

УДК 519.6

## МЕТОДИКА СНДМА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ ИЗЛУЧАЮЩЕЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ПЛАЗМЫ

В. Д. Атаманенко, Г. В. Долголёва, В. А. Жмайло, И. В. Попов  
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Рассматривается методика СНДМА, предназначенная для расчета течений излучающей неравновесной молекулярной плазмы совместно с кинетикой химических, фотохимических, плазмохимических, фото- и радиационно-плазмохимических реакций в воздушной плазме.

Дается описание используемой физической модели, методики численного решения, проводится сравнение результатов численных расчетов с аналитическими решениями тестовых задач.

*Ключевые слова:* расчет течений излучающей неравновесной молекулярной плазмы, методика численного решения.

### Введение

В ряде задач необходимо решать уравнения газовой динамики совместно с уравнениями неравновесной кинетики плазмы и переноса излучения. К таким задачам относятся расчеты характеристик воздушной плазмы, связанных с прохождением ударных волн, возникающих при сильных локальных возмущениях атмосферы (например, для изучения проблемы ионизации, вызываемой метеорами, или для гиперзвуковых полетов на больших высотах).

Созданы различные модели описания процессов кинетики, например модель среднего иона, реализованная в методике СНДП [1]. Эта модель подходит для задач, в которых наблюдается сильное взаимодействие между процессами кинетики и переноса излучения. При этом в плазме преобладают многократные ионы, а наличием молекул можно пренебречь.

В данной работе рассматривается модель кинетики, излучения и движения плазмы, в которой учитываются молекулярные и ионно-молекулярные процессы в воздушной плазме — химические, фотохимические, плазмохимические, фото- и радиационно-плазмохимические, как-то: диссоциация молекул и молекулярных ионов тяжелыми частицами (под тяжелыми частицами здесь и далее подразумеваются ионы, молекулы, атомы); ионизация молекул, атомов, ионов электронным ударом; ионизация молекул тяжелыми частицами; ассоциативная ионизация и диссоциативная рекомбинация; химические реакции; реакции перезарядки; фотодиссоциация молекул; фотоионизация молекул, молекулярных ионов, атомов и ионов. Эта модель введена в методику СНД [2], и ей дано название СНДМА (СНД молекулярно-атомарная).

### 1. Система уравнений методики СНДМА

В методике СНДМА рассчитывается следующая система уравнений в одномерном приближении, записанная в лагранжевых массовых координатах  $m$  ( $\partial m = \rho r^\theta \partial r$ ):

– уравнение сохранения массы

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\rho} \right) = \frac{\partial}{\partial m} (r^\theta v); \quad (1)$$

– уравнение движения

$$\frac{d}{dt}v = -r^\theta \frac{\partial}{\partial m} (p_a + p_e + p_{rad}), \quad \frac{d}{dt}r = v, \quad p_{rad} = \int_0^\infty U_\varepsilon D_\varepsilon d\varepsilon; \quad (2)$$

– уравнение энергии свободных электронов

$$\frac{d}{dt}E_e + p_e \frac{\partial}{\partial m} (r^\theta v) = -\frac{Q_{ea}^{el}}{\rho} - \frac{Q_{ea}^{inel}}{\rho} - \frac{c}{\rho} \int_0^\infty (J_{\varepsilon_{light}} - \kappa'_{\varepsilon_{light}} U_\varepsilon) d\varepsilon; \quad (3)$$

– уравнение энергии тяжелых частиц

$$\frac{d}{dt}E_a + p_a \frac{\partial}{\partial m} (r^\theta v) = \frac{Q_{ea}^{el}}{\rho} + \frac{Q_{ea}^{inel}}{\rho} - \frac{c}{\rho} \int_0^\infty (J_{\varepsilon_{heavy}} - \kappa'_{\varepsilon_{heavy}} U_\varepsilon) d\varepsilon; \quad (4)$$

– уравнение переноса излучения в квазидиффузионном приближении

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} U_\varepsilon + \frac{1}{r^\theta} \frac{\partial}{\partial r} (r^\theta S_\varepsilon) &= J_\varepsilon - \kappa'_\varepsilon U_\varepsilon, \\ S_\varepsilon &= -\frac{c}{\kappa'_\varepsilon} \left[ \frac{\partial}{\partial r} (D_\varepsilon U_\varepsilon) + \frac{\theta (3D_\varepsilon - 1)}{2r} U_\varepsilon \right], \quad J_\varepsilon = J_{\varepsilon_{heavy}} + J_{\varepsilon_{light}}, \quad \kappa'_\varepsilon = \kappa'_{\varepsilon_{heavy}} + \kappa'_{\varepsilon_{light}}; \end{aligned} \quad (5)$$

– уравнения кинетики для реакций, описываемых стехиометрическим уравнением

$$\sum_{k=1}^{S_D} \nu_{k(j)}^D W_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{S_R} \nu_{k(j)}^R X_k, \quad k = \overline{1, K},$$

$$\frac{d}{dt}c_k = A_k \sum_{j=1}^M \left[ \left( -\nu_{k(j)}^D + \nu_{k(j)}^R \right) \left( k_{(j)}^D \frac{\rho^{\Sigma_D-1} \prod_{s=1}^{\Sigma_D} c_s}{m_a^{\Sigma_D-1} \prod_{s=1}^{\Sigma_D} A_s} - k_{(j)}^R \frac{\rho^{\Sigma_R-1} \prod_{s=1}^{\Sigma_R} c_s}{m_a^{\Sigma_R-1} \prod_{s=1}^{\Sigma_R} A_s} \right) \right]. \quad (6)$$

В (1)–(6) используются общепринятые обозначения. Кроме того,  $\rho = \sum_{k=1}^K \rho_k$  – массовая плотность среды;  $\varepsilon$  [эВ] – энергия квантов излучения;  $D_\varepsilon$  – коэффициент квазидиффузии [2], вычисляется по решению кинетического уравнения для спектральной интенсивности;  $Q_{ea}^{el}$  – объемная мощность обмена энергией между электронами и тяжелыми частицами в упругих столкновениях;  $Q_{ea}^{inel}$  – объемная мощность потери энергии электронами в неупругих столкновениях (реакции ассоциативной ионизации и диссоциативной рекомбинации);  $J_\varepsilon$ ,  $\kappa'_\varepsilon$  – спектральные излучательная способность и коэффициент поглощения соответственно, исправленные на вынужденное излучение;  $p_{rad}$  – давление излучения. В (6)  $c_k = \rho_k / \rho$  – массовая доля компонента  $k$ ;  $j = 1, \dots, M$  – число реакций, приводящих к образованию или уничтожению  $k$ -го компонента;  $A_k$  – масса компонента  $k$ , выраженная в атомных единицах массы  $m_a = 1,66057 \cdot 10^{-24}$  г;  $S_D$ ,  $S_R$  – число различных химических веществ, участвующих в прямой и обратной реакции  $j$  соответственно;  $\nu_{k(j)}^D$ ,  $\nu_{k(j)}^R$  – стехиометрические коэффициенты вещества сорта  $k$  ( $W_k$ ,  $X_k$ ) в прямой и обратной реакции  $j$  соответственно (по определению положительные); для краткости записи обозначено  $\Sigma_D = \sum_{k=1}^{S_D} \nu_{k(j)}^D$ ,  $\Sigma_R = \sum_{k=1}^{S_R} \nu_{k(j)}^R$ ; под знаком  $\prod$  стоят все массовые доли взаимодействующих компонентов в реакции с номером  $j$  (в прямой ( $D$ ) или обратной ( $R$ ));  $k_{(j)}^D$ ,  $k_{(j)}^R$  – скорости прямой и обратной реакций.

При моделировании кинетики реакций воздуха использовались следующие предположения:

- не включаются в рассмотрение аргон, неон и другие малые воздушные примеси;
- не учитывается присоединение электрона, т. е. образование отрицательных ионов;
- не учитываются возбужденные состояния атомов, ионов и молекул.

Компоненты воздушной плазмы в физической модели методики СНДМА — NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, NO<sup>+</sup>, N<sub>2</sub><sup>+</sup>, O<sub>2</sub><sup>+</sup>, N<sup>i+</sup>, O<sup>i+</sup> —  $i$  раз ионизованные ионы азота и кислорода,  $i = \overline{0,7}$  для азота и  $i = \overline{0,8}$  для кислорода, в частном случае  $i = 0$  — нейтральные атомы. То есть воздушная плазма рассматривается как смесь из свободных электронов и  $K = 24$  компонентов тяжелых частиц.

Кинетика рассчитывается по 86 химическим, фотохимическим, плазмохимическим, фото- и радиационно-плазмохимическим реакциям в воздушной плазме, как-то: диссоциация молекул и молекулярных ионов тяжелыми частицами [3–5]; ионизация молекул, атомов, ионов электронным ударом; ионизация молекул тяжелыми частицами [6–8]; ассоциативная ионизация и диссоциативная рекомбинация [4, 9]; химические реакции [4, 5, 10, 11]; реакции перезарядки [4, 12]; фотодиссоциация молекул [7, 13–15]; фотоионизация молекул, молекулярных ионов, атомов и ионов [8, 13–16]. Отметим, что в физической модели методики СНДМА для каждой прямой реакции учитывается и соответствующая обратная.

**1.1. Уравнения состояния.** При составлении уравнений состояния для электронов и тяжелых частиц авторы следовали [10], за нуль отсчета внутренней энергии принята энергия воздуха, состоящего из N<sub>2</sub> и O<sub>2</sub> при температуре 0 К.

Для тяжелых частиц

$$\begin{aligned} \frac{E_a}{\Psi} &= \left( \frac{5}{2}T_a + \varepsilon_{vibr_{NO}} \right) \frac{c_{NO}}{A_{NO}} + \left( 3T_a + \sum_{m=1}^{III} \varepsilon_{vibr_{NO_2m}} \right) \frac{c_{NO_2}}{A_{NO_2}} + \left( \frac{5}{2}T_a + \varepsilon_{vibr_{N_2}} \right) \frac{c_{N_2}}{A_{N_2}} + \\ &+ \left( \frac{5}{2}T_a + \varepsilon_{vibr_{O_2}} \right) \frac{c_{O_2}}{A_{O_2}} + \left( \frac{5}{2}T_a + \varepsilon_{vibr_{NO^+}} \right) \frac{c_{NO^+}}{A_{NO^+}} + \left( \frac{5}{2}T_a + \varepsilon_{vibr_{N_2^+}} \right) \frac{c_{N_2^+}}{A_{N_2^+}} + \\ &+ \left( \frac{5}{2}T_a + \varepsilon_{vibr_{O_2^+}} \right) \frac{c_{O_2^+}}{A_{O_2^+}} + \frac{3}{2} \frac{T_a}{A_N} \sum_{i=0}^7 c_{N^{i+}} + \frac{3}{2} \frac{T_a}{A_O} \sum_{i=0}^8 c_{O^{i+}} + \frac{U_{N_2}^{diss}}{2A_N} \sum_{i=0}^7 c_{N^{i+}} + \frac{U_{O_2}^{diss}}{2A_O} \sum_{i=0}^8 c_{O^{i+}} + \\ &+ \frac{(U_{N_2}^{diss} + U_{O_2}^{diss} - 2U_{NO}^{diss})}{2A_{NO}} (c_{NO} + c_{NO^+}) + \left( \frac{U_{N_2}^{diss}}{2} + U_{O_2}^{diss} - U_{NO}^{diss} - U_{NO_2}^{diss} \right) \frac{c_{NO_2}}{A_{NO_2}}; \quad (7) \\ p_a &= \Psi T_a \rho \left( \frac{c_{NO}}{A_{NO}} + \frac{c_{NO_2}}{A_{NO_2}} + \frac{c_{N_2}}{A_{N_2}} + \frac{c_{O_2}}{A_{O_2}} + \frac{c_{NO^+}}{A_{NO^+}} + \frac{c_{N_2^+}}{A_{N_2^+}} + \frac{c_{O_2^+}}{A_{O_2^+}} + \frac{\sum_{i=0}^7 c_{N^{i+}}}{A_N} + \frac{\sum_{i=0}^8 c_{O^{i+}}}{A_O} \right). \end{aligned}$$

Здесь  $\Psi = k_B/m_a$  ( $k_B = 1,6021 \cdot 10^{-12}$  эрг/эВ — постоянная Больцмана);  $T_a$  [эВ] — температура тяжелых частиц;  $\varepsilon_{vibr_k} = \frac{w_k}{\exp(w_k/T_a) - 1}$  — колебательная составляющая внутренней энергии молекул (значения энергий  $w_k$  колебательных квантов молекул сорта  $k$  приведены в [10, сс. 154, 324]).

Для электронов

$$\begin{aligned} \frac{E_e}{\Psi} &= \frac{3}{2}T_e \frac{c_e}{A_e} + \frac{c_{N_2^+}}{A_{N_2^+}} I_{N_2} + \frac{c_{O_2^+}}{A_{O_2^+}} I_{O_2} + \frac{c_{NO^+}}{A_{NO^+}} I_{NO} + \sum_{i=1}^7 \frac{c_{N^{i+}}}{A_N} \sum_{k=1}^i I_{N^{(k-1)+}} + \sum_{i=1}^8 \frac{c_{O^{i+}}}{A_O} \sum_{k=1}^i I_{O^{(k-1)+}}; \quad (8) \\ p_e &= \Psi T_e \rho \frac{c_e}{A_e}. \end{aligned}$$

Здесь  $T_e$  [эВ] — температура электронов;  $I_k$  — потенциал ионизации частицы сорта  $k$ ;  $U_k^{diss}$  — потенциал диссоциации молекулы  $k$ ;  $k = N_2, O_2, NO, NO_2$  соответственно;  $I_{N^{(k-1)+}}, I_{O^{(k-1)+}}$  — потенциалы

ионизации ионов  $N^{(k-1)+}$  и  $O^{(k-1)+}$  соответственно [6, 11, 17]; массовая доля электронов подчиняется условию квазинейтральности  $\frac{c_e}{A_e} = \frac{c_{NO^+}}{A_{NO^+}} + \frac{c_{N_2^+}}{A_{N_2^+}} + \frac{c_{O_2^+}}{A_{O_2^+}} + \sum_{i=1}^7 i \frac{c_{N^{i+}}}{A_N} + \sum_{i=1}^8 i \frac{c_{O^{i+}}}{A_O}$ .

**1.2. Упругие столкновения.** Обмен энергией между электронами и тяжелыми частицами в упругих столкновениях [10] описывается выражением (в СГС)

$$\frac{Q_{ea}^{el}}{\rho} = 1,699 \cdot 10^{44} c_e \sqrt{T_e \rho} \left[ 2\sigma_0 \text{ см}^2 \left( \frac{c_{NO}}{A_{NO}^2} + \frac{c_{NO_2}}{A_{NO_2}^2} + \frac{c_{N_2}}{A_{N_2}^2} + \frac{c_{O_2}}{A_{O_2}^2} + \frac{c_N}{A_N^2} + \frac{c_O}{A_O^2} \right) + \right. \\ \left. + \sigma_{\text{см}^2}^{(1)} \left( \frac{c_{NO^+}}{A_{NO^+}^2} + \frac{c_{N_2^+}}{A_{N_2^+}^2} + \frac{c_{O_2^+}}{A_{O_2^+}^2} + \frac{c_{N^+}}{A_{N^+}^2} + \frac{c_{O^+}}{A_{O^+}^2} \right) + \sum_{i=2}^7 \sigma_{\text{см}^2}^{(i)} \left( \frac{c_{N^{i+}}}{A_N^2} + \frac{c_{O^{i+}}}{A_O^2} \right) + \sigma_{\text{см}^2}^{(8)} \frac{c_{O^{8+}}}{A_O^2} \right] (T_e - T_a). \quad (9)$$

Здесь [10]  $\sigma_0 = 10^{-15} \text{ см}^2$  — газокинетическое сечение рассеяния электронов на нейтральных частицах;  $\sigma^{(i)} = 4,34 \cdot 10^{-14} \frac{i^2 \Lambda_{ei}^{(i)}}{T_e^2} \text{ см}^2$  — сечение рассеяния на  $i$ -кратных ионах, где  $\Lambda_{ei}^{(i)}$  — кулоновские

логарифмы электрон-ионных столкновений,  $\Lambda_{ei}^{(i)} = \begin{cases} -7,13 + \ln(T_e) - \frac{1}{2} \ln(c_e \rho), & T_e > 12i^2 \\ -8,33 + 1,5 \ln(T_e) - \frac{1}{2} \ln(c_e \rho i^2), & T_e \leq 12i^2. \end{cases}$

**1.3. Неупругие столкновения.** Из всего множества рассматриваемых неупругих столкновений диссоциация молекулярных ионов, ионизация молекул и атомов ударами тяжелых частиц, перезарядка, химические реакции с участием молекулярных ионов, ассоциативная ионизация и диссоциативная рекомбинация (реакция вида  $A + B \rightleftharpoons AB^+ + e$ ) требуют введения источников в уравнения энергии (3), (4).

Рассматривая соответствующие интегралы столкновений, уравнения состояния (7), (8) (сечения ассоциативной ионизации взяты из [9, с. 229]), несложно показать, что для реакции ассоциативной ионизации и диссоциативной рекомбинации источник описывается уравнением

$$\frac{1}{\Psi} \left( \frac{Q_{ea}^{inel}}{\rho} \right) = -\bar{k}_{(N-N)}^D \left( \frac{c_N}{A_N} \right)^2 (T_a + I_{N_2}) + \bar{k}_{(N-N)}^R \frac{c_{N_2^+} c_e}{A_{N_2^+} A_e} (T_e + I_{N_2}) - \bar{k}_{(O-O)}^D \left( \frac{c_O}{A_O} \right)^2 (T_a + I_{O_2}) + \\ + \bar{k}_{(O-O)}^R \frac{c_{O_2^+} c_e}{A_{O_2^+} A_e} (T_e + I_{O_2}) - \bar{k}_{(N-O)}^D \frac{c_N c_O}{A_N A_O} (T_a + I_{NO}) + \bar{k}_{(N-O)}^R \frac{c_{NO^+} c_e}{A_{NO^+} A_e} (T_e + I_{NO}), \quad (10)$$

где  $\bar{k}_{(j)}^{D(R)} = k_{(j)}^{D(R)} \rho / m_a$  ( $j = A-B$  — реакция вида  $A + B \rightleftharpoons AB^+ + e$ ),  $k_{(j)}^{D(R)}$  — скорости  $j$ -й ассоциативной ионизации ( $D$ ) и диссоциативной рекомбинации ( $R$ ). Источники для остальных описанных выше реакций не приводятся ввиду их малой величины по сравнению с источником (10).

**1.4. Спектральный коэффициент поглощения  $\kappa'_\varepsilon$  и излучательная способность  $J_\varepsilon$ .** В методике СНДМА излучение учитывается только в непрерывном спектре (возбужденные состояния тяжелых частиц не учитываются), вклад в который вносят следующие физические процессы:

- 1) тормозное излучение —  $\kappa'_{\varepsilon,f}, J_{\varepsilon,f}$ ;
- 2) связанно-свободные переходы (фотодиссоциация ( $ph-d$ ) и фотоионизация ( $ph-i$ )) —  $\kappa'_{\varepsilon,j}, J_{\varepsilon,j}$ ,  $j = ph-d, ph-i$ ;
- 3) связанно-связанные переходы в молекулах (молекулярные полосы).

Тогда  $J_\varepsilon = J_{\varepsilon_{heavy}} + J_{\varepsilon_{light}}$ ,  $\kappa'_\varepsilon = \kappa'_{\varepsilon_{heavy}} + \kappa'_{\varepsilon_{light}}$  — полные спектральные излучательная способность и коэффициент поглощения соответственно, исправленные на вынужденное излучение, где  $J_{\varepsilon_{heavy}} = \sum_{j=ph-d, \text{полосы}} J_{\varepsilon,j}$ ;  $J_{\varepsilon_{light}} = J_{\varepsilon,f} + \sum_{j=ph-i} J_{\varepsilon,j}$ ;  $\kappa'_{\varepsilon_{heavy}} = \sum_{j=ph-d, \text{полосы}} \kappa'_{\varepsilon,j}$ ;  $\kappa'_{\varepsilon_{light}} = \kappa'_{\varepsilon,f} + \sum_{j=ph-i} \kappa'_{\varepsilon,j}$ .

Выражения для коэффициента поглощения и излучательной способности для тормозного излучения, исправленных на вынужденное излучение, приведены в [10, сс. 222, 224].

*Связанно-свободные переходы.* Рассматривая баланс поглощения и испускания излучения в плазме при протекании реакции типа  $A + \hbar\omega \rightleftharpoons B + C$  в случаях неравновесного и равновесного составов плазмы, можно получить выражения для исправленных на вынужденное излучение коэффициента поглощения и излучательной способности:

$$\kappa'_\varepsilon = \sigma_\varepsilon \frac{\rho}{m_a A_A} \left( c_A - c_{BC} \frac{c_A^*}{c_B^* c_C^*} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right) \right); \quad J_\varepsilon = \sigma_\varepsilon \frac{\rho}{m_a A_A} c_{BC} \frac{c_A^*}{c_B^* c_C^*} \frac{8\pi k_B^4 \varepsilon^3}{h^3 c^3} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right). \quad (11)$$

Здесь звездочки используются для обозначения равновесных массовых долей;  $\sigma_\varepsilon$  — сечение фотодиссоциации, ионизации. Если рассматривается процесс фотодиссоциации, то в (11) входит температура тяжелых частиц, если процесс фотоионизации — температура электронов.

Равновесные массовые доли находятся из констант равновесия диссоциации [11] и ионизации [8]. Сечения фотодиссоциации, фотоионизации молекул, атомов, ионов приведены в [7, 8, 13–16].

*Молекулярные полосы.* Известно [10, с. 260–289], что при больших плотностях газа и при высоких температурах (но не выше  $\sim 15\,000$  К) молекулярные линии сильно расширяются и даже могут перекрываться. Молекулярный спектр при этом становится почти непрерывным. Воспользовавшись этим фактом, из рекомендаций, данных в [10], авторы вывели исправленные на вынужденное излучение коэффициенты поглощения и излучения при следующих условиях: 1) линии расширены настолько, что перекрываются; 2) число молекул  $Av''J''$  в верхнем электронном состоянии вычислялось по формуле Больцмана; 3) полосу заполняют линии с большими вращательными числами  $J'' \gg 1$  и  $\Delta J'' \ll J''$ .

Коэффициент поглощения, исправленный на вынужденное излучение, и излучательная способность в полосах, т. е. для системы Шумана—Рунге  $O_2$  ( $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ ), первой положительной системы  $N_2$  ( $B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$ ), второй положительной системы  $N_2$  ( $C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$ ), первой отрицательной  $N_2^+$  ( $B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$ ),  $\beta$ -системы  $NO$  ( $B^2\Pi - X^2\Pi$ ),  $\gamma$ -системы  $NO$  ( $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ ), определяются следующими выражениями (в СГС):

$$\begin{aligned} \kappa'_{\varepsilon,\beta} &= 10^6 \rho B_\beta \varphi_{\varepsilon,\beta} \exp\left(\frac{\varepsilon - U_\beta}{T_a}\right) T_a^{-1} c_{AB} A_{AB}^{-1} \left(1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T_a}\right)\right), \\ J_{\varepsilon,\beta} &= 6 \cdot 10^7 \frac{1}{c} \pi^{-4} \tilde{\sigma} \rho B_\beta \varphi_{\varepsilon,\beta} \varepsilon^3 \exp\left(\frac{-U_\beta}{T_a}\right) T_a^{-1} c_{AB} A_{AB}^{-1}. \end{aligned}$$

Здесь  $B_\beta \propto f_{VA}$  (величина порядка единицы),  $f_{VA}$  — сила осциллятора полосы А-В [10, с. 284];  $\varphi_{\varepsilon,\beta}$  — аналитическая аппроксимация безразмерного спектрального множителя (порядка единицы) [10, с. 282], отличного от нуля только в области, в которой излучает данная электронная полоса;  $c_{AB}$  — массовая доля молекулы АВ, для которой ищется поглощение;  $\tilde{\sigma}$  — постоянная Стефана—Больцмана.

## 2. Численный метод решения системы уравнений

Система уравнений (1)—(6) решается расщеплением по физическим процессам в следующей последовательности: 1) кинетика; 2) неупругие столкновения; 3) газовая динамика; 4) перенос излучения и его взаимодействие с веществом; 5) релаксация энергии между электронами и тяжелыми частицами в упругих столкновениях.

Численные методы решения уравнений газовой динамики, переноса излучения и релаксации энергии при упругих столкновениях описаны в работе [2].

Остановимся подробнее на решении системы уравнений кинетики и неупругих столкновений.

**2.1. Разностная схема для уравнений кинетики.** На этапе решения уравнений (1)–(6) рассматривается система уравнений (6) совместно с уравнениями состояния (7), (8). При написании разностной схемы для уравнений кинетики авторы стремились выполнить следующие условия:

- получаемые при решении системы уравнений кинетики массовые доли должны быть неотрицательными;
- сумма всех массовых долей (за исключением электронов) в каждой счетной ячейке должна сохраняться и быть равной единице. То есть должен выполняться закон сохранения массы

$$\sum_{k=1}^K c_k = \sum_{k=1}^K \rho_k / \rho = 1.$$

Таким требованиям удовлетворяет следующая неявная разностная схема для численного решения системы (6):

$$\frac{c_k^{\nu+1} - c_k^n}{\tau} = -b_k(c_1^\nu, \dots, c_K^\nu) c_k^{\nu+1} + d_k(c_1^\nu, \dots, c_K^\nu), \quad b_k \geq 0, \quad d_k \geq 0, \quad c_k^{\nu+1} = \frac{c_k^n + d_k \tau}{1 + b_k \tau}, \quad (12)$$

где  $\nu$  — номер итерации по кинетике;  $\tau$  — счетный шаг;  $c_k^n$  — значение массовой доли  $k$ -го компонента с временного слоя  $n$ .

Итерации в (12) ведутся до сходимости с заданной точностью  $\varepsilon_1$  — до тех пор, пока не будет выполняться неравенство  $\max_k \left( \frac{|c_k^{\nu+1} - c_k^\nu|}{c_k^{\nu+1}} \right) \leq \varepsilon_1 = 10^{-6}$ . В этом неравенстве участвуют компоненты с массовыми долями больше некоторой минимальной величины  $c_{\min} = 10^{-10}$ . Результатом решения системы уравнений (6) по схеме (12) являются массовые доли  $c_k^{n+1}$  на  $(n+1)$ -м временном слое. По ним рассчитываются все величины, которые зависят от массовых долей; в дальнейшем в течение счета всего временного шага эти величины больше не пересчитываются.

Система уравнений численно решается расщеплением по физическим процессам. Обмен энергией между электронами и тяжелыми частицами учитывается в источниках  $Q_{ea}^{el}$  (релаксация) и  $Q_{ea}^{inel}$  (неупругие столкновения). Процессы релаксации и неупругих столкновений считаются после кинетики. В результате решения уравнений кинетики получаются новые электронные и ионные теплоемкости и потери на ионизацию ( $C_{Ve}^{n+1}$ ,  $C_{Va}^{n+1}$ ,  $I_e^{n+1}$ ,  $I_a^{n+1}$ ) (уравнения состояния (7), (8) можно представить в виде  $E_e(c_1, \dots, c_K, T_e) = C_{Ve}(c_e)T_e + I_e(c_1, \dots, c_K)$ ;  $E_a(c_1, \dots, c_K, T_a) = C_{Va}(c_1, \dots, c_K)T_a + I_a(c_1, \dots, c_K)$ ), а также промежуточные температуры электронов и ионов  $\tilde{T}_e^{n+1}$ ,  $\tilde{T}_a^{n+1}$  с учетом сохранения энергий на этапе совместного решения уравнений кинетики и энергии:  $E_e = C_{Ve}^n T_e^n + I_e^n = C_{Ve}^{n+1} \tilde{T}_e^{n+1} + I_e^{n+1}$ ;  $E_a = C_{Va}^n T_a^n + I_a^n = C_{Va}^{n+1} \tilde{T}_a^{n+1} + I_a^{n+1}$ . Далее температуры электронов и ионов меняются при счете  $Q_{ea}^{inel}$ , газовой динамики, переноса излучения и  $Q_{ea}^{el}$ .

**2.2. Неупругие столкновения.** Изменение энергии электронов и тяжелых частиц при неупругих столкновениях описывается следующей системой (второй этап при расщеплении — уравнения (3), (4)):  $\frac{dE_e}{dt} = -\frac{Q_{ea}^{inel}}{\rho}$ ;  $\frac{dE_a}{dt} = \frac{Q_{ea}^{inel}}{\rho}$ .

Выражение для  $Q_{ea}^{inel}/\rho$  из (10) можно записать в виде  $BT_e - AT_a$  ( $A \geq 0$ ,  $B \geq 0$ ), где

$$A = \bar{k}_{(N-N)}^D \left( \frac{c_N}{A_N} \right)^2 \left( 1 + \frac{I_{N_2}}{\tilde{T}_a^{n+1}} \right) + \bar{k}_{(O-O)}^D \left( \frac{c_O}{A_O} \right)^2 \left( 1 + \frac{I_{O_2}}{\tilde{T}_a^{n+1}} \right) + \bar{k}_{(N-O)}^D \frac{c_N}{A_N} \frac{c_O}{A_O} \left( 1 + \frac{I_{NO}}{\tilde{T}_a^{n+1}} \right);$$

$$B = \frac{c_e}{A_e} \left[ \bar{k}_{(N-N)}^R \frac{c_{N_2}^+}{A_{N_2}^+} \left( 1 + \frac{I_{N_2}}{\tilde{T}_e^{n+1}} \right) + \bar{k}_{(O-O)}^R \frac{c_{O_2}^+}{A_{O_2}^+} \left( 1 + \frac{I_{O_2}}{\tilde{T}_e^{n+1}} \right) + \bar{k}_{(N-O)}^R \frac{c_{NO}^+}{A_{NO}^+} \left( 1 + \frac{I_{NO}}{\tilde{T}_e^{n+1}} \right) \right].$$

Линеаризованная по температуре монотонная схема решения имеет вид

$$\frac{\tilde{T}_e^{n+1} - \tilde{T}_e^{n+1}}{\tau} = \frac{1}{C_{Ve}^{n+1}} \left( A \tilde{T}_a^{n+1} - B \tilde{T}_e^{n+1} \right); \quad \frac{\tilde{T}_a^{n+1} - \tilde{T}_a^{n+1}}{\tau} = \frac{1}{C_{Va}^{n+1}} \left( B \tilde{T}_e^{n+1} - A \tilde{T}_a^{n+1} \right),$$

или

$$\tilde{T}_e^{n+1} = \frac{\left(1 + \frac{\tau B}{C_{Ve}^{n+1}}\right) \tilde{T}_a^{n+1} + \frac{\tau B}{C_{Va}^{n+1}} \tilde{T}_e^{n+1}}{1 + \tau \left(\frac{B}{C_{Ve}^{n+1}} + \frac{A}{C_{Va}^{n+1}}\right)}; \quad \tilde{T}_a^{n+1} = \frac{\left(1 + \frac{\tau A}{C_{Va}^{n+1}}\right) \tilde{T}_e^{n+1} + \frac{\tau A}{C_{Ve}^{n+1}} \tilde{T}_a^n}{1 + \tau \left(\frac{B}{C_{Ve}^{n+1}} + \frac{A}{C_{Va}^{n+1}}\right)},$$

где  $\tilde{T}_e^{n+1}$ ,  $\tilde{T}_a^{n+1}$  — промежуточные значения температуры после решения уравнений кинетики и неупругих столкновений.

Несколько слов по поводу того, что при решении уравнения энергии на этапе счета упругих и неупругих процессов излучения можно пользоваться линейризованным по температуре выражением производной по времени от энергии. На самом деле уравнения (3), (4) для нахождения температур имеют вид

$$\left(\frac{\partial E_{a,e}}{\partial T_{a,e}}\right)_{c_i} \frac{d}{dt} T_{a,e} = - \sum_i \left(\frac{\partial E_{a,e}}{\partial c_i}\right)_{T_{a,e}, c_j \neq c_i} \frac{dc_i}{dt} - p_{a,e} \frac{\partial}{\partial m} (r^\theta v) \pm \frac{Q_{ea}^{el}}{\rho} \pm \frac{Q_{ea}^{inel}}{\rho} - \frac{c}{\rho} \int_0^\infty (J_\varepsilon - \kappa'_\varepsilon U_\varepsilon) d\varepsilon. \quad (13)$$

Если решать (13) методом расщепления по физическим процессам, то по методу, описанному в подразд. 2.1, решаются уравнения кинетики совместно с уравнением  $C_{Va,e} (c_j^{n+1}) \frac{d}{dt} T_{a,e} = - \sum_i \left(\frac{\partial E_{a,e}}{\partial c_i}\right)_{T_{a,e}, c_j \neq c_i} \frac{dc_i}{dt}$ . Расчет всех остальных физических процессов может производиться по линейризованному уравнению типа  $C_{Va,e} (c_j^{n+1}) \frac{d}{dt} T_{a,e} = \pm \frac{Q_{ea}^{inel}}{\rho}$ .

### 3. Тестовые расчеты

**3.1. Задача о расчете равновесного воздуха в заданном диапазоне температур.** Цель — сравнить результаты численных расчетов по методике СНДМА с известными данными о составе равновесного воздуха [18].

Математическая постановка этой задачи следующая. Уравнения газовой динамики не решались;  $\rho = \delta \rho_0$  ( $\delta = \text{const}$ ;  $\rho_0 = 1,2921 \cdot 10^{-3} \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$  — плотность воздуха в нормальных условиях). Начальные значения массовых долей:  $c_{N_2} = 0,768$ ;  $c_{O_2} = 0,232$  (т. е. при заданной температуре 0,18–1,13 эВ начальный состав воздуха был существенно неравновесный). Уравнения кинетики (6) и энергий (7), (8) решались до тех пор, пока правые части (6) не обращались в нуль.

На рис. 1–4 приведены значения равновесных концентраций ( $\alpha_k = \frac{n_k \rho_0}{n_0 \rho}$ , где  $n_k$  — объемная концентрация компонента  $k$ ,  $n_0$  — число Лошмидта) компонентов воздушной плазмы при различной температуре для  $\delta = 1$ ;  $10^{-3}$ . Пунктирные линии — результаты расчетов, маркеры — данные, взятые из [18]. Наблюдается хорошее согласие приведенных результатов.

Заметим, что, как видно из рисунков, чем плотнее среда, тем молекулярные составляющие воздуха существуют при более высокой температуре. Кроме того, видно, что при низкой температуре ( $T \leq 0,6$  эВ) основной источник свободных электронов —  $\text{NO}^+$ : в этом температурном диапазоне кривые концентраций молекулярного иона  $\text{NO}^+$  и электронов совпадают.

Отметим, что в работе [18] не приводятся концентрации  $\alpha_k < 10^{-4}$ , поэтому на рис. 1 не приводятся значения из [18] для  $\text{O}_2^+$ , а на рис. 2 — для  $\text{N}_2^+$ .

Проведенный тестовый расчет показывает, что используемая физическая модель кинетики и численный метод решения уравнений (1)–(6) позволяют находить не только неравновесные значения состава воздуха, но и, в предельном случае, равновесные.

**3.2. Модельная задача о диссоциативной рекомбинации.** Решим задачу о диссоциативной рекомбинации молекулярного иона азота с учетом упругих и неупругих столкновений. Рассмотрим неподвижный идеальный газ, состоящий из атомарного азота, молекулярного иона азота и

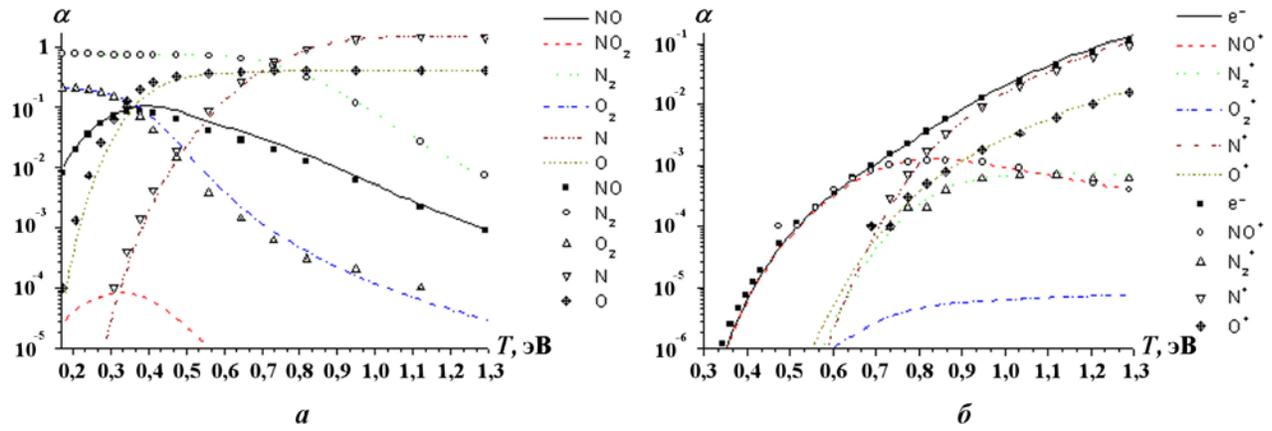


Рис. 1. Результаты расчета равновесного состава воздуха плотностью  $\rho = 1,2921 \cdot 10^{-3} \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$ : *a* — нейтральные частицы; *b* — ионизованные частицы

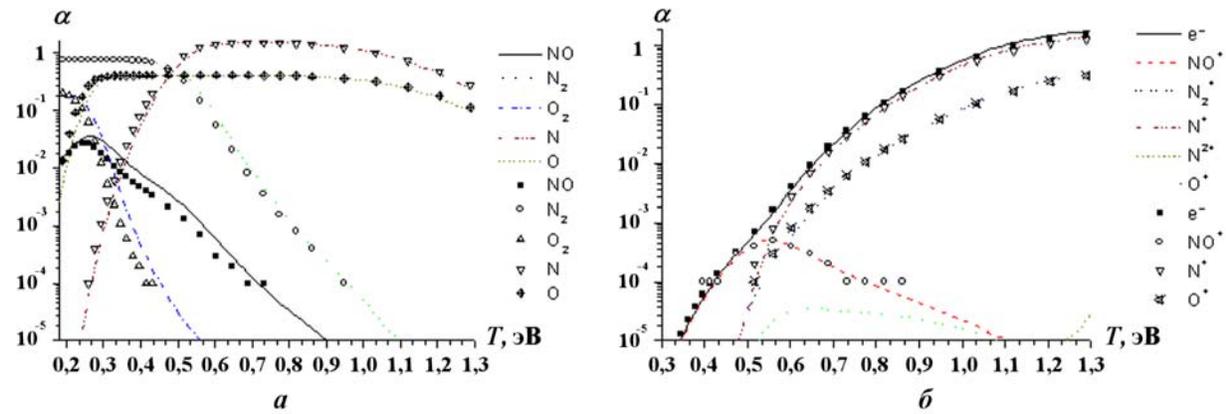


Рис. 2. Результаты расчета равновесного состава воздуха плотностью  $\rho = 1,2921 \cdot 10^{-6} \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$ : *a* — нейтральные частицы; *b* — ионизованные частицы

электронов. Единственный канал, по которому может меняться состав газа, — это  $\text{N}_2^+ (X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow 2\text{N} (^2D) + 5,825 \text{ эВ}$  — канал диссоциативной рекомбинации.

Исходная система уравнений, полученная из системы уравнений (1)–(6), уравнений состояния (7), (8) (колебательная составляющая внутренней энергии тяжелых частиц опущена) и выражений упругих и неупругих процессов (9), (10) в этом случае имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_e(t) &= -k^R(t) n_e(t) n_{\text{N}_2^+}(t); \\ \frac{d}{dt} E_e(t) &= -Q_{ea}^{el}(t) - Q_{ea}^{inel}(t); \\ \frac{d}{dt} E_a(t) &= Q_{ea}^{el}(t) + Q_{ea}^{inel}(t). \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь  $E_e(t) = \frac{3}{2} T_e(t) n_e(t) + I_{\text{N}_2} n_{\text{N}_2^+}(t)$ ;  $E_a(t) = \frac{3}{2} T_a(t) n_{\text{N}}(t) + \frac{U_{\text{N}_2}^{diss}}{2} n_{\text{N}}(t) + \frac{5}{2} T_a(t) n_{\text{N}_2^+}(t)$  — уравнения состояния;  $k^R(t) = \frac{4,16 \cdot 10^{-8}}{\sqrt{T_e(t)}} [\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}]$  — скорость диссоциативной рекомбинации молекулярного иона азота [4];

$Q_{ea}^{el}(t) = 3 \sqrt{\frac{8A_e k_B}{\pi m_a}} n_e(t) \sqrt{T_e(t)} \left( 2\sigma_0 \frac{n_{\text{N}}(t)}{A_{\text{N}}} + \sigma_e(t) \frac{n_{\text{N}_2^+}(t)}{A_{\text{N}_2^+}} \right) (T_e(t) - T_a(t))$  — обмен энергией между электронами и тяжелыми частицами в упругих столкновениях;  $Q_{ea}^{inel}(t) =$

$= k^R(t) n_e(t) n_{N_2^+}(t) (T_e(t) + I_{N_2^+})$  — обмен энергией в неупругом процессе диссоциативной рекомбинации.

Упростим вид  $Q_{ea}^{el}(t)$ . Для этого предположим, что электроны в основном сталкиваются с нейтральными атомами (т. е. начальная степень ионизации газа невелика);  $\sigma_0$  — газокинетическое сечение. Получим

$$Q_{ea}^{el}(t) = 6\sqrt{\frac{8A_e k_B}{\pi m_a}} n_e(t) \sqrt{T_e(t)} \sigma_0 \frac{n_N(t)}{A_N} (T_e(t) - T_a(t)).$$

Действуют следующие законы сохранения: сохраняется число ядер азота  $2n_{N_2^+}(t) + n_N(t) = N_0 = \text{const} \neq N_0(t)$  и выполняется условие квазинейтральности  $n_e(t) = n_{N_2^+}(t)$ . Тогда систему (14) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \sqrt{T_e} \frac{d\alpha_e}{d\tilde{t}} &= -\alpha_e^2; \\ 3\alpha_e \sqrt{T_e} \frac{dT_e}{d\tilde{t}} &= \alpha_e^2 T_e - 2B\alpha_e(1 - 2\alpha_e) T_e (T_e - T_a); \\ (3 - \alpha_e) \sqrt{T_e} \frac{dT_a}{d\tilde{t}} &= \alpha_e^2 (2U_r + 2T_e - T_a) + 2B\alpha_e(1 - 2\alpha_e) T_e (T_e - T_a), \end{aligned} \quad (15)$$

где  $\alpha_e = \frac{n_e}{N_0}$ ;  $\tilde{t} = tN_0 \tilde{k}^R$ ;  $B = \frac{6\sigma_0}{A_N \tilde{k}^R} \sqrt{\frac{8A_e k_B}{\pi m_a}}$ ;  $U_r = I_{N_2} - U_{N_2}^{diss} = 5,825 \text{ эВ}$ ; ( $I_{N_2} = 15,577 \text{ эВ}$ ;  $U_{N_2}^{diss} = 9,755 \text{ эВ}$ );  $\tilde{k}^R = 4,16 \cdot 10^{-8}$  — скорость диссоциативной рекомбинации при  $T_e = 1 \text{ эВ}$ .

Начальные условия:  $\alpha_e(t=0) = \alpha_e^0$ ;  $T_e(t=0) = T_e^0$ ;  $T_a(t=0) = T_a^0$ .

Система (15) имеет решение в квадратурах, найденное одним из авторов. В общих чертах ход решения следующий. Поделим второе и третье уравнения (15) на уравнение кинетики (первое уравнение системы (15)). В итоге получим два дифференциальных уравнения относительно производных температур по  $\alpha_e$ . Эту систему несложно решить и найти связь между  $T_a$  и  $T_e$  как функцию  $\alpha_e$ :

$$T_a(\alpha_e) = -\frac{3\alpha_e}{3 - \alpha_e} T_e(\alpha_e) + \frac{3 - \alpha_e^0}{3 - \alpha_e} T_a^0 + \frac{3\alpha_e^0}{3 - \alpha_e} T_e^0 - 2U_r \frac{\alpha_e - \alpha_e^0}{3 - \alpha_e}. \quad (16)$$

Для нахождения зависимости  $T_e(\alpha_e)$  имеем следующее обыкновенное дифференциальное уравнение Бернулли:

$$\frac{d}{d\alpha_e} T_e(\alpha_e) + f(\alpha_e) T_e(\alpha_e) + g(\alpha_e) T_e^2(\alpha_e) = 0, \quad (17)$$

где

$$f(\alpha_e) = \frac{1}{3\alpha_e} + \frac{2}{3} B \frac{1 - 2\alpha_e}{\alpha_e^2} \left( \frac{3 - \alpha_e^0}{3 - \alpha_e} T_a^0 + \frac{3\alpha_e^0}{3 - \alpha_e} T_e^0 - 2U_r \frac{\alpha_e - \alpha_e^0}{3 - \alpha_e} \right); \quad g(\alpha_e) = -\frac{2}{3} B \frac{1 - 2\alpha_e}{\alpha_e^2} \frac{3 + 2\alpha_e}{3 - \alpha_e}.$$

Решение (17) в квадратурах:

$$T_e = T_e^0 \frac{\left( \frac{\alpha_e}{\alpha_e^0} \right)^{-\alpha} \left( \frac{3/\alpha_e - 1}{3/\alpha_e^0 - 1} \right)^{-\gamma} \exp\left( \beta \left( \frac{1}{\alpha_e} - \frac{1}{\alpha_e^0} \right) \right)}{1 + \frac{2}{3} T_e^0 B (\alpha_e^0)^\alpha \left( \frac{3}{\alpha_e^0} - 1 \right)^\gamma \exp\left( -\frac{\beta}{\alpha_e^0} \right) \left( \Gamma(\alpha, \gamma, \alpha_e) + 4\Gamma(\alpha - 1, \gamma, \alpha_e) - 15\Gamma(\alpha, \gamma + 1, \alpha_e) \right)}, \quad (18)$$

где введены обозначения

$$\alpha = \frac{1}{3} - \frac{8}{3} B U_r; \quad \beta = \frac{2}{9} B [(3 - \alpha_e^0) T_a^0 + 3\alpha_e^0 T_e^0 + 2U_r \alpha_e^0];$$

$$\gamma = \frac{10}{27} B [(3 - \alpha_e^0) T_a^0 + 3\alpha_e^0 T_e^0 - 2U_r (3 - \alpha_e^0)]; \quad \Gamma(a, b, x) = \int_{1/\alpha_e^0}^{1/x} t^a (3t - 1)^{-b} \exp(\beta t) dt.$$

Зная решение (18), из первого уравнения системы (15) можно найти зависимость степени ионизации  $\alpha_e$  от времени.

Проанализируем полученные решения.

Если плазма, имеющая некоторую начальную степень ионизации и температуру, предоставлена самой себе и рекомбинирует, то согласно (16) температура тяжелых частиц со временем увеличивается и в пределе  $\alpha_e \rightarrow 0$  ( $t \rightarrow \infty$ )

$$T_a^{\alpha_e \rightarrow 0} = \frac{1}{3} [(3 - \alpha_e^0) T_a^0 + 3\alpha_e^0 T_e^0 + 2U_r \alpha_e^0]. \quad (19)$$

Несложно показать из (18), что в пределе  $\alpha_e \rightarrow 0$  ( $t \rightarrow \infty$ ) температура электронов стремится к температуре тяжелых частиц (19), хотя поначалу наблюдается их отрыв друг от друга.

Если пренебречь упругими столкновениями в газе ( $B = 0$ ), то решение (18) упрощается:

$$T_e = T_e^0 \left( \frac{\alpha_e}{\alpha_e^0} \right)^{-1/3}, \quad \alpha_e = \alpha_e^0 \left( 1 + \frac{7\alpha_e^0 N_0 \tilde{k}^R}{6\sqrt{T_e^0}} t \right)^{-6/7}. \quad (20)$$

Видно, что температура электронов неограниченно возрастает с уменьшением степени ионизации. Этот нефизичный эффект исчезает при учете упругих столкновений. В пределе  $\alpha_e \rightarrow 0$  ( $t \rightarrow \infty$ ) температура тяжелых частиц стремится к температуре (19).

Задача ставилась в следующей постановке. Уравнения газовой динамики не решались;  $N_0 = 8,643e14 \text{ см}^{-3}$ ; начальные массовые доли веществ:  $c_{N_2^+} = 0,02$ ;  $c_N = 0,98$  ( $\alpha_e^0 = 0,01$ );  $T_e^0 = T_a^0 = 0,25 \text{ эВ}$ .

Были проведены два расчета:

- 1) рассчитывалась неравновесная кинетика; учитывался обмен энергией между электронами и тяжелыми частицами в упругих и неупругих столкновениях;
- 2) расчет проводился аналогично расчету 1 за исключением того, что не учитывался обмен энергией между электронами и тяжелыми частицами в упругих столкновениях.

Результаты численных расчетов и аналитические решения представлены на рис. 3, 4 (см. также цветную вкладку). Как видно, наблюдается хорошее согласие численного и аналитического решений (отличие менее 1%).

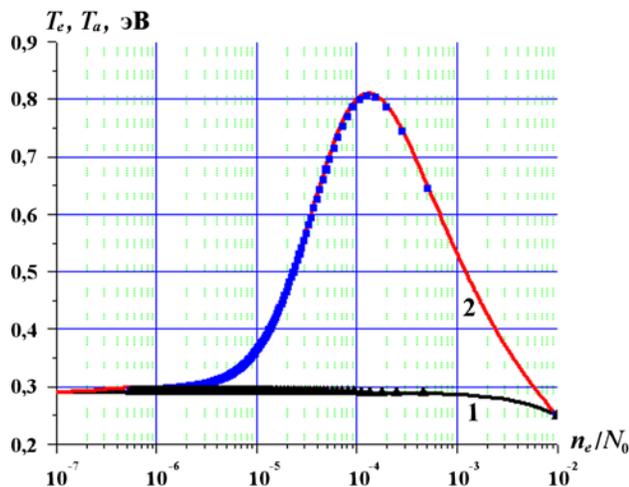


Рис. 3. Сравнение результатов расчета 1 температуры электронов и тяжелых частиц с аналитическим решением (16), (18): — —  $T_a$  (1),  $T_e$  (2) — аналитическое решение; ■ —  $T_e$ , численное решение; ▲ —  $T_a$ , численное решение

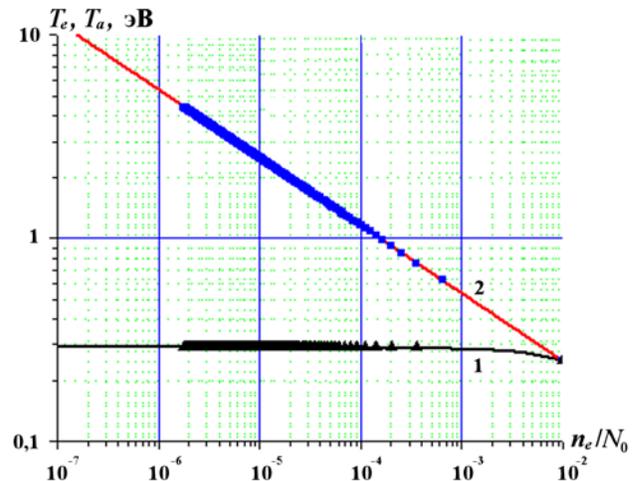


Рис. 4. Сравнение результатов расчета 2 температуры электронов и тяжелых частиц с аналитическим решением (16), (20): — —  $T_a$  (1),  $T_e$  (2) — аналитическое решение; ■ —  $T_e$ , численное решение; ▲ —  $T_a$ , численное решение

**3.3. Модельная задача о фотодиссоциации молекулярного кислорода.** По методике СНДМА решалась модельная задача, которая имеет аналитическое решение, полученное одним из авторов.

Рассмотрим частный случай системы уравнений (1)–(6) при следующих предположениях:

- 1) химическая система предполагается кинетически идеальной, неравновесной;
- 2) принимается во внимание реакция фотодиссоциации молекулы кислорода:  $O_2 + \hbar\omega \rightarrow 2O$ ;
- 3) реагенты равномерно распределены по объему;
- 4) поглощение излучения в среде происходит согласно спектральному диффузионному уравнению переноса излучения;
- 5) геометрия задачи — плоская одномерная;
- 6) газодинамического движения вещества нет;
- 7) сечение фотодиссоциации не зависит от частоты излучения;
- 8) коэффициент спонтанного излучения пренебрежимо мал по сравнению с поглощением излучения;
- 9) пренебрегается процессом вынужденного излучения.

Тогда система (1)–(6) принимает вид

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} U_\varepsilon(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} S_\varepsilon(x, t) &= -c\kappa(x, t) U_\varepsilon(x, t); \\
 \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} S_\varepsilon(x, t) + \frac{c}{3} \frac{\partial}{\partial x} (U_\varepsilon(x, t)) &= -\kappa(x, t) S_\varepsilon(x, t); \\
 \frac{\partial}{\partial t} E(x, t) &= c \int_{U_{O_2}^{diss}}^{\infty} \kappa(x, t) U_\varepsilon(x, t) d\varepsilon; \\
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha(x, t) &= k^D(x, t) (1 - \alpha(x, t)); \quad \kappa(x, t) = N\sigma(1 - \alpha(x, t)).
 \end{aligned} \tag{21}$$

Здесь  $k^D = \frac{c}{k_B} \int_{U_{O_2}^{diss}}^{\infty} \frac{\sigma}{\varepsilon} U_\varepsilon d\varepsilon$  — скорость фотодиссоциации;  $N$  — начальная объемная концентрация

молекул кислорода ( $n_{O_2}(t=0) = N$ );  $\alpha(x, t) = 1 - n_{O_2}/N$  — степень диссоциации; уравнение (7) переходит в  $E = \frac{5}{2} N k_B (1 - \alpha(x, t)) T + 3 N k_B \alpha(x, t) T + N k_B U_{O_2}^{diss} \alpha(x, t)$  — внутренняя энергия единицы объема;  $x$  — эйлерова координата.

Поставим для системы (21) краевую задачу первого типа в полупространстве ( $x \geq 0$ ). Начальные условия:  $\alpha(x, t=0) = 0$ ;  $S_\varepsilon(x, t=0) = 0$ ;  $U_\varepsilon(x, t=0) = 0$ ;  $T(x, t=0) = T^0$ . Граничные условия:  $S_\varepsilon(x=0, t) = S_\varepsilon^0(t)$ ;  $S_\varepsilon(x \rightarrow \infty, t) = 0$ .

Решения для спектральных плотности  $U_\varepsilon(x, t)$  и потока излучения  $S_\varepsilon(x, t)$  будем искать в виде  $S_\varepsilon = caU_\varepsilon$ , где  $a = 1/\sqrt{3}$ .

Аналитическое решение системы (21) имеет вид

$$\alpha(x, t) = \begin{cases} \frac{Z\left(t - \frac{x}{ca}\right) - 1}{\exp\left(\frac{N\sigma}{a} x\right) + Z\left(t - \frac{x}{ca}\right) - 1}, & \text{если } t \geq \frac{x}{ca}; \\ 0, & \text{если } t < \frac{x}{ca}; \end{cases} \tag{22}$$

$$U_\varepsilon(x, t) = \begin{cases} \frac{Z\left(t - \frac{x}{ca}\right) \tilde{J}_\varepsilon\left(t - \frac{x}{ca}\right)}{\exp\left(x \frac{N\sigma}{a}\right) + Z\left(t - \frac{x}{ca}\right) - 1}, & \text{если } t \geq \frac{x}{ca}; \\ 0, & \text{если } t < \frac{x}{ca}; \end{cases} \quad (23)$$

$$T(x, t) = \begin{cases} \frac{2 \frac{c\sigma}{k_B} \exp\left(x \frac{N\sigma}{a}\right) \int_0^{t - \frac{x}{ca}} \frac{Z(\tau) \int_{U_{O_2}^{diss}}^{\infty} \tilde{J}_\varepsilon(\tau) d\varepsilon}{\left(\exp\left(x \frac{N\sigma}{a}\right) + Z(\tau) - 1\right)^2} d\tau - 2\alpha(x, t) U_{O_2}^{diss} + 5T^0}{5 + \alpha(x, t)}, & \text{если } t \geq \frac{x}{ca}; \\ T^0, & \text{если } t < \frac{x}{ca}. \end{cases} \quad (24)$$

Здесь

$$Z(z) = \exp\left(\frac{\sigma c}{k_B} \int_0^z \int_{U_{O_2}^{diss}}^{\infty} \frac{\tilde{J}_\varepsilon(\tau)}{\varepsilon} d\varepsilon d\tau\right); \quad (25)$$

$\tilde{J}_\varepsilon(t) = S_\varepsilon^0(t) / ca$  — плотность излучения на левой границе  $x = 0$ .

В качестве граничного условия для плотности излучения возьмем следующую функцию (выбор такой функции связан исключительно с тем, чтобы можно было разрешить все появляющиеся в (22)—(25) квадратуры и чтобы поток на границе имел существенную временную зависимость):

$$\tilde{J}_\varepsilon(t) = k_B T_0^2 \frac{N}{\varepsilon^2} (cN\sigma t)^2, \quad (26)$$

где  $T_0$  [эВ] — начальная температура излучения. Тогда из (25)

$$Z(z) = \exp\left(\frac{(\sigma c N)^3}{(U_{O_2}^{diss})^2} T_0^2 \frac{z^3}{6}\right).$$

Из (24) при условии (26)

$$T(x, t) = \begin{cases} \frac{2\alpha(x, t) U_{O_2}^{diss} + 5T^0}{5 + \alpha(x, t)}, & \text{если } t \geq \frac{x}{ca}; \\ T^0, & \text{если } t < \frac{x}{ca}. \end{cases} \quad (27)$$

Для численного решения системы уравнений (21) параметры задачи брались следующие:  $N = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ;  $\sigma = 10^{-18} \text{ см}^2$ ;  $T^0 = 0,025 \text{ эВ}$ ;  $T_0 = 7 \text{ эВ}$ ;  $U_{O_2}^{diss} = 5,12 \text{ эВ}$ .

Сравнение аналитического решения с численным приведено на рис. 5, 6. Как следует из этих рисунков, согласие численного и аналитического решений хорошее (отличие меньше доли процента).

### Заключение

Создана методика СНДМА расчета динамики, кинетики, переноса излучения в неравновесной воздушной плазме. В физическую модель методики можно легко включить новые вещества и реакции между ними, что позволяет использовать ее для решения большого круга задач. Проведенные

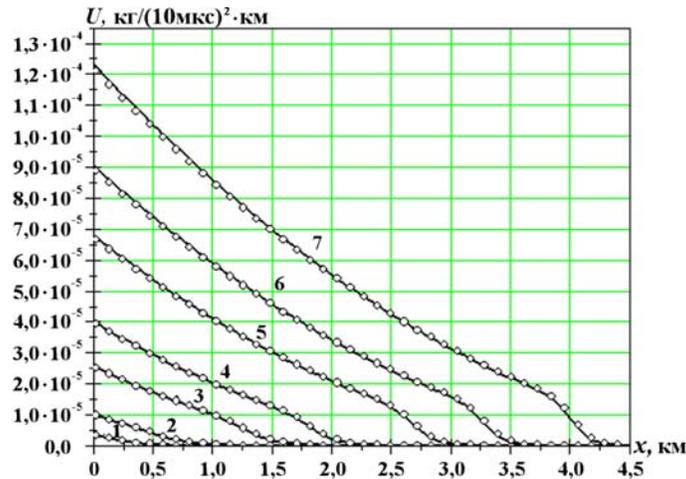


Рис. 5. Интегральная по всему спектру плотность излучения на различные моменты времени: 1 —  $t = 0,6 \times 10^{-5}$  с; 2 —  $t = 1 \cdot 10^{-5}$  с; 3 —  $t = 1,6 \cdot 10^{-5}$  с; 4 —  $t = 2 \cdot 10^{-5}$  с; 5 —  $t = 2,6 \cdot 10^{-5}$  с; 6 —  $t = 3 \cdot 10^{-5}$  с; 7 —  $t = 3,5 \cdot 10^{-5}$  с; — — аналитическое решение (23);  $\circ$  — численное решение

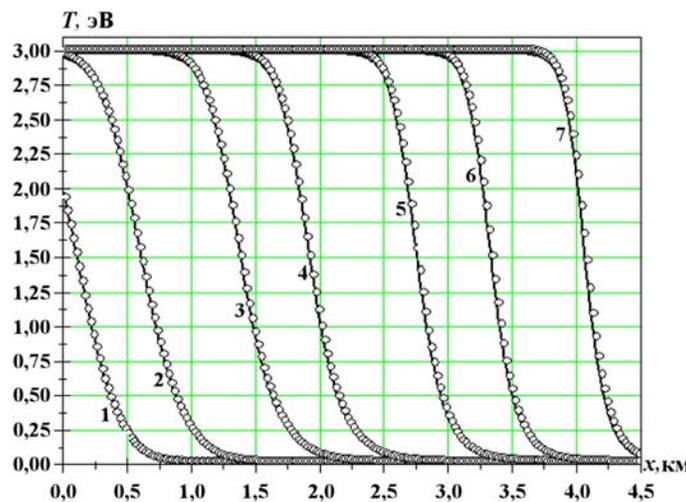


Рис. 6. Температура газа на различные моменты времени: 1 —  $t = 0,6 \cdot 10^{-5}$  с; 2 —  $t = 10^{-5}$  с; 3 —  $t = 1,6 \times 10^{-5}$  с; 4 —  $t = 2 \cdot 10^{-5}$  с; 5 —  $t = 2,6 \cdot 10^{-5}$  с; 6 —  $t = 3 \cdot 10^{-5}$  с; 7 —  $t = 3,5 \cdot 10^{-5}$  с; — — аналитическое решение (27);  $\circ$  — численное решение

тестовые расчеты демонстрируют применимость методики, правильность численного решения исходной системы уравнений. Предполагается, что методика СНДМА будет использоваться в расчетах неравновесных процессов в воздушной плазме.

За многочисленные плодотворные обсуждения авторы выражают благодарность А. А. Кондратьеву и Ю. И. Матвеевко (РФЯЦ-ВНИИТФ).

### Список литературы

1. Бельков С. А., Долголёва Г. В. Модель среднего иона для расчета кинетики ионизации, населенностей возбужденных уровней и спектральных коэффициентов переноса излучения в программе СНДП // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1992. Вып. 1. С. 59–61.

2. Долголёва Г. В. Методика расчета движения двухтемпературного излучающего газа (СНД) // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1983. Вып. 2(13). С. 29—33.
3. Ибрагимова Л. Б., Сметов Г. Д., Шаталов О. П. Константы скорости диссоциации двухатомных молекул в термически равновесных условиях // Механика жидкости и газа. 1999. Вып. 1. С. 181—186.
4. Teulet P., Sarrette J. P., Gomes A. M. Collisional-radiative modeling of one- and two-temperature air and air-sodium plasmas at atmospheric pressure with temperatures of 2 000—12 000 K // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2001. Vol. 70. P. 159—187.
5. Панасенко Л. Н., Романов Г. С., Станкевич Ю. А., Степанов К. Л. О квазиравновесных состояниях низкотемпературной воздушной плазмы пониженной плотности // Инженерно-физический журнал. 1995. Т. 68, № 4. С. 569—575.
6. Teulet P., Sarrette J. P., Gomes A. M. Calculation of electron impact inelastic cross sections and rate coefficients for diatomic molecules. Application to air molecules // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1999. Vol. 62. P. 549—569.
7. Замышляев Б. В., Ступицкий Е. Л., Гузь А. Г., Жуков В. Н. Состав и термодинамические функции плазмы. М.: Наука, 1984.
8. Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М.: Наука, 1973.
9. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводный том I / Под ред. В. Е. Фортова. М.: Наука, 2000.
10. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
11. Кривоносова О. Э., Лосев С. А., Наливайко В. П., Мукосеев Ю. К., Шаталов О. П. Рекомендуемые данные о константах скорости химических реакций между молекулами, состоящими из атомов N и O // Химия плазмы. Вып. 14 / Под общ. ред. Б. М. Смирнова. М.: Энергоатомиздат, 1987.
12. Lin S. C., Teare J. D. Ionization rate in the air behind shock waves // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6, No 3. P. 355—375.
13. Мнацаканян А. Х. Фотодиссоциация и фотоионизация двухатомных молекул при высоких температурах // Теплофизика высоких температур. 1968. Т. 6, № 2. С. 236—241.
14. Romanov G. S., Stankevich Yu. A., Stanchits L. K., Stepanov K. L. Thermodynamic and optical properties of gases in a wide range of parameters // Int. J. Heat Mass Transfer. 1995. Vol. 38. P. 545—556.
15. Fennely J. A., Torr D. G. Photoionization and photoabsorption cross sections of O, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> and N for aeronomic calculations // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1992. Vol. 51. P. 321—363.
16. Verner D. A., Yakovlev D. G., Band I. M., Trazhaskovskaya M. B. Subshell photoionization cross sections and ionization energies of atoms and ions from He to Zn // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1993. Vol. 55, No. 2. P. 233—280.
17. Григорьев И. С., Мейлихов Е. З. Физические величины. М.: Энергоатомиздат, 1991.
18. Кузнецов Н. М. Термодинамические функции и ударные адиабаты воздуха при высоких температурах. М.: Машиностроение, 1965.