# NSCTNG2

## Ein Programm zur räumlich zweidimensionalen, instationären Strömungssimulation thermisch perfekter, aber kalorisch nicht perfekter Gasgemische im chemischen und thermischen Nichtgleichgewicht

Siegfried Müller[1]
Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

E-Mail: mueller@igpm.rwth-aachen.de

**Zusammenfassung**

In dieser Arbeit wird ein Programm zur Simulation von räumlich zweidimensionalen bzw. rotationssymmetrischen kompressiblen Strömungen dokumentiert. Das betrachtete Fluid ist ein thermisch perfektes aber kalorisch nicht perfektes Gasgemisch. Dieses befindet sich im chemischen und thermischen Nichtgleichgewicht. Reibung, Wärmeleitung und Diffusion werden berücksichtigt. Das zugrundeliegende physikalische Modell wird durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben. Diese müssen um einen Produktionsterm zur Beschreibung der chemischen Produktionsraten und der Austauschraten zwischen den Freiheitsgraden erweitert werden. Dieses System partieller Differentialgleichungen wird mittels eines expliziten Shock-Capturing-Verfahrens diskretisiert. In jedem Zeitschritt wird der Quellterm der chemischen Produktionsraten vom restlichen System abgespalten. Dies führt auf ein Sytem partieller Differentialgleichungen und ein gewöhnliches Differentialgleichungssytem. Zur Diskretisierung des reibungsfreien Anteils der Navier-Stokes-Gleichungen werden ENO-Verfahren und approximative Riemannlöser verwendet. Die Terme zweiter Ordnung — reibungsbehafteter Anteil — werden durch zentrale Differenzen diskretisert.

**Key Words:** Navier-Stokes equations, chemically reacting flows, thermodynamics of mixtures, finite difference methods, applications of mathematical programming

**AMS subject classification:** 35Q30, 80A32, 80A15, 76M20, 90C90

[1]Der Autor wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Sonderforschungsbereich 253, Teilprojekt B5, und vom Graduiertenkolleg „Transportvorgänge im Hyperschall“ der RWTH Aachen gefördert.

# Vorwort

Bei dem Programm **NSCTNG2** (**N**avier–**S**tokes–Gleichungen für **c**hemisches und **t**hermisches **N**icht**g**leichgewicht in **2** Raumdimensionen) handelt es sich um eine Erweiterung von **NSCNG2** (vgl. [1]). An der Programmstruktur wurde nichts geändert. Es mußten jedoch einige Änderungen in den Schnittstellen (vgl. 6.1, 6.4, 6.5.1) vorgenommen werden. Desweiteren mußten zusätzliche globale Parameter und Variablen deklariert werden (vgl. 7.1, 7.2). Daraus resultierten sehr viele prozedurinterne Änderungen, die für den Benutzer selber nicht von Bedeutung sind.
Um einen von **NSCNG2** unabhängigen Einstieg in die Benutzung von **NSCTNG2** zu ermöglichen, wurde diese Dokumentation erstellt. Dem Benutzer der Version **NSCNG2** werden viele Gemeinsamkeiten auffallen.
Bei der Modellierung des thermischen Nichtgleichgewichtes wurde ich von meinem Kollegen Dipl.-Ing. Arno Klomfaß unterstützt. Durch seine Hilfe war es mir möglich, das Programm **NSCNG2** in kurzer Zeit auf thermisches Nichtgleichgewicht zu erweitern.
Mein Dank gilt ferner Stephan Mannheim für seinen Einsatz bei der Erstellung des Layouts dieser Arbeit.

# Inhaltsverzeichnis

# 1 Einleitung

Im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 253 wurde im Teilprojekt B5 ein FORTRAN 77-Programm entwickelt, das die numerische Simulation von kompressiblen Strömungen ermöglicht. Dieses wurde dazu verwendet, um Strömungen um einen stumpfen Körper bei einer Überschallanströmung ($Ma_\infty \gg 1$) zu untersuchen. Diese sind an räumlich zweidimensionalen Geometrien beziehungsweise an rotationssymmetrischen Körpern (z.B. Kugel mit Radius $r$) durchgeführt worden. Die Ergebnisse sind in [2], [3] dargestellt.
Aufgrund der für solche Probleme typisch hohen Anströmungsgeschwindigkeit und der relativ großen Höhen (30–80 km) kommt es hinter dem Frontstoß zu Temperaturen von teilweise weit über 3000 K. Dies führt zur Dissoziation von molekularem Sauerstoff und Stickstoff. Bei Temperaturen von über 8000 K kommt es ferner zur Ionisation der chemischen Komponenten (z.B. Stickoxid). Da der Nasenradius $r$ in der Regel sehr klein ist (z.B. ELAC-1: $r = 0.18$m, [4]), befindet sich der Frontstoß sehr nahe am Körper. Dadurch haben die chemischen Reaktionen nicht genügend Zeit, um in den Gleichgewichtszustand zu relaxieren. Deshalb wurde chemisches Nichtgleichgewicht modelliert. Dazu wurde das 5-Komponenten-Modell von Park [6] für $N, N_2, O, O_2$ und $NO$, das die wichtigsten 17 Reaktionen berücksichtigt, verwendet.
Da auf eine Modellierung der Ionisationseffekte verzichtet wurde, brauchen auch keine elektrischen Kräfte berücksichtigt zu werden. Diese dürfen jedoch bei einem hohen Ionisationsgrad des Gasgemisches nicht vernachlässigt werden.
Bei großen Flughöhen müssen thermische Nichtgleichgewichtseffekte berücksichtigt werden (vgl. [9]). In diesem Fall sind die inneren Freiheitsgrade im allgemeinen noch nicht angeregt, d.h. sie liegen mit unterschiedlichen Temperaturen vor. Diese haben aber das Bestreben, ins Gleichgewicht zu kommen. Dazu sind eine gewisse Anzahl von Stößen zwischen den Teilchen des Gasgemisches erforderlich.
Da die Rotationstemperatur nach einigen wenigen Stößen schon mit der Translationstemperatur im Gleichgewicht ist, werden diese hier mit einer gemeinsamen Temperatur $T^1$ modelliert. Für die Vibration und die elektronische Anregung ist dies nicht der Fall. Diese brauchen wesentlich mehr Stöße, um ins Gleichgewicht zu kommen. Eine detaillierte Diskussion der Nichtgleichgewichtseffekte findet sich in [11] und [12].
Um quantitative Aussagen über den Wärmetransport an der Wand machen zu können, wurden Reibungs– und Diffusionseffekte berücksichtigt. Katalytische Wandeffekte wurden jedoch vernachlässigt. Diese viskosen Effekte hängen wesentlich von der Modellierung der Transport– und Diffusionskoeffizienten ab. Da diese aber noch Gegenstand laufender Forschungsarbeiten sind (z.B. Modellierung des intermolekularen Potentials, experimentell zu bestimmende Parameter, etc.), wurde auf die explizite Implementierung eines speziellen Modells verzichtet. Stattdessen wurden die entsprechenden Koeffizienten für jede einzelne chemische Komponente mittels einer Least-Square-Approximation über den Temperaturbereich gefittet (siehe [10]). In einem Gasgemisch hängen diese Koeffizienten jedoch zusätzlich von der Zusammensetzung des Gases ab. Um die Gemischkoeffizienten realistisch zu modellieren, wurden die Mischungsregeln von Obermeier und Schaber ($D_{ij}$), Wilke ($\mu$) sowie Mason ($\lambda^1$) verwendet. Näheres über die Qualität der Modellierung findet sich in [11] und [12]. Dort werden die Transport– und Diffusionskoeffizienten – ausgehend von der kinetischen Gastheorie – betrachtet und verschiedene Alternativen speziell für

das 5-Komponenten-Modell diskutiert.
Zur Modellierung der massenspezifischen inneren Energie $e$ und der massenspezifischen Wärmekapazitäten bei konstantem Volumen $c_V$ wurde analog vorgegangen. Hier sind die Größen $e_i^m$ und $c_{V,i}^m$, $m =$ TR, vib, el, für die Freiheitsgrade Translation und Rotation (TR), Vibration (vib) und elektronische Anregung (el) einer einzelnen chemischen Komponente $i$ gefittet worden. Die Größen für das Gemisch können daraus additiv durch Gewichtung mit der entsprechenden Massenkonzentration bestimmt werden. Dadurch bleibt es dem Benutzer vorbehalten, zu entscheiden, ob zum Beispiel ein harmonischer bzw. ein anharmonischer Oszillator oder welche Parameter verwendet werden sollen.
Diese Strategie der Kurvenfits für physikalische Größen der einzelnen chemischen Komponenten hat mehrere Vorteile:

- Flexibilität bei Änderung des Modells
- effiziente Auswertung aufwendiger analytischer Modelle bei Abweichungen, die im Rahmen des analytischen Modells liegen
- Vermeidung von Fallunterscheidungen zur Laufzeit
- hoher Vektorisierungsgrad

Zur Modellierung des bisher beschriebenen pkysikalischen Modells wurden die Navier-Stokes-Gleichungen (NSGen), bestehend aus den Komponentengleichungen für die Partialdichten, den Impulsgleichungen, der Energiegleichung und den Gleichungen für die Energiemodi im thermischen Nichtgleichgewicht, auf einem strukturierten krummlinigen Gitter, das sich aus regelmäßigen Vierecken zusammensetzt, diskretisiert.
Dazu wurde ein explizites Shock-Capturing-Verfahren implementiert. In jedem Zeitschritt wird der Quellterm der chemischen Reaktionen und der thermischen Austauschprozesse mittels eines Operatorsplittings von den NSGen getrennt. Daraus resultiert ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen (GDGen) und ein homogenes System partieller Differentialgleichungen (PDGen).
Die Lösung der GDGen wird mittels eines expliziten Eulerschrittes approximiert. Die homogenen NSGen werden durch die Finite-Volumen-Methode, d.h. Integration über ein räumlich-zeitliches Kontinuum, diskretisiert. Die räumliche Integration wird mittels des Satzes von Gauß auf die Integration entlang des Zellrandes überführt.
Bei der Diskretisierung der Randflüsse wird zwischen dem reibungsfreien und dem viskosen Anteil unterschieden. Die im viskosen Fluß auftretenden räumlichen Ableitungen 1.Ordnung werden durch zentrale Differenzen approximiert. Zur Diskretisierung des reibungsfreien Flusses werden in den PDGen die viskosen Terme vernachlässigt. Dies führt auf die Eulergleichung (EGen) in Integraldarstellung.
Auf diese wird die Dimensionssplitting-Technik angewendet, d.h. die Erhaltungsgrößen werden auf jeder Zellkante konstant angenommen, und somit auch der Randfluß. Letzterer muß nur noch in den Zellrandmittelpunkten bestimmt werden.
Dazu werden die Mittelpunkte zweier gegenüberliegender Zellkanten miteinander verbunden. Dadurch wird eine Schar einparametriger Kurven konstruiert. Entlang jeder

dieser Kurven werden die räumlich eindimensionalen EGen mittels eines Godunov-Typ-Verfahrens – dem sogenannten Essentially Non-Oscillatory-Verfahren (ENO) [14] – diskretisiert.
Dieses basiert auf einer Rekonstruktionstechnik (hier: RP-Methode, [14]), die aus den gegebenen Mittelwerten einer Funktion an diskreten Stellen eine kontinuierliche, stückweise glatte Funktion, die an den Zellrändern springen darf, approximiert. In den Zellrandmittelpunkten werden nun eindimensionale Riemannprobleme gelöst. Dies geschieht aus Rechenzeitgründen nicht exakt, sondern approximativ mit dem verallgemeinerten Löser von Liu und Vinohur [15] für die EGen im thermischen und chemischen Nichtgleichgewicht.
Daraus ergibt sich eine Approximation des reibungsfreien Randflusses.
Ziel dieser Arbeit ist es nun, das oben in groben Zügen beschriebene Programm zu dokumentieren. Damit sollen Fremdbenutzer in die Lage versetzt werden, eigene Simulationen durchzuführen. Dazu sind folgende Kenntnisse erforderlich:

- Programmstruktur, z.B.
  - Inhalt der Unterprogramme,
  - globale Variablen
- Ein– und Ausgabe
- Schnittstellen für die physikalischen Modelle, z.B.
  - Kurvenfits für Transport- und Diffusionskoeffizienten,
  - Kurvenfits für die innere Energie und die isochoren Wärmen,
  - Kurvenfits für die Gleichgewichtskonstanten,
  - Diffusionsfluß,
  - Randbedingungen.

Zunächst werden deshalb die zugrunde liegenden Gleichungen explizit angegeben (siehe Kap. 2) und die sich daraus durch das Operatorsplitting und Dimensionssplitting ergebenden Teilprobleme beschrieben. Daran schließt sich die Beschreibung der numerischen Methoden zur Diskretisierung der Teilprobleme an (siehe Kap. 3). Hier werden jedoch **keine** expliziten Algorithmen angegeben. Diese können in [2] nachgeschlagen werden. Auf die entsprechenden Stellen wird verwiesen.
Darauf aufbauend kann die Programmstruktur nachvollzogen werden.

# 2 Die inhomogenen Navier-Stokes-Gleichungen

Das in der Einleitung beschriebene physikalische Modell einer kompressiblen Strömung im chemischen und thermischen Nichtgleichgewicht unter Vernachlässigung äußerer Kräfte wird durch die inhomogenen NSGen beschrieben (hier: räumlich $d$-dimensional):

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}_{,t} \; &+ \; \operatorname{div}\left(\boldsymbol{F}_1^I(\boldsymbol{u}),\dots,\boldsymbol{F}_d^I(\boldsymbol{u})\right) \\ &- \; \operatorname{div}\left(\boldsymbol{F}_1^V(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}_{,x_1},\dots,\boldsymbol{u}_{,x_d}),\dots,\boldsymbol{F}_d^V(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}_{,x_1},\dots,\boldsymbol{u}_{,x_d})\right) = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}). \end{aligned} \tag{1}$$

Die Notation $(\cdot)_{,x_i}$ bedeutet dabei die partielle Ableitung der Größe $(\cdot)$ nach der Komponente $x_i$. Die Größen sind wie folgt definiert:

- Vektor der Bilanzgrößen:

$$\boldsymbol{u} := (\rho_1,\dots,\rho_K,\rho\boldsymbol{v},\rho E,\epsilon^2,\dots\epsilon^M)^T \tag{2}$$

- Quellterm der chemischen Reaktionen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}) &:= (s_1,\dots,s_K,\mathbf{0},0,\Omega_2,\dots,\Omega_M)^T \\ s_i &= s_i(\rho_1,\dots,\rho_K,T^1,\dots,T^M) \\ \Omega^\alpha &= \Omega^\alpha(\rho_1,\dots,\rho_k,T^1,\dots,T^M) \end{aligned} \tag{3}$$

- reibungsfreier Fluß in Richtung $x_i$:

$$\begin{aligned} F_i^I(\boldsymbol{u}) &:= (\rho_1 v_i,\dots,\rho_K v_i,\rho\boldsymbol{v}v_i + p\boldsymbol{e}_i,\rho v_i H,\epsilon^2 v_i,\dots,\epsilon^M v_i)^T \\ \boldsymbol{e}_i &= i\text{–ter Einheitsvektor des } R^{K+d+M} \end{aligned} \tag{4}$$

- viskoser Fluß in Richtung $x_i$:

$$\begin{aligned} &F_i^V(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}_{,x_1},\dots,\boldsymbol{u}_{,x_d}) := \\ &\quad (-q_{1,i}^D,\dots,-q_{K,i}^D,(\boldsymbol{\tau})^i,(\boldsymbol{\tau v})_i - q_i,\, -\epsilon^2 c_i^2 - q_i^2,\dots,-\epsilon^M c_i^M - q_i^M)^T \end{aligned} \tag{5}$$

- Diffusionsfluß in Richtung $x_i$ (nach [16], S. 516):

$$\begin{aligned} \boldsymbol{q}_i^D &:= \frac{c^2}{\rho}\sum_{j\neq i} M_i M_j D_{ij}\boldsymbol{d}_j - D_i^T\frac{1}{T}\,\mathbf{grad}\,T \\ \boldsymbol{d}_i &:= \mathbf{grad}\,\frac{c_i}{c} + \left(\frac{c_i}{c}-\frac{\rho_i}{\rho}\right)\frac{1}{p}\,\mathbf{grad}\,p \end{aligned} \tag{6}$$

- Tensor der Reibungsspannungen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &:= \mu\left(\,\mathbf{grad}\,\boldsymbol{v} + (\,\mathbf{grad}\,\boldsymbol{v})^T - \tfrac{2}{3}(\operatorname{div}\boldsymbol{v})\,\mathbf{I}\,\right) \\ (\boldsymbol{\tau})^i &= i\text{-te Spalte von } \boldsymbol{\tau} \\ (\boldsymbol{\tau v})_i &= i\text{-te Komponente von } \boldsymbol{\tau v} \end{aligned} \tag{7}$$

- Wärmefluß:

$$\boldsymbol{q} := -\lambda^1 \,\mathbf{grad}\, T^1 + \sum_{\alpha\neq 1} \boldsymbol{q}^\alpha \quad + \quad \sum_i h_i \boldsymbol{q}_i^D \\ \qquad + \quad \frac{RT}{c} \sum_i \sum_{j\neq i} \frac{c_j}{M_i} \frac{D_i^T}{\mathcal{D}_{ij}} \left( \frac{\boldsymbol{q}_i^D}{\rho_i} - \frac{\boldsymbol{q}_j^D}{\rho_j} \right) \tag{8}$$

- Wärmefluß der Energiemodi im thermischen Nichtgleichgewicht

$$\boldsymbol{q}^\alpha := -\lambda^\alpha \,\mathbf{grad}\, T^\alpha \tag{9}$$

- Diffusionsfluß der Energiemodi im thermischen Nichtgleichgewicht

$$\boldsymbol{c}^\alpha := \sum_{\substack{i=i(\alpha)\\ m=m(\alpha)}} e_i^m(T^\alpha) \boldsymbol{q}_i^D \Big/ \epsilon^\alpha \;, \quad \alpha = 2, M \tag{10}$$

(Summation über alle Energiemodi, die mit der gleichen Temperatur $T^\alpha$ vorliegen.)

Die physikalischen Größen sind wie folgt definiert:

- Massendichte:

$$\rho := \sum_{i=1}^K \rho_i \tag{11}$$

- Massenbruch der Komponenete $i$:

$$Y_i := \frac{\rho_i}{\rho} \tag{12}$$

- molare Konzentration der Komponente $i$:

$$c_i := \frac{\rho_i}{M_i} \tag{13}$$

- Summe der molaren Konzentrationen:

$$c := \sum_{i=1}^K c_i \tag{14}$$

- Molenbruch der Komponente $i$:

$$X_i := \frac{c_i}{c} \tag{15}$$

- massenspezifische innere Energie (kalorische Zustandsgleichung):

$$e := \sum_{i=1}^K Y_i \left( e_i^{tr}(T_i^{tr}) + e_i^{rot}(T_i^{rot}) + e_i^{vib}(T_i^{vib}) + e_i^{el}(T_i^{el}) + e_i^0 \right) \tag{16}$$

- Temperaturen

$$T^\alpha = T_i^m\ , \tag{17}$$

falls Freiheitsgrad $m \in \{tr, rot, vib, el\}$ der Komponente $i$ mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergeht;

**Achtung:**

Die Freiheitsgrade der Translation und der Rotation werden hier grundsätzlich im Gleichgewicht modelliert. Dies erscheint gerechtfertigt, da bei den hier betrachteten Strömungsbedingungen es nur einiger weniger Kollisionen bedarf, um dieses Gleichgewicht herzustellen. Somit wird

$$T_i^{rot} = T_i^{tr} = T^1\ , \qquad i = 1, K \tag{18}$$

vorausgesetzt. Im folgenden werden diese Freiheitsgrade zu TR zusammengefaßt.

- innere Energie

$$e_i^\alpha = \sum_{m=\{TR,vib,el\}} \sigma_{i,m} e_i^m(T^\alpha)\ , \tag{19}$$

$$\sigma_{i,m} = \begin{cases} 1\ , & T_i^m = T^\alpha \\ 0\ , & T_i^m \neq T^\alpha \end{cases}$$

$$e^\alpha = \sum_{i=1}^{K} Y_i e_i^\alpha \tag{20}$$

- isochore Wärmekapazitäten

$$c_{v,i}^m(T_i^m) = \left(\frac{\partial e_i^m(T_i^m)}{\partial T_i^m}\right)_{Y_1,\ldots,Y_K=\text{const.}} \tag{21}$$

$$\tag{22}$$

$$c_{v,i}^\alpha = \sum_{m=\{TR,vib,el\}} \sigma_{i,m} c_{v,i}^m(T^\alpha) \tag{23}$$

$$\tag{24}$$

$$c_v^\alpha = \sum_{i=1}^{K} Y_i c_{v,i}^\alpha \tag{25}$$

- Gleichgewichtsenergie

$$e^{GG} = \sum_{\substack{i=i(1)\\ m=m(1)}} Y_i e_i^m(T^1) \tag{26}$$

- Nichtgleichgewichtsenergie

$$e^{NG} = \sum_{\alpha=2}^{M} \sum_{\substack{i=i(\alpha)\\ m=m(\alpha)}} Y_i e_i^m(T^\alpha) \tag{27}$$

- massenspezifische Totalenergie:

$$E := e + \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 \tag{28}$$

- Druck (thermische Zustandsgleichung):

$$p := \rho R T^1 \sum_{i=1}^{K} Y_i / M_i \tag{29}$$

- massenspezifische Enthalpie der Komponente $i$:

$$h_i := e_i + \frac{RT^1}{M_i} \tag{30}$$

- massenspezifische Enthalpie:

$$h := \sum_{i=1}^{K} Y_i \left(h_i + e_i^0\right) = e + p/\rho \tag{31}$$

- massenspezifische Totalenthalpie:

$$H := E + p/\rho = h + \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 \tag{32}$$

Die Gleichung (1) wird vervollständigt durch die Transport- und Diffusionskoeffizienten:

- Viskositätskoeffizient des Gasgemisches:

$$\mu = \mu(T^1, X_1, \ldots, X_K) \tag{33}$$

- Wärmeleitungskoeffizient des Gasgemisches:

$$\begin{array}{rcll} \lambda^1 & = & \lambda^1(T^1, X_1, \ldots, X_K) & \\ \lambda^\alpha & = & \lambda^\alpha(T^\alpha, \rho, X_1, \ldots, X_K)\,, & \qquad \alpha \neq 1 \end{array} \tag{34}$$

- thermischer Diffusionskoeffizient der Komponente $i$:

$$D_i^T = D_i^T(T^1, p, X_1, \ldots, X_K) \tag{35}$$

- binärer Diffusionskoeffizient der Komponenten $i$ und $j$:

$$\mathcal{D}_{ij} = \mathcal{D}_{ij}(T^1, p) \tag{36}$$

- Koeffizient der Mehrkomponentendiffusion der Komponenten $i$ und $j$:

$$D_{ij} = D_{ij}(T^1, p, X_1, \dots, X_K) \tag{37}$$

Die NSGen (1) sind hier für den räumlichen $d$-dimensionalen Fall dargestellt. Sie wurden jedoch nur für $d = 2$ implementiert. Diese können auch für den Fall einer rotationssymmetrischen Strömung (hier: Rotationsachse $x_2 = 0$) verwendet werden. Aus der Rotationssymmetrie, d.h.

$$\boldsymbol{u}_{,x_3} = \boldsymbol{0} \quad \text{und} \quad v_3 = 0, \tag{38}$$

können die räumlich dreidimensionalen NSGen (1) überführt werden in

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}_t \;+\; \operatorname{div}\left(\boldsymbol{F}_1^I(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{F}_2^I(\boldsymbol{u})\right) - \operatorname{div}\left(\boldsymbol{F}_1^V(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}_{,x_1}, \boldsymbol{u}_{,x_2}), \boldsymbol{F}_2^V(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}_{,x_1}, \boldsymbol{u}_{,x_2})\right) \\ = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}) - \sigma\left[\boldsymbol{R}^I(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{R}^V(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}_{,x_1}, \boldsymbol{u}_{,x_2})\right] \Big/ x_2 = 0\,, \end{aligned} \tag{39}$$

d.h. die zweidimensionalen Gleichungen müssen um einen zusätzlichen Quellterm erweitert werden:

$$\boldsymbol{R}^I = \begin{pmatrix} F^I_{2,1} \\ \vdots \\ F^I_{2,K} \\ \rho v_1 v_2 \\ \rho v_2 v_2 \\ F^I_{2,K+3} \\ F^I_{2,K+4} \\ \vdots \\ F^I_{2,K+2+M} \end{pmatrix} \tag{40}$$

$$\boldsymbol{R}^V = \begin{pmatrix} F^V_{2,1} \\ \vdots \\ F^V_{2,K} \\ \mu(v_{2,x_1} + v_{1,x_2}) - \frac{2}{3}(v_1 v_2)_{,x_1} \\ \left[2\mu\left(\frac{v_2}{x_2}\right)_{,x_2} - \frac{2}{3}\left(\frac{\mu v_2}{x_2}\right)_{,x_2}\right] \Big/ x_2 \\ F^V_{2,K+3} - \frac{2}{3}\left[(\mu v_1 v_2)_{,x_1} + (\mu v_2 v_2)_{,x_2}\right] \\ F^V_{2,K+4} \\ \vdots \\ F^V_{2,K+2+M} \end{pmatrix}, \tag{41}$$

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

# 3 Numerische Methoden

Im Rahmen des Forschungsprojektes wurden die Gleichungen (39) diskretisiert. Dazu wurden folgende Techniken benutzt:

- Operatorsplitting (Quellterm der chemischen Produktionsraten und der thermischen Austauschraten)
- Dimensionssplitting
- Finite–Volumen–Technik
- explizites Shock–Capturing–Verfahren (reibungsfreier Anteil der NSGen)
- zentrale Differenzen (viskoser Term der NSGen, Quellterm der Rotationssymmetrie).

Zu jedem expliziten Zeitschritt wird zunächst der Quellterm $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{u})$ der chemischen Produktionsraten und der Austauschraten von den restlichen Gleichungen getrennt. Dies führt auf ein System von GDGen und ein System von PDGen, die sukzessive gelöst werden:

$$\text{Schritt 1:} \quad \frac{d\boldsymbol{u}^1}{dt} = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}^1) \quad , \ \boldsymbol{u}^1(\boldsymbol{x},t_n) = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t_n) \tag{42}$$

$$\begin{aligned} \text{Schritt 2:} \quad \boldsymbol{u}^2_{,t} &+ \operatorname{div}\Big(\boldsymbol{F}^I_1(\boldsymbol{u}^2), \boldsymbol{F}^I_2(\boldsymbol{u}^2)\Big) \\ &- \operatorname{div}\Big(\boldsymbol{F}^V_1(\boldsymbol{u}^2,\boldsymbol{u}^2_{,x_1},\boldsymbol{u}^2_{,x_2}), \boldsymbol{F}^V_2(\boldsymbol{u}^2,\boldsymbol{u}^2_{,x_1},\boldsymbol{u}^2_{,x_2})\Big) \\ &+ \sigma\left[\boldsymbol{R}^I(\boldsymbol{u}^2) - \boldsymbol{R}^V(\boldsymbol{u}^2,\boldsymbol{u}^2_{,x_1},\boldsymbol{u}^2_{,x_2})\right]\Big/ x_2 = 0 \\ \boldsymbol{u}^2(\boldsymbol{x},t_n) &= \boldsymbol{u}^1(\boldsymbol{x},t_{n+1}) \ . \end{aligned} \tag{43}$$

Das System (42) geht mit (2) und (3) über in

$$\begin{array}{llcll} \text{a)} & \dfrac{d\rho_i}{dt} & = & s_i(\rho_i,\ldots,\rho_N,T^1,\ldots,T^M), \quad \rho_i(t_n) = \rho_i^n & , \ i=1,\ldots,K \\ \text{b)} & \dfrac{d\epsilon^\alpha}{dt} & = & \Omega^\alpha(\rho_1,\ldots,\rho_K,T^1,\ldots,T^M), \quad \epsilon^\alpha(t_n) = (\epsilon^\alpha)^n \ , & \alpha = 2,\ldots,M \\ \text{c)} & T^1 & = & T^1(e^{GG}) = T^1(e^{GG}(\rho_1,\ldots,\rho_N,(\rho\boldsymbol{v})^n,(\rho E)^n,\epsilon^2,\ldots,\epsilon^M)) & \\ \text{d)} & T^\alpha & = & T(\epsilon^\alpha) \ , \qquad \alpha = 2,\ldots,M & \end{array} \tag{44}$$

Bei der Diskretisierung von (44) ist darauf zu achten, daß die Atomerhaltung lokal gewährleistet ist (siehe [3], S. 18), d.h. es soll keine elementare Entmischung stattfinden. Diese zusätzlichen algebraischen Gleichungen werden dazu verwendet, um das System (44a) entsprechend zu reduzieren. Das reduzierte System wurde hier mittels eines expliziten Eulerschrittes approximiert (siehe [3], S. 64).
Da die Flüsse $\boldsymbol{F}^I_i$ und $\boldsymbol{F}^V_i$ zwei unterschiedliche physikalische Effekte beschreiben – Advektion bzw. dissipative Effekte (Diffusion, Reibung, Wärmeleitung) – und im Sinne der kinetischen Gastheorie von unterschiedlicher Ordnung sind (siehe Chapman-Enskog Entwicklung, [16]), wurden diese unterschiedlich diskretisiert. Dies entspricht einem weiteren Operatorsplitting.

Da die Rotationssymmetrie optional ist, wird auch der dadurch bedingte Quellterm – der bei einer $3D$-Rechnung nicht auftritt – von den übrigen Termen separiert. Die Gleichung (43) wird somit in drei voneinander unabhängige Systeme aufgespalten:

$$\begin{array}{lll}
\text{Schritt 2.1:} & \boldsymbol{u}^{21}_{,t} + \operatorname{div}\left(\boldsymbol{F}^I_1(\boldsymbol{u}^{21}), \boldsymbol{F}^I_2(\boldsymbol{u}^{21})\right) = 0 \,, & (45) \\
 & \boldsymbol{u}^{21}(\boldsymbol{x}, t_n) = \boldsymbol{u}^1(\boldsymbol{x}, t_{n+1}) \,; & \\
\text{Schritt 2.2:} & \boldsymbol{u}^{22}_{,t} - \operatorname{div}\left(\boldsymbol{F}^V_1(\boldsymbol{u}^{22}, \boldsymbol{u}^{22}_{,x_1}, \boldsymbol{u}^{22}_{,x_2}), \boldsymbol{F}^V_2(\boldsymbol{u}^{22}, \boldsymbol{u}^{22}_{,x_1}, \boldsymbol{u}^{22}_{,x_2})\right) = 0 \,, & (46) \\
 & \boldsymbol{u}^{22}(\boldsymbol{x}, t_n) = \boldsymbol{u}^1(\boldsymbol{x}, t_{n+1}) \,; & \\
\text{Schritt 2.3:} & \boldsymbol{u}^{23}_{,t} + \sigma\left[\boldsymbol{R}^I(\boldsymbol{u}^{23}) - \boldsymbol{R}^V(\boldsymbol{u}^{23}, \boldsymbol{u}^{23}_{,x_1}, \boldsymbol{u}^{23}_{,x_2})\right]/x_2 = 0 \,, & (47) \\
 & \boldsymbol{u}^{23}(\boldsymbol{x}, t_n) = \boldsymbol{u}^1(\boldsymbol{x}, t_{n+1}) \,. &
\end{array}$$

Diese werden in einem Zeitschritt simultan gelöst, d.h.

$$\boldsymbol{u}^2_{,t} = \boldsymbol{u}^{21}_{,t} + \boldsymbol{u}^{22}_{,t} + \boldsymbol{u}^{23}_{,t} \,. \tag{48}$$

Die Systeme (45), (46) und (47) werden mittels der Finiten-Volumen-Technik in Integralgleichungen überführt. Dazu werden sie über ein räumlich–zeitliches Kontinuum $[t_n, t_{n+1}] \times V,\ V \subset \mathrm{IR}^2$ integriert und der Satz von Gauß angewendet. Daraus resultieren die Gleichungen

$$\begin{array}{lrcl}
\text{a)} & \widehat{\boldsymbol{u}^{21}}(\boldsymbol{x}_M, t_{n+1}) & = & \widehat{\boldsymbol{u}^{21}}(\boldsymbol{x}_M, t) - \dfrac{\Delta t}{|V|}\widehat{\boldsymbol{F}^I}_{\boldsymbol{N},\partial V}(\boldsymbol{u}^{21}) \\
\text{b)} & \widehat{\boldsymbol{u}^{22}}(\boldsymbol{x}_M, t_{n+1}) & = & \widehat{\boldsymbol{u}^{22}}(\boldsymbol{x}_M, t) + \dfrac{\Delta t}{|V|}\widehat{\boldsymbol{F}^V}_{\boldsymbol{N},\partial V}(\boldsymbol{u}^{22}) \\
\text{c)} & \widehat{\boldsymbol{u}^{23}}(\boldsymbol{x}_M, t_{n+1}) & = & \widehat{\boldsymbol{u}^{23}}(\boldsymbol{x}_M, t) - \sigma\Delta t\left[\widehat{\boldsymbol{R}^I}(\boldsymbol{u}^{23}) - \widehat{\boldsymbol{R}^V}(\boldsymbol{u}^{23})\right] \,.
\end{array} \tag{49}$$

mit den Notationen

- räumlicher Mittelwert von $\boldsymbol{u}$:

$$\widehat{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}_{M,t}) := \frac{1}{|V|}\iint\limits_V \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)\, dV \tag{50}$$

- reibungsfreier Fluß in Richtung der äußeren Normalen $\boldsymbol{N}$ zum Rand $\partial V$:

$$\boldsymbol{F}^I_{\boldsymbol{N},\partial V}\left(\boldsymbol{u}^{21}(\boldsymbol{x}, t)\right) := \left(\boldsymbol{F}^I_1\left(\boldsymbol{u}^{21}(\boldsymbol{x}, t)\right), \boldsymbol{F}^I_2\left(\boldsymbol{u}^{21}(\boldsymbol{x}, t)\right)\right) \cdot \boldsymbol{N}(\boldsymbol{x}) \tag{51}$$

- viskoser Fluß in Richtung der äußeren Normalen $\boldsymbol{N}$ zum Rand $\partial V$:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{F}^V_{\boldsymbol{N},\partial V}\left(\boldsymbol{u}^{22}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}^{22}_{,x_1}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}^{22}_{,x_2}(\boldsymbol{x}, t)\right) := \\
&\qquad \left(\boldsymbol{F}^V_1\left(\boldsymbol{u}^{22}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}^{22}_{,x_1}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}^{22}_{,x_2}(\boldsymbol{x}, t)\right),\right. \\
&\qquad\qquad \left.\boldsymbol{F}^V_2\left(\boldsymbol{u}^{22}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}^{22}_{,x_1}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}^{22}_{,x_2}(\boldsymbol{x}, t)\right)\right) \cdot \boldsymbol{N}(\boldsymbol{x})
\end{aligned} \tag{52}$$

- zeitlicher Mittelwert des reibungsfreien Flusses über den Rand $\partial V$:

$$\widehat{\boldsymbol{F}^I}_{\boldsymbol{N},\partial V}(\boldsymbol{u}^{21}) := \frac{1}{\Delta t} \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} \int\limits_{\partial V} \boldsymbol{F}^I_{\boldsymbol{N},\partial V} \left( \boldsymbol{u}^{21}(\boldsymbol{x}(s), t) \right) \, ds \, dt \tag{53}$$

- zeitlicher Mittelwert des viskosen Flusses über den Rand $\partial V$:

$$\widehat{\boldsymbol{F}^V}_{\boldsymbol{N},\partial V}(\boldsymbol{u}^{22}) := \frac{1}{\Delta t} \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} \int\limits_{\partial V} \boldsymbol{F}^V_{\boldsymbol{N},\partial V} \left( \boldsymbol{u}^{22}(\boldsymbol{x}(s), t) \right) \, ds \, dt \tag{54}$$

- räumlich-zeitlicher Mittelwert des Quellterms $\boldsymbol{R}^I$:

$$\widehat{\boldsymbol{R}^I}(\boldsymbol{u}^{23}) := \frac{1}{\Delta t \cdot |V|} \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} \iint\limits_{V} \boldsymbol{R}^I \left( \boldsymbol{u}^{23}(\boldsymbol{x}, t) \right) \, dV \, dt \tag{55}$$

- räumlich-zeitlicher Mittelwert des Quellterms $\boldsymbol{R}^V$:

$$\widehat{\boldsymbol{R}^V}(\boldsymbol{u}^{23}) := \frac{1}{\Delta t \cdot |V|} \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} \iint\limits_{V} \boldsymbol{R}^V \left( \boldsymbol{u}^{23}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}^{23}_{,x_1}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}^{23}_{,x_2}(\boldsymbol{x}, t) \right) \, dV \, dt \, . \tag{56}$$

Dabei gibt $\Delta t := t_{n+1} - t_n > 0$ die Länge des Zeitintervalls, $|V|$ die Fläche von $V$ und $\boldsymbol{x}_M \in V$ den Schwerpunkt von $V$ an.
Aus (48) folgt dann die Approximation für (43)

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{u}^2}(\boldsymbol{x}_M, t_{n+1}) \;=\; \widehat{\boldsymbol{u}^2}(\boldsymbol{x}_M, t_n) \;&-\; \frac{\Delta t}{|V|} \left[ \widehat{\boldsymbol{F}^I}_{\boldsymbol{N},\partial V}(\boldsymbol{u}^{21}) - \widehat{\boldsymbol{F}^V}_{\boldsymbol{N},\partial V}(\boldsymbol{u}^{22}) \right] \\ &-\; \sigma \cdot \Delta t \left[ \widehat{\boldsymbol{R}^I}(\boldsymbol{u}^{23}) - \widehat{\boldsymbol{R}^V}(\boldsymbol{u}^{23}) \right] \, . \end{aligned} \tag{57}$$

Wendet man die Finite–Volumen–Technik direkt auf die Gleichung (43) an, so ergibt sich (57) mit $\boldsymbol{u}^{21} = \boldsymbol{u}^{22} = \boldsymbol{u}^{23} = \boldsymbol{u}^2$. Somit bewirkt das Aufspalten von (43) in (49a), (49b) und (49c) nur, daß die Flüsse an unterschiedlichen Stellen ausgewertet werden.
Zur Diskretisierung der Gleichung (45) — diese entsprechen den Euler–Gleichungen — wird ein explizites Shock-Capturing Verfahren verwendet. Es handelt sich dabei um das Essentially–Non–Oscillatory–Verfahren (ENO) von Harten u.a. [14]. Dieses basiert darauf, daß die Gleichung (45) über jede Zelle des diskretisierten Strömungsgebietes integriert bzw. (49a) berechnet wird.
In der hier durchgeführten numerischen Simulation wird der Strömungsbereich in allgemeine Vierecke unterteilt. Diese sollen so gewählt sein, daß die Seiten eines Viereckes möglichst senkrecht aufeinander stehen und etwa gleiche Seitenlängen haben. Ein Ausschnitt eines derart diskretisierten Gebietes ist in Abb. 1 dargestellt.
Dabei sind die Punkte $\boldsymbol{P}_i^{j,k}$ die Mittelpunkte der vier Seiten $\Gamma_i^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ mit der konstanten äußeren Normalen $\boldsymbol{N}_i^{j,k}$. Man beachte, daß die äußeren Normalen zu einer Seite, die zwei benachbarten Zellen angehören, sich nur durch das Vorzeichen unterscheiden, d.h.

$$N_1^{j,k} = -N_3^{j,k+1} \quad \text{und} \quad N_2^{j,k} = -N_4^{j-1,k} \ . \tag{58}$$

Nun wird (49a) für jede Zelle $V_{j,k}$ berechnet, d.h. die Mittelwerte $\widehat{\boldsymbol{u}^{21}}$ zum neuen Zeitpunkt ergeben sich aus denen des alten Zeitniveaus und der Differenz der Flüsse, d.h. dessen, was in dem Zeitintervall über die Zellgrenzen fließt. Zur Auswertung der Flüsse wird aber $\boldsymbol{u}^{21}$ und nicht der Mittelwert benötigt, d.h. aus den diskreten Mittelwerten $\widehat{\boldsymbol{u}^{21}}$ muß $\boldsymbol{u}^{21}$ rekonstruiert werden.
Somit erhält man für das ENO-Verfahren folgende Schrittfolge eines expliziten Zeitschrittes auf obigem Strömungsgebiet:

a) **Initialisierung:**
$\boldsymbol{v}_{j,k}^n \approx \widehat{\boldsymbol{u}^{21}}(\boldsymbol{x}_{j,k}, t_n)$ ;

b) **Rekonstruktion von Ordnung $\boldsymbol{N}$:**
$\boldsymbol{R}^N(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_{j,k}^n) = \boldsymbol{u}^{21}(\boldsymbol{x}, t_n) + \mathrm{O}\left(||\Delta x||^N\right)$ ,
$\boldsymbol{R}_{j,k}^N := \boldsymbol{R}^N|_{V_{j,k}} \in \mathcal{P}_2^N := \left\{ x_1^{l_1} x_2^{l_2} \;\middle|\; 0 \le l_1 + l_2 \le N \right\}$ ;

c) **Numerischer Fluß:**

$$\widehat{\boldsymbol{F}^I}_{i,j,k} := \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_I^{j,k}} \boldsymbol{F}^I_{\boldsymbol{N}_i^{j,k}, \Gamma_i^{j,k}}(\boldsymbol{w}(\boldsymbol{x}(s), t))\, ds\, dt \tag{59}$$

$\boldsymbol{F}^I_{\boldsymbol{N}_i^{j,k}, \Gamma_i^{j,k}} := (\boldsymbol{F}_1^I, \boldsymbol{F}_2^I) \cdot \boldsymbol{N}_i^{j,k}$
$\boldsymbol{w}$ Lösung von (45) zu den Anfangsbedingungen $\boldsymbol{w}(\boldsymbol{x}, t_n) = \boldsymbol{R}^N(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_{j,k}^n)$ ;

d) **Mittelwertbildung:**

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_{j,k}^{n+1} &= \boldsymbol{v}_{j,k}^n - \frac{\Delta t}{|V_{j,k}|} \sum_{i=1}^4 \widehat{\boldsymbol{F}^I}_{i,j,k} \\ &\overset{(58)}{=} \boldsymbol{v}_{j,k}^n - \frac{\Delta t}{|V_{j,k}|} \left\{ \left[ \widehat{\boldsymbol{F}^I}_{3,j,k} - \widehat{\boldsymbol{F}^I}_{1,j,k-1} \right] + \left[ \widehat{\boldsymbol{F}^I}_{2,j,k} - \widehat{\boldsymbol{F}^I}_{4,j-1,k} \right] \right\} \ . \end{aligned}$$

Die Berechnung der Rekonstruktionspolynome $\boldsymbol{R}_{j,k}^N$ und der Flüsse $\widehat{\boldsymbol{F}^I}_{i,j,k}$ wird nun mittels der Dimensions-Splitting-Technik auf den räumlich eindimensionalen Fall zurückgeführt. Dazu wird angenommen, daß die Größe $\boldsymbol{u}^{21}$ entlang jeder Zellkante konstant ist. Dadurch muß der Fluß über den Zellrand nur in den Zellrandmittelpunkten ausgewertet werden. Die Zeitintegration wird durch die Mittelpunktsregel approximiert:

$$\widehat{\boldsymbol{F}^I}_{i,j,k} \approx \left|\Gamma_i^{j,k}\right| \; \boldsymbol{F}^I_{\boldsymbol{N}_I^{j,k}, \Gamma_I^{j,k}} \left( \boldsymbol{w}(\boldsymbol{P}_i^{j,k}, t_n + \Delta t/2) \right) \ . \tag{60}$$

Zur Berechnung von $\boldsymbol{w}$ an der Stelle $\boldsymbol{P}_i^{j,k}$ reicht aufgrund des Dimensionssplittings ebenfalls eine eindimensionale Rekonstruktionstechnik. Durch Verbinden der Punkte $\boldsymbol{P}_2^{j,k}$ und $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ bzw. $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ und $\boldsymbol{P}_3^{j,k}$ für alle Zellen $V_{j,k}$ ergeben sich einparametrige Kurven $\boldsymbol{z}_k(\zeta)$ bzw. $\boldsymbol{z}_j(\eta)$ entlang denen $\boldsymbol{u}^{21}$ mittels der RP-Methode (siehe [14]) rekonstruiert wird (siehe Abb. 2).

In den Stellen $\boldsymbol{P}_i^{j,k}$ haben die Rekonstruktionspolynome $\boldsymbol{R}_j^N(\boldsymbol{z}_k(\zeta))$ bzw. $\boldsymbol{R}_k^N(\boldsymbol{z}_j(\eta))$ Unstetigkeiten. Um den physikalisch sinnvollen Zustand zu bestimmen, werden eindimensionale Riemannprobleme in Richtung der äußeren Normale zum Zellrand gelöst:

$$\boldsymbol{w}_t(\xi,t) + \Big((\boldsymbol{F}_1^I(\boldsymbol{w}(\xi,t)), \boldsymbol{F}_2^I(\boldsymbol{w}(\xi,t))) \cdot \boldsymbol{N}_i^{j,k}\Big)_{,\xi} = 0\,, \quad \xi = \boldsymbol{N}_i^{j,k} \cdot \boldsymbol{x}$$

$$\boldsymbol{w}(\xi, t_n + \tfrac{\Delta t}{2}) = \begin{cases} \boldsymbol{w}^N\left(\xi_i - 0, t_n + \dfrac{\Delta t}{2}\right), & \xi < \xi_i \\ \boldsymbol{w}^N\left(\xi_i + 0, t_n + \dfrac{\Delta t}{2}\right), & \xi > \xi_i \end{cases} \tag{61}$$

zu den Zuständen

$$\boldsymbol{w}(\xi,t_n) = \boldsymbol{R}_j^N(\boldsymbol{z}_k(\xi)) \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{w}(\xi,t_n) = \boldsymbol{R}_k^N(\boldsymbol{z}_j(\xi))\,. \tag{62}$$

Zur Lösung des Riemannproblems (61) wird der approximative Riemannlöser von Liu und Vinokur [15] für ein Gasgemisch, das sich im chemischen und thermischen Nichtgleichgewicht befindet (siehe [3], S. 55 ff.) verwendet. Er wird jedoch nicht explizit der Zwischenzustand sondern der approximative Fluß ausgerechnet. Bei der Berechnung der Flüsse am Rand des Strömungsgebietes werden keine Riemannprobleme gelöst, sondern die Randwerte explizit in den Fluß eingesetzt. Die Diskretisierung der Eulergleichungen (45) ist damit beschrieben. Sie stellt wohl den aufwendigsten Teil des Algorithmus' dar. In der Berechnung von (49b) wird der Mittelwert des viskosen Flusses durch die Zellmittelwerte auf dem alten Zeitniveau approximiert. Analog zu (60) ergibt sich

$$\widehat{\boldsymbol{F}^V}_{i,j,k} \approx \left|\Gamma_i^{j,k}\right| \; \boldsymbol{F}^V_{\boldsymbol{N}_I^{j,k},\Gamma_i^{j,k}}(\boldsymbol{u}^{22}(\boldsymbol{P}_i,t_n), \boldsymbol{u}^{22}_{,x_1}(\boldsymbol{P}_i,t_n), \boldsymbol{u}^{22}_{,x_2}(\boldsymbol{P}_i,t_n))\,. \tag{63}$$

Um $\boldsymbol{F}^V_{\boldsymbol{N}_i^{j,k},\Gamma_i^{j,k}}$ im Punkt $\boldsymbol{P}_i$ auswerten zu können, werden sowohl die Größen $\boldsymbol{u}^{22}(\boldsymbol{P}_i)$ als auch die Ableitungen des Geschwindigkeitsvektors $\boldsymbol{v}_\xi(\boldsymbol{P}_i)$ und $\boldsymbol{v}_\eta(\boldsymbol{P}_i)$ benötigt, wobei $(x_1,x_2)$ die kartesischen und $(\xi,\eta)$ beliebige krummlinige Koordinaten sind (vgl. (52)). Für die Ableitungen gilt lokal:

$$\mathbf{grad}\,\boldsymbol{v}(x_1,x_2) \approx \begin{pmatrix} N_1 & -N_2 \\ N_2 & N_1 \end{pmatrix} \mathbf{grad}\,\boldsymbol{v}(\xi,\eta)\,. \tag{64}$$

Diese lassen sich durch zentrale Differenzen

$$\boldsymbol{v}_\xi(\boldsymbol{P}_i) \approx \frac{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_O) - \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_W)}{||\boldsymbol{P}_W - \boldsymbol{P}_O||} \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{v}_\eta(\boldsymbol{P}_i) \approx \frac{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_N) - \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_S)}{||\boldsymbol{P}_N - \boldsymbol{P}_S||} \tag{65}$$

mit

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_N) &= \frac{1}{4}\Big(\boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_{NW}) + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_W) + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_O) + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_{NO})\Big) \\ \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_S) &= \frac{1}{4}\Big(\boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_{SO}) + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_O) + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_W) + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{P}_{SW})\Big) \end{aligned}$$

diskretisieren (vgl. Abb. 3).

Analog gilt dies auch für alle anderen Größen und deren Ableitungen bzgl. $\xi$ und $\eta$. Die Werte in den Zellmittelpunkten sind gerade die Werte auf dem alten Zeitniveau.
An der Körperwand muß man zwei Fälle unterscheiden (vgl. Abb. 4, 5):
Im Fall von Abb. 4 müssen in den Punkten $\boldsymbol{P}_{SW}$ und $\boldsymbol{P}_{SO}$ die Wanddaten verwendet werden. Durch Mittellung dieser Werte erhält man dann eine Diskretisierung für den Punkt $\boldsymbol{P}_S$. Bei der Diskretisierung des Flusses normal zur Körperwand (5) müssen in den Punkten $\boldsymbol{P}_{SW}, \boldsymbol{P}_W = \boldsymbol{P}_i$ und $\boldsymbol{P}_{NW}$ die Wanddaten verwendet werden. Durch Mittellung erhält man dann wiederum approximative Werte in den Punkten $\boldsymbol{P}_N$ und $\boldsymbol{P}_S$. Beachte, daß in diesem Fall der Fluß eine andere Darstellung hat, da hier eventuell die Transportvorgänge an der Wand berücksichtigt werden müssen.
In Schritt 2.3 (vgl. (47)) müssen im Fall der Rotationssymmetrie ($\sigma = 1$) die Terme (55) und (56) diskretisiert werden. Um den Aufwand möglichst gering zu halten, soll dazu auf die schon vorhandenen Informationen aus den Schritten 2.1 und 2.2 (vgl. (45), (46)) zurückgegriffen werden. Dazu werden zum alten Zeitpunkt die räumlichen Integrale approximiert. Für den reibungsfreien Anteil wird dieses im Zellmittelpunkt ausgewertet, für den viskosen Anteil dagegen in den vier Zellrandmittelpunkten, d.h.

$$\widehat{\boldsymbol{R}^I}_{j,k} = \boldsymbol{R}^I\left(\boldsymbol{u}^{23}(\boldsymbol{x}_{j,k}, t_n)\right) \qquad \text{bzw.} \tag{66}$$

$$\widehat{\boldsymbol{R}^V}_{j,k} = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} \boldsymbol{R}^V\left(\boldsymbol{u}^{23}(\boldsymbol{P}_i^{j,k}, t_n), \boldsymbol{u}^{23}_{,x_1}(\boldsymbol{P}_i^{j,k}, t_n), \boldsymbol{u}^{23}_{,x_2}(\boldsymbol{P}_i^{j,k}, t_n)\right) . \tag{67}$$

Abschließend sei noch bemerkt, daß die Schritte 2.1 – 2.3 simultan berechnet werden und nicht sukzessive. Wahlweise kann auch auf das Separieren der chemischen Produktionsterme verzichtet werden und diese Schritte auch simultan zu 2.1 – 2.3 durchgeführt werden. Dies ist für instationäre Probleme sinnvoll. Die Wahl des physikalischen und somit auch numerischen Modells erfolgt über Flags.

# 4 Programmstruktur

## 4.1 NSCTNG2 (Hauptprogramm)

Im vorausgegangenen Kapitel wurden die numerischen Methoden ausführlich beschrieben. Die Diskretisierung der einzelnen Schritte (42), (45), (46) und (47) wurde dabei im wesentlichen in der Reihenfolge vorgenommen, in der sie auch im Programm ablaufen. Schwerpunkt des Programms bildet der Eulerlöser zur Diskretisierung von (45).
Die Berechnung von (42), (46) und (47) geschieht optional. Die Programmstruktur ist in einem Flußdiagramm (Abb. 6) dargestellt.
Die Unterroutinen zu den einzelnen Schritten befinden sich in den gleichnamigen Dateien. Die einzelnen Schritte sind

**INPUT**

Eingabe der strömungs– und diskretisierungsspezifischen Parameter;

**INITIAL**

Einlesen der Daten und des Gitters;

Initialisierung der charakteristischen Anströmwerte für die durchzuführende Strömungssimulation;

Initialisierung der physikalischen Größen;

Initialisierung der Anströmwerte;

Initialisierung aller gitterspezifischen Größen;

Initialisierung der rekonstruktionsspezifischen Größen;

**CHEMIE** (optional, falls chemisches und thermisches Nichtgleichgewicht modelliert werden soll)

Berechnung der Diskretisierung von (42) bzw. (44);

**CFD**

Berechnung der Strömung;

Berechnung der Bilanzgrößen (2) auf dem neuen Zeitlevel;

**BOUND**

Berechnung der Bilanzgrößen (2) in den Randzellen des Gitters;

**OUTPUT**

Ausgabe der neuen Mittelwerte nach **NSTEPS** durchgeführten Zeitschritten.

## 4.2 INPUT

Die Programmeingabe der zur Laufzeit benötigten Parameter und Dateien erfolgt in der Routine **INPUT**. Diese wird zu Programmbeginn aufgerufen. Die Eingabe erfolgt über eine Datei, deren Name zum Programmstart eingegeben wird. Sie muß folgendermaßen strukturiert sein:

**OFLAG** ohne/mit Operatorsplitting (siehe Kap. 5)

**WFLAG** adiabate/nicht adiabate Wand (siehe Kap. 5)

**KWFLAG** voll/nicht katalytische Wand (siehe Kap. 5)

**GFLAG** ebene/rotations–/achsensymmetrische Strömung (siehe Kap. 5)

**NSFLAG** ohne/mit Reibung, Diffusion und Wärmeleitung (siehe Kap. 5)

**CFLAG** chemisch und thermisch gefrorenes Gas/chemisches und thermisches Nichtgleichgewicht (siehe Kap. 5)

**RFLAG**$(i)$ Randtyp des Randes $\Gamma_i$, $i = 1, 4$ (siehe Kap. 5)

**KFLAG**$(i)$ fester Körperrand oder freier Strömungsrand des Randes $\Gamma_i$, $i = 1, 4$ (siehe Kap. 5)

**PFLAG** ohne/mit Überprüfung auf positiven Druck (siehe Kap. 5)

**ENTRINP** Dateiname für Tabellierung von $\tilde{e}_i^{TR}(T^1) := (e_i^{tr}(T^1) + e_i^{rot}(T^1))\, M_i/RT^1$

**ENVINP** Dateiname für Tabellierung von $\tilde{e}_i^{vib}(T_i^{vib}) := e_i^{vib}(T_i^{vib})M_i/RT_i^{vib}$

**ENEINP** Dateiname für Tabellierung von $\tilde{e}_i^{el}(T_i^{el}) := e_i^{el}(T_i^{el})M_i/RT_i^{el}$

**CVVINP** Dateiname für Tabellierung von $\tilde{c}_{v,i}^{vib}(T_i^{vib}) := c_{v,i}^{vib}(T_i^{vib})M_i/R$

**CVEINP** Dateiname für Tabellierung von $\tilde{c}_{v,i}^{el}(T_i^{el}) := c_{v,i}^{el}(T_i^{el})M_i/R$

**MUINP** Dateiname für Tabellierung von $\mu_i(T^1)$

**BDINP** Dateiname für Tabellierung von $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T^1) := p\mathcal{D}_{ij}$

**AKINP** Dateiname für Tabellierung von $\tilde{K}_g^i(\ln T^1) := \ln\left(K_g^i(\ln T^1)\right)$

**POLGRA** Rekonstruktionsordnung

**NSTEPS** Anzahl der zu berechnenden Zeitschritte

**DELTAT** Zeitschrittweite

**DATZWI** Dateiname für Zwischenspeicherung der Daten

**ZSTEPS** Anzahl der Zeitschritte, nach denen die Daten zwischengespeichert werden sollen

**SSTEPS** Anzahl der Zeitschritte, nach denen überprüft werden soll, ob die Strömung stationär ist

**GITTER** Dateiname für Gitter

**DATINP** Dateiname für Eingabedaten

**DATOUT** Dateiname für Ausgabedaten

**REFQUA** Dateiname für Anströmungsgrößen

## 4.3 INITIAL

Nach der Eingabe der strömungsspezifischen Parameter erfolgt die Initialisierung der zur Laufzeit benötigten konstanten Größen. Diese wird über die Routine **INITIAL** gesteuert. Sie erfolgt in der nachstehenden Reihenfolge:

**DATINI**

Einlesen des Gitters und der Strömungsdaten (Bilanzgrößen), d.h. Vorbelegung der Variablen (siehe Kap. 5.2 und 7.2):

**MZAHLX**, **MZAHLY**

$\mathbf{GRID}(j,k,i)$ $\quad j=-2,\mathbf{MZAHLX}+1, \quad k=-2,\mathbf{MZAHLY}+1, \quad i=1,2$

$\mathbf{MW}(j,k,i)$ $\quad j=-1,\mathbf{MZAHLX}+1, \quad k=-1,\mathbf{MZAHLY}+1, \quad i=1,\mathbf{DIMMAX}$

$\mathbf{MWRHO}(j,k,i)$ $\quad j=-1,\mathbf{MZAHLX}+1, \quad k=-1,\mathbf{MZAHLY}+1, \quad i=1,\mathbf{IMAX}$

**PHYINI**

Einlesen der Koeffizienten der Tabellierung von $\tilde{e}_i^{TR}(T^1)$, $\tilde{e}_i^{vib}(T_i^{vib})$, $\tilde{e}_i^{el}(T_i^{el})$, $\tilde{c}_{v,i}^{vib}(T_i^{vib})$, $\tilde{c}_{v,i}^{el}(T_i^{el})$, $\mu_i(T^1)$, $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T^1)$ und $\tilde{K}_g^i(\ln T^1)$, d.h. Vorbelegung der Variablen (siehe Kap. 7.6):

$\mathbf{W}(i), \quad i=1,\mathbf{IMAX}$

$\mathbf{FENTH}(i), \quad i=1,\mathbf{IMAX}$

$\mathbf{IEATR}(i), \quad i=1,\mathbf{IMAX}$

$\mathbf{TMIN}(i)$, $\mathbf{TMAX}(i)$, $\mathbf{DTP}(i)$, $\mathbf{JANZ}(i), \quad i=1,2$

$\mathbf{IEA}(l,j,k,i), \quad l=1,4\ ,\ j=1,\mathbf{IMAX}\ ,\ k=1,\mathbf{JANZ}(i)\ ,\ i=1,2$

$\mathbf{CVA}(l,j,k,i), \quad l=1,4\ ,\ j=1,\mathbf{IMAX}\ ,\ k=1,\mathbf{JANZ}(i)\ ,\ i=1,2$

**TMINMU**, **TMAXMU**, **DTPMU**, **JANZMU**

$\mathbf{MUA}(l,j,k), \quad l=1,5\ ,\ j=1,\mathbf{IMAX}\ ,\ k=1,\mathbf{JANZMU}$

**TMINBD**, **TMAXBD**, **DTPBD**, **JANZBD**

$\mathbf{BDA}(l,i,j,k), \quad l=1,5\ ,\ i,j=1,\mathbf{IMAX}\ ,\ k=1,\mathbf{JANZBD}$

**TMINAK**, **TMAXAK**, **DTPAK**, **JANZAK**

**AKOEFF**$(l,j,k)$, $l = 1,4$ , $j = 1,$**IMAX** , $k = 1,$**JANZAK**

**REFINI**

Einlesen der Anströmungsgrößen (siehe Kap. 7.1):

**XREF**$(i)$ $i = 1,$**IMAX**

**EREF**$(\alpha)$ $\alpha = 2,$**TKMAX**

**RHOREF**, **MREF**, **NREF**, **PREF**, **TREF**, **REREF**

**TWALL**$(i)$ (falls **NSFLAG**$= 1$, **WFLAG**$= 1$, **KFLAG**$(i) = 1$), $i = 1,4$

**XWALL**$(i)$ (falls **NSFLAG**$= 1$, **KWFLAG**$= 0$), $i = 1,$**IMAX**

**NETINI**

Initialisierung der gitterabhängigen Größen (siehe Kap. 7.3):

1. Normale in den Zellrandmittelpunkten (**NORMAL**)
   **NXI**$(j,k,i)$ $j = -1,$**MZAHLX**, $k = -1,$**MZAHLY**$+1$, $i = 1,2$
   **NETA**$(j,k,i)$ $j = -1,$**MZAHLX**$+1$, $k = -1,$**MZAHLY**, $i = 1,2$
2. Flächeninhalt der einzelnen Zellen (**VOLUME**)
   **VOL**$(j,k)$ $j = -1,$**MZAHLX**$+1$, $k = -1,$ **MZAHLY**$+1$
3. Bogenlänge der Zellkanten (**ARCLEN**)
   **ARCXI**$(j,k)$ $j = -1,$**MZAHLX**, $k = 0,$**MZAHLY**
   **ARCETA**$(j,k)$ $j = 0,$**MZAHLX**, $k = -1,$**MZAHLY**$+1$

**REKINI**

Initialisierung der für die Rekonstruktion benötigten Größen, hier: Berechnung der Stützstellen auf den eindimensionalen parametrisierten Kurven entlang denen rekonstruiert wird (siehe Kap. 7.4):

**MPKXI**$(j,k)$ $j = -$**NMAX**,**MZAHLX** + **NMAX**, $k = 0,$**MZAHLY**

**MPKETA**$(j,k)$ $j = 0,$**MZAHLX**, $k = -$**NMAX**,**MZAHLY** + **NMAX**

## 4.4 CHEMIE

Soll chemisches und thermisches Nichtgleichgewicht modelliert werden (**CFLAG**$= 1$), so müssen die chemischen Produktionsraten und die thermischen Austauschraten berechnet werden. Diese beschreiben die zeitliche Änderung der Partialdichten und der Energien zu den Nichtgleichgewichtstemperaturen gemäß der chemischen Produktion bzw. der Austauschprozesse zwischen den Freiheitsgraden. Dies geschieht in der Routine **CHEOME**. Dazu werden die drei folgenden Schritte ausgeführt:

**MWQUAN**

Berechnung der Massenbrüche $Y_i$, der Bindungsenergie $\sum Y_i e_i^0$, der Temperaturen $T^\alpha$, des Druckes $p$ und der inneren Energie $e^{NG}$ bezüglich der Temperaturen $T^\alpha$,

$\alpha \neq 1$ zu den Mittelwerten der Zellen im Strömungsgebiet **und** auf dem Rand sowie Abspeichern der alten Erhaltungsgrößen (siehe Kap. 7.2):

| | | |
|---|---|---|
| **MWX**$(j,k)$ | $j = -1$,**MZAHLX**+1, | $k = -1$,**MZAHLY**+1 |
| **MWFE**$(j,k)$ | $j = -1$,**MZAHLX**+1, | $k = -1$,**MZAHLY**+1 |
| **MWENG**$(j,k)$ | $j = -1$,**MZAHLX**+1, | $k = -1$,**MZAHLY**+1 |
| **MWT**$(j,k,\alpha)$ | $j = -1$,**MZAHLX**+1, | $k = -1$,**MZAHLY**+1, $\alpha = 1$,**TKMAX** |
| **MWP**$(j,k)$ | $j = -1$,**MZAHLX**+1, | $k = -1$,**MZAHLY**+1 |
| **MWALT**$(j,k)$ | $j = -1$,**MZAHLX**+1, | $k = -1$,**MZAHLY**+1 |

**CHEOME**

Berechnung der chemischen Produktionsraten $s_i$ zu den Zellen $\{V_{j,k}\}_{j=0,\mathbf{MZAHLX}}$ entlang der Kurven $k = 0$,**MZAHLY**:

**QUELLE**$(j,k,i)$ $j = 0$,**MZAHLX**, $k = 0$,**MZAHLY**, $i = 1$,**IMAX**

Berechnung der thermischen Austauschraten $\Omega^\alpha$ zu den Zellen $\{V_{j,k}\}_{j=0,\mathbf{MZAHLX}}$ entlang der Kurven $k = 0$,**MZAHLY**:

**VQUELL**$(j,k,\alpha)$ $j = 0$,**MZAHLX**, $k = 0$,**MZAHLY**, $\alpha = 2$,**TKMAX**

Näheres zu dieser Routine findet man in Kap. 6.4.1.

**EULER**

Falls der Quellterm der chemischen Produktionsraten und der thermischen Austauschraten von den übrigen Gleichungen gesplittet werden soll (**OFLAG**$=1$), dann werden die Partialdichten und die Energien im thermischen Nichtgleichgewicht zu jeder Zelle **im** Strömungsgebiet mittels eines expliziten Eulerschrittes aufdatiert:

| | | | |
|---|---|---|---|
| **MWRHO**$(j,k,i)$ | $j = 0$,**MZAHLX**, | $k = 0$,**MZAHLY**, | $i = 1$,**IMAX** |
| **MWE**$(j,k,\alpha)$ | $j = 0$,**MZAHLX**, | $k = 0$,**MZAHLY**, | $\alpha = 2$,**TKMAX** |

## 4.5 CFD

Das Kernstück des Programms bildet die Berechnung der Strömung, d.h. die Diskretisierung von (42). Diese wird von der Prozedur **CFD** gesteuert und gliedert sich im wesentlichen in die Berechnung von (46) und (47). Die Struktur ist in einem Flußdiagramm (Abb. 7) dargestellt.

**BOUND**

Berechnung der Bilanzgrößen (2) in den Randzellen des Gitters;

**MWQUAN**

Berechnung der physikalischen Größen ($\sum Y_i e_i^0, \rho_i/\rho, T^1, \ldots, T^M, p, e^{NG}$) aus den Bilanzgrößen zum alten Zeitpunkt $t = t_n$, und Abspeichern der alten Erhaltungsgrößen;

**REKON**

Berechnung der Rekonstruktion entlang der Kurven in $\xi$-Richtung – Kurve $\boldsymbol{z}_k(\xi)$ – und in $\eta$-Richtung – Kurve $\boldsymbol{z}_j(\eta)$ – über die einparametrige RP-Methode ([3], S. 33 ff.), und Auswertung der Polynome in den Zellrandmittelpunkten;

**FLINV**

Lösung der Riemannprobleme in den Zellrandmittelpunkten entlang der Kurven $\boldsymbol{z}_k(\xi)$ und $\boldsymbol{z}_j(\eta)$ mittels des Riemannlösers von Liu und Vinokur [15], und Berechnung des reibungsfreien numerischen Flusses (60);

**FLVIS** (optional, falls viskose Effekte modelliert werden sollen)

Berechnung der viskosen Flüsse (5) und optional – bei einer rotationssymmetrischen Rechnung – des Quellterms (68) über zentrale Differenzen (64), (65);

**MWSTEP**

Berechnung der Mittelwerte $\widehat{\boldsymbol{u}^{21}}$ (49a), $\widehat{\boldsymbol{u}^{22}}$ (49b) bzw. $\widehat{\boldsymbol{u}^{23}}$ (49c), sowie optional – bei einer rotationssymetrischen Rechnung – die Berechnung des Quellterms (66) und des Mittelwertes $\widehat{\boldsymbol{u}^{23}}$ (49c);

**TEST**

Überprüfung (optional), ob aus den Mittelwerten auf dem neuen Zeitniveau keine negativen Drücke resultieren und eventuell erforderliche Korrekturmaßnahmen;

Überprüfung, ob Strömung stationär ist über zeitliche Änderung der Erhaltungsgrößen $(\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E)^T$ in einer Zelle;

### 4.5.1 BOUND

Aufgrund der Verwendung von strukturierten Gittern setzt sich der Rand des Diskretisierungsgebietes aus vier Teilstücken zusammen:

$$\begin{aligned}
\Gamma_1 &:= \{\boldsymbol{x}(\mathbf{MZAHLX}+1, k) | k = 0, \mathbf{MZAHLY}\}, \\
\Gamma_2 &:= \{\boldsymbol{x}(j, \mathbf{MZAHLY}+1) | j = 0, \mathbf{MZAHLX}\}, \\
\Gamma_3 &:= \{\boldsymbol{x}(-1, k) | k = 0, \mathbf{MZAHLY}\}, \\
\Gamma_4 &:= \{\boldsymbol{x}(j, -1) | j = 0, \mathbf{MZAHLX}\}
\end{aligned}$$

und den vier Endpunkten

$$\begin{aligned}
E_{12} &:= \boldsymbol{x}(\mathbf{MZAHLX}+1, \mathbf{MZAHLY}+1), \\
E_{23} &:= \boldsymbol{x}(-1, \mathbf{MZAHLY}+1), \\
E_{34} &:= \boldsymbol{x}(-1, -1), \\
E_{41} &:= \boldsymbol{x}(\mathbf{MZAHLX}+1, -1).
\end{aligned}$$

Da das Verfahren auf dem Dimensionssplitting beruht, wird auf die Endpunkte $E_{jk}$ nur bei der Diskretisierung von (54), (56) zugegriffen.
Bei der Berechnung der Randdaten muß grundsätzlich unterschieden werden zwischen

- einem freien Strömungsrand und
- einer festen Wand.

Da die Modellierung der Ränder wesentlich das zu simulierende Strömungsproblem bestimmt, z.B.

- Staupunktströmung
- Stoßwellenkanal
- Düsenströmung, etc ,

wurde den vier Rändern kein bestimmter Randtyp zugeordnet, sondern der Benutzer kann diese über den Flag **RFLAG**($i$), $i = 1, 4$, frei wählen. Dadurch können unterschiedliche Problemstellungen mit dem Programm simuliert werden. Der Benutzer kann zwischen den folgenden Randtypen wählen:

**HYPIN** (hypersonischer Inflow)

hier werden die Anströmdaten als Randdaten verwendet; dies ist nur dann physikalisch sinnvoll, wenn die Strömung hypersonisch ist.

**HYPOUT** (hypersonischer Outflow)

hier werden die Daten vom Strömungsgebiet auf den Rand fortgesetzt; dies ist nur dann physikalisch sinnvoll, wenn die Strömung hypersonisch ist.

**WALLS** (Haftbedingung an der Wand)

$\boldsymbol{v}_W = 0$

$T^1_W = \text{const.}$ (**WFLAG**= 1) oder $\dfrac{\partial T^1}{\partial \boldsymbol{N}} = 0$ (**WFLAG**= 0)

$\dfrac{\partial p}{\partial \boldsymbol{N}} = 0$ oder $\dfrac{\partial p}{\partial \boldsymbol{N}}$ gemäß [3], S. 72

$\dfrac{\partial Y_i}{\partial \boldsymbol{N}} = 0$ (**KWFLAG**= 1) oder $Y_{i,W} = \text{const.}$ (**KWFLAG**= 0), $i = 1,$**IMAX**

$\dfrac{\partial T^\alpha}{\partial \boldsymbol{N}} = 0$, $\alpha = 2,$**TKMAX**

**WALLV** (Gleitbedingung)

Berechnung der Zustände an der Wand über eine isotrope Expansions– bzw. Kompressionswelle derart, daß gilt (vgl. [3], S. 69 ff):

$$v^N_W = 0$$

**WALLR** (Reflexionsbedingung)

Berechnung der Wanddaten durch Reflexion des Massenflusses, d.h. (vgl. [3], S. 71):

$$v^N_W = -\boldsymbol{v}_W \cdot \boldsymbol{N}$$

**SYMROT** (Rotationsachse)

Spiegelung der Daten an der Rotationsachse (hier nur $\Gamma_3$, d.h. $x_2 = 0$)

$$\begin{aligned}
\rho_i(x_1, x_2) &= \rho_i(x_1, -x_2), \ i = 1, \dots, \mathbf{IMAX} \\
E(x_1, x_2) &= E(x_1, -x_2) \\
\epsilon^\alpha(x_1, x_2) &= \epsilon^\alpha(x_1, -x_2), \ \alpha = 2, \dots, \mathbf{TKMAX} \\
v_1(x_1, x_2) &= v_1(x_1, -x_2) \\
v_2(x_1, x_2) &= -v_2(x_1, -x_2)
\end{aligned}$$

**SYMACH** (Symmetrieachse)

analog zu **SYMROT**, man beachte aber, daß sich in Abhängigkeit von **GFLAG** die Gitterstruktur ändert (siehe Kap. 5.2.1).

Die Parameterübergabe ist bei allen Routinen identisch:

**XIMIN**
**ETAMIN** } 1. Punkt der Randkurve

**NORMAL** Gibt die Richtung der inneren Normale des Randpunktes an in Relation zur Kurve von der die Wanddaten abgetragen werden sollen ((1) für $\Gamma_1, \Gamma_3$ bzw. (-1) für $\Gamma_2, \Gamma_4$)

**ANZ** Anzahl der zu berechnenden Randdaten

**XI** Randzellen liegen auf $\xi$-Kurve (1), sonst (0)

**ETA** Randzellen liegen auf $\eta$-Kurve (1), sonst (0)

Nur bei der Routine **WALLS** muß zusätzlich noch die Nummer **NR** des Randes $\Gamma_i$, $i = 1, 4$ mitübergeben werden.
Die Berechnung der Randdaten erfolgt in der Routine **BOUND** in vier Schritten:

**PRABOU**

Vorbesetzung von gewissen Randzellen, um bei der Berechnung der Randdaten auf vorbesetzte Werte zuzugreifen;

**RANDDATEN**

Berechnung der Randdaten bezüglich des gewählten Randtyps (siehe **RFLAG**);

**EPIBOU**

Belegung der Eckzellen;

**REKBOU**

Randwerte zur Berechnung der Rekonstruktion von Ordnung $> 1$.

### 4.5.2 MWQUAN

In jeder Zelle werden außer den Mittelwerten der Bilanzgrößen $\rho_i, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ noch andere physikalische Größen benötigt, auf die in einem Zeitschritt wiederholt zugegriffen wird. Diese werden aus den Erhaltungsgrößen auf dem alten Zeitniveau zu jeder Zelle im Strömungsgebiet und auf dem Rand berechnet. Zur Charakterisierung aller Größen, die sich auf die Mittelwerte einer Zelle zum alten Zeitniveau beziehen, haben die Namen der Variablen die Struktur
**MW**$*$ (z.B. MW, MWRHO, MWX, MWT, MWFE, MWP, MWENG).
In der Routine **MWQUAN** sind alle benötigten Größen zusammengefaßt:

**MWMFRA**

Berechnung der Massenbrüche $Y_i := \rho_i/\rho$, $i = 1,$**IMAX**

**MWENTH**

Berechnung der Bindungsenergie $\sum\limits_{i=1}^{\mathbf{IMAX}} Y_i e_i^0$

**MWIENG**

Berechnung der inneren Energie zu den Temperaturen im thermischen Nichtgleichgewicht

$$e^{NG} = \sum_{\alpha=2}^{\mathbf{TKMAX}} \sum_{\substack{i=i(\alpha)\\ m=m(\alpha)}} e_i^m(T^\alpha)$$

**MWTEMP**

Berechnung der Temperaturen $T^\alpha$ aus

$$\begin{aligned} e^{GG} &= e^{GG}(T^1) \quad \text{bzw.} \\ \epsilon^\alpha &= \epsilon^\alpha(T^\alpha)\,, \qquad \alpha = 2, \mathbf{TKMAX} \end{aligned}$$

**MWPRES**

Berechnung des Druckes $p = \rho R T^1 \sum\limits_{i=1}^{\mathbf{IMAX}} Y_i/M_i$

**MWALT**

Erhaltungsgrößen $(\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E)$ auf dem alten Zeitniveau

### 4.5.3 REKON

Das Ziel der Routine **REKON** ist die Rekonstruktion der Bilanzgrößen $\rho_1, \ldots, \rho_{\mathbf{IMAX}}, \rho\boldsymbol{v}$, $\rho E, \epsilon^2, \ldots, \epsilon^M$ aus den gegebenen Mittelwerten und der Bestimmung der Riemannprobleme in den Zellrandmittelpunkten (siehe (61),(62)). Zur Reduzierung des Aufwandes werden jedoch nur die Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ rekonstruiert. Zur Rekonstruktion der Partialdichten $\rho_i$ und der Nichtgleichgewichtsenergien $\epsilon^\alpha$ wird angenommen, daß die Zusammensetzung in jeder Zelle lokal gefroren ist. Dann ergibt sich:

$$\begin{aligned} R(\cdot,\rho_i) &= Y_i \cdot R(\cdot,\rho) \qquad \text{bzw.} \\ R(\cdot,\epsilon^\alpha) &= \frac{\epsilon^\alpha}{\rho} R(\cdot,\rho), \qquad \alpha = 2, \mathbf{TKMAX}\ . \end{aligned}$$

Der Rekonstruktionsaufwand ist somit unabhängig von der Anzahl der Komponenten des Gasgemisches. Eine weitere Vereinfachung besteht darin, daß keine zweidimensionale Rekonstruktion berechnet wird, sondern die Größen nur entlang einer eindimensionalen Parameterkurve $\boldsymbol{z}_k(\xi) := \boldsymbol{x}(\xi, k-1/2)$ bzw. $\boldsymbol{z}_j(\eta) := \boldsymbol{x}(j-1/2, \eta)$ rekonstruiert werden. Dies ist in [3], Kap. 2.2, 2.3 und 3.2 ausführlich beschrieben. Das Kernstück der eindimensionalen Rekonstruktion bildet die Routine **KOMREK**. In ihr wird die komponentenweise RP–Rekonstruktion der Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ entlang einer Parameterkurve berechnet. Diese setzt sich aus drei Schritten zusammen:

- Berechnung der ENO–Interpolationspolynome der Stammfunktion $W$ (siehe [3], Kap. 2.2 und 3.2) in Newtondarstellung zu jeder Zelle;
- Taylorentwicklung der Interpolationspolynome um die Zellrandmittelwerte (siehe [14]);
- Ableiten der Interpolationspolynome ergibt die gesuchte Rekonstruktion.

In einem zweiten Schritt werden die Riemannprobleme (61) durch Taylorentwicklung von $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{z}_k(\xi), t_{n+1/2})$ bzw. $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{z}_j(\eta), t_{n+1/2})$ um den Punkt $(\boldsymbol{z}_k(\xi_{j+1/2}), t_n)$ bzw. $(\boldsymbol{z}_j(\eta_{k+1/2}), t_n)$ ermittelt (vgl. [3], Kap. 3.3). Dies wird über die Routine **TSTATE** gesteuert:

**HORN$*$**

Berechnung der $i$-ten Ableitung der Rekonstruktionspolynome in dem linken bzw. rechten Zellrand;

**JACOBI**

Berechnung des Druckes $p$ sowie der Ableitung des Druckes, des Flusses $\boldsymbol{F}_1^I$ (vgl. 4)) und des Flusses $\boldsymbol{F}_2^I$ (vgl. 4)) für gefrorenes Gas nach den Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$;

**TAYLOR**

Berechnung der Koeffizienten der Taylorentwicklung (vgl. [3], Kap. 3.3);

**STATE$*$**

Berechnung der Zustände der Riemannprobleme im linken bzw. rechten Zellrand.

Hierbei steht $*$ für **L** bzw. **R**.
Die Berechnung der Rekonstruktion und der Riemannprobleme entlang einer Parameterkurve wird über die übergeordnete Routine **REKON** gesteuert:

**REK∗∗**

Rekonstruktion entlang der Kurve $\boldsymbol{z}_k(\xi)$ bzw. $\boldsymbol{z}_j(\eta)$;

**STA∗∗**

Berechnung der Riemannprobleme in den Zellrändern entlang der Kurve $\boldsymbol{z}_k(\xi)$ bzw. $\boldsymbol{z}_j(\eta)$.

Hier steht ∗∗ für XI bzw. ETA.
Es bleibt dem Benutzer des Programms freigestellt, andere Rekonstruktionsarten zu implementieren (siehe z.B. [14]). Es muß nur darauf geachtet werden, daß nach Verlassen der Routine **REKON** die Variablen **UL**∗∗ bzw. **UR**∗∗ mit den Zuständen links und rechts eines Zellrandmittelpunktes besetzt sind.
Zur besseren Vektorisierung und somit kürzeren Rechenzeiten wurden drei Routinen implementiert, in denen die RP–Rekonstruktion wie oben beschrieben in Abhängigkeit der Rekonstruktionsordnung durchgeführt wird. Die unterschiedlichen Versionen stehen in den Files

**REKON1.F** Rekonstruktion von Ordnung $N = 1$

**REKON2.F** Rekonstruktion von Ordnung $N = 2$

**REKONN.F** Rekonstruktion von beliebiger Ordnung $N \geq 1$

Für eine schnelle Simulationsrechnung empfiehlt sich $N = 1$, da hier keine Rekonstruktion durchgeführt werden muß. In diesem Fall ist die Rekonstruktion in einer Zelle identisch mit dem Zellmittelwert (Godunov – Verfahren).

### 4.5.4 FLINV

In den Zellrandmittelpunkten müssen Riemannprobleme gelöst werden. Die Anfangszustände ergeben sich durch Auswertung der Rekonstruktionspolynome zu den benachbarten Zellen in diesem Punkt. Es interessiert hier nicht der Zwischenzustand $\tilde{\boldsymbol{u}}$ in einem Punkt, sondern der Fluß über den Zellrand in Normalenrichtung, also $\boldsymbol{F}^I_{\boldsymbol{N}}(\tilde{\boldsymbol{u}}) := \left(\boldsymbol{F}^I_1(\tilde{\boldsymbol{u}}), \boldsymbol{F}^I_2(\tilde{\boldsymbol{u}})\right) \boldsymbol{N}$.
Die Berechnung dieser Größe wird über die Routine **FLINV** gesteuert:

**RPN**

Berechnung aller reibungsfreien Flüsse über den Zellrand innerhalb des Strömungsbereiches und dem Rand

**FIBOU**

Berechnung aller reibungsfreien Flüsse über die Zellränder des Diskretisierungsrandes außer auf der Symmetrieachse

**ROELSG**

Berechnung der Lösung der eindimensionalen Riemannprobleme in Normalenrichtung

#### 4.5.4.1 RPN

In dieser Routine werden alle numerischen reibungsfreien Flüsse in Normalenrichtung (siehe (55)) in den Zellrandmittelpunkten

$$\begin{array}{llll} \boldsymbol{P}_4^{j,k}, & j=-1,\mathbf{MZAHLX}, & k=0,\mathbf{MZAHLY}, & (\xi\text{–Parameterkurve) bzw.} \\ \boldsymbol{P}_1^{j,k}, & j=0,\mathbf{MZAHLX}, & k=-1,\mathbf{MZAHLY}, & (\eta\text{–Parameterkurve)} \end{array}$$

bestimmt (vgl. Abb. 1).
Die Richtung der Parameterkurven wird über die Parameterliste gesteuert.

**Input:**

| | |
|---|---|
| **XI** | Lösung aller Riemannprobleme entlang der Parameterkurve in $\xi$–Richtung (1), sonst (0) |
| **ETA** | Lösung aller Riemannprobleme entlang der Parameterkurve in $\eta$–Richtung (1), sonst (0) |
| **JDIM** | maximale Anzahl von Punkten in $\xi$–Richtung |
| **KDIM** | maximale Anzahl von Punkten in $\eta$–Richtung |
| **URPL**$(j,k,i)$ | $j=1$,**JDIM**, $k=1$,**KDIM**, $i=1$,**DIMMAX** rechter Zustand der Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ im Punkt $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ bzw. $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ |
| **URPR**$(j,k,i)$ | $j=1$,**JDIM**, $k=1$,**KDIM**, $i=1$,**DIMMAX** linker Zustand der Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ im Punkt $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ bzw. $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ |
| **JU** | erster Punkt in $\xi$–Richtung |
| **JO** | letzter Punkt in $\xi$–Richtung |
| **KU** | erster Punkt in $\eta$–Richtung |
| **KO** | letzter Punkt in $\eta$–Richtung |
| **ARC**$(j,k)$ | $j=1$,**JDIM**, $k=1$,**KDIM** Länge des Zellrandes, über den das Riemannproblem gelöst wird |
| **N**$(j,k,i)$ | $j=1$,**JDIM**, $k=1$,**KDIM**, $i=1,2$ Normalenrichtung, in der das Riemannproblem gelöst werden soll |

**Output:**

| | |
|---|---|
| **NFL**$(j,k,i)$ | $j=1$,**JDIM**, $k=1$,**KDIM**, $i=1$,**DIMMAX** reibungsfreier numerischer Fluß $\boldsymbol{F}_N^I$ in Normalenrichtung $\boldsymbol{N}$ der Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ (vgl. (60)) |
| **CNF**$(j,k,i)$ | $j=1$,**JDIM**, $k=1$,**KDIM**, $i=1$,**DIMMAX** reibungsfreier numerischer Fluß $\boldsymbol{F}_N^I$ in Normalenrichtung $\boldsymbol{N}$ der Größen $(\rho_1,\ldots,\rho_{\mathbf{IMAX}})$ (vgl. (60)) |
| **VNF**$(j,k,\alpha)$ | $j=1$,**JDIM**, $k=1$,**KDIM**, $\alpha=2$,**TKMAX** reibungsfreier numerischer Fluß $\boldsymbol{F}_N^I$ in Normalenrichtung $\boldsymbol{N}$ der Größen $\epsilon^2,\ldots,\epsilon^{\mathbf{TKMAX}}$ |

#### 4.5.4.2 FIBOU

Hier werden alle Flüsse in Normalenrichtung zu den Zellrändern, die auf dem Rand des Diskretisierungsbereiches liegen, berechnet. Dazu werden die in **BOUND** berechneten Werte in den Fluß $\boldsymbol{F}^I_{\mathbf{N}}$ eingesetzt. Dies gilt jedoch nicht, falls der Rand eine Symmetrieachse ist. In diesem Fall wird dort ein Riemannproblem gelöst (siehe **RPN**).
Die Berechnung erfolgt über jeden Zellrand getrennt. Der Rand wird über eine zu den Randroutinen aus Kap. 4.5.1 identischen Parameterliste gesteuert.

#### 4.5.4.3 ROELSG

In dieser Routine erfolgt die eigentliche Berechnung der Lösung der Riemannprobleme und der Auswertung der reibungsfreien Flüsse in Normalenrichtung (siehe (51)). Dies geschieht jeweils für eine **einzige** Parameterkurve. Letztere wird in **RPN** festgelegt. Von dort erfolgt auch der Aufruf des Riemannlösers. Die Übergabe der Anfangszustände erfolgt über die folgende Parameterliste:

**Input:**

| | |
|---|---|
| **U**$*(l,i)$ | $l = 1$,**DIM**, $i = 1,3$ Zustand $*$ der Größen $\rho\boldsymbol{v}, \rho E$ |
| **RHO**$*(l)$ | $l = 1$,**DIM** Zustand $*$ der Gesamtdichte $\rho$ |
| **X**$*(l,i)$ | $l = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX** Zustand $*$ der Massenbrüche $Y_i$ |
| **ENG**$*(l,\alpha)$ | $l = 1$,**DIM**, $\alpha = 2$,**TKMAX** Zustand $*$ der volumenspezifischen inneren Energien $\epsilon^\alpha$ |
| **NORM**$*(l,i)$ | $l = 1$,**DIM**, $i = 1,2$ Normalenrichtung, in der das Riemannproblem gelöst werden soll |
| **DIM** | Anzahl der zu lösenden Riemannprobleme |

Der Platzhalter $*$ steht für den linken (**L**) bzw. rechten (**R**) Zustand.

**Output:**

| | |
|---|---|
| **F**$*(j,i)$ | $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX**+2+**TKMAX** reibungsfreier Fluß in Normalenrichtung gemäß (51) |

Zur Zeit existieren zwei Riemannlöser, die auf dem Ansatz von Liu und Vinokur [15] basieren. Diese stehen in den Dateien:

**LVCTNG5.F**

Riemannlöser gemäß [15] für chemisches und thermisches Nichtgleichgewicht. Hier wird das Riemannproblem approximativ für die Größen $\rho_1, \ldots, \rho_{\mathbf{IMAX}}, \rho\boldsymbol{v}, \rho E, \epsilon^2$, $\ldots$, $\epsilon^{\mathbf{TKMAX}}$ gelöst. Diese Routine ist jedoch nur für ein 5-Komponenten-Gasgemisch implementiert.

**LVCTNG2.F**

Analog zu **LVCTNG5.F**, jedoch für ein 2-Komponenten Gasgemisch

**LVFRO.F**

Riemannlöser gemäß [17] für gefrorenes Gas als Vereinfachung von [15]. Das Riemannproblem wird approximativ für die Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ gelöst. Die Flüsse in den Partialdichten $\rho_i$ und den volumenspezifischen inneren Energien $\epsilon^\alpha$ ergeben sich aus den Massenbrüchen $Y_i$ bzw. den Energien $\epsilon^\alpha$ des linken bzw. rechten Zustandes und dem approximativen Fluß in $\rho$. Hier ist die Anzahl der Komponenten des Gasgemisches nicht eingeschränkt.

Vor dem Programmstart muß der Benutzer eine der Alternativen auswählen und in die Datei **ROELSG.F** kopieren und das Programm durch Aufruf der MAKE–Datei **nsctng2.m** neu übersetzen (siehe auch Kap. 10).

### 4.5.5 FLVIS

Im Falle einer reibungsbehafteten Strömung (**NSFLAG** = 1) muß in den Zellrandmittelpunkten der viskose Fluß $\boldsymbol{F}^V_{\boldsymbol{N}}$ in Normalenrichtung $\boldsymbol{N}$ gemäß (52) berechnet werden. Dies geschieht analog zur Routine **FLINV** für die Punktemengen $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$, $j = 0, \mathbf{MZAHLX}$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY}$ bzw. $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$, $j = -1, \mathbf{MZAHLX}$, $k = 0, \mathbf{MZAHLY}$ getrennt; erstere liegen alle auf Parameterkurven in $\eta$–Richtung, letztere auf solchen in $\xi$–Richtung. Dabei wird zwischen solchen Punkten, die in der Strömung liegen und solchen auf einer festen Körperwand, unterschieden:

**VFLPAR**

Berechnung aller viskosen Flüsse in den Zellrandmittelpunkten, die alle auf einer Parameterkurve in einer Richtung ($\xi$ bzw. $\eta$) liegen und nicht auf einer Körperwand;

**VFLWAL**

Berechnung aller viskosen Flüsse in den Zellrandmittelpunkten, die alle auf einer einzigen Parameterkurve in $\xi$– bzw. $\eta$–Richtung liegen und mit einer festen Körperwand zusammenfallen.

Falls die Strömung rotationssymmetrisch ist (**GFLAG** = 1), dann werden hier zusätzlich die Anteile **Q** des rotationsbedingten Quellterms $R^V$ (vgl. (41)) berechnet, der sich nicht als $\boldsymbol{F}_2^V/Y_2$ darstellen läßt, d.h.

$$\boldsymbol{Q} := \boldsymbol{R}^V - \Big(\boldsymbol{F}^V_{2,1}, \ldots, \boldsymbol{F}^V_{2,\mathbf{IMAX}}, 0, 0, \boldsymbol{F}^V_{2,\mathbf{IMAX}+3}, \boldsymbol{F}^V_{2,\mathbf{IMAX}+4}, \ldots, \boldsymbol{F}^V_{2,\mathbf{IMAX}+2+\mathbf{TKMAX}}\Big)^T . \tag{68}$$

Vergleicht man diese Differenz mit (41), so zeigt sich, daß nur drei Terme — für die Impuls– und die Energiegleichung — zu berechnen sind.
Dies geschieht von **VFLPAR** und **VFLWAL** aus, durch Aufruf der Routinen:

**RQVXI**

Berechnung von $\boldsymbol{Q}$ (vgl.(68)) in den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$, die auf Parameterkurven in $\xi$–Richtung liegen;

**RQVETA**

Berechnung von $\boldsymbol{Q}$ (vgl.(68)) in den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$, die auf Parameterkurven in $\eta$–Richtung liegen;

**RQWVXI**

Berechnung von $\boldsymbol{Q}$ (vgl.(68)) in den Zellrandmittelpunkten, die auf einer Parameterkurven in $\xi$–Richtung liegen und mit einer festen Wand zusammenfallen;

**RQWVETA**

Berechnung von $\boldsymbol{Q}$ (vgl.(68)) in den Zellrandmittelpunkten, die auf einer Parameterkurven in $\eta$–Richtung liegen und mit einer festen Wand zusammenfallen;

Diese stehen in der Datei **RQUELL.F**.

#### 4.5.5.1 VFLPAR

In dieser Routine werden die viskosen Flüsse $\boldsymbol{F}_i^V$ in den Punkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ bzw. $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ berechnet, die nicht auf dem Körperrand liegen. Die Punkte liegen dabei immer auf Parameterkurven in $\xi$–Richtung bzw. $\eta$–Richtung. Die Richtung wird über folgende Parameterliste gesteuert:

**Input:**

| | |
|---|---|
| **XI** | Berechnung aller viskosen Flüsse in den Punkten auf einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung (1), sonst (0) |
| **ETA** | Berechnung aller viskosen Flüsse in den Punkten auf einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung (1), sonst (0) |
| **JDIM** | maximale Anzahl von Punkten in $\xi$–Richtung |
| **KDIM** | maximale Anzahl von Punkten in $\eta$–Richtung |
| **JU** | erster Punkt in $\xi$–Richtung |
| **JOB** | letzter Punkt in $\xi$–Richtung |
| **KU** | erster Punkt in $\eta$–Richtung |
| **KOB** | letzter Punkt in $\eta$–Richtung |
| **ARC**$(j,k)$ | $j$ = 1,**JDIM**, $k$ = 1,**KDIM** Länge des Zellrandes, über den die Flüsse berechnet werden |
| **NORM**$(j,k,i)$ | $j$ = 1,**JDIM**, $k$ = 1,**KDIM**, $i = 1,2$ Normalenrichtung im Zellrandmittelpunkt, in dem die Flüsse berechnet werden sollen |

**Output:**

- **VF**$(j,k,i)$ $j$ = 1,**JDIM**, $k$ = 1,**KDIM**, $i$ = 1,**DIMMAX** viskoser Fluß in $x_1$–Richtung der Erhaltungsgrößen $(\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E)$
- **VG**$(j,k,i)$ $j$ = 1,**JDIM**, $k$ = 1,**KDIM**, $i$ = 1,**DIMMAX** viskoser Fluß in $x_2$–Richtung der Erhaltungsgrößen $(\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E)$
- **VFD**$(j,k,i)$ $j$ = 1,**JDIM**, $k$ = 1,**KDIM**, $i$ = 1,**IMAX** viskoser Fluß in $x_1$–Richtung der Partialdichten $\rho_i$
- **VGD**$(j,k,i)$ $j$ = 1,**JDIM**, $k$ = 1,**KDIM**, $i$ = 1,**IMAX** viskoser Fluß in $x_2$–Richtung der Partialdichten $\rho_i$
- **VFN**$(j,k,i)$ $j$ = 1,**JDIM**, $k$ = 1,**KDIM**, $i$ = 1,**TKMAX** viskoser Fluß in $x_1$–Richtung der inneren Energien $\epsilon^\alpha$, $\alpha$ = 2,**TKMAX**
- **VGN**$(j,k,i)$ $j$ = 1,**JDIM**, $k$ = 1,**KDIM**, $i$ = 1,**TKMAX** viskoser Fluß in $x_2$–Richtung der inneren Energien $\epsilon^\alpha$, $\alpha$ = 2,**TKMAX**

#### 4.5.5.2 VFLWAL

In Analogie zur Routine **VFLPAR** werden hier die entsprechenden viskosen Flüsse in den Punkten, die auf einer Körperwand liegen, berechnet. In diesen Punkten ergeben sich Änderungen in der Berechnung, die in der Haftbedingung, der Wanddiffusion und der Modellierung des Wärmeübergangs an der Wand begründet sind. Diesen Wandeffekten wird in der Routine **VFLWAL** Rechnung getragen.
Die Parameterliste ist identisch zu der von **VFLPAR**. Man beachte aber, daß vorher die Flüsse in allen Punkten entlang **aller** Parameterkurven in einer Richtung berechnet wurden. Dies entspricht einer zweidimensionalen Punktmenge. Hier werden jedoch die Flüsse in den Punkten entlang einer **einzigen** eindimensionalen Parameterkurve berechnet.
Diese werden über die Parameter **JU**, **JOB**, **KU**, **KOB** gesteuert:

| Richtung der Parameterkurve | Rand $\Gamma_i$ | **JU** | **JOB** | **KU** | **KOB** |
|---|---|---|---|---|---|
| $\xi$ | 1 | **MZAHLX** | **MZAHLX** | 0 | **MZAHLY** |
| $\eta$ | 2 | 0 | **MZAHLX** | **MZAHLY** | **MZAHLY** |
| $\xi$ | 3 | -1 | -1 | 0 | **MZAHLY** |
| $\eta$ | 4 | 0 | **MZAHLX** | -1 | -1 |

#### 4.5.5.3 RQVXI, RQVETA, RQWVXI, RQWVETA

Im Falle einer rotationssymmetrischen und reibungsbehafteten Strömung (**GFLAG** = 1, **NSFLAG** = 1) muß der Quellterm $\boldsymbol{R}^V$ (vgl. (67)) berechnet werden. Dieser setzt sich zusammen aus $\boldsymbol{F}_2^V/x_2$ und $\boldsymbol{Q}$ (vgl. (68)).

Während der erste Term in **VFLPAR** bzw. **VFLWAL** berechnet wird, muß der zweite Term zusätzlich berechnet werden. Dies geschieht in **RQV**$*$ bzw. **RQWV**$*$. Der Platzhalter $*$ steht dabei für die Richtung der Parameterkurven, also **XI** und **ETA**. Diese Routinen werden aus **VLFPAR** und **VFLWAL** aufgerufen. Dort werden schon die meisten, für die Berechnung von $\boldsymbol{Q}$ benötigten Größen berechnet, insbesondere die Transportkoeffizienten. Übergeben werden folgende Parameter:

**Input:**

| | |
|---|---|
| **XI** | Berechnung von $\boldsymbol{Q}$ in den Punkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ auf einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung (1), sonst (0) |
| **ETA** | Berechnung von $\boldsymbol{Q}$ in den Punkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ auf einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung (1), sonst (0) |
| **JDIM** | maximale Anzahl von Punkten in $\xi$–Richtung |
| **KDIM** | maximale Anzahl von Punkten in $\eta$–Richtung |
| **JU** | erster Punkt in $\xi$–Richtung |
| **JO** | letzter Punkt in $\xi$–Richtung |
| **KU** | erster Punkt in $\eta$–Richtung |
| **KO** | letzter Punkt in $\eta$–Richtung |
| **TPP**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** Translationstemperatur $T^1$ im Zellrandmittelpunkt |
| **XP**$(j, i)$ | $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX** molare Konzentration im Zellrandmittelpunkt |
| **UP**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** Geschwindigkeitskomponente in $x_1$–Richtung im Zellrandmittelpunkt |
| **VP**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** Geschwindigkeitskomponente in $x_2$–Richtung im Zellrandmittelpunkt |
| **VX**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** partielle Ableitung der Geschwindigkeitskomponente in $x_2$–Richtung nach der $x_1$–Richtung im Zellrandmittelpunkt |
| **TX**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** partielle Ableitung der Translationstemperatur $T^1$ nach der $x_1$–Richtung im Zellrandmittelpunkt |
| **TY**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** partielle Ableitung der Translationstemperatur $T^1$ nach der $x_2$–Richtung im Zellrandmittelpunkt |
| **DETA**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** Länge des Zellrandes |
| **DXI**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** Abstand zwischen den Zellmittelpunkten der an den Zellrand angrenzenden Zellen |
| **TAUXY**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** Scherspannungskoeffizient $\tau_{12}$ gemäß (7) im Zellrandmittelpunkt |
| **MUE**$(j)$ | $j = 1$,**DIM** Viskositätskoeffizient des Gasgemisches im Zellrandmittelpunkt |

**LK** Nummer der Parameterkurve in $\eta$–Richtung, auf der die Zellrandmittelpunkte liegen, entlang der $\boldsymbol{Q}$ bestimmt werden soll

**LJ** Nummer der Parameterkurve in $\xi$–Richtung, auf der die Zellrandmittelpunkte liegen, entlang der $\boldsymbol{Q}$ bestimmt werden soll

Der Parameter **LJ** wird jedoch nur an **RQVWXI** übergeben, sonst nur der Parameter **LK**.

### 4.5.6 MWSTEP

Zur Berechnung des Mittelwertes der Bilanzgrößen $\rho_1, \ldots, \rho_{\mathbf{IMAX}}, \rho\boldsymbol{v}, \rho E, \epsilon^2, \ldots, \epsilon^{\mathbf{TKMAX}}$ auf dem neuen Zeitniveau $t = t_n + \mathbf{DELTAT}$ müssen die Flüsse über den Zellgrenzen gemäß (57) aufaddiert werden. Dies geschieht für den reibungsfreien und den reibungsbehafteten Fluß separat in den Routinen **MWINV** und **MWVIS**:

**MWVIS**

Berechnung der numerischen viskosen Flüsse $\widehat{\boldsymbol{F}^V}_{\boldsymbol{N}}$ (54) aus den in **VFLPAR** und **VFLWAL** berechneten Flüsse in $x_1$– und $x_2$–Richtung sowie des Quellterms $\widehat{\boldsymbol{R}^V}$ (56) in den Zellrandmittelpunkten und anschließendes aufaddieren auf die alten Mittelwerte der Bilanzgrößen gemäß (57);

**MWINV**

Berechnung des Mittelwertes der Bilanzgrößen auf dem neuen Zeitniveau durch aufaddieren der numerischen inviskosen Flüsse $\widehat{\boldsymbol{F}^I}_{\boldsymbol{N}}$ (53) (siehe **FLINV**) und des Quellterms $\widehat{\boldsymbol{R}^I}$ (55) gemäß (57) aus den alten Mittelwerten.

### 4.5.7 TEST

Nach der Mittelwertbildung (57) der Bilanzgrößen werden die beiden folgenden Bedingungen in den Routinen überprüft:

**PTEST** (falls **PFLAG** = 1)

Positivität des Druckes auf dem neuen Zeitniveau;

**STEADY**

mittlere zeitliche Änderung der Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ im Vergleich zu den Mittelwerten auf dem vorausgegangenen Zeitniveau.

#### 4.5.7.1 PTEST

Die Mittelwertbildung (57) der Bilanzgrößen $\rho_1, \ldots, \rho_{\mathbf{IMAX}}, \rho\boldsymbol{v}, \rho E, \epsilon^2, \ldots, \epsilon^{\mathbf{TKMAX}}$ kann eventuell zu negativen Drücken führen. Diese würden zu einem sofortigen Programmabsturz führen. Bei den bisher untersuchten hypersonischen Staupunktproblemen trat dieses unphysikalische Phänomen lokal **vor** dem Frontstoß in der Nähe der Stromlinien durch den Staupunkt, also in der Anströmung, auf. Dort kam es aufgrund des starken Stoßes

zu leichten Oszillationen der Rekonstruktion von Ordnung größer als 1. Diese führten zu einer Absenkung des Druckes in der Anströmung. Da dieser in der Regel sehr gering ist, resultierte daraus mit fortschreitender Integrationszeit ein negativer Druck. Um dies zu verhindern, wird der Impuls in der entsprechenden Zelle so skaliert, daß der Druck auf den Anströmwert hochgesetzt wird, aber die Totalenergie konstant gehalten wird. Dies entspricht physikalisch einer Umwandlung von innerer Energie in kinetische Energie bei Wahrung der Energieerhaltung. Dies hat sich als eine sinnvolle Korrekturmaßnahme in der Praxis bewährt.
Es kann aber geschehen, daß diese Korrekturmaßnahme nicht durchführbar ist, weil aus einem negativen Skalierungsfaktor die Wurzel zu ziehen ist. In diesem Fall wird die Energieerhaltung verletzt und soviel Energie auf den Mittelwert der Totalenergie aufaddiert wie erforderlich ist, um den Anströmdruck zu erreichen. Diese Maßnahme verhindert zwar den sofortigen Programmabsturz, führt aber langfristig zu unphysikalischen Ergebnissen. In diesem Fall ist eine erneute Rechnung mit kleinerer Zeitschrittweite **DELTAT** erforderlich. Zur Laufzeit des Programms werden entsprechende Warnungen ausgegeben, falls eine Korrekturmaßnahme erforderlich ist und welche durchgeführt wurde.

**Warnung:**

> Es wird davor gewarnt, die Routine **PTENS** immer zu verwenden. So kann es geschehen, daß bei einer schrägen Anströmung eines Körpers auf dessen Leeseite ein Druckabfall unter den Anströmwert sehr wohl physikalisch sein kann. In diesem Fall darf keine Korrektur vorgenommen werden. Man sollte deshalb diese nur dann durchführen, falls der Druck in der Anströmung auf einen Wert kleiner als dem kleinsten Wert hinter dem Stoß sinkt. In diesem Fall muß **PFLAG** = 0 gesetzt werden.

#### 4.5.7.2 STEADY

Da man bei der Staupunktberechnung an der stationären Lösung interessiert ist, wird nach einer von dem Benutzer zur Laufzeit über die Eingabe festzulegende Anzahl von Integrationsschritten (**SSTEPS**) überprüft, ob der stationäre Zustand erreicht ist. Dazu wird die relative zeitliche Änderung in einer Zelle in den Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ berechnet und über alle Zellen gemittelt. Diese Residuen werden in der Regel nicht gegen Null konvergieren, sondern ab einem gewissen Zeitpunkt konstant bleiben. Dies entspricht dann dem stationären Zustand. Das Phänomen kann durch die Diskretisierungsfehler begründet werden. Aufgrund der Mittelwertbildung werden ab einem gewissen Zeitpunkt nur noch diese Fehler zwischen den einzelnen Zellen lokal transportiert.

## 4.6 OUTPUT

Nach Beendigung der Zeitintegration werden die berechneten Daten ausgegeben und ein Protokoll mit den Parametern der Strömungssimulation erstellt. Der Filename des Protokolls hat die Endung **.PRO**. Es wird in der Routine **OUTPUT** erstellt. Von dort wird auch die Prozedur **OUTDAT** aufgerufen. In ihr werden die berechneten Mittelwerte gemäß Kap. 5.2.2 in das File, dessen Name in **DATOUT** abgespeichert wurde, rausgeschrieben.

Beim Aufruf beider Routinen muß die Zahl der in diesem Programmablauf schon durchgeführten Integrationsschritte übergeben werden. An die Routine **OUTDAT** muß zusätzlich noch der Dateiname übergeben werden, in den die Daten geschrieben werden sollen. Da in der Regel viele Zeitschritte in einem Programmlauf ausgeführt werden und dies in der Regel sehr viel Rechenzeit erfordert, die auf kontingentierten Rechneranlagen teuer sind, werden die Daten nach je **ZSTEPS** Zeitschritten auf ein File abgespeichert. Der Name dieses Files steht in der Variablen **DATZWI**.

# 5 Programmsteuerung über Optionen und Dateien

## 5.1 Optionen

Wie in den vorausgegangenen Kapiteln schon dargelegt wurde, hat der Benutzer relativ viele Freiheiten bezüglich

- der physikalischen Modellierung
- der numerischen Diskretisierung
- und der zugrundeliegenden Geometrie des Strömungsgebietes.

Zur Steuerung der Optionen müssen zur Laufzeit Flags gesetzt werden. Diese sind im folgenden aufgelistet:

**NSFLAG**

| | |
|---|---|
| reibungsfreie Strömung | (0) |
| reibungsbehaftete Strömung | (1) |

**CFLAG**

| | |
|---|---|
| chemisch und thermisch gefrorenes Gas | (0) |
| chemisches und thermisches Nichtgleichgewicht | (1) |

**OFLAG** (nur falls **CFLAG**= 1)

| | |
|---|---|
| ohne Operatorsplitting für chemische Produktionsraten und thermische Austauschraten | (0) |
| mit Operatorsplitting für chemische Produktionsraten und thermische Austauschraten | (1) |

**WFLAG** (nur falls **NSFLAG**= 1)

| | |
|---|---|
| adiabate Wand $\left(\frac{\partial T^1}{\partial \boldsymbol{N}} = 0\right)$ | (0) |
| nicht adiabate Wand ($T_W^1 = \text{const.}$) | (1) |

**KWFLAG** (nur falls **NSFLAG**= 1)

| | |
|---|---|
| voll katalytische Wand ($Y_{i,W} = \text{const.}$, $i = 1, \mathbf{IMAX}$ | (0) |
| nicht katalytische Wand $\left(\frac{\partial Y_{i,W}}{\partial \boldsymbol{N}} = 0,\ i = 1, \mathbf{IMAX}\right)$ | (1) |

**GFLAG**

| | |
|---|---|
| ebene Strömung | (0) |
| rotationssymmetrische Strömung | (1) |
| achsensymmetrische, ebene Strömung | (2) |

**RFLAG**$(i)$

Zuordnung eines der folgenden Randtypen zu den vier Strömungsrändern $\Gamma_i$, $i = 1,4$:

| | |
|---|---|
| hypersonischer Inflow | (1) |
| hypersonischer Outflow | (2) |
| Wand (Haftbedingung, **NSFLAG** = 1) | (3) |
| Wand (Verdünnungswelle, **NSFLAG** = 0) | (4) |
| Wand (Reflexion, **NSFLAG** = 0) | (5) |
| Symmetrieachse (Rotationssymmetrie, nur $x_2 = 0$) | (6) |
| Symmetrieachse (Achsensymmetrie, nur $x_2 = 0$) | (7) |

**KFLAG**$(i)$

Charakterisierung des Randes $\Gamma_i$, $i = 1,4$:

| | |
|---|---|
| freier Strömungsrand | (0) |
| feste Körperwand | (1) |

**PFLAG**

| | |
|---|---|
| ohne Positivitätstest des Druckes | (0) |
| mit Positivitätstest des Druckes | (1) |

Diese Optionen werden beim Programmstart über eine Datei, deren Name beim Programmaufruf vom Benutzer angegeben werden muß (vgl. Kap. 10), eingegeben.
Neben dieser Eingabedatei werden noch weitere Dateien benötigt, die das physikalische Modell festlegen und für die Diskretisierung benötigt werden:

- Referenzgrößen der Anströmung (**REFQUA**)
- Gitter (**GITTER**)
- Mittelwerte der Bilanzgrößen in den Zellen (**DATIN**, **DATZWI**, **DATOUT**)
- Tabellen für die Koeffizienten der Kurvenfits $\tilde{e}_i^{TR}(T^1)$, $\tilde{e}_i^{vib}(T_i^{vib})$, $\tilde{e}_i^{el}(T_i^{el})$, $\tilde{c}_{v,i}^{vib}(T_i^{vib})$, $\tilde{c}_{v,i}^{vib}(T_i^{vib})$, $\tilde{c}_{v,i}^{el}(T_i^{el})$, $\mu_i(T^1)$, $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T^1)$ und $\tilde{\mathcal{K}}_g^i(\ln T^1)$

  (**ENTRINP**, **ENVINP**, **ENEINP**, **CVVINP**, **CVEINP**, **MUINP**, **BDINP**, **AKINP**)

Die Dateinamen sind in Klammern angeführt (vgl. auch Kap. 7.2).

## 5.2 Dateistrukturen

Im folgenden werden die Dateistrukturen der Dateien erklärt, die während des Programmablaufs eingelesen bzw. auf die Daten rausgeschrieben werden.

### 5.2.1 Eingabedatei

Die Datei, die beim Programmstart als Parameter mit angegeben werden muß (vgl. Kap. 10), hat folgende Struktur:

**OFLAG** : Parameter zur Steuerung des Operatorsplittings

**WFLAG** : Parameter zur Steuerung der thermischen Wandmodellierung

**KWFLAG** : Parameter zur Steuerung der katalytischen Wandmodellierung

**GFLAG** : Parameter zur Steuerung der Geometrie

**NSFLAG** : Parameter zur Steuerung der Differentialgleichung

**CFLAG** : Parameter zur Steuerung der Modellierung der chemischen Produktion und der thermischen Austauschprozesse

**RFLAG**($i$) : Randtypen zu Rand $\Gamma_i, i = 1, 4$:

| | |
|---|---|
| hypersonischer Inflow | (1) |
| hypersonischer Outflow | (2) |
| Wand (Haftbedingung, Navier–Stokes) | (3) |
| Wand (Verdünnungswelle, Euler) | (4) |
| Wand (Reflexion, Euler) | (5) |
| Symmetrieachse (Rotationssym., nur $x_2 = 0$) | (6) |
| Symmetrieachse (Achsensym., nur $x_2 = 0$) | (7) |

**KFLAG**($i$) : Charakterisierung des Gitterrandes $\Gamma_i, i = 1, 4$

**PFLAG** : Parameter zur Steuerung der Drucküberprüfung

**ENTRINP**: Dateiname für die Tabellierung der Translations– und Rotationsenergie $\tilde{e}_i^{TR}(T^1)$

**ENVINP** : Dateiname für die Tabellierung der Vibrationsenergie $\tilde{e}_i^{vib}(T_i^{vib})$

**ENEINP** : Dateiname für die Tabellierung der elektronischen Anregungsenergie $\tilde{e}_i^{el}(T_i^{el})$

**CVVINP** : Dateiname für die Tabellierung des Anteils der Vibration an der Wärmekapazität $\tilde{c}_{v,i}^{vib}(T_i^{vib})$

**CVEINP** : Dateiname für die Tabellierung des Anteils der elektronischen Anregung an der Wärmekapazität $\tilde{c}_{v,i}^{el}(T_i^{el})$

**MUINP** : Dateiname für die Tabellierung von $\mu_i(T^1)$

**BDINP** : Dateiname für die Tabellierung von $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T^1)$

**AKINP** : Dateiname für die Tabellierung von $\tilde{K}_g^i(\ln T^1)$

**POLGRA** : Interpolationsordnung

**NSTEPS** : Anzahl durchzuführender Zeitschritte

**DELTAT** : Zeitschrittweite

**DATZWI** : Dateiname für Zwischenspeicher

**ZSTEPS** : Anzahl der Zeitschritte, nach denen die Daten zwischengespeichert werden sollen

**SSTEPS** : Anzahl der Zeitschritte, nach denen überprüft werden soll, ob die Strömung stationär ist

**GITTER** : Dateiname für Gitter

**DATINP** : Dateiname für Bilanzgrößen

**DATOUT** : Dateiname für Ausgabedaten

**REFQUA** : Dateiname für Referenzgrößen

Die Dateinamen dürfen dabei nicht länger als 14 Zeichen sein. Die Variablen sind in Kap. 7 erklärt.

### 5.2.2 Referenzgrößen der Anströmung

Die Strömung ist durch die Anströmwerte charakterisiert. Diese Werte werden in den Routinen **PTENS** und **HYPIN** benötigt. Der Benutzer hat diese Werte in einer Datei mit folgender Struktur zur Verfügung zu stellen:

**XREF**($i$) Massenbruch $Y_i$ der Anströmung, $i = 1,$**IMAX**

**RHOREF** Massendichte der Anströmung

**MREF** $x_1$–Impuls der Anströmung

**NREF** $x_2$–Impuls der Anströmung

**REREF** Totalenergie der Anströmung

**EREF**($\alpha$) volumenspezifische innere Energie zur Temperatur $T^\alpha$, $\alpha = 2,$**TKMAX**

**PREF** Druck der Anströmung

**TREF** Temperatur der Anströmung

**TWALL**(1) (falls **NSFLAG** = 1, **WFLAG** = 1, **KFLAG**(1) = 1) Wandtemperatur

**TWALL**(2) (falls **NSFLAG** = 1, **WFLAG** = 1, **KFLAG**(2) = 1) Wandtemperatur

**TWALL**(3) (falls **NSFLAG** = 1, **WFLAG** = 1, **KFLAG**(3) = 1) Wandtemperatur

**TWALL**(4) (falls **NSFLAG** = 1, **WFLAG** = 1, **KFLAG**(4) = 1) Wandtemperatur

**XWALL**($i$) (falls **NSFLAG** = 1, **KWFLAG** = 0) Wandzusammensetzung, $i = 1,$**IMAX**

### 5.2.3 Gitter

Die Strömungssimulation wird auf einem strukturierten Gitter durchgeführt. Das Gitter ist somit gegeben durch die Transformation eines zweidimensionalen Parameterbereiches $P$ auf das Gebiet $G \subset \mathrm{IR}^2$, formal:

$$\boldsymbol{x} : \ P \to G \quad \text{def. durch} \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\xi, \eta).$$

Zu jeder Zelle $V_{j,k}$ werden die Eckpunkte abgespeichert, d.h.

$$V_{j,k} = \Box(\boldsymbol{x}(j \pm 1/2, k \pm 1/2)) \qquad \begin{array}{l} j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1, \\ k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1. \end{array}$$

**Struktur: MZAHLX MZAHLY**

$$\boldsymbol{x}(j + 1/2, k + 1/2), \ j = -2, \mathbf{MZAHLX} + 1, \ k = -2, \mathbf{MZAHLY} + 1$$

Diese Struktur gilt für alle Gitter, unabhängig von der zugrunde liegenden Geometrie. Wird insbesondere eine achsensymmetrische (**GFLAG** $= 2$) oder rotationssymmetrische Geometrie (**GFLAG** $= 1$) gewählt, so sind folgende Besonderheiten an der Symmetrieachse zu beachten:

1. Symmetrieachse darf nur $x_2 = 0$ sein
2. (a) **GFLAG** $= 1$:
$$\begin{array}{rcl} x_1(-3/2, k + 1/2) & = & x_1(1/2, k + 1/2) \\ x_2(-3/2, k + 1/2) & = & -x_2(1/2, k + 1/2) \\ x_2(-1/2, k + 1/2) & = & 0 \end{array}$$
$$k = -2, \mathbf{MZAHLY} + 1$$
   (b) **GFLAG** $= 2$:
$$\begin{array}{rcl} x_1(-1/2, k + 1/2) & = & x_1(1/2, k + 1/2) \\ x_2(-1/2, k + 1/2) & = & -x_2(1/2, k + 1/2) \\ x_1(-3/2, k + 1/2) & = & x_1(3/2, k + 1/2) \\ x_2(-3/2, k + 1/2) & = & -x_2(3/2, k + 1/2) \end{array}$$
$$k = -2, \mathbf{MZAHLY} + 1$$

### 5.2.4 Mittelwerte der Bilanzgrößen

Zum Start der Rechnung werden die Mittelwerte zu jeder Zelle im Strömungsgebiet und auf dem Rand des Diskretisierungsbereiches benötigt. Die Struktur für die einzulesenden als auch für die rauszuschreibenden Daten sind identisch:

| | | |
|---|---|---|
| **Struktur:** | **ASTEPS** | # alter Zeitschritt |
| | **DUMMY** | # Leerzeile |
| | (**MW**$(j,k,i)$, $i = 2$,**DIMMAX**), | # $\rho\boldsymbol{v}, \rho E, \rho_1, \ldots, \rho_{\mathbf{IMAX}}, \epsilon^2, \ldots, \epsilon^{\mathbf{TKMAX}}$ |
| | (**MWRHO**$(j,k,i)$, $i = 1$,**IMAX**) | # $k = -1$,**MZAHLY**+1, $j = -1$,**MZAHLX**+1 |
| | (**MWE**$(j,k,i)$, $i = 2$,**TKMAX**) | |

### 5.2.5 Tabellen

Um nicht auf ein spezielles Modell für die Transport– und Diffusionskoeffizienten sowie die Energie eingeschränkt zu sein, werden für diese Größen Kurvenfits verwendet. Dadurch hat der Benutzer die Möglichkeit ein beliebiges Modell seiner Wahl zu verwenden, ohne im Programm selber etwas ändern zu müssen. Näheres zu dieser Strategie findet man in [11]. Folgende Größen werden gefittet:

1. Translations– und Rotationsenergie der Komponente $i$

$$\tilde{e}_i^{TR}(T) := \left(e_i^{tr}(T) + e_i^{rot}(T)\right) M_i/R/T = a_i T;$$

2. Vibrationsenergie der Komponente $i$

$$\tilde{e}_i^{vib}(T) := e_i^{vib}(T) M_i/R/T = \sum_{l=1}^{4} a_{l,i,j,1} T^{l-1}, \quad j = INT\left(\frac{T - \mathbf{TMINEN}(i,1)}{\mathbf{DTPEN}(i,1)} + 1\right);$$

3. Elektronische Anregungsenergie der Komponente $i$

$$\tilde{e}_i^{el}(T) := e_i^{el}(T) M_i/R/T = \sum_{l=1}^{4} a_{l,i,j,2} T^{l-1}, \quad j = INT\left(\frac{T - \mathbf{TMINEN}(i,2)}{\mathbf{DTPEN}(i,2)} + 1\right);$$

4. Anteil der Vibration an der isochoren Wärmekapazität der Komponente $i$

$$\tilde{c}_{v,i}^{vib}(T) := c_{v,i}^{vib}(T) M_i/R/T = \sum_{l=1}^{4} b_{l,i,j,1} T^{l-1}, \quad j = INT\left(\frac{T - \mathbf{TMINCV}(i,1)}{\mathbf{DTPCV}(i,1)} + 1\right);$$

5. Anteil der elektronischen Anregung an der isochoren Wärmekapazität der Komponente $i$

$$\tilde{c}_{v,i}^{el}(T) := c_{v,i}^{el}(T) M_i/R/T = \sum_{l=1}^{4} b_{l,i,j,2} T^{l-1}, \quad j = INT\left(\frac{T - \mathbf{TMINCV}(i,2)}{\mathbf{DTPCV}(i,2)} + 1\right);$$

6. Komponentenviskosität der Komponente $i$

$$\mu_i(T) = \sum_{l=1}^{5} c_{l,i,j} T^{l-1}, \; j = INT\left(\frac{T - \mathbf{TMINMU}}{\mathbf{DTPMU}} + 1\right);$$

7. binärer Diffusionskoeffizient der Komponenten $i, j$

$$\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T) := \mathcal{D}_{ij} \cdot p = \sum_{l=1}^{5} d_{l,i,j,k} T^{l-1}, \; k = INT\left(\frac{T - \mathbf{TMINBD}}{\mathbf{DTPBD}} + 1\right);$$

8. Gleichgewichtskonstante der Reaktionsklasse $i$

$$\tilde{K}_g^i(\ln T) := K_g^i(T) = \sum_{l=1}^{4} e_{lik} (\ln T)^{l-1}, \; k = INT\left(\frac{\ln T - \mathbf{TMINAK}}{\mathbf{DTPAK}} + 1\right).$$

**Struktur 1:**

| | |
|---|---|
| anz | Anzahl der Kurvenfits |
| 'xx' | Komponente $i$, z. B. N1, N2, O1, O2, NO |
| **W**($i$) | Molgewicht der Komponente $i$ |
| **FENTH**($i$) | Formationsenthalpie der Komponente $i$ |
| **IEATR**($i$) | Koeffizient $a_i$ der Kurvenfits von $\tilde{e}_i^{TR}(T)$ |

**Struktur 2:**

| | |
|---|---|
| anz | Anzahl der Kurvenfits |
| 'xx' | Komponente $i$, z. B. N1, N2, O1, O2, NO |
| **TMINEN**(i,1) | minimale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **TMAXEN**(i,1) | maximale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **DTPEN**(i,1) | äquidistante Intervallänge |
| **JANZEN**(i,1) | Anzahl der Diskretisierungsintervalle |
| **IEA**($l,i,j,1$) | Koeffizienten $a_{l,i,j,1}$ der Kurvenfits von $\tilde{e}_i^{vib}(T)$, $l = 1,4$, $j = 1$,**JANZEN**(i,1) |

**Struktur 3:**

| | |
|---|---|
| anz | Anzahl der Kurvenfits |
| 'xx' | Komponente $i$, z. B. N1, N2, O1, O2, NO |
| **TMINEN**(i,2) | minimale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **TMAXEN**(i,2) | maximale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **DTPEN**(i,2) | äquidistante Intervallänge |
| **JANZEN**(i,2) | Anzahl der Diskretisierungsintervalle |
| **IEA**($l,i,j,2$) | Koeffizienten $a_{l,i,j,2}$ der Kurvenfits von $\tilde{e}_i^{el}(T)$, $l = 1,4$, $j = 1$,**JANZEN**(i,2) |

**Struktur 4:**

| | |
|---|---|
| anz | Anzahl der Kurvenfits |
| 'xx' | Komponente $i$, z. B. N1, N2, O1, O2, NO |
| **TMINCV**(i,1) | minimale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **TMAXCV**(i,1) | maximale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **DTPCV**(i,1) | äquidistante Intervallänge |
| **JANZCV**(i,1) | Anzahl der Diskretisierungsintervalle |
| **CVA**($l,i,j,1$) | Koeffizienten $b_{l,i,j,1}$ der Kurvenfits von $\tilde{c}_{v,i}^{vib}(T)$, $l = 1,4$, $j = 1$,**JANZCV**(i,1) |

**Struktur 5:**

| | |
|---|---|
| anz | Anzahl der Kurvenfits |
| 'xx' | Komponente $i$, z. B. N1, N2, O1, O2, NO |
| **TMINCV**(i,2) | minimale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **TMAXCV**(i,2) | maximale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **DTPCV**(i,2) | äquidistante Intervallänge |
| **JANZCV**(i,2) | Anzahl der Diskretisierungsintervalle |
| **CVA**$(l,i,j,2)$ | Koeffizienten $b_{l,i,j,2}$ der Kurvenfits von $\tilde{c}^{el}_{v,i}(T)$, $l=1,4$, $j=1$,**JANZCV**(i,2) |

**Struktur 6:**

| | |
|---|---|
| anz | Anzahl der Kurvenfits |
| **TMINMU** | minimale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **TMAXMU** | maximale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **DTPMU** | äquidistante Intervallänge |
| **JANZMU** | Anzahl der Diskretisierungsintervalle |
| 'xx' | Komponente $i$, z. B. N1, N2, O1, O2, NO |
| **MUA**$(l,i,j)$ | Koeffizienten $c_{l,i,j}$ des Kurvenfits von $\mu_i(T)$, $l=1,5$, $j=1$,**JANZMU** |

**Struktur 7:**

| | |
|---|---|
| anz | Anzahl der Kurvenfits |
| **TMINBD** | minimale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **TMAXBD** | maximale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **DTPBD** | äquidistante Intervallänge |
| **JANZBD** | Anzahl der Diskretisierungsintervalle |
| 'xx' 'yy' | Komponente $i,j$, z. B. N1, N2, O1, O2, NO mit $1 \leq j \leq i \leq$ **IMAX** |
| **BDA**$(l,i,j,k)$ | Koeffizienten $d_{l,i,j,k}$ des Kurvenfits $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$, $l=1,5$, $k=1$,**JANZBD** |

**Struktur 8:**

| | |
|---|---|
| anz | Anzahl der Kurvenfits |
| **TMINAK** | minimale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **TMAXAK** | maximale Temperatur des Diskretisierungsbereiches |
| **DTPAK** | äquidistante Intervallänge |
| **JANZAK** | Anzahl der Diskretisierungsintervalle |

| | |
|---|---|
| 'xx' | Reaktionsklasse $i$, z. B. |
| **AKOEFF**$(l,i,j)$ | Koeffizienten $e_{l,i,j}$ des Kurvenfits $\tilde{K}_g^i(\ln T)$, $l=1,4$, $j=1$,**JANZAK** |

**Bemerkung:**

Die Zuweisung der Strings 'xx' und 'yy' einer Komponente erfolgt in der Routine **NUMMER**. Zur Zeit ist folgende Zuweisung für die Komponenten des Gasgemisches und der Reaktionsklassen implementiert:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **SPEZIE**(1) | = | 'N1' | $\longleftrightarrow$ | 1 |
| **SPEZIE**(2) | = | 'N2' | $\longleftrightarrow$ | 2 |
| **SPEZIE**(3) | = | 'O1' | $\longleftrightarrow$ | 3 |
| **SPEZIE**(4) | = | 'O2' | $\longleftrightarrow$ | 4 |
| **SPEZIE**(5) | = | 'NO' | $\longleftrightarrow$ | 5 |
| **REAKT**(1) | = | 'O2DIS' | $\longleftrightarrow$ | $O_2$ - Dissoziation |
| **REAKT**(2) | = | 'N2DIS' | $\longleftrightarrow$ | $N_2$ - Dissoziation |
| **REAKT**(3) | = | 'NODIS' | $\longleftrightarrow$ | NO - Dissoziation |
| **REAKT**(4) | = | 'O2REK' | $\longleftrightarrow$ | $O_2$ - Rekombination |
| **REAKT**(5) | = | 'NOREK' | $\longleftrightarrow$ | NO - Rekombination |

Zur Zeit existieren folgende Dateien für das 5–Komponenten–Luftmodell:

| | |
|---|---|
| **EN_AIR5.DAT** | Translations- und Rotationsenergie sowie Formationsenthalpie |
| **EN_AIR5V.DATS**<br>**EN_AIR5E.DATS**<br>**CV_AIR5V.DATS**<br>**CV_AIR5E.DATS**<br>**AK_AIR5.DATS** | harmonischer Oszillator, keine Kopplung von Rotation und Vibration, analytisches Energiemodell (siehe [11], Kap. 3.2, 8.1, 8.2) |
| **EN_AIR5V.DATE**<br>**EN_AIR5E.DATE**<br>**CV_AIR5V.DATE**<br>**CV_AIR5E.DATE**<br>**AK_AIR5.DATE** | anharmonischer Oszillator, Kopplung von Rotation und Vibration, analytisches Energiemodell (siehe [18]) |
| **MU_AIR5.DAT** | analytisches Modell (siehe [11], Kap. 4.3) |
| **MU_AVE5.DAT** | Mittelung der Komponentenviskositätskoeffizienten über die Gleichgewichtszusammensetzung von 5–Komponenten–Luft; diese ist nur in Zusammenhang mit dem Modell **SPF** (siehe Kap. 6.5) zu verwenden |
| **DB_AIR5.DAT** | Parameter des analytischen Modells (siehe [11], Kap. 4.3) |

Näheres zur Implementierung der Modelle findet man in [11], Kap. 5.

### 5.2.6 Protokoll

Zum Abschluß des Programms wird eine Datei angelegt, die den Programmablauf protokolliert. Diese hat den Namen fn.**PRO** mit dem Filenamen, der in **DATOUT** steht.

**Struktur:**

| | |
|---|---|
| **NSFLAG** | |
| **CFLAG** | |
| **OFLAG** | |
| **XREF**($i$), | $i = 1$,**IMAX** |
| **EREF**($\alpha$), | $\alpha = 2$,**TKMAX** |
| **RHOREF** | |
| **MREF** | |
| **NREF** | |
| **REREF** | |
| **PREF** | |
| **TREF** | |
| **WFLAG** | (falls **NSFLAG** = 1) |
| **TWALL**($i$) | (falls **NSFLAG** = 1, **WFLAG** = 1, **KFLAG**($i$) = 1, $i = 1, 4$) |
| **XWALL**($i$) | (falls **NSFLAG** = 1, **KWFLAG** = 0), $i = 1$,**IMAX** |
| **MUEREF** | (falls **NSFLAG** = 1) |
| **MREF/MUEREF** | (falls **NSFLAG** = 1) Reynoldszahl pro Länge |
| **POLGRA** | |
| **GFLAG** | |
| **DELTAT** | |
| **MZAHLX** | |
| **MZAHLY** | |
| **GITTER** | |

# 6 Schnittstellen

Einige Routinen sind so angelegt, daß sie auf keine globalen Variablen zugreifen, d.h. es werden keine INCLUDE–Dateien eingebunden. Die gesamte Ein– und Ausgabe erfolgt über eine Parameterliste. Diese Vorgehensweise wurde nur bei solchen Unterprogrammen angewendet, in denen physikalische Größen berechnet werden, die auf Modellen beruhen, zu denen Alternativen existieren. In diesem Fall soll es dem Benutzer ermöglicht werden, eigene Modelle zu verwenden, ohne dazu Änderungen im ganzen Programm vornehmen zu müssen. Zu diesem Zweck wurde die Parameterliste so allgemein gestaltet, daß möglichst viele, zur Zeit bekannte Modelle, adaptierbar sind.

## 6.1 Energiemodell

### 6.1.1 Schnittstelle IET

**Ziel:** Berechnung der massenspezifischen inneren Energie zur Temperatur $T^\alpha$

$$\begin{aligned} e^\alpha &= e^\alpha(Y_1, \ldots, Y_{\mathbf{IMAX}}, T^\alpha) \\ &:= \delta_{\alpha,1} \sum_{i=1}^{\mathbf{IMAX}} Y_i \cdot e_i^{TR}(T^1) + \sum_{k=1}^{\mathbf{IKMAX}(\alpha)} Y_{\mathbf{IK}(k,\alpha)} \cdot e_{\mathbf{IK}(k,\alpha)}^{\mathbf{MF}(k,\alpha)}(T^\alpha) \end{aligned}$$

über einen stückweisen polynomialen Fit von

$$\begin{aligned} \tilde{e}_i^{TR}(T) &= e_i^{TR}(T) \cdot M_i/R/T = \mathbf{IEATR}(i) \\ \tilde{e}_i^{m}(T) &= e_i^{m}(T) \cdot M_i/R/T = \sum_{l=1}^{4} \mathbf{IEA}(l,i,j,m) \cdot T^{l-1}, \\ & \qquad j = INT\left(\frac{T - \boldsymbol{TMINEN}(i,m)}{\boldsymbol{DTPEN}(i,m)} + 1\right); \end{aligned}$$

**Input:**

| | |
|---|---|
| $\mathbf{T}(j)$ | Temperatur $T^\alpha$, $j = 1,$**MANZ** |
| $\mathbf{X}(j,i)$ | Massenbrüche, $i = 1,$**IMAX**, $j = 1,$**MANZ** |
| $\mathbf{IEATR}(i)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Translations– und Rotationsenergie der einzelnen Komponenten, $i = 1,$**IMAX** |
| $\mathbf{IEA}(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Vibrationsenergie und die elektronische Anregungsenergie der einzelnen Komponenten, $l = 1,4$, $i = 1,$**IMAX**, $k = 1,\mathbf{JANZEN}(i,m)$, $m = 1,2$ |
| $\mathbf{IA}(j)$ | Hilfsvektor zum Abspeichern der Intervallnummern, $j = 1,$**MANZ** |
| **MANZ** | Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |

**IMAX** Anzahl der Komponenten des Gasgemisches

**TMINEN**$(i,m)$ minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**TMAXEN**$(i,m)$ maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**DTPEN**$(i,m)$ äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**JANZEN**$(i,m)$ Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T)$, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**JMAX** maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits

**RGK** universelle Gaskonstante

**W**$(i)$ Molmasse der Komponente $i$, $i = 1,$**IMAX**

**TKMAX** Anzahl der verschiedenen Temperaturen

**FGMAX** Anzahl der verschiedenen Freiheitsgrade $m = TR, vib, el$ für alle Komponenten

**IKMAX**$(\alpha)$ Anzahl der Freiheitsgrade, die mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergehen, $\alpha = 1,$**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**MF**$(k,\alpha)$ Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**IK**$(k,\alpha)$ Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**ALPHA** Nummer der Temperaturklasse

**Output:**

**IE**$(j)$ gesamte massenspezifische innere Energie zur Temperatur $T^\alpha$ gemäß (20), $j = 1,$**MANZ**

### 6.1.2 Schnittstelle CVT

**Ziel:** Berechnung der gesamten massenspezifischen isochoren Wärmekapazität zur Temperatur $T^\alpha$

$$\begin{aligned} c_V^\alpha &= c_V^\alpha(Y_1, \ldots, Y_{\mathbf{IMAX}}, T^\alpha) \\ &:= \delta_{\alpha,1} \sum_{i=1}^{\mathbf{IMAX}} Y_i \cdot c_{V,i}^{TR}(T^1) + \sum_{k=1}^{\mathbf{IKMAX}(\alpha)} Y_{\mathbf{IK}(k,\alpha)} \cdot c_{V,\mathbf{IK}(k,\alpha)}^{\mathbf{MF}(k,\alpha)}(T^\alpha) \end{aligned}$$

über einen stückweisen polynomialen Fit von

$$\begin{aligned}\tilde{c}_{V,i}^{TR}(T) &= c_{V,i}^{TR}(T) \cdot M_i/R = \mathbf{IEATR}(i) \\ \tilde{c}_{V,i}^{m}(T) &= c_{V,i}^{m}(T) \cdot M_i/R = \sum_{l=1}^{4} \mathbf{CVA}(l,i,j,m) \cdot T^{l-1},\end{aligned}$$

$$j = INT\left(\frac{T - \boldsymbol{TMINCV}(i,m)}{\boldsymbol{DTPCV}(i,m)} + 1\right);$$

**Input:**

| | |
|---|---|
| $\mathbf{T}(j)$ | Temperatur $T^{\alpha}$, $j = 1,$**MANZ** |
| $\mathbf{X}(j,i)$ | Massenbrüche, $i = 1,$**IMAX**, $j = 1,$**MANZ** |
| $\mathbf{IEATR}(i)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Translations– und Rotationsenergie einzelner Komponenten, $i = 1,$**IMAX** |
| $\mathbf{CVA}(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für den Anteil der Vibration und der elektronischen Anregung an der massenspezifischen Wärmekapazität der einzelnen Komponenten, $l = 1,4$, $i = 1,$**IMAX**, $k = 1,$**JANZCV**$(i,m)$, $m = 1,2$ |
| $\mathbf{IA}(j)$ | Hilfsvektor zum Abspeichern der Intervallnummern, $j = 1,$**MANZ** |
| **MANZ** | Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen Wärmekapazitäten |
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen Wärmekapazitäten |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| $\mathbf{TMINCV}(i,m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1,$**IMAX** |
| $\mathbf{TMAXCV}(i,m)$ | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1,$**IMAX** |
| $\mathbf{DTPCV}(i,m)$ | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1,$**IMAX** |
| $\mathbf{JANZCV}(i,m)$ | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{c}_{V,i}^{m}(T)$, $m = 1,2$, $i = 1,$**IMAX** |
| **JMAX** | maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits |
| **RGK** | universelle Gaskonstante |
| $\mathbf{W}(i)$ | Molmasse der Komponente $i$, $i = 1,$**IMAX** |
| **TKMAX** | Anzahl der verschiedenen Temperaturen |
| **FGMAX** | Anzahl der verschiedenen Freiheitsgrade $m = TR, vib, el$ für alle Komponenten |

| | |
|---|---|
| **IKMAX**$(\alpha)$ | Anzahl der Freiheitsgrade, die mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergehen, $\alpha = 1$,**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet) |
| **MF**$(k, \alpha)$ | Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet) |
| **IK**$(k, \alpha)$ | Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet) |
| **ALPHA** | Nummer der Temperaturklasse |

**Output:**

| | |
|---|---|
| **CV**$(j)$ | gesamte massenspezifische Wärmekapazität zur Temperatur $T^\alpha$ gemäß (25), $j = 1$,**MANZ** |

### 6.1.3 Schnittstelle IETA

**Ziel:** Berechnung der gesamten massenspezifischen isochoren Wärmekapazität zur Temperatur $T^\alpha$

$$\begin{aligned} c_V^\alpha &= \frac{d}{dT^\alpha} e^\alpha (Y_1, \ldots, Y_{\mathbf{IMAX}}, T^\alpha)\Big|_{Y_1,\ldots,Y_{\mathbf{IMAX}}=\text{const}} \\ &:= \delta_{\alpha,1} \sum_{i=1}^{\mathbf{IMAX}} Y_i \cdot C_{V,i}^{TR}(T^1) + \sum_{k=1}^{\mathbf{IKMAX}(\alpha)} Y_{\mathbf{IK}(k,\alpha)} \cdot c_{V,\mathbf{IK}(k,\alpha)}^{\mathbf{MF}(k,\alpha)}(T^\alpha) \end{aligned}$$

über einen stückweisen polynomialen Fit von

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{V,i}^{TR}(T) &= c_{V,i}^{TR}(T) \cdot M_i/R = \mathbf{IEATR}(i) \\ \tilde{c}_{V,i}^{m}(T) &= \frac{de_i^m(T)}{dT} \cdot M_i/R = \sum_{l=1}^{3} l \cdot \mathbf{IEA}(l,i,j,m) \cdot T^{l-1}, \\ & \qquad j = INT\left(\frac{T - \boldsymbol{TMINEN}(i,m)}{\boldsymbol{DTPEN}(i,m)} + 1\right); \end{aligned}$$

**Input:**

| | |
|---|---|
| **T**$(j)$ | Temperatur $T^\alpha$, $j = 1$,**MANZ** |
| **X**$(j, i)$ | Massenbrüche, $i = 1$,**IMAX**, $j = 1$,**MANZ** |
| **IEATR**$(i)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Translations– und Rotationsenergie der einzelnen Komponenten, $i = 1$,**IMAX** |
| **IEA**$(l, i, k, m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Vibrationsenergie und die elektronische Anregungsenergie der einzelnen Komponenten, $l = 1, 4$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZEN**$(i, m)$, $m = 1, 2$ |

| | |
|---|---|
| **IA**($j$) | Hilfsvektor zum Abspeichern der Intervallnummern, $j$ = 1,**MANZ** |
| **MANZ** | Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| **TMINEN**($i, m$) | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1, 2,\ i$ = 1,**IMAX** |
| **TMAXEN**($i, m$) | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1, 2,\ i$ = 1,**IMAX** |
| **DTPEN**($i, m$) | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1, 2,\ i$ = 1,**IMAX** |
| **JANZEN**($i, m$) | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T),\ m = 1, 2,\ i$ = 1,**IMAX** |
| **JMAX** | maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits |
| **RGK** | universelle Gaskonstante |
| **W**($i$) | Molmasse der Komponente $i$, $i$ = 1,**IMAX** |
| **TKMAX** | Anzahl der verschiedenen Temperaturen |
| **FGMAX** | Anzahl der verschiedenen Freiheitsgrade $m = TR, vib, el$ für alle Komponenten |
| **IKMAX**($\alpha$) | Anzahl der Freiheitsgrade, die mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergehen, $\alpha$ = 1,**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| **MF**($k, \alpha$) | Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| **IK**($k, \alpha$) | Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| **ALPHA** | Nummer der Temperaturklasse |

**Output:**

| | |
|---|---|
| **CV**($j$) | gesamte massenspezifische Wärmekapazität zur Temperatur $T^\alpha$ gemäß (25), $j$ = 1,**MANZ** |

**Bemerkung:**

Zur Berechnung der inneren Energie $e_i$ und der isochoren Wärmekapazität $c_{V,i}$ der Komponente $i$ werden zwei voneinander unabhängige stückweise polynomiale Kurvenfits angefertigt. Dies hat zur Folge, daß die Beziehung

$$\frac{de_i(T)}{dT} = c_{V,i}(T)$$

nicht mehr exakt erfüllt ist.

Zur Berechnung der Temperatur $T^\alpha$ aus

$$e^\alpha(Y_1, \ldots, Y_{\mathbf{IMAX}}, T^\alpha) - e^\alpha = 0$$

über eine Newton-Iteration (vgl. Schnittstelle **TEMP**, Kap. 6.3.1) wird die Ableitung von $e^\alpha$ nach der Temperatur bei gefrorener Zusammensetzung aber exakt benötigt. Die Verwendung des Kurvenfits für die isochoren Wärmekapazitäten führt bei der Auswertung für $T^\alpha$, $\alpha \geq 2$, zu Problemen im Temperatrbereich 50 K $< T <$ 1500 K. Für $\alpha = 1$ ergaben sich keine Probleme.

### 6.1.4 Schnittstelle IEI

**Ziel:** Berechnung der massenspezifischen inneren Energie zur Temperatur $T^\alpha$ der Komponente **L**

$$\tilde{e}^\alpha_{\mathbf{L}} = \delta_{\alpha,1} \cdot e^{TR}_{\mathbf{L}}(T^1) + \sum_{k=1}^{\mathbf{IKMAX}(\alpha)} \delta_{\mathbf{IK}(k,\alpha),\mathbf{L}} \cdot e^{\mathbf{MF}(k,\alpha)}_{\mathbf{IK}(k,\alpha)}(T^\alpha)$$

über einen stückweisen polynomialen Fit von

$$\begin{aligned} \tilde{e}^{TR}_{\mathbf{L}}(T) &= e^{TR}_{\mathbf{L}}(T) \cdot M_i/R/T = \mathbf{IEATR}(\mathbf{L}) \\ \tilde{e}^m_i(T) &= e^m_i(T) \cdot M_i/R/T = \sum_{l=1}^{4} \mathbf{IEA}(l,i,j,m) \cdot T^{l-1}, \\ & \qquad j = INT\left(\frac{T - \mathbf{TMINEN}(i,m)}{\mathbf{DTPEN}(i,m)} + 1\right); \end{aligned}$$

**Input:**

| | |
|---|---|
| $\mathbf{T}(j)$ | Temperatur $T^\alpha$, $j = 1,$**MANZ** |
| **L** | Komponente **L** |
| $\mathbf{IEA}(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Vibrationsenergie und elektronische Anregungsenergie der Komponente **L**, $l = 1,4$, $i = 1,$**IMAX**, $k = 1,$**JANZEN**$(i,m)$, $m = 1,2$ |
| **MANZ** | Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energie |
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |

**IMAX** Anzahl der Komponenten des Gasgemisches

**TMINEN**$(i,m)$ minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**TMAXEN**$(i,m)$ maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**DTPEN**$(i,m)$ äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,$ $i = 1,$**IMAX**

**JANZEN**$(i,m)$ Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T),\ m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**JMAX** maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits

**RGK** universelle Gaskonstante

**W**$(i)$ Molmasse der Komponente $i$, $i = 1,$**IMAX**

**TKMAX** Anzahl der verschiedenen Temperaturen

**FGMAX** Anzahl der verschiedenen Freiheitsgrade $m = TR, vib, el$ für alle Komponenten

**IKMAX**$(\alpha)$ Anzahl der Freiheitsgrade, die mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergehen, $\alpha = 1,$**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**MF**$(k,\alpha)$ Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**IK**$(k,\alpha)$ Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**ALPHA** Nummer der Temperaturklasse

**Output:**

**IEK**$(j)$ massenspezifische innere Energie der Komponente **L** zur Temperatur $T^\alpha$ gemäß (19), $j = 1,$**MANZ**

### 6.1.5 Schnittstelle CVI

**Ziel:** Berechnung der isochoren Wärmekapazität zur Temperatur $T^\alpha$ der Komponente **L**

$$\tilde{c}^{\alpha}_{V,\mathbf{L}} = \delta_{\alpha,1} \cdot c^{TR}_{V,\mathbf{L}}(T^1) + \sum_{k=1}^{\mathbf{IKMAX}(\alpha)} \delta_{\mathbf{IK}(k,\alpha),\mathbf{L}} \cdot c^{\mathbf{MF}(k,\alpha)}_{V,\mathbf{IK}(k,\alpha)}(T^\alpha)$$

über einen stückweisen polynomialen Fit von

$$\begin{aligned}
\tilde{c}^{TR}_{V,\mathbf{L}}(T) &= c^{TR}_{V,\mathbf{L}}(T) \cdot M_i/R = \mathbf{IEATR}(\mathbf{L}) \\
\tilde{c}^{m}_{V,i}(T) &= c^{m}_{V,i}(T) \cdot M_i/R = \sum_{l=1}^{4} \mathbf{CVA}(l,i,j,m) \cdot T^{l-1}, \\
& \qquad\qquad j = INT\left(\frac{T - \mathbf{TMINCV}(i,m)}{\mathbf{DTPCV}(i,m)} + 1\right);
\end{aligned}$$

**Input:**

| | |
|---|---|
| $\mathbf{T}(j)$ | Temperatur $T^\alpha$, $j = 1,$**MANZ** |
| **L** | Komponente **L** |
| $\mathbf{CVA}(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für den Anteil der Vibration und der elektronischen Anregung an der isochoren Wärmekapazität der Komponente **L**, $l = 1,4$, $i = 1,$**IMAX**, $k = 1,$**JANZCV**$(i,m)$, $m = 1,2$ |
| **MANZ** | Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energie |
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energie |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| $\mathbf{TMINCV}(i,m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX** |
| $\mathbf{TMAXCV}(i,m)$ | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX** |
| $\mathbf{DTPCV}(i,m)$ | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX** |
| $\mathbf{JANZCV}(i,m)$ | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{c}^{m}_{V,i}(T)$, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX** |
| **JMAX** | maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits |
| **RGK** | universelle Gaskonstante |
| $\mathbf{W}(i)$ | Molmasse der Komponente $i$, $i = 1,$**IMAX** |
| **TKMAX** | Anzahl der verschiedenen Temperaturen |
| **FGMAX** | Anzahl der verschiedenen Freiheitsgrade $m = TR, vib, el$ für alle Komponenten |
| $\mathbf{IKMAX}(\alpha)$ | Anzahl der Freiheitsgrade, die mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergehen, $\alpha = 1,$**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |

| | |
|---|---|
| $\mathbf{MF}(k,\alpha)$ | Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| $\mathbf{IK}(k,\alpha)$ | Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| **ALPHA** | Nummer der Temperaturklasse |

**Output:**

| | |
|---|---|
| $\mathbf{CVK}(j)$ | isochore Wärmekapazität der Komponente **L** zur Temperatur $T^\alpha$ gemäß (23), $j = 1$,**MANZ** |

## 6.2 Schnittstelle IEIM

**Ziel:** Berechnung der massenspezifischen inneren Energie zum Freiheitsgrad **M** der Komponente **L** über einen stückweisen polynomialen Fit von

$$\begin{aligned}\tilde{e}_i^m(T) &= e_i^m(T)\cdot M_i/R/T \\ &= \begin{cases} \mathbf{IEATR}(\mathbf{L}), & m = TR \\ \sum\limits_{l=1}^{4} \mathbf{IEA}(l,i,j,m)\cdot T^{l-1}, & m \in \{vib, el\}, \\ & j = INT\left(\dfrac{T - \mathbf{TMINEN}(i,m)}{\mathbf{DTPEN}(i,m)} + 1\right) \end{cases}\end{aligned}$$

**Input:**

| | |
|---|---|
| $\mathbf{T}(j)$ | Temperatur $T$, $j = 1$,**MANZ** |
| **L** | Komponente **L** |
| $\mathbf{IEATR}(i)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Translations– und Rotationsenergie der einzelnen Komponenten, $i = 1$,**IMAX** |
| $\mathbf{IEA}(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Vibrationsenergie und elektronische Anregungsenergie der Komponente **L**, $l = 1,4$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,$\mathbf{JANZEN}(i,m)$, $m = 1,2$ |
| **MANZ** | Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energie |
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| $\mathbf{TMINEN}(i,m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |

**TMAXEN**$(i,m)$ maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**DTPEN**$(i,m)$ äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**JANZEN**$(i,m)$ Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T),\ m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX**

**JMAX** maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits

**RGK** universelle Gaskonstante

**W**$(i)$ Molmasse der Komponente $i$, $i = 1,$**IMAX**

**M** Freiheitsgrad **M** ($vib \mathrel{\hat{=}} 1,\ el \mathrel{\hat{=}} 2,\ TR \mathrel{\hat{=}} 3$)

**Output:**

**IEK**$(j)$ massenspezifische innere Energie der Komponente **L** und des Freiheitsgrades **M** zur Temperatur $T$, $j = 1,$**MANZ**

## 6.3 Schnittstelle CVIM

**Ziel:** Berechnung der massenspezifischen isochoren Wärmekapazität zum Freiheitsgrad **M** der Komponente **L** über einen stückweisen polynomialen Fit von

$$\begin{aligned}
\tilde{c}_{V,i}^m(T) &= c_{V,i}^m(T) \cdot M_i/R \\
&= \begin{cases} \mathbf{IEATR}(\mathbf{L}), & m = TR \\ \sum\limits_{l=1}^{4} \mathbf{CVA}(l,i,j,m) \cdot T^{l-1}, & m \in \{vib, el\} \\ & j = INT\left(\dfrac{T - \mathbf{TMINCV}(i,m)}{\mathbf{DTPCV}(i,m)} + 1\right) \end{cases}
\end{aligned}$$

**Input:**

**T**$(j)$ Temperatur $T$, $j = 1,$**MANZ**

**L** Komponente **L**

**IEATR**$(i)$ Koeffizienten der Kurvenfits für die Translations– und Rotationsenergie einzelner Komponenten, $i = 1,$**IMAX**

**CVA**$(l,i,k,m)$ Koeffizienten der Kurvenfits für den Anteil der Vibration und der elektronischen Anregung an der massenspezifischen Wärmekapazität der einzelnen Komponenten, $l = 1,4,\ i = 1,$**IMAX**, $k = 1,$**JANZCV**$(i,m)$, $m = 1,2$

**MANZ** Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energie

| | |
|---|---|
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| **TMINCV**$(i,m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX** |
| **TMAXCV**$(i,m)$ | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX** |
| **DTPCV**$(i,m)$ | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX** |
| **JANZCV**$(i,m)$ | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T)$, $m = 1,2,\ i = 1,$**IMAX** |
| **JMAX** | maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits |
| **RGK** | universelle Gaskonstante |
| **W**$(i)$ | Molmasse der Komponente $i$, $i = 1,$**IMAX** |
| **M** | Freiheitsgrad **M** ($vib \mathrel{\hat{=}} 1,\ el \mathrel{\hat{=}} 2,\ TR \mathrel{\hat{=}} 3$) |

**Output:**

| | |
|---|---|
| **CVK**$(j)$ | massenspezifische isochore Wärmekapazität der Komponente **L** und des Freiheitsgrades **M** zur Temperatur $T$ gemäß (21), $j = 1,$**MANZ** |

### 6.3.1 Schnittstelle TEMP

**Ziel:** Berechnung der Temperatur $T^1$ als Lösung des Nullstellenproblems

$$e^1(Y_1, \ldots, Y_{\mathbf{IMAX}}, T^1) - e^1 = 0$$

über eine Newton-Iteration. Es werden jedoch nur eine feste Anzahl von Iterationsschritten durchgeführt. Dies ist für eine gute Näherung der hier verwendeten Kurvenfits der inneren Energien und der isochoren Wärmekapazitäten ausreichend. Als Starttemperatur für die Translationstemperatur hat sich

$$T^1 = e^1/1200$$

bewährt.

**Input:**

| | |
|---|---|
| **X**$(j,i)$ | Massenbrüche der Komponenten $i$, $i = 1,$**IMAX**, $j = 1,$**MANZ** |
| **IE**$(j)$ | totale massenspezifische innere Energie **ohne** Bindungsenergie |
| **IEA**$(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Vibrationsenergie und die elektronische Anregung der einzelnen Komponenten, $l = 1,4$, $i = 1,$**IMAX**, $k = 1,$**JANZEN**$(i,m)$, $m = 1,2$ |

| | |
|---|---|
| **CVA**$(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für den Anteil der Vibration und der elektronischen Anregung an der massenspezifischen Wärmekapazitäten der einzelnen Komponenten, $l = 1,4$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZCV**$(i,m)$, $m = 1,2$ |
| **IEN**$(j)$ <br> **CVN**$(j)$ | Hilfsvektoren zur Berechnung des Newton–Schrittes bei der Temperaturiteration, $j = 1$,**MANZ** |
| **IA**$(j)$ | Hilfsvektor zum Abspeichern der Intervallnummern, $j = 1$,**MANZ** |
| **MANZ** | Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| **TMINEN**$(i,m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **TMAXEN**$(i,m)$ | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **DTPEN**$(i,m)$ | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **JANZEN**$(i,m)$ | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T)$ bzw. $\tilde{c}_{V,i}^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **TMINCV**$(i,m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **TMAXCV**$(i,m)$ | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **DTPCV**$(i,m)$ | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **JANZCV**$(i,m)$ | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T)$ bzw. $\tilde{c}_{V,i}^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **JMAX** | maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits |
| **RGK** | universelle Gaskonstante |
| **W**$(i)$ | Molmasse der Komponente $i$, $i = 1$,**IMAX** |
| **TKMAX** | Anzahl der verschiedenen Temperaturen |
| **FGMAX** | Anzahl der verschiedenen Freiheitsgrade $m = TR, vib, el$ für alle Komponenten |
| **IKMAX**$(\alpha)$ | Anzahl der Freiheitsgrade, die mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergehen, $\alpha = 1$,**TKMAX** <br> (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet) |

| | |
|---|---|
| $\mathbf{MF}(k,\alpha)$ | Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| $\mathbf{IK}(k,\alpha)$ | Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |

**Output:**

| | |
|---|---|
| $\mathbf{T}(j)$ | Temperatur $T^1$, $j = 1,$**MANZ** |

### 6.3.2 Schnittstelle TEMPNG

**Ziel:** Berechnung der Temperatur $T^\alpha$, $\alpha \neq 1$, als Lösung des Nullstellenproblems

$$e^\alpha(Y_1, \ldots, Y_{\mathbf{IMAX}}, T^\alpha) - e^\alpha = 0$$

über eine Newton-Iteration.

Auch hier werden nur eine feste Anzahl von Iterationsschritten durchgeführt. Es sind allerdings ein paar Schritte mehr erforderlich als bei der Schnittstelle **TEMP**, da die Nichtgleichgewichtsenergien der einzelnen Komponenten $e_i^\alpha$, $\alpha \neq 1$ nicht mehr monoton ist. Eine gute Wahl der Starttemperatur ist deshalb sehr wichtig. Dazu wird angenommen, daß für die Energie bei niedrigen Temperaturen gilt:

$$e = c_v T.$$

Um diesen Ansatz auch für hohe Temperaturen in erster Näherung verwenden zu können, wurde $c_v$ für zwei Temperaturbereiche unterschiedlich gewählt und dem 5–Komponenten–Luftmodell angepaßt:

$$T_0^\alpha = \begin{cases} \frac{e^\alpha - (cv0 - cv1) X_\infty^\alpha T0}{cv1\ X_\infty^\alpha} & = \quad e^\alpha / X_\infty^\alpha > T0 \\ \frac{e^\alpha}{cv0\ X_\infty^\alpha} & = \quad e^\alpha / X_\infty^\alpha > T0 \end{cases}$$

mit $X_\infty^\alpha = \max\{Y_i \,|\, i = i(\alpha)\}$. Die Berechnung der Nichtgleichgewichtstemperaturen $T^\alpha$, $\alpha > 1$, ist zudem problematisch, da durch vollständige Dissoziation einer Molekülkomponente, die Massenbrüche der entsprechenden Komponente verschwinden und somit die zugehörige Vibrationstemperatur bzw. die zugehörige innere Energie sowie die isochore Wärmekapazität zu Null werden. Entsprechend ergeben sich Probleme, wenn eine Komponente in der Anströmung nicht vorhanden ist und erst durch Austauschreaktionen (siehe z. B. $NO$) entsteht. In diesem Fall kann die Vibrationstemperatur sehr hoch sein, da die Teilchen mit einer sehr hohen Vibrationsenergie, nämlich der halben Dissoziationsenergie ($\theta_{NO}^{diss} = 75500$ K), entstehen. Um hier Singularitäten zu vermeiden, wird bei einem Unterschreiten der Konzentration (zur Zeit $5 \cdot 10^{-4}$) aller zu einer Temperaturklasse gehörenden Komponenten auf die Translationstemperatur gesetzt. Dies erscheint sinnvoll, da die wenigen Teilchen mit der hohen Vibrationsenergie durch Kollisionen mit anderen Teilchen sehr schnell ins thermische Gleichgewicht relaxieren.

**Input:**

| | |
|---|---|
| **X**$(j,i)$ | Massenbrüche der Komponenten $i$, $i=1$,**IMAX**, $j=1$,**MANZ** |
| **XMAX**$(j)$ | Hilfsarray zum Abspeichern des maximalen Massenbruchs der Komponenten der Temperaturklasse **ALPHA**, $j=1$,**MANZ** |
| **IE**$(j)$ | totale massenspezifische innere Energie **ohne** Bindungsenergie |
| **IEA**$(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Vibrationsenergie und die elektronische Anregung der einzelnen Komponenten, $l=1,4$, $i=1$,**IMAX**, $k=1$,**JANZEN**$(i,m)$, $m=1,2$ |
| **CVA**$(l,i,k,m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für den Anteil der Vibration und der elektronischen Anregung an der massenspezifischen Wärmekapazitäten der einzelnen Komponenten, $l=1,4$, $i=1$,**IMAX**, $k=1$,**JANZCV**$(i,m)$, $m=1,2$ |
| **IEN**$(j)$<br>**CVN**$(j)$ | Hilfsvektoren zur Berechnung des Newton–Schrittes bei der Temperaturiteration, $j=1$,**MANZ** |
| **IA**$(j)$ | Hilfsvektor zum Abspeichern der Intervallnummern, $j=1$,**MANZ** |
| **MANZ** | Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **MMAX** | maximale Anzahl der zu berechnenden Werte der massenspezifischen inneren Energien |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| **TMINEN**$(i,m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m=1,2,\ i=1$,**IMAX** |
| **TMAXEN**$(i,m)$ | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m=1,2,\ i=1$,**IMAX** |
| **DTPEN**$(i,m)$ | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m=1,2,\ i=1$,**IMAX** |
| **JANZEN**$(i,m)$ | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T)$ bzw. $\tilde{c}_{V,i}^m(T)$, $m=1,2,\ i=1$,**IMAX** |
| **TMINCV**$(i,m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m=1,2,\ i=1$,**IMAX** |
| **TMAXCV**$(i,m)$ | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m=1,2,\ i=1$,**IMAX** |
| **DTPCV**$(i,m)$ | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m=1,2,\ i=1$,**IMAX** |
| **JANZCV**$(i,m)$ | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T)$ bzw. $\tilde{c}_{V,i}^m(T)$, $m=1,2,\ i=1$,**IMAX** |

| | |
|---|---|
| **JMAX** | maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits |
| **RGK** | universelle Gaskonstante |
| **W**$(i)$ | Molmasse der Komponente $i$, $i = 1$,**IMAX** |
| **TKMAX** | Anzahl der verschiedenen Temperaturen |
| **FGMAX** | Anzahl der verschiedenen Freiheitsgrade $m = TR, vib, el$ für alle Komponenten |
| **IKMAX**$(\alpha)$ | Anzahl der Freiheitsgrade, die mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergehen, $\alpha = 1$,**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| **MF**$(k, \alpha)$ | Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| **IK**$(k, \alpha)$ | Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad ($m = TR$) nicht mitgerechnet) |
| **ALPHA** | Nummer der Temperaturklasse |

**Output:**

| | |
|---|---|
| **T**$(j)$ | Temperatur $T^\alpha$, $j = 1$,**MANZ** |

## 6.4 Chemische Produktionsraten und thermische Austauschprozesse

### 6.4.1 Schnittstelle CHEOME

**Ziel:** Berechnung von $s_i = s_i(\rho_1, \ldots, \rho_{\mathbf{IMAX}}, T^1, \ldots, T^{\mathbf{TKMAX}})$ und
$\Omega^\alpha = \Omega^\alpha\left(\rho_1, \ldots, \rho_{\mathbf{IMAX}}, T^1, \ldots, T^{\mathbf{TKMAX}}\right)$

**Input:**

| | |
|---|---|
| **PRHO**$(j, i)$ | Partialdichten $\rho_1, \ldots, \rho_{\mathbf{IMAX}}$ zur $j$-ten Zusammensetzung $j = 0$,**ANZ**, $i = 1$,**IMAX** |
| **T**$(j, \alpha)$ | Temperatur $T^\alpha$, $j = 0$,**ANZ**, $\alpha = 1$,**TKMAX** |
| **P**$(j)$ | Druck $p$, $j = 1$,**ANZ** |
| **IENGT1**$(\alpha, j)$ | Hilfsarray zum Abspeichern von $e_i^{vib}(T^\alpha)$, $\alpha = 2$,**TKMAX**, $j = 1$,**ANZ** |
| **IENGTA**$(\alpha, j)$ | Hilfsarray zum Abspeichern von $e_i^{vib}(T^1)$, $\alpha = 2$,**TKMAX**, $j = 1$,**ANZ** |
| **ANZ** | Anzahl der Zusammensetzungen |

| | |
|---|---|
| **DIM** | maximale Anzahl an Zusammensetzungen $-1$ |
| **TANZ** | Anzahl der verschiedenen Temperaturen |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| **IEATR**$(i)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Translations– und Rotationsenergie der einzelnen Komponenten, $i = 1$,**IMAX** |
| **IEA**$(l, i, k, m)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Vibrationsenergie und die elektronische Anregungsenergien der einzelnen Komponenten, $l = 1, 4$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZEN**$(i, m)$, $m = 1, 2$ |
| **AKOEFF**$(l, i, k)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Gleichgewichtskonstante, $l = 1, 4$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZAK** |
| **TMINEN**$(i, m)$ | minimale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1, 2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **TMAXEN**$(i, m)$ | maximale Temperatur für Kurvenfits zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1, 2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **TMINAK** | minimale Temperatur für den Kurvenfit der Gleichgewichtskonstanten |
| **TMAXAK** | maximale Temperatur für den Kurvenfit der Gleichgewichtskonstanten |
| **DTPEN**$(i, m)$ | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle zu Vibration und elektronischer Anregung der einzelnen Komponenten, $m = 1, 2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **DTPAK** | äquidistante Schrittweite der Diskretisierungsintervalle der Kurvenfits der Gleichgewichtskonstanten |
| **JANZEN**$(i, m)$ | Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\tilde{e}_i^m(T)$, $m = 1, 2$, $i = 1$,**IMAX** |
| **JANZAK** | Anzahl der Diskretisierungsintervalle der Kurvenfits der Gleichgewichtskonstanten |
| **JMAX** | maximale Anzahl der Diskretisierungsintervalle aller Kurvenfits |
| **RGK** | universelle Gaskonstante |
| **W**$(i)$ | Molmasse der Komponente $i$, $i = 1$,**IMAX** |

**Output:**

| | |
|---|---|
| **S**$(j, i)$ | chemische Produktionsrate der Komponente $i$, $j = 0$,**ANZ**, $i = 1$, **IMAX** |
| **O**$(j, \alpha)$ | thermische Austauschrate zur Temperatur $T^\alpha$, $\alpha = 2$,**TKMAX**, $j = 0$,**ANZ** |

**Bemerkung 1:**

Zur Zeit existieren zwei Modelle:

**CHEOMEL5** 5–Komponenten–Luftmodell

Gasmodell: N, $N_2$, O, $O_2$, NO (**IMAX** = 5)

Reaktionen: Dissoziation von $N_2$, $O_2$ und NO

Rekombination von $O_2$ und NO

Gleichgewichtskonstante: Kurvenfit gemäß [13]

Vorwärtsreaktionsraten: Kurvenfit gemäß [5]

Temperaturmodell: $T^1 = T_N^{TR} = T_{N_2}^{TR} = T_O^{TR} = T_{O_2}^{TR} = T_{NO}^{TR} = T_N^{el} = T_O^{el}$

$T^2 = T_{N_2}^{vib} = T_{N_2}^{el}$

$T^3 = T_{O_2}^{vib} = T_{O_2}^{el}$

$T^4 = T_{NO}^{vib} = T_{NO}^{el}$ (**TKMAX** = 4)

Austauschprozesse: Vibration – Translation gemäß [8]

Vibration – Chemie gemäß [13], [7]

**CHEOMEN2** 2–Komponenten–Stickstoffmodell

Gasmodell: N, $N_2$ (**IMAX** = 2)

Reaktionen: Dissoziation von $N_2$

Gleichgewichtskonstante: Kurvenfit gemäß [13]

Vorwärtsreaktionsraten: Kurvenfit gemäß [5]

Temperaturmodell: $T^1 = T_N^{TR} = T_{N_2}^{TR} = T_N^{el} = T_{N_2}^{el}$

$T^2 = T_{N_2}^{vib}$ (**TKMAX** = 2)

Austauschprozesse: Vibration – Translation gemäß [8]

**Bemerkung 2:**

Hier wird die Atomerhaltung explizit ausgenutzt, d.h. es werden beispielsweise für das 5-Komponenten-Luftmodell nur die drei linear unabhängigen Produktionsraten der Moleküle $N_2$, $O_2$ und NO berechnet. Die fehlenden zwei werden über die Atomerhaltung ermittelt.

**Bemerkung 3:**

Die Gleichgewichtskonstanten werden über einen stückweisen polynomialen Kurvenfit berechnet (vgl. **AKOEFF**).

## 6.5 Transport– und Diffusionsmodell

Zur Berechnung der viskosen Flüsse $\boldsymbol{F}_i^V$ (5) und des Quellterms $\boldsymbol{R}^V$ (41) werden folgende Routinen benötigt:

### KOEFF

Berechnung der Transport– und Diffusionskoeffizienten $\mathcal{D}_{ij}, \mu, \lambda^1, \ldots, \lambda^M$

**MDIFF**

Berechnung des Diffusionsflusses $\boldsymbol{q}_i^D$

**VISCOE**

Berechnung des Viskositätskoeffizienten des Gasgemisches $\mu$

**DVISCOE**

Berechnung von $\dfrac{d\mu}{dT}$ bei gefrorener Gaszusammensetzung

Letztere beiden werden für die Berechnung des Wanddruckes bei einer reibungsbehafteten Strömung (vgl. Routine **WALLS** in Kap. 4.5.1) benötigt.
Die Berechnung der Transport– und Diffusionkoeffizienten basiert auf Kurvenfits gemäß Kap. 5.2.3 für

- den Viskositätskoeffizient $\mu_i(T)$ der Komponente $i$ eines reinen Gases und
- den binären Diffusionskoeffizienten $\widetilde{\mathcal{D}}_{ik}(T)$ des binären Gasgemisches bestehend aus den Komponenten $i$ und $k$.

Damit ist der Wärmeleitungskoeffizient $\lambda_i^\alpha(T)$ der Komponente $i$ eines reinen Gases festgelegt (siehe z.B. [16]).
Mit Hilfe der Mischungsregeln von Wilke für den Viskositätskoeffizienten $\mu$ und den Wärmeleitungskoeffizienten $\lambda^1$ eines Gasgemisches sowie Obermeier und Schaber für die polynären Diffusionskoeffizienten $D_{ik}$ werden daraus die Koeffizienten für ein Gasgemisch ermittelt. Die Wärmeleitungskoeffizienten $\lambda^\alpha$, $\alpha \neq 1$, berechnen sich aus den binären Diffusionskoeffizienten.
Die allgemeine Darstellung des Diffusionsflusses $\boldsymbol{q}_i^D$ gemäß [16] (vgl. (6)) kann durch geeignete Annahmen vereinfacht werden (z.B. Gesetz von Fick).
Bisher wurden drei — auf obigem Konzept basierende — Modelle implementiert. Diese sind in [11] beschrieben:

**MIXp**

Mischungsregeln von Wilke sowie Obermeier und Schaber;

Diffusionsfluß gemäß (6), jedoch ohne thermische Diffusion;

**MIX**

Mischungsregeln von Wilke sowie Obermeier und Schaber;

Diffusionsfluß gemäß (6), jedoch ohne thermische Diffusion und Druckdiffusion;

**SPW**

Mischungsregel von Wilke für den Viskositätskoeffizienten $\mu$;

konstante Schmidt– und Prandtl–Zahlen zur Berechnung der Diffusionskonstanten $D$ des Fickgesetzes und der Wärmeleitungskoeffizienten $\lambda^\alpha$;

**SPA**

Kurvenfit für den Viskositätskoeffizienten $\mu = \mu(T)$ aus Mittelung der Kurvenfits für die Viskositätskoeffizienten $\mu_i(T)$ eines reinen Gases und der Gleichgewichtsverteilung der 5–Komponenten–Luft;

konstante Schmidt– und Prandtl–Zahlen zur Berechnung der Diffusionskonstanten $D$ des Fickgesetzes und der Wärmeleitungskoeffizienten $\lambda^\alpha$;

Diffusionsfluß gemäß Fick.

Die entsprechenden Modelle sind in den Dateien

**TKMIXP.F**

**TKMIX.F**

**TKSPW.F**

**TKSPA.F**

abgespeichert. Vor dem Programmstart muß der Benutzer eine der Alternativen auswählen, in die Datei **TRKO.F** kopieren und das Programm durch Aufruf der MAKE-Datei **nsctng2.m** neu übersetzen (siehe auch Kap. 10).

### 6.5.1 Schnittstelle KOEFF

**Ziel:** Berechnung der Größen

| | |
|---|---|
| $\mathcal{D}_{ij}$ | binärer Diffusionskoeffizient der Komponenten $i$ und $j$, $i,j = 1$,**IMAX** |
| $\mu$ | Viskositätskoeffizient des Gasgemisches |
| $\lambda^\alpha$ | Wärmeleitungskoeffizienten des Gasgemisches, $\alpha = 1$,**TKMAX** |

**Input:**

| | |
|---|---|
| **DIM** | Anzahl der zu berechnenden Koeffiziententupel |
| **MMAX** | maximale Anzahl an zu berechnenden Koeffiziententupeln |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| **TKMAX** | Anzahl der verschiedenen Temperaturen |
| **T**$(j)$ | Temperatur, $j = 1$,**DIM** |
| **P**$(j)$ | Druck, $j = 1$,**DIM** |
| **C**$(j)$ | Summe der Molmassen, $j = 1$,**DIM** |
| **RHO**$(j)$ | Massendichte, $j = 1$,**DIM** |
| **PRHO**$(j,i)$ | Partialdichte $i$, $i = 1$,**IMAX**, $j = 1$,**DIM** |
| **X**$(j,i)$ | molare Konzentration der Komponente $i$, $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX** |
| **CVINT1**$(j,i)$ | Anteil der inneren Freiheitsgrade, die mit $T^1$ im Gleichgewicht stehen, an der massenspezifischen isochoren Wärmekapazität, $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX** |

**CVKM**$(j,i,m)$ massenspezifische isochore Wärmekapazität der Komponente $i$ zum Freiheitsgrad $m$, (Bem.: Es werden nur diejenigen benötigt, die im thermischen Nichtgleichgewicht sind) $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**, $m=1,3$

**MUEI**$(j,i)$ Viskositätskoeffizient der Komponente $i$, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**

**KDTI**$(j,i)$ Wärmeleitungskoeffizient der Komponente $i$ zu $T^1$, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**

**PHI**$(j,l,i)$ Hilfsgröße $\Phi_{ij}$ bei der Berechnung von $\mu$ und $\lambda$ gemäß der Mischungsregel von Wilke, $j=1$,**DIM**, $l,i=1$,**IMAX**

**DUM**$(j,i)$ Dummy–Variable zum Speichern von Zwischenergebnissen, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**

**MUA**$(l,i,j)$ Koeffizienten der Kurvenfits für die Viskositätskoeffizienten $\mu_i(T)$ gemäß Kap. 5.2.2, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**, $l=1,5$

**JMAX** maximale Anzahl an Diskretisierungsintervallen aller Kurvenfits

**JANZMU** tatsächliche Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\mu_i(T)$

**TMINMU** minimale Temperatur für $\mu_i(T)$

**TMAXMU** maximale Temperatur für $\mu_i(T)$

**DTPMU** äquidistante Schrittweite für $\mu_i(T)$

**BDA**$(l,i,k,j)$ Koeffizienten der Kurvenfits für die binären Diffusionskoeffizienten $\tilde{\mathcal{D}}_{ik}(T)$ gemäß Kap. 5.2.3, $j=1$,**DIM**, $i,k=1$,**IMAX**, $l=1,5$

**JANZBD** tatsächliche Anzahl an Diskretisierungsintervallen für $\tilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$

**TMINBD** minimale Temperatur für $\tilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$

**TMAXBD** maximale Temperatur für $\tilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$

**DTPBD** äquidistante Schrittweite für $\tilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$

**IA**$(j)$ Hilfsvektor zur Auswertung von $\tilde{\mathcal{D}}_{ij}(T),\mu_i(T)$, $j=1$,**DIM**

**RGK** universelle Gaskonstante

**W**$(i)$ Molmasse der Komponente $i$, $i=1$,**IMAX**

**FGMAX** Anzahl der verschiedenen Freiheitsgrade $m=TR,vib,el$ für alle Komponenten

**IKMAX**$(\alpha)$ Anzahl der Freiheitsgrade, die mit der Temperatur $T^\alpha$ einhergehen, $\alpha=1$,**TKMAX**
(Beachte: Für $\alpha=1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m=TR)$ nicht mitgerechnet)

**MF**$(k,\alpha)$ Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha=1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m=TR)$ nicht mitgerechnet)

**IK**$(k,\alpha)$ Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ einhergeht (Beachte: Für $\alpha=1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m=TR)$ nicht mitgerechnet)

**Output:**

| | |
|---|---|
| **MUE**$(j)$ | Viskositätskoeffizient $\mu(T, X_1, \ldots, X_{\mathbf{IMAX}})$ des Gasgemisches, $j = 1,$**DIM** |
| **KDT**$(j, \alpha)$ | Wärmeleitungskoeffizienten $\lambda^\alpha(T, X_1, \ldots, X_{\mathbf{IMAX}})$ des Gasgemisches, $j = 1,$**DIM**, $\alpha = 1,$**TKMAX** |
| **BD**$(j, i, k)$ | binärer Diffusionskoeffizient $\mathcal{D}_{ik}$ der Komponenten $i$ und $k$, $j = 1,$**DIM**, $i, k = 1,$**IMAX** |
| **MD**$(j, i, k)$ | polynärer Diffusionskoeffizient $D_{ik}$ der Komponenten $i$ und $k$, $j = 1,$**DIM**, $i, k = 1,$**IMAX** |

### 6.5.2 Schnittstelle MDIFF

**Ziel:** Berechnung der Diffusionsflüsse $\boldsymbol{q}_1^D, \boldsymbol{q}_2^D$ analog zu (6) $i = 1,$**IMAX**

**Input:**

| | |
|---|---|
| **DIM** | Anzahl der zu berechnenden Diffusionsflüsse |
| **MMAX** | maximale Anzahl zu berechnender Diffusionsflüsse |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| **X**$(j, i)$ | molare Konzentration der Komponente $i$, $j = 1,$**DIM**, $i = 1,$**IMAX** |
| **PRHO**$(j, i)$ | Partialdichte der Komponente $i$, $j = 1,$**DIM**, $i = 1,$**IMAX** |
| **RHO**$(j)$ | Massendichte, $j = 1,$**DIM** |
| **P**$(j)$ | Druck, $j = 1,$**DIM** |
| **C**$(j)$ | Summe der Molmassen, $j = 1,$**DIM** |
| **CX**$(j, i)$ | molares Konzentrationsgefälle in $x_1$–Richtung der Komponente $i$, $j = 1,$**DIM**, $i = 1,$**IMAX** |
| **CY**$(j, i)$ | molares Konzentrationsgefälle in $x_2$–Richtung der Komponente $i$, $j = 1,$**DIM**, $i = 1,$**IMAX** |
| **PX**$(j)$ | Druckgefälle in $x_1$–Richtung, $j = 1,$**DIM** |
| **PY**$(j)$ | Druckgefälle in $x_2$–Richtung, $j = 1,$**DIM** |
| **DX**$(j)$ | Hilfsvektor zur Berechnung von $\boldsymbol{q}_{1,i}^D$, $j = 1,$**DIM** |
| **DY**$(j)$ | Hilfsvektor zur Berechnung von $\boldsymbol{q}_{2,i}^D$, $j = 1,$**DIM** |
| **XERROR**$(j)$ | Abweichung der Summe der Diffusionsflüsse $\boldsymbol{q}_{1,i}^D$ von Null (Verletzung der Massenerhaltung), $j = 1,$**DIM** |
| **YERROR**$(j)$ | Abweichung der Summe der Diffusionsflüsse $\boldsymbol{q}_{2,i}^D$ von Null (Verletzung der Massenerhaltung), $j = 1,$**DIM** |
| **BD**$(j, i, k)$ | binärer Diffusionskoeffizient $\mathcal{D}_{ik}$ der Komponenten $i$ und $k$, $j = 1,$**DIM**, $i, k = 1,$**IMAX** |

**MD**$(j,i,k)$ polynärer Diffusionskoeffizient $D_{ik}$ der Komponenten $i$ und $k$, $j=1$,**DIM**, $i,k=1$,**IMAX**

**Output:**

**QDX**$(j,i)$ Diffusionsfluß $\boldsymbol{q}^D_{1,i}$ der Komponente $i$ in $x_1$–Richtung, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**

**QDY**$(j,i)$ Diffusionsfluß $\boldsymbol{q}^D_{2,i}$ der Komponente $i$ in $x_2$–Richtung, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**

### 6.5.3 Schnittstelle VISCOE

**Ziel:** Berechnung des Viskositätskoeffizienten

$$\mu(T, X_1, \ldots, X_{\mathbf{IMAX}})$$

des Gasgemisches identisch zu der Berechnung in **KOEFF**

**Input:**

**DIM** Anzahl der zu berechnenden Koeffiziententupel

**MMAX** maximale Anzahl an zu berechnenden Koeffiziententupeln

**IMAX** Anzahl der Komponenten des Gasgemisches

**T**$(j)$ Temperatur, $j=1$,**DIM**

**X**$(j,i)$ molare Konzentration, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**

**MUEI**$(j,i)$ Viskositätskoeffizient der Komponente $i$, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**

**PHI**$(j,l,i)$ Hilfsgröße $\Phi_{ij}$ bei der Berechnung von $\mu$ und $\lambda$ gemäß der Mischungsregel von Wilke, $j=1$,**DIM**, $l,i=1$,**IMAX**

**MUA**$(l,i,j)$ Koeffizienten der Kurvenfits für die Viskositätskoeffizienten $\mu_i(T)$ gemäß Kap. 5.2.2, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**, $l=1,5$

**JMAX** maximale Anzahl an Diskretisierungsintervallen aller Kurvenfits

**JANZMU** tatsächliche Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\mu_i(T)$

**TMINMU** minimale Temperatur für $\mu_i(T)$

**TMAXMU** maximale Temperatur für $\mu_i(T)$

**DTPMU** äquidistante Schrittweite für $\mu_i(T)$

**IA**$(j)$ Hilfsvektor zur Auswertung von $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T), \mu_i(T)$, $j=1$,**DIM**

**W**$(i)$ Molmasse der Komponente $i$, $i=1$,**IMAX**

**DUM**$(j,i)$ Dummy–Variable zum Speichern von Zwischenergebnissen, $j=1$,**DIM**, $i=1$,**IMAX**

**Output:**

**MUE**$(j)$ Viskositätskoeffizient $\mu(T, X_1, \ldots, X_{\mathbf{IMAX}})$ des Gasgemisches, $j=1$,**DIM**

### 6.5.4 Schnittstelle DVISCO

**Ziel:** Berechnung der Ableitung des Viskositätskoeffizienten nach der Temperatur bei gefrorenen Konzentrationen

$$\left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_{X_i=\text{const.}}$$

**Input:**

| | |
|---|---|
| **DIM** | Anzahl der zu berechnenden Koeffiziententupel |
| **MMAX** | maximale Anzahl an zu berechnenden Koeffiziententupeln |
| **IMAX** | Anzahl der Komponenten des Gasgemisches |
| **T**$(j)$ | Temperatur, $j = 1$,**DIM** |
| **X**$(j,i)$ | molare Konzentration der Komponente $i$, $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX** |
| **MUEI**$(j,i)$ | Viskositätskoeffizient der Komponente $i$, $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX** |
| **PHI**$(j,l,i)$ | Hilfsgröße $\Phi_{ij}$ bei der Berechnung von $\mu$ und $\lambda$ gemäß der Mischungsregel von Wilke, $j = 1$,**DIM**, $l,i = 1$,**IMAX** |
| **MUA**$(l,i,j)$ | Koeffizienten der Kurvenfits für die Viskositätskoeffizienten $\mu_i(T)$ gemäß Kap. 5.2.2, $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX**, $l = 1,5$ |
| **JMAX** | maximale Anzahl an Diskretisierungsintervallen aller Kurvenfits |
| **JANZMU** | tatsächliche Anzahl der Diskretisierungsintervalle für $\mu_i(T)$ |
| **TMINMU** | minimale Temperatur für $\mu_i(T)$ |
| **TMAXMU** | maximale Temperatur für $\mu_i(T)$ |
| **DTPMU** | äquidistante Schrittweite für $\mu_i(T)$ |
| **IA**$(j)$ | Hilfsvektor zur Auswertung von $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T), \mu_i(T)$, $j = 1$,**DIM** |
| **W**$(i)$ | Molmasse der Komponente $i$, $i = 1$,**IMAX** |
| **DUM**$(j,i)$ | Dummy–Variable zum Speichern von Zwischenergebnissen, $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX** |
| **DMUEI**$(j,i)$ | Viskositätskoeffizient der Komponente $i$ nach der Temperatur abgeleitet bei gefrorenen Konzentrationen, $j = 1$,**DIM**, $i = 1$,**IMAX** |
| **DPHI**$(j,l,i)$ | Ableitung der Hilfsgröße $\Phi_{ij}$ bei der Berechnung von $\mu$ gemäß der Mischungsregel von Wilke, $j = 1$,**DIM**, $l,i = 1$,**IMAX** |

**Output:**

| | |
|---|---|
| **DMUE**$(j)$ | Änderung des Viskositätskoeffizienten $\mu$ des Gasgemisches bezüglich der Temperatur bei gefrorenen Konzentrationen, $j = 1$,**DIM** |

# 7 Globale Variablen

In FORTRAN 77 ist es nicht möglich, dynamisch Speicherplatz zu allokieren, d.h. die Dimensionierung von Arrays darf sich während des Programmablaufs nicht ändern. Das hat zur Folge, daß alle in einem Unterprogramm benötigten Arrays mit entsprechender Dimensionierung dort deklariert werden müssen. Daraus resultieren sehr lange Parameterlisten. Dies kann vermieden werden, in dem man die entsprechende Größen in einer Datei deklariert, diese in COMMON–Blöcken zusammenfaßt und dann als INCLUDE–Datei in das Unterprogramm einbindet. Es ist jedoch nicht sinnvoll, für jedes Unterprogramm eine solche Datei anzulegen. Dies würde bei großen Programmen, die in der Regel aus vielen Routinen bestehen, die Anzahl der Dateien unnötig erhöhen.
Es ist deshalb angebracht, nur solche Variablen und Parameter in einigen wenigen INCLUDE–Dateien zusammenzufassen, die in verschiedenen Routinen benötigt werden. Dadurch sind jedoch die Unterprogramme nicht mehr ohne weiteres austauschbar. Man muß sich also sehr genau überlegen, ob man alle Variablen über eine eventuell sehr lange Parameterliste übergibt oder über INCLUDE–Dateien einbindet.
In dem hier dokumentierten Programm wurden beide Strategien verwendet. Dabei wurde die Unterteilung nach folgenden Aspekten durchgeführt:

**INCLUDE–Dateien:**

Variablen und Parameter, auf die in verschiedenen Unterroutinen zugegriffen wird;

Variablen und Parameter, die zur numerischen Diskretisierung benötigt werden;

**Parameterliste:**

Variablen und Parameter, die den Programmablauf steuern;

Unterprogramme, die das thermodynamische Modell beschreiben, wie

- Energiemodell
- Modell der chemischen Produktionsraten und der thermischen Austauschraten
- Modell der Transport– und Diffusionsphänomene (vgl. Kap. 6)

Unterprogramme, die vom Benutzer leicht durch Alternativen zu ersetzen sein sollten.

Im folgenden sollen die globalen Variablen, nach INCLUDE–Dateien sortiert, beschrieben werden.

## 7.1 INCLUDE–Datei FIXDEK

In dieser Datei sind alle Parameter und Variablen zusammengefaßt, die

- zur Dimensionierung der Arrays
- zur Steuerung des physikalischen Modells zur Programmlaufzeit (∗**FLAG**)
- zur Festlegung der Strömung (∗**REF**)

benötigt werden. Diese Datei muß immer zusätzlich zu den anderen INCLUDE–Dateien eingebunden werden, da hier die Array–Dimensionierung festgelegt ist.
Die einzelnen Variablen und Parameter sind:

**DIMMAX** Anzahl der Komponenten des Erhaltungsvektors $(\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E)$, (hier: 4, da 2D)

**NMAX** maximale Interpolationsordnung $(\geq 1)$

**MXMAX** maximale Anzahl von Punkten entlang der Parameterkurve in $\xi$–Richtung ($\geq$ **MZAHLX** $+ 1$)

**MYMAX** maximale Anzahl von Punkten entlang der Parameterkurve in $\eta$–Richtung ($\geq$ **MZAHLY** $+ 1$)

**MMAX** Maximum von **MXMAX** und **MYMAX**

**IMAX** Anzahl der Komponenten des Gasgemisches

**RMAX** Anzahl der verschiedenen Gleichgewichtskonstanten

**VMAX** Anzahl der mehratomigen Komponenten

**TKMAX** Anzahl der verschiedenen Temperaturen

**FGMAX** Anzahl der Energiemodi $\{TR, vib, el\}$ aller Komponenten

**IKMAX**$(\alpha)$ Anzahl der Freiheitsgrade $\{TR, vib, el\}$, die mit der Temperatur $T^\alpha$ vorliegen, $\alpha = 1$,**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**MF**$(k, \alpha)$ Freiheitsgrad des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ vorliegt, $k = 1$,**IKMAX**$(\alpha)$, $\alpha = 1$,**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**IK**$(k, \alpha)$ Komponente des $k$-ten Energiemodes, der mit $T^\alpha$ vorliegt, $k = 1$,**IKMAX**$(\alpha)$, $\alpha = 1$,**TKMAX** (Beachte: Für $\alpha = 1$ werden Translations– und Rotationsfreiheitsgrad $(m = TR)$ nicht mitgerechnet)

**IOFORM** Ausgabeformat der Daten

**SPEZIE**$(i)$ Komponente $i$ des Gasgemisches, $i = 1$,**IMAX**

**REAKT**$(i)$ Reaktionsklasse $i$, die mit der gleichen Gleichgewichtskonstante einhergeht, in der gleichen Reihenfolge abgespeichert, wie diese in **CHEOME** berechnet werden, $i = 1$,**RMAX**

**RGK** universelle Gaskonstante

**TREF** Temperatur in der Anströmung

**PREF** Druck in der Anströmung

**XREF**($i$) Massenbruch der Komponente $i$ in der Anströmung, $i = 1$,**IMAX**

**EREF**($\alpha$) volumenspezifische innere Energie $\epsilon^\alpha$ in der Anströmung, die mit der Temperatur $T^\alpha$ vorliegt, $\alpha = 2$,**TKMAX**

**ENGREF** Summe aller volumenspezifischen inneren Energien in der Anströmung, die mit $T^\alpha$ vorliegen, $\alpha \neq 1$

**RHOREF** Massendichte in der Anströmung

**MREF** Impuls in $x_1$–Richtung in der Anströmung

**NREF** Impuls in $x_2$–Richtung in der Anströmung

**REREF** Totalenergie in der Anströmung

**FEREF** Bindungsenergie in der Anströmung

$$\sum_{i=1}^{\mathbf{IMAX}} Y_i e_i^0$$

**TWALL**($i$) Körpertemperatur in der nichtadiabaten Wand $\Gamma_i$, $i = 1, 4$ (vgl. Kap. 4.5.1)

**XWALL**($i$) Massenbruch in der Wand $i = 1$,**IMAX** (vgl. Kap. 4.5.1)

**NSFLAG** Wahl der Strömung:

| | |
|---|---|
| reibungsfrei | (0) |
| reibungsbehaftet | (1) |

**CFLAG** chemische und thermische Modellierung des Gasgemisches:

| | |
|---|---|
| chemisch und thermisch gefroren | (0) |
| chemisches und thermisches Nichtgleichgewicht | (1) |

**OFLAG** Operatorsplitting für den Quellterm der chemischen Produktionsraten (vgl. (42))

| | |
|---|---|
| ohne Operatorsplitting | (0) |
| mit Operatorsplitting | (1) |

**GFLAG** Wahl der Geometrie (vgl. Kap. 5.2.1)

| | |
|---|---|
| eben | (0) |
| quasi–2D, rotationssymmetrisch | (1) |
| eben, achsensymmetrisch | (2) |

**WFLAG** Modellierung der Körperwand

| | |
|---|---|
| adiabat | (0) |
| nicht adiabat | (1) |

**KWFLAG** Modellierung der chemischen Zusammensetzung in der Körperwand

| | |
|---|---|
| voll katalytisch | (0) |
| nicht katalytisch | (1) |

**RFLAG**($i$) Zuordnung eines Randtyps zu dem Rand $\Gamma_i$, $i$, $i = 1, 4$

| | |
|---|---|
| Hypersonischer Inflow | (1) |
| Hypersonischer Outflow | (2) |
| Körperwand (Haftbedingung, Navier–Stokes) | (3) |
| Körperwand (Verdünnungswelle, Euler) | (4) |
| Körperwand (Reflexion, Euler) | (5) |
| Symmetrieachse (Rotationssymmetrie, nur $\Gamma_3$ und $x_2 = 0$) | (6) |
| Symmetrieachse (Achsensymmetrie, nur $\Gamma_3$ und $x_2 = 0$) | (7) |

**KFLAG**($i$) Charakterisierung des Randes $\Gamma_i$, $i = 1, 4$

| | |
|---|---|
| freier Strömungsrand | (0) |
| feste Körperwand | (1) |

**PFLAG** Überprüfung auf positiven Druck

| | |
|---|---|
| ohne Test | (0) |
| mit Test | (1) |

**Achtung:** Bei **IKMAX**, **MF** und **IK** werden für $\alpha = 1$ die Translations– und Rotationsfreiheitsgrade ($m = TR$) **nicht** mitgezählt!

## 7.2 INCLUDE–Datei FLDEK

Hier sind alle globalen Variablen zusammengefaßt, die benötigt werden für:

- Mittelwerte
- numerische Flüsse
- Quellterm der chemischen Produktionsraten
- Dateinamen zur Steuerung der Ein– und Ausgabe.

**ASTEPS** Anzahl der schon durchgeführten Zeitschritte

**NSTEPS** Anzahl der in diesem Programmlauf auszuführenden Zeitschritte

**ZSTEPS** Anzahl der Zeitschritte, nach denen die Daten zwischengespeichert werden sollen

**SSTEPS** Anzahl der Zeitschritte, nach denen überprüft werden soll, ob die Strömung stationär ist

**DATINP** Dateiname der Daten zum alten Zeitpunkt $t = t_{\mathbf{ASTEPS}}$

**DATZWI** Dateiname zum Zwischenspeichern der Daten

**DATOUT** Dateiname der Daten zum neuen Zeitpunkt $t = t_{\mathbf{ASTEPS+NSTEPS}}$

**REFQUA** Dateiname für die Referenzgrößen der Strömung

**MZAHLX** Anzahl der Zellen entlang der Parameterkurve in $\xi$–Richtung $-3$

**MZAHLY** Anzahl der Zellen entlang der Parameterkurve in $\eta$–Richtung $-3$

**DELTAT** Zeitschrittweite

**MW**$(j,k,i)$ Mittelwerte der Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in der Zelle $V_{j,k}$

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1,\ k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1,\ i = 1, 4$

**MWI**$(j,i,l)$ Mittelwerte der Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ am Rand $l$ innerhalb des Rechengebietes (wird nur für das zonale Konzept benötigt)

$j = 0, \mathbf{MMAX},\ i = 1, \mathbf{DIMMAX},\ l = 1, 4$

**MWA**$(j,i,l)$ Mittelwerte der Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ am Rand $l$ außerhalb des Rechengebietes (wird nur für das zonale Konzept benötigt)

$j = 0, \mathbf{MMAX},\ i = 1, \mathbf{DIMMAX},\ l = 1, 4$

**MWALT**$(j,k,i)$ wie **MW**, aber zum alten Zeitpunkt

**MWRHO**$(j,k,i)$ Mittelwerte der Partialdichten $\rho_i$ in der Zelle $V_{j,k}$

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1,\ k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1,\ i = 1,\mathbf{IMAX}$

**MWRHOI**$(j,i,l)$ Mittelwerte der Partialdichten $\rho_i$ am Rand $l$ innerhalb des Rechengebietes (wird nur für das zonale Konzept benötigt)

$j = 0, \mathbf{MMAX},\ i = 1, \mathbf{IMAX},\ l = 1, 4$

**MWRHOA**$(j,i,l)$ Mittelwerte der Partialdichten $\rho_i$ am Rand $l$ außerhalb des Rechengebietes (wird nur für das zonale Konzept benötigt)

$j = 0, \mathbf{MMAX},\ i = 1, \mathbf{IMAX},\ l = 1, 4$

**MWX**$(j,k,i)$ Mittelwerte der Massenbrüche $Y_i$ in der Zelle $V_{j,k}$

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1,\ k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1,\ i = 1,\mathbf{IMAX}$

**MWE**$(j,k,\alpha)$ Mittelwerte der volumenspezifischen inneren Energie, die mit $T^\alpha$ in der Zelle $V_{j,k}$ vorliegt,

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1,\ k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1,\ \alpha = 2, \mathbf{TKMAX}$

**MWEI**$(j,i,l)$ Mittelwerte der volumenspezifischen inneren Energie, die mit $T^\alpha$ vorliegt, am Rand $l$ innerhalb des Rechengebietes (wird nur für das zonale Konzept benötigt)

$j = 0, \mathbf{MMAX},\ i = 1, \mathbf{TKMAX},\ l = 1, 4$

**MWEA**$(j,i,l)$ Mittelwerte der volumenspezifischen inneren Energie, die mit $T^\alpha$ vorliegt, am Rand $l$ außerhalb des Rechengebietes (wird nur für das zonale Konzept benötigt)

$j = 0, \mathbf{MMAX}$, $i = 1, \mathbf{TKMAX}$, $l = 1, 4$

**MWEALT**$(j,k,\alpha)$ wie **MWE**, aber zum alten Zeitpunkt

**MWENG**$(j,k)$ Summe der Mittelwerte der volumenspezifischen inneren Energien, die mit $T^\alpha$, $\alpha = 2$,**TKMAX**, in der Zelle $V_{j,k}$ vorliegen,

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1$,

**MWT**$(j,k,\alpha)$ Mittelwerte der Temperatur $T^\alpha$ in der Zelle $V_{j,k}$

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1$ $\alpha = 1, \mathbf{TKMAX}$

**MWP**$(j,k)$ Mittelwerte des Druckes in der Zelle $V_{j,k}$

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1$,

**MWFE**$(j,k)$ Mittelwerte der Bildungsenergie $\sum_{i=1}^{\mathbf{IMAX}} Y_i e_i^0$ in der Zelle $V_{j,k}$

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1$

**VFXI**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des viskosen Flusses zu $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in $x_1$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = -1, \mathbf{MZAHLX}$, $k = 0, \mathbf{MZAHLY} + 1$, $i = 1$,**DIMMAX**

**VGXI**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des viskosen Flusses zu $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in $x_2$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = -1, \mathbf{MZAHLX}$, $k = 0, \mathbf{MZAHLY} + 1$, $i = 1$,**DIMMAX**

**VFETA**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des viskosen Flusses zu $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in $x_1$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = 0, \mathbf{MZAHLX}$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY}$, $i = 1$,**DIMMAX**

**VGETA**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des viskosen Flusses zu $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in $x_2$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = 0, \mathbf{MZAHLX}$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY}$, $i = 1$,**DIMMAX**

**VFXID**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des viskosen Massenflusses von $\rho_i$ in $x_1$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = -1, \mathbf{MZAHLX}$, $k = 0, \mathbf{MZAHLY}$, $i = 1$,**IMAX**

**VGXID**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des viskosen Massenflusses von $\rho_i$ in $x_2$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = -1,$ **MZAHLX**, $k = 0,$ **MZAHLY**, $i = 1,$**IMAX**

**VFETAD**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des viskosen Massenflusses von $\rho_i$ in $x_1$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = 0,$ **MZAHLX**, $k = -1,$ **MZAHLY**, $i = 1,$**IMAX**

**VGETAD**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des viskosen Massenflusses von $\rho_i$ in $x_2$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = 0,$ **MZAHLX**, $k = -1,$ **MZAHLY**, $i = 1,$**IMAX**

**VFXIN**$(j,k,\alpha)$ $\alpha$–te Komponente des viskosen Flusses von $\epsilon^\alpha$ in $x_1$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = -1,$ **MZAHLX**, $k = 0,$ **MZAHLY**, $\alpha = 2,$**TKMAX**

**VGXIN**$(j,k,\alpha)$ $\alpha$–te Komponente des viskosen Flusses von $\epsilon^\alpha$ in $x_2$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = -1,$ **MZAHLX**, $k = 0,$ **MZAHLY**, $\alpha = 2,$**TKMAX**

**VFETAN**$(j,k,\alpha)$ $\alpha$–te Komponente des viskosen Flusses von $\epsilon^\alpha$ in $x_1$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = 0,$ **MZAHLX**, $k = -1,$ **MZAHLY**, $\alpha = 2,$**TKMAX**

**VGETAN**$(j,k,\alpha)$ $\alpha$–te Komponente des viskosen Flusses von $\epsilon^\alpha$ in $x_2$–Richtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = 0,$ **MZAHLX**, $k = -1,$ **MZAHLY**, $\alpha = 2,$**TKMAX**

**NFLXI**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des numerischen inviskosen Flusses zu $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in Normalenrichtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = -1,$ **MZAHLX**, $k = 0,$ **MZAHLY**, $i = 1,$**DIMMAX**

**NFLETA**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des numerischen inviskosen Flusses zu $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in Normalenrichtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = 0,$ **MZAHLX**, $k = -1,$ **MZAHLY**, $i = 1,$**DIMMAX**

**CNFXI**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des numerischen inviskosen Flusses zu $\rho_i$ in Normalenrichtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = 0,$ **MZAHLX**, $k = -1,$ **MZAHLY**, $i = 1,$**IMAX**

**CNFETA**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des numerischen inviskosen Flusses zu $\rho_i$ in Normalenrichtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = -1,$ **MZAHLX**, $k = 0,$ **MZAHLY**, $i = 1,$**IMAX**

**VNFETA**$(j,k,\alpha)$ $\alpha$–te Komponente des numerischen inviskosen Flusses zu $\epsilon^\alpha$ in Normalenrichtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = 0,$ **MZAHLX**, $k = -1,$ **MZAHLY**, $\alpha = 2,$ **TKMAX**

**VNFXI**$(j,k,\alpha)$ $\alpha$–te Komponente des numerischen inviskosen Flusses zu $\epsilon^\alpha$ in Normalenrichtung entlang den Zellrandmittelpunkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ der Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = -1,$ **MZAHLX**, $k = 0,$ **MZAHLY**, $\alpha = 2,$ **TKMAX**

**QUELLE**$(j,k,i)$ Quellterm der chemischen Produktionsraten in der Zelle $V_{j,k}$

$j = 0,$**MZAHLX**, $k = 0,$**MZAHLY**, $i = 1,$**IMAX**

**VQUELL**$(j,k,\alpha)$ Quellterm der thermischen Austauschraten $\Omega^\alpha$ in der Zelle $V_{j,k}$

$j = 0,$**MZAHLX**, $k = 0,$**MZAHLY**, $\alpha = 2,$ **TKMAX**

**RQ**$(j,k,i)$ Quellterm $\boldsymbol{Q}$ gemäß (68) in den Punkten $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ bzw. $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$

$j = -1,$ **MZAHLX** $+ 1$, $k = -1,$ **MZAHLY** $+ 1$, $i = 1, 3$

## 7.3 INCLUDE–Datei NETDEK

Zur Berechnung der Mittelwerte werden gitterabhängige Informationen wie

- Kantenlänge einer Zelle
- Eckpunkte einer Zelle
- Normale zu Zellrändern
- Volumen einer Zelle

benötigt. Diese sind hier zusammengefaßt:

**GITTER** Dateiname für das Gitter

**GRID**$(j,k,i)$ Koordinate $i$ eines Zelleckpunktes

$j = -2,$ **MZAHLX** $+ 1$, $k = -2,$ **MZAHLX** $+ 1$, $i = 1, 2$

**NXI**$(j,k,i)$ Koordinate $i$ der äußeren Normalen im Zellrandmittelpunkt $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$ zur Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung

$j = -1, \mathbf{MZAHLX}$, $k = 0, \mathbf{MZAHLY}$, $i = 1, 2$

**NETA**$(j,k,i)$ Koordinate $i$ der äußeren Normalen im Zellrandmittelpunkt $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$ zur Zelle $V_{j,k}$ einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung

$j = 0, \mathbf{MZAHLX}$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY}$, $i = 1, 2$

**ARCXI**$(j,k)$ Länge des Zellrandes $\Gamma_4^{j,k}$,

$j = -1$,**MZAHLX**, $k = 0$,**MZAHLY**

**ARCETA**$(j,k)$ Länge des Zellrandes $\Gamma_1^{j,k}$,

$j = 0$,**MZAHLX**, $k = -1$,**MZAHLY**

**VOL**$(j,k)$ Volumen der Zelle $V_{j,k}$,

$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1$, $k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1$

Es sei bemerkt, daß die Zelle $V_{j,k}$ durch die vier Gitterpunkte

| | |
|---|---|
| **GRID**$(j-1, k-1, i)$ | **GRID**$(j-1, k, i)$ |
| **GRID**$(j, k-1, i)$ | **GRID**$(j, k, i)$ |

$$j = -1, \mathbf{MZAHLX} + 1, \quad k = -1, \mathbf{MZAHLY} + 1, \quad i = 1, 2$$

festgelegt ist.

## 7.4 INCLUDE–Datei REKDEK

In dieser Datei stehen alle Variablen, die zur Bestimmung des Rekonstruktionspolynoms benötigt werden (vgl. Kap. 4.5.3). Hier wurde nur die eindimensionale, komponentenweise RP–Rekonstruktion entlang einer Parameterkurve durch die Zellrandmittelpunkte implementiert. Diese ist in [14], Kapitel 3 ausführlich beschrieben. Die Berechnung erfolgt für jede Parameterkurve getrennt. Die Variablen haben somit nur einen Raumindex:

**ZWNMAX** $2 * \mathbf{NMAX}$

**MZAHL** Anzahl der Zellen entlang einer Parameterkurve in $\xi$– bzw. $\eta$–Richtung $-3$, d.h.

**MZAHL** = **MZAHLX** oder **MZAHLY**

**POLGRA** Grad des Rekonstruktionspolynoms +1, d.h. Ordnung des Rekonstruktionspolynoms

**MPKXI**$(j,k)$ Parametrisierung einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung, d.h. $\eta = k =$ const. über den euklidischen Abstand der Zellrandmittelpunkte $\boldsymbol{P}_2^{j,k}$ und $\boldsymbol{P}_4^{j,k}$

$j = -$**POLGRA**,**MZAHLX** + **POLGRA**

$k = -$**POLGRA**,**MZAHLY** + **POLGRA**

**MPKETA**$(j,k)$ Parametrisierung einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung, d.h. $\xi = j =$ const. über den euklidischen Abstand der Zellrandmittelpunkte $\boldsymbol{P}_3^{j,k}$ und $\boldsymbol{P}_1^{j,k}$

$j = -$**POLGRA**,**MZAHLX** + **POLGRA**

$k = -$**POLGRA**,**MZAHLY** + **POLGRA**

**APPROX**$(l,i)$ Mittelwerte der Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ entlang einer Parameterkurve

$l = -$**POLGRA**,**MZAHL** + **POLGRA**, $i = 1$,**DIMMAX**

**MPKTE**$(l)$ parametrische Stützstellen einer Parameterkurve gemäß **MPKXI** bzw. **MPKETA**

$l = -$**POLGRA**,**MZAHL** + **POLGRA**

**REKPOL**$(l,i,k)$ $k$–ter Koeffizient des Rekonstruktionspolynoms zum Intervall $l$ der $i$–ten Komponente des Erhaltungsvektors $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$

$l = -1$, **MZAHL** $+ 1$, $k = 0$,**POLGRA**, $i = 1$,**DIMMAX**

**KMIN**$(l,i)$ kleinste Stützstelle des Rekonstruktionspolynoms zum Intervall $l$ der $i$–ten Komponente des Erhaltungsvektors $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$

$l = -1$, **MZAHL** $+ 1$, $i = 1$,**DIMMAX**

## 7.5 INCLUDE–Datei RPDEK

Alle Variablen, die zur Berechnung der Anfangszustände für die Riemannprobleme in den Zellrandmittelpunkten benötigt werden (vgl. (61),(62)), sind in dieser INCLUDE–Datei deklariert.

**NORMAL**$(l,i)$ Normalenvektor in den Zellrandmittelpunkten einer Parameterkurve in $\xi$– bzw. $\eta$–Richtung

$l = -1$,**MZAHL**, $i = 1, 2$

**UREKR**$(l,i)$ rechtsseitiger Grenzwert der Rekonstruktionspolynome zu $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in den Zellrandmittelpunkten einer Parameterkurve in $\xi$– bzw. $\eta$–Richtung

$l = -1$,**MZAHL**, $i = 1$,**DIMMAX**

**UREKL**$(l,i)$ linksseitiger Grenzwert der Rekonstruktionspolynome zu $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ in den Zellrandmittelpunkten einer Parameterkurve in $\xi$– bzw. $\eta$–Richtung

$l = -1$,**MZAHL**, $i = 1$,**DIMMAX**

**XREKR**$(l,i)$ zu **UREKR**$(\cdot,l)$ gehörender Massenbruch $Y_i$

$l=-1$,**MZAHL**, $i=1$,**IMAX**

**XREKL**$(l,i)$ zu **UREKL**$(\cdot,l)$ gehörender Massenbruch $Y_i$

$l=-1$,**MZAHL**, $i=1$,**IMAX**

**ENGRKR**$(l)$ zu **UREKR**$(\cdot,l)$ gehörende massenspezifische Energie zu den Temperaturen $T^\alpha$, $\alpha\neq 1$, $l=-1$,**MZAHL**

**ENGRKL**$(l)$ zu **UREKL**$(\cdot,l)$ gehörende massenspezifische Energie zu den Temperaturen $T^\alpha$, $\alpha\neq 1$, $l=-1$,**MZAHL**

**FERKR**$(l)$ zu **UREKR**$(\cdot,l)$, **XREKR**$(\cdot,l)$ gehörende Bindungsenergie $\sum Y_i e_i^0$

$l=-1$,**MZAHL**

**FERKL**$(l)$ zu **UREKL**$(\cdot,l)$, **XREKL**$(\cdot,l)$ gehörende Bindungsenergie $\sum Y_i e_i^0$

$l=-1$,**MZAHL**

**UREK**$(l,i,n)$ $n$–te Ableitung der $i$–ten Komponente des Vektors der Rekonstruktionspolynome in den Zellrandmittelpunkten entlang einer Parameterkurve in $\xi$– bzw. $\eta$–Richtung

$l=0,$**MZAHL**$+1$, $i=1$,**DIMMAX**, $n=0$,**POLGRA**

**XREK**$(l,i)$ zu **UREK**$(\cdot,0,l)$ gehörender Massenbruch $Y_i$

$l=0,$**MZAHL**$+1$, $i=1$,**IMAX**

**ENGREK**$(l)$ zu **UREK**$(\cdot,l)$ gehörende massenspezifische Energie zu den Temperaturen $T^\alpha$, $\alpha\neq 1$, $l=-1,$**MZAHL**$+1$

**FFL1**$(l,i,n)$ erste partielle Ableitung der $i$–ten Komponente des reibungsfreien Flusses in $x_1$–Richtung nach der $n$–ten Komponente von $(\rho,\rho\boldsymbol{v},\rho E)$

$l=0,$**MZAHL**$+1$, $i,n=1$,**DIMMAX**

**GFL1**$(l,i,n)$ erste partielle Ableitung der $i$–ten Komponente des reibungsfreien Flusses in $x_2$–Richtung nach der $n$–ten Komponente von $(\rho,\rho\boldsymbol{v},\rho E)$

$l=0,$**MZAHL**$+1$, $i,n=1$,**DIMMAX**

**PR**$(l)$ Druck bezüglich **XREK**$(l,\cdot)$, **UREK**$(\cdot,0,l)$

**PR1**$(l,i)$ erste partielle Ableitung des Druckes bei konstanten Konzentrationen (gefrorenes Gas) nach der $i$–ten Komponente von $\rho,\rho\boldsymbol{v},\rho E$

$l=0,$**MZAHL**$+1$, $i=1$,**DIMMAX**

**DUDT**$(l,i,n)$ $n$–te partielle Ableitung der $i$–ten Komponente der Erhaltungsvektors $\rho,\rho\boldsymbol{v},\rho E$ des Problems (61) an der Stelle **UREK**$(\cdot,0,l)$ nach der Zeit (vgl. (62))

$l=0,$**MZAHL**$+1$, $i=1$,**DIMMAX**, $n=0,1$

**ULXI**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des linken Anfangszustandes der Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ für das Riemannproblem in den Zellrandmittelpunkten, die auf einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung liegen

$j = -1$,**MZAHLX**, $k = 0$,**MZAHLY**, $i = 1$,**DIMMAX**

**URXI**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des rechten Anfangszustandes der Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ für das Riemannproblem in den Zellrandmittelpunkten, die auf einer Parameterkurve in $\xi$–Richtung liegen

$j = -1$,**MZAHLX**, $k = 0$,**MZAHLY**, $i = 1$,**DIMMAX**

**ULETA**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des linken Anfangszustandes der Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ für das Riemannproblem in den Zellrandmittelpunkten, die auf einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung liegen

$j = 0$,**MZAHLX**, $k = -1$,**MZAHLY**, $i = 1$,**DIMMAX**

**URETA**$(j,k,i)$ $i$–te Komponente des rechten Anfangszustandes der Größen $\rho, \rho\boldsymbol{v}, \rho E$ für das Riemannproblem in den Zellrandmittelpunkten, die auf einer Parameterkurve in $\eta$–Richtung liegen

$j = 0$,**MZAHLX**, $k = -1$,**MZAHLY**, $i = 1$,**DIMMAX**

## 7.6 INCLUDE–Datei CHEDEK

Alle Größen, die zur Berechnung des physikalischen Modells benötigt werden, wie

- Koeffizienten der Kurvenfits für die massenspezifische innere Energie und die massenspezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
- Koeffizienten der Kurvenfits für die Gleichgewichtskonstanten der einzelnen Reaktionsklassen
- Koeffizienten der Kurvenfits für den Viskositätskoeffizienten der Komponente $i$ eines reinen Gases
- Koeffizienten der Kurvenfits für die binären Diffusionskoeffizienten der Komponenten $i$ und $j$ eines binären Gasgemisches
- Molmassen der einzelnen Komponenten eines Gasgemisches
- Formationsenthalpien der einzelnen Komponenten eines Gasgemisches

sind hier deklariert:

**IEA**$(l,i,k,m)$ $l$–ter Koeffizient des stückweisen polynomialen Kurvenfits der Vibrationsenergie und der elektronischen Anregung zur $i$–ten Komponente des Gasgemisches im $k$–ten Temperaturintervall (vgl. Kap. 5.2.3)

$l = 1,4$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZEN**(i,m), $m = 1,2$

**CVA**$(l,i,k,m)$ $l$–ter Koeffizient des stückweisen polynomialen Kurvenfits für den Anteil der Vibration und der elektronischen Anregung an der isochoren Wärmekapazität zur $i$–ten Komponente des Gasgemisches im $k$–ten Temperaturintervall (vgl. Kap. 5.2.3)

$l = 1,4$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZCV**(i,m), $m = 1,2$

**JANZEN**$(i,m)$ Anzahl an Temperaturintervallen der Kurvenfits für $\tilde{e}_i^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX**

**DTPEN**$(i,m)$ äquidistante Intervallänge der Diskretisierung des Temperaturbereiches der Kurvenfits zu $\tilde{e}_i^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX**

**TMINEN**$(i,m)$ untere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\tilde{e}_i^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX**

**TMAXEN**$(i,m)$ obere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\tilde{e}_i^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX**

**JANZCV**$(i,m)$ Anzahl an Temperaturintervallen der Kurvenfits für $\tilde{c}_{V,i}^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX**

**DTPCV**$(i,m)$ äquidistante Intervallänge der Diskretisierung des Temperaturbereiches der Kurvenfits zu $\tilde{c}_{V,i}^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX**

**TMINCV**$(i,m)$ untere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\tilde{c}_{V,i}^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX**

**TMAXCV**$(i,m)$ obere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\tilde{c}_{V,i}^m(T)$, $m = 1,2$, $i = 1$,**IMAX**

**MUA**$(l,i,k)$ $l$–ter Koeffizient des stückweisen polynomialen Kurvenfits der Komponentenviskosität $\mu_i(T)$ zur $i$–ten Komponente des Gasgemisches im $k$–ten Temperaturintervall (vgl. Kap. 5.2.3)

$l = 1,5$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZMU**

**JANZMU** Anzahl an Temperaturintervallen der Kurvenfits für $\mu_i(T)$

**DTPMU** äquidistante Intervallänge der Diskretisierung des Temperaturbereiches der Kurvenfits zu $\mu_i(T)$

**TMINMU** untere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\mu_i(T)$

**TMAXMU** obere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\mu_i(T)$

**BDA**$(l,i,j,k)$ $l$–ter Koeffizient des stückweisen polynomialen Kurvenfits der binären Diffusionskoeffizienten $\tilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$ der Komponenten $i$ und $j$ des binären Gasgemisches im $k$–ten Temperaturintervall (vgl. Kap. 5.2.3)

$l = 1,5$, $i,j = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZBD**

**JANZBD** Anzahl an Temperaturintervallen der Kurvenfits für $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$

**DTPBD** äquidistante Intervallänge der Diskretisierung des Temperaturbereiches der Kurvenfits zu $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$

**TMINBD** untere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$

**TMAXBD** obere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$

**AKOEFF**$(l, i, k)$ $l$-ter Koeffizient des stückweise polynomialen Kurvenfits der Gleichgewichtskonstanten $\tilde{K}_g^l(T)$ der $i$-ten Reaktionsklasse im $k$-ten Temperaturintervall, $l = 1, 4$, $i = 1$,**IMAX**, $k = 1$,**JANZAK**

**JANZAK** Anzahl an Temperaturintervallen der Kurvenfits für $\tilde{K}_g^i(T)$

**DTPAK** äquidistante Intervallänge der Diskretisierung des Temperaturbereiches der Kurvenfits zu $\tilde{K}_g^i(T)$

**TMINAK** untere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\tilde{K}_g^i(T)$

**TMAXAK** obere Temperatur des Diskretisierungsbereiches der Kurvenfits $\tilde{K}_g^i(T)$

**JMAX** maximale Anzahl an Temperaturintervallen aller Kurvenfits

**W**$(i)$ Molmasse der Komponente $i$ des Gasgemisches, $i = 1$,**IMAX**

**FENTH**$(i)$ Formationsenthalpie der Komponente $i$ des Gasgemisches, $i = 1$,**IMAX**

**MUINP** Name der Datei, in der die Koeffizienten der Kurvenfits für $\mu_i(T)$ abgespeichert sind

**BDINP** Name der Datei, in der die Koeffizienten der Kurvenfits für $\widetilde{\mathcal{D}}_{ij}(T)$ abgespeichert sind

**ENTRINP** Name der Datei, in der die Koeffizienten der Kurvenfits für $\tilde{e}_i^{TR}(T)$ abgespeichert sind

**ENVINP** Name der Datei, in der die Koeffizienten der Kurvenfits für $\tilde{e}_i^{vib}(T)$ abgespeichert sind

**ENEINP** Name der Datei, in der die Koeffizienten der Kurvenfits für $\tilde{e}_i^{el}(T)$ abgespeichert sind

**CVVINP** Name der Datei, in der die Koeffizienten der Kurvenfits für $\tilde{c}_{V,i}^{vib}(T)$ abgespeichert sind

**CVEINP** Name der Datei, in der die Koeffizienten der Kurvenfits für $\tilde{c}_{V,i}^{el}(T)$ abgespeichert sind

**AKINP** Name der Datei, in der die Koeffizienten der Kurvenfits für $\tilde{K}_g^i(\ln T)$ abgespeichert sind

# 8 Warnungen

Ziel der Implementierung war unter anderem die Wahrung der Flexibilität bezüglich der zu simulierenden Strömungssituation. Das Programm **NSCTNG2** ist so ausgelegt, daß damit unterschiedlichste ebene und rotationssymmetrische Strömungsprobleme wie

- Staupunktprobleme
- Rampenströmungen
- Plattenströmungen
- Kanal– und Düsenströmungen, etc.

untersucht werden können.
Dies wurde durch die Implementierung verschiedener Randbedingungen erreicht. Da bisher aber nur hypersonische Staupunktprobleme konkret untersucht wurden, sind nur einige wenige Kombinationen der zur Zeit sieben Randbedingungen (siehe Kap. 4.5.1) im Rahmen einer Strömungssimulation ausgetestet worden. Dies waren folgende Parametereinstellungen für

| **NSFLAG** | **GFLAG** | **RFLAG**(1) | **RFLAG**(2) | **RFLAG**(3) | **RFLAG**(4) |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1 | 2 | 1 | 6 | 3 |
| 1 | 2 | 2 | 1 | 7 | 3 |
| 0 | 0 | 2 | 1 | 2 | 4,5 |
| 0 | 2 | 2 | 1 | 7 | 4,5 |

Bei allen anderen Parameterkombinationen können eventuell Probleme auftreten. In diesem Fall müssen die entsprechenden Routinen in **BOUND.F** überprüft werden. Sie sind zwar lokal getestet worden, dies garantiert aber keinen fehlerfreien Einsatz bei einer Strömungssimulation.
Damit verbunden sind eventuelle Fehler bei der Lösung der Riemannprobleme am Gitterrand — hier können Probleme in den Routinen in **FLINV.F** auftreten — und der Diskretisierung der reibungsbehafteten Flüsse und des Quellterms der rotationssymmetrischen Gleichungen. Letztere kann Fehler in den Routinen in **FLVIS.F** und **RQUELL.F** sowie **MWINV** in **MWSTEP.F** führen.
Bei einem anderen Strömungsproblem als der hypersonischen Staupunktberechnung an stumpfen Körpern, kann die Verwendung der Routine **PTEST** zu Problemen führen (siehe Kap. 4.5.7.1). In diesem Fall sollte **PFLAG** auf 0 gesetzt werden.
Eventuell kann es zu Problemen bei der Temperaturiteration der Nichtgleichgewichtstemperatur kommen (vgl. Kap. 6.3.2). Dann sollte überprüft werden, ob die Wahl der Starttemperatur geändert werden muß. Für sehr kleine Massenbrüche kann es geschehen, daß das Umschalten auf die Translationstemperatur schon bei nicht ganz so geringen Konzentrationen geschehen muß.
In Abhängigkeit der verwendeten Kurvenfits kann es zur Überschreitung des zugrundeliegenden Temperaturbereiches kommen. Dies führt zu falschen Speicherzugriffen in den Schnittstellen des kalorischen Modells (vgl. Kap. 6.1).

# 9 Mögliche Änderungen durch den Benutzer

Bei der Implementierung wurde darauf geachtet, daß bestimmte Programmodule in entsprechenden Dateien zusammengefaßt wurden. Dies soll es dem Benutzer erleichtern, ganze Programmodule durch eigene Routinen zu ersetzen. Exemplarisch seien im folgenden einige Änderungsmöglichkeiten angeführt:

1. Änderung der Rekonstruktionsmethode:

   Austausch der Rekonstruktionsmethode in **REKON.F** [1] (siehe die Routinen **KOMREK**, **HORNL**, **HORNR**);

   entsprechende Änderung der Variablendeklaration in **REKDEK.HNG**;

   bei Erhöhung der Rekonstruktionsordnung $N \geq 3$ muß **NMAX** in **FIXDEK.HNG** entsprechend angepaßt werden;

   **Wichtig:**

   **URXI**, **URETA**, **ULXI**, **ULETA** (vgl. Kap. 7.5) müssen nach Verlassen von **REKON** mit den Anfangsdaten für die Riemannprobleme in den Zellrandmittelpunkten belegt sein.

2. Änderung des Riemannlösers:

   Austausch der Routine **ROELSG** in **ROELSG.F**;

   Beibehaltung der Parameterliste;

   **Wichtig:**

   Der Vektor $\boldsymbol{F}$ muß mit dem Fluß in Normalenrichtung belegt sein (vgl. Kap. 4.5.4.3)

3. Änderung des Gasmodells:

   Passe **IMAX**, **VMAX**, **TKMAX**, **FGMAX**, **IKMAX**, **RMAX**, **MF**, **IK**, **SPEZIE**, **REAKT** und **IOFORM** in **FIXDEK.HNG** an die aktuelle Anzahl an Komponenten des Gasgemisches an;

   tausche die Routine **CHEOME** [2] in **CHEMIE.F** gegen eine solche aus, die die chemischen Produktionsraten des neuen Gasgemisches beschreibt (vgl. Kap. 4.4);

   berechne in **ROELSG** [3] die Flüsse in Normalenrichtung zu den Partialdichten des neuen Gasgemisches, falls der Riemannlöser von Liu und Vinokur verwendet werden soll (siehe **LVCTNG5.F**);

   aktualisiere die Dateien mit den Koeffizienten für die Kurvenfits gemäß 5.2.3;

   passe die Datenstruktur gemäß Kap. 5.2.4 an die veränderte Anzahl an Komponenten an

[1] Der Benutzer hat zur Zeit drei Alternativen zur Auswahl (siehe Kap. 4.5.3).
[2] Der Benutzer hat zur Zeit zwei Alternativen zur Auswahl (siehe Kap. 6.4.1).
[3] Der Benutzer hat zur Zeit zwei Alternativen zur Auswahl (siehe Kap. 4.5.4.3).

4. Änderung der Koeffizienten der Kurvenfits:

   Falls mehr als 15 Temperaturintervalle für die Kurvenfits gewählt werden, so passe **JMAX** in **CHEDEK.HNG** entsprechend an;

5. Änderung des Transport– und Diffusionsmodells

   Sollen die Diffusionsflüsse sowie die Transport– und Diffusionskoeffizienten nach anderen Modellen bzw. Mischungsregeln berechnet werden, so müssen die Routinen **MDIFF**, **KOEFF**, **VISCOE** und **DVISCO** in **TRKO.F** entsprechend geändert werden (vgl. Kap. 6.5).

# 10 Compilieren, Linken und Programmstart

Vor dem Programmstart müssen folgende Dateien compiliert und gelinkt werden:

| | | |
|---|---|---|
| **NSCTNG2.F** | **MWQUAN.F** | **MWSTEP.F** |
| **OUTPUT.F** | **INPUT.F** | **REKON.F**[1] |
| **TEST.F** | **INITIAL.F** | **FLINV.F** |
| **CHEMIE.F**[2] | **FLVIS.F** | **RQUELL.F** |
| **BOUND.F** | **ROELSG.F**[3] | **TRKO.F**[4] |
| **CFD.F** | | |

Dies geschieht automatisch mit dem Aufruf

**make -f nsctng2.m**

des MAKE-Files **nsctng2.m**. Daraus resultiert das lauffähige Programm **nsctng2.out**. Dieses wird aufgerufen mit

**nsctng2.out** <**'input'**>.

Dabei steht **input** für den Namen der Datei, in der die Parameter für die Strömungssimulation und die erforderlichen Dateinamen stehen. Die Dateistruktur kann Kap 5.2.1 entnommen werden.
Desweiteren müssen vor dem Programmstart folgende Datein erzeugt werden, damit zur Laufzeit darauf zugegriffen werden kann:

- Referenzgrößen der Anströmung (Kap. 5.2.2)
- Gitter (Kap. 5.2.3)
- Mittelwerte (Kap. 5.2.4)
- Tabellen der Koeffizienten des Energie–, des Transport–, des Diffusionsmodells sowie der Gleichgewichtskonstanten (Kap. 5.2.5)

Nach dem Programmablauf stehen die neuen Mittelwerte in der Datei mit dem Namen, der in **DATOUT** abgespeichert ist. Desweiteren wird der Ablauf der Strömungssimulation in einer Datei mit dem Namen

fn.**PRO**

dokumentiert, wobei fn identisch mit dem Namen in **DATOUT** ist.

[1]Der Benutzer hat zur Zeit drei Alternativen zur Auswahl (siehe Kap. 4.5.3).
[2]Der Benutzer hat zur Zeit zwei Alternativen zur Auswahl (siehe Kap. 6.4.1).
[3]Der Benutzer hat zur Zeit zwei Alternativen zur Auswahl (siehe Kap. 4.5.4.3).
[4]Der Benutzer hat zur Zeit drei Alternativen zur Auswahl (siehe Kap. 6.5).

# 11 Anhang

## 11.1 Abbildungen

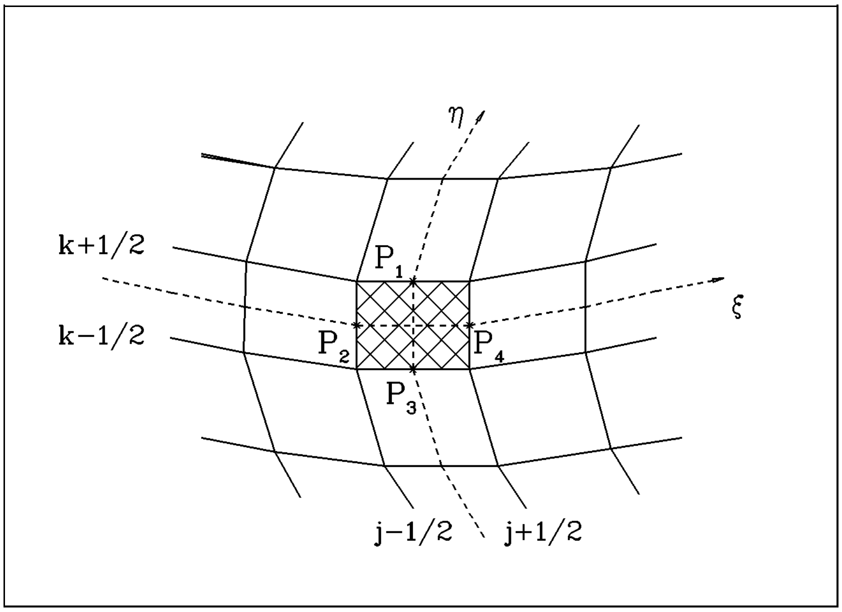


Abbildung 1: (entnommen aus [3], S. 33)

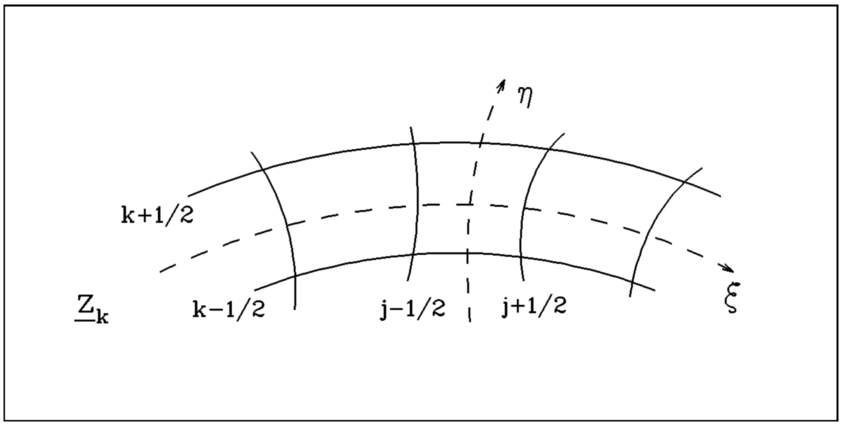


Abbildung 2: (entnommen aus [3])

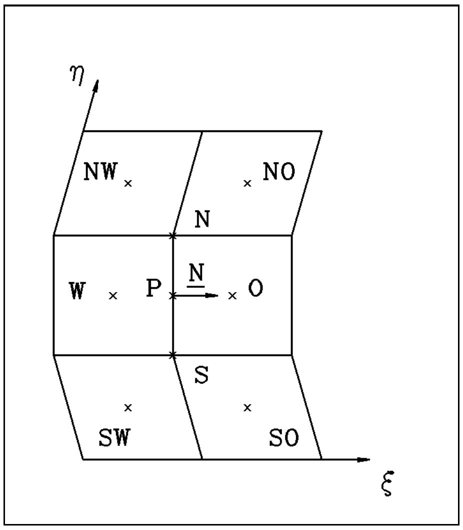


Abbildung 3: (entnommen aus [3])

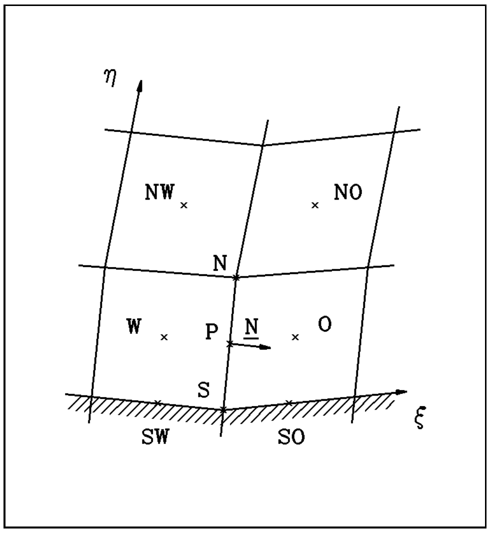


Abbildung 4: (entnommen aus [3])

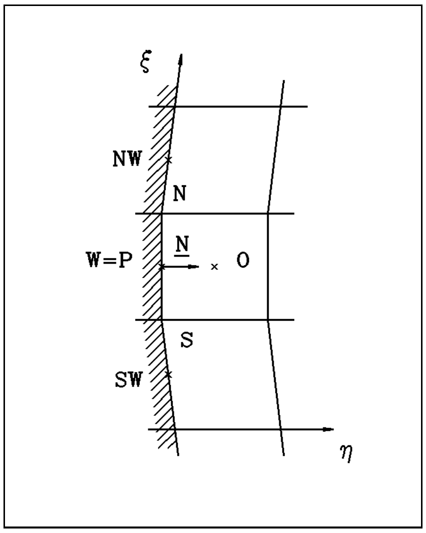


Abbildung 5: (entnommen aus [3])

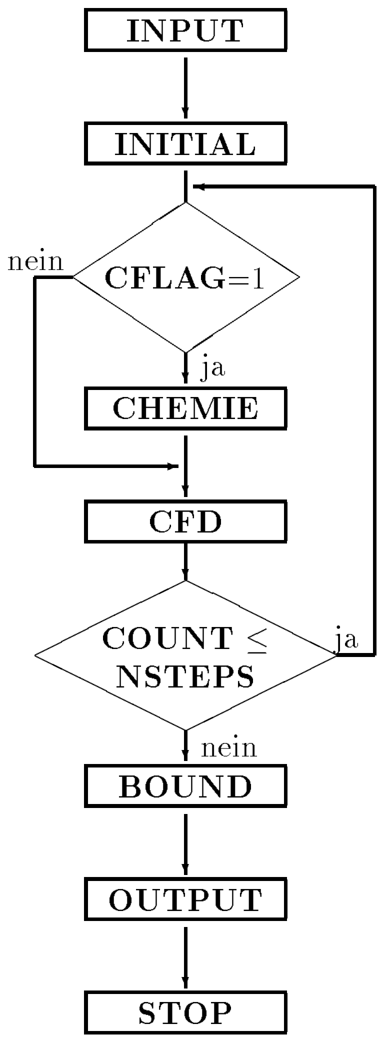


Abbildung 6: Flußdiagramm des Programms **NSCTNG2**

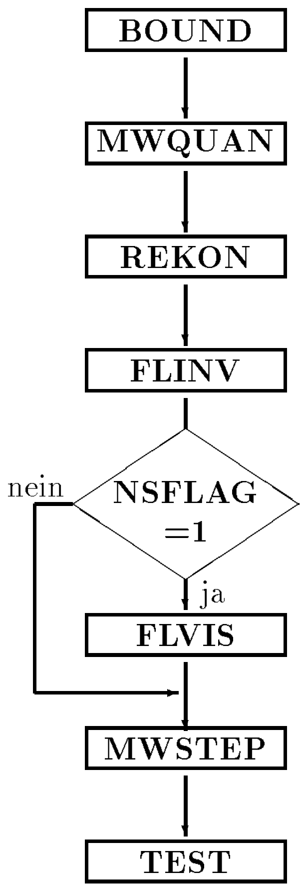


Abbildung 7: Flußdiagramm der Routine **CFD**

## 11.2 Zuordnung Datei — Unterprogramm

Um dem Benutzer das Auffinden von Routinen zu erleichtern, sind im folgenden, nach Dateien sortiert, die darin enthaltenen Unterprogramme aufgeführt:

| | | | |
|---|---|---|---|
| **NSCNG2.F** | : **NSCTNG2** | (Hauptprogramm) | |
| **CFD.F** | : **CFD** | | |
| **INPUT.F** | : **INPUT** | | |
| **INITIAL.F** | : **INITIAL** | **DATINI** | **PHYINI** |
| | **REFINI** | **NETINI** | **ENORM** |
| | **VPROD** | **NORMAL** | **VOLUME** |
| | **ARCLEN** | **NUMMER** | |
| **CHEMIE.F** | : **CHEMIE** | **CHEOME** | **EULER** |
| **BOUND.F** | : **BOUND** | **EPIBOU** | **WALLS** |
| | **WALLR** | **PRABOU** | **REKBOU** |
| | **SYMROT** | **WALLV** | **ECKE** |
| | **HYPOUT** | **SYMACH** | **HYPIN** |
| **MWQUAN.F** | : **MWQUAN** | **MWENTH** | **MWMFRA** |
| | **MWIENG** | **MWTEMP** | **MWALTU** |
| | **MWPRES** | | |
| **REKON.F** | : **REKINI** | **STAXI** | **REKON** |
| | **STAETA** | **REKXI** | **REKETA** |
| | **TAYLOR** | **KOMREK** | **STATEL** |
| | **STATER** | **RPREK** | **HORNL** |
| | **HORNR** | **JACOBI** | |
| **FLINV.F** | : **RPS** | **RPSN** | **FIBOU** |
| **RPSOLV.F** | : **ROELSG** | | |
| **FLVIS.F** | : **VFLPAR** | **VFLWAL** | |
| **RQUELL.F** | : **RQUXI** | **RQUETA** | **RQVWXI** |
| | **RQWVETA** | | |
| **PHYQUAN.F** | : **IET** | **CVT** | **IETA** |
| | **CVIM** | **IEI** | **CVI** |
| | **IEIM** | **TEMP** | **TEMPNG** |
| **MWSTEP.F** | : **MWSTEP** | **MWVIS** | **MWINV** |
| **TEST.F** | : **TEST** | **PTEST** | **STEADY** |
| **TRKO.F** | : **MDIFF** | **KOEFF** | **VISCOE** |
| | **DVISCO** | | |

**OUTPUT.F : OUTDAT OUTPUT**

# Literatur

[1] Müller S., *"NSCNG2 – Ein Programm zur räumlich zweidimensionalen, instationären Strömungssimulation thermisch perfekter aber kalorisch nicht perfekter Gasgemische im chemischen Nichtgleichgewicht"*, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen, Institutsbericht Nr. 89, 1993

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

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

[4] Neuwerth G., Staufenbiel R., *"Geometrie der Konfiguration ELAC-1"*, Interner Bericht Nr. 1, Teilprojekt A4, 1990

[5] Park C., *"On the Convergence of Computation of Chemically Reacting Flows"*, AIAA-Paper 085-0247, 1985

[6] Park C., *"Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics"*, John Wiley & Sons Inc., 1990

[7] Marrone T.V., Treanor C.E., *"Effect of Dissociation on the Rate of Vibrational Excitation"*, The Physics of Fluids, Vol. 5, No. 9, Sep. 1962

[8] Milikan R.C., White D.R., *"Systematics of Vibrational Relaxation"*, J. of Chem. Phys. Vol. 39, No. 12, Dec. 1962, pp. 3209 - 3213

[9] 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 Technical Memorandum C01528, 1989

[10] Klomfaß A., *Unveröffentlichte Arbeitspapiere*

[11] Klomfaß A., Müller S., Ballmann J., *"Modellierung Hypersonischer Staupunktströmungen"*, Lehr– und Forschungsgebiet für Mechanik, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen, 1993

[12] Klomfaß A., Müller S., Ballmann J., *"Modelling of Transport Phenomena for the Hypersonic Stagnation Point Heat Transfer Problem"*, AIAA-Paper 93-5047 Presented at: AIAA/DGLR Fifth International Aerospace Planes and Hypersonics Technologies Conference, 30. November - 3. December 1993, Munich, Germany

[13] Klomfaß A., Ballmann J., *"A Numerical Study on Hypersonic Non-Equilibrium Nitrogen Flow Modelling"*, Lehr– und Forschungsgebiet für Mechanik, RWTH Aachen, unveröffentlichte Arbeitspapiere (1993)

[14] 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

[15] 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

[16] Hirschfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B., *"Molecular Theory of Gases and Liquids"*, John Wiley & Sons Inc., 4. Auflage, 1967

[17] 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

[18] Esser, B., *"Die Zustandsgrößen im Stoßwellenkanal als Ergebnisse eines exakten Riemannlösers"*, Dissertation, Stoßwellenlabor, RWTH Aachen, 1991