

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.Grundsätzlicheszu 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:



and the second s	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.

 🖉 Insfla GUI) X
Project Info			
film Home	⊖-[Flat Flame ⊕-Fixed ⊕- Customisable		
Options			
J Files			
Results			
Graph Time			
Graph R			
Terminal			
Save	Run with P	rofile 🔹	Run

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_H20	Konzentration von H20 (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
Taballa 2. E	installen ä slishlysiten ynten Ontions

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.

	Ignition Hydrogen			
Home	Options			
	VPRO	Volume profile specified	Enabled	-
2005	REVSIM	Reverse reaction rates at every time step	Enabled	-
F	MOLE	Species output units	Mole fractions	-
Options	EXTRA	Use integration routine LIMEX	Enabled	
JI	Conditions			
Files	BC_P	Pressure P [Bar]	1.0E	
	BC_T	Temperature T [°K]	900.E	
	BC_V	Reactor volume v [m^3]	100.E-3	
Results	BC_H2	Concentration of H2	2.0	
	BC_02	Concentration of O2	1.0	
ier and a D	BC_N2	Concentration of N2	3.76	
raph 20	BC H2O	Concentration of H2O	0.	
	Calculation			
	- NT	Number of timesteps used for output [1]	-1.E	
erminal	TSTA	First time at which an output is desired [s]	0.E	
	TEND	Final time of calculation [s]	0.40E+00	
	STEP	Initial step size guess	1.0E-09	
	RTOL	Relative error tolerance	1.0E-03	
	ATOL	Absolute error tolerance	1.05-09	
	ATOL	Absolute enor tolerance	1.5.2	

Abb.4:Options: Einstellen der Randbedingungen

Beispiel (siehe auch Abb.4):

Folgende Reaktionsgleichung sei gegeben:

 $2 H_2 + 1 O_2 + 3.76 N_2 \longrightarrow 2 H_2O + 3.76 N_2$

Conditions (betrachtet die Anfangsbedingung und somit
die linke Seite der Reaktionsgleichung)
p=1bar , $T=900K$
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

	Config	Mechanis	m Them Data							
Home	OPTION	S								
	VPRO	/REV	SIM /MOLE	1/EX1	RA /	/		/	/	
chat.	END									
1 Store	SPECIE	5								
Options	H2	,Н	,H2O	,H2O2	, HO2	,N2	,0	,		
	02	, OH	,	,	,	,	,	,		
	END									
Files	CONDIT	IONS								
	NT	=	-1.E							
	TSTA	=	0.E							
Results	TEND	= 0.	40E+00							
	STEP	= 1	.0E-09							
1	RTOL	= 1	.0E-03							
Graph 2D	ATOL	_ 1	.0E-09							
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	ATOS	_	1.E-2							
	P	-	1.05							
	T	_	900 F							
Terminal	v	= 1	00.E-3							
	H2	= 1	2.0							
	02	=	1.0							
	N2	=	3.76							
	1100									

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!

Project Info	•					eL.			
A Home	0 🗘								— 0.4s (
		t(s)	T(K)	conc.	P(BAR)	H2	н	H2O	
1 Sec	1	0	900	13,3639	1	0,295857	0	0	0
Options	2	1e-09	900	13,3639	1	0,295857	2,8801e-16	3,60046e-26	1,1153
Files	3	1,01e-07	900	13,3639	1	0,295857	2,8823e-14	2,38894e-18	1,1381
	4	1,0101e-05	900	13,3639	1	0,295857	1,77414e-12	5,45346e-13	1,5657
Results	5	3,38243e-05	900	13,3639	1	0,295857	3,06332e-12	4,46323e-12	2,3962
1	6	0,000140856	900	13,3639	1	0,295857	3,42987e-12	2,80041e-11	5,4395
Graph 2D	7	0,00119439	900	13,3639	1	0,295857	4,23948e-12	2,93824e-10	4,3861
	8	0,00487016	900	13,3639	1	0,295857	7,96227e-12	1,80278e-09	7,8074
Terminal	9	0,00783994	900	13,3639	1	0,295857	1,23115e-11	3,9798e-09	2,1539
	10	0,0113568	900	13,3639	1	0,295857	1,97204e-11	8,2675e-09	4,9506
	11	0,0153181	900	13,3639	1	0,295857	3,24165e-11	1,64941e-08	1,0212

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).

frome									
- Sti									
Options									
U Files									
Results									
Results									
Results Graph 2D	₩ 🖽 🕂	_							
Results Graph 2D	H III +	- X-Axis	Y-Axis	Width	Line Type	Scale X	Scale Y	Colour	
Results Graph 2D	Title	X-Axis <select a="" field=""></select>	Y-Axis <select a="" field=""></select>	Width 1 px	Line Type Solid	Scale X	Scale Y	Colour	
Results Graph 2D	Title	X-Axis <select a="" field=""></select>	Y-Axis <select a="" field=""></select>	Width 1 px	Line Type Solid	Scale X	Scale Y	Colour	

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
4	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-	Durch Doppelklick lassen sich die Parameter aus mehreren möglichen Optionen
Axis	festlegen
Width	Liniendicke

Line	Linientyp			
Туре				
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
<u>ت</u> a)	ь)	c)	d)	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)