ(T) := \sum_{s=1}^{n_{\text{spec}}} \nu_{sr} \bar{S}_s^\circ(T).$$

Implementieren Sie in die gegebenen MATLAB-Funktionen die Berechnung von  $k_{r,r}$ . Benutzen Sie dafür auch Ihre Implementierung für Aufgabe 5.1.

Simulieren Sie das Modell für verschiedene Parameterwerte.

---