Teilprojekt Nr.: B5
Leiter: Univ.–Prof. Dr.–Ing. J. Ballmann, Univ.–Prof. Dr.–sc.math. R. Jeltsch

Berechnung hypersonischer Staupunktströmungen bei hohen Temperaturen unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen

S. Müller[1], A. Klomfass[2], J. Ballmann[2], R. Jeltsch[1]
[1] **Institut für Geometrie und Praktische Mathematik**
[2] **Lehr- und Forschungsgebiet für Mechanik**

1. Zusammenfassung

Das Teilprojekt B5 befaßte sich mit der numerischen Simulation von ebenen und rotationssymmetrischen hypersonischen Staupunktströmungen um stumpfe Körper. Als physikalisches Modell wurden zunächst die Navier-Stokes-Gleichungen mit chemischem Nichtgleichgewicht angenommen. Dieses Modell wurde bis zum Abschluß der Arbeiten [4] um das Vibrationsnichtgleichgewicht erweitert. Dadurch erstreckt sich der Bereich der zu untersuchenden Strömungen jetzt auf Anströmbedingungen, wie sie in Flughöhen unterhalb 80 km bei Geschwindigkeiten bis zu 8000 m/s auftreten.

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeiten in der zweiten Antragsphase lag auf der Implementierung eines realistischen Modells für die Transportkoeffizienten. Es wurden verschiedene Modelle getestet, um zu untersuchen, inwieweit Vereinfachungen ohne wesentliche qualitative und quantitative Einbußen vorgenommen werden können (vgl. [15], [16]).

Zur numerischen Lösung der strömungsmechanischen Bilanzgleichungen wird ein explizites Shock-Capturing-Verfahren verwendet, das auf einem Finite-Volumen-Ansatz basiert. Dazu wurde ein 1D-ENO-Verfahren mittels Dimensionssplitting auf zwei Raumdimensionen erweitert (vgl. [21], [22]).

Zur numerischen und experimentellen Validierung werden drei unterschiedliche Testsituationen betrachtet. Dabei handelt es sich um Strömungen um den RAM-C II Flugkörper, eine Kugel mit Radius 2,54 cm und die ELECTRE-Konfiguration (vgl. [1], [31], [3]).

[4] Das Teilprojekt wurde Ende 1993 abgeschlossen

2. Einleitung

Untersucht wird ein Gasgemisch aus mehreren Komponenten, das als Kontinuum aufgefaßt wird. Es wird berücksichtigt, daß die charakteristischen Relaxationszeiten der Vibration und der chemischen Reaktionen in der Größenordnung der charakteristischen Zeit der Strömung liegen können. Somit müssen chemisches und thermisches Nichtgleichgewicht modelliert werden. Das zugrundeliegende physikalische Modell basiert auf den Bilanzgleichungen für die Partialdichten der einzelnen Komponenten des Gasgemisches, den Impuls, die totale Energie sowie die Vibrationsenergien. Für jede Komponente des Gasgemischs gilt eine Komponentengleichung

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho_\alpha \underset{\sim}{v}\right) + \operatorname{div} \underset{\sim}{j}_\alpha = \omega_\alpha . \tag{1}$$

Hier bezeichnet ω_α die chemische Produktionsrate und $\underset{\sim}{j}_\alpha$ den Diffusionsfluß der Komponente. Für die Impulsgleichung erhält man bei Vernachlässigung der Fernkräfte

$$\frac{\partial \left(\rho \underset{\sim}{v}\right)}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho \underset{\sim}{v} \circ \underset{\sim}{v} + \underset{\approx}{P}\right) = \underset{\sim}{0}, \tag{2}$$

wobei $\underset{\approx}{P}$ den Spannungstensor bezeichnet. In der Energiegleichung werden Strahlungseffekte nicht berücksichtigt; somit lautet sie für das Gemisch

$$\frac{\partial \left(\rho e^{tot}\right)}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho \underset{\sim}{v}\, e^{tot}\right) + \operatorname{div}\left(\underset{\approx}{P}\underset{\sim}{v} + \underset{\sim}{q}\right) = 0 \; . \tag{3}$$

Darin bezeichnen $\underset{\sim}{q}$ den Wärmefluß und e^{tot} die spezifische Totalenergie

$$\rho e^{tot} = \sum_\alpha \rho_\alpha e_\alpha + \frac{1}{2}\, \rho\, \underset{\sim}{v}^2 \; . \tag{4}$$

Zur Beschreibung der Vibrationsrelaxation werden zusätzliche Bilanzgleichungen für die Vibrationsenergien e_α^{vib} der molekularen Komponenten benötigt

$$\frac{\partial \rho_\alpha e_\alpha^{vib}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho_\alpha e_\alpha^{vib} \underset{\sim}{v}\right) + \operatorname{div}\left(e_\alpha^{vib} \underset{\sim}{J}_\alpha + \underset{\sim}{q}_\alpha^{vib}\right) = \Omega_\alpha^{vib} \; . \tag{5}$$

Hier bezeichnen Ω_α^{vib} den volumenspezifischen Vibrationsenergietransfer und $\underset{\sim}{q}_\alpha^{vib}$ den vibratorischen Anteil am Wärmefluß .

Durch (1), (2), (3) und (5) ist ein System von partiellen Differentialgleichungen gegeben, welches durch konstitutive Gleichungen für die thermodynamischen Zustandsgrößen und die Transportgrößen vervollständigt werden muß.

3. Angewandte Methoden

3.1 Gleichungssystem

Für die Darstellung des numerischen Verfahrens ist folgende Formulierung des Gleichungssystems zweckmäßig:

$$\mathbf{u}_{,t} \quad + \quad \operatorname{div}\left(\mathbf{F}_1^I(\mathbf{u}), \ldots, \mathbf{F}_d^I(\mathbf{u})\right)$$

$$ - \operatorname{div}\Big(\mathbf{F}_1^V(\mathbf{u},\mathbf{u}_{,x_1},\dots,\mathbf{u}_{,x_d}),\dots,\mathbf{F}_d^V(\mathbf{u},\mathbf{u}_{,x_1},\dots,\mathbf{u}_{,x_d})\Big) = \mathbf{S}(\mathbf{u}). \tag{6}$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} &= \Big(\rho_1,\dots,\rho_N,\rho\,\underset{\sim}{v},\rho\,e^{tot},\rho_1 e_1^{vib},\dots,\rho_M e_M^{vib}\Big)\\
\mathbf{S} &= \Big(\omega_1,\dots,\omega_N,\underset{\sim}{0},0,\Omega_1^{vib},\dots,\Omega_M^{vib}\Big)\\
\mathbf{F}_i^I &= \Big(\rho_1\,v_i,\dots,\rho_N\,v_i,\rho\,\underset{\sim}{v}\,v_i+p\,\underset{\sim}{e}_i,\rho\,v_i\,h^{tot},\rho_1 e_1^{vib}\,v_i,\dots,\rho_M e_M^{vib}\,v_i\Big)\\
\mathbf{F}_i^V &= \Big(-j_{1,i},\dots,-j_{N,i},(\underset{\approx}{\tau})^i,(\underset{\approx}{\tau}\,\underset{\sim}{v})_i-q_i,-e_1^{vib}j_1-q_{1,i}^{vib},\dots,-e_M^{vib}j_M-q_{M,i}^{vib}\Big)
\end{aligned}$$

Dabei ist N die Anzahl der Komponenten und M die Anzahl der Moleküle. Die Komponenten seien im folgenden so numeriert, daß mit $\alpha = 1,\dots,M$ die Moleküle und mit $\alpha = M+1,\dots,K$ die Atome gekennzeichnet sind. Die Dimension des Ortsraumes ist durch d gegeben. $(\underset{\approx}{\tau})^i$ kennzeichnet die i-te Spalte von $\underset{\approx}{\tau}$ und $(\underset{\approx}{\tau}\,\underset{\sim}{v})_i$ die i-te Komponente von $\underset{\approx}{\tau}\,\underset{\sim}{v}$. Die Bilanzgleichungenen (6) sind hier für den allgemeinen räumlichen d-dimensionalen Fall dargestellt. Sie wurden jedoch nur für $d = 2$ implementiert, wobei auch rotationssymmetrische Strömungen einbezogen sind. Interpretiert man x_1, x_2 im ebenen Fall als kartesische Koordinaten und im drehsymmetrischen Fall als Zylinderkoordinaten, dann erhält man aus (6), vgl. [24]

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_{,t} \;&+\; \operatorname{div}\Big(\mathbf{F}_1^I(\mathbf{u}),\mathbf{F}_2^I(\mathbf{u})\Big) - \operatorname{div}\Big(\mathbf{F}_1^V(\mathbf{u},\mathbf{u}_{,x_1},\mathbf{u}_{,x_2}),\mathbf{F}_2^V(\mathbf{u},\mathbf{u}_{,x_1},\mathbf{u}_{,x_2})\Big)\\
&=\; \mathbf{S}(\mathbf{u}) - \sigma\mathbf{R}(\mathbf{u},\mathbf{u}_{,x_1},\mathbf{u}_{,x_2})/x_2\;,
\end{aligned} \tag{7}$$

wobei R ein nur im drehsymmetrischen Fall auftretender Quellterm ist, d.h.

$$\sigma = \begin{cases} 1, & \text{rotationssymmetrische Strömung} \\ 0, & \text{ebene Strömung} \end{cases}\quad .$$

3.2 Berechnung der molekularen Flüsse

Zur Schließung des Gleichungssystems (6) müssen der Spannungstensor und die Diffusions- und Wärmeflüsse in Abhängigkeit der Geschwindigkeits- und Zustandsgrößen dargestellt werden. Einen Ansatz hierfür liefert die kinetische Theorie für Gemische verdünnter (thermisch perfekter) Gase. Im Rahmen dieser Theorie können bei kleinen Abweichungen vom Translationsgleichgewicht lineare Beziehungen zwischen den molekularen Flüssen und den räumlichen Gradienten der Geschwindigkeits- und Zustandsgrößen abgeleitet werden [30], [13], [5]. Wie in [30] diskutiert wird, liefern diese jedoch bestenfalls eine qualitativ korrekte Beschreibung der inneren Struktur von starken Stoßwellen (Ma $\gg$ 1). Die Anwendung ist daher auf Strömungsprobleme begrenzt, bei denen die Dicke solcher Stoßwellen klein gegenüber den Abmessungen des Strömungsfeldes ist.

In den Diffusionsflüssen werden nur die Anteile berücksichtigt, die proportional zu den Konzentrations- und Druckgradienten sind ([13], S.516). Die zum Temperaturgradienten proportionalen Anteile (*Soret-Effekt*) werden als Effekt geringerer Größenordnung vernachlässigt:

$$\underset{\sim}{j}_\alpha = \rho \sum_\beta \frac{M_\beta}{M_\alpha} D_{\alpha\beta} \underset{\sim}{d}_\beta \quad , \quad \underset{\sim}{d}_\beta = \nabla y_\beta + (y_\beta - x_\beta) \frac{1}{p} \nabla p \; . \tag{8}$$

Hier bezeichnen x_α und y_α die Massen-, beziehungsweise die Molenbrüche der Komponenten. Während ein Konzentrationsgradient stets eine Homogenisierung des Gemisches bewirkt, verursachen die übrigen Anteile eine Entmischung der Komponenten. Hierbei führt die Druckdiffusion zu einer Konzentration der schweren (leichten) Teilchen in Gebieten hohen (niedrigen) Drucks. Das Fick'sche Gesetz ist mit einem einheitlichen Diffusionskoeffizienten D und wegen der Vernachlässigung der Druckdiffusion eine Approximation von (8).

Der Spannungstensor setzt sich aus einem diagonalen Anteil des statischen Drucks, dem Schubspannungstensor und dem diagonalen Tensor der Volumenviskosität zusammen ([13], S.521):

$$\underset{\approx}{P} = p \underset{\approx}{E} - \underset{\approx}{\tau} - \underset{\approx}{\tau}_b \; , \tag{9}$$

$$p = \frac{2}{3} \sum_\alpha \rho_\alpha e_\alpha^{tr} \quad , \quad \underset{\approx}{\tau} = \eta \left(\nabla \underset{\sim}{V} + (\nabla \underset{\sim}{V})^T \right) \quad , \quad \underset{\approx}{\tau}_b = (-\eta \frac{2}{3} + \eta_b)(\mathrm{div}\, \underset{\sim}{V}) \underset{\approx}{E} \; . \tag{10}$$

Der erste Anteil des Volumenviskositätstensors $\underset{\approx}{\tau}_b$ resultiert aus der Kompressibilität des Gases, während der zweite Anteil auf den Energietransfer zwischen Translations- und inneren Freiheitsgraden zurückzuführen ist ([13] S.503, [30] S.407). Hier wird der Relaxationsprozeß explizit durch entsprechende Bilanzgleichungen (5) berücksichtigt oder lokales Gleichgewicht angenommen, so daß dieser Anteil entfällt.

Der Wärmeleitungsvektor besteht aus einem Anteil, der proportional zum Gradienten der Translationstemperatur ist, und weiteren Anteilen, die aus der Diffusion und den internen Freiheitsgraden resultieren ([13] S.522):

$$\underset{\sim}{q} = -K^{tr} \nabla T^{tr} + \sum_\alpha \underset{\sim}{j}_\alpha h_\alpha + \sum_\alpha \sum_{m \neq tr} \underset{\sim}{q}_\alpha^m \; . \tag{11}$$

Der mit der Thermodiffusion einhergehende Anteil (*Dufour-Effekt*) wurde hier vernachlässigt. Die Anteile der internen Freiheitsgrade werden mit der verallgemeinerten Eucken-Relation nach Hirschfelder dargestellt [12]:

$$\underset{\sim}{q}^m_\alpha = -K^m_\alpha \nabla T^m_\alpha \ . \tag{12}$$

3.3 Berechnung der Transportkoeffizienten

Zur Berechnung der Transportkoeffizienten η, $D_{\alpha\beta}$, $K^{(tr)}$ steht im wesentlichen nur die kinetische Theorie einatomiger Gase zur Verfügung. Die Koeffizienten K^m_α der Wärmeleitung werden mit der bereits zitierten Eucken-Relation berechnet.

Die erfolgreiche Anwendung der Theorie einatomiger Gase auf Gase mit internen Freiheitsgraden beruht zum Teil auf der Tatsache, daß die verwendeten Kollisionsintegrale experimentell ermittelt werden und dadurch inelastische Kollisionen und Abweichungen der Potentiale von der Kugelsymmetrie indirekt berücksichtigt werden. Die Kollisionsintegrale werden hier aus den von Metz [20] erstellten Kurvenanpassungen berechnet, die in der Form

$$\Omega^{(l,k)}_{\alpha\alpha} = \exp(\, a \ln T^{(tr)} + b\sqrt{\ln T^{(tr)}} + c\,) \tag{13}$$

vorliegen. Für ein reines Gas ergeben sich die Koeffizienten der Viskosität und des translatorischen Anteils der Wärmeleitung aus ([8] S.16):

$$\eta_\alpha = 8,44106 \cdot 10^{-5} \frac{\sqrt{M_\alpha T^{tr}}}{\Omega^{(2,2)}_{\alpha\alpha}(T^{tr})} \quad , \quad K^{tr}_\alpha = \frac{15}{4}\eta_\alpha R_\alpha \ . \tag{14}$$

Für ein binäres Gemisch kann der Diffusionskoeffizient wie folgt berechnet werden ([8] S.25):

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta} = \frac{8,4186 \cdot 10^{-4}}{p\, \Omega^{(1,1)}_{\alpha\beta}(T^{tr})} \sqrt{(T^{tr})^3 \frac{M_\alpha + M_\beta}{2 M_\alpha M_\beta}} \ . \tag{15}$$

Für die Transportkoeffzienten in Mehrkomponentengemischen liefert die Theorie keine geschlossenen Ausdrücke ([13] S.478), deren Auswertung einen zu großen numerischen Aufwand im Rahmen einer Strömungsberechnung erfordern würde. Es muß deshalb auf Approximationen zurückgegriffen werden. In [20] wurde gezeigt, daß die Mischungsregeln für 5-Komponenten Luftgemische eine ausgezeichnete Approximation der exakten Beziehungen liefern. In einer eigenen Studie [16] wurden verschiedene Alternativen miteinander verglichen und der Einfluß auf den Staupunktwärmestrom in Hyperschallströmungen untersucht. Die wesentlichen Ergebnisse dieser Studie sind in Kapitel 4. zusammengefaßt. Im folgenden soll der Ansatz mit Mischungsregeln kurz dargestellt werden.

Für die Gemischviskosität lautet die Mischungsregel von Herning und Zipperer [33]:

$$\eta = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\eta_\alpha y_\alpha}{\sum\limits_{\beta=1}^{N} y_\beta \phi_{\alpha\beta}} \quad , \quad \phi_{\alpha\beta} = (M_\beta / M_\alpha)^{1/2} . \tag{16}$$

Eine analoge Formel kann zur Berechnung des translatorischen Anteils der Wärmeleitung verwendet werden. Die Mehrkomponenten-Diffusionskoeffizienten werden nach der Mischungsregel von Obermeier und Schaber ermittelt [26]:

$$D_{\alpha\beta} = \frac{y_\alpha}{\frac{y_\beta}{\mathcal{D}_{\alpha\beta}} \left(\frac{\mathcal{D}_{\alpha\alpha}}{\mathcal{D}_{\beta\beta}}\right)^{1/2} + \sum\limits_{\delta\neq\beta} \frac{y_\delta}{\mathcal{D}_{\beta\delta}}} + \frac{(\overline{M} - M_\alpha y_\alpha)/M_\beta}{\frac{y_\alpha}{\mathcal{D}_{\alpha\beta}} \left(\frac{\mathcal{D}_{\beta\beta}}{\mathcal{D}_{\alpha\alpha}}\right)^{1/2} + \sum\limits_{\delta\neq\alpha} \frac{y_\delta}{\mathcal{D}_{\alpha\delta}}} \quad , \quad \overline{M} = \sum_\alpha M_\alpha y_\alpha . \tag{17}$$

Der Wärmeleitungskoeffizient der internen Freiheitsgrade ergibt sich nach der Eucken-Relation als Funktion der spezifischen Wärmen und eines effektiven Diffusionskoeffizienten [12]:

$$K_\alpha^m = c_{v\alpha}^m x_\alpha \rho \mathcal{D}_\alpha \quad , \quad \mathcal{D}_\alpha = \left(\sum_\beta \frac{y_\beta}{\mathcal{D}_{\alpha\beta}}\right)^{-1} . \tag{18}$$

3.4 Thermodynamische Größen

Zur Vervollständigung der Bilanzgleichungen müssen Beziehungen für die volumenspezifische innere Energie, die chemischen Produktionsraten und die Energietransferraten angegeben werden. Diese Größen können als Mittelwerte teilchenspezifischer Größen ausgedrückt werden.

Grundlage des thermodynamischen Modells ist ein vereinfachtes, quantenmechanisches Teilchenmodell. Dieses berücksichtigt translatorische, rotatorische, vibratorische und elektronische Freiheitsgrade. Vereinfachend wird jedoch angenommen, daß i) die Freiheitsgrade unabhängig voneinander sind, ii) Trägheitsmoment und Eigenfrequenz der Moleküle konstant sind (starre Rotation, harmonische Vibration) und iii) die maximale Vibrationsenergie der Dissoziationsenergie des betreffenden Moleküls entspricht. Weiterhin wird ein verdünntes (thermisch perfektes) Gas vorausgesetzt, dessen intermolekulare potentielle Energie im zeitlichen Mittel vernachlässigbar ist. Die volumenspezifische innere Energie des Gases kann dann in folgender Form dargestellt werden:

$$\rho e = \sum_{\alpha=1}^{N} \left\{ \rho_\alpha e_\alpha^{(tr)} + \rho_\alpha e_\alpha^{(el)} + \rho_\alpha e_\alpha^{(rot)} + \rho_\alpha e_\alpha^{(vib)} + \rho_\alpha e_\alpha^{(0)} \right\} \tag{19}$$

Die Verteilung der Energie auf die Teilchen und ihre Freiheitgrade entspricht im thermodynamischen Gleichgewicht einer Boltzmannverteilung [30]. Sie ist durch genau einen Verteilungsparameter – die Gleichgewichtstemperatur – gekennzeichnet. Bei der Modellierung des Nichtgleichgewichts wird angenommen, daß die jeweiligen Verteilungen der Energien innerhalb der einzelnen Freiheitsgrade ebenfalls Boltzmannverteilungen sind, die jedoch unabhängige Temperaturen T_α^m haben können. Hier werden Freiheitsgrade mit gleicher Temperatur zusammengefaßt. Dabei wird für die Translations- und Rotationsfreiheitsgrade sowie die elektronischen Freiheitsgrade der atomaren Komponenten eine gemeinsame Temperatur $T^{(tr)}$ angenommen, während für die vibratorischen und elektronischen Freiheitsgrade der molekularen Komponenten unabhängige Temperaturen $T_{N2}^{(vib)}, T_{O2}^{(vib)}, T_{NO}^{(vib)}$ eingeführt werden.

Die spezifischen Energien der einzelnen Freiheitsgrade können mit den durch das Teilchenmodell gegebenen Zustandssummen als Funktionen dieser Temperaturen angegeben werden. Um eine numerisch effiziente Auswertung dieser kalorischen Zustandsgleichungen zu ermöglichen, wurden diese durch stetig differenzierbare Polynomanpassungen dargestellt [14].

Die Beschreibung der chemischen Produktionsraten und der Energietransferraten erfolgt auf der Grundlage des verallgemeinerten Massenwirkungsgesetzes. Die Netto-Produktionsraten ergeben sich als Summe aus endothermen (r') und exothermen (r'') Reaktionen:

$$\omega_\alpha^{(r)} = \omega_\alpha^{(r')} + \omega_\alpha^{(r'')} = M_\alpha \left(\nu_\alpha^{(r'')} - \nu_\alpha^{(r')}\right) \left\{ k^{(r')} \prod_\alpha (c_\alpha)^{\nu_\alpha^{(r')}} - k^{(r'')} \prod_\alpha (c_\alpha)^{\nu_\alpha^{(r'')}} \right\} . \tag{20}$$

Hier bezeichnen c_α molare Konzentrationen. Hinsichtlich des Vibrationsenergietransfers kann zwischen nichtreaktivem und reaktivem Energietransfer unterschieden werden. In der ersten Gruppe wird hier der Austausch von Vibrations- und Translationsenergie und der Energieaustausch zwischen den Vibrationsfreiheitsgraden der verschiedenen Komponenten berücksichtigt. Durch Einbeziehung des Prinzips des detaillierten Gleichgewichts [30] können diese Anteile für harmonische Molekülvibration wie folgt dargestellt werden:

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(VT)} = \rho_\alpha \frac{1}{\tau_{\alpha\beta}^{(VT)}} \left\{ e_\alpha^{(vib)}(T^{(tr)}) - e_\alpha^{(vib)} \right\} , \tag{21}$$

$$\begin{aligned} \Omega_{\alpha\beta}^{(VV)} = {} & \rho_\alpha \frac{1}{\tau_{\alpha\beta}^{(VV)}} \frac{1}{R_\beta \theta_\beta^{(vib)}} \times \\ & \left\{ \left(e_\alpha^{(vib)} + R_\alpha \theta_\alpha^{(vib)}\right) e_\beta^{(vib)} \exp\left(-\frac{\theta_\alpha^{(vib)} - \theta_\beta^{(vib)}}{T^{(tr)}}\right) - e_\alpha^{(vib)} \left(e_\beta^{(vib)} + R_\beta \theta_\beta^{(vib)}\right) \right\} . \end{aligned} \tag{22}$$

Die in diesen Formulierungen auftretenden Relaxationszeiten hängen ausschließlich von den Ratenkonstanten der Anregung des niedrigsten Schwingungsniveaus ab [14].

Der reaktive Vibrationsenergietransfer ergibt sich aus den chemischen Produktionsraten und den mittleren Vibrationsenergien $e_\alpha^{(vib,r')}$ und $e_\alpha^{(vib,r'')}$ der dissoziierenden und rekombinierenden Moleküle:

$$\Omega_\alpha^{(r)} = \omega_\alpha^{(r')} e_\alpha^{(vib,r')} + \omega_\alpha^{(r'')} e_\alpha^{(vib,r'')} \ . \tag{23}$$

Die mittleren Energien können mit den Ratenkonstanten konsistent angegeben werden. Die Netto-Produktionsraten und die Netto-Energietransferraten ergeben sich durch Summierung über die Reaktionen, beziehungsweise die wechselwirkenden Komponenten.

3.5 Berechnung der Ratenkonstanten

Grundlagen zur Berechnung der Ratenkonstanten bilden die Kollisionstheorie [32],[14] und das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts. Nach der Kollisionstheorie führt die Kollision eines Moleküls der Komponente α mit einem Teilchen der Komponente β zu einer endothermen Reaktion r', wenn die kinetische Energie der Kollision eine für die Reaktion charakteristische Aktivierungsenergie $\varepsilon^{(r')}$ überschreitet. Eine Erweiterung dieses Ansatzes wurde von Treanor und Marrone [19],[18] vorgeschlagen. Dabei wird angenommen, daß sich die Aktivierungsenergie um die Vibrationsenergie des Moleküls vermindert. Dies führt zu einer bevorzugten Dissoziation vibratorisch stark angeregter Moleküle. Einer endothermen chemischen Reaktion muß im Sinne dieser Theorien die Anregung der Molekülvibration vorangehen. Dieses Phänomen kann als Reaktionsinduktionszone hinter starken Verdichtungsstößen beobachtet werden. Die Ratenkonstanten der endothermen Reaktionen im thermischen Gleichgewicht werden hier mit den von Park [27] angegebenen Korrelationen berechnet, die in Form eines Arrhenius-Ansates vorliegen

$$\tilde{k}^{(r')}(T) = f^{(r')}(T) \exp\left(-\frac{\varepsilon^{(r')}}{kT}\right) \ . \tag{24}$$

Der Einfluß des vibratorischen Zustandes des Eduktmoleküls der entsprechenden Reaktion wird in der Theorie von Treanor und Marrone durch einen Vibrationsparameter

$$\Psi^{(vib)} = \frac{k^{(r')}(T \ , \ T_\alpha^{(vib)})}{k^{(r')}(T = T_\alpha^{(vib)})} = \frac{Q_\alpha^{(vib)}(\ T_\alpha^* \ )}{Q_\alpha^{(vib)}(T_\alpha^{(vib)})} \frac{Q_\alpha^{(vib)}(T^{(tr)})}{L_{max}} \quad , \quad \frac{1}{T_\alpha^*} := \frac{1}{T_\alpha^{(vib)}} - \frac{1}{T^{(tr)}} \tag{25}$$

ausgedrückt. Hier bezeichnet L_{max} die Anzahl der Vibrationsenergieniveaus. Ist die Vibrationstemperatur höher als die Translationstemperatur, so ist der Parameter größer als eins, im umgekehrten Fall kleiner als eins. Die Ratenkonstanten der endothermen Reaktionen können damit in folgender Form angegeben werden:

$$k^{(r')} = \tilde{k}^{(r')}(T^{(tr)})\,\Psi_\alpha^{(vib)}(T^{(tr)}, T_\alpha^{(vib)})\;. \tag{26}$$

Die mittlere Energie der dissoziierenden Moleküle ergibt sich im Rahmen dieses Modells zu

$$e_\alpha^{(vib,r')} = e_\alpha^{(vib)}(T_\alpha^*)\;. \tag{27}$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht können die Ratenkonstanten der exothermen Reaktionen (r'') durch Auswertung des Prinzips des detaillierten Gleichgewichts ermittelt werden. Danach ist das Verhältnis der Ratenkonstanten durch die Gleichgewichtskonstanten $K_r^c(T)$ gegeben, welche als Funktionen der Zustandssummenen berechnet werden können.

Im thermischen Nichtgleichgewicht ist eine Auswertung dieses Zusammenhangs nicht möglich, da die Gleichgewichtstemperatur in diesem Fall nicht definiert ist. Für die Ratenkonstanten der exothermen Reaktionen werden deshalb die folgenden, heuristischen Ansätze verwendet

$$\begin{aligned} k^{(r'')} &= \tilde{k}^{(r')}(T^{(tr)})\,/\,K_r^c(T^{(tr)}) && \text{Rekombinationsreaktionen} \\ k^{(r'')} &= \tilde{k}^{(r')}(T^{(tr)})\,/\,K_r^c(T^{(tr)})\,\Psi^{(vib)} && \text{Austauschreaktionen}\;. \end{aligned} \tag{28}$$

Eine Begründung hierfür findet sich in [14]. Im Sinne einer effizienten numerischen Auswertung, wurden hier die Beziehungen für die Gleichgewichtskonstanten durch Polynomanpassungen approximiert. Wie in [14] ebenfalls erläutert wird, kann für die mittlere Energie der in den exothermen Reaktionen entstehenden Moleküle die folgende Beziehung angegeben werden

$$e_\alpha^{(vib,r'')} = \lim_{T_\alpha^* \to \infty} e_\alpha^{(vib)}(T_\alpha^*) = \frac{1}{2}\left(e_\alpha^{(0)} - R_\alpha \theta_\alpha^{(vib)}\right)\;, \tag{29}$$

wobei $e_\alpha^{(0)}$ und $R_\alpha \theta_\alpha^{(vib)}$ die Dissoziationsenergie und das Vibrationsenergiequantum bedeuten. Für die Relaxationszeiten des VT- und des VV-Transfers wurden von Klomfaß [14] Korrelationen mit experimentellen Daten erstellt. Diese Korrelationen entsprechen hinsichtlich der Temperaturabhängigkeit der SSH Theorie [29]:

$$\tau_{\alpha\beta}^{(VT)} p_\beta = \left(T^{(tr)}\right)^{2/3} \exp\left\{\frac{a_{\alpha\beta}^{(VT)}}{(T^{(tr)})^{1/3}} + \frac{b_{\alpha\beta}^{(VT)}}{T^{(tr)}} + c_{\alpha\beta}^{(VT)}\right\} \frac{1}{\left(1 - \exp\left(-\theta_\alpha^{(vib)}/T^{(tr)}\right)\right)}\,, \tag{30}$$

$$\tau_{\alpha\beta}^{(VV)} p_\beta = \left(T^{(tr)}\right)^{2/3} \exp\left\{\frac{a_{\alpha\beta}^{(VV)}}{(T^{(tr)})^{1/3}} + \frac{b_{\alpha\beta}^{(VV)}}{T^{(tr)}} + c_{\alpha\beta}^{(VV)}\right\}\;. \tag{31}$$

In den Abbildungen 1 und 2 sind die charakteristischen Zeiten $\tau p_\beta = \mathcal{R}T^{(tr)}/k^{(r')}$ der endothermen Reaktionen und die Relaxationszeiten am Beispiel von Stickstoff dargestellt.

Wie ein Vergleich der charakteristischen Zeiten verdeutlicht, verlaufen die endothermen Reaktionen oberhalb von etwa $12000K$ simultan mit der Vibrationsrelaxation. Bei Sauerstoff ist dies oberhalb etwa 8000 K der Fall. Eine Berücksichtigung des Vibrationsnichtgleichgewichts ist oberhalb dieser Temperaturen daher immer erforderlich.

3.6 Wandbedingungen

Die Oberlächeneigenschaften besitzen einen großen Einfluß auf die Strömung. Eine detaillierte Modellierung der katalytischen Wandeffekte und der Vibrationsakkomodation wurde nicht implementiert.

Es wurden lediglich die Grenzfälle vollkatalytisch und nichtkatalytisch berücksichtigt. Im Falle einer vollkatalytischen, kalten Wand entspricht die Zusammensetzung des Gases an der Wand den Anströmbedingungen, während bei einer nichtkatalytischen Wand ein verschwindender Konzentrationsgradient vorliegt. Ebenso kann die vollständige Akkomodation der Vibrationsfreiheitsgrade oder eine vibrationsadiabate Wand berechnet werden. In diesen Fällen entspricht die Vibrationstemperatur der Wandtemperatur, oder es liegt ein verschwindender Temperaturgradient vor.

3.7 Numerisches Verfahren

Zur Diskretisierung von (7) wird ein explizites Shock-Capturing-Verfahren verwendet. Dazu wird in jedem Zeitschritt ein Operatorsplitting durchgeführt, d. h. die chemischen Produktionsraten und die thermischen Austauschraten werden von der restlichen Gleichung getrennt:

$$\mathbf{u}_t = \mathbf{S}(\mathbf{u}), \tag{32}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_t &+ \operatorname{div}\left(\mathbf{F}_1^I(\mathbf{u}), \mathbf{F}_2^I(\mathbf{u})\right) \\ &- \operatorname{div}\left(\mathbf{F}_1^V(\mathbf{u}, \mathbf{u}_{,x_1}, \mathbf{u}_{,x_2}), \mathbf{F}_2^V(\mathbf{u}, \mathbf{u}_{,x_1}, \mathbf{u}_{,x_2})\right) \\ &+ \sigma \mathbf{R}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_{,x_1}, \mathbf{u}_{,x_2})/x_2 = 0\,. \end{aligned} \tag{33}$$

Bei (32) handelt es sich um ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen, wobei die Anzahl der Gleichungen für die Partialdichten aufgrund der Atomerhaltung reduziert werden kann(vgl. [4]). Dieses wird durch einen expliziten Eulerschritt approximiert.

Die Gleichungen (33) werden mittels der Finiten-Volumen-Technik diskretisiert, d. h. (33) wird über ein Raum-Zeit-Kontinuum integriert, wobei die räumliche Integration der Divergenzanteile mittels des Satzes von Gauß auf eine Integration entlang dem Rand überführt wird.

Das Strömungsgebiet wird durch ein körperangepaßtes orthogonales Gitter diskretisiert, das sich aus regulären Vierecken zusammensetzt. Die Integration wird über jede einzelne Gitterzelle durchgeführt. Die Randintegrale setzen sich dabei aus den vier Seiten der Gitterzelle zusammen. Hier wird nun die Dimensionssplittingtechnik verwendet, d. h. es wird angenommen, daß die Bilanzgrößen $\mathbf{u}$ entlang jedem Teilstück im betrachteten Zeitintervall konstant sind. Der Fluß ist somit ebenfalls entlang jeder Zellenwand konstant. Dieser braucht also nur noch in den Zellrandmittelpunkten ausgewertet zu werden. Da die Flüsse $\mathbf{F}_i^I$ und $\mathbf{F}_i^V$ unterschiedliche physikalische Effekte — Advektion beziehungsweise Dissipation — beschreiben, werden zur Bestimmung der Zustände in den Zellrandmittelpunkten unterschiedliche Techniken verwendet.

Um den dissipativen Fluß auszuwerten, werden die benötigten Gradienten im Strömungsgebiet durch zentrale Differenzen und an der Wand durch einseitige Differenzen zweiter Ordnung diskretisiert und die Bilanzgrößen aus den angrenzenden Zellen gemittelt.

Zur Berechnung des konvektiven Flusses wird ein 1D-ENO-Verfahren verwendet (vgl. [11]), das auf jede der beiden Richtungen gleichzeitig angewendet wird. Grundlage bildet eine eindimensionale skalare Rekonstruktionstechnik. Die Erweiterung auf Systeme erfolgt komponentenweise. Um dieses eindimensionale Verfahren auf zwei Raumdimensionen anwenden zu können, verbindet man nun die Zellrandmittelpunkte zweier gegenüberliegender Seiten einer Zelle. Man erhält somit in jeder Richtung eine Schar von eindimensionalen Kurven. Auf jede einzelne wendet man nun das 1D-ENO-Verfahren an. Dabei muß in jedem Zellrandmittelpunkt ein Riemannproblem gelöst werden, um den Fluß normal zur Zellwand zu berechnen.

Die Konstruktion und Auswertung der Rekonstruktionspolynome ist sehr aufwendig. Um den Aufwand zu reduzieren, wird angenommen, daß die Massenbrüche $\rho_\alpha/\ \rho$ und die massenspezifischen Vibrationsenergien $\rho_\alpha e_\alpha^{vib}/\ \rho$ in jeder Zelle konstant sind, d. h. ein lokal eingefrorener Gaszustand vorliegt. Dann braucht nur die Gesamtdichte ρ rekonstruiert zu werden, die Partialdichten und die volumenspezifischen Vibrationsenergien ergeben sich daraus durch Multiplikation mit den Massenbrüchen beziehungsweise den massenspezifischen Vibrationsenergien der entsprechenden Zelle.

Bei einer rotationssymmetrischen Strömung muß zusätzlich der Term $\mathbf{R}$ diskretisiert werden. Um den Aufwand möglichst gering zu halten, soll dazu auf die schon vorhandenen Informationen aus der Berechnung der konvektiven und dissipativen Flüsse zurückgegriffen werden. Dazu werden zum alten Zeitpunkt die räumlichen Integrale approximiert. Für den konvektiven Anteil werden diese im Zellmittelpunkt ausgewertet, für den dissipativen Anteil dagegen in den vier Zellrandmittelpunkten. Eine detaillierte Beschreibung des numerischen Verfahrens findet sich in [21].

3.8 Riemannlöser

Ein sehr rechenzeitaufwendiger Teil des Algorithmus stellt die Berechnung der Lösung der Riemannprobleme an den Zellrändern dar. Hier wurde der iterative Löser von Colella und Glaz (vgl. [2]) durch einen approximativen Löser von Liu und Vinokur (vgl. [17]) ersetzt. Dieser ist für den vollständigen Satz an Bilanzgrößen formuliert. Um auch hier wie schon bei der Rekonstruktion den Aufwand unabhängig von der Anzahl der Gaskomponenten und der Anzahl der verschiedenen Vibrationsenergien zu halten, wurde alternativ eine Modifikation für eine chemisch und thermisch gefrorene Strömung entwickelt (siehe [9]). Verschiedene Testrechnungen ergaben nur geringe quantitative Unterschiede. Dies ist wohl dadurch begründet, daß aufgrund der kleinen Zeitschrittweiten, die durch das explizite Verfahren erforderlich sind, die Strömung lokal als gefroren betrachtet werden kann. Diese Annahme gilt in der Wandgrenzschicht nur noch bedingt. Hier zeigten sich auch die größten Abweichungen. In der Reduzierung der Rechenzeit ergaben sich für thermisches Gleichgewicht etwa 47 % und für thermisches Nichtgleichgewicht etwa 18 %. Die hier angeführten Ergebnisse sind in [9] ausführlich begründet und dokumentiert.

3.9 Implementierung

Es wurden zwei unterschiedliche Programme für thermisches Gleichgewicht beziehungsweise Nichtgleichgewicht in FORTRAN 77 geschrieben. Diese sind ausführlich dokumentiert (siehe [23], [24]). Die Testrechnungen wurden auf einer CRAY Y/MP durchgeführt. Wegen der langen Rechenzeiten wurde untersucht, inwieweit eine Parallelisierung diese reduzieren kann. Dazu wurde ein zonales Konzept entwickelt, in das die bestehenden Programme eingebettet werden können. Das Strömungsgebiet wird dabei in mehrere überlappende Teilgebiete zerlegt. Für jede einzelne Zone wird dann das serielle Programm als Unterroutine aufgerufen. Dies kann in jedem Zeitschritt für alle Gebiete simultan geschehen. Nach jedem Zeitschritt müssen die Daten an den angrenzenden Zonenrändern ausgetauscht werden. Untersuchungen wurden für das thermische Gleichgewicht auf einem Workstation-Cluster von 4 Maschinen (IRIS-Indigo-R4000) durchgeführt. Hierbei wurde das an der Fakultät für Mathematik der TU Chemnitz–Zwickau entwickelte Software–Paket **PAR-LIB** (siehe [10]) sowie die am Oak Ridge National Laboratory erstellte Bibliothek **PVM 3** (siehe [7]) zum Aufbau einer parallelen virtuellen Maschine eines heterogenen Netzes benutzt. Die **PAR-LIB**-Software stellt ein einheitliches Interface zur Verfügung, mit dem neben Workstation-Clustern auch Transputersyteme und HyperCubes angesprochen werden können. Dadurch braucht sich der Benutzer nicht mehr um die Maschinenanpassung des Datentransfers zu kümmern. Eine ausführliche Diskussion findet sich in [25].

4. Ergebnisse

Die implementierten Berechnungsverfahren wurden im wesentlichen angewendet um den Einfluß des Transportmodells und des Vibrationsnichtgleichgewichts auf die berechneten Strömungsfelder und den Staupunktwärmestrom zu untersuchen. Einen weiteren Schwerpunkt bildete der Vergleich mit Experimenten. Zu diesen Zwecken wurden drei unterschiedliche, rotationssymmetrische Strömungen untersucht, die in Tabelle 1 näher beschrieben sind.

Die Strömung um den RAM-C II Flugkörper ist durch eine hohe Anströmgeschwindigkeit bei geringer Reynoldszahl gekennzeichnet. Daher sind Vibrationsnichtgleichgewicht und molekularer Transport signifikant. Die Dicke der Stoßwelle beträgt hier etwa ein Viertel des Stoßabstands, so daß die Anwendbarkeit der Navier-Stokes-Gleichungen auf ihre Grenzen stößt. Die Verwendung des beschriebenen Transportmodells anstelle des bisher verwendeten, vereinfachten Modells (Fick'sche Diffusion, konstante Prandtl- und Schmidtzahl) ergab einen etwa 5% größeren Staupunktwärmestrom. Dies ist zum Teil auf den Einfluß der Druckdiffusion zurückzuführen, die in Abb.3 am nichtmonotonen Verlauf des Stickstoffmassenbruchs im Bereich des Stoßes sichtbar wird.

Die Signifikanz des Vibrationsnichtgleichgewichts kann ebenfalls dieser Abbildung und Abb.4 entnommen werden, in der die Verläufe der Temperaturen entlang der Staupunktstromlinie dargestellt sind. Wie der Vergleich verschiedener Berechnungen zeigte, besitzt der VV-Transfer einen nicht vernachlässigbaren Einfluß auf den Relaxationsprozess.

Da für die Testkonfiguration ELECTRE eine experimentelle Untersuchung im Hochenthalpiekanal HEG vorgesehen ist, wurde auch dieses Beispiel untersucht. Die Abbildungen 5 und 6 zeigen hierzu Details des Strömungsfeldes.

Als drittes Beispiel wurde ein von Wen und Hornung [31] durchgeführtes Experiment nachgerechnet, in dem die Hochenthalpieströmung um eine Kugel visualisiert und der Staupunktwärmestrom gemessen wurde. Abb. 7 zeigt den Vergleich des aus dem berechneten Strömungsfeld rekonstruierten und des aufgenommenen Differentialinterferogramms. Die gute Übereinstimmung des Stoßabstandes und der Interferenzmuster weißt auf eine realitätsnahe Modellierung der Ratenkonstanten hin. Der berechnete Wärmestrom lag jedoch etwa 50% unterhalb des gemessenen Wertes. Als Ursache wird eine unzureichende Auflösung der in unmittelbarer Wandnähe stattfindenden Rekombinationsprozesse vermutet. Eine höhere Auflösung ist jedoch bei dem hier verwendeten expliziten Verfahren aufgrund der dabei erforderlichen Reduzierung der Zeitschrittweite nicht möglich.

5. Offene Fragen

Es kann davon ausgegangen werden, daß das hier verwendete physikalische Modell einen hinreichenden Detaillierungsgrad besitzt. Die Überprüfung der Korrelationen für die Ratenkonstanten und die Transportkoeffizienten ist jedoch bisher unzureichend. Hierzu müssen in Zukunft weitere Vergleiche mit geeigneten Experimenten durchgeführt werden. Desweiteren kann festgestellt werden, daß die Reaktions- und Relaxationsprozesse in der Staupunktgrenzschicht bei hohen Reynoldszahlen mit expliziten Verfahren nur unzureichend aufgelöst werden können. Eine zuverlässige Berechnung des Staupunktswärmestroms ist in solchen Fällen nur mit impliziten Verfahren oder Grenzschichtverfahren möglich.

6. Literatur

[1] Candler G.V., MacCormack R.W., *The Computation of Hypersonic Ionized Flows in Chemical and Thermal Nonequilibrium*, AIAA-Paper 88 0511, 1988

[2] Colella, Ph., Glaz, H. M., *Efficient Solution Algorithms for the Riemann Problem for Real Gases*, J. Comp. Phys., 79, S. 264-289, 1985

[3] *European High-Velocity Database* Testfälle für Fourth European High-Velocity Database Workshop, ESTEC, Noordwijk, 22 - 25 November 1994

[4] Fey, M., Jeltsch, R., Karmann, P. *Numerical Analysis of Chemically Reacting Inviscid Flow in 2D*, in: Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, January 22-25, 1990 Antibers Tome 4, INRIA, GAMNI-SMAI, S. 185-241

[5] Ferzinger J.D., Kaper H.G., *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases* , North–Holland, 1972

[6] Fey, M., Jeltsch, R., Müller, S., *Stagnation point computations of non-equilibrium inviscid blunt body flow*, Computers and Fluids, Vol. 22, Nr. 4/5, S. 501-515, 1993

[7] Geist, A., Beguelin, A., Dongarra, J., Jiang,W., Manchek, R., Sunderam,V., *PVM 3 User's Guide and Reference Manual*, Oak Ridge National Laboratory, ORNL–Report TM–12187, Mai 1993

[8] Gupta R.N., Yos J.M., Thompson R.A., Lee K.-P., *A Review of Reaction Rates and Thermodynamic and Transport Properties for an 11 Species Air Model for Chemical and Thermal Nonequilibrium Calculations to 30000 K*, NASA Reference Publication 1232, 1990

[9] Haardt R., *Erweiterung eines Godunov-Typ-Verfahrens zur Berechnung von Strömungen im chemischen und thermischen Nichtgleichgewicht* , Studienarbeit, Lehr- und Forschungsgebiet für Mechanik, RWTH Aachen, 1993

[10] Haase, G., Hommel, T., Meyer, T., Pester, M., *Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen*, Preprint–Reihe der Chemnitzer DFG–Forschergruppe *Scientific Parallel Computing*, TU Chemnitz–Zwickau, SPC 94_4, März 1994

[11] Chakravarthy S.R.,Engquist B., Harten A., Osher S., *Uniformly High Order Accurate Essentially Non-Oscillatory Schemes III*, J. Comp. Phys., Vol. 71, 1987, pp. 231 - 303

[12] Hirschfelder J.O., *Generalization of the Eucken Correction for Mixtures of Polyatomic Gases*, Paper presented at the Conference on Thermodynamics and Transport Properties of Fluids (Session 3, Paper 5), July 1957

[13] Hirschfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B., *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, 1965

[14] Klomfass A., *Hyperschallströmungen im thermodynamischen Nichtgleichgewicht* Dissertation RWTH Aachen, Dezember 1994

[15] Klomfass A., Müller S., Ballmann J., *Modellierung hypersonischer Strömungen*, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, Lehr- und Forschungsgebiet Mechanik, RWTH Aachen 1993

[16] Klomfass A., Müller S., Ballmann J., *Modelling of Transport Phenomena for the Hypersonic Stagnation Point Heat Transfer Problem*, AIAA-Paper 93 5047, 1993

[17] Liu Y. , Vinokur M. , *Nonequilibrium Flow Computations I. An Analysis of Numerical Formulations of Conservation Laws*, J. Comp. Phys., Vol. 83, 1989, pp. 373 - 397

[18] Marrone P.V., Treanor C.E., *Chemical Relaxation with Preferential Dissociation from Excited Vibrational Levels*, The Physics of Fluid, Vol.6, No.9, S.1215-1221, 1963

[19] Marrone T.V., Treanor C.E., *Effect of Dissociation on the Rate of Vibrational Excitation*, The Physics of Fluids, Vol.5, No.9, S.1022-1026, 1962

[20] Metz S., *Numerische Verfahren zur Berechnung des Stoff- und Impulstransports in Wasserstoff-Luft und Methan-Luft Gemischen*, Dissertation, RWTH Aachen, 1994

[21] Müller S., *Erweiterung von ENO–Verfahren auf zwei Raumdimensionen und Anwendung auf hypersonische Staupunktprobleme* , Dissertation RWTH Aachen 1993, Verlag Shaker, Aachen

[22] Müller S., Dickopp Ch., Ballmann J., Jeltsch R., *Computation of Viscous Hypersonic Nonequilibrium Blunt Body Flow*, ZFW Bd.17, S.125 - 130, 1993

[23] Müller S., *NSCNG2 - Programmdokumentation* Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen, Institutsbericht Nr.89, 1993

[24] Müller S., *NSCTNG2 - Programmdokumentation* Institut für Geometrie und Mathematik, RWTH Aachen, Institutsbericht Nr.101, 1994

[25] Müller S., Knoben F. *Parallelisierung eines expliziten Finite-Volumen-Verfahrens*, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen, Institutsbericht Nr.97, 1994

[26] Obermeier E., Schaber A., *A Simple Formula for Multicomponent Gaseous Diffusion Coefficients Derived from Mean Free Path Theory*, Int. J. Heat Mass Transfer, 20, 1977, S. 1301-1306

[27] Park C., *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*, Wiley, 1990

[28] Peyret, R., Taylor, Th. D., *Computational Methods for Fluid Flow* , Springer Verlag, 1982;

[29] Schwartz R.N., Slawsky Z.I., Herzfeld K.F., *Calculation of Vibrational Relaxation Times in Gases*, Journal of Chemical Physics, Vol.20, No.10, S. 1591-1599, 1952

[30] Vincenti W.G., Kruger Ch.H., *Introduction to Physical Gas Dynamics*, Wiley, 1965

[31] Wen C., Hornung H., *Experiments on Hypervelocity Dissociating Flow over Spheres*, Paper presented at 19th International Symposium on Shock Waves, Marseille, 1993

[32] Williams F.A., *Combustion Theory*, Addison–Wesley, 1985

[33] Herning F. , Zipperer L. *Beitrag zur Berechnung der Zähigkeit technischer Gasgemische aus den Zähigkeitswerten der Einzelbestandteile*, Das Gas- und Wasserfach, Vol.4 , S.49 ff., 1936

7. Abbildungen

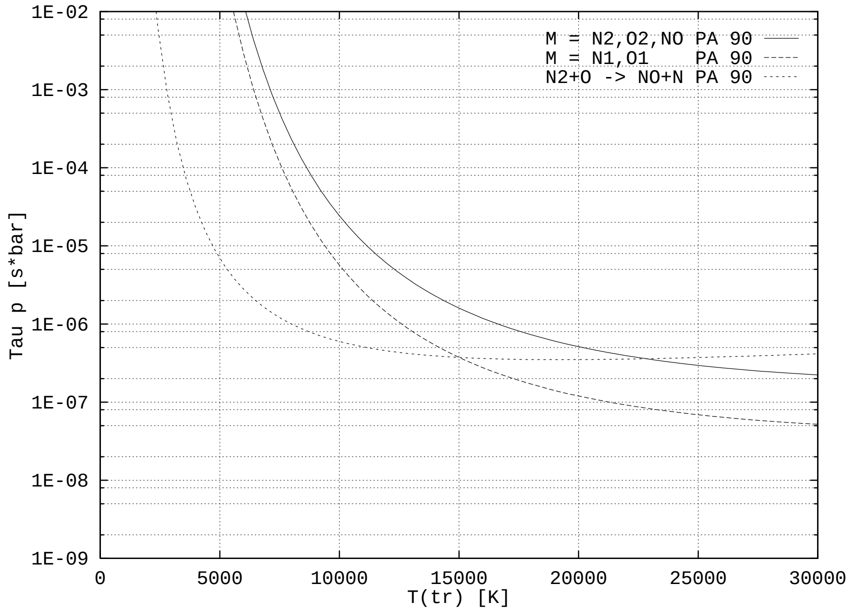

Abbildung 1: Charakteristische Zeiten, N_2 Reaktionen

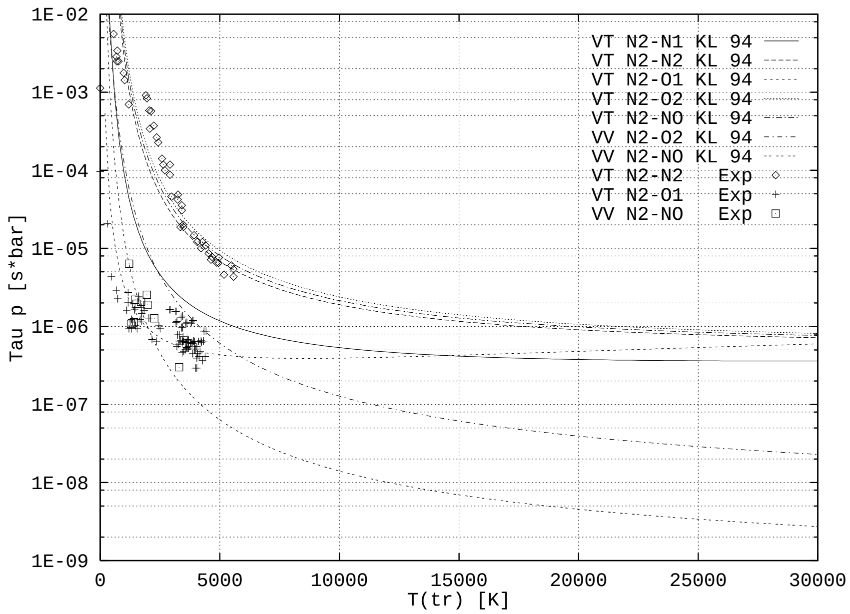

Abbildung 2: Charakteristische Zeiten, N_2 Relaxation

Parameter	RAM-C II	Wen	ELECTRE	Einheit
R_{Kugel}	0.1524	0.0254	0.035	m
T_{Wand}	1500	300	300	K
ρ	$6.8449 \cdot 10^{-5}$	$1.69 \cdot 10^{-2}$	$2.036 \cdot 10^{-3}$	kg/m^3
p	4.1772	13082	358	N/m^2
T	212	2350	510	K
T^{vib}_{N2}	212	2350	5449.3	K
T^{vib}_{O2}	212	2350	3390.5	K
T^{vib}_{NO}	212	2350	510	K
V	7600	5300	5576.7	m/s
Ma	26	5.7	12	-
x_{N2}	0.7654	0.749	0.76108	-
x_{O2}	0.2346	0.058	0.00722	-
x_O	0	0.159	0.21885	-
x_{NO}	0	0.034	0.0127	-
x_N	0	0	0	-
μ	$1.573 \cdot 10^{-5}$	$7.613 \cdot 10^{-5}$	$2.576 \cdot 10^{-5}$	kg/m/s
Re	5040	29887	15427	-

Tabelle 1

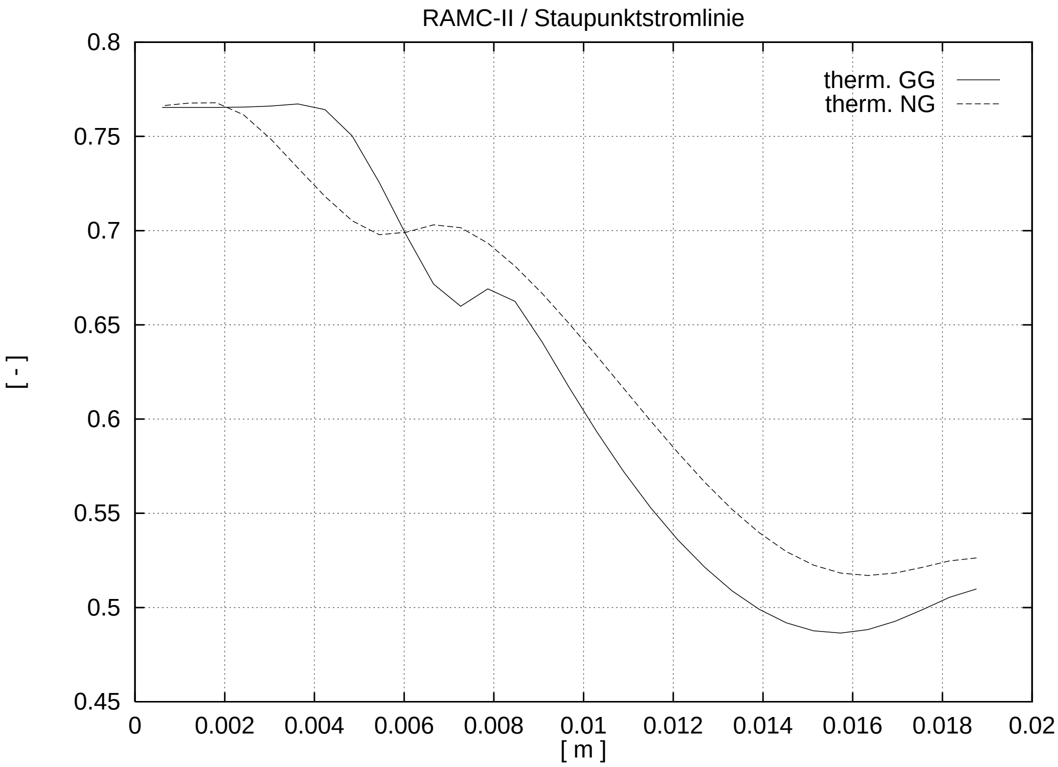

Abbildung 3: Massenbruch von N2

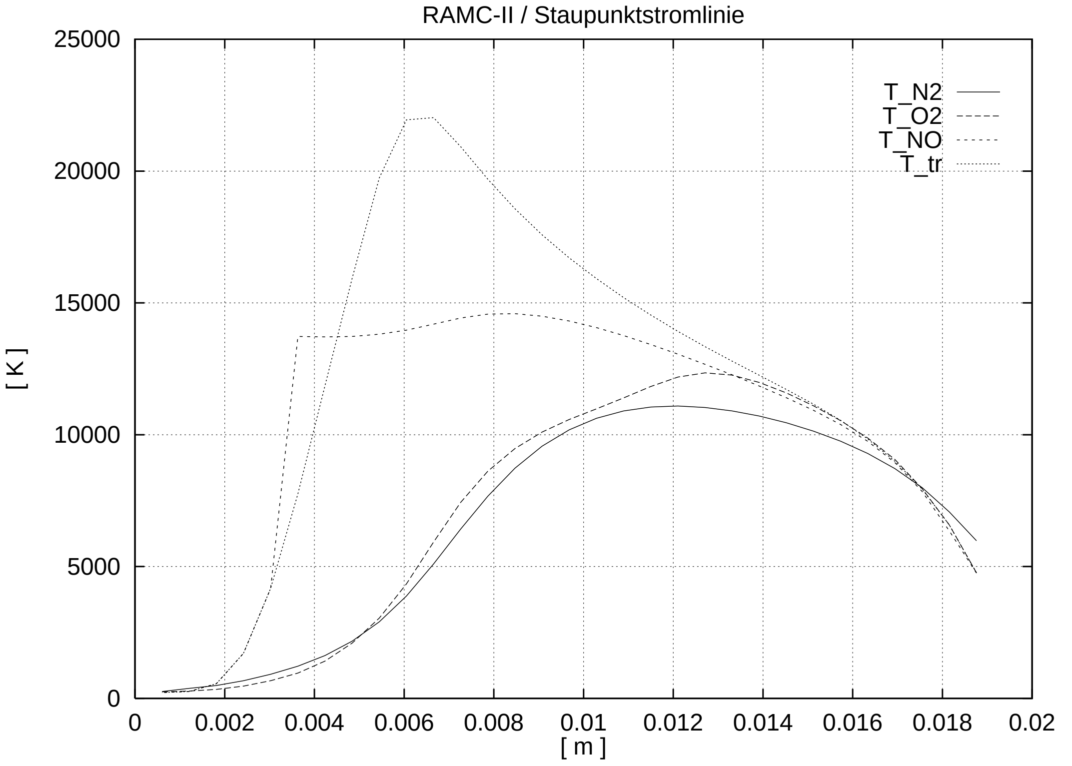

Abbildung 4: Translations- u. Vibrationstemperaturen

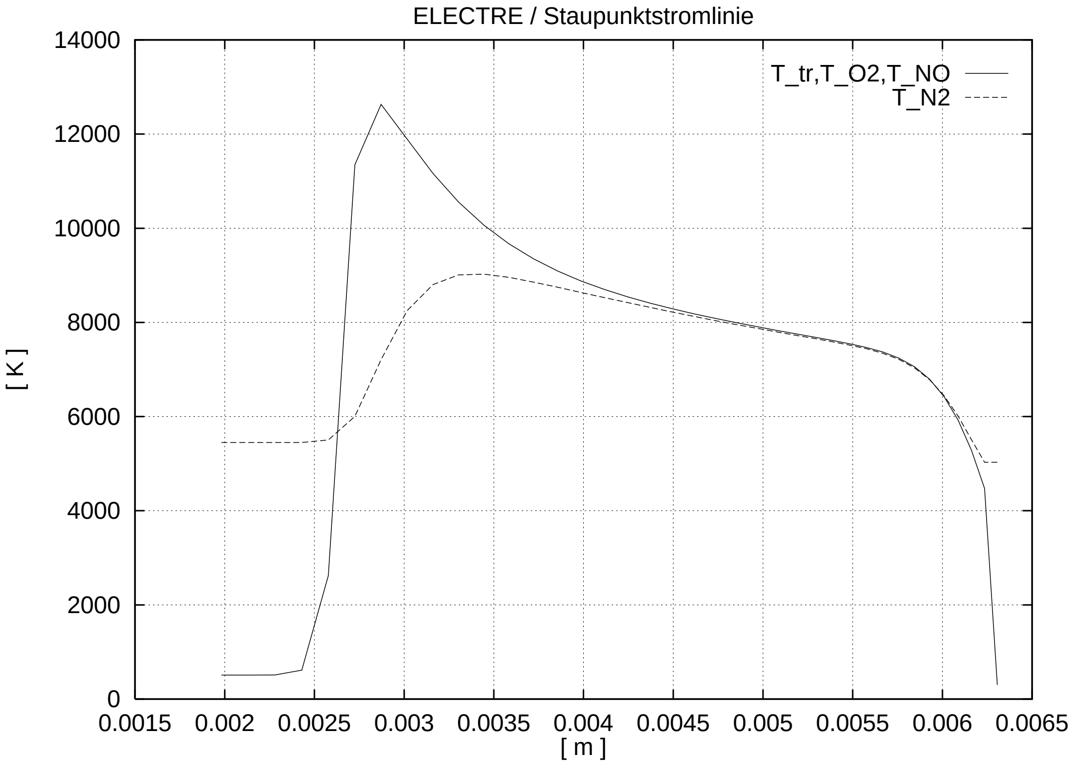

Abbildung 5: Temperatur

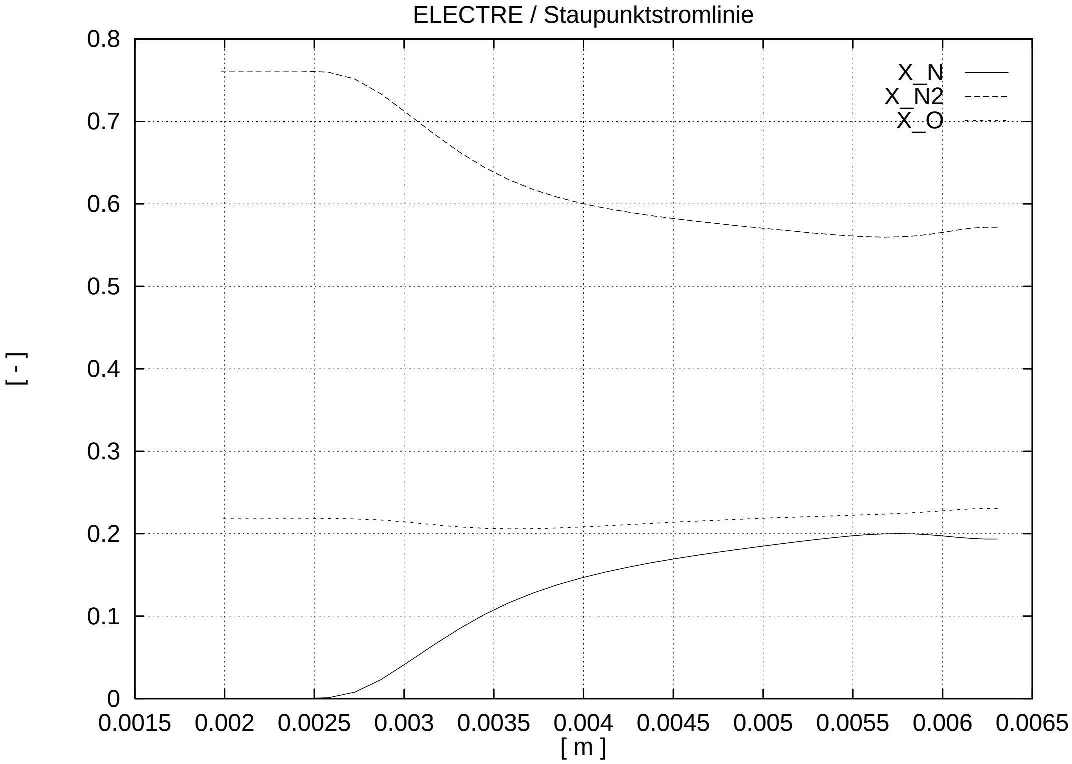

Abbildung 6: Massenbrüche

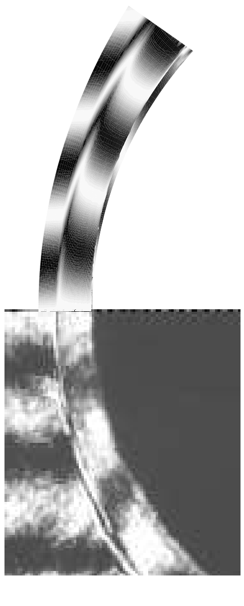

Abbildung 7: Vergleich der Interferogramme