



HOMREA-GUI

Kurze Anleitung

Inhaltsverzeichnis

1. Grundsätzliches zu HOMREA	3
2. Übersicht der Oberfläche	3
3. Erstellen eines neuen Projekts	4
4. Einstellen der Randbedingungen	5
5. Die Files Seite	8
6. Tabellarische Übersicht berechneter Daten in Results	9
7. Darstellung der Ergebnisse in Graph 2D	10

1.Grundsätzliches zu HOMREA

HOMREA bedeutet (**HOM**ogeneous **REA**ctor). Grundsätzlich können mit dem Programm zeitabhängige räumlich homogene Reaktionssysteme, wie eine Zündung in einem Stoßrohr, im Endgasbereich eines SI-Otto-Motors, in HCCI-Motoren oder einer schnellen Kompressionsmaschinen, berechnet werden. Es können Berechnungen von isothermen oder adiabaten Systemen ausgeführt werden.

2. Übersicht der Oberfläche

Im Folgenden werden einige für die Übung relevante Funktionen kurz erläutert.

Öffnen Sie zunächst das Programm durch einen Doppelklick. Es öffnet sich folgende Startseite:

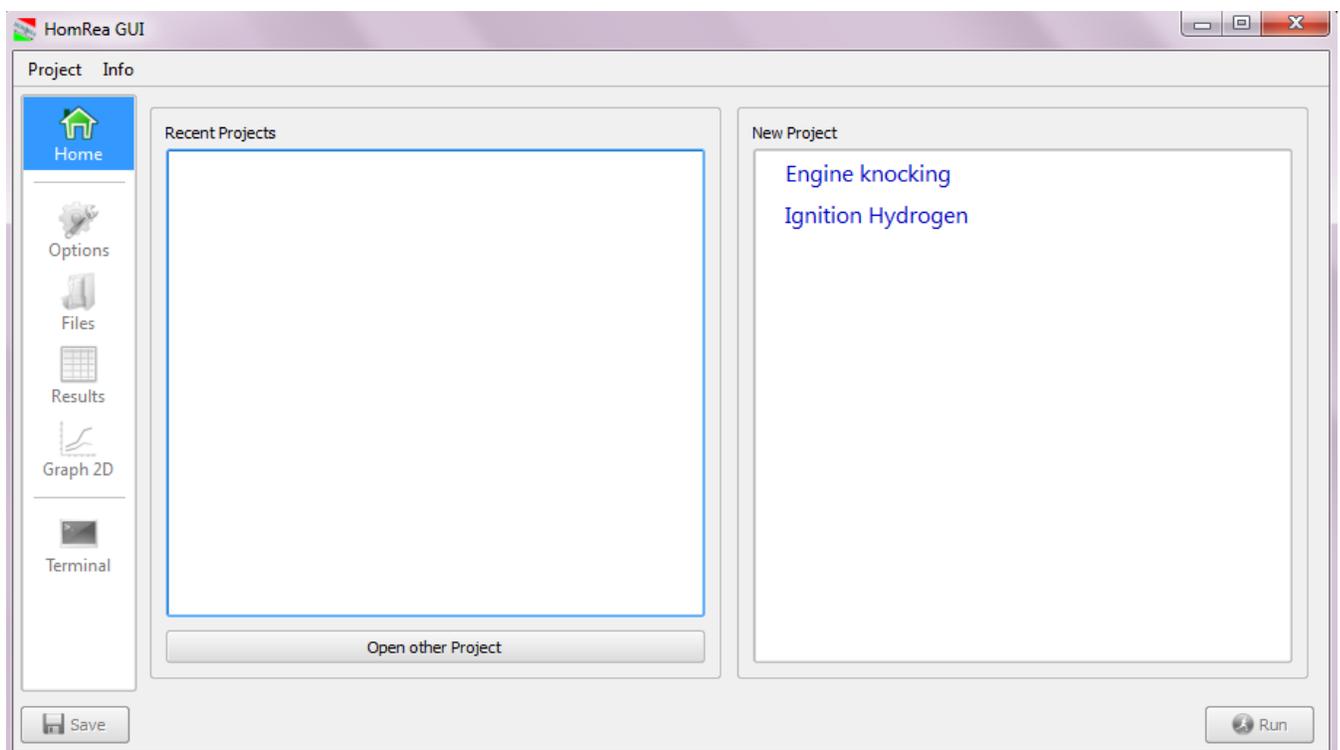


Abb.1 Startseite

Folgende Tabelle stellt eine grundsätzliche Übersicht der Oberfläche dar:

	Startseite (Home). Hier können neue Projekte („New Projects“) geöffnet werden oder kürzlich bearbeitete und gespeicherte Projekte („Recent Projects“) ausgewählt werden.
---	---

	Options. Hier können die Randbedingungen eingestellt werden.
	Files. Hier ist es möglich die Konfigurationsdateien einzusehen.
	Results Seite. Die Seite stellt eine tabellarische Übersicht der berechneten Daten bereit.
	Graph 2D ermöglicht eine graphische zweidimensionale Darstellung der Ergebnisse.
	Terminal Seite. Ausgabe der Kommandozeile.

Tabelle1: Auswahlmöglichkeiten und Übersicht der Oberfläche

3. Erstellen eines neuen Projekts

In der Übung wird die Simulation der Zündung einer Wasserstoffflamme behandelt. Öffnen Sie dazu ein neues Projekt indem Sie unter **New Project** auf **Ignition Hydrogen** klicken (siehe Abb.2).

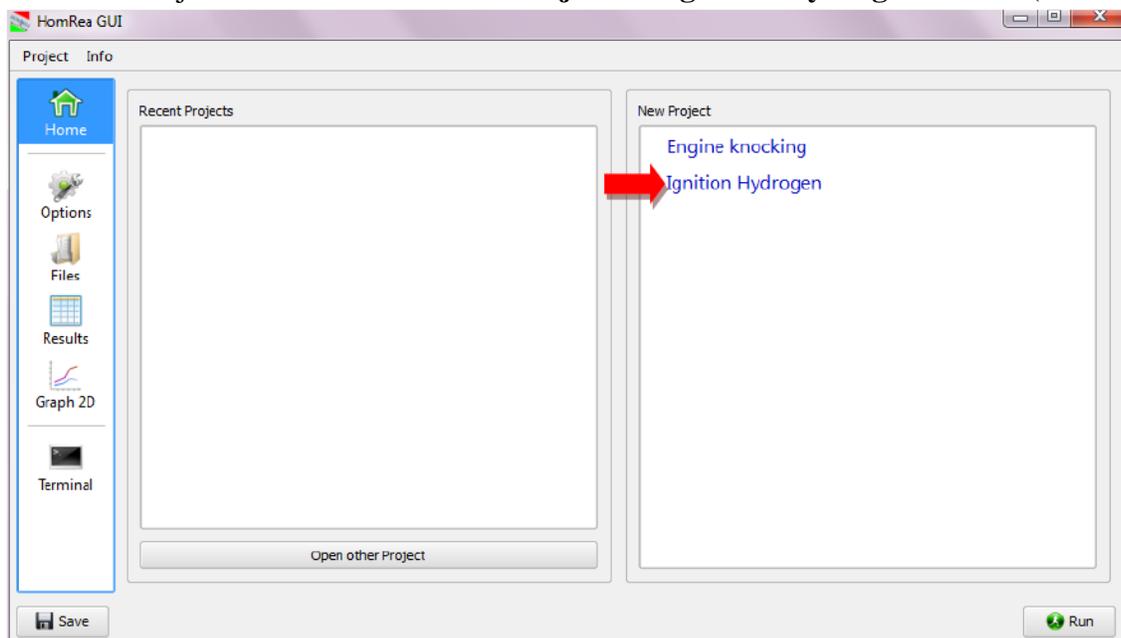


Abb.2: Startseite: Auswählen eines neuen Projekts

4.Einstellen der Randbedingungen

Es öffnet sich automatisch das Register **Options**. Hier können Randbedingungen an das zu simulierende Modell angepasst werden.

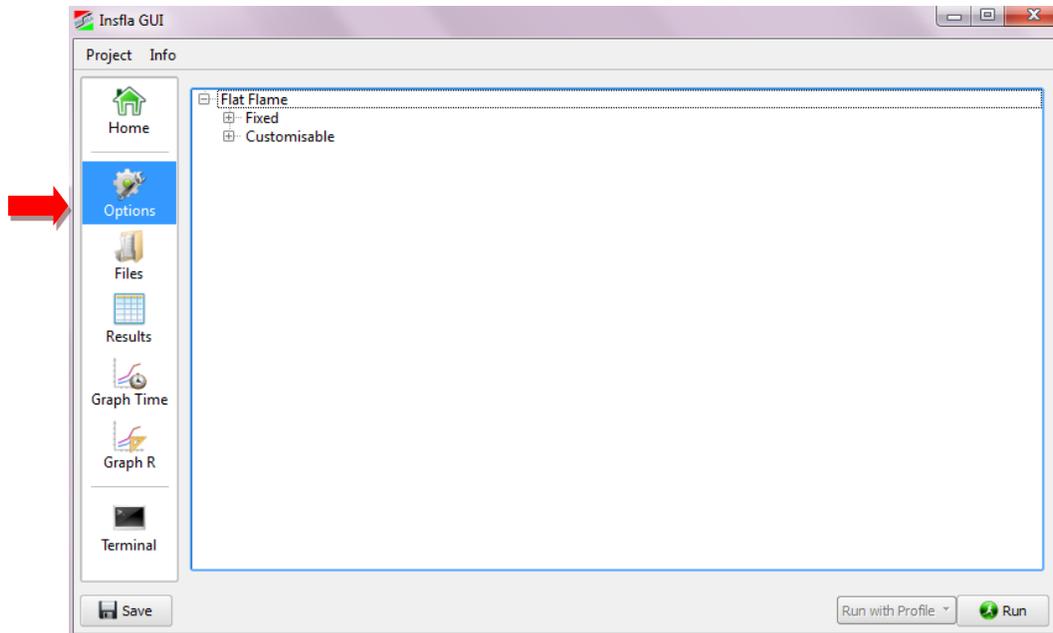


Abb.3: Options

Um eine Zündung mit bestimmten Randbedingungen und Stoffwerten zu simulieren, öffnen Sie die noch geschlossenen Fenster **Options**, **Conditions** und **Calculations** (siehe Abb.4). Hier können Werte eingegebenen und an die Randbedingungen angepasst werden.

Folgende Parameter können verändert werden:

Options:

VPRO	Wenn die Option gewählt wird, wird angenommen, dass das Volumen eine gegebene Funktion der Zeit ist. Ist dies nicht der Fall wird angenommen, dass der Druck eine gegebene Funktion der Zeit ist.
REVISM	Berechnung der Rückreaktionsrate zu jedem Zeitschritt und für jede Gastemperatur.
MOLE	Hier kann die Ausgabeeinheit der Spezies gewählt werden, zum Beispiel: Massenbruch oder Molenbruch
EXTRA	Extrapolationscode LIMEX – nicht auswählbar

Conditions:

BC_P	Eintragen des Drucks in [bar]
BC_T	Eintragen der Temperatur in [Kelvin]
BC_V	Eintragen des Volumens in [m ³]
BC_H2	Konzentration von H2 (auch möglich Molenbrüche)
BC_O2	Konzentration von O2 (auch möglich Molenbrüche)
BC_N2	Konzentration von N2 (auch möglich Molenbrüche)
BC_H2O	Konzentration von H2O (auch möglich Molenbrüche)

Calculations:

NT	Anzahl der Zeitschritte für die Ausgabe
TSTA	Zeitpunkt ab der eine Ausgabe gewünscht ist, in [s]
TEND	Endzeitpunkt der Berechnung, in [s]
STEP	Anfangs-Schrittgrößen-Annahme
RTOL	Relative Fehler-Toleranz
ATOL	Absolute Fehler-Toleranz
RTOS	Relative Fehler-Toleranz des Sensitivitätskoeffizienten
ATOS	Absolute Fehler-Toleranz des Sensitivitätskoeffizienten

Tabelle 2: Einstellmöglichkeiten unter Options

Für die Übung können alle voreingestellten Werte übernommen werden. Lediglich die Werte unter **Conditions** sollten angepasst werden. Sollte die Rechnung fehlschlagen kann dies auch an der Anzahl der Zeitschritte **NT**, unter **Calculations**, liegen. Diese sollten dann angepasst werden.

Achtung: **Concentration of...** unter **Conditions** steht hier nicht direkt für Konzentration von..., es sind immer Werte die auf die Stoffmenge bezogen sind. Dadurch ist es möglich den Molenbruch oder die Konzentration der Stoffe für die Rechnung zu verwenden und hier einzutragen.

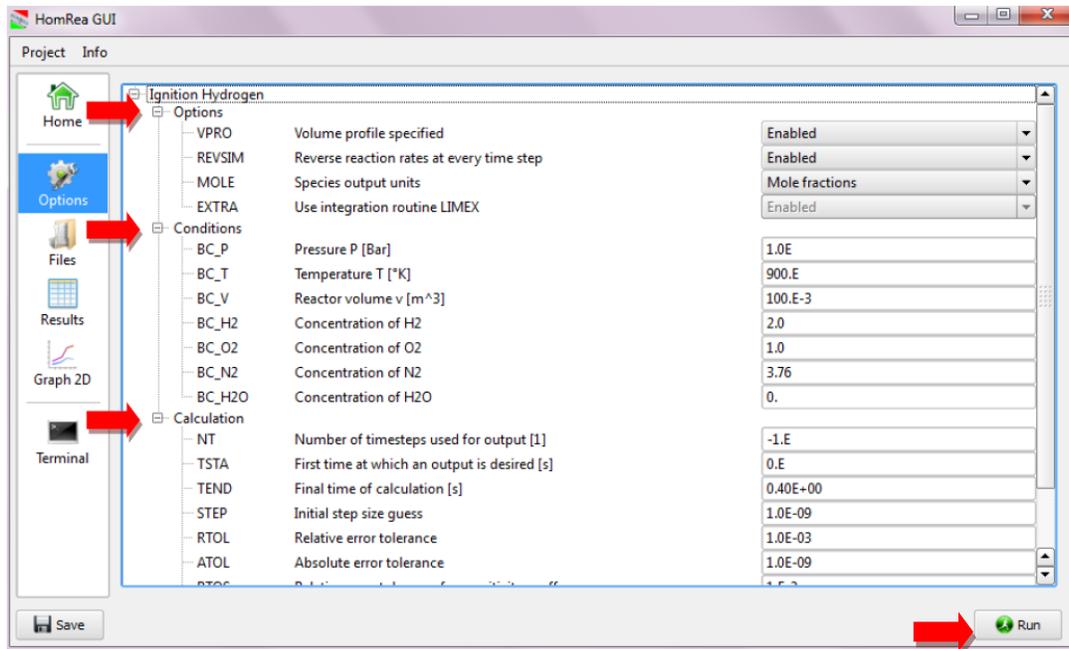


Abb.4:Options: Einstellen der Randbedingungen

Beispiel (siehe auch Abb.4):

Folgende Reaktionsgleichung sei gegeben:



Conditions (betrachtet die Anfangsbedingung und somit die linke Seite der Reaktionsgleichung)
$p = 1 \text{ bar}, T = 900 \text{ K}$
Concentration of H_2 – 2
Concentration of O_2 – 1
Concentration of N_2 – 3.762
Concentration of H_2O – 0.00

Tabelle 3: Beispielwerte

Die Simulation wird durch drücken des **Run**-Buttons gestartet (siehe Abb.4).

5. Die Files Seite

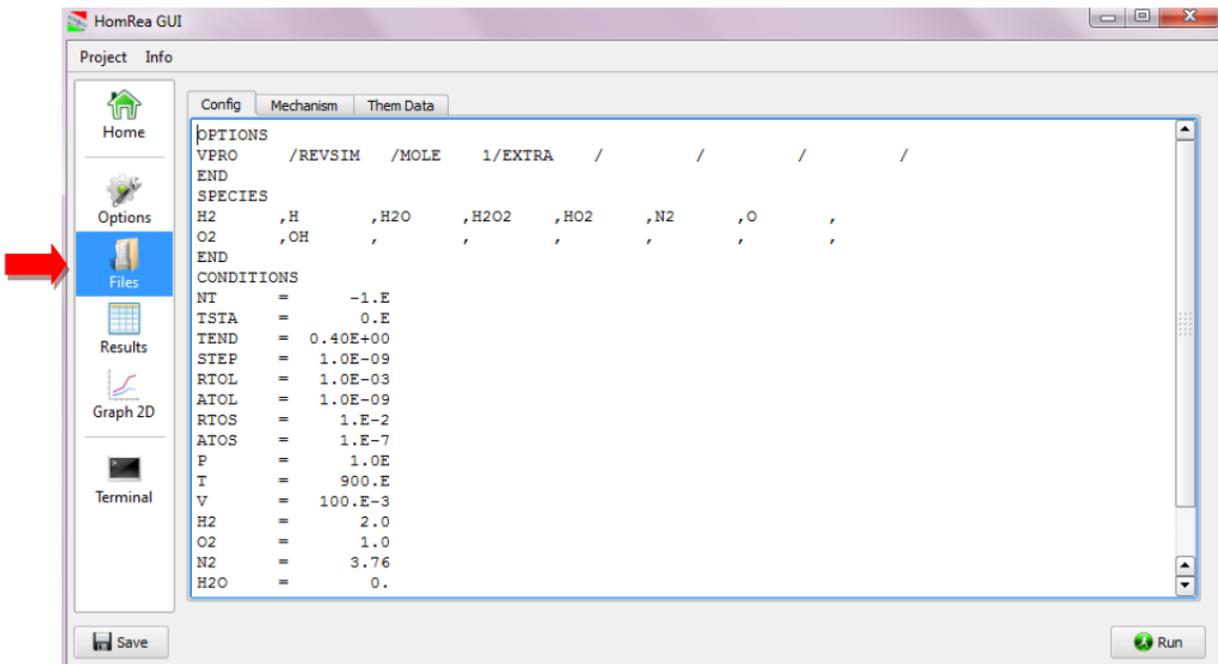


Abb.5: Files

In **Files** (siehe Abb.5) befinden sich mehrere Register unter anderem:

1. **Config:** Dieser Datensatz kontrolliert die Ausführung des Programms. Er beinhaltet alle wichtigen Daten, Randbedingungen sowie die gebildeten Spezies.
2. **Mechanism:** beinhaltet die Elementaren Reaktionsmechanismen
3. **Them Data:** beinhaltet polynomische Anpassungen der Wärmekapazität, Enthalpie und Entropie.

Achtung: Manuelle Bearbeitung ist möglich, aber nur für Experten gedacht!

6.Tabellarische Übersicht berechneter Daten in Results

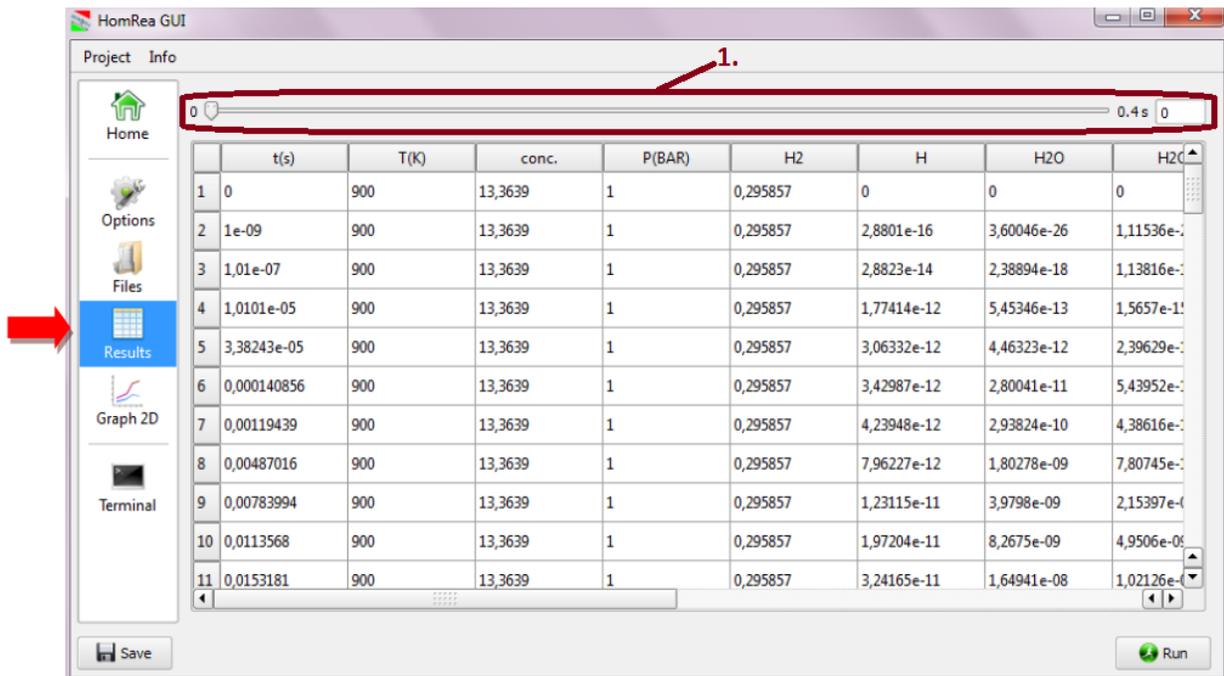


Abb.6: Tabellarische Übersicht unter Results

Die **Results** Seite stellt eine tabellarische Übersicht berechneter Daten bereit. Über die mit 1. Gekennzeichnete Zeitschiene lassen sich die Ergebnisse zu den gewünschten Zeitpunkten einfach aufzeigen (siehe Abb.6).

7.Darstellung der Ergebnisse in Graph 2D

Eine Graphik können Sie sich unter dem Register **Graph 2D** anzeigen lassen. Der Vorgang wird hier am Beispiel eines Temperatur-Zeitverlaufs näher erläutert (siehe Abb.7).

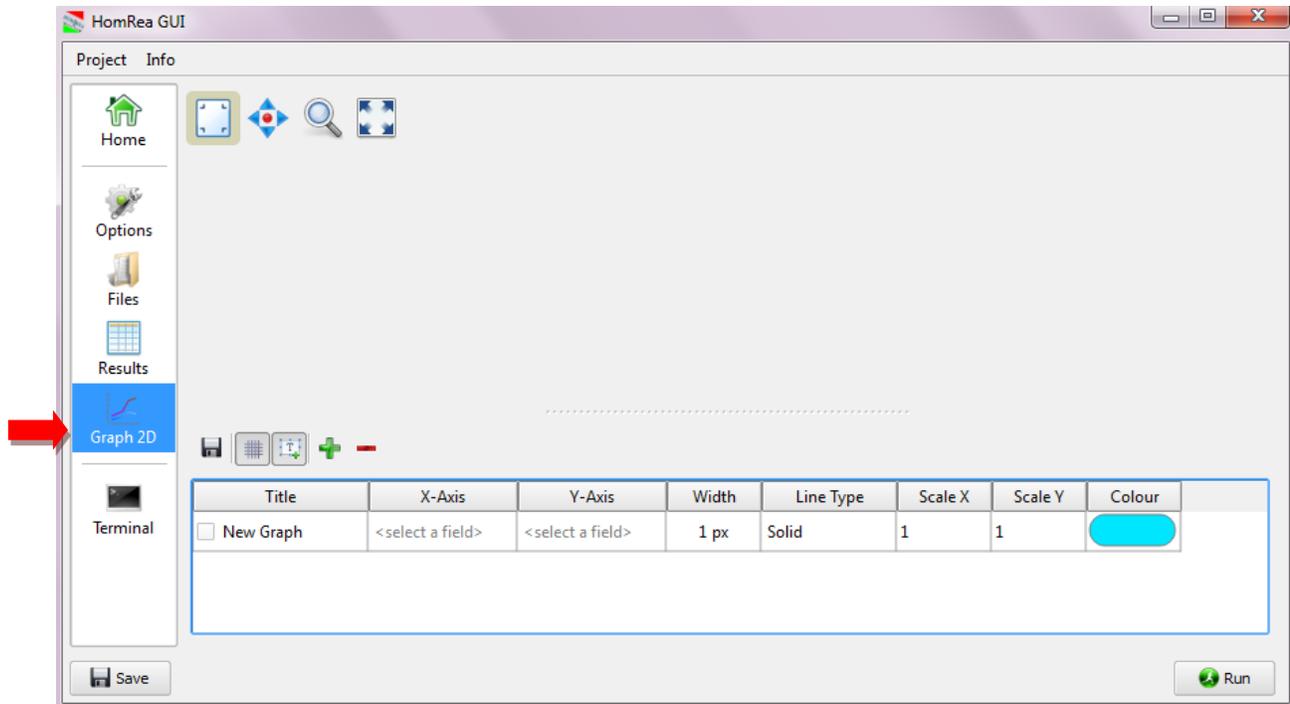


Abb.7:Graph 2D

Folgende Optionen stehen zur Verfügung werden in Tabelle 2 aufgeführt:

	Exportieren /Speichern der Graphik als Bilddatei
	Gitter anzeigen: an/aus
	Legende anzeigen: an/aus
	Kurve zum Graphen hinzufügen. Es ist möglich mehrere Kurven in einem Graphen darzustellen
	Kurvenverlauf löschen
Title	Durch Doppelklick auf das Feld lässt sich die Kurve benennen
X-/Y-Axis	Durch Doppelklick lassen sich die Parameter aus mehreren möglichen Optionen festlegen
Width	Liniendicke

Line Type	Linientyp
Scale X/Y	Skalierung. Dadurch ist es möglich zwei Funktionen unterschiedlicher Größenordnung in einer Graphik anzuzeigen
Colour	Kurvenfarbe

Tabelle 4: Verfügbare Optionen für Graph 2D

Einige weitere Funktionen zum Anpassen des Graphikfensters, finden Sie, indem Sie mit der Maus über die Graphik fahren und folgende Symbole auftauchen. Darunter:



- a) Auswahl-Zoomen
- c) Vergrößern
- b) Verfahren/Verschieben
- d) Auto Fit

Nach abgeschlossener Berechnung und setzen des Kreuzes bei **New Graph** erscheint die Graphik. Wenn Sie mehrere Kurven in einem Diagramm darstellen wollen, können Sie durch Ankreuzen entscheiden, welche Kurven angezeigt werden sollen und welche nicht.

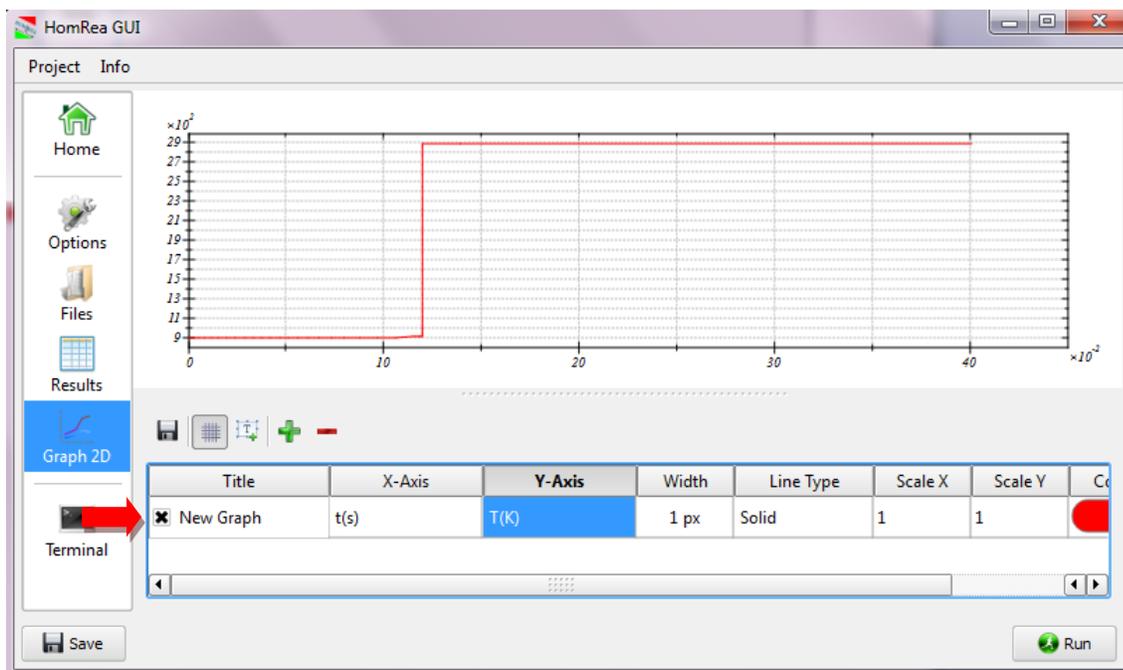


Abb.7:Graph 2D (Temperatur-Zeitverlauf)