

Thomas Hirschler, Graz

Implosionen und Explosionen in chemisch reagierenden Medien

Reihe **3**: Verfahrenstechnik

Nr. **475**

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	III
Inhaltsverzeichnis	V
Einleitung	1
1 Grundgleichungen	3
1.1 Das generalisierte Erhaltungsgesetz (in Eulerscher Betrachtungsweise)	3
1.2 Grundgleichungen in konservativen Variablen	4
1.2.1 Euler-Gleichungen in konservativen Variablen	4
1.2.2 Euler-Gleichungen für die quasi-eindimensionale Strömung . .	7
1.2.3 Euler-Gleichungen für eine zweidimensionale reaktive Strömung	8
1.3 Grundgleichungen in primitiven Variablen	9
1.3.1 Euler-Gleichungen in primitiven Variablen	9
1.3.2 Euler-Gleichungen für quasi-eindimensionale Strömung	12
1.4 Grundgleichungen in charakteristischen Variablen	12
1.4.1 Euler-Gleichungen in charakteristischen Variablen	12
1.4.2 Euler-Gleichungen für die quasi-eindimensionale Strömung . .	16
1.5 Rankine-Hugoniot-Beziehungen	18
2 Gasmodell	20
2.1 Mikroskopische Beschreibung von Gasen	20
2.1.1 Die Schrödinger-Gleichung	20
2.1.2 Translationsenergie	25
2.1.3 Rotationsenergie	28
2.1.4 Schwingungsenergie	35
2.1.5 Die Energie der Elektronen	38
2.2 Makroskopische Beschreibung von Gasen	41
2.2.1 Die Boltzmann-Verteilung	41
2.2.2 Die Verteilungsfunktion	46
2.2.3 Die Verteilungsfunktion für die Translationsenergie	47
2.2.4 Die Verteilungsfunktion für die Rotationsenergie	48
2.2.5 Die Verteilungsfunktion der Schwingungsenergie	49
2.2.6 Die Verteilungsfunktion für die Elektronenenergie	49
2.3 Die innere Energie von idealen Gasen	50

2.3.1	Die innere Energie eines idealen homogenen Gases	50
2.3.2	Die innere Energie eines idealen Gasgemisches	54
3	Reaktionsmodelle	59
3.1	Gleichgewichtsmodell	59
3.1.1	Das allgemeine Massenwirkungsgesetz	59
3.1.2	Näherungsgleichungen für das Massenwirkungsgesetz	63
3.2	Nichtgleichgewichtsmodell	66
3.2.1	Chemische Ratengleichungen	66
3.2.2	Die Geschwindigkeitskoeffizienten	68
4	Die konvergierende sphärische Stoßwelle	71
4.1	Die Guderleysche Ähnlichkeitslösung	74
4.1.1	Problembeschreibung	74
4.1.2	Mathematisches Modell	75
4.1.3	Ergebnisse	83
4.2	Die Ausbreitung einer sphärisch konvergierenden Stoßwelle in Stickstoff als kalorisch ideales Gas (Kolbenlösung)	90
4.2.1	Problembeschreibung	90
4.2.2	Mathematisches Modell	91
4.2.3	Ergebnisse	96
4.3	Die Ausbreitung einer sphärisch konvergierenden Stoßwelle in Stickstoff als Gemisch chemisch reagierender idealer Gase (Kolbenlösung)	108
4.3.1	Problembeschreibung	108
4.3.2	Mathematisches Modell	110
4.3.3	Ergebnisse	118
5	Das sphärische Riemann-Problem	129
5.1	Problembeschreibung	129
5.2	Mathematisches Modell	130
5.3	Ergebnisse	136
6	Explosion eines Druckgefäßes in einem Raum	149
6.1	Problembeschreibung	149
6.2	Mathematisches Modell	150
6.3	Ergebnisse	153

7 Numerische Ausführung	179
7.1 Das TVD-Schema	179
7.2 Anwendung auf ein eindimensionales System von Erhaltungssätzen . .	182
7.3 Anwendung des TVD-Schemas auf ein zweidimensionales System von Erhaltungssätzen	187
7.4 Integration der Quellterme	189
Appendix	195
Literaturverzeichnis	197