

Dipl.-Ing. Wilfried Aretz, Aachen

**Numerische Verfahren zur  
Berechnung des Energie-  
transportes in Wasserstoff/  
Luft- und Methan/Luft-  
Gemischen**

Reihe **20**: Rechnerunterstützte  
Verfahren

Nr. **211**

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Problemstellung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>4</b>
2.1	Kinetische Gastheorie und Kontinuumsmechanik . . . . .	4
2.2	Zustandsgrößen reiner Gase . . . . .	9
2.2.1	Zustandssummen der Atome und Moleküle . . . . .	10
2.2.2	Modelle der inneren Energie und der Wärmekapazität von Molekülen	13
2.3	Transportkoeffizienten nach Chapman-Enskog . . . . .	18
2.3.1	Molekularer Energietransport in Gleichgewichtsnähe . . . . .	18
2.3.2	Mehr-Temperaturen-Modell im thermischen Nichtgleichgewicht . . . .	24
2.3.3	Allgemeine Formulierungen der Transportgrößen für Gemische . . . .	28
2.4	Relaxation der inneren Freiheitsgrade . . . . .	32
2.4.1	Rotationsrelaxation . . . . .	33
2.4.2	Vibrationsrelaxation . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Eingangsgrößen der Berechnungen</b>	<b>40</b>
3.1	Experimentell abgesicherte Daten . . . . .	40
3.1.1	Zustandsgrößen, Wärmeleitfähigkeiten, Relaxationszeiten . . . . .	41
3.2	Bestimmung konsistenter Potentialparameter . . . . .	47
3.2.1	Potentialfunktionen der intermolekularen Wechselwirkung . . . . .	47
3.2.2	Methoden zur Bestimmung der Kollisionsparameter . . . . .	49
3.2.3	Parameter der inelastischen Kollisionen . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Wärmeleitung und Wärmeübergang</b>	<b>63</b>
4.1	Fourier'sche Wärmeleitfähigkeit im chemischen Gleichgewicht . . . . .	63
4.1.1	Bereitstellung der Eingangsgrößen . . . . .	64
4.1.2	Untersuchungen der exakten Gleichungssysteme . . . . .	66
4.1.3	Empirische Näherungen der Wärmeleitfähigkeit . . . . .	74
4.2	Wärmeleitung reagierender Gemische im chemischen Gleichgewicht . . . . .	84
4.2.1	Wärmeleitung durch Diffusionsvorgänge in reagierenden Gemischen .	84
4.2.2	Wärmeleitung in dissoziierenden Gasen bei chemischem Gleichgewicht	88
4.2.3	Wärmeleitung in Brennstoff/Oxidator-Gemischen bei chemischem Gleichgewicht . . . . .	94
4.3	Wärmeleitung und Wärmeübergang in Nichtgleichgewichtsströmungen . . . .	104
4.3.1	Navier-Stokes-Code CELHYO . . . . .	104
4.3.2	Wärmeübergang in einer laminaren Hochenthalpie-Staupunktströmung	106
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>111</b>

<b>I</b>	<b>Anhang</b>	<b>115</b>
I.1	Gleichungen der Transportgrößen . . . . .	115
I.2	Stoffdaten . . . . .	122
I.3	Potentialdaten . . . . .	126
<b>II</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>133</b>