

# ОПИСАНИЕ ПАКЕТА ПРОГРАММ SOVA, ПРЕДНАЗНАЧЕННОГО ДЛЯ РАСЧЕТА РАВНОВЕСНОГО СОСТАВА И КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЕРЕНОСА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ В ВЫСШИХ ПРИБЛИЖЕНИЯХ МЕТОДА ЧЕПМЕНА - ЭНСКОГА

Соколова И.А., Васильевский С.А., Андриатис А.В.

Москва, *vasil@ipmnet.ru*

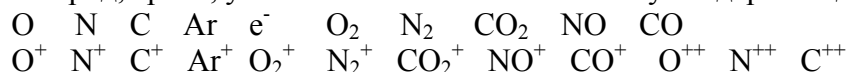
Представлено описание пакета программ SoVA, предназначенного для расчета равновесного состава, термодинамических функций, коэффициентов переноса и эффективных коэффициентов для многокомпонентной реагирующей частично ионизованной смеси газов с учетом высших приближений метода Чепмена - Энскога. Представлены уравнения переноса и входящие в эти уравнения коэффициенты переноса - вязкость, теплопроводность, электропроводность, коэффициенты, характеризующие диффузионные и термодиффузионные свойства компонент. Даны формулы для коэффициентов переноса для произвольного числа высших приближений. Для химически равновесной смеси приведена компактная форма записи уравнений переноса и формулы для эффективных коэффициентов, учитывающих вклад равновесных химических реакций, с учетом высших приближений. Представлены результаты расчетов для различных газов (воздух, углекислый газ, аргон) в широком диапазоне давления (0.0001 - 100 атм) и температуры (300 - 20 000 К). Исследуется сходимость коэффициентов переноса и эффективных коэффициентов с увеличением номера приближения до четвертого приближения включительно. Дано описание моделей потенциалов взаимодействия частиц и интегралов столкновений, используемых в расчетах.

## 1. Краткая характеристика пакета SoVA

### 1.1. Назначение и технические данные

Пакет предназначен для расчета равновесного состава, термодинамических функций и коэффициентов переноса многокомпонентной смеси газов или плазмы в широком диапазоне давления (0.0001 - 100 атм) и температуры (300 - 20 000 К). Здесь и далее плазмой называется низкотемпературная плазма, или многокомпонентная смесь реагирующих частично ионизованных газов, которая может содержать молекулы, атомы, электроны, однократно ионизованные молекулы и атомы, двукратно ионизованные атомы.

В стандартной версии пакета рассматриваются смеси, образованные следующими газами: азот, кислород, аргон, углекислый газ. Эти смеси могут содержать до 22-х компонент:



где через  $e^-$  обозначена электронная компонента. Элементный состав смеси, определяемый массовыми концентрациями элементов O, N, C, Ar, может быть произвольным. Конкретные расчеты проводились для следующих газов и газовых смесей: азот, кислород, аргон, воздух, углекислый газ, смеси углекислого газа и азота с различным содержанием азота.

Пакет снабжен простым графическим интерфейсом, контекстно-зависимыми подсказками и демонстрационной версией. Благодаря простому интерфейсу, пакет занимает мало оперативной и дисковой памяти. Пакет был разработан для работы на IBM-совместимых

персональных компьютерах с процессором Intel (или его аналогами), начиная с Intel-286. Время расчета всех параметров плазмы для одной заданной точки (фиксированное давление, фиксированная температура) на Pentium-200 - меньше секунды.

Пакет SoVA включен в автоматизированную базу данных по физико-химическим свойствам веществ АВОГАДРО Института Механики МГУ.

## 1.2. Входные параметры

Основные входные параметры:

давление  $P$ , атм,

температура  $T$ , К.

Элементный состав смеси задается с помощью молярных концентраций основных компонент при нормальных условиях  $x_k^{(0)}$ ,  $k=1, \dots, N$ , где  $N$  - общее число компонент смеси. Нормальные условия соответствуют  $P^{(0)}=1$  атм,  $T^{(0)}=300$  К. Например, элементный состав воздуха задается следующим образом:

$x_{O_2}^{(0)}=0.2095$ ;  $x_{N_2}^{(0)}=0.7808$ ;  $x_{Ar}^{(0)}=0.0097$ ; концентрации остальных компонент равны нулю.

В качестве входных параметров должны быть заданы также номера ненулевых приближений  $\xi'$  для расчета основных коэффициентов переноса: вязкости ( $1 \leq \xi'_\mu \leq 2$ ), теплопроводности ( $1 \leq \xi'_\lambda \leq 3$ ), электропроводности ( $1 \leq \xi'_\sigma \leq 3$ ). Для вязкости и электропроводности номер ненулевого приближения совпадает с обычным номером приближения:  $\xi'_\mu = \xi_\mu$ ;  $\xi'_\sigma = \xi_\sigma$ . Коэффициент теплопроводности в первом приближении равен нулю, первым ненулевым приближением для него является второе приближение, поэтому  $\xi'_\lambda = \xi_\lambda - 1$ . Здесь номер приближения  $\xi$  есть число членов, учитываемых в разложениях возмущенных функций распределения по полиномам Сонина. Номера приближений для остальных коэффициентов переноса определяются следующим образом:

$$\xi'_{k_T} = \xi'_\Delta = \xi'_\lambda; \quad \xi'_{D_T} = \xi'_{D_{ik}} = \xi'_\sigma.$$

С помощью пакета можно также проводить расчеты переносных свойств химически неравновесной или замороженной плазмы. В этом случае молярные концентрации всех компонент смеси  $x_k$ ,  $k=1, \dots, N$ , не вычисляются, а задаются как входные параметры для каждой точки, т.е. для заданных значений  $P$  и  $T$ .

Демонстрационная версия, приведенная на интернет-сайте, была написана для ПК с малой оперативной памятью и поэтому имеет дополнительные ограничения на число приближений: при большом числе компонент смеси (например, при расчете воздуха) максимально возможные номера приближения  $\xi'_\lambda$  и  $\xi'_\sigma$  равны 2, а не 3. Кроме того, расчет для углекислого газа возможен только начиная с  $T=600$  К.

## 1.3. Выходные параметры

Химический состав равновесной смеси - молярные концентрации всех компонент смеси  $x_k$ ,  $k=1, \dots, N$ .

Термодинамические параметры отдельных компонент:

$h_k$  - удельные энтальпии компонент, Дж / кг,

- $c_{pk}$  - удельные теплоемкости компонент при постоянном давлении, Дж / (кг·К),  
 $q_k$  - удельные теплоты образования компонент (теплоты реакций), Дж / кг,

Термодинамические параметры смеси:

- $m$  - молекулярная масса, кг / кмоль,  
 $\rho$  - плотность, кг / м<sup>3</sup>,  
 $h$  - удельная энтальпия, Дж / кг,  
 $c_p$  - удельная теплоемкость при постоянном давлении, Дж / (кг·К).

Эффективные термодинамические параметры равновесно реагирующей смеси:

- $c_{pr}$  - вклад в удельную теплоемкость при постоянном давлении за счет равновесных реакций, Дж / (кг·К),  
 $c_{peff}$  - полная (эффективная) удельная теплоемкость при постоянном давлении,  
 $c_{peff} = c_p + c_{pr}$ , Дж / (кг·К),  
 $\gamma_{eff}$  - эффективный показатель адиабаты.

Коэффициенты переноса смеси:

- $\mu$  - вязкость, Па·с,  
 $\lambda^r$  - теплопроводность за счет поступательных степеней свободы, Вт / (м·К),  
 $\lambda^{int}$  - теплопроводность за счет внутренних степеней свободы, Вт / (м·К),  
 $\lambda$  - теплопроводность,  $\lambda = \lambda^r + \lambda^{int}$ , Вт / (м·К),  
 $\sigma$  - электропроводность плазмы, 1 / (Ом·м),

Эффективные коэффициенты переноса равновесно реагирующей смеси:

- $\lambda_r$  - теплопроводность за счет равновесных реакций, Вт/(м·К),  
 $\lambda_{eff}$  - эффективная теплопроводность,  $\lambda_{eff} = \lambda + \lambda_r$ , Вт/(м·К),  
 $Pr_{eff}$  - эффективное число Прандтля.

Термодиффузионные свойства отдельных компонент:

- $k_{Tk}$  - термодиффузионные отношения компонент,  
 $D_{Tk}$  - коэффициенты термодиффузии, кг / (м·с).

Коэффициенты диффузии для всех пар компонент:

- $\Delta_{ik}$  - диффузионные коэффициенты сопротивления, 10<sup>-20</sup> м·с,  
 $D_{ik}$  - многокомпонентные коэффициенты диффузии, м<sup>2</sup> / с.

Для всех размерных величин, кроме специально оговоренных случаев, используется система единиц СИ.

1.4. Режимы работы

Пакет позволяет проводить расчеты в двух режимах - диалоговом и автономном.

В диалоговом режиме (калькулятор) перед началом расчета задаются входные параметры:

- давление  $P$ ;
- температура  $T$ ;
- концентрации всех компонент при нормальных условиях  $x_k^{(0)}$ ,  $k=1, \dots, N$ , определяющие элементный состав смеси;
- номера ненулевых приближений  $\xi'_\mu, \xi'_\lambda, \xi'_\sigma$ .

Затем для заданной "точки"  $(P, T)$  проводится расчет равновесного состава, термодинамических параметров и всех (или только некоторых выбранных) коэффициентов переноса газа или плазмы заданного элементного состава.

В диалоговом режиме можно также рассчитать коэффициенты переноса химически неравновесной или замороженной смеси заданного химического состава. В этом случае вместо концентраций компонент при нормальных условиях  $x_k^{(0)} = x_k^{(0)}(P^{(0)}, T^{(0)})$  в качестве входных параметров должны быть заданы концентраций всех компонент химически неравновесной смеси  $x_k$ ,  $k=1, \dots, N$ , определенные предварительно по какой-либо другой программе для заданных значений  $P, T$ .

Результаты расчета в диалоговом режиме можно увидеть на экране монитора в виде одной из четырех таблиц:

- 1) термодинамические параметры и коэффициенты переноса для смеси в целом  $h, \rho, m, \gamma_{\text{eff}}, c_p, c_{pT}, c_{peff}, \mu, \lambda^r, \lambda^{int}, \lambda_T, \lambda_{\text{eff}}, Pr_{\text{eff}}, \sigma$ ;
- 2) молярные концентрации смеси  $x_k$ , термодинамические и переносные свойства отдельных компонент  $h_k, c_{pk}, k_{Tk}, D_{Tk}, k=1, \dots, N$ ;
- 3) диффузионные коэффициенты сопротивления  $\Delta_{ik}, i, k=1, \dots, N$ ;
- 4) многокомпонентные коэффициенты диффузии  $D_{ik}, i, k=1, \dots, N$ .

Термодинамические параметры, термодиффузионные свойства и коэффициенты диффузии для компонент с исчезающе малой концентрацией не вычисляются, в таблицах 2) - 4) приводятся результаты расчета только для компонент, концентрации которых больше заданных пороговых значений:

$$x_k > \varepsilon_k, \quad \varepsilon_k = 10^{-6}.$$

В автономном режиме для химически равновесной смеси газов или плазмы с заданным элементным составом проводится расчет двухпараметрических таблиц термодинамических и переносных параметров для заданного диапазона давления и температуры. При этом набор значений давления должен быть непосредственно задан пользователем, а набор значений температуры внутри ее диапазона определяется автоматически, исходя из заданного максимального числа точек по  $T$ , максимального и минимального шага по  $T$  и требуемой точности. Результат расчета - таблицы термодинамических и переносных параметров равновесной смеси как функций  $P$  и  $T$ , записываются в текущую директорию в виде файла в двоичном формате. Затем с помощью пакета (опция "Работа с готовой таблицей") данные из этих таблиц для фиксированного давления можно представлять в удобном графическом или текстовом виде как функции  $T$ .

Кроме того, в специализированных версиях пакета в автономном режиме можно проводить расчеты двухпараметрических таблиц термодинамических и переносных параметров равновесной смеси не только как функций  $P$  и  $T$ , но и для других типов входных данных, например, для различных значений плотности (вместо давления) и энтальпии или внутренней энергии газа (вместо температуры), с записью результатов в текстовый файл (в ASCII формате). Полученные таблицы можно использовать далее для построения графиков с помощью любой стандартной графической программы, а также для быстрого и точного вычисления необходимых параметров в каждой точке химически равновесного течения газа или плазмы с помощью интерполяции по таблицам в ходе газодинамических и магнитогидродинамических расчетов.

### 1.5. Основные предположения

Расчетные формулы и уравнения, лежащие в основе пакета SoVA, получены в рамках следующих допущений.

Предполагается, что для газовой смеси выполняется условие идеального разреженного газа [1,2]:  $d^* \ll l^* \ll L^*$ , где  $d^*$  - средний размер частицы,  $l^*$  - средняя длина свободного пробега,  $L^*$  - характерный размер течения, т.е. масштаб изменения макроскопических характеристик.

Газоплазменная смесь предполагается термически равновесной, т.е. все степени свободы атомов, молекул, ионов и электронов (поступательные, вращательные, колебательные, электронные) имеют одну температуру  $T$ .

Плазма предполагается идеальной, т.е. внутри сферы с радиусом  $r_D$  находится много частиц. Здесь  $r_D$  - дебаевский радиус экранирования,

$$r_D = \sqrt{\frac{kT}{4\pi n_e e^2}},$$

$e$  - заряд электрона,  $n_e$  - числовая плотность электронов,  $k$  - постоянная Больцмана. Предполагается также, что плазма является квазинейтральной, т.е. заряд смеси в целом равен нулю при усреднении по объему, много большему сферы с радиусом  $r_D$ .

Предполагается, что внешнее магнитное поле отсутствует или является малым и не влияет на переносные свойства плазмы.

При расчете коэффициентов переноса предполагается, что столкновения всех частиц бинарные, функции распределения для всех частиц  $f_k$ ,  $k=1, \dots, N$ , мало отклоняются от равновесных Максвелловских  $f_k^{(0)}$ , т.е.  $f_k = f_k^{(0)}(1 + \phi_k^{(1)})$ , и уравнения Больцмана можно решать методом Чепмена-Энскога с разложением поправок к функциям распределения  $\phi_k^{(1)}$  по полиномам Сонина [1-3].

Считается, что можно пренебречь непосредственным влиянием химических реакций и ионизации на коэффициенты переноса, т.е. не учитывать "химические" неупругие столкновения, нарушающие равновесное распределение. Это соответствует предположению о том, что характерные времена всех реакций велики по сравнению со средним временем свободного пробега частиц, и скорости реакций много меньше, чем скорость установления Максвелловского равновесия за счет упругих столкновений.

### 1.6. Теоретические основы и методы расчета

Расчет химического состава равновесно реагирующей смеси газов или плазмы проводится с помощью численного решения уравнений химического равновесия Гульдберга-Вааге (реакции диссоциации) и Саха (реакции ионизации). Константы равновесия для всех компонент, кроме вторых ионов, определяются по стандартным аппроксимационным формулам для приведенной энергии Гиббса, полученным в [4]. Для вторых ионов константы равновесия определяются по дополнительным аппроксимационным формулам. Плотность смеси определяется из уравнения состояния идеального газа. Эффективные термодинамические коэффициенты ( $c_{pr}$  и др.) вычисляются по формулам [5].

Для расчета коэффициентов переноса используются точные формулы, справедливые в любом приближении  $\xi$ , полученные в рамках метода Чепмена-Энскога с помощью модифицированного представления уравнений переноса, предложенного в работе А.Ф.Колесникова, Г.А.Тирского [3], а также классические формулы [1,2,6]. Здесь  $\xi$  - номер приближения, т.е. число членов, учитываемых в разложениях возмущенных функций распределения по полиномам Сонина. Для достижения сходимости разложений по полиномам Сонина с точностью  $\sim 1\%$  в расчетах достаточно использовать формулы первого или второго приближения для вязкости,  $1 \leq \xi_{\mu} \leq 2$ , и формулы второго, третьего или четвертого приближения ( $2 \leq \xi \leq 4$ ) для всех остальных коэффициентов переноса, в зависимости от степени ионизации смеси [6,7].

Эффективные коэффициенты переноса, также как и основные коэффициенты, зависят от номера приближения  $\xi$  и вычисляются с учетом высших приближений, вплоть до четвертого.

Фундаментом любого метода расчета коэффициентов переноса газа и плазмы являются интегралы столкновений  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ , здесь  $i, j$  - индексы компонент (сталкивающихся частиц), верхние индексы  $(l,s)$  определяют порядок интеграла. Точность задания  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$  во многом определяет точность получаемых коэффициентов переноса. В пакет SoVA входит база данных по интегралам столкновений, позволяющая вычислить все  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ , необходимые для расчетов коэффициентов переноса в высших приближениях до 4-го приближения включительно, для всех пар частиц 22-х компонентной смеси. Интегралы  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$  вычисляются по аппроксимационным формулам как функции температуры на основе наилучших известных данных по эффективным потенциалам взаимодействия и сечениям рассеяния [9-13].

Далее приведено описание теоретических основ пакета SoVA - уравнения, расчетные формулы и методы расчета, используемые потенциалы взаимодействия частиц и интегралы столкновений.

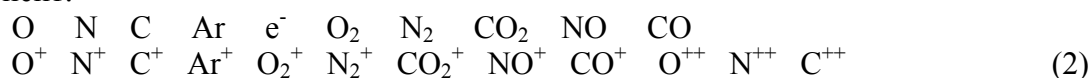
## 2. Расчет химического состава и термодинамических параметров

### 2.1. Расчет химического состава равновесной смеси

Пусть  $N$  - общее число компонент смеси,  $L$  - число независимых базисных компонент, за которые приняты химические элементы и электронная компонента  $e$ . Тогда  $R$  линейно независимых реакций образования остальных компонент - продуктов реакций можно записать в виде:

$$A_i = \sum_{j=1}^L v_{ij} B_j, \quad i=L+1, \dots, N, \quad (1)$$

где  $B_j$  и  $A_i$  - химические символы базисных компонент и продуктов реакций;  $v_{ij}$  - стехиометрические коэффициенты. Для стандартной версии пакета принят следующий набор компонент:



Для этого набора  $N=22$ ,  $L=5$ ,  $R=17$ .

Условиями химического и ионизационного равновесия являются уравнения Гульдберга-Вааге и Саха, которые можно записать в виде:

$$\prod_{j=1}^L x_j^{v_{ij}} = x_i P^{-v_i} K_{pi}(T) , \quad (3)$$

$$v_i = \sum_{j=1}^L v_{ij} - 1 , \quad i=L+1, \dots, N,$$

где  $x_i$  - молярная концентрация  $i$ -й компоненты,  $K_{pi}$  - константа равновесия реакции образования  $i$ -й компоненты. Следующие равенства дополняют систему уравнений:

$$c_k = x_k \frac{m_k}{m} , \quad k=1, \dots, N, \quad (4)$$

$$\sum_{k=1}^N x_k = 1 , \quad (5)$$

$$\sum_{k=1}^N c_k = 1 , \quad (6)$$

$$m = \sum_{k=1}^N x_k m_k , \quad (7)$$

где  $c_k$  - массовая концентрация  $k$ -й компоненты,  $m_k$  и  $m$  - молекулярная масса  $k$ -й компоненты и смеси в целом.

Массовые концентрации элементов  $c_j^*$  определяются следующим образом:

$$c_j^* = c_j + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m_k} c_k , \quad j=1, \dots, L, \quad \sum_{j=1}^L c_j^* = 1 . \quad (8)$$

Преобразуя определение (8), можно записать уравнения для молярных концентраций компонент:

$$x_j + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} x_k = m \frac{c_j^*}{m_j} , \quad j=1, \dots, L. \quad (9)$$

Массовые концентрации элементов  $c_j^*$  определяют элементный состав газа, они вычисляются по заданным величинам  $x_k^{(0)}$  - молярным концентрациям компонент при нормальных условиях:

$$c_j^* = x_j^{(0)} \frac{m_j}{m^{(0)}} + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m^{(0)}} x_k^{(0)} , \quad j=1, \dots, L, \quad (10)$$

где  $m^{(0)}$  - молекулярная масса смеси при нормальных условиях. Молярные концентрации всех компонент равновесной смеси  $x_k$  и молекулярная масса смеси  $m$  могут быть определены из решения системы нелинейных алгебраических уравнений (3) и дополняющих их уравнений (5), (7) и (9). При этом величины  $P$ ,  $T$  и  $c_j^*$ ,  $j=1, \dots, L$ , являются заданными входными параметрами.

Для удобства численного решения уравнения (9) преобразуются следующим образом [14]. Суммируя (9) по  $j$  от 1 до  $L$ , имеем

$$1 + \sum_{k=L+1}^N v_k x_k = m \sum_{j=1}^L \frac{c_j^*}{m_j} . \quad (11)$$

Исключая  $m$  из (9) с помощью (11), получаем уравнения материального баланса, разрешенные относительно  $x_j$ :

$$\Psi_j(x_j; x_{L+1}, \dots, x_N) \equiv x_j - \alpha_j - \sum_{k=L+1}^N \alpha_{jk} x_k = 0, \quad j=1, \dots, L, \quad (12)$$

где

$$\alpha_j = \frac{c_j^*}{m_j} \left( \sum_{l=1}^L \frac{c_l^*}{m_l} \right)^{-1}; \quad \alpha_{jk} = \alpha_j \nu_k - \nu_{kj}; \quad \sum_{j=1}^L \alpha_{jk} = -1. \quad (13)$$

$L$  уравнений (12) являются линейно независимыми, из них с помощью суммирования можно получить (5). Уравнения (12) не содержат неизвестной молекулярной массы смеси  $m$  и заменяют систему уравнений (5), (7), (9). В результате получается замкнутая система из  $N$  уравнений (3), (12), определяющая  $N$  молярных концентраций  $x_k$ ,  $k=1, \dots, N$ . Эта система решается с помощью итераций по методу Ньютона, причем в качестве неизвестных используются логарифмы концентраций  $z_k = \ln x_k$ . Уравнения (3), разрешенные относительно  $z_i$ , имеют вид:

$$f_i(z_i; z_1, \dots, z_L) \equiv z_i - \sum_{j=1}^L \nu_{ij} z_j + \ln K_{pi} - \nu_i \ln P = 0, \quad i = L+1, \dots, N. \quad (14)$$

Решая систему (12), (14) методом Ньютона, получим следующую систему линейных уравнений относительно поправок  $\Delta z_k$ ,  $k=1, \dots, N$ :

$$x_j \Delta z_j = \sum_{k=L+1}^N \alpha_{jk} x_k \Delta z_k - \Psi_j, \quad j = 1, \dots, L, \quad (15)$$

$$\Delta z_i = \sum_{j=1}^L \nu_{ij} \Delta z_j - f_i, \quad i = L+1, \dots, N. \quad (16)$$

Исключая поправки  $\Delta z_i$ , получаем окончательный вид системы относительно поправок  $\Delta z_j$ :

$$\sum_{n=1}^L \beta_{jn} \Delta z_n = \gamma_j, \quad j = 1, \dots, L, \quad (17)$$

$$\beta_{jn} = \sum_{k=L+1}^N \alpha_{jk} x_k \nu_{kn} - \delta_{nj} x_n; \quad \gamma_j = x_j - \alpha_j + \sum_{k=L+1}^N \alpha_{jk} x_k (f_k - 1),$$

где  $\delta_{nj}$  - символ Кронекера. После нахождения поправок  $\Delta z_j$  из решения системы (17), остальные поправки  $\Delta z_i$ ,  $i=L+1, \dots, N$ , вычисляются по формулам (16). Итерации проводятся до достижения заданной точности сходимости, определяемой условиями

$$|\Delta z_k| < \varepsilon_k; \quad \varepsilon_k = 10^{-6}, \quad k=1, \dots, N. \quad (18)$$

Дополнительные детали метода численного решения приведены в [15].

Точность расчета химического состава определяется точностью задания набора констант равновесия  $K_{pi}$  для всех независимых реакций. Для случая идеального газа или плазмы константы равновесия зависят только от температуры и могут быть определены с помощью стандартных аппроксимационных формул [4] для приведенной энергии Гиббса  $\Phi_k(T)$ :

$$\Phi_k(x) = \alpha_k \ln x + \sum_{s=1}^6 a_{ks} x^{s-3}, \quad x \equiv T \cdot 10^{-4}, \quad k = 1, \dots, N. \quad (19)$$

Значения коэффициентов  $\alpha_k$  и  $a_{ks}$ ,  $s=1, \dots, 6$ , даны в [4] для всех необходимых компонент, кроме вторых ионов. Функции  $K_{pi}(T)$  выражаются через  $\Phi_k(T)$ :

$$R_A \ln K_{pi}(T) = \sum_{j=1}^L \nu_{ij} \Phi_j(T) - \Phi_i(T) - \frac{1}{T} m_i q_i(0), \quad i = L+1, \dots, N, \quad (20)$$

где  $R_A$  - абсолютная газовая постоянная,  $m_i q_i(0)$  - молярные теплоты реакций при  $T=0$  К, приведенные в [4]. С помощью (19), (20) были получены стандартные аппроксимационные формулы для  $K_{pi}(T)$  для всех компонент, кроме вторых ионов. Для вторых ионов константы равновесия определяются по дополнительным аппроксимационным формулам:



$$\ln K_{pi}(x) = b_{i1} + b_{i2}x^{-1} + b_{i3} \ln x, \quad x \equiv T \cdot 10^{-4}, \quad i = O^{++}, N^{++}, C^{++}. \quad (21)$$

Вместо данных [4] можно для сравнения или для повышения точности использовать и другие данные для аппроксимации констант равновесия  $K_{pi}(T)$  и термодинамических функций компонент.

## 2.2. Расчет термодинамических параметров смеси

Молярные энтальпии  $m_k h_k(T)$ , теплоты реакций  $m_i q_i(T)$  и теплоемкости  $m_k c_{pk}(T)$  являются функциями только температуры в рамках предположения об идеальности газа и плазмы. Они могут быть выражены через приведенную энергию Гиббса с помощью формул:

$$m_k h_k(T) - m_k h_k(0) = T^2 \frac{\partial}{\partial T} \Phi_k(T), \quad k = 1, \dots, N, \quad (22)$$

$$m_i q_i(T) = \sum_{j=1}^L \nu_{ij} m_j h_j(T) - m_i h_i(T), \quad i = L+1, \dots, N, \quad (23)$$

$$m_k c_{pk}(T) = \frac{d}{dT} (m_k h_k(T)), \quad k = 1, \dots, N, \quad (24)$$

где  $m_k h_k(0)$  - молярные энтальпии образования компонент при  $T=0$  К, приведенные в [4]. Соответствующие удельные величины  $q_i(T)$ ,  $h_k(T)$ ,  $c_{pk}(T)$  получаются элементарно, делением на молекулярную массу компоненты. Молекулярная масса смеси  $m$  вычисляется после определения химического состава по формуле (7). После этого плотность  $\rho$  определяется уравнением состояния:

$$P = \frac{\rho R_A T}{m}. \quad (25)$$

Удельная энтальпия смеси  $h$  и удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении  $c_p$  определяются равенствами:

$$h = \sum_{k=1}^N c_k h_k, \quad c_p = \sum_{k=1}^N c_k c_{pk}. \quad (26)$$

Формулы (22)-(26) не предполагают химического равновесия смеси, вычисления по ним можно проводить как для равновесной, так и для химически неравновесной смеси с заданными концентрациями компонент  $x_k$ ,  $k=1, \dots, N$ .

## 2.3. Расчет эффективных термодинамических коэффициентов для равновесной смеси

При расчете эффективных термодинамических коэффициентов для химически равновесной смеси используются точные уравнения [5], полученные с учетом эффектов бародиффузии и диффузии элементов. Следуя [5], используя выражения для концентраций элементов (8), теплот реакций (23), удельной энтальпии и теплоемкости смеси (26), можно получить уравнение для градиента энтальпии для произвольной (химически равновесной или неравновесной) смеси:

$$\nabla h = c_p \nabla T + \sum_{j=1}^L h_j \nabla c_j^* - \sum_{i=L+1}^N q_i \nabla c_i. \quad (27)$$

Для химически равновесной смеси, используя условия равновесия (3) и уравнения изохор Вант-Гоффа

$$\frac{d \ln K_{pi}}{dT} = \frac{m_i q_i}{R_A T^2}, \quad i = L+1, \dots, N, \quad (28)$$

можно получить систему линейных алгебраических уравнений относительно градиентов концентраций компонент - продуктов реакций  $\nabla c_i$ ,  $i=L+1, \dots, N$ , и решая эту систему,

выразить последнюю сумму в (27) через градиенты температуры, давления и концентраций элементов:

$$\sum_{i=L+1}^N q_i \nabla c_i = -c_{pr} \nabla T + \frac{a(v, q)}{\rho} \nabla P + \sum_{j=1}^L a_j(v^*, q) \nabla c_j^* . \quad (29)$$

Здесь  $c_{pr}$  - вклад в теплоемкость смеси при постоянном давлении за счет равновесных химических реакций, определяется через отношение определителей порядка  $(R+1)$  и  $R$ , где  $R$  - число независимых химических реакций:

$$c_{pr} = -\frac{1}{m k T^2 \det \left\| \begin{array}{cc} \mathbf{a}_{ik} & \mathbf{m}_i \mathbf{q}_i \\ \mathbf{m}_k \mathbf{q}_k & 0 \end{array} \right\|} . \quad (30)$$

Здесь  $\mathbf{a}_{ik}$  - матрица размерности  $R \times R$ ; элементы этой матрицы вычисляются через молярные концентрации и стехиометрические коэффициенты:

$$a_{ik} = \frac{\delta_{ik}}{x_i} - v_i v_k + \sum_{j=1}^L \frac{v_{ij} v_{kj}}{x_j} , \quad (31)$$

$$v_i = \sum_{j=1}^L v_{ij} - 1, \quad i, k = L+1, \dots, N,$$

$\delta_{ik}$  - символ Кронекера. Выражения для коэффициентов  $a(v, q)$ ,  $a_j(v^*, q)$  приведены в [5,8]. Подставляя (29) в (27), имеем выражение для градиента энтальпии в химически равновесной смеси:

$$\nabla h = c_{peff} \nabla T - \frac{a(v, q)}{\rho} \nabla P + \sum_{j=1}^L (h_j - a_j(v^*, q)) \nabla c_j^* , \quad (32)$$

$$c_{peff} = c_p + c_{pr} , \quad (33)$$

где  $c_{peff}$  - эффективная теплоемкость смеси при постоянном давлении с учетом вклада равновесных химических реакций. В уравнении (32) второй член справа учитывает эффект бародиффузии, третий член учитывает эффект диффузии элементов, т.е. изменение элементного состава равновесной смеси за счет разных диффузионных свойств компонент. В практических приложениях влиянием этих эффектов обычно пренебрегают, поэтому в стандартной версии пакета SoVA коэффициенты  $a(v, q)$ ,  $a_j(v^*, q)$  не вычисляются.

Эффективный показатель адиабаты вычисляется по формуле:

$$\gamma_{eff} = \frac{mh}{mh - R_A T} . \quad (34)$$

С использованием  $\gamma_{eff}$  уравнение состояния можно записать через энтальпию в квазисовершенном виде [16]:

$$P = \rho h \frac{(\gamma_{eff} - 1)}{\gamma_{eff}} . \quad (35)$$

Выражения (34), (35) можно использовать как для случая химически равновесной смеси, так и в общем случае неравновесно реагирующей смеси. При низких температурах, когда газ совершенный, теплоемкости  $c_p$  и  $c_v$  постоянные, эффективный показатель адиабаты совпадает с обычным показателем адиабаты и является константой для данного рода газа:  $\gamma_{eff} = \gamma = c_p / c_v$ . Для реагирующей химически равновесной смеси газов  $\gamma_{eff}$  является функцией давления, температуры и элементного состава смеси, также как и все параметры, характеризующие термодинамические и переносные свойства равновесной смеси газов.

### 3. Расчет коэффициентов переноса и эффективных коэффициентов в высших приближениях метода Чепмена-Энскога

#### 3.1. Уравнения переноса массы, импульса, энергии; закон Ома

С использованием обозначений (1), (8), можно записать законы сохранения массы, импульса и энергии для общего случая реагирующей химически неравновесной смеси газов или плазмы.

Уравнение неразрывности (сохранения массы) для смеси в целом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0. \quad (36)$$

Уравнение сохранения массы химических элементов:

$$\rho \frac{dc_j^*}{dt} + \text{div} \vec{J}_j^* = 0, \quad j = 1, \dots, L. \quad (37)$$

Уравнение сохранения массы компонент - продуктов реакций:

$$\rho \frac{dc_i}{dt} + \text{div} \vec{J}_i = \dot{w}_i, \quad i = L+1, \dots, N. \quad (38)$$

Уравнение сохранения импульса для смеси в целом:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \sum_{k=1}^N \rho_k \vec{F}_k - \nabla P + \text{div}(\hat{\tau}). \quad (39)$$

Уравнение сохранения энергии для смеси в целом:

$$\rho \frac{d}{dt} \left( h + \frac{v^2}{2} \right) = \frac{\partial P}{\partial t} + \sum_{k=1}^N \rho_k \vec{v}_k \vec{F}_k + \text{div}(\hat{\tau} \cdot \vec{v} - \vec{J}_q). \quad (40)$$

Эту систему уравнений дополняют уравнение состояния идеального газа для смеси в целом

$$P = n k T \quad (41)$$

и следующие определения и соотношения:

$$\rho_k = n_k m_k, \quad \rho = \sum_{k=1}^N \rho_k = m \cdot n, \quad n = \sum_{k=1}^N n_k, \quad m = \sum_{k=1}^N x_k m_k, \quad \rho \vec{v} = \sum_{k=1}^N \rho_k \vec{v}_k, \quad (42)$$

где  $n_i$ ,  $\rho_i$ ,  $\vec{v}_i$ ,  $\vec{J}_i$ ,  $\dot{w}_i$ ,  $\vec{F}_i$  - число частиц в единице объема, массовая плотность, среднестатистическая скорость, массовый диффузионный поток  $i$ -й компоненты, скорость образования массы  $i$ -й компоненты в единице объема за единицу времени, массовая сила, действующая на  $i$ -ю компоненту;  $n$ ,  $\vec{v}$ ,  $\vec{J}_q$ ,  $\hat{\tau}$  - полное число частиц в единице объема, скорость, полный поток тепла, тензор вязких напряжений для смеси в целом;  $k$  - постоянная Больцмана. Отметим, что в предыдущем разделе  $m_i$  и  $m$  обозначали молекулярные массы компонент и смеси в целом; в данном разделе используются другие определения, принятые в кинетической теории:  $m_i$  - масса одной частицы  $i$ -й компоненты,  $m$  - средняя масса, приходящаяся на одну частицу смеси в целом. Диффузионный поток  $j$ -го элемента  $\vec{J}_j^*$  определяется соотношением:

$$\vec{J}_j^* = \vec{J}_j + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m_k} \vec{J}_k, \quad j = 1, \dots, L; \quad \sum_{j=1}^L \vec{J}_j^* = 0. \quad (43)$$

Уравнения (36)-(40) получены в рамках кинетической теории разреженных газов и справедливы в любом приближении  $\xi$ . Для замыкания системы уравнений (36)-(43) необходимо использовать уравнения переноса - выражения для "потоков"

$$\vec{J}_j^*, \quad j = 1, \dots, L; \quad \vec{J}_i, \quad i = L+1, \dots, N; \quad \vec{J}_q; \quad \hat{\tau};$$

а также, для химически неравновесной смеси, выражение для источниковых членов  $\dot{w}_i$ ,  $i=L+1, \dots, N$ .

Выражение для тензора вязких напряжений в предположении, что коэффициент объемной вязкости мал и им можно пренебречь, имеет вид [1]:

$$\tau_{\alpha\beta} = 2 \mu(\xi) e_{\alpha\beta} - \frac{2}{3} \mu(\xi) \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}}, \quad (44)$$

$$e_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3,$$

где  $\tau_{\alpha\beta}$  - компоненты тензора вязких напряжений,  $e_{\alpha\beta}$  - компоненты тензора скоростей деформации,  $\mu(\xi)$  - коэффициент вязкости смеси в  $\xi$ -ом приближении метода Чепмена-Энскога.

Точные уравнения переноса массы компонент (соотношения Стефана-Максвелла) и точное выражение для потока тепла, справедливые в любом приближении  $\xi$  метода Чепмена-Энскога, получены в работе [1] в традиционной форме. При этом соотношения Стефана-Максвелла записываются в виде, разрешенном относительно потоков - см. далее уравнения (50)-(52). В работе [3], также в рамках метода Чепмена-Энскога, уравнения переноса получены в виде, разрешенном относительно термодинамических "сил", что приводит к более простым формулам для всех коэффициентов переноса, кроме вязкости (эти формулы приведены в следующем разделе). Уравнения переноса и соответствующие формулы для коэффициентов переноса, полученные в [3], также справедливы в любом приближении  $\xi$  и являются столь же точными, что и традиционные [1]. В пакете SoVA коэффициенты переноса  $\lambda''(\xi)$ ,  $\Delta_{ik}(\xi)$ ,  $k_{Tk}(\xi)$  вычисляются по формулам [3], коэффициенты  $D_{ik}(\xi)$ ,  $D_{Tk}(\xi)$ ,  $\sigma(\xi)$  - по формулам [1,6].

В представлении [3], соотношения Стефана-Максвелла можно записать отдельно для элементов и для компонент - продуктов реакций в следующем виде, разрешенном относительно термодинамических "сил":

$$\bar{\mathbf{d}}_j = -\Delta_j \frac{\bar{\mathbf{J}}_j^*}{m_j} + x_j \sum_{l=1}^L \Delta_{jl} \frac{\bar{\mathbf{J}}_l^*}{m_l} + \sum_{k=L+1}^N \theta_{kj}^* \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k}, \quad j=1, \dots, L, \quad (45)$$

$$\bar{\mathbf{d}}_i = -\Delta_i \frac{\bar{\mathbf{J}}_i}{m_i} + x_i \sum_{l=1}^L \Delta_{il} \frac{\bar{\mathbf{J}}_l^*}{m_l} + \sum_{k=L+1}^N \theta_{ki}^o \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k}, \quad i=L+1, \dots, N, \quad (46)$$

где векторы диффузионных сил равны:

$$\bar{\mathbf{d}}_k = \nabla x_k + k_{Pk} \nabla \ln P + k_{Tk}(\xi) \nabla \ln T - \frac{c_k}{P} \left( \rho \bar{\mathbf{F}}_k - \sum_{i=1}^N \rho_i \bar{\mathbf{F}}_i \right), \quad k=1, \dots, N. \quad (47)$$

Здесь

$$\Delta_i = \sum_{k=1}^N x_k \Delta_{ik}, \quad k_{Pi} = x_i - c_i, \quad \theta_{kj}^* = \Delta_j v_{kj} + x_j \left( \Delta_{jk} - \sum_{l=1}^L v_{kl} \Delta_{lj} \right), \quad \theta_{ki}^o = x_i \left( \Delta_{ik} - \sum_{l=1}^L v_{kl} \Delta_{li} \right),$$

$k_{Pi}$  - коэффициенты бародиффузии (не зависят от номера приближения);  $\Delta_{ij}(\xi)$  - диффузионные коэффициенты сопротивления,  $k_{Ti}(\xi)$  - термодиффузионные отношения.

Уравнение для полного потока тепла  $\bar{\mathbf{J}}_q$  имеет вид:

$$\bar{\mathbf{J}}_q = \bar{\mathbf{q}} + \sum_{k=1}^N h_k \bar{\mathbf{J}}_k = \bar{\mathbf{q}} + \sum_{j=1}^L h_j \bar{\mathbf{J}}_j^* - \sum_{k=L+1}^N q_k \bar{\mathbf{J}}_k, \quad (48)$$

где  $\bar{\mathbf{q}}$  - приведенный поток тепла, который в  $\xi$ -м приближении метода Чепмена-Энскога в представлении [3] выражается сразу через истинный коэффициент теплопроводности  $\lambda(\xi)$  и термодиффузионные отношения  $k_{Ti}(\xi)$ :

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{q}} &= -\lambda(\xi) \nabla T + kT \sum_{k=1}^N \alpha_{Tk}(\xi) \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k} = \\ &= -\lambda(\xi) \nabla T + kT \sum_{j=1}^L \alpha_{Tj}(\xi) \frac{\bar{\mathbf{J}}_j^*}{m_j} + kT \sum_{i=L+1}^N \beta_{Ti}(\xi) \frac{\bar{\mathbf{J}}_i}{m_i}, \quad (49) \\ \beta_{Ti} &= \alpha_{Ti} - \sum_{j=1}^L v_{ij} \alpha_{Tj}, \quad \alpha_{Ti} = \frac{1}{x_i} k_{Ti}. \end{aligned}$$

В выражении (49)  $\lambda(\xi)$  есть истинный коэффициент теплопроводности, т.е. коэффициент перед градиентом температуры в выражении для потока тепла, когда все диффузионные потоки равны нулю.

Уравнения переноса массы компонент (45-47) совместно с уравнением (44) для тензора вязких напряжений и выражением для потока тепла (48-49) представляют полный набор уравнений переноса, достаточный для замыкания системы уравнений (36)-(43). Однако для полноты представления различных форм записи уравнений переноса в пакете SoVA вычисляются также многокомпонентные коэффициенты диффузии  $D_{ik}$  и коэффициенты термодиффузии  $D_{Tk}$ , которые используются в традиционной форме записи уравнений переноса [1,6]. Далее приведены уравнения переноса массы компонент и выражение для потока тепла в традиционной форме.

Соотношения Стефана-Максвелла в форме [1,6], разрешенные относительно потоков:

$$\bar{\mathbf{J}}_i = nm_i \sum_{k=1}^N D_{ik}(\xi) \frac{m_k}{m} \bar{\mathbf{d}}_k - D_{Ti}(\xi) \nabla \ln T, \quad i=1, \dots, N, \quad (50)$$

$$\bar{\mathbf{d}}_k = \nabla x_k + k_{Pk} \nabla \ln P - \frac{c_k}{P} \left( \rho \bar{\mathbf{F}}_k - \sum_{i=1}^N \rho_i \bar{\mathbf{F}}_i \right), \quad k=1, \dots, N. \quad (51)$$

Уравнение, определяющее приведенный поток тепла [1,6]:

$$\bar{\mathbf{q}} = -\lambda'(\xi) \nabla T - nkT \sum_{k=1}^N \frac{1}{n_k m_k} D_{Tk}(\xi) \bar{\mathbf{d}}_k. \quad (52)$$

Полный поток тепла  $\bar{\mathbf{J}}_q$  по-прежнему определяется формулой (48). Отметим, что векторы диффузионных сил  $\bar{\mathbf{d}}_k$  в формулировке [1,6], входящие в (50) и (52), имеют несколько иной смысл, чем в формулировке [3], и определяются не уравнением (47), а уравнением (51), не содержащим градиента температуры. Входящий в (52) коэффициент  $\lambda'(\xi)$  не является истинным коэффициентом теплопроводности. В формулировке [1,6] истинный коэффициент теплопроводности  $\lambda(\xi)$  равен сумме  $\lambda'(\xi)$  и термодиффузионного члена, который выражается с помощью громоздких формул, требующих двойного обращения матриц порядка  $N\xi$  и  $\xi$ . В пакете SoVA коэффициент  $\lambda'(\xi)$  не вычисляется, т.к. формулировка [3] приводит к прямому вычислению истинного коэффициента теплопроводности  $\lambda(\xi)$  с помощью более простой формулы, представленной в следующем разделе.

При наличии в квазинейтральной плазме электрического тока приведенные выше уравнения необходимо дополнить законом Ома, выражающим линейную связь плотности электрического тока в плазме  $\vec{j}_e$  и напряженности внешнего электрического поля  $\vec{E}$ :

$$\vec{j}_e = \sigma \vec{E}. \quad (53)$$

Формула для коэффициента электропроводности  $\sigma = \sigma(\xi)$  представлена в следующем разделе. Уравнение (53) справедливо, если внешнее магнитное поле отсутствует или является пренебрежимо малым. Кроме того, уравнение (53) не учитывает влияния эффектов термо и бародиффузии, которые обычно предполагаются пренебрежимо малыми. Обобщенный закон Ома, учитывающий эффекты термо и бародиффузии, получен в работе [17].

### 3.2. Расчет коэффициентов переноса

Формула для коэффициента вязкости в  $\xi$ -м приближении ( $\xi \geq 1$ ) имеет вид [1,6]:

$$\mu(\xi) = -\frac{5}{2} \frac{1}{\det \|\hat{\mathbf{q}}\|} \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} & x_r \sqrt{m_r} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} & \cdot \\ x_s \sqrt{m_s} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \end{vmatrix}, \quad (54)$$

$$\det \|\hat{\mathbf{q}}\| = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad r,s=1,\dots,N,$$

здесь для каждой пары индексов  $m,p$  ( $m,p=0,\dots,\xi-1$ )  $\hat{\mathbf{q}}_{rs}^{mp}$  - квадратная матрица порядка  $N \times N$ , составленная из элементов  $\hat{q}_{ij}^{mp}$ ,  $i,j=1,\dots,N$ :

$$\hat{q}_{ij}^{mp} = \sqrt{\frac{m_j}{2\pi kT}} \left\{ 8x_i \left(\frac{m_i}{m_j}\right)^{p+1} \times \sum_{k=1}^N x_k \sum_{l=1}^{m+1} [\delta_{ij} + (-1)^l \delta_{jk}] \times \right. \\ \left. \times \sum_{t=0}^m \frac{(m_j/m_k)^{2t+[1-(-1)^l]J/2}}{(m_i/m_k+1)^{m+p+3/2}} \times \sum_{s=1}^{m+p+l-2t} b_{lts}^{m,p} \Omega_{ik}^{(l,s)} \right\}. \quad (55)$$

Значения числовых коэффициентов  $b_{lts}^{m,p}$  для  $\xi=2$  приведены в [6,18].

Бинарные коэффициенты диффузии, входящие далее в формулы (58), (60), (63), (64), вычисляются только в первом приближении:

$$\mathcal{D}_{ij} \equiv \mathcal{D}_{ij}(1) = \frac{3}{16n} \sqrt{\frac{2\pi kT}{m_{ij}}} \frac{1}{\Omega_{ij}^{(1,1)}}, \quad i, j=1, \dots, N, \quad (56)$$

где  $m_{ij}$  - приведенная масса,

$$m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}.$$

Для расчета коэффициента теплопроводности, термодиффузионных отношений и диффузионных коэффициентов сопротивления в  $\xi$ -м приближении использовались формулы, полученные в [3]. Формула для коэффициента транспортной теплопроводности в  $\xi$ -м приближении ( $\xi \geq 2$ ) имеет вид [3]:

$$\lambda^{tr}(\xi) = -\frac{75}{8} \frac{k}{\det \|\mathbf{q}\|} \begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ x_r & \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{1,\xi-1} \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad (57)$$

$$\det \|\mathbf{q}\| = \begin{vmatrix} \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{1,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad r, s=1, \dots, N.$$

Коэффициент теплопроводности  $\lambda^{tr}(\xi)$  учитывает перенос энергии за счет поступательных степеней свободы частиц (транспортная теплопроводность). Дополнительный вклад в теплопроводность смеси за счет внутренних степеней свободы молекул  $\lambda^{int}$  вычисляется приближенно с помощью модифицированной формулы Эйкена [2,18]:

$$\lambda^{int} = \sum_{m=1}^{Nm} \lambda_m^{int} \times \left( 1 + \sum_{\substack{k=1, \\ k \neq m}}^N \frac{x_k}{x_m} \frac{\mathcal{D}_{mm}}{\mathcal{D}_{mk}} \right)^{-1}, \quad (58)$$

$$\lambda_m^{int} = \lambda_m^{Euken} - \lambda_m^{tr}, \quad (59)$$

$$\lambda_m^{Euken} = 2.5 c_{V,m}^{tr} \mu_m + \rho c_{V,m}^{int} \mathcal{D}_{mm}, \quad (60)$$

где нижним индексом  $m$ , ( $m=1, \dots, Nm$ ) обозначены молекулы,  $Nm$  - число молекул (без учета молекулярных ионов), индекс  $k$  относится ко всем компонентам смеси. В формулах (58)-(60) величины с нижним индексом  $m$  относятся к простому газу из молекул "m":  $\lambda_m^{int}$  - дополнительный вклад в теплопроводность за счет внутренних степеней свободы,  $\lambda_m^{Euken}$  - значение полной теплопроводности, вычисленное по приближенной формуле Эйкена (60);  $c_{V,m}^{tr}$  и  $c_{V,m}^{int}$  - вклад в удельную теплоемкость при постоянном объеме за счет поступательного движения молекул "m" и за счет их внутренних степеней свободы;  $\lambda_m^{tr}$ ,  $\mu_m$  и  $\mathcal{D}_{mm}$  - транспортная теплопроводность, вязкость и коэффициент самодиффузии для простого газа,

вычисленные в первом ненулевом приближении по точным формулам метода Чепмена-Энскога;  $\mathcal{D}_{mk}$  - бинарный коэффициент диффузии для смеси газов, определенный по формуле (56).

Полный коэффициент теплопроводности  $\lambda(\xi)$  (который будем называть просто коэффициентом теплопроводности) является суммой коэффициента транспортной теплопроводности и поправки за счет вклада внутренних степеней свободы молекул:

$$\lambda(\xi) = \lambda^r(\xi) + \lambda^{int}. \quad (61)$$

Формулы (58)-(60) - приближенные. Использование этих формул оправдано тем, что сама величина поправки  $\lambda^{int}$  невелика и существенна только в узком диапазоне температуры, где колебания молекул уже возбуждены, но молекулы еще не полностью диссоциировались.

Формула для термодиффузионных отношений в  $\xi$ -м приближении ( $\xi \geq 2$ ) имеет вид [3]:

$$k_{T_i}(\xi) = -\frac{5}{2} \frac{1}{\det \|\mathbf{q}\|} \begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 & \cdot & 0 \\ \mathbf{q}_{ri}^{1,0} & \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{1,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{q}_{ri}^{\xi-1,0} & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad i=1,\dots,N. \quad (62)$$

Диффузионные коэффициенты сопротивления в  $\xi$ -м приближении ( $\xi \geq 2$ ) вычисляются с помощью поправочных функций  $\varphi_{ij}(\xi)$  [3]:

$$\Delta_{ij}(\xi) = \Delta_{ij}(1) (1 + \varphi_{ij}(\xi)) = \frac{1 + \varphi_{ij}(\xi)}{n \mathcal{D}_{ij}(1)}, \quad i,j=1,\dots,N, \quad (63)$$

формула для поправочных функций  $\varphi_{ij}(\xi)$  имеет вид:

$$\varphi_{ij}(\xi) = \frac{2}{3} \frac{\mathcal{D}_{ij}(1)}{x_i x_j} \frac{1}{\det \|\mathbf{q}\|} \begin{vmatrix} 0 & \mathbf{q}_{js}^{0,1} & 0 & \cdot & \mathbf{q}_{js}^{0,\xi-1} \\ \mathbf{q}_{ri}^{1,0} & \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{1,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{q}_{ri}^{\xi-1,0} & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (64)$$

В первом приближении ( $\xi=1$ ) имеем:

$$\varphi_{ij}(1) = 0, \quad \Delta_{ij}(1) = \frac{1}{n \mathcal{D}_{ij}(1)}, \quad i,j=1,\dots,N.$$

Входящие в формулы (57), (62), (64)  $\mathbf{q}_{rs}^{mp}$  ( $m,p=0,\dots,\xi-1$ ) - квадратные матрицы порядка  $N \times N$ , составленные из элементов  $q_{ij}^{mp}$  ( $i,j=1,\dots,N$ ). Выражения для  $q_{ij}^{mp}$  при  $m>0, p \geq m$  имеют вид:



$$q_{ij}^{mp} = \sqrt{\frac{m_j}{2\pi kT}} \left\{ 8x_i \left(\frac{m_i}{m_j}\right)^{p+1/2} \times \sum_{k=1}^N x_k \sum_{l=1}^{m+1} [\delta_{ij} + (-1)^l \delta_{jk}] \times \right. \\ \left. \times \sum_{t=0}^{m+1-l} \frac{(m_j/m_k)^{2t+l-1}}{(m_i/m_k+1)^{m+p+1/2}} \times \sum_{s=l}^{m+p-(l-2)-2t} a_{lts}^{m,p} \Omega_{ik}^{(l,s)} \right\}. \quad (65)$$

Для  $m=0, p>0$ :

$$q_{ij}^{0p} = \sqrt{\frac{m_j}{2\pi kT}} \left\{ 8x_i \left(\frac{m_i}{m_j}\right)^{p+1/2} \times \sum_{k=1}^N x_k \left(\frac{m_k}{m_i+m_k}\right)^{p+1/2} (\delta_{ij} - \delta_{jk}) \times \sum_{s=1}^{p+1} a_{10s}^{0,p} \Omega_{ik}^{(1,s)} \right\}. \quad (66)$$

Для  $p<m$ :

$$q_{ij}^{mp} = \left(\frac{m_j}{m_i}\right)^{m-p} q_{ij}^{pm}. \quad (67)$$

Значения числовых коэффициентов  $a_{lts}^{m,p}$  для всех  $m, p$ , необходимых при расчетах для  $2 \leq \xi \leq 4$ , приведены в [6,18].

Формулы (57), (62)-(64), полученные в представлении [3], менее громоздки, чем формулы традиционного представления [1,6], приведенные далее. Формулы (57), (62)-(64) содержат отношения определителей порядка  $N(\xi-1)+1$  и  $N(\xi-1)$ , тогда как традиционные формулы (68), (69) содержат отношения определителей порядка  $N\xi+1$  и  $N\xi$ , т.е. на  $N$  больше. Для полного набора компонент  $N=22$  при  $\xi=4$  формулы (57), (62)-(64) требуют расчета определителей порядка 67 и 66, а формулы (68), (69) - определителей порядка 89 и 88.

Далее приведены формулы для расчета коэффициентов термодиффузии  $D_{Ti}(\xi)$  и многокомпонентных коэффициентов диффузии  $D_{ik}(\xi)$ , входящих в уравнения переноса (50) - (52) в традиционной форме [1,6].

Коэффициенты термодиффузии в  $\xi$ -м приближении ( $\xi \geq 2$ ) вычисляются по формуле [6]:

$$D_{Ti}(\xi) = \frac{15 n_i \sqrt{2\pi m_i kT}}{4 \det \|\tilde{\mathbf{q}}\|} \begin{vmatrix} \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} & | & 0 \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,\xi-1} & | & n_r \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & | & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & | & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & | & \cdot \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} & | & 0 \\ \hline \delta_{is} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & | & 0 \end{vmatrix}, \quad (68)$$

$$\det \|\tilde{\mathbf{q}}\| = \begin{vmatrix} \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad i=1,\dots,N, \quad r,s=1,\dots,N.$$

Многокомпонентные коэффициенты диффузии в  $\xi$ -м приближении ( $\xi \geq 1$ ) вычисляются по формуле [6]:

$$D_{ij}(\xi) = \frac{3mn_i\sqrt{2\pi kT}}{2m_j\sqrt{m_i} \det \|\tilde{\mathbf{q}}\|} \begin{vmatrix} \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} & \delta_{rj} - \delta_{ri} \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,\xi-1} & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} & 0 \\ \delta_{is} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (69)$$

$i, j = 1, \dots, N, \quad r, s = 1, \dots, N.$

Входящие в формулы (68)-(69)  $\tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{mp}$  ( $m, p = 0, \dots, \xi - 1$ ) - квадратные матрицы порядка  $N \times N$ , составленные из элементов  $\tilde{q}_{ij}^{mp}$  ( $i, j = 1, \dots, N$ ), пропорциональных использованным выше элементам  $q_{ij}^{mp}$ :

$$\tilde{q}_{ij}^{mp} = q_{ij}^{mp} \times n \left( \frac{2\pi kT}{m_j} \right)^{1/2}. \quad (70)$$

Формулы непосредственно для элементов  $\tilde{q}_{ij}^{mp}$  приведены в [6].

Коэффициент электропроводности плазмы выражается через сумму соответствующих коэффициентов многокомпонентной диффузии [6]:

$$\sigma(\xi) = \frac{e^2}{mkT} \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq e)}}^N n_i m_i Z_i D_{ei}(\xi), \quad (71)$$

где  $Z_i$  - зарядовое число соответствующей компоненты, т.е.  $Z_i = 0$  для молекул и атомов,  $Z_i = 1$  для однократных положительных ионов и  $Z_i = 2$  для двукратных положительных ионов;  $D_{ei}(\xi)$  - коэффициент многокомпонентной диффузии для пары частиц "электрон - ион",  $i$  - индекс иона. Формула (71) получена в [6] в пренебрежении малыми членами порядка  $\sqrt{m_e/m_a}$ , где  $m_e$  и  $m_a$  - масса электрона и масса атома.

Отметим, что  $\lambda''(1) = k_{Ti}(1) = D_{Ti}(1) = 0$ , т.е. для этих коэффициентов переноса первым ненулевым приближением является второе,  $\xi = 2$ .

Сходимость разложений по полиномам Сонина для коэффициентов переноса различных газов (воздуха, углекислого газа, аргона) исследована в работах [6,7,13,15,17] и др. Было показано, что точность порядка 1% во всем рассматриваемом диапазоне температур

обеспечивается при расчете вязкости во втором приближении  $\mu(2)$ , а для остальных коэффициентов переноса - в 3-м ненулевом приближении  $\xi' = 3$ , что соответствует обычным приближениям  $\xi_\lambda = 4$ ,  $\xi_{k_T} = 4$ ,  $\xi_\Delta = 3$ ,  $\xi_\sigma = 3$ . Многие коэффициенты переноса можно с достаточной точностью рассчитывать уже во втором ненулевом приближении, например, для воздуха точность  $\sim 1\div 3\%$  имеют  $\lambda(3)$ ,  $\Delta_{ij}(2)$ ,  $\sigma(2)$ . В то же время расчет коэффициентов переноса в первом ненулевом приближении может привести к значительной погрешности, например, для ионизованного воздуха погрешность  $\mu(1)$ ,  $\sigma(2)$ ,  $\lambda(2)$  может достигать порядка 15%, 40% и 50% соответственно.

С помощью пакета программ SoVA можно проводить расчеты коэффициентов переноса  $\mu$ ,  $\lambda$ ,  $k_{Ti}$ ,  $\Delta_{ik}$  в следующих приближениях:  $1 \leq \xi_\mu \leq 2$ ,  $2 \leq \xi_\lambda \leq 4$ ,  $2 \leq \xi_{k_T} \leq 4$ ,  $1 \leq \xi_\Delta \leq 4$ . Расчеты коэффициентов  $D_{ik}$ ,  $D_{Ti}$ ,  $\sigma$  можно проводить в приближениях:  $1 \leq \xi_{D_{ik}} \leq 3$ ,  $2 \leq \xi_{D_{Ti}} \leq 3$ ,  $1 \leq \xi_\sigma \leq 3$ .

### 3.3. Расчет эффективных коэффициентов переноса для равновесной смеси

Эффективные коэффициенты переноса для химически равновесной смеси с учетом бародиффузии и диффузии элементов, справедливые в любом приближении  $\xi$ , получены в [5,8].

Подставляя выражение для приведенного потока тепла  $\bar{q}$  (49) в уравнение для полного потока тепла  $\bar{J}_q$  (48), имеем:

$$\bar{J}_q = -\lambda(\xi)\nabla T + kT \sum_{k=1}^N \alpha_{Tk}(\xi) \frac{\bar{J}_k}{m_k} + \sum_{k=1}^N h_k \bar{J}_k, \quad (72)$$

$$\alpha_{Tk}(\xi) = k_{Tk}(\xi) / x_k,$$

где  $\alpha_{Tk}$  - термодиффузионный фактор  $k$ -й компоненты. Преобразуя далее (72) с учетом (23), вводя диффузионные потоки элементов  $\bar{J}_j^*$ ,  $j=1, \dots, L$ , получим

$$\bar{J}_q = -\lambda\nabla T + \sum_{j=1}^L h_j^T \bar{J}_j^* - \sum_{i=L+1}^N q_i^T \bar{J}_i, \quad (73)$$

$$h_j^T = h_j + \frac{kT}{m_j} \alpha_{Tj}, \quad (74)$$

$$q_i^T = q_i - \frac{kT}{m_i} \left( \alpha_{Ti} - \sum_{j=1}^L v_{ij} \alpha_{Tj} \right). \quad (75)$$

Переходя в (73) от градиента температуры к градиенту энтальпии, используя (27), получим

$$\bar{J}_q = -\frac{\mu}{Pr} \left[ \nabla h - \sum_{j=1}^L \left( h_j \nabla c_j^* + \frac{Pr}{\mu} h_j^T \bar{J}_j^* \right) + \sum_{i=L+1}^N \left( q_i \nabla c_i + \frac{Pr}{\mu} q_i^T \bar{J}_i \right) \right], \quad (76)$$

где  $Pr = Pr(\xi) = c_p \mu / \lambda$  - число Прандтля.

Уравнения для полного потока тепла (72), (73), (76) справедливы для общего случая химически равновесной или неравновесной смеси. Для химически равновесной смеси, используя условия равновесия (3) и уравнения (28), можно получить систему линейных алгебраических уравнений относительно градиентов концентраций компонент - продуктов

реакций  $\nabla c_i$ ,  $i=L+1, \dots, N$ , и решая эту систему, выразить соответствующую сумму  $q_i \nabla c_i$  в (76) через градиенты температуры, давления и концентраций элементов - см. выше формулу (29). Аналогично, можно получить систему линейных алгебраических уравнений относительно диффузионных потоков компонент - продуктов реакций  $\bar{\mathbf{J}}_i$ ,  $i=L+1, \dots, N$ , и выразить сумму  $q_i^T \bar{\mathbf{J}}_i$  в (73), (76) через градиент температуры и диффузионные потоки элементов. В результате для химически равновесной смеси уравнения (73) и (76) преобразуются к виду (77) и (78), соответственно:

$$\bar{\mathbf{J}}_q = -\lambda_{eff} \nabla T - \sum_{j=1}^L b_j^* \bar{\mathbf{J}}_j^*, \quad (77)$$

$$\bar{\mathbf{J}}_q = -\frac{\mu}{Pr_{eff}} \left[ \nabla h + a(v, q) \frac{\nabla P}{\rho} + \sum_{j=1}^L \left( a_j^* \nabla c_j^* + \frac{Pr_{eff}}{\mu} b_j^* \bar{\mathbf{J}}_j^* \right) \right]. \quad (78)$$

Входящие в эти уравнения эффективная теплопроводность  $\lambda_{eff}$  и эффективное число Прандтля  $Pr_{eff}$  определяются формулами:

$$\lambda_{eff}(\xi) = \lambda(\xi) + \lambda_r(\xi) = \lambda^{tr}(\xi) + \lambda^{int} + \lambda_r(\xi), \quad (79)$$

$$Pr_{eff}(\xi) = \mu(\xi) c_{peff} / \lambda_{eff}(\xi). \quad (80)$$

Вклад в теплопроводность смеси за счет равновесных реакций  $\lambda_r$  выражается через отношение определителей порядка  $(R+1)$  и  $R$ , где  $R$  - число независимых химических реакций:

$$\lambda_r(\xi) = -\frac{1}{k T^2 \det \left\| \begin{array}{cc} \mathbf{b}_{ik} & \mathbf{m}_i \mathbf{q}_i^T \\ \mathbf{m}_k \mathbf{q}_k^T & 0 \end{array} \right\|}. \quad (81)$$

Матрица  $\mathbf{b}_{ik}$  имеет размерность  $R \times R$ , ее элементы  $b_{ik}$ ,  $i, k=L+1, \dots, N$ , вычисляются через молярные концентрации, стехиометрические коэффициенты и диффузионные коэффициенты сопротивления:

$$b_{ik} = \frac{\delta_{ik}}{x_i} \Delta_i - \Delta_{ik} + \sum_{j=1}^L \frac{v_{ij} v_{kj}}{x_j} \Delta_j - \sum_{j=1}^L \sum_{l=1}^L v_{ij} v_{kl} \Delta_{jl} + \sum_{j=1}^L (v_{ij} \Delta_{jk} + v_{kj} \Delta_{ji}). \quad (82)$$

Матрица определителя  $(R+1) \times (R+1)$ , стоящего в числителе (81), получается из матрицы  $\mathbf{b}_{ik}$  добавлением столбца и строки, составленных из коэффициентов  $m_i q_i^T$ , выражающихся через молярные теплоты реакций и термодиффузионные факторы согласно формуле (75). Выражения для коэффициентов  $a(v, q)$ ,  $a_j^*$ ,  $b_j^*$  приведены в [8].

В уравнении (78) член, пропорциональный  $\nabla P$ , учитывает эффект бародиффузии; суммы в уравнениях (77), (78), содержащие градиенты концентраций элементов и диффузионные потоки элементов, учитывают влияние переменности элементного состава химически равновесной смеси - эффект диффузии элементов. В практических приложениях влиянием этих эффектов обычно пренебрегают, поэтому в стандартной версии пакета SoVA коэффициенты  $a(v, q)$ ,  $a_j^*$ ,  $b_j^*$  не вычисляются. Но для задач, в которых эти эффекты следует учитывать, была сделана специализированная версия пакета, включающая вычисление по формулам [8] эффективных коэффициентов  $a(v, q)$ ,  $a_j^*$ ,  $b_j^*$  а также коэффициента  $a_j(v^*, q)$ , входящего в (32). В работе [19] проведен расчет равновесного течения диссоциированного частично ионизованного воздуха в вязком ударном слое с точным учетом термодиффузии и диффузии элементов с использованием полных уравнений (32) и (78), с вычислением всех входящих в них эффективных коэффициентов. Было показано, что изменение элементного состава внутри пограничного слоя может быть значительным ( $c_{Omin}^* \approx 0.15$ ,  $c_{Omax}^* \approx 0.3$  при

стандартном значении  $c_o^*=0.23$ ), однако влияние диффузии элементов и термодиффузии на тепловой поток к холодной стенке составляет не более 3÷4%.

Эффективные коэффициенты переноса  $Pr_{\text{eff}}$ ,  $\lambda_{\text{eff}}$ ,  $\lambda_r$  зависят от номера приближения  $\xi$ , т.к. они зависят от вязкости ( $Pr_{\text{eff}}$ ), от теплопроводности, от термодиффузионных отношений через  $m_i q_i^T$  (75) и от диффузионных коэффициентов сопротивления через  $b_{ik}$  (82). Если коэффициенты переноса ( $\mu$ ,  $\lambda$ ,  $k_{Ti}$ ,  $\Delta_{ik}$ ) вычисляются в разных приближениях, то эффективные коэффициенты переноса могут зависеть сразу от нескольких номеров приближений, т.е. от "вектора"  $\Sigma = (\xi_\mu, \xi_\lambda, \xi_{k_T}, \xi_\Delta)$ . Сходимость эффективных коэффициентов переноса при увеличении числа приближений  $\xi_\mu, \xi_\lambda, \xi_{k_T}, \xi_\Delta$  исследована для воздушной плазмы в [8,15]. Показано, что расчет эффективных коэффициентов в первом ненулевом приближении  $\Sigma = (1, 2, 1, 1)$  приводит к значительной погрешности (до 60%) в области, где существенна ионизация. Достаточную точность не хуже 5% для всех эффективных коэффициентов обеспечивает расчет в приближении  $\Sigma = (2, 3, 2, 2)$ . Показано также, что влияние на эффективные коэффициенты термодиффузионных отношений  $k_{Ti}$  и поправок  $\phi_{ik}$  к диффузионным коэффициентам сопротивления не велико. Например, влияние  $k_{Ti}$  и  $\phi_{ik}$  на реакционную теплопроводность  $\lambda_r$  не превышает 5% и 2% соответственно, поэтому с указанной точностью можно считать, что  $\lambda_r$  зависит только от  $\xi_\lambda$ .

### 3.4. Методика численного расчета определителей

Численный расчет всех отношений определителей, входящих в формулы для коэффициентов переноса и эффективных коэффициентов, а также решение системы линейных уравнений (17) при расчете химического состава проводится по алгоритмам [20], основанным на методе Гаусса с выбором максимального элемента.

Если полагать, что все компоненты (2) присутствуют в смеси, порядок определителей в формулах для коэффициентов переноса становится очень большим. В то же время число реально присутствующих в смеси компонент  $N'$  всегда значительно меньше максимального числа  $N=22$ , т.к. концентрация многих компонент равна нулю или пренебрежимо мала. В пакете SoVA при расчете коэффициентов переноса фактически учитываются только те компоненты  $x_{k'}$ ,  $k'=1, \dots, N'$ , концентрация которых при заданных  $P$  и  $T$  не является исчезающе малой:  $x_{k'} > \varepsilon_{k'}$ . Пороговые значения  $\varepsilon_k$ ,  $k=1, \dots, N$ , задаются в качестве входных параметров, они обычно полагаются равными  $\varepsilon_k = 10^{-6}$ . Формулы для коэффициентов переноса, содержащие отношения определителей, имеют специфическую структуру, позволяющую вычеркивать все строки и столбцы в определителях, соответствующие компонентам с нулевой (меньшей порогового значения) концентрацией. Этот прием позволяет избежать обращения в ноль определителей, стоящих в знаменателе формул, и сокращает время расчета.

## **4. Вычисление интегралов столкновений**

### 4.1. Определения

Интегралы столкновений  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$  определяются по сечениям рассеяния  $Q_{ij}^{(l)}$  согласно [6]:

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \frac{4(l+1)}{(s+1)! [2l+1 - (-1)^l]} \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} Q_{ij}^{(l)}(g) d\gamma, \quad (83)$$

здесь  $i, j$  - индексы сталкивающихся частиц, верхние индексы  $(l, s)$  обозначают порядок интеграла,  $g$  - начальная относительная скорость,  $\gamma$  - приведенная начальная относительная скорость сталкивающихся частиц, связанная с  $g$  и с приведенной массой сталкивающихся частиц  $m_{ij}$ :

$$\gamma = g \sqrt{\frac{m_{ij}}{2kT}}, \quad m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}.$$

Сечения рассеяния можно вычислить по заданному потенциалу взаимодействия частиц  $V_{ij}(r)$ :

$$Q_{ij}^{(l)}(g) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^l \chi_{ij}) b db,$$

$$\chi_{ij}(b, g) = \pi - 2b \int_{r_m}^\infty \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - \frac{2V_{ij}(r)}{m_{ij} g^2} - \frac{b^2}{r^2}}},$$

где  $b$  - прицельное расстояние,  $\chi$  - угол отклонения частиц в системе координат центра тяжести,  $r$  - расстояние между частицами,  $r_m$  - расстояние наименьшего сближения.

Размерность интегралов столкновений  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ :  $A^2$ . Для расчета коэффициентов переноса в четвертом приближении  $\xi=4$  для каждой пары компонент необходимо использовать шестнадцать интегралов столкновений  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ :  $1 \leq l \leq 4$ ;  $s = l, l+1, \dots, 8-l$ .

#### 4.2. Используемые модели потенциалов взаимодействия

Потенциал взаимодействия  $V$  сталкивающихся частиц зависит в основном от расстояния  $r$  между ними. На малых расстояниях действуют силы отталкивания, определяющиеся обменным взаимодействием электронов, экспоненциально убывающим с расстоянием, и кулоновским взаимодействием. Эти короткодействующие силы существенны при больших температурах. Взаимодействие частиц на малых расстояниях обычно моделируется потенциалом Борна-Майера [11-13]:

$$V(r) = A \exp(-\alpha \cdot r). \quad (84)$$

На больших расстояниях, когда перекрытие электронных оболочек сталкивающихся частиц отсутствует, взаимодействие частиц определяется дальнедействующими силами электростатического, индукционного и дисперсного взаимодействия. Эти силы являются основными для расчета коэффициентов переноса при малых и умеренных температурах порядка 1000 К и ниже. Потенциал взаимодействия для дальнедействующих сил между нейтральными компонентами (молекула-молекула, молекула-атом) можно моделировать комбинациями обратных степенных зависимостей. Простейшая модель такого типа - потенциал Леннард-Джонса:

$$V(r) = \varepsilon \cdot \left( \left( \frac{r_m}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_m}{r} \right)^6 \right), \quad (85)$$

используемый для описания взаимодействия молекул при малых температурах [1]. Более широкую область применимости имеет потенциал, предложенный в [11-13]:

$$V(r) = \varepsilon \cdot \left( \frac{r_m}{r} \right)^n - b \cdot \left( \frac{r_m}{r} \right)^6 - c \cdot \left( \frac{r_m}{r} \right)^8, \quad (86)$$

где первый член введен для удобства последующей сшивки с потенциалом короткодействующих сил отталкивания.

На промежуточных расстояниях взаимодействие частиц определяется конкуренцией дальнедействующих и короткодействующих сил. Для описания взаимодействия частиц в широком диапазоне расстояний, включая промежуточную область, с учетом и короткодействующих и дальнедействующих сил, в [11-13] предложен универсальный потенциал, полученный с помощью гладкой сшивки потенциала отталкивания (84) и потенциала дальнедействующих сил (86):

$$V(r) = \begin{cases} A \exp(-\alpha \cdot r), & r \leq r_1 \\ S(r), & r_1 < r < r_2 \\ \varepsilon \cdot (r_m/r)^n - b \cdot (r_m/r)^6 - c \cdot (r_m/r)^8, & r \geq r_2 \end{cases}, \quad (87)$$

где  $S(r)$  - кубический сплайн.

При взаимодействии сложных частиц (двух молекул, атома с молекулой или с ионом) потенциал зависит также от углов взаимной ориентации частиц. В этом случае для расчета коэффициентов переноса используется эффективный потенциал, усредненный по углам ориентации.

Взаимодействие заряженных частиц в термически равновесной идеальной плазме достаточно точно описывается экранированным кулоновским потенциалом [2]:

$$V(r) = \frac{e^2 Z_i Z_j}{r} \exp(-r/r_D) = kT \frac{E_{ij}}{r} \exp(-r/r_D), \quad (88)$$

где  $e$  - заряд электрона,  $Z_i$  - зарядовое число  $i$ -й компоненты, которое может быть положительным (ион) и отрицательным (электрон). Дебаевский радиус экранирования  $r_D$  и длина Ландау  $E_{ij}$  определяются формулами:

$$r_D = \sqrt{\frac{kT}{4\pi n_e e^2}}, \quad E_{ij} = \frac{e^2 Z_i Z_j}{kT}. \quad (89)$$

Расчет потенциала взаимодействия является сложной задачей и возможен только для относительно простых случаев (например, расчет параметров потенциала Борна-Майера для атом-атомных взаимодействий [21]). Параметры заданной модели потенциала взаимодействия или сечения рассеяния могут быть получены с помощью результатов экспериментальных исследований рассеяния пучков (так, например, сечения рассеяния для взаимодействий электрон-атом и электрон-молекула получены в [22,23]). Используются и другие экспериментальные данные - исследование подвижности ионов в электрическом поле, спектроскопические данные и др. Если для нужного вида взаимодействия сложных частиц (молекул, ионов) отсутствуют надежные экспериментальные и теоретические данные, потенциал взаимодействия можно сконструировать с помощью эмпирических методов, например метода атом-атомных потенциалов [11-13].

В работах [9-13,24,25] проведен анализ имеющихся экспериментальных и теоретических данных по сечениям столкновений и потенциалам взаимодействия, выбраны достоверные данные и модели для всех видов взаимодействия и проведены расчеты интегралов столкновений всех необходимых порядков, если для них в литературе отсутствовали данные. На основе этих работ была создана база данных, реализованная в виде набора подпрограмм, позволяющих вычислить все интегралы столкновений, необходимые для расчета коэффициентов переноса в высших приближениях до 4-го приближения включительно. Расчет по этим подпрограммам использует готовые аппроксимационные формулы,

определяющие  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$  как функции температуры, или интерполяцию по рассчитанным ранее таблицам.

#### 4.3. Интегралы столкновений нейтральных частиц

Столкновения пар частиц типа молекула-молекула, молекула-атом описываются комбинированным потенциалом (87). Параметры  $A$  и  $\alpha$  потенциала Борна-Майера, входящего в (87), определены в [11-13] методом атом-атомных взаимодействий, исходя из значений  $A$  и  $\alpha$  для взаимодействий атом-атом, рассчитанных в [21], и экспериментальных данных. Параметры потенциала (86), описывающего дальнедействующие силы в (87), определялись с помощью экспериментальных данных. Интегралы столкновений для потенциала (87) были рассчитаны как функции температуры и представлены в виде таблиц; эти таблицы включены в пакет SoVA.

Влияние столкновений типа атом-атом на коэффициенты переноса существенно только при высоких температурах, когда дальнедействующей составляющей потенциала взаимодействия можно пренебречь. Поэтому эти столкновения с достаточной точностью описываются потенциалом Борна-Майера (84). Для всех пар атомов параметры  $A$  и  $\alpha$ , определенные на основе расчета [21], приведены в работах [10-13]. Интегралы столкновений для потенциала Борна-Майера аппроксимированы простыми зависимостями. При этом интеграл  $\Omega_{ij}^{(1,1)}$  использовался в качестве базового - он аппроксимировался непосредственно следующим выражением:

$$\Omega_{ij}^{(1,1)}(T) = \frac{1.827}{\alpha_{ij}^2} \cdot \eta^{2.2405} \exp(-0.01337 \cdot \eta), \quad \eta \equiv \ln(A_{ij}/kT). \quad (90)$$

Остальные интегралы столкновений  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$  выражаются через безразмерные относительные интегралы  $\omega_{ij}^{(l,s)} = \Omega_{ij}^{(l,s)}/\Omega_{ij}^{(1,1)}$ , которые аппроксимируются простыми зависимостями

$$\omega_{ij}^{(l,s)} = \begin{cases} a_0^{(l,s)} + a_1^{(l,s)}\eta + a_2^{(l,s)}\eta^2; & \eta \leq \eta_*^{(l,s)} \\ b_0^{(l,s)} + b_1^{(l,s)} \ln \eta; & \eta > \eta_*^{(l,s)} \end{cases} \quad (91)$$

Значения коэффициентов для этих аппроксимаций приведены в [10,13].

#### 4.4. Интегралы столкновений нейтральных частиц с ионами

Взаимодействие при упругих (нерезонансных) столкновениях на близких расстояниях описывается потенциалом Борна-Майера. Возникающее на дальних расстояниях поляризационное взаимодействие и другие дальнедействующие силы существенны только при небольших температурах меньше 1000÷2000 К, но при этих температурах концентрации ионов в равновесной смеси малы. Поэтому влиянием дальнедействующих сил на взаимодействие нейтральных частиц с ионами можно пренебречь и использовать потенциал Борна-Майера для всех расстояний. Значения параметров  $A$  и  $\alpha$  определялись с помощью метода атом-атомных потенциалов и дополнительно корректировались для лучшего соответствия экспериментальным данным для тех пар нейтрал-ион, для которых в литературе известны надежные экспериментальных данные. Интегралы столкновений рассчитывались по формулам (90)-(91).

#### Резонансная перезарядка

Столкновения нейтрала с одноименным ионом, в отличие от рассмотренного выше упругого рассеяния, сопровождаются резонансной перезарядкой - передачей заряда от иона к нейтралу без энергообмена. Этот эффект приводит к резкому возрастанию сечения столкновения для



нечетных номеров  $l$  ( $l=1$  и  $l=3$ ). Для четных  $l$  ( $l=2$  и  $l=4$ ) этот эффект не проявляется и  $\Omega_{ij}^{(l,s)}$  рассчитываются с учетом только упругого рассеяния с использованием потенциала Борна-Майера.

Интегралы столкновений для резонансной перезарядки рассчитывались по соответствующим сечениям резонансного обмена, полученным из экспериментальных данных по рассеянию пучков и по подвижности ионов в электрическом поле. В некоторых случаях использовались результаты квантово-механических расчетов. Обзор различных методик и данных по сечениям резонансного обмена приведен в [11,25]. Полученные интегралы столкновений для резонансной перезарядки аппроксимировались следующим образом. Базовый интеграл  $\Omega_{ij}^{(1,1)}$  аппроксимировался зависимостью:

$$\Omega_{ij}^{(1,1)}(T) = a_{ij} + b_{ij} \lg(T) + c_{ij} \lg^2(T). \quad (92)$$

Относительные интегралы  $\omega_{ij}^{(l,s)}$  для резонансной перезарядки, слабо зависящие от температуры, аппроксимировались константами, близкими к единице:

$$\omega_{ij}^{(l,s)}(T) = \omega_{ij}^{(l,s)}. \quad (93)$$

Коэффициенты в формуле (92) и значения  $\omega_{ij}^{(l,s)}$  ( $l=1$  и  $l=3$ ) для пар атом - ион и молекула - молекулярный ион приведены в [13].

#### 4.5. Интегралы столкновений нейтральных частиц с электронами

Интегралы столкновений атомов и молекул с электронами рассчитывались по сечениям рассеяния, полученным в работах [22,23]. Базовые интегралы  $\Omega_{ej}^{(1,1)}$  как функции температуры были представлены в виде таблиц. Относительные интегралы  $\omega_{ej}^{(l,s)}(T)$  аппроксимировались простыми формулами [13]. Отметим, что столкновения молекул с электронами существенны только в узком диапазоне температуры, где молекулы еще не полностью диссоциированы, но уже начинается ионизация газа.

#### 4.6. Интегралы столкновений заряженных частиц

Взаимодействие заряженных частиц описывается экранированным кулоновским потенциалом (88). Интегралы столкновений для него рассчитаны И.А.Соколовой [9] отдельно для двух случаев: столкновения одноименно и разноименно заряженных частиц; соответствующие интегралы обозначаются  $\Omega_{++}^{(l,s)}$  и  $\Omega_{+-}^{(l,s)}$ . Аппроксимационные формулы для этих интегралов получены в [10,11] для диапазона  $0.1 < \Lambda \leq 100$ :

$$\Omega_{++}^{(1,1)} = \pi E_{ij}^2 \cdot (0.5228 \cdot \ln(1 + 0.6\Lambda)), \quad z_i z_j > 0, \quad (94)$$

$$\Omega_{+-}^{(1,1)} = \pi E_{ij}^2 \cdot (0.4085 \cdot \ln(1 + 2\Lambda)), \quad z_i z_j < 0, \quad (95)$$

параметр  $\Lambda$  равен отношению дебаевского радиуса к длине Ландау:  $\Lambda = r_D / E_{ij}$ .

Интегралы  $\Omega_{++}^{(l,s)}$  и  $\Omega_{+-}^{(l,s)}$  для  $(l,s) \neq (1,1)$  определяются через относительные интегралы  $\omega_{++}^{(l,s)}$  и  $\omega_{+-}^{(l,s)}$ , которые при  $0.1 < \Lambda \leq 100$  аппроксимируются простыми зависимостями от  $\ln \Lambda$ , приведенными в [10,13].

В пределе больших значений  $\Lambda$  ( $\Lambda \geq 100$ ) интегралы  $\Omega_{++}^{(l,s)}$  и  $\Omega_{+-}^{(l,s)}$  совпадают между собой с точностью  $\sim 1\%$  и описываются асимптотическими формулами [26] для всех порядков  $(l,s)$ . Для  $\Omega_{++}^{(1,1)}$  формула [26] имеет вид:

$$\Omega^{(1,1)} = \Omega_{++}^{(1,1)} = \Omega_{+-}^{(1,1)} = \pi E_{ij}^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (\ln \Lambda - 0.2684). \quad (96)$$

Формулы (94), (95) и (96) при  $\Lambda=100$  совпадают с точностью 1%. Отметим, что при  $\Lambda < 1$  плазма уже не является идеальной.

## 5. Примеры расчетов

Результаты проведенных с помощью пакета SoVA расчетов равновесного состава и термодинамических параметров воздушной плазмы представлены в [15], кислородной плазмы - в [27]; плазмы углекислого газа - в [28]. В качестве примера в Приложении показаны рассчитанные для равновесной плазмы воздуха молярные концентрации электронейтральных компонент (рис. 1), электронов и ионов (рис. 2). Зависимость энтальпии воздуха от давления и температуры показана на рис. 3. Сравнение  $c_p$  и  $c_{p\text{eff}}$  для различных газов (воздух, углекислый газ, аргон) показано на рис. 4.

Расчеты коэффициентов переноса и эффективных коэффициентов в высших приближениях метода Чепмена-Энскога были проведены для равновесной воздушной плазмы [7,8,13,15,17,29], плазмы кислорода [27], углекислого газа [28], аргона [30]. Таблицы параметров равновесной плазмы ( $\gamma_{\text{eff}}$ ,  $\mu$ ,  $\sigma$ ,  $Pr_{\text{eff}}$ ), рассчитанные с помощью пакета SoVA, использовались в ходе численных расчетов течений индукционной плазмы в плазмотроне ВГУ-4 ИПМ РАН для различных видов плазмообразующих газов [30,31].

В Приложении на рис. 5 и 6 показана сходимость коэффициентов переноса воздушной плазмы - вязкости  $\mu(\xi)$ ,  $1 \leq \xi_\mu \leq 2$ , и электропроводности  $\sigma(\xi)$ ,  $1 \leq \xi_\sigma \leq 3$ , для давления  $P=1$  атм. На рис. 7 для равновесной плазмы воздуха показана сходимость транспортной теплопроводности  $\lambda''(\xi)$ ,  $2 \leq \xi_\lambda \leq 4$ , и эффективной теплопроводности  $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$ ,  $\Sigma=(2,1,1)$ ,  $(3,1,1)$  и  $(4,4,4)$ , где  $\Sigma=(\xi_\lambda, \xi_{k_T}, \xi_\Delta)$ . Видно, что первые ненулевые приближения  $\mu(1)$ ,  $\sigma(1)$ ,  $\lambda''(2)$  дают значительную погрешность, достигающую 14%, 40%, 50% соответственно. Первое ненулевое приближение для  $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$ ,  $\Sigma=(2,1,1)$ , также дает значительную погрешность, достигающую 45%. Расчет  $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$  в приближении  $\Sigma=(3,1,1)$ , т.е. с учетом второго ненулевого приближения для  $\lambda''$ , первого приближения для  $\Delta_{ik}$  и без учета термодиффузии, дает достаточно точное значение, отличающееся от расчета в высшем приближении  $\Sigma=(4,4,4)$  не более чем на 4%. Таким образом, эффективная теплопроводность воздуха слабо зависит от учета термодиффузии и поправок  $\phi_{ik}$  к диффузионным коэффициентам сопротивления  $\Delta_{ik}$ ; практически совпадают значения  $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$ , рассчитанные для  $\Sigma=(2,1,1)$  и  $\Sigma=(2,2,2)$ , а также для  $\Sigma=(3,1,1)$  и  $\Sigma=(3,3,3)$ .

На рис. 8 - 10 показаны коэффициенты переноса - вязкость  $\mu(\xi)$ , электропроводность  $\sigma(\xi)$  и эффективная теплопроводность  $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$ , рассчитанные для воздуха, углекислого газа и аргона при  $P=1$  атм. Расчеты этих коэффициентов проведены в высших приближениях  $\xi_\mu = 2$ ,  $\xi_\sigma = 3$ ,  $\Sigma=(\xi_\lambda, \xi_{k_T}, \xi_\Delta)=(4,4,4)$ .

Сравнение наших расчетов коэффициентов переноса  $\mu$ ,  $\sigma$  и эффективных коэффициентов  $\lambda_{\text{eff}}$ ,  $Pr_{\text{eff}}$  для равновесной плазмы воздуха, азота, аргона, углекислого газа с расчетами

других авторов и с надежными экспериментальными данными представлено в [13,17,27-29]. Большой разброс расчетных данных разных авторов объясняется использованием различных потенциалов взаимодействия и интегралов столкновений, а также тем, что в большинстве работ расчеты проводились только в первом ненулевом приближении. Надежные экспериментальные данные по  $\mu$  и  $\lambda$  имеются в области низких температур до 2000÷2500 К. В области высоких температур экспериментальных данных по коэффициентам переноса мало и они носят противоречивый характер. Возможные причины расхождения различных экспериментальных данных при высоких температурах указаны в [32,33]. В целом, результаты наших расчетов лежат в ядре коридора расчетных и экспериментальных данных и являются достаточно надежными. Наши расчеты коэффициентов переноса хорошо согласуются с известными данными [34-37] при низких температурах и с экспериментальными данными [38] - при высоких температурах.

## Литература

1. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ. 1963.
2. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. - М.: Мир, 1976.
3. Колесников А.Ф., Тирский Г.А. Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях. В сб. Молекулярная газодинамика. - М.: Наука. 1982. с.20-44.
4. Термодинамические свойства индивидуальных веществ /ред. В.П.Глушко. - М.: Наука, 1978-1982.
5. Суслов О.Н., Тирский Г.А., Щенников В.В. Описание химически равновесных течений многокомпонентных ионизованных смесей в рамках уравнений Навье-Стокса и Прандтля. Журнал Прикладной Механики и Технической Физики. 1971. №1. с.73-89.
6. Devoto R.S. Transport properties of ionized monoatomic gases. Physics of Fluids, 1966, v.9, N.6, pp.1230-1240.
7. Васильевский С.А., Соколова И.А., Тирский Г.А. Точные уравнения и коэффициенты переноса для многокомпонентной смеси газов и частично ионизованной плазмы. Журнал прикладной механики и технической физики. 1984. №4. с. 15-24.
8. Васильевский С.А., Соколова И.А., Тирский Г.А. Определение и вычисление эффективных коэффициентов переноса для химически равновесных течений частично диссоциированных и ионизованных смесей газов. Журнал Прикладной Механики и Технической Физики. 1986. №1. с.68-79.
9. Соколова И.А. Коэффициенты переноса и интегралы столкновений воздуха и его компонент. В сб. Физическая кинетика. ИТПМ СО АН СССР: Новосибирск, 1974, с.39-104.
10. Соколова И.А., Тирский Г.А. Расчет и аппроксимации интегралов столкновений компонентов смесей, содержащих атомы O, H, C, N, F, Na, S, Si и их соединения. Отчет Института механики МГУ, 1983, № 2857.
11. Гордеев О.А., Калинин А.П., Комов А.Л., Люстерник В.Е., Самуйлов Е.В., Соколова И.А., Фокин Л.Р. Потенциалы взаимодействия, упругие сечения, интегралы столкновений компонентов воздуха для температур до 20000 К. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ / ТФЦ. - М.: ИВТАН. 1985, № 5 (55).
12. Герасимов Г.Я., Калинин А.П., Люстерник В.Е., Самуйлов Е.В., Соколова И.А., Фокин Л.Р., Цителаури Н.Н., Щевелева Н.А. Интегралы столкновений, потенциалы атом-

- молекулярных и ион-молекулярных взаимодействий компонентов воздуха до 20000 К. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ / ТФЦ. - М.: ИВТАН. 1987, № 5 (67).
13. Соколова И.А. Моделирование молекулярного переноса многокомпонентных газов и плазмы. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. М., Институт математического моделирования РАН, 1992.
  14. Казейкин С.Н. Расчет термодинамических и переносных свойств высокотемпературного воздуха. Препринт ИПМ АН СССР № 108, 1978.
  15. Васильевский С.А., Ефимова Л.Г., Колесников А.Ф., Соколова И.А., Тирский Г.А. Расчет коэффициентов переноса в многокомпонентной плазме в высших приближениях. Эффект разделения элементов в химически и ионизационно равновесной плазме. Отчет № 2427 Института механики МГУ. М, 1980.
  16. Лунев В.В. Гиперзвуковая аэродинамика. М: Машиностроение, 1975.
  17. Соколова И.А., Тирский Г.А. Обобщенный закон Ома частично ионизованных многокомпонентных смесей химически реагирующих газов. В сб. Избранные вопросы современной механики, ч.1. - М.: Изд-во МГУ. 1981. с. 91-109
  18. Соколова И.А. Свойства молекулярного переноса в задачах теплообмена и газовой динамики. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ / ТФЦ. - М.: ИВТАН. 1992, № 2 (94).
  19. Васильевский С.А. Расчет течения и теплопередачи в окрестности оси симметрии затупленного тела с учетом диффузии элементов и высших приближений для коэффициентов переноса. В сб. Современные газодинамические и физико-химические модели гиперзвуковой аэродинамики и теплообмена. ч.1. / Ред. Л.И.Седова М., Издательство МГУ, 1994. с.30-44.
  20. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980.
  21. Gaydaenko V.I., Nikulin V.K. Born-Mayer interatomic potentials for atoms with  $Z=2$  to  $Z=36$ . Chem. Phys. Lett. 1970. v.7, N3, pp.360-362.
  22. Itikawa J. Momentum transfer cross sections for electron collisions with atoms and molecules revision and supplement. Atomic data and nuclear data tables, 1978, v.21, N 1, p.69-75.
  23. Hayashi M. Recommended values of transport cross sections for elastic collisions and total collision cross section for electrons in atomic and molecular gases. Report IPPJ AM. 1981.
  24. Соколова И.А., Тирский Г.А. Свойства молекулярного переноса диссоциированных и ионизованных газов. Журнал Прикладной Механики и Технической Физики. 1988. №3. с.14-28.
  25. Соколова И.А. Процессы резонансного обмена в транспортных свойствах низкотемпературной плазмы. Математическое моделирование. 1989. том 1. № 3. с. 84-99.
  26. Devoto R.S. Transport coefficients of partially ionized argon. Physics of Fluids, 1967, v.10, N.2, pp.354-363.
  27. Андриатис А.В., Соколова И.А. Кислород. Транспортные и термодинамические свойства. Журнал Математическое моделирование. 1994. том 6. № 10. с. 88-128.
  28. Андриатис А.В., Соколова И.А. Двуокись углерода. Транспортные и термодинамические свойства. Журнал Математическое моделирование. 1995. том 7. № 2. с. 89-125.
  29. Васильевский С.А., Жлуктов С.В., Соколова И.А., Тирский Г.А. Приближенные формулы для коэффициентов переноса диссоциированного и ионизованного воздуха и их исследование в задачах гиперзвуковой аэродинамики и теплообмена. Отчет №3359 Института механики МГУ. М, 1986.
  30. Колесников А.Ф., Васильевский С.А. Результаты и проблемы моделирования потоков индукционной плазмы. Препринт ИПМ РАН № 610, Москва, 1998.

31. Васильевский С.А., Колесников А.Ф. Численное моделирование течений равновесной индукционной плазмы в цилиндрическом канале плазмотрона. Изв. РАН. МЖГ. 2000, № 5, с. 164-173.
32. Асиновский Э.Н., Шабашов В.И. Экспериментальное исследование коэффициентов электропроводности и теплопроводности плазмы воздуха. Теплофизика высоких температур. 1969. т.7, №2. с.217-222.
33. Асиновский Э.Н., Пахомов Е.П. Анализ экспериментальных данных по вязкости газов в области высоких температур. Теплофизика высоких температур. 1970. т.8, №4. с.890-896.
34. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. - М.: Наука, 1972.
35. Варгафтик Н.Б., Филиппов Л.П., Тарзиманов А.Л., Тоцкий Е.Е. Теплопроводность жидкостей и газов. Справочные данные. - М.: Изд-во стандартов, 1978.
36. Uribe F.J. Mason E.A., Kestin J. A correlation scheme for the thermal conductivity of polyatomic gases at low density. Physica A, 1989, v.156, N 1, p 467-491.
37. Диоксид углерода. Коэффициенты вязкости, теплопроводности и число Прандтля разреженного газа в диапазоне температур 150...2000 К. Таблицы справочных стандартных данных. ГСССД 101-86. - М. : Изд-во стандартов, 1986.
38. Асиновский Э.Н., Низовский В.Л., Шабашов В.И. Измерение коэффициентов электропроводности и теплопроводности плазмы воздуха и углекислого газа при помощи стабилизированной электрической дуги. Теплофизика высоких температур. 1971. т.9, №1. с.37-41.

Приложение

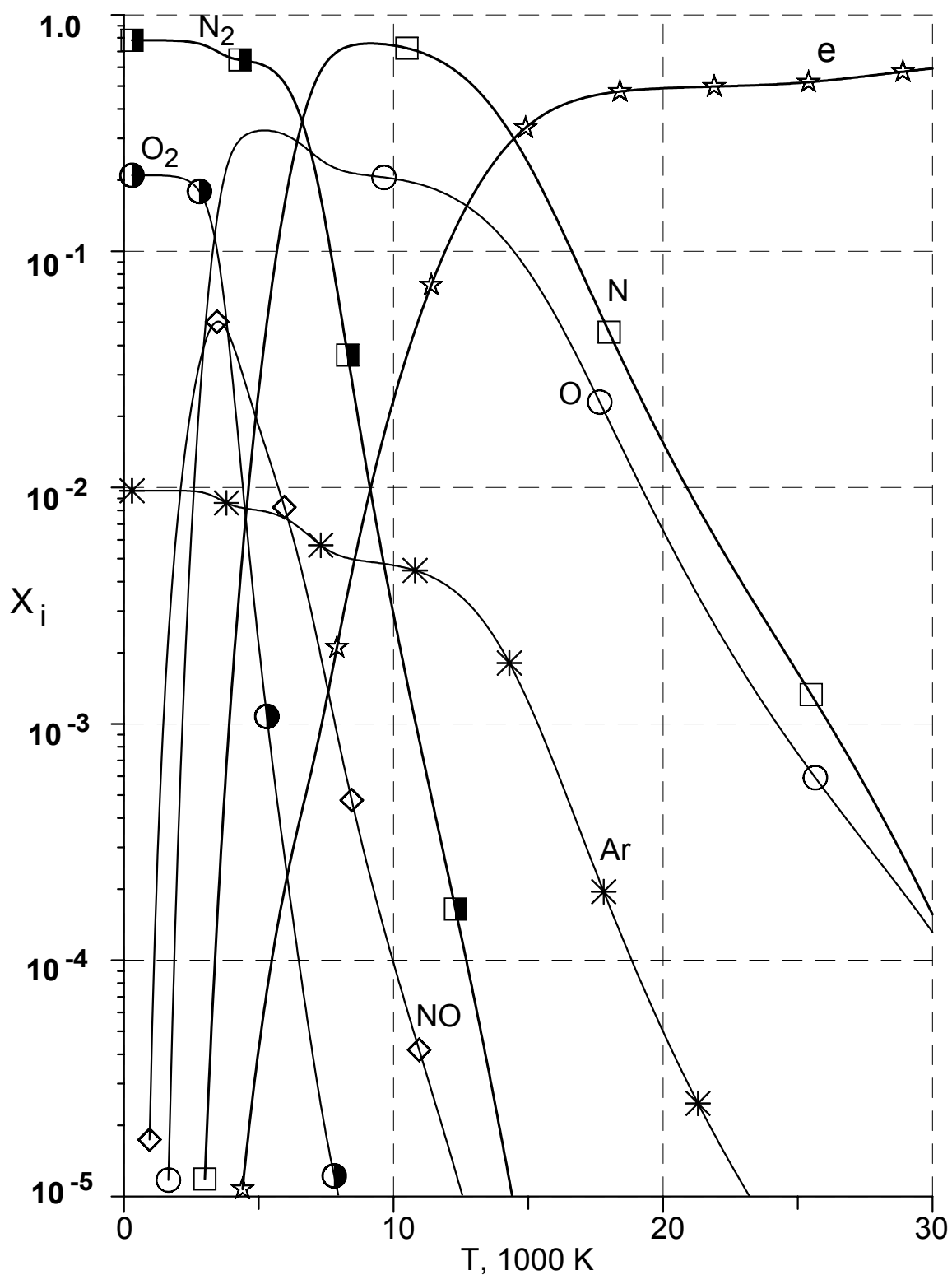


Рис. 1. Молярные концентрации электронейтральных компонент и электронов для воздуха при давлении  $P = 1$  атм

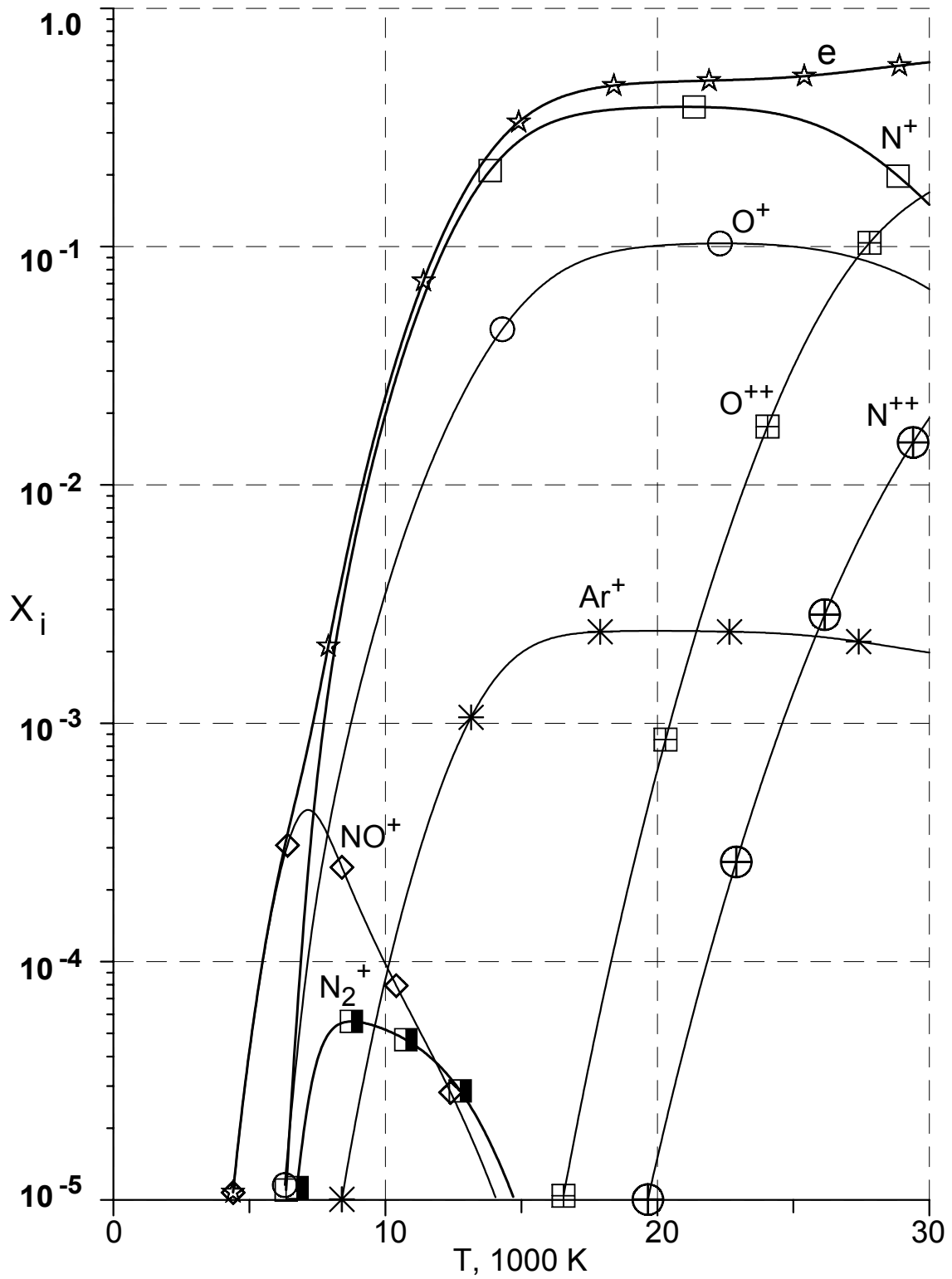


Рис. 2. Молярные концентрации ионов и электронов для воздушной плазмы при  $P=1$  атм (концентрация  $O_2^+$  менее  $10^{-6}$ )

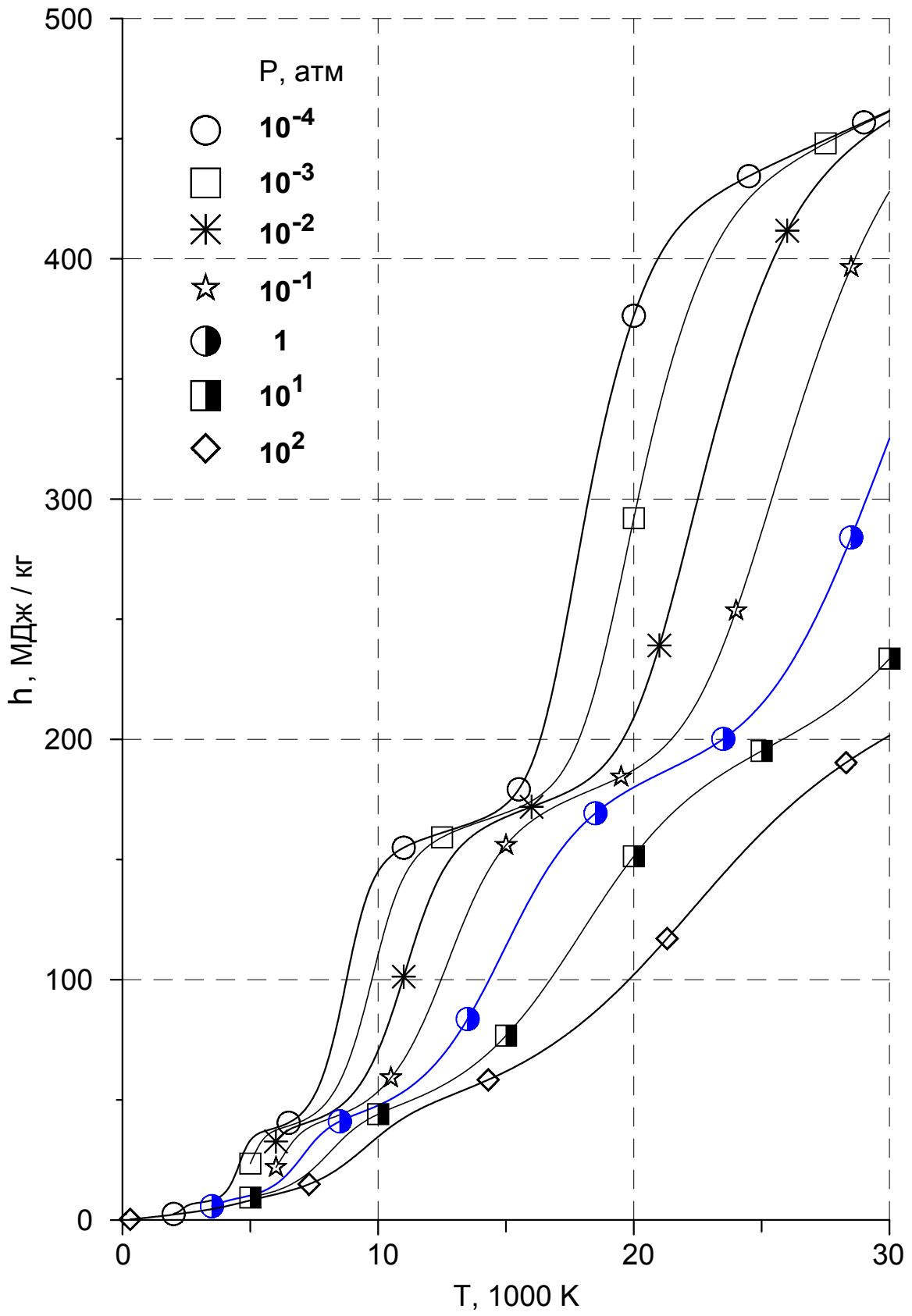


Рис. 3. Энтальпия воздуха  $h, 10^6 \text{ Дж / кг}$ , при различных значениях давления



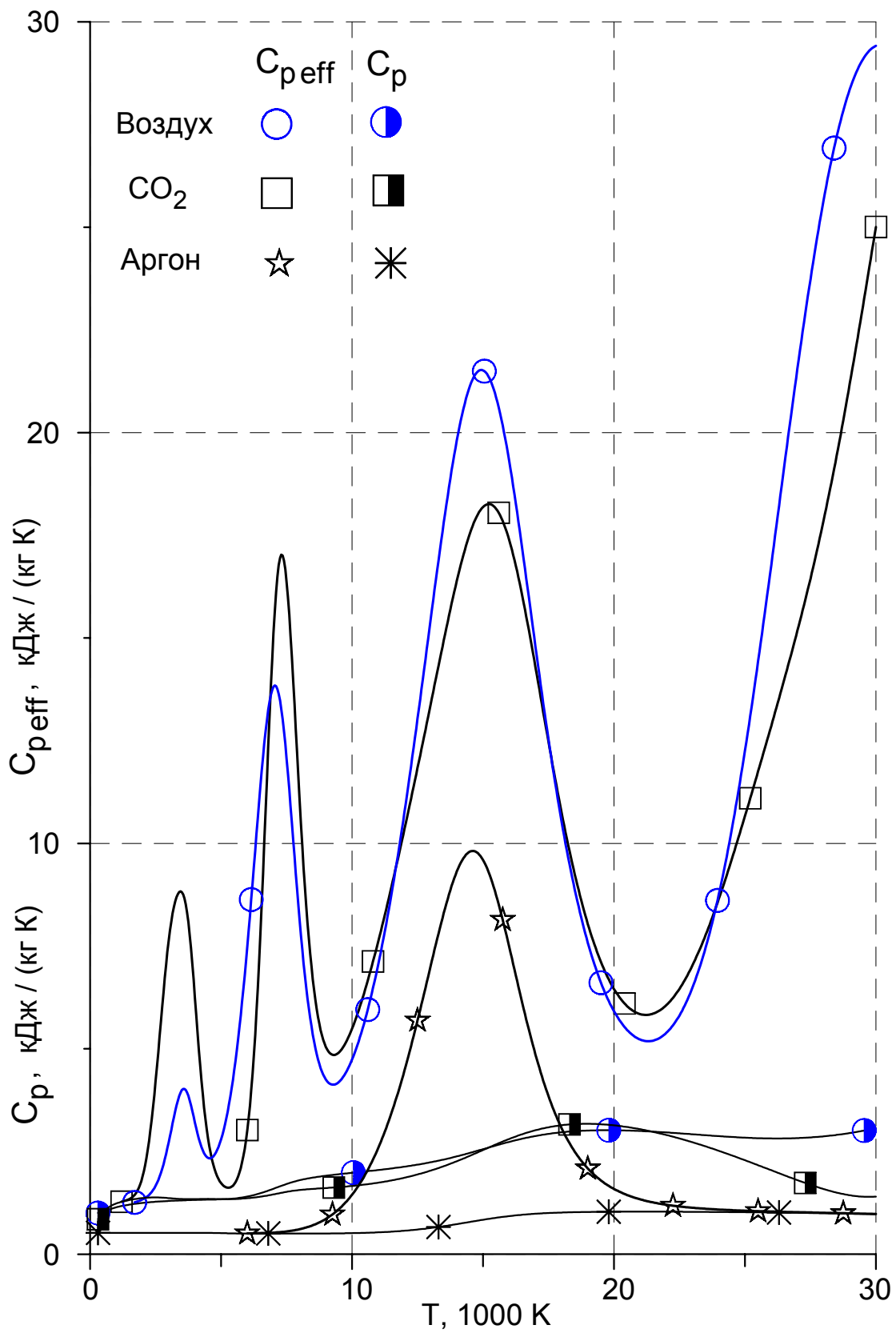


Рис. 4. Удельная теплоемкость  $C_p$  и эффективная удельная теплоемкость  $C_{p,eff}$  воздуха, углекислого газа и аргона при  $P=1$  атм

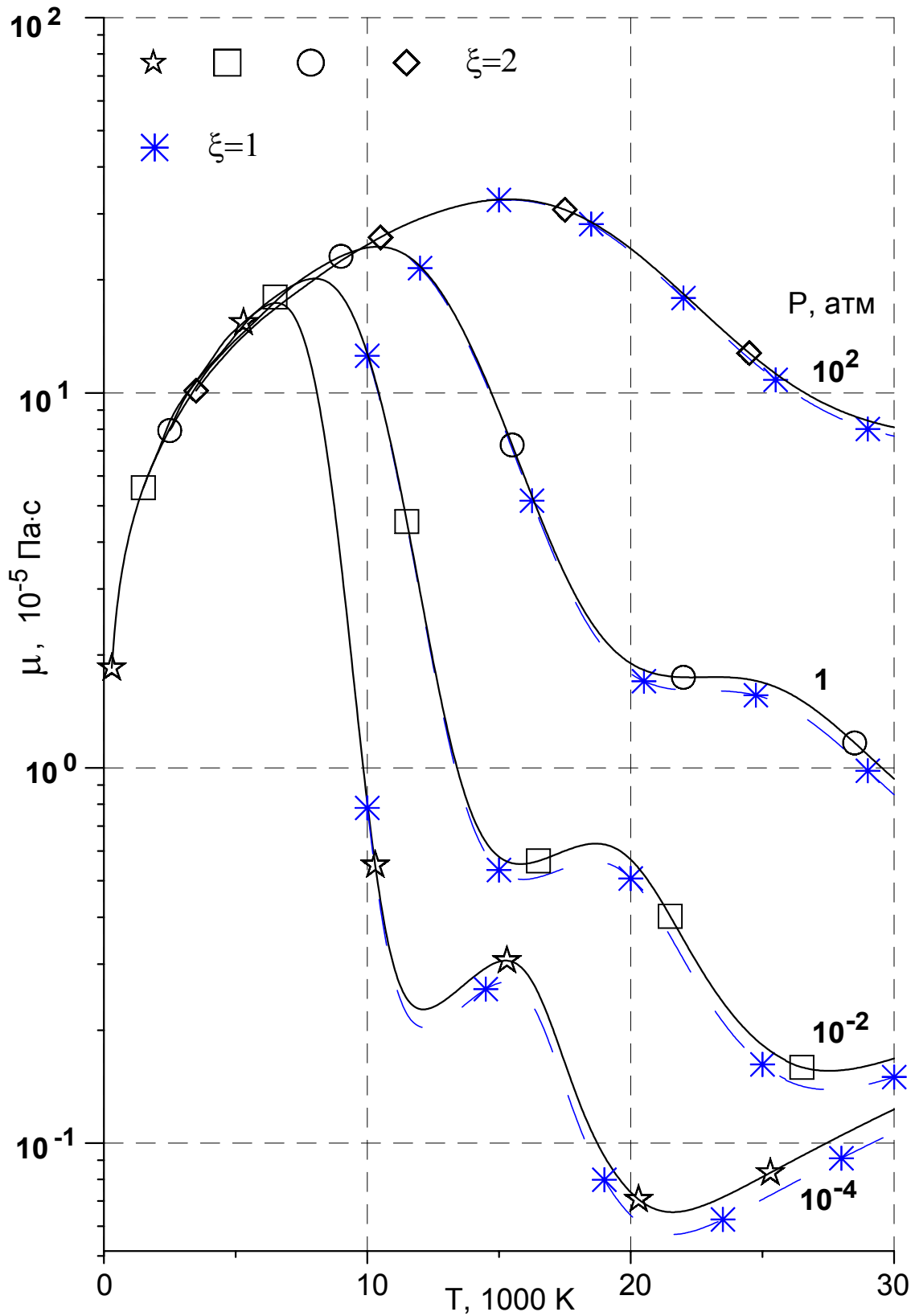


Рис. 5. Вязкость воздуха для давлений  $P = 10^{-4}, 10^{-2}, 1, 100$  атм, рассчитанная во втором приближении (сплошные кривые) и в первом приближении (пунктир)

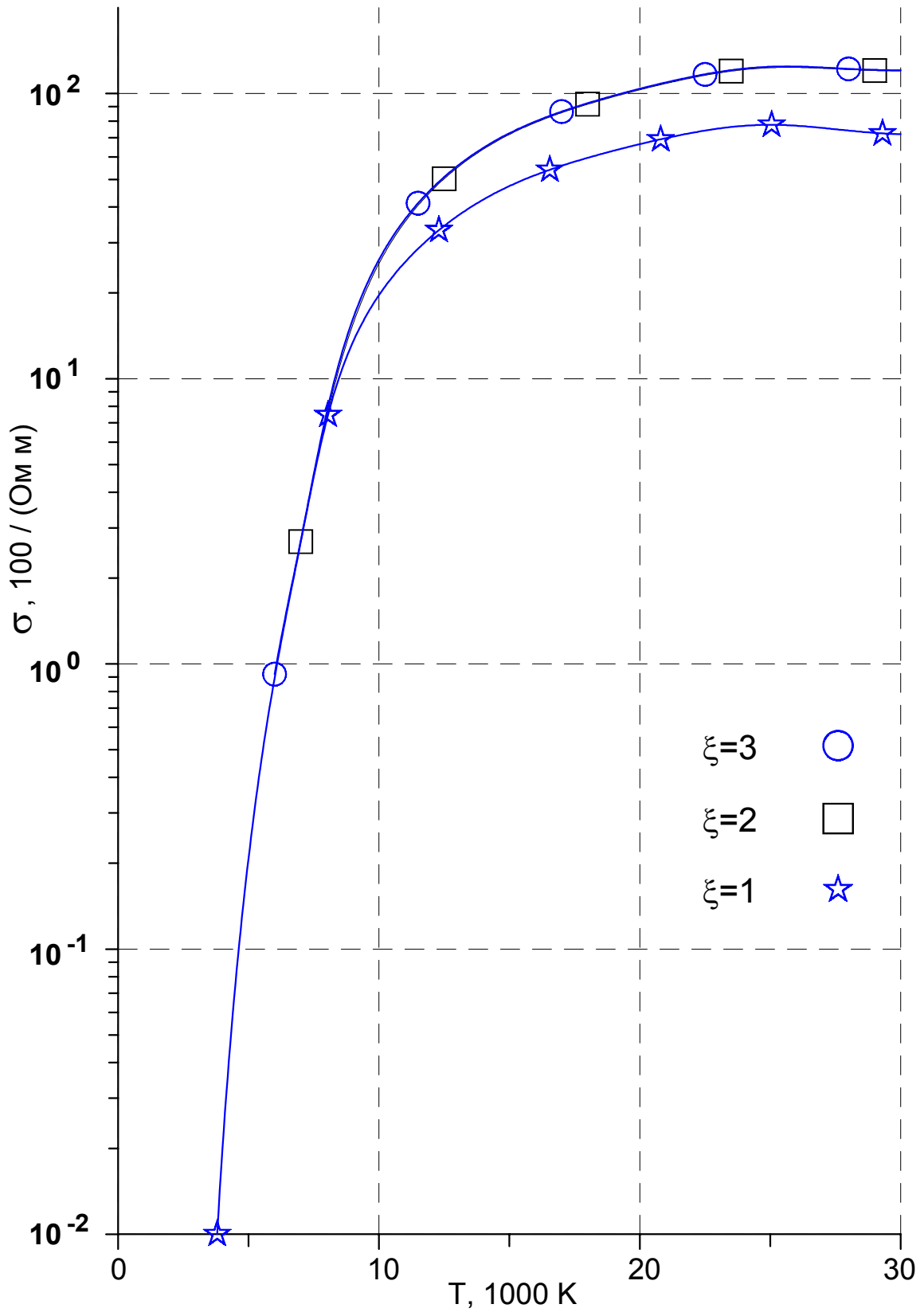


Рис. 6. Электропроводность плазмы воздуха  $\sigma(\xi)$  при  $P=1$  атм, рассчитанная в приближениях  $1 \leq \xi \leq 3$

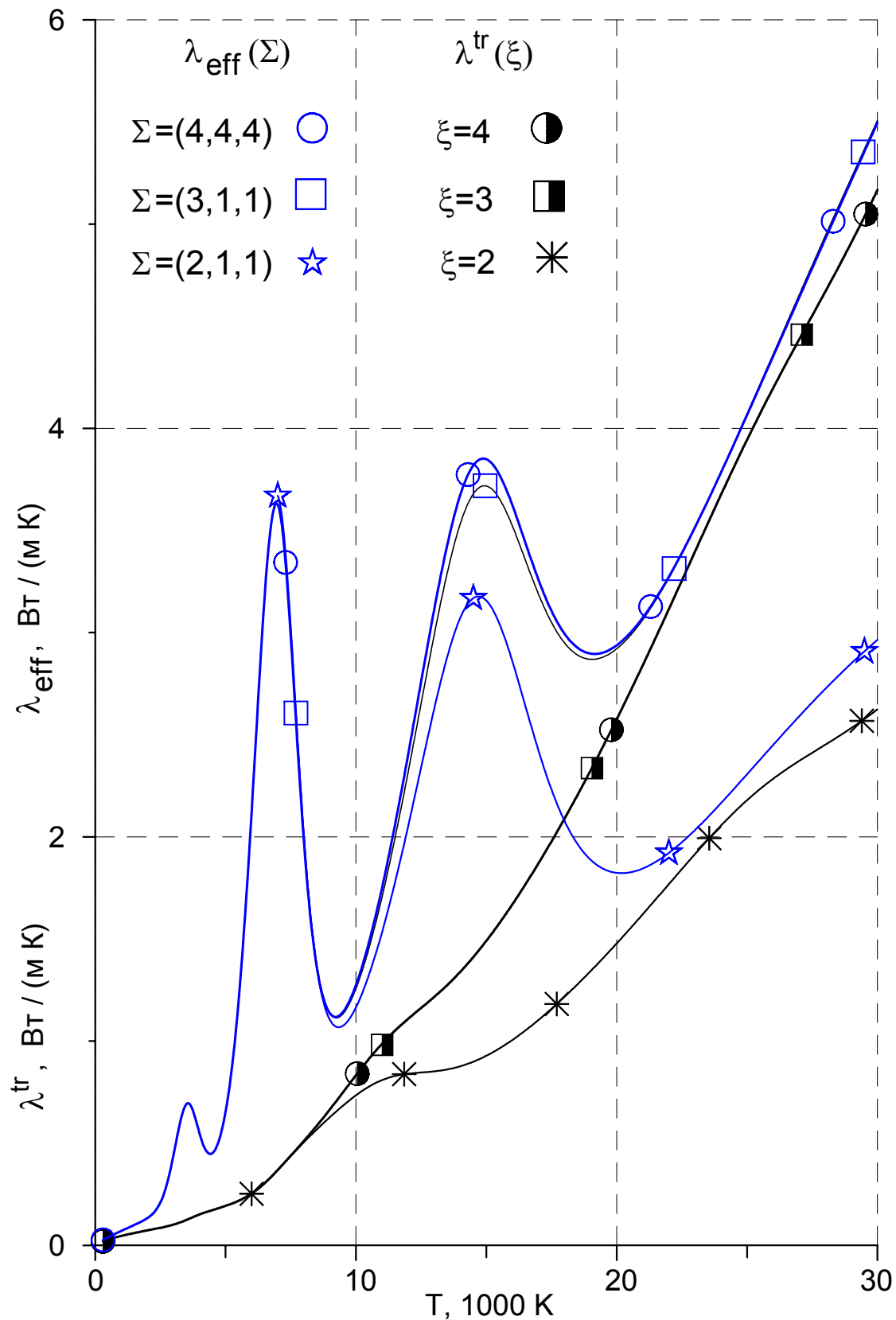


Рис. 7. Транспортная теплопроводность  $\lambda^{\text{tr}}(\xi)$  и эффективная теплопроводность  $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$  для воздуха,  $P=1$  атм, рассчитанные в приближениях  $2 \leq \xi_{\lambda} \leq 4$  и  $\Sigma = (\xi_{\lambda}, \xi_{k_T}, \xi_{\Delta}) = (2,1,1); (3,1,1); (4,4,4)$

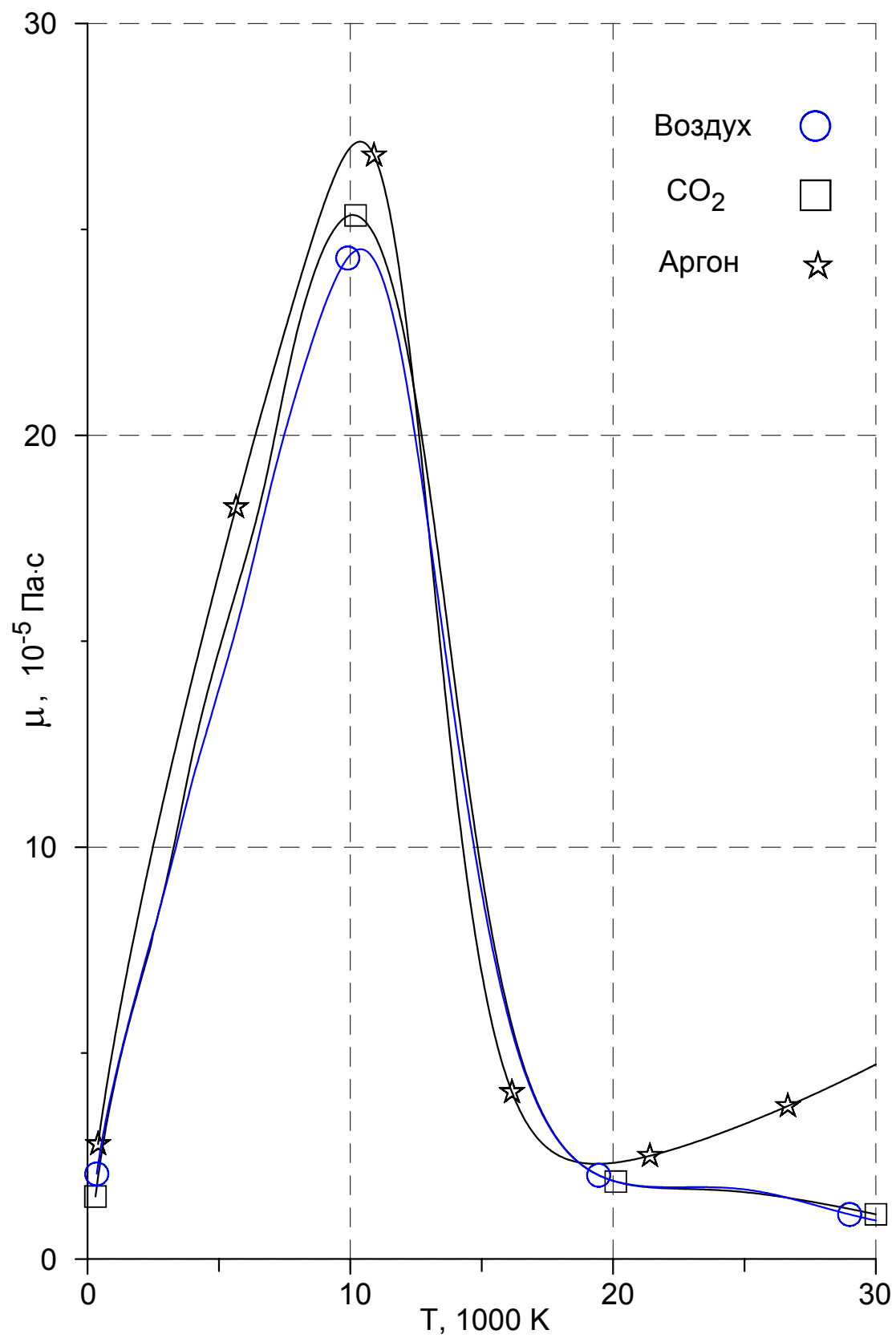


Рис. 8. Вязкость воздуха, углекислого газа и аргона при P=1 атм

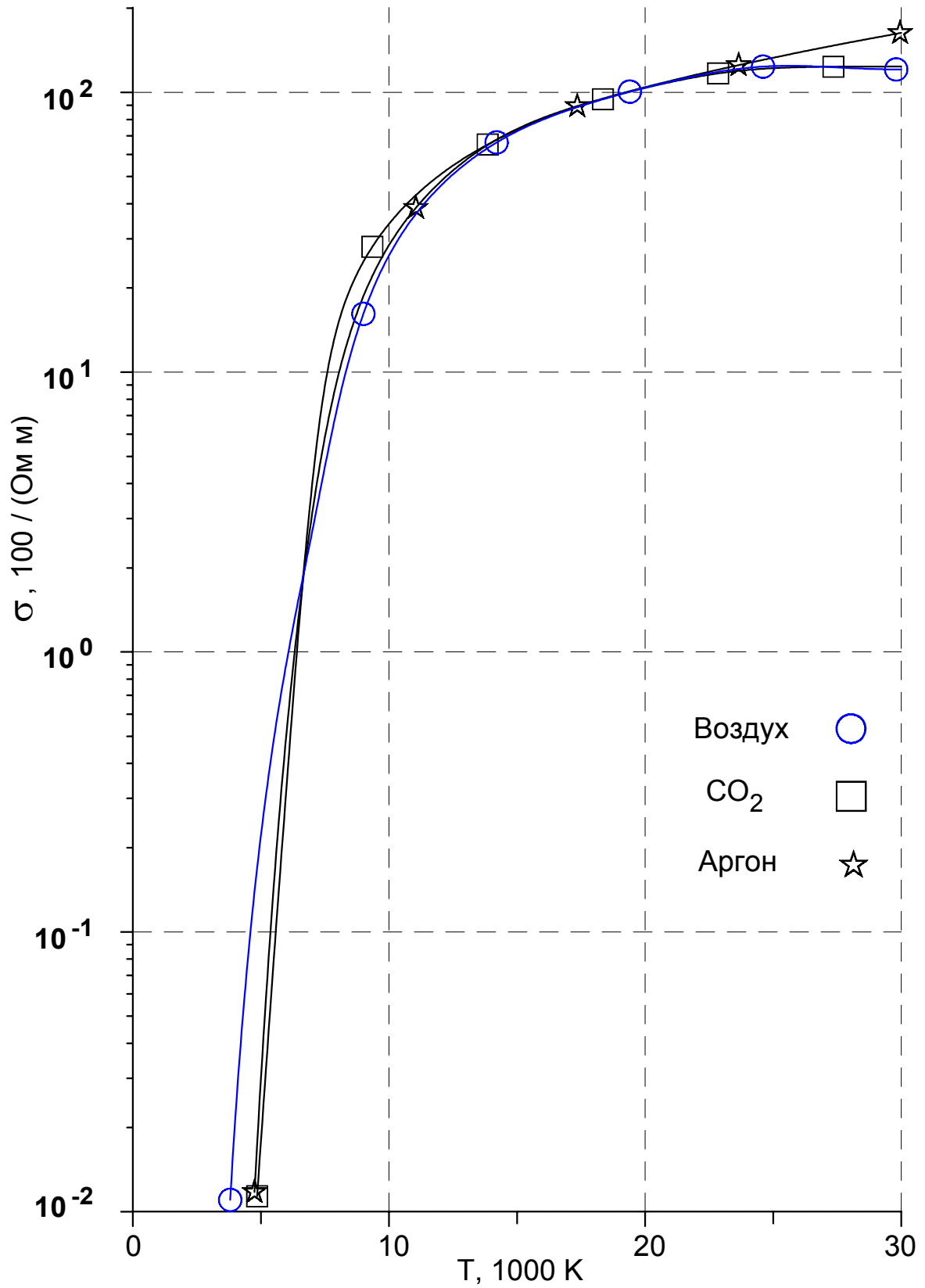


Рис. 9. Электропроводность воздуха, углекислого газа и аргона при P=1 атм

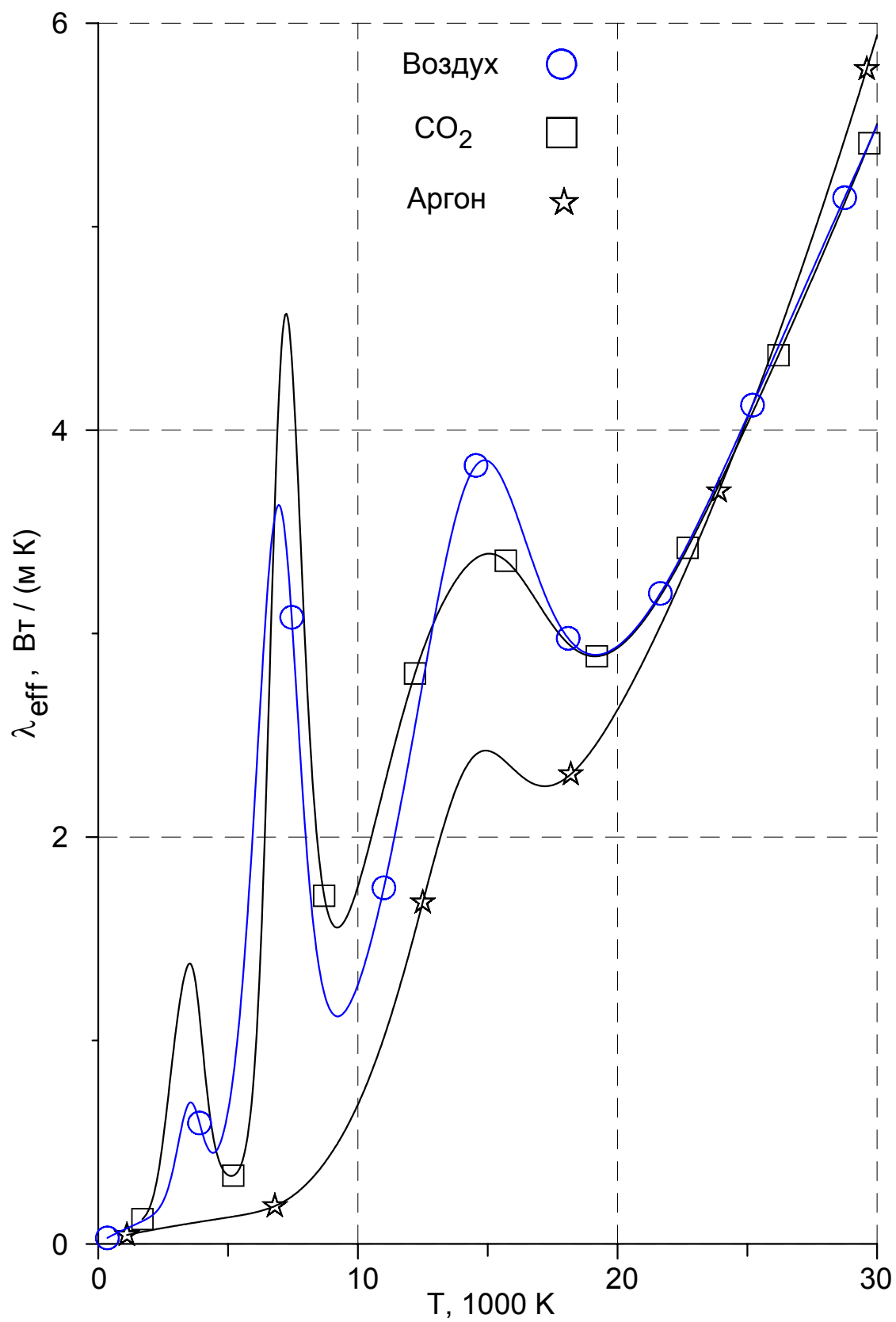


Рис. 10. Эффективная теплопроводность воздуха, углекислого газа и аргона при  $P=1$  атм