

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ЛАГУТИН Семён Михайлович

Выпускная квалификационная работа

**Разработка модулей программного комплекса КАРРА для
исследования физико-химических свойств газов**

Уровень образования:

Направление: 01.01.03 «Механика и математическое моделирование»

Основная образовательная программа СВ.5008 «Механика и
математическое моделирование»

Профиль «Молекулярно-кинетическая теория жидкости и газа»

Научный руководитель:
заведующий кафедрой
гидроаэромеханики, доктор
физико-математических наук,
профессор Кустова Е. В.

Рецензент:
научный сотрудник университета
Штата Техас в Остине, США,
кандидат физико-математических
наук, Облапенко Г. П.

Санкт-Петербург

2021

SAINT-PETERSBURG STATE UNIVERSITY

LAGUTIN Semen

Bachelor's Thesis

**Development of KAPPA software package modules for
investigation of physical and chemical properties of gases**

Scientific supervisor:
head of department of
hydroaeromechanics, PhD, professor,
Elena Kustova

Reviewer:
Research Scientist, The University of
Texas at Austin, USA, Candidate in
Physics and Mathematics, Georgii
Oblapenko

Saint-Petersburg

2021

Содержание

Введение	4
1 Теоретическая модель	6
1.1 Поуровневое приближение	6
2 Библиотека KAPPA	10
3 Программное обеспечение	11
3.1 Архитектура приложения	11
3.2 Графический интерфейс	12
4 Модельная задача	14
5 Результаты	15
6 Заключение	25

Введение

Кинетическая теория многокомпонентных реагирующих газов в условиях сильной термической и химической неравновесности помогает решить многие современные научные и технические задачи. Основываясь на распределениях молекул по скоростям и внутренним энергиям, связывая кинетическое описание газа с газодинамическим — характеризующимся макроскопическими параметрами, зависящими только от пространственных и временных координат — можно построить и замкнуть систему уравнений неравновесной газовой динамики [1].

Наиболее детальным подходом кинетической теории является поуровневое приближение, учитывающее заселенности колебательных уровней молекул [1, 2]. Применение поуровневого подхода важно в условиях сильных отклонений от равновесия, например, при изучении входа космического аппарата в атмосферу планеты, в задачах низко-температурной плазмы, при исследовании разрядов.

Для практического использования поуровневого подхода необходимы сведения о коэффициентах скорости физико-химических процессов и коэффициентах переноса, зависящих от колебательного состояний молекул. Теоретические модели для указанных коэффициентов разработаны в [1], а их практическая реализация проведена в программном комплексе КАРРА [3, 4]. КАРРА — библиотека с открытым исходным кодом, написанная на языке программирования C++, разрабатываемая на кафедре гидроаэромеханики Санкт-Петербургского государственного университета. В числе прочего, в данной библиотеке содержатся базы данных физических и химических свойств молекул и атомов, реализованы модели коэффициентов скоростей реакций и коэффициентов переноса в приближении поуровневой кинетики.

Одним из ограничений библиотеки КАРРА является то, что она не позволяет решать уравнения неравновесной газодинамики. Для решения систем уравнений необходимо стороннее программное обеспечение, в котором реализованы численные методы решения систем дифференциальных уравнений, описывающих течение газа. Кроме того, КАРРА представля-

ет собой программную библиотеку. Её применение пользователем, не обладающим достаточными навыками программирования, довольно сильно затруднено.

Целью данной работы является написание программного модуля для работы с библиотекой КАРРА, посредством которого можно решать системы уравнений неравновесной газодинамики в поуровневом приближении, получая распределения гидродинамических параметров исследуемых течений.

Помимо этого, поставлена задача разработать пользовательский интерфейс, позволяющий использовать функционал библиотеки, не вникая в структуру исходного кода.

1 Теоретическая модель

Фундаментальная основа кинетической теории — уравнение Больцмана для функций распределения частиц, описывающее изменение функции распределения вследствие движения газа вдоль траектории и вследствие столкновений частиц.

Пусть $f_{cij}(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ — функция распределения частиц смеси по химическим сортам c , уровням колебательной i и вращательной j энергии в фазовом пространстве координат \mathbf{r} , скоростей \mathbf{u} и времени t . Функция распределения является плотностью вероятности математического ожидания числа частиц заданных сортов в элементарном фазовом объёме $(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}) \times (\mathbf{u}, \mathbf{u} + d\mathbf{u})$ в момент времени t . Макропараметры газа определяются как моменты функции распределения.

Кинетические уравнения Больцмана для функции распределения:

$$\frac{\partial f_{cij}}{\partial t} + \mathbf{u}_c \cdot \nabla f_{cij} = J_{cij} \quad (1)$$
$$c = 1, \dots, L, \quad i = 0, \dots, L_c, \quad j = 0, \dots, L_{ci}.$$

где J_{cij} — интегральный оператор столкновений частиц; L — количество химических сортов частиц в смеси; L_c, L_{ci} — число возбужденных колебательных и вращательных уровней энергии частиц соответственно. Таким образом, левая часть данных уравнений выражает изменение функции распределения при движении вдоль траектории, правая часть — изменение вследствие различных взаимодействий частиц при столкновениях.

1.1 Поуровневое приближение

Для приближенного решения уравнения Больцмана часто используется один из основных методов кинетической теории — метод Энского–Чепмена [5, 6], а также его обобщения [1]. В обобщенном методе все процессы в газах делятся на быстрые и медленные. Функция распределения раскладывается в ряды по малому параметру — отношению характерных времен релаксации быстрых и медленных процессов.

Детальное поуровневое приближение применяется, в частности, в условиях сильной колебательной и химической неравновесности, когда релак-

сация по поступательным и вращательным степеням свободы происходит значительно быстрее колебательной релаксации и химических реакций. Отношение характерных времен релаксации в этом случае:

$$\tau_{\text{tr}} \lesssim \tau_{\text{rot}} \ll \tau_{\text{vibr}} < \tau_{\text{react}} \sim \theta, \quad (2)$$

здесь θ — характерное время изменения газодинамических макропараметров. При таких условиях предполагается локальное сохранение равновесных распределений по скоростям и уровням вращательной энергии.

Макропараметрами в поуровневом приближении являются скорость газа $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, температура $T(\mathbf{r}, t)$, и заселенности колебательных уровней $n_{ci}(\mathbf{r}, t)$. Уравнения переноса для макропараметров выводятся из уравнения Больцмана [1]:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{P} &= 0, \\ \rho \frac{dU}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{P} : \nabla \mathbf{v} &= 0, \\ \frac{dn_{ci}}{dt} &= n_{ci} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (n_{ci} \mathbf{V}_{ci}) = R_{ci}. \end{aligned} \quad (3)$$

В результате получаем систему уравнений сохранения количества движения и энергии, дополненную уравнениями детальной поуровневой кинетики для заселенностей колебательных уровней. Данные уравнения содержат потоковые члены: тензор напряжений \mathbf{P} , характеризующий перенос импульса, поток тепла \mathbf{q} — перенос энергии, скорость диффузии \mathbf{V}_{ci} — перенос массы и колебательной энергии.

$$\begin{aligned} n_{ci} \mathbf{V}_{ci}(\mathbf{r}, t) &= \sum_j \int \mathbf{c}_c f_{cij}(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u}_c \\ \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{cij} \int m_c \mathbf{c}_c \mathbf{c}_c f_{cij}(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u}_c \\ \mathbf{q}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{cij} \int \left(\frac{m_c c_c^2}{2} + \varepsilon_j^{ci} + \varepsilon_i^c + \varepsilon_c \right) \mathbf{c}_c f_{cij}(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u}_c \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь \mathbf{c}_c — собственная скорость частиц, ε_j^{ci} , ε_i^c , ε_c — вращательная, колебательная энергия уровней i , j и энергия образования. Потоковые члены в первом приближении метода выражаются через коэффициенты переноса:

теплопроводности, сдвиговой и объемной вязкости, релаксационное давление, коэффициенты многокомпонентной диффузии и термодиффузии.

Кроме того, уравнения переноса (3) содержат релаксационные члены R_{ci} , выражающиеся через интегралы медленных процессов и характеризующие изменения заселенностей колебательных уровней и концентраций атомарных компонентов вследствие столкновений частиц и происходящих при этом обменов внутренней энергией, химических реакций обмена и диссоциации-рекомбинации:

$$R_{ci} = \sum_j \int J_{cij}^{\text{sl}} d\mathbf{u}_c = R_{ci}^{\text{vibr}} + R_{ci}^{\text{react}} = R_{ci}^{\text{VT}} + R_{ci}^{\text{VV}} + R_{ci}^{\text{exch}} + R_{ci}^{\text{diss-rec}} \quad (5)$$

Выражения для R_{ci} содержат микроскопические коэффициенты скорости переходов колебательной энергии и химических реакций:

$$\begin{aligned} R_{ci}^{\text{VT}} &= \sum_{d=a,m} n_d \sum_{i' \neq i} (n_{ci'} k_{c,i'i}^d - n_{ci} k_{c,ii'}^d) \\ R_{ci}^{\text{VV}} &= \sum_{dk'i'k'} (n_{ci'} n_{dk'} k_{c,i'i}^{d,k'k} - n_{ci} k_{c,ii'}^{d,kk'}) \\ R_{ci}^{\text{exch}} &= \sum_{dc'd'} \sum_{ki'k'} (n_{c'i'} n_{d'k'} k_{c'i',ci}^{d'k',dk} - n_{ci} n_{dk} k_{ci,c'i'}^{dk,d'k'}) \\ R_{ci}^{\text{diss-rec}} &= \sum_{dk} n_{dk} (n_{c'} n_{f'} k_{\text{rec},ci}^{dk} - n_{ci} k_{ci,\text{diss}}^{dk}) \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь k_{\dots} — коэффициенты скорости соответствующих процессов.

Как видно из выражений (6) вычисление релаксационных членов подразумевает расчет коэффициентов скорости обменов колебательной энергией и химических реакций для каждого колебательного уровня, а также многократное суммирование. Причем для интегрирования уравнений переноса необходимо вычислять новые значения релаксационных членов, основываясь на температуре и заселенностях в каждый момент времени и в каждой ячейке сетки. Все это делает задачу решения уравнений переноса вычислительно трудоемкой.

Существует большое количество теоретических моделей различной степени сложности для расчета поуровневых коэффициентов скорости реакций. Например, для вычислений коэффициентов VT и VV-переходов колебательной энергии часто используются модели Шварца-Славского-Герц-

фельда SSH [7] и нагруженного гармонического осцилятора ГНО [8], для коэффициентов реакций диссоциации-рекомбинации — модель Тринора–Маррона [9] и ее модификации. Наиболее достоверные модели реализованы в библиотеке KAPPA.

2 Библиотека KAPPA

Библиотека KAPPA [4] предоставляет программный интерфейс для вычисления физических, химических, термодинамических свойств и коэффициентов переноса исследуемых смесей газов.

Архитектура библиотеки основана на объектно-ориентированной парадигме программирования. Все внутренние классы описаны в пространстве имен `kappa`.

Представленные в KAPPA классы:

- `kappa::Atom`, `kappa::Molecule` — классы, реализующие хранение физических параметров отдельных сортов частиц — атомов и молекул; наследуются от `kappa::Particle`.

- `kappa::Interaction` — класс, который позволяет хранить данные о взаимодействии двух частиц.

- `kappa::Approximation` — класс, реализующий методы поуровневой кинетики для вычислений коэффициентов скоростей реакций, сечений и интегралов столкновений, статистических сумм, а также Больцмановского распределения.

- `kappa::Mixture` — наследуется от класса `kappa::Approximation`; реализует методы расчета коэффициентов переноса для многокомпонентных смесей газов.

Важное замечание: один из принципов объектно-ориентированного программирования, а именно принцип инкапсуляции в KAPPA в полной мере не применяется. Все объекты библиотечных классов содержат только качественные, но не количественные характеристики. А функции-методы библиотеки используют константные спецификации для входных параметров, гарантирующих их неизменность в ходе работы алгоритмов.

Это означает, например, что библиотечный класс `kappa::Mixture` хранит только сорта частиц, входящих в смесь, без конкретизации концентраций и заселенностей компонентов.

В дополнение к программному интерфейсу вместе с KAPPA также поставляются текстовые базы данных для отдельных частиц и взаимодействий.

3 Программное обеспечение

Для решения поставленных задач было разработано программное обеспечение, включающее в себя модуль для решения системы уравнений переноса и имеющее графический пользовательский интерфейс.

В силу того, что представленная система дифференциальных уравнений является жесткой, для её интегрирования был выбран неявный метод Гира [10] переменного порядка точности с квазипостоянным размером шага.

3.1 Архитектура приложения

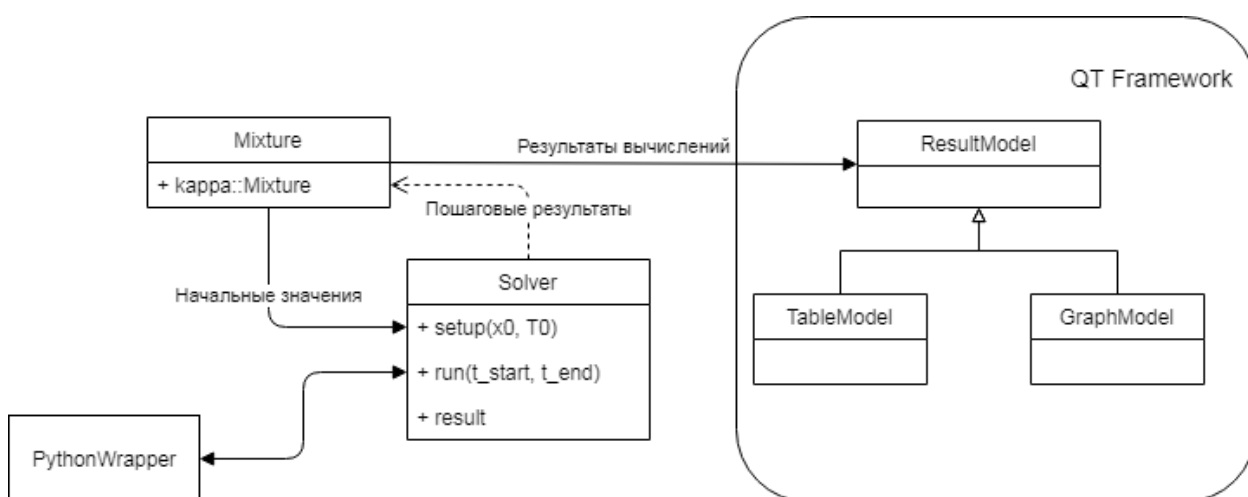


Рис. 1. Архитектура разработанного программного обеспечения

Класс `MixtureStorage` реализует хранение информации о конкретном качественном и количественном составе смеси исследуемых газов. Содержит в себе объект библиотечного класса `kappa::Mixture`, концентрации компонентов и значения заселенностей колебательных уровней. Имеет методы для получения коэффициентов переноса на основе текущего состояния.

Реализация метода Гира используется из Python пакета для научных вычислений `scipy`¹. В статическом классе `PythonWrapper` написаны функ-

¹Scientific computing tools for Python, URL <https://www.scipy.org/>

ции преобразования данных между двумя языками, использующие низкоуровневый программный интерфейс Python/C API².

Класс `Solver` предоставляет интерфейс для интегрирования системы дифференциальных уравнений. Реализует функцию обратного вызова `rpart(t, x)`, которую может использовать алгоритм метода Гира из Python. `Solver` имеет следующие методы:

1. `setup(x0, T0)` для инициализации начальных условий;
2. `run(t_start, t_end)` для запуска интегрирования на отрезке времени $(t_{\text{start}}, t_{\text{end}})$;
3. `result()` для получения результатов интегрирования — заселенностей, концентраций атомарных компонентов и температуры на каждом временном шаге.

3.2 Графический интерфейс

Графический интерфейс приложения основывается на фреймворке с открытым исходным кодом QT³. Выбор данного фреймворка обусловлен удобством поддержки разработанных программных решений и легкой переносимостью получаемых приложений между разными операционными системами.

Класс `ResultModel` базируется на `QAbstractItemModel`. Служит для хранения результатов вычислений от других модулей приложения. Имеет два класса-наследника: `ResultTable` для организации результатов в табличном виде; `ResultGraph` — для графического представления.

На рисунке 2 изображена таблица, в которой настраивается состав смеси. У каждой частицы в таблице есть тип, загружаемый из базы данных КАРРА. Пользователь выбирает нужные частицы, вписывает концентрации и задает модели для молекул — модель осциллятора и модель ротатора.

²Python/C API Reference Manual, URL <https://docs.python.org/3/c-api/>

³QT | Cross-platform software development for embedded & desktop, URL <https://www.qt.io/>

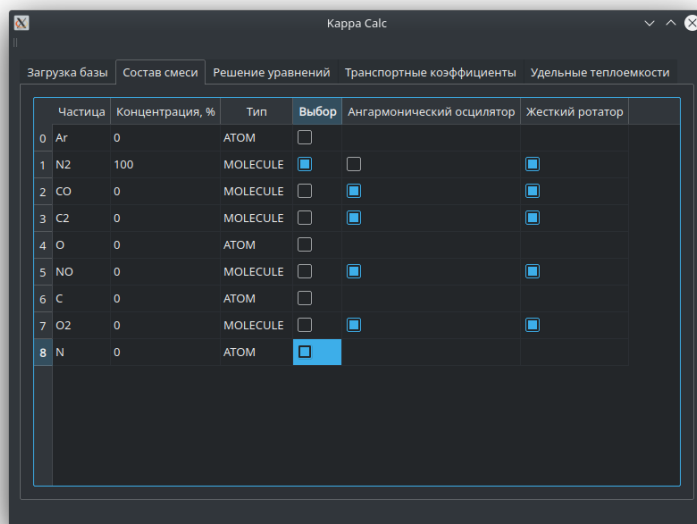


Рис. 2. Форма настройки состава смеси

На рисунке 3 изображен экран для взаимодействия с модулем решения уравнений. Пользователь задает на выбор начальные параметры — распределение заселенностей, начальную температуру. Затем указывает до какого времени интегрировать систему.

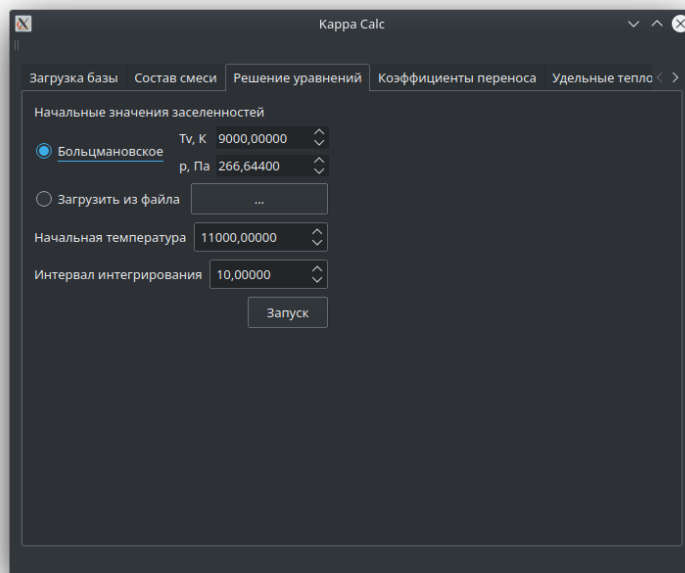


Рис. 3. Форма настройки и запуска модуля решения уравнений

4 Модельная задача

В целях демонстрации работы программного модуля рассмотрим задачу пространственно-однородной релаксации для бинарной смеси газов A_2/A . В этом случае система уравнений переноса (3) упрощается:

$$U = \frac{3}{2}nkT + n_{A_2}kT + \sum_i \varepsilon_i^{A_2} n_{A_2i} + \sum_c \varepsilon_c n_c = \text{const}$$

$$\frac{dn_{A_2i}}{dt} = R_{A_2i}, \quad i = 0, \dots, L, \quad (7)$$

$$\frac{dn_A}{dt} = R_A$$

Здесь n — числовая плотность смеси, k — постоянная Больцмана, n_{A_2} — числовая плотность молекул сорта A_2 . При этом интегральный оператор для реакций химического обмена равен нулю, поэтому релаксационные члены имеют вид:

$$R_{A_2i} = R_{A_2i}^{\text{VT}} + R_{A_2i}^{\text{VV}} + R_{A_2i}^{\text{diss-rec}}$$

$$R_A = -2 \sum_i R_{A_2i}^{\text{diss-rec}} \quad (8)$$

Начальное значение заселенностей n_{A_2i} задается распределением Больцмана с колебательной температурой T_{vibr} , отличной от температуры газа T :

$$n_{A_2i} = n \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_i^{A_2}}{kT_{\text{vibr}}}\right)}{\sum_i \exp\left(-\frac{\varepsilon_i^{A_2}}{kT_{\text{vibr}}}\right)}. \quad (9)$$

Колебательная энергия молекулы $\varepsilon_i^{A_2}$ описывается гармоническим осциллятором.

В результате имеем систему $L + 2$ обыкновенных дифференциальных уравнений, которая решается при заданных начальных значениях параметров T , T_{vibr} , $p = nkT$.

5 Результаты

Рассмотрим процессы релаксации, происходящие при различных начальных неравновесных условиях. Коэффициенты VT-обменов посчитаны по модели SSH, коэффициенты скорости реакций диссоциации–рекомбинации — по модели Тринора–Маррона. Данные модели реализованы в КАРРА.

Решение системы уравнений поуровневой кинетики проводилось двумя способами: с помощью разработанного модуля и с помощью кода, написанного в научном пакете MatLab⁴. Рассматривались бинарные смеси N₂/N и O₂/O при различных начальных отклонениях от равновесия. Во всех примерах начальное давление $p_0 = 266.644$ Па.

На Рис. 4–19 приведены распределения макропараметров смеси, вычисленные для нескольких тестовых случаев с использованием MatLab и разработанного модуля. Температуры, концентрации и заселенности колебательных уровней приводятся как функции времени. Видим, что чем выше колебательный уровень, тем раньше начинается процесс релаксации заселенностей. Также, с увеличением номера уровня увеличивается время выхода на равновесие. Кроме того заселенности нижних уровней сохраняют высокие значения в равновесном состоянии, в то время как заселенности верхних уровней малы. Изменения концентраций атомарных компонентов и температуры газа тесно связаны с значениями заселенностей всех колебательных уровней.

⁴MATLAB - MathWorks, URL <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>

Рис. 4. Изменение заселенностей нижних уровней,
 N_2/N , $T_0 = 15000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 1500$ К

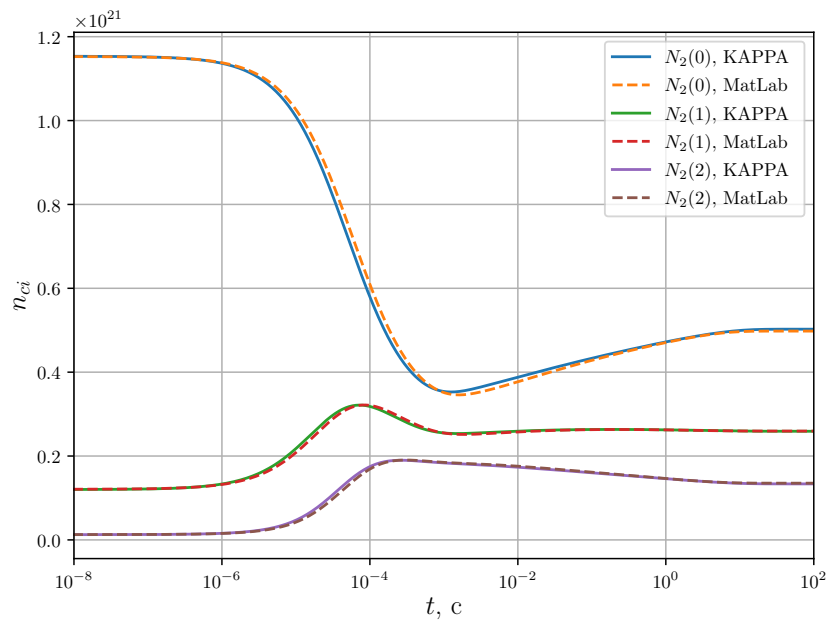


Рис. 5. Изменение заселенностей верхних уровней,
 N_2/N , $T_0 = 15000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 1500$ К

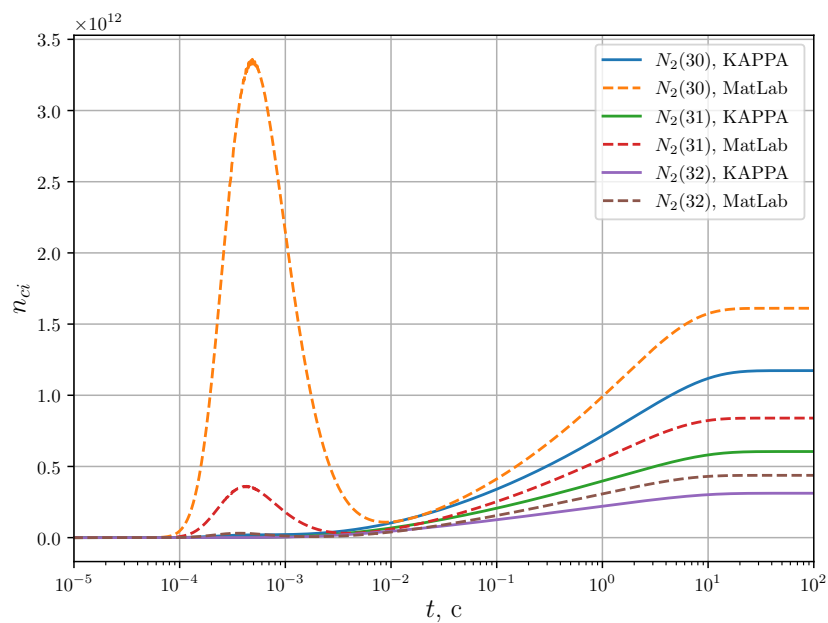


Рис. 6. Изменение концентраций атомарных компонентов,
 N_2/N , $T_0 = 15000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 1500$ К

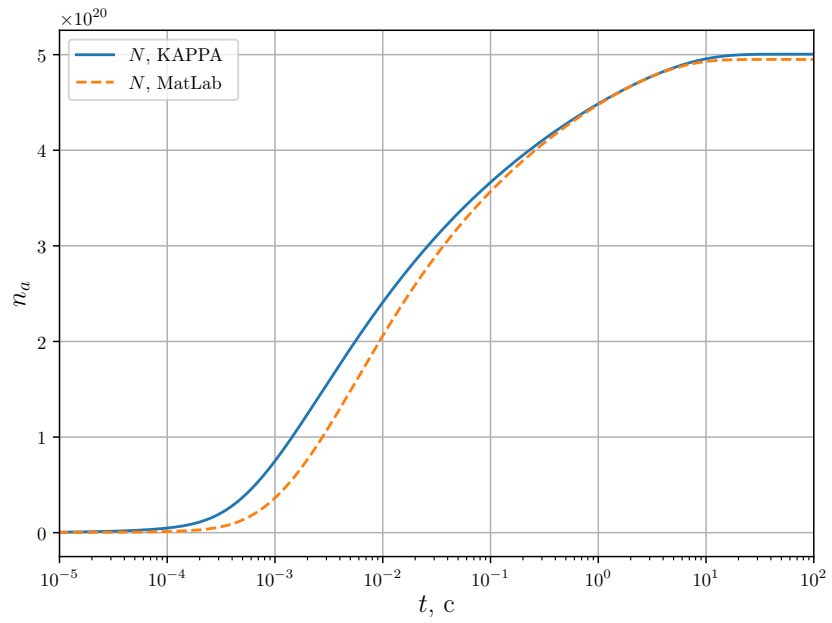


Рис. 7. Изменение температуры газа,
 N_2/N , $T_0 = 15000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 1500$ К

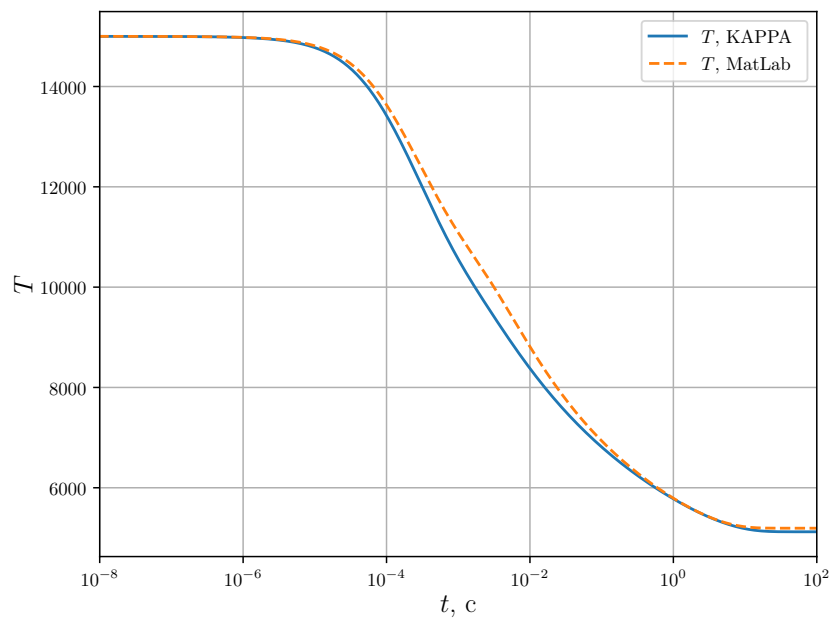


Рис. 8. Изменение заселенностей нижних уровней,
 N_2/N , $T_0 = 6000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 10000$ К

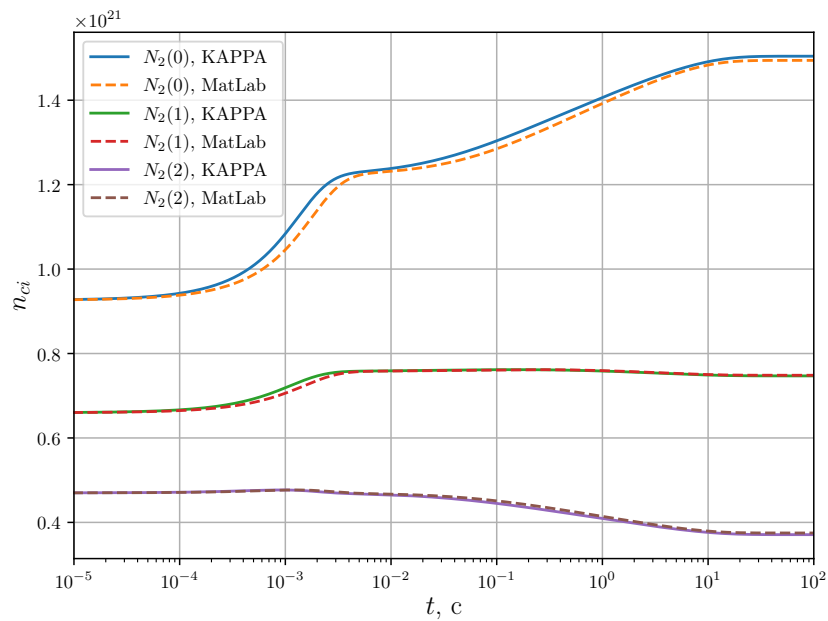


Рис. 9. Изменение заселенностей верхних уровней,
 N_2/N , $T_0 = 6000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 10000$ К

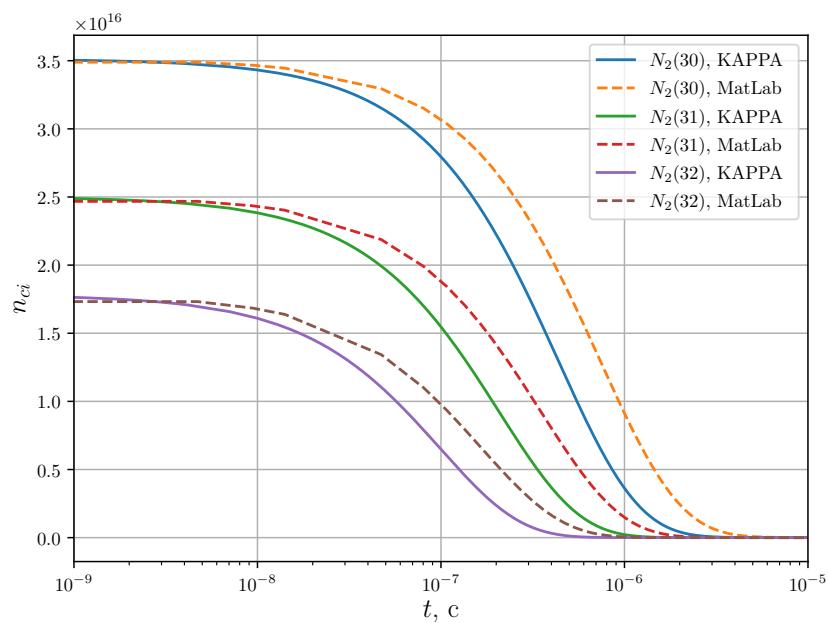


Рис. 10. Изменение концентраций атомарных компонентов,
 N_2/N , $T_0 = 6000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 10000$ К

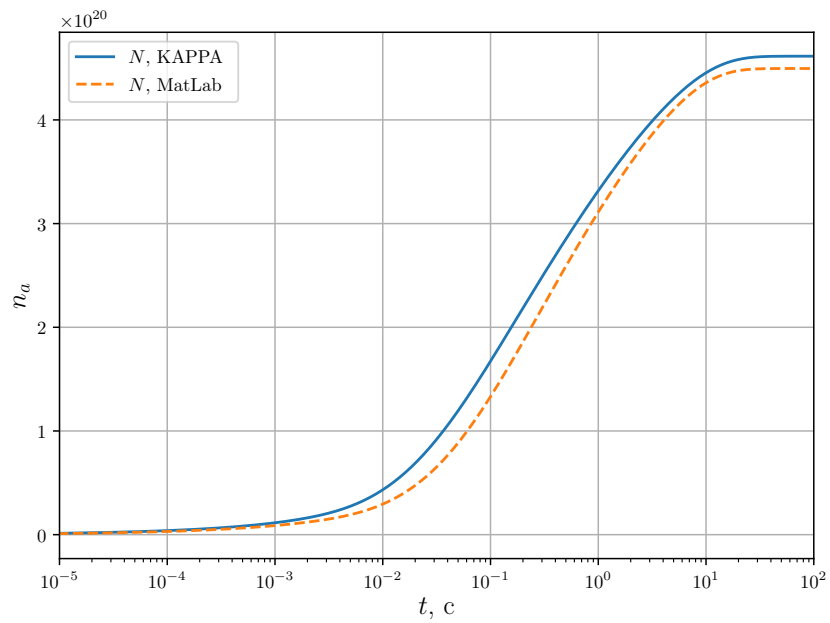


Рис. 11. Изменение температуры газа,
 N_2/N , $T_0 = 6000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 10000$ К

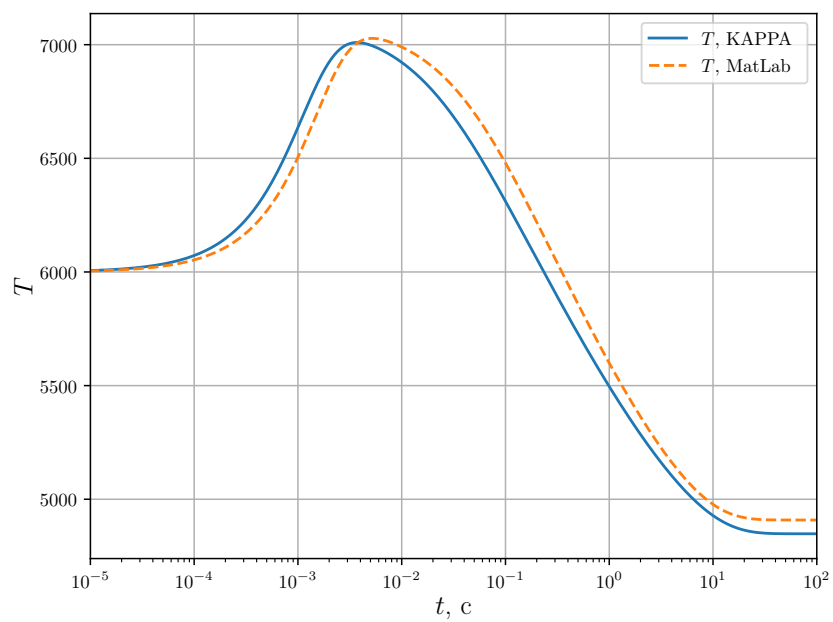


Рис. 12. Изменение заселенностей нижних уровней,
 $O_2/O, T_0 = 12000 \text{ К}, T_{\text{vibr}}^{(0)} = 1200 \text{ К}$

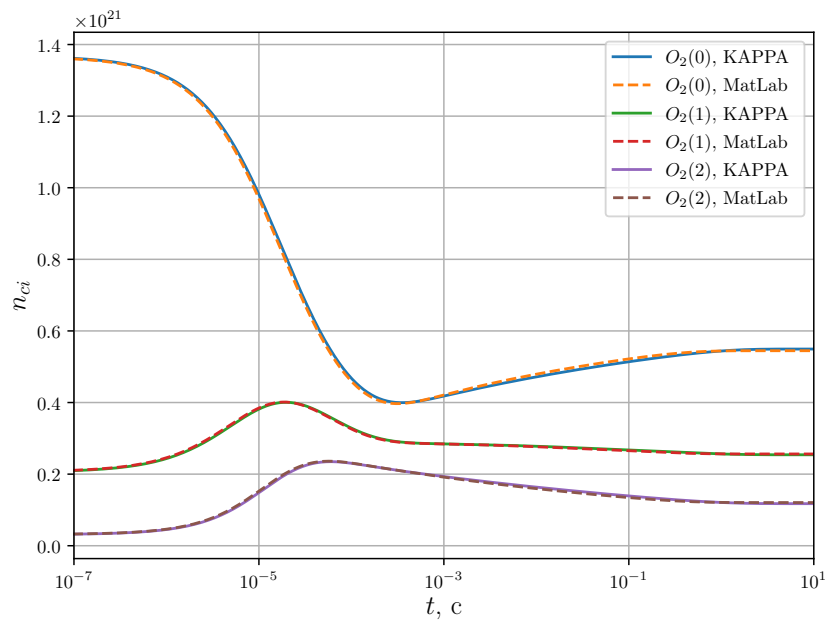


Рис. 13. Изменение заселенностей верхних уровней,
 $O_2/O, T_0 = 12000 \text{ К}, T_{\text{vibr}}^{(0)} = 1200 \text{ К}$

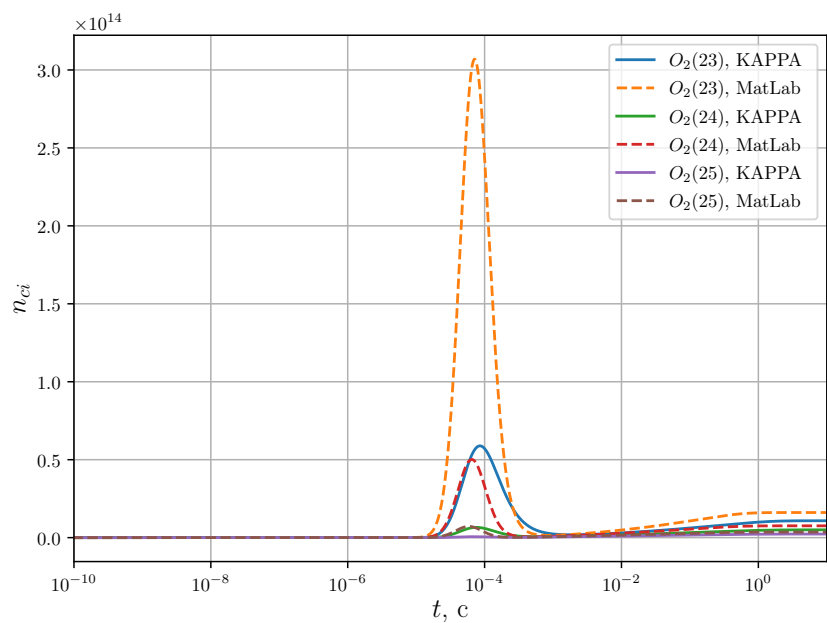


Рис. 14. Изменение концентраций атомарных компонентов,
 $O_2/O, T_0 = 12000 \text{ K}, T_{\text{vibr}}^{(0)} = 1200 \text{ K}$

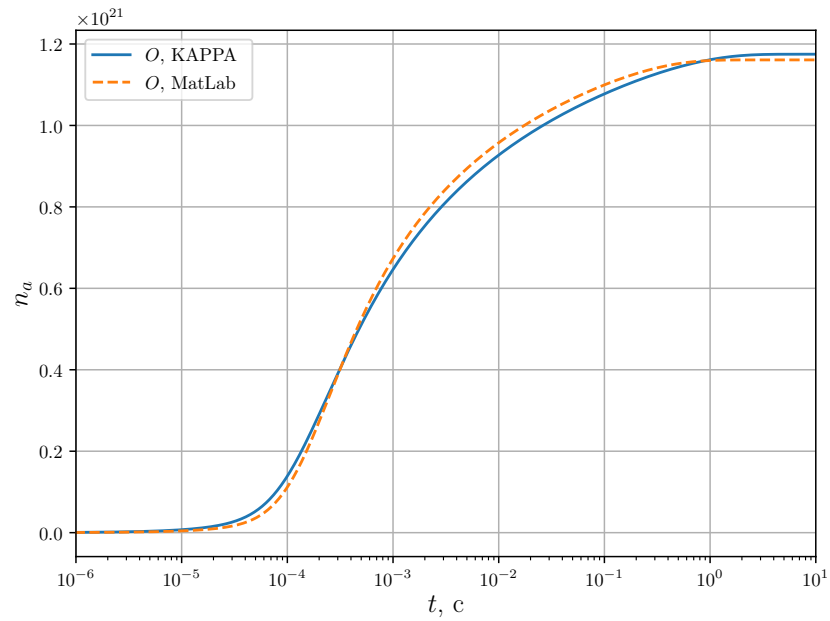


Рис. 15. Изменение температуры газа,
 $O_2/O, T_0 = 12000 \text{ K}, T_{\text{vibr}}^{(0)} = 1200 \text{ K}$

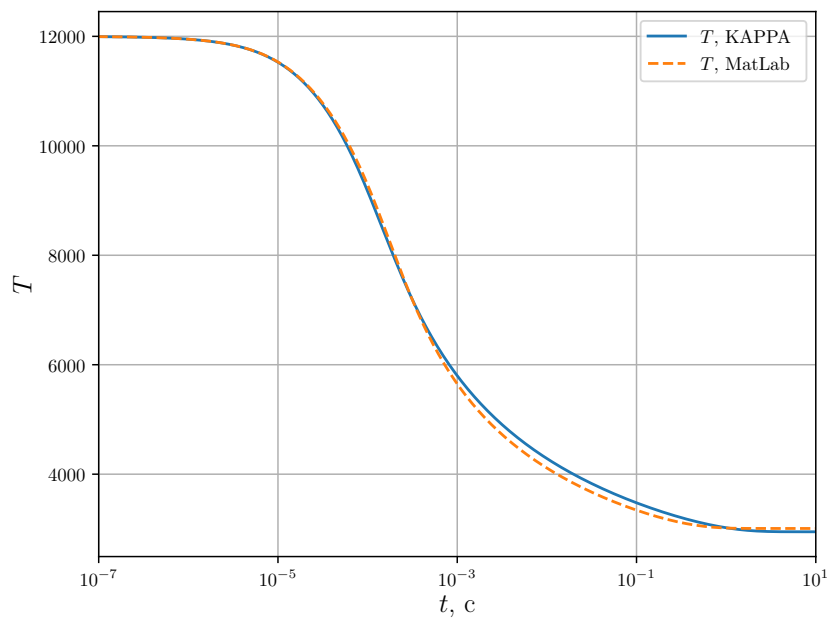


Рис. 16. Изменение заселенностей нижних уровней,
 $O_2/O, T_0 = 11000 \text{ K}, T_{\text{vibr}}^{(0)} = 9000 \text{ K}$

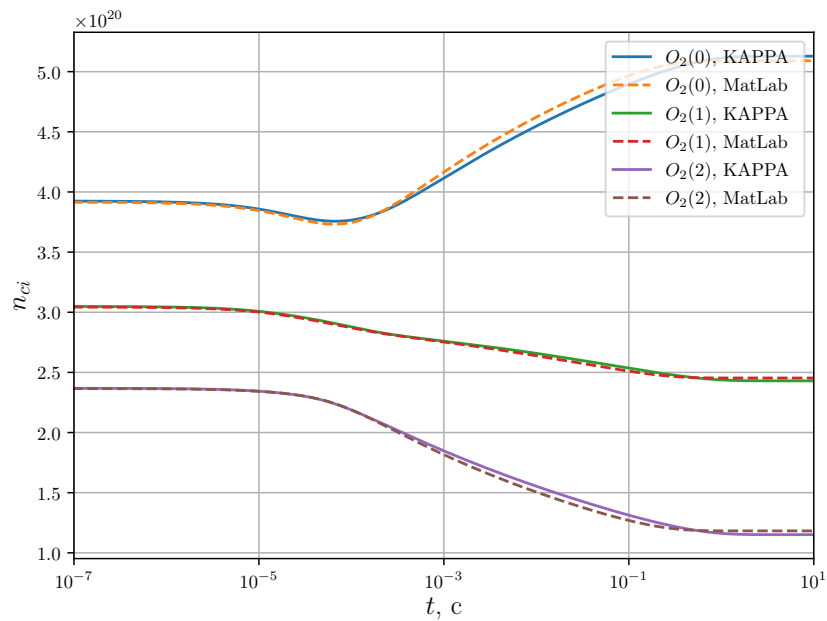


Рис. 17. Изменение заселенностей верхних уровней,
 $O_2/O, T_0 = 11000 \text{ K}, T_{\text{vibr}}^{(0)} = 9000 \text{ K}$

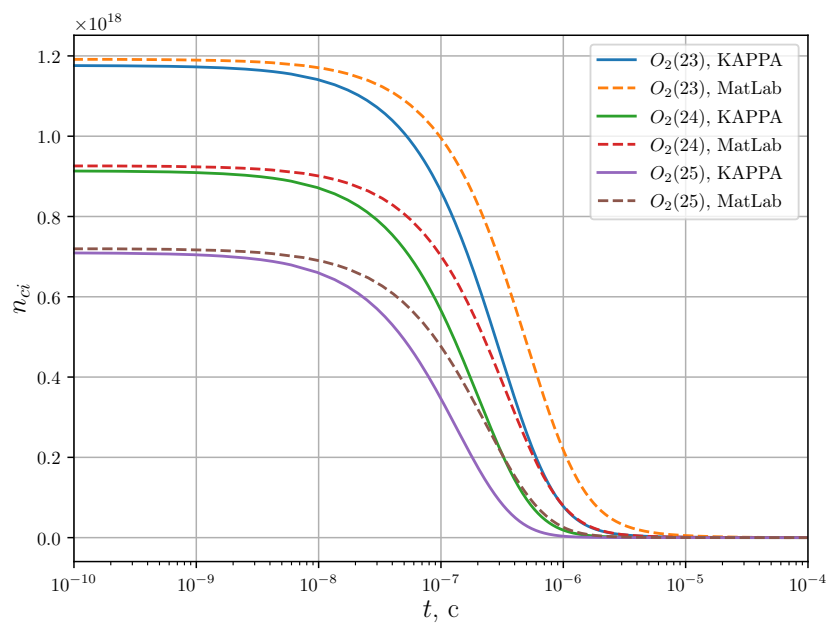


Рис. 18. Изменение концентраций атомарных компонентов,
 O_2/O , $T_0 = 11000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 9000$ К

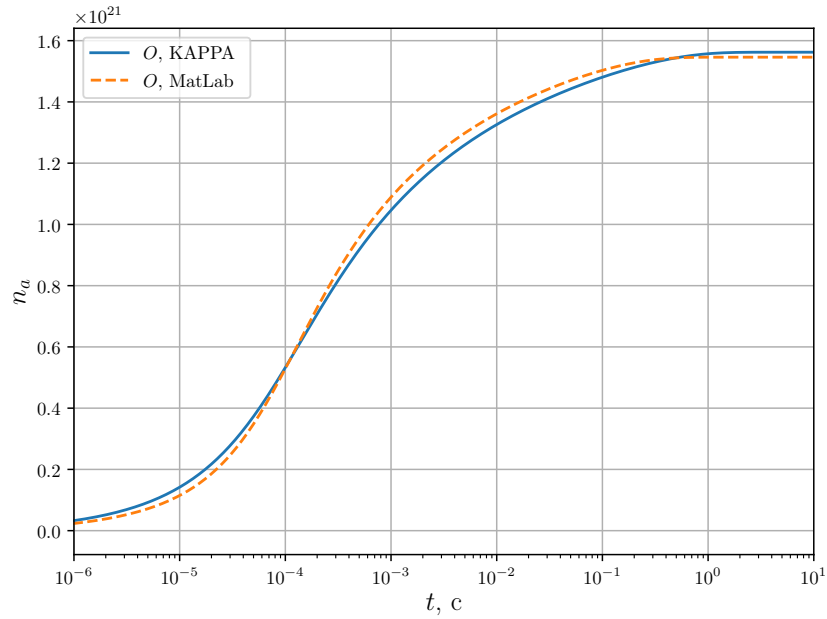
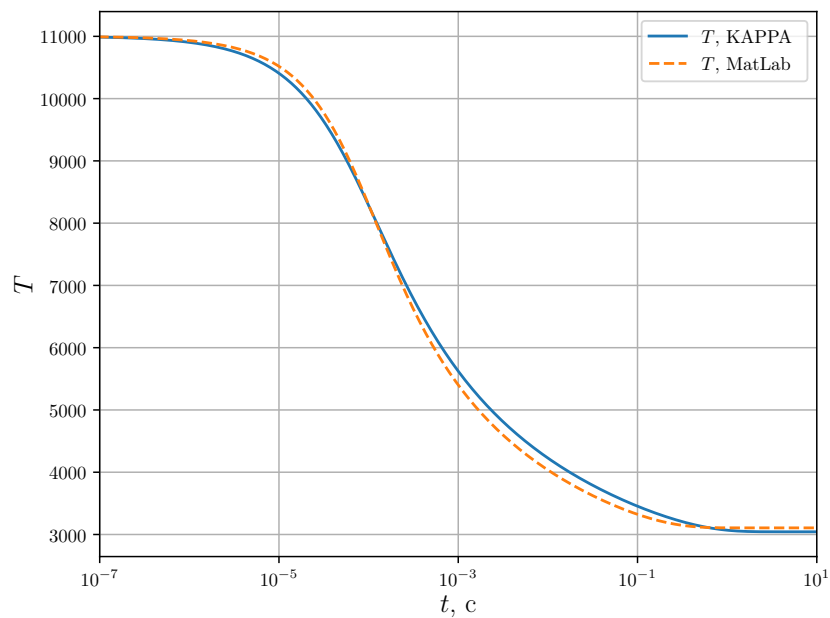


Рис. 19. Изменение температуры газа,
 O_2/O , $T_0 = 11000$ К, $T_{\text{vibr}}^{(0)} = 9000$ К



Анализ графиков показывает, что для большинства начальных условий, для температур, концентраций и заселенностей нижних уровней получается хорошее совпадение с решением, реализованным на MatLab. Однако

в значениях заселенностей верхних уровней имеются некоторые расхождения, см. Рис. 5 и 13. Это может быть обусловлено тем, что решение, реализованное в MatLab, использует безразмерные заселенности, которые являются очень малыми величинами.

Для проверки достоверности сравним относительные невязки по плотности и полной энергии полученной смеси:

$$d_1 = \frac{|\rho - \rho_0|}{\rho_0} \quad d_2 = \frac{|E - E_0|}{E_0} \quad (10)$$

Кроме того, сравним время выполнения алгоритмов.

Таблица 1. Сравнение работы алгоритмов

Смесь	T_0 , К	$T_{\text{vibr}}^{(0)}$, К	d_1 , КАРРА	d_2 , КАРРА	Время, КАРРА	d_1 , MatLab	d_2 , MatLab	Время, MatLab
N_2/N	15000	1500	3.79e-14	5.025e-10	8.6	1.426e-9	3.095-e9	7.32
N_2/N	11000	9000	1.925e-14	4.909e-10	5.74	1.433e-10	7.431e-9	5.58
N_2/N	6000	10000	2.082e-14	1.454e-10	9.36	3.875e-10	8.587e-9	8.13
O_2/O	12000	1200	1.393e-13	4.7e-10	7.48	3.075e-10	9.349e-9	7.12
O_2/O	11000	9000	6.437e-13	4.128e-10	12.34	2.936e-10	2.851e-8	6.92

В таблице 1 можно видеть, что написанный программный модуль немного уступает по скорости выполнения, но имеет существенно меньшую невязку. Таким образом, модуль может быть рекомендован для решения системы уравнений поуровневой кинетики с использованием библиотеки КАРРА.

6 Заключение

В ходе работы было разработано программное обеспечение, позволяющее решать уравнения неравновесной газодинамики с использованием функционала библиотеки KAPPA для расчета коэффициентов скорости физико-химических процессов в детальном поуровневом приближении.

Проверка работы программного модуля на модельной задаче показала достоверные результаты в сравнении с уже известными алгоритмами.

При этом созданное программное обеспечение имеет графический интерфейс, ввиду чего его можно использовать, например, в учебных целях для предоставления наглядных расчетов.

Список литературы

- [1] *Кустова Е. В., Нагнибеда Е. А.* Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов // СПб.: Изд-во С.-Петербургского государственного университета, 2003. 272 с.
- [2] *Кустова Е. В., Нагнибеда Е. А.* Поуровневое описание течений газа с сильной колебательной и химической неравновесностью // Мат. моделирование. 1999. Т. 11 № 2. С. 89–104.
- [3] *Campoli L., Oblapenko G. P., Kustova E. V.* Kappa: Kinetic approach to physical processes in atmospheres library in C++ // J. Computer Physics Communications. 2019. Vol. 236. P. 244–267.
- [4] Kinetic Approach to Physical Processes in Atmospheres
URL <https://github.com/lkampoli/kappa>
- [5] *Chapman S.* On the kinetic theory of gas. II: A composite monoatomic gas, diffusion, viscosity, and thermal conduction // Philos. Trans. Roy. Soc. London. 1917. Vol. 217. P. 118–192.
- [6] *Enskog D.* Kinetische Theorie der Vorgänge in mässigverdünnten Gasen. Diss. Uppsala. 1917.
- [7] *Schwartz R. N., Slawsky Z. I., Herzfeld K. F.* Calculation of Vibrational Relaxation Times in Gases // J. Chem. Phys. 1952. Vol. 20 P. 1591–1599.
- [8] *Adamovich I. V., Macheret S. O., Rich J. W., Treanor C. E.* Vibrational energy transfer rates using a forced harmonic oscillator model // J. Thermophys. Heat Transfer. Vol. 12. N 1. 1998. P. 57–65.
- [9] *Marrone P. V., Treanor C. E.* Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. N 9 P. 1215–1221.

- [10] *Byrne G. D., Hindmarsh A. C.* A Polyalgorithm for the Numerical Solution of Ordinary Differential Equations // J. ACM Trans. Math. Softw. Vol. 1. N 1. 1975. P. 71–96