

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

О. И. Додулад, Ю. Ю. Клосс, А. П. Потапов, Ф. Г. Черемисин, П. В. Шувалов,
Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического
уравнения Больцмана консервативным проекционным методом, *Ж. вычисл.
матем. и матем. физ.*, 2016, том 56, номер 6, 1008–1024

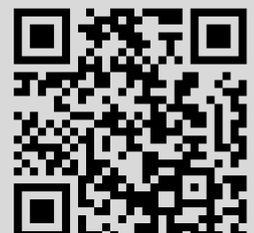
DOI: 10.7868/S0044466916060119

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали
и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.145.180.189

7 ноября 2024 г., 14:24:45



УДК 519.634

Светлой памяти О.М. Белоцерковского посвящается

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА КОНСЕРВАТИВНЫМ ПРОЕКЦИОННЫМ МЕТОДОМ¹⁾

© 2016 г. О. И. Додулад^{*,**}, Ю. Ю. Клосс^{*,**}, А. П. Потапов^{***},
Ф. Г. Черемисин^{*,****}, П. В. Шувалов^{*,**}

(*141700 М.о., Долгопрудный, Институтский пер., 9, МФТИ;

**123098 Москва, пл. Акад. Курчатова, 1, “Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”;

***127566 Москва, Алтуфьевское ш., 44, ООО “Параллелз Рисерч”;

****119333 Москва, ул. Вавилова, 40, Федеральный исследовательский центр “Информатика и управление”)

e-mail: dodulad@list.ru; kl@lokip.ru; anton.palich@gmail.com; tcherem@ccas.ru; shuvalov.pavel@gmail.com

Поступила в редакцию 09.11.2015 г.

Расчет течений простого разреженного газа и газовых смесей осуществляется на основе кинетического уравнения Больцмана. Для его решения применяются различные варианты консервативного проекционного метода: двухточечный метод для простого газа и смесей газов с небольшой разницей молекулярных масс, и многоточечный метод при значительной разнице масс. Приводятся примеры расчета стационарных и нестационарных течений в широком диапазоне чисел Маха и Кнудсена. Библ. 29. Фиг. 19.

Ключевые слова: разреженный газ, смесь газов, уравнение Больцмана, консервативный проекционный метод, численное моделирование.

DOI: 10.7868/S0044466916060119

ВВЕДЕНИЕ

Среди научных интересов Олега Михайловича Белоцерковского существенное место занимает динамика разреженного газа. Он принимал участие в качестве руководителя советской делегации на ряде международных конференций по данной тематике, был организатором издания трудов 13 Международного симпозиума по динамике разреженного газа в Новосибирске. Под его научным руководством В.Е. Яницким был разработан метод статистического моделирования течений разреженного газа (см. [1]), основанный на кинетическом уравнении Леонтовича для системы взаимодействующих частиц. Этот метод позволил рассчитывать течения разреженного газа с использованием небольшого числа моделирующих частиц, что было особенно важно ввиду крайне ограниченной памяти отечественных машин того времени (БЭСМ-6). Метод применяется и в настоящее время как альтернатива популярному методу “Прямого статистического моделирования” (DSMC) Берда.

Несмотря на свою приверженность статистическим методам, Олег Михайлович проявлял интерес и к проблеме численного решения кинетического уравнения Больцмана. Это направление было начато в работах американских ученых Нордсика, Хикса и Йена (см. [2]), а в Вычислительном Центре АН СССР развивалось сначала Ф.Г. Черемисиним, а затем им же совместно с В.В. Аристовым. Основная трудность решения уравнения Больцмана заключалась в обеспечении консервативности вычисления интеграла столкновений по массе, импульсу и энергии. Считалось, что точно это требование не может быть удовлетворено ввиду необходимости интерполяции значений функции распределения для “обратных столкновений”, скорости которых не попадают в узлы сетки. Американской группой применялась консервативная коррекция

¹⁾Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 15-08-00990, 15-07-02025, 16-38-60132, 15-37-70017, 16-01-00489А).

вычисленных значений интеграла столкновений, а сотрудниками ВЦ РАН – коррекция вычисленных значений функции распределения после этапа релаксации в схеме расщепления (см. [3]). Коррекция стабилизировала алгоритм вычислений и снижала требования к вычислительным ресурсам, но вносила дополнительную погрешность в решение. В методах статистического моделирования законы сохранения выполнялись с точностью расчета бинарного столкновения, а “обратных столкновений” и необходимости интерполяции не было. Возникла идея при вычислении интеграла столкновений отказаться от “обратных столкновений” и от интерполяции, заменив ее проецированием вкладов от столкновений в узлы сетки. На равномерной скоростной сетке оказалось возможным использовать свойства симметрии столкновений и построить консервативный проекционный метод, применимый как для простого газа, так и для смеси газов, а также для газа с внутренними степенями свободы (см. [4], [5]). Этот вариант консервативного метода позволил вести устойчивый счет на грубых скоростных сетках и при небольшой мощности кубатурной сетки, но решения содержали случайные флуктуации, характерные для методов статистического моделирования. В [6], [7] был найден способ консервативным образом включить в проекционный метод “обратные столкновения”, а также предложена интерполяция, обеспечивающая точное равенство нулю интеграла столкновений от равновесной максвелловской функции. В результате вычислительная эффективность метода значительно повысилась.

При расчете газовых смесей требуется перейти от равномерной сетки в пространстве скоростей к общей для компонент равномерной сетке в пространстве импульсов. При небольшой разнице молекулярных масс компонент смеси такая замена не создает трудностей (см. [8]), но при значительной разнице масс требование одинакового шага приводит к резкому увеличению числа узлов сетки для тяжелой компоненты и соответствующему увеличению вычислительных затрат. Преодолеть указанную трудность позволяет новый вариант консервативного проекционного метода – многоточный проекционный метод (см. [9]). В статье будут объяснены особенности различных вариантов консервативного проекционного метода, приведены основные определяющие эти методы формулы и показаны примеры расчетов течений различной степени сложности. Мы ограничимся нейтральными газами и газовыми смесями и классическим уравнением Больцмана. Консервативный проекционный метод для обобщенного уравнения Больцмана, описывающего газы с внутренними степенями свободы (см. [10], [11]), не рассматривается.

1. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Запишем уравнение Больцмана в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f = I[f].$$

Для его решения в [12] была предложена схема расщепления. Простейшая схема расщепления имеет первый порядок точности по Δt . Пусть функция распределения (ФР) f_0 известна в момент времени t_0 , необходимо получить ФР в момент времени $t_0 + \Delta t$, которая равна $f_{\Delta t}$. Тогда первый шаг – решить уравнение переноса, т.е. получить $\tilde{f} = \mathcal{C}_{\Delta t}(f_0)$ из уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f = 0, \quad f(t_0, \mathbf{x}, \xi) = f_0(\mathbf{x}, \xi). \quad (1)$$

Второй шаг – вычислить действие оператора $I[f]$ на \tilde{f} , т.е. найти $f_{\Delta t} = \mathcal{T}_{\Delta t}(\tilde{f})$,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = I[f], \quad f(t_0, \mathbf{x}, \xi) = \tilde{f}(\mathbf{x}, \xi).$$

Общая схема решения: $f_{\Delta t} = \mathcal{T}_{\Delta t}(\mathcal{C}_{\Delta t}(f_0))$. Важно заметить, что оператор однородной релаксации $\mathcal{C}_{\Delta t}$ действует только в пространстве ξ при заданном \mathbf{x} , а оператор переноса $\mathcal{T}_{\Delta t}$ действует в пространстве \mathbf{x} при заданном ξ . Это обстоятельство позволяет создать эффективные численные алгоритмы для каждого шага. В приводимых ниже расчетах используется симметричная схема, имеющая второй порядок точности (см. [13])

$$f_{\Delta t} = \mathcal{T}_{\Delta t/2}(\mathcal{C}_{\Delta t}(\mathcal{T}_{\Delta t/2}(f_0))).$$

Рассмотрим вопрос построения численных схем аппроксимации уравнения адвекции (1). При анализе сложных устройств часто расчетная область не может быть заполнена прямоугольной сеткой. В таких случаях применяются неструктурированные сетки.

На неструктурированной сетке уравнение адвекции аппроксимируется уравнением

$$\frac{f_i^{j+1} + f_i^j}{\tau} + \sum \frac{(\xi, S_k)}{V_i} f_{i_k}' = 0,$$

где суммирование ведется по всем тетраэдрам i_k , граничащим с i -м тетраэдром, S_k – направляющий вектор площади i_k -й грани.

Значения f_{i_k}' – определяются в зависимости от порядка схемы. Для схемы первого порядка они имеют вид

$$f_{i_k}' = \begin{cases} f_i, & (\xi, S_k) > 0, \\ f_{i_k}, & (\xi, S_k) < 0. \end{cases}$$

Для совмещения монотонности с аппроксимацией второго порядка используются TVD-схемы, для которых не убывает так называемая полная вариация функции распределения. Подробнее построение TVD-схем на неструктурированных сетках дано в [14].

Перейдем к рассмотрению проекционного метода вычисления интеграла столкновений Больцмана (см. [4]):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = I[f] = \int (f_1' f' - f_1 f) g b d b d \epsilon d^3 \xi_1.$$

В скоростном пространстве выбирается область Ω объема V , в которой строится сетка из равноотстоящих скоростных узлов $\Xi = \{\xi_\gamma\}$, $\gamma = 1, \dots, N$. В качестве области в большинстве задач можно выбрать шар такого радиуса, что функция распределения вне шара пренебрежимо мала.

На построенной сетке функция распределения и интеграл столкновений представляются в базисе δ -функций в виде

$$f(\xi) = \frac{V}{N} \sum_{\gamma=1}^N f_\gamma \delta(\xi - \xi_\gamma), \quad I[f](\xi) = \frac{V}{N} \sum_{\gamma=1}^N f_\gamma \delta(-\xi_\gamma).$$

Дальнейшая задача – получить дискретные значения интеграла столкновений, удовлетворяющие следующим свойствам:

$$\bar{\phi}(\xi_\gamma) = (1, \xi_\gamma, \xi_\gamma^2), \quad \sum_{\gamma=1}^N f_\gamma \bar{\phi}(\xi_\gamma) = \bar{0}, \quad \sum_{\gamma=1}^N f_\gamma \log f_\gamma \leq 0.$$

Свойство симметрии позволяет преобразовать интеграл столкновений к виду

$$I_\gamma = \frac{1}{4} \int \varphi(\xi_\gamma) (f_1' f' - f_1 f) g b d b d \epsilon d^3 \xi_1,$$

где $\varphi(\xi_\gamma) = \delta(\xi - \xi_\gamma) + \delta(\xi_1 - \xi_\gamma) - \delta(\xi' - \xi_\gamma) - \delta(\xi_1' - \xi_\gamma)$.

Для вычисления симметризованного интеграла столкновений используется равномерная кубатурная сетка Коробова (см. [15]) из узлов в пространстве $\{\xi_{\alpha_\nu}, \xi_{\beta_\nu}, b_\nu, \epsilon_\nu\}$, $\nu = 1, \dots, N_\nu$, узлы ξ_{α_ν} , ξ_{β_ν} совпадают с узлами скоростной сетки. Скорости после столкновения ξ' , ξ_1' определяются по прицельному расстоянию b , углу наклона плоскости столкновения ϵ и потенциала взаимодействия молекул $U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|)$.

Поскольку скорости после столкновения ξ' , ξ_1' не попадают в узлы сетки, две последние δ -функции в проекторе заменяются на комбинацию проекторов в две пары ближайших, соответственно, к ξ' и ξ_1' узлов $(\xi_{\lambda_\nu}, \xi_{\lambda_\nu+s})$ и $(\xi_{\mu_\nu}, \xi_{\mu_\nu-s})$, где s – трехмерный вектор смещения в соседний узел сетки, компоненты которого могут принимать значения, равные 0, 1, -1:

$$\begin{aligned} \delta(\xi' - \xi_\gamma) &= (1 - r) \delta(\xi_{\lambda_\nu} - \xi_\gamma) + r \delta(\xi_{\lambda_\nu+s} - \xi_\gamma), \\ \delta(\xi_1' - \xi_\gamma) &= (1 - r) \delta(\xi_{\mu_\nu} - \xi_\gamma) + r \delta(\xi_{\mu_\nu-s} - \xi_\gamma). \end{aligned}$$

Такая замена означает, что вклады в интеграл столкновений в не узловых точках ξ' и ξ'' распределяются между парами ближайших сеточных узлов. Коэффициент r находится из условия сохранения энергии: $\xi_\alpha^2 + \xi_\beta^2 = (1-r)(\xi_\lambda^2 + \xi_\mu^2) + r(\xi_{\lambda+s}^2 + \xi_{\mu-s}^2)$.

Законы сохранения массы и импульса на равномерной сетке выполняются автоматически.

Формула для вычисления интеграла столкновений приобретает вид

$$I_\gamma = B \sum_{v=1}^{N_v} (-\delta_{\gamma,\alpha_v} + \delta_{\gamma,\beta_v}) + (1-r_v)(\delta_{\gamma,\lambda_{\mu v}} + \delta_{\gamma,\mu_v}) + r_v(\delta_{\gamma,\lambda_{v+s}} + \delta_{\gamma,\mu_{v-s}}) \Delta_v,$$

$$\delta_{\alpha,\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta, \\ 0, & \alpha \neq \beta, \end{cases}$$

есть символ Кронекера, $\Delta_v = (f'_1 f' - f_{\alpha_v} f_{\beta_v}) | \xi_{\alpha_v} - \xi_{\beta_v} |$.

Для вычисления $f'_1 f'$ могут быть использованы различные виды интерполяции. Наиболее предпочтительной является степенная интерполяция, обеспечивающая точное равенство нулю интеграла столкновения для равновесной максвелловской функции распределения

$$f'_1 f' = (f_\lambda f_\mu)^{1-r} (f_{\lambda+s} f_{\mu-s})^r.$$

Для интегрирования уравнения релаксации используется схема, имеющая правильную асимптотику при $t \rightarrow \infty$. Запишем уравнение в интегральном виде и введем промежуточные значения времени $t_v = t_0 + \tau v / N_1$ и промежуточные значения $f^{\gamma,v}$, где $f^{\gamma,v} \Big|_{v=0} = f^{\gamma,0}$, $f^{\gamma,v} \Big|_{v=N_1}$ – функции распределения в моменты времени t_0 и $t_0 + \tau$, соответственно. Тогда

$$f^{\gamma,N_1} = f^{\gamma,0} + \int_{t_0}^{t_0+\tau} I^\gamma dt = f^{\gamma,0} + \sum_{v=1}^{N_1} \int_{t_0+\tau(v-1)/N_1}^{t_0+\tau v/N_1} I^\gamma dt = f^{\gamma,0} + \tau \sum_{v=1}^{N_1} B \Delta_v^\gamma g_v g_v,$$

что переписывается в виде следующей схемы “непрерывного счета”

$$\begin{aligned} f^{\alpha,v} &= f^{\alpha,v-1} - \tau B \Delta_v g_v, & f^{\beta,v} &= f^{\beta,v-1} - \tau B \Delta_v g_v, \\ f^{\lambda,v} &= f^{\lambda,v-1} + (1-r) \tau B \Delta_v g_v, & f^{\mu,v} &= f^{\mu,v-1} + (1-r) \tau B \Delta_v g_v, \\ f^{\lambda_v+s,v} &= f^{\lambda_v+s,v-1} + \tau B \Delta_v g_v, & f^{\mu_v-s,v} &= f^{\mu_v-s,v-1} + r \tau B \Delta_v g_v. \end{aligned}$$

Эта схема позволяет контролировать неотрицательность функции распределения.

Для смеси газов уравнение Больцмана имеет вид

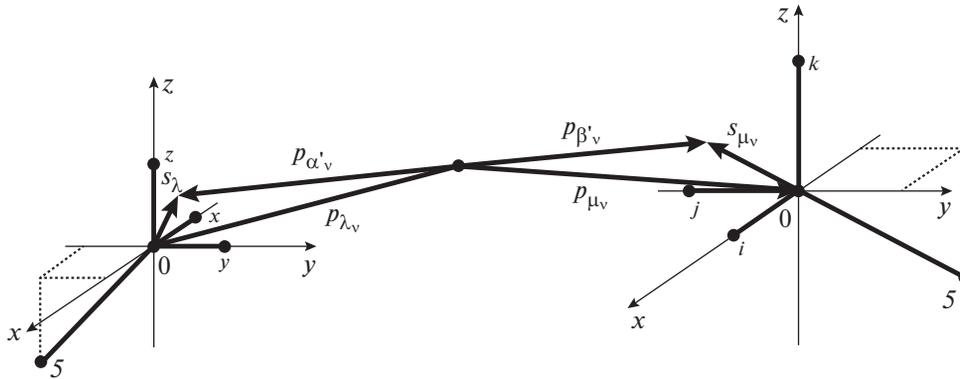
$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m_i} \cdot \nabla f_i = \sum_j \int \left(f_j(\mathbf{p}') f_i(\mathbf{p}') - f_j(\mathbf{p}) f_i(\mathbf{p}) \right) \left| \frac{\mathbf{p}}{m_i} - \frac{\mathbf{p}_1}{m_j} \right| \sigma(\theta, g) d^2 \mathbf{n} d^3 \mathbf{p}_1,$$

где f_i – функция распределения по импульсам молекул i -го сорта, $i = 1, \dots, N$.

Описанный выше проекционный метод применим и для вычисления интеграла столкновений для смеси газа. Единственным требованием для обеспечения консервативности является то, что необходимо перейти от функции распределения по скоростям к функции распределения по импульсам и сеточные шаги в импульсном пространстве для каждой из компонент смеси газов должны быть равны $\Delta \mathbf{p}_i = \Delta \mathbf{p}$, $i = 1, \dots, N$.

Такой подход хорошо работает при умеренном отношении молекулярных масс компонент смеси [15], но равенство шагов в импульсных сетках приводит к увеличению числа узлов в сетках тяжелых компонент смеси согласно зависимости $N_i \sim (m_i/m_{\min})^{3/2}$.

Для устранения данного недостатка был разработан метод, применимый в случае импульсных сеток с равномерным, но различным для каждой компоненты шагом $\Delta \mathbf{p}_i$. Проецирование вкладов в таком методе происходит независимо для каждой компоненты смеси.



Фиг. 1. Шаблон проецирования.

После представления функции распределения и интеграла столкновений в базисе δ -функций, приведения интеграла столкновений к симметричному виду и применения кубатурной сетки Коробова $\{\mathbf{p}_{\alpha_v}, \mathbf{p}_{\beta_v}, \mathbf{n}_v\}$, выражение для вычисления интеграла столкновений приобретает вид

$$I_i(\mathbf{p}_\gamma) = \sum_{j=1}^N \sum_{v=1}^{N_v} B_v \left(\delta(\mathbf{p}'_i - \mathbf{p}_\gamma) + \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_\gamma) - \delta(\mathbf{p}_{\beta_v} - \mathbf{p}_\gamma) - \delta(\mathbf{p}_{\alpha_v} - \mathbf{p}_\gamma) \right) \times \left(f_j(\mathbf{p}'_i) f_i(\mathbf{p}') - f_i(\mathbf{p}_{\alpha_v}) f_j(\mathbf{p}_{\beta_v}) \right) \left| \frac{\mathbf{p}_{\alpha_v}}{m_i} - \frac{\mathbf{p}_{\beta_v}}{m_j} \right|, \tag{2}$$

где $\delta(\mathbf{p}_{\alpha_v} - \mathbf{p}_\gamma) = \delta_{\alpha_v, \gamma}$, $\delta(\mathbf{p}_{\beta_v} - \mathbf{p}_\gamma) = \delta_{\beta_v, \gamma}$ – символы Кронекера, $f_i(\mathbf{p}_{\alpha_v}) = f_{i, \alpha_v}$, $f_i(\mathbf{p}_{\beta_v}) = f_{i, \beta_v}$ – значения сеточной функции распределения. Так же как и в случае простого газа, следующие величины требуют определения с помощью процедуры проецирования:

$$\delta(\mathbf{p}_{\alpha_v} - \mathbf{p}_\gamma), \quad \delta(\mathbf{p}_{\beta_v} - \mathbf{p}_\gamma), \quad f_i(\mathbf{p}'), \quad f_j(\mathbf{p}'_i). \tag{3}$$

Для обеспечения сохранения массы, трех компонент импульса и энергии минимальное количество узлов проецирования равно пяти. Используемый шаблон $\Lambda_5 = \{0, i, j, k, 5\}$ проецирования показан на фиг. 1, где $s_{\lambda_v} = (\mathbf{p}_{\lambda_v} - \mathbf{p}') / \Delta p$, $s_{\mu_v} = (\mathbf{p}_{\mu_v} - \mathbf{p}'_i) / \Delta p$, а $\mathbf{p}_{\lambda_v}, \mathbf{p}_{\mu_v}$ – ближайшие к $\mathbf{p}', \mathbf{p}'_i$ импульсы на сетке. Все пять узлов проецирования не могут быть выбраны из вершин куба, в котором лежит импульс \mathbf{p}_{α_v} , так как в таком случае получится несовместная система алгебраических уравнений для коэффициентов проецирования. Коэффициенты проецирования, определяющие представление δ -функций в виде

$$\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_\gamma) = \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda, a} \delta_{\lambda_v + s_a, \gamma} \tag{4}$$

(s_a – вектор смещения a -го узла шаблона) равны

$$r_{\lambda, 0} = 1 - \frac{1}{3} p - \frac{2}{3} q, \quad r_{\lambda, 5} = -\frac{1}{6} (p - q),$$

$$r_{\lambda, i} = |s_{\lambda x}| + r_{\lambda, 5}, \quad r_{\lambda, j} = |s_{\lambda y}| + r_{\lambda, 5}, \quad r_{\lambda, k} = |s_{\lambda x}| + r_{\lambda, 5},$$

$$p = |s_{\lambda x}| + |s_{\lambda y}| + |s_{\lambda z}|, \quad q = s_{\lambda x}^2 + s_{\lambda y}^2 + s_{\lambda z}^2.$$

Непосредственной подстановкой коэффициентов вкладов в приведенные ниже выражения можно убедиться в том, что приведенная схема обладает свойством консервативности

$$\sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda, a} = 1, \quad \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda, a} \mathbf{p}_{\lambda + s_a} = \mathbf{p}', \quad \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda, a} \mathbf{p}_{\lambda + s_a}^2 = (\mathbf{p}')^2,$$

где s_a – вектор смещения a -го узла шаблона.

Возможно построение шаблонов на большем числе соседних узлов, дополнительно сохраняющих при проецировании тензор потока импульса и вектор потока энергии (см. [9]).

Значения функций распределения $f_i(\mathbf{p}')$ и $f_j(\mathbf{p}')$ находятся путем интерполяции функции распределения. Применяется интерполяция, являющаяся аналогом степенной интерполяции и обладающая тем же свойством равенства нулю интеграла столкновений от максвелловской функции

$$f_j(\mathbf{p}') = \prod_{a \in \Lambda} f_i(\mathbf{p}_{\lambda+s_a})^{\lambda_{i,a}}. \tag{5}$$

Окончательно, формула вычисления интеграла столкновений имеет вид (2), где выражения (3) вычисляются по формулам (4) и (5).

Так же как и оригинальный проекционный метод (см. [4]), многоточечный консервативный метод допускает возможную оптимизацию вычисления интеграла столкновений при наличии цилиндрической симметрии в пространстве скоростей (импульсов). Подробное описание различных модификаций многоточечного метода дано в [9].

На основе описанного метода решения уравнения Больцмана разработана и продолжает развиваться авторами проблемно-моделирующая среда (ПМС), более подробно представленная в [15], [16]. ПМС позволяет эффективно решать широкий класс задач динамики разреженных газов, в том числе с высокой точностью моделировать и анализировать медленные течения газа в микро- и наноструктурах. Имеется возможность проводить расчеты как на прямоугольных структурированных сетках, так и на основе неструктурированных тетраэдрических сеток, позволяющих описывать произвольные трехмерные геометрии любой сложности. Вычислительные солверы разработаны так, чтобы обеспечить эффективное распараллеливание на различных вычислительных архитектурах: как на многопроцессорных кластерных системах [17], так и на графических картах из [18]. Для вычислений на графических картах применяется технология Nvidia CUDA.

2. СТРУКТУРА УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Нахождение структуры плоской ударной волны в одноатомном газе составляет классическую задачу кинетической теории. Кроме физического интереса, как примера сильно неравновесного течения, она является важным тестом для проверки различных приближенных теорий и методов расчета кинетических процессов в газе. Ее удобство как тестовой задачи состоит в одномерности в физическом пространстве, простых граничных условиях и наличии инвариантов – законов сохранения потоков массы, импульса и энергии – которые могут использоваться для контроля правильности решения. В [19] нами были выполнены прецизионные расчеты структуры ударной волны с контролем точности, здесь покажем только некоторые результаты.

Рассмотрим плоскую ударную волну, распространяющуюся в одноатомном газе. Свяжем систему отсчета с фронтом ударной волны. Ось x направим вдоль потока перпендикулярно фронту ударной волны. Плотность, скорость, температура газа соответственно, до и после ударной волны – n_1, u_1, T_1 и n_2, u_2, T_2 – связаны соотношениями Рэнкина–Гюгонио

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{(\gamma + 1)M^2}{(\gamma - 1)M^2 + 2},$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{(2\gamma M^2 - (\gamma - 1))((\gamma - 1)M^2 + 2)}{(\gamma + 1)^2 M^2},$$

где для одноатомного газа $\gamma = 5/3$, M – число Маха ударной волны, определяемое по скорости звука в невозмущенном (до ударной волны) газе, $c_1 = \sqrt{\gamma T_1}$.

Выделим область $(-L_1, L_2)$ такую, что функцию распределения газа в точках $x = -L_1, x = L_2$ можно считать максвелловской. Структура ударной волны получается в результате эволюции со временем начального разрыва в точке $x = 0$. Функция распределения в цилиндрически-симмет-

ричной системе скоростей перед и после разрыва в начальный момент времени и граничные условия определяются следующим образом:

$$f(t=0, x < 0, \xi_x, \xi_r) = f(t, x = -L_1, \xi_x, \xi_r) = \frac{\xi_r}{Z_1} \exp\left(-\frac{(\xi_x - u_1)^2 + \xi_r^2}{2T_1}\right),$$

$$f(t=0, x > 0, \xi_x, \xi_r) = f(t, x = L_2, \xi_x, \xi_r) = \frac{\xi_r}{Z_2} \exp\left(-\frac{(\xi_x - u_2)^2 + \xi_r^2}{2T_2}\right).$$

Задача состоит в нахождении $f(0 < t < t_\infty, -L_1 < x < L_2, \xi_x, \xi_r)$ путем решения уравнения Больцмана методом, описанным выше.

Макроскопические величины, характеризующие состояние газа, определяются как суммы по узлам скоростной сетки. Плотность числа частиц

$$n(x) = \frac{V}{N} \sum_{\gamma \in \Xi} f(x, \xi_x^\gamma, \xi_r^\gamma),$$

гидродинамическая скорость

$$u(x) = \frac{1}{n(x)} \sum_{\gamma \in \Xi} \xi_x^\gamma f(x, \xi_x^\gamma, \xi_r^\gamma),$$

температура

$$T(x) = \frac{1}{3n(x)} \sum_{\gamma \in \Xi} \left((\xi_x^\gamma - u(x))^2 + \xi_r^{\gamma 2} \right) f(x, \xi_x^\gamma, \xi_r^\gamma),$$

продольная компонента температуры и продольная компонента тензора давлений

$$T_{xx}(x) = \frac{1}{n(x)} \sum_{\gamma \in \Xi} (\xi_x^\gamma - u(x))^2 f(x, \xi_x^\gamma, \xi_r^\gamma),$$

$$p_{xx}(x) = n(x)(T_{xx}(x) - T(x)),$$

поток тепла

$$q(x) = \frac{1}{2N} \sum_{\gamma \in \Xi} (\xi_x^\gamma - u(x)) \left((\xi_x^\gamma - u(x))^2 + \xi_r^{\gamma 2} \right) f(x, \xi_x^\gamma, \xi_r^\gamma).$$

Одной из характеристик структуры ударной волны является обратная ширина, определяемая формулой

$$\delta = \frac{\lambda_1}{L} = \frac{\lambda_1}{n_2 - n_1} \left(\frac{dn(t = \infty, x)}{dx} \right)_{\max},$$

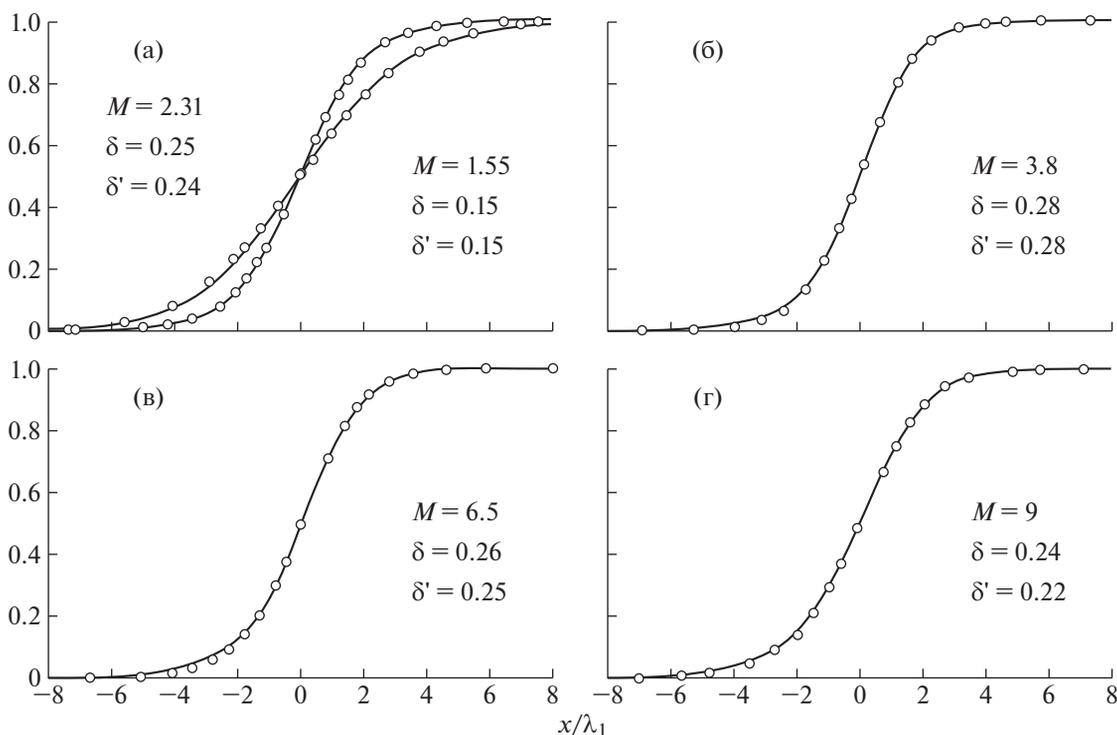
где λ_1 – средняя длина свободного пробега в невозмущенном (до ударной волны) газе

$$\lambda_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi n_1} \sigma_{\text{eff}}}.$$

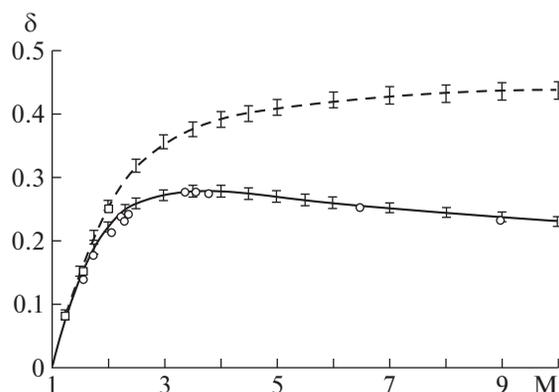
Стационарная структура ударной волны определяется как при таком $t = t_\infty$, когда профили макропараметров перестают зависеть от времени.

На фиг. 2 показаны профили плотности ударной волны, рассчитанные с использованием реального потенциала аргона в форме Леннарда–Джонса, в сравнении с экспериментальными данными из [20] (экспериментальные данные обозначены через \circ , δ' – экспериментальное значение обратной ширины ударной волны). Наблюдается хорошее совпадение для всех чисел Маха.

На фиг. 3 представлена зависимость обратной ширины ударной волны δ от числа Маха в сравнении с ее значением для газа твердых сфер и экспериментальными данными (здесь и далее: сплошная линия – газ Леннарда–Джонса, штриховая линия – газ твердых сфер, \circ – экспериментальные данные из [20], \square – экспериментальные данные из [21]). График δ для потенциала Леннарда–Джонса согласуется с экспериментом. Наблюдается максимум обратной толщины при $M = 3.8 \pm 0.3$.



Фиг. 2. Профили плотности: сплошная линия – потенциал Леннарда–Джонса, о – потенциал твердых сфер.

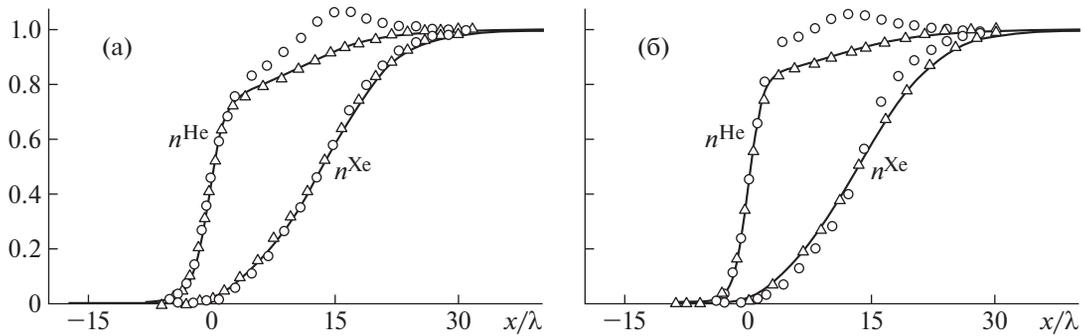


Фиг. 3. Зависимость обратной ширины ударной волны δ от числа Маха: сплошная линия – потенциал Леннарда–Джонса, штриховая линия – потенциал твердых сфер, о – экспериментальные данные из [20], □ – экспериментальные данные из [21].

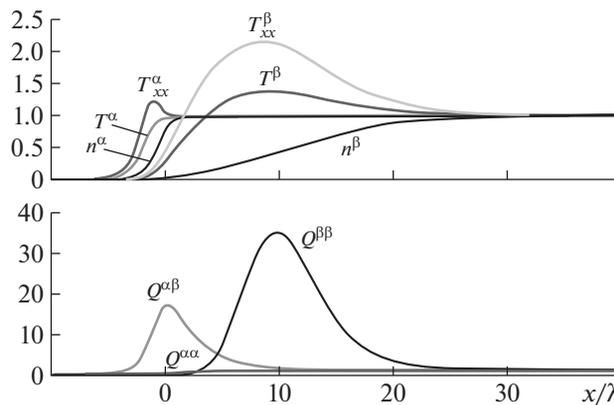
В ряде работ [22] указана возможность протекания в области фронта УВ при ее движении в смеси газов с сильно различающимися массами молекул, неупругих процессов со значениями пороговой энергии, превышающими характерную тепловую энергию равновесного состояния за фронтом. Ниже приведены только некоторые результаты расчетов этого явления на основе проекционного метода, подробные данные имеются в [23].

На фиг. 4а в качестве теста показано сравнение рассчитанных профилей плотности с данными экспериментальной работы [24] для случая ударной волны при $M = 3.89$ с молярными концентрациями газов 97% гелия и 3% ксенона. На фиг. 4б показано сравнение для случая $M = 3.61$ в газе, состоящем на 98.5% из гелия и 1.5% из ксенона.

Рассчитанные данные представлены сплошной линией, кружочками показаны экспериментальные данные. Дополнительно, треугольниками отображены данные из [25], полученные ме-



Фиг. 4. Сравнение с экспериментальными данными: (а) – для $M = 3.89$, 97% He + 3% Xe; (б) – для $M = 3.61$, 98.5% He + 1.5% Xe.



Фиг. 5. Параметры компонент смеси и частоты столкновений для $M = 5$, $m^\alpha/m^\beta = 1/33$, $n^\alpha/n^\beta = 500/1$.

тодом статистического моделирования. Видно хорошее совпадение с экспериментом графиков плотности ксенона на фиг. 4а, на фиг. 5б совпадение графиков плотности ксенона несколько хуже. Различие графиков плотности для гелия состоит в том, что на экспериментальных графиках имеется максимум. Предполагается, что это связано с погрешностью экспериментальных данных.

Перейдем к рассмотрению вопроса о высокоэнергетических столкновениях во фронте ударной волны. Частота высокоэнергетических столкновений рассчитывается по следующей формуле:

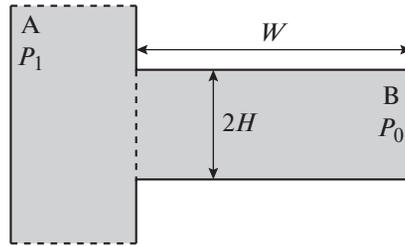
$$Q_R^{ij}(x) = \int f_i f_j g H(g - g_R) b db d\epsilon d^3 p d^3 p_1, \quad g = \left| \frac{p}{m_i} - \frac{p_1}{m_j} \right|.$$

Здесь $H(g - g_R)$ – функция Хевисайда:

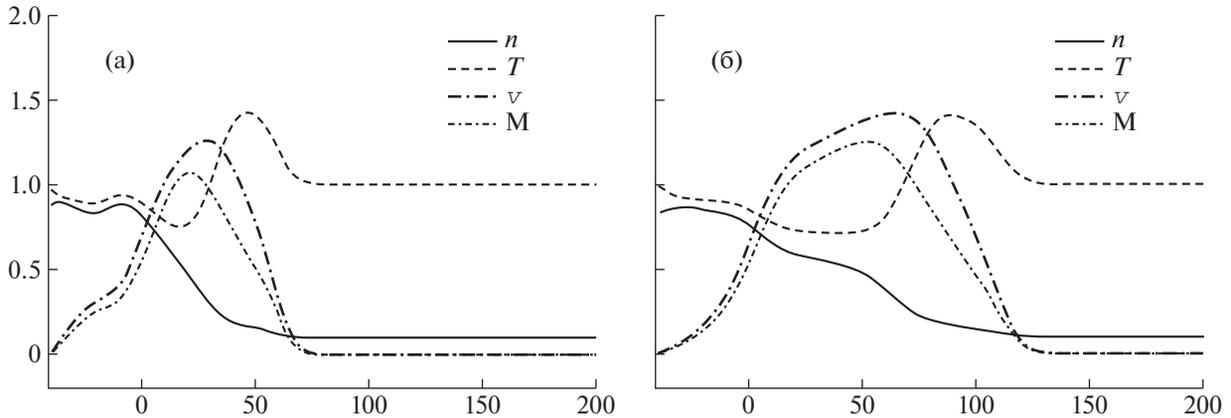
$$H(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

Интеграл $Q_R^{ij}(x)$ является функционалом, определяющим частоту столкновений в единице объема молекул i -го сорта с молекулами j -го сорта, энергия которых превышает заданный величиной g_R порог.

На фиг. 5 представлены результаты для смеси с отношением масс $m^\alpha/m^\beta = 1/33$ и отношением концентраций $n^\alpha/n^\beta = 500/1$. На графике макропараметров для тяжелой компоненты наблюдается существенное превышение температуры во фронте ударной волны. На нижнем графике показаны величины $Q_R^{ij}(x)$, приведенные к такому же виду, как и макропараметры $Q_R^{ij*}(x) = (Q_R^{ij}(x) - Q_R^{ij}(\infty))/(Q_R^{ij}(+\infty) - Q_R^{ij}(-\infty))$. Видно, что функционал для легкого газа $Q_R^{\alpha\alpha}(x)$ являет-



Фиг. 6. Геометрия ударной трубы.



Фиг. 7. Параметры газа на центральной линии для $Kn = 0.05$: (а) – для $t = 30$; (б) – для $t = 60$.

ся монотонным. Функционалы $Q_R^{\alpha\beta}(x)$, $Q_R^{\beta\beta}(x)$ имеют максимум при $g_R = 5\sqrt{(m_i + m_j)kT_2/m_i m_j}$, значения $Q_R^{\alpha\beta}(x)$, $Q_R^{\beta\beta}(x)$ во фронте превышают их значения за УВ в 18 и 35 раз соответственно. В [23] приведены расчеты также для других отношений масс и концентраций компонент смеси.

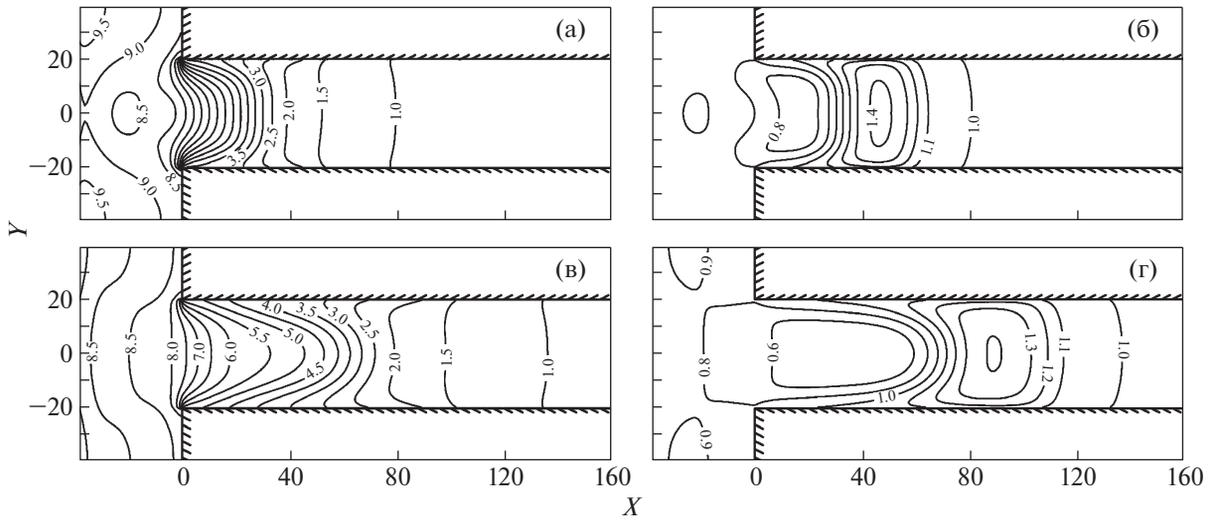
3. МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕЧЕНИЙ С УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ В УЗКИХ КАНАЛАХ

Исследование течений газа с ударными волнами в узких каналах приобретает практический интерес по мере развития новых технологий, использующих устройства с характерным размером, сравнимым с длиной свободного пробега молекул. Примером такого устройства может служить представленная в [26] ударная труба с диаметром рабочей секции в 2 мм, предназначенная для генерирования молекулярных пучков высокой энергии.

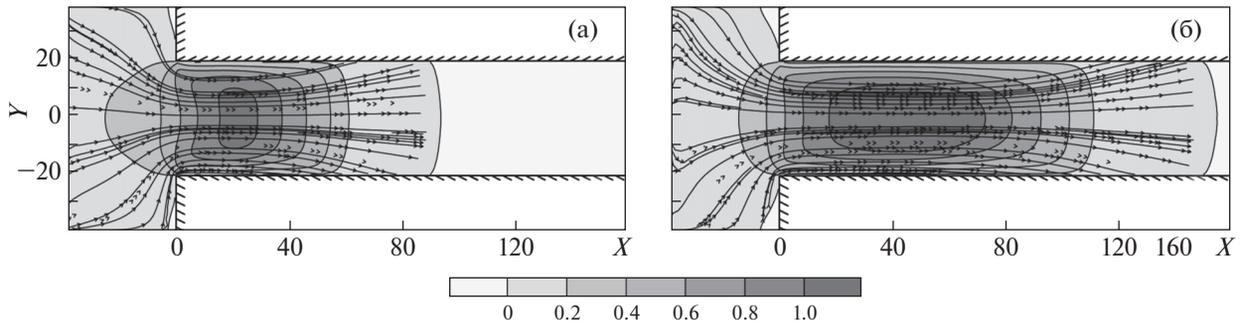
Характерной особенностью течения является наличие невозмущенных областей газа, находящегося в состоянии термодинамического равновесия, которые должны оставаться таковыми вплоть до прихода ударной волны и не содержать флуктуаций, вызванных счетом. Используемый нами численный метод обеспечивает выполнение указанного условия. Подробный анализ распространения УВ в узком канале дан в [27], здесь же приведем только некоторые результаты.

Моделируемая ударная труба показана на фиг. 6 и состоит из двух секций: более широкой толкающей секции (секция А) и узкой измерительной секции (секция В), что соответствует ударной трубе, описанной в [26]. В начальный момент времени давление в толкающей секции в 10 раз больше, чем в измерительной, а температуры в обеих секциях равны.

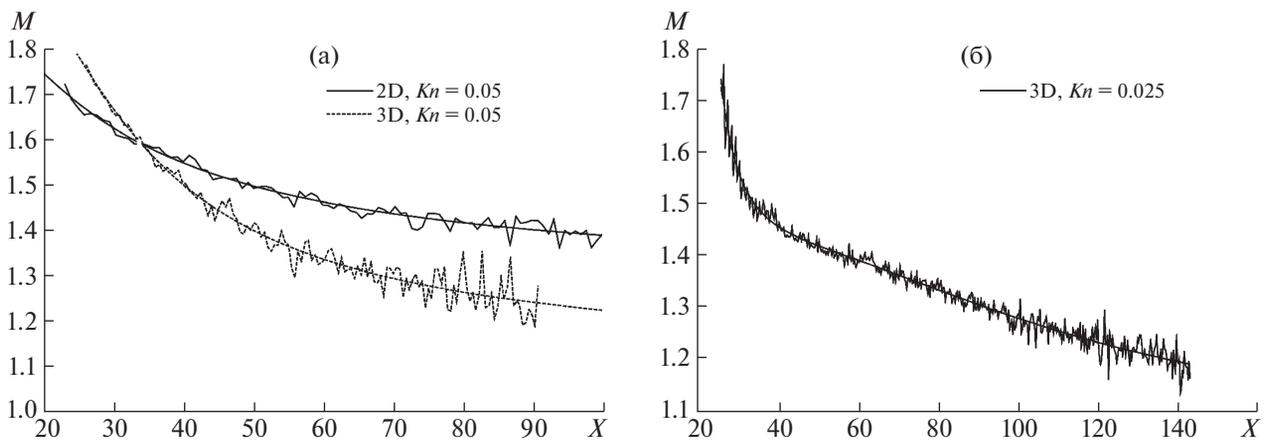
На стенках сосудов задано условие полной аккомодации с диффузным отражением молекул, имеющих максвелловскую функцию распределения по скоростям. Распад начального разрыва давления создает ударную волну (УВ), которая движется внутри измерительной секции. Распространение УВ в канале квадратного сечения детально изучено для $Kn = 0.05$. Графики плотности, температуры, скорости и локального числа Маха вдоль центральной линии для двух моментов времени представлены на фиг. 7. Все макропараметры приводятся в безразмерных величинах.



Фиг. 8. Поля плотности и температуры для $Kn = 0.05$: (а) – плотность, $t = 30$; (б) – температура, $t = 30$; (в) – плотность, $t = 60$; (г) – температура, $t = 60$.

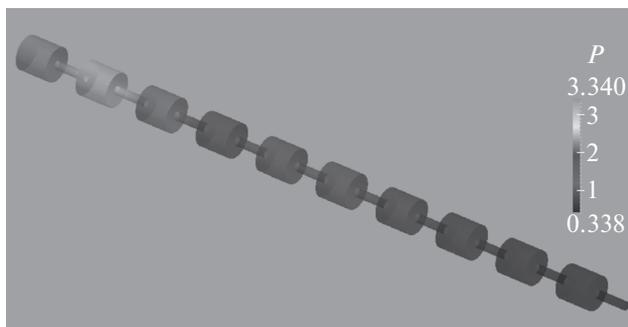


Фиг. 9. Поле локального числа Маха и линии тока для $Kn = 0.05$: (а) – для $t = 30$, (б) – для $t = 60$.

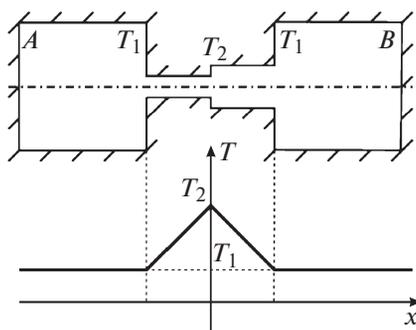


Фиг. 10. Число Маха вдоль ударной трубы: (а) – для 2D и 3D геометрии, $Kn = 0.05$; (б) – для 3D геометрии, $Kn = 0.025$.

Скорость газа нормирована на скорость звука в невозмущенном газе, плотность и температура нормированы на их характерные значения в сечении В. Указанные расстояния x и времена t нормированы на среднюю длину λ и время τ свободного пробега молекул соответственно.



Фиг. 11. Распределение давления в десятикаскадном насосе Кнудсена.



Фиг. 12. Схема насоса Кнудсена.

В области размытого фронта УВ видно возрастание температуры, а за фронтом температура падает в волне разрежения. Плоской области контактного газа за фронтом не наблюдается, так как она сливается с размытым ударным фронтом с одной стороны, и с зоной разрежения с другой (фиг. 8).

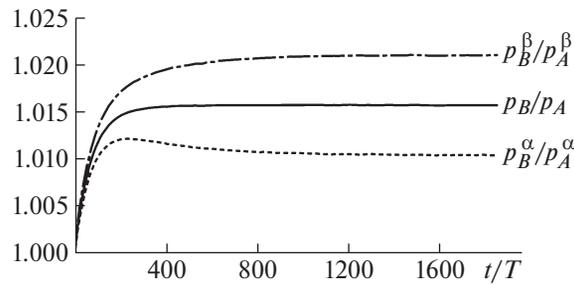
Поля плотности и температуры показывают охлаждение газа и замедление УВ у стенок канала, что вызывает повышение его плотности. Области сжатия и разрежения особенно хорошо видны на полях температуры. Волна разрежения распространяется в толкающую секцию.

Поля локального числа Маха и линии тока показаны на фиг. 9, где хорошо видно торможение газа на стенках сосуда.

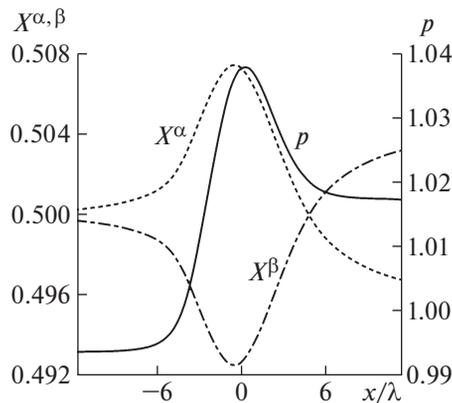
На фиг. 10 замедление УВ показано в зависимости от координаты вдоль канала. Замедление УВ возрастает с увеличением числа Кнудсена, а при равных числах Кнудсена оно выше для 3D течений. Структура УВ формируется на расстоянии примерно в 25λ от входа в измерительную секцию. В начале процесса скорость УВ превышает рассчитанную по одномерной теории. Скорость торможения плавно уменьшается по мере продвижения УВ. Для малых чисел Кнудсена, как показано на фиг. 10б для $Kn = 0.025$, график торможения становится почти линейным. Положение фронта ударной волны определялось по нулю второй производной графика плотности. Флуктуации на графиках замедления вызваны погрешностью расчета этой производной для перемещающейся по дискретной сетке вдоль оси канала УВ. В [27] рассмотрено также отражение УВ от торца трубы и приведены расчеты для потенциала Леннарда–Джонса. Разработанный вычислительный код может быть использован для изучения эффективности микроударных труб и других устройств, работающих в режиме течений разреженного газа.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ГАЗА В НАСОСЕ КНУДСЕНА

В 1909–1910 годах М. Кнудсен исследовал разность давлений на концах устройства, состоящего из последовательно соединенных цилиндрических узких и широких трубок. Вдоль узких трубок, диаметр которых равнялся приблизительно 0.5 мм, температура линейно возрастала от некоторого значения T_1 до $T_2 > T_1$. Вдоль широких трубок, диаметр которых равнялся 10–15 мм,



Фиг. 13. Накачка и разделение в насосе Кнудсена в зависимости от времени.



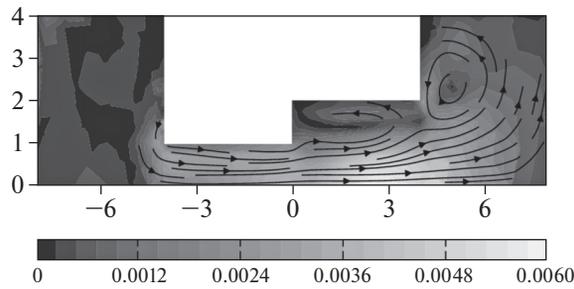
Фиг. 14. Стационарное распределение давления p и долей легкого χ^α и тяжелого χ^β газа вдоль линии симметрии устройства.

температура линейно убывала до значения T_1 . Эксперимент показал, что при некоторых условиях отношение давлений на концах десятикаскадного устройства достигало 10, т.е. устройство могло работать как насос. Этот классический эксперимент открыл явление теплового скольжения в газе, практическая важность которого выявилась только в конце 20-го века.

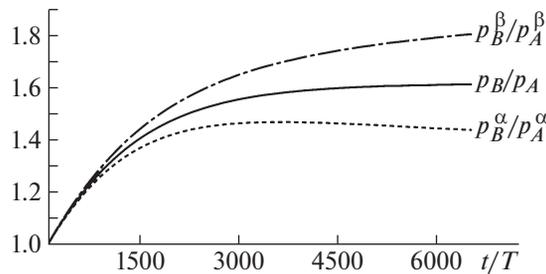
Нами была поставлена задача математического моделирования эксперимента при известных параметрах устройства. Использовался молекулярный потенциал водорода Леннарда–Джонса с параметрами из [28], вращательно-поступательные переходы энергии учитывались на основе двухуровневой модели, подробно описанной в [10]. На фиг. 11 приведено рассчитанное распределение давления в десятикаскадном насосе Кнудсена. Десятикратное увеличение давления с точностью до нескольких процентов совпадает с данными физического эксперимента. Другие варианты эксперимента также были рассчитаны. Получено совпадение расчетных и экспериментальных данных в пределах 7%.

В настоящее время интерес к микронасосам кнудсеновского типа возрастает в связи со стремлением миниатюризации технических устройств. Течения смеси газов в таких устройствах представляют большой интерес (см. [29]), так как эффект теплового скольжения зависит от свойств молекул газа, что приводит к тому, что отдельные компоненты газа в подобных устройствах ведут себя по-разному.

Рассмотрим результаты моделирования разделения смеси газов в насосе Кнудсена. Схема насоса Кнудсена изображена на фиг. 12. Насос представляет собой два резервуара с газом, которые соединены последовательно узкими и широкими трубками, шириной h и H соответственно. Температура на стенках резервуаров поддерживается равной T_1 , и вдоль стенок узкого щелевого канала температура растет по направлению оси x , достигает значения T_2 в месте стыка каналов и линейно падает в широком канале. На стенках резервуаров и каналов задается условие диффузного отражения молекул. Конструкция насоса симметрична относительно оси канала, это позволяет вести расчет для одной четверти, применяя граничные условия зеркального отражения на плоскостях симметрии.



Фиг. 15. Стационарное распределение потоков газа в устройстве.



Фиг. 16. Накачка и разделение в многоступенчатом насосе Кнудсена в зависимости от времени.

Исследуется двухкомпонентная смесь газов твердых сфер, обладающих массами m^α и m^β . Начальная температура газа в каждой точке соответствует температуре ближайшей стенки. Начальные концентрации компонент смеси равны $n^\alpha = n^\beta$ в каждой точке системы и зависят от пространственной координаты так, что давление постоянно.

Рассмотрим процессы откачки и разделения смеси с отношением масс $m^\alpha/m^\beta = 1/2$, в насосе Кнудсена с параметрами $T_2/T_1 = 4/3$, $H = 2h$, $h = 2\lambda$ ($\text{Kn} = 0.5$, $\lambda = 1/\sqrt{2}\pi d^2(n^\alpha + n^\beta)$).

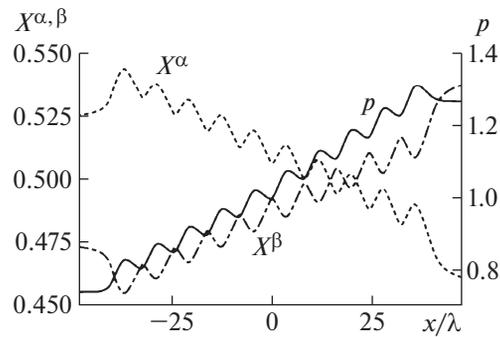
На фиг. 13 показаны зависимости отношения давлений и парциальных давлений компонент в резервуарах в зависимости от времени. Под действием эффекта теплового скольжения газ приходит в движение в пристеночной области вдоль градиента температуры. Благодаря тому, что данный эффект проявляется сильнее в узком канале, начинается перекачка обоих компонент газа из левого резервуара в правый. В момент времени $t = 250\tau$ отношение парциальных давлений для легкой компоненты достигает максимума. Начинается обратная перекачка легкой компоненты газа из-за создавшегося повышенного давления в правом резервуаре.

На фиг. 14 представлено стационарное распределение давления $p(x) = p^\alpha(x) + p^\beta(x)$ и долей легкого $\chi^\alpha = n^\alpha/(n^\alpha + n^\beta)$ и тяжелого $\chi^\beta = n^\beta/(n^\alpha + n^\beta)$ газа вдоль продольной линии симметрии насоса в зависимости от координаты x . Откачка достигает $p_A/p_B = 1.015$ (1.5%), разделение в правом резервуаре равно $n_B^\alpha/n_B^\beta = 0.987$ (1.3%).

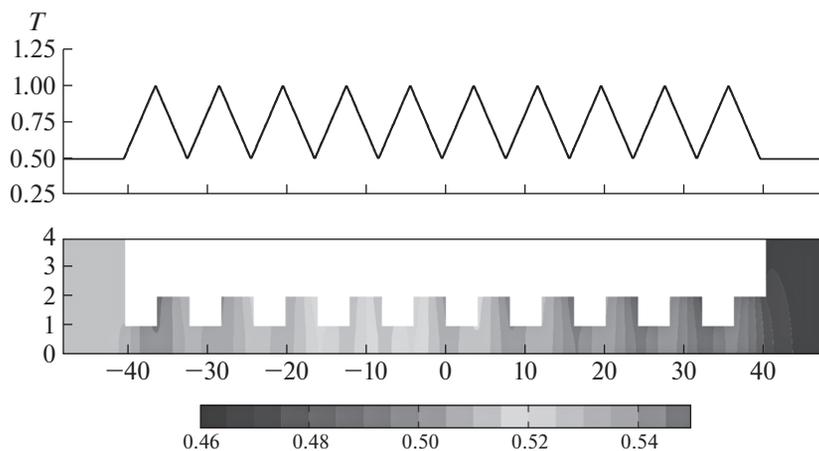
На фиг. 15 показано стационарное распределение потоков газа в насосе. В каналах в пристеночной области газ течет в направлении градиента температуры, а в центре в обратном направлении под действием возникшей разницы давлений.

Откачка и разделение могут быть увеличены в многоступенчатом насосе Кнудсена. В многоступенчатом насосе резервуары сообщаются множеством последовательно соединенных элементов. Каждый элемент представляет собой соединенные между собой узкий и широкий канал, температура стенок каналов меняется так же, как и в одноступенчатом насосе: повышается в узком канале и падает в широком.

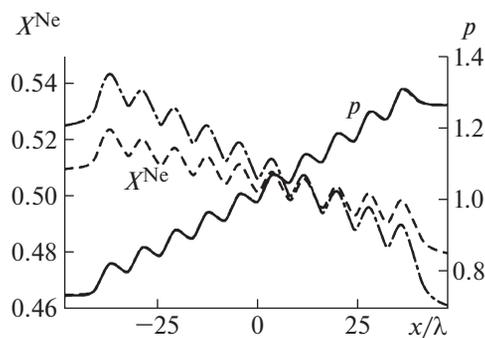
Фиг. 16, 17 и аналогичны фиг. 13 и 14. На фиг. 16 показаны зависимости отношения давлений в резервуарах в зависимости от времени. Здесь также наблюдается максимум отношения давлений для тяжелой компоненты. Он приходится на момент времени $t \approx 3250\tau$, после которого начинается обратное течение тяжелого газа. На фиг. 17 представлено распределение давления и долей



Фиг. 17. Распределение давления p и долей легкого χ^α и тяжелого χ^β газа вдоль линии симметрии в многоступенчатом насосе.



Фиг. 18. Поле доли легкой компоненты смеси χ^α и распределение температуры на стенках устройства.



Фиг. 19. Давление p — сплошная линия и доля легкого χ^α газа на линии симметрии; штриховая — газ твердых сфер, пунктирная — газ Леннарда–Джонса.

компонент вдоль продольной линии симметрии насоса. Зависимости имеют пилообразный вид, достигают локальных экстремумов в местах соединения каналов. В данном случае откачка значительно сильнее и равна $p_A/p_B = 1.55$, а разделение равно $\chi_B^\alpha/\chi_A^\alpha = 0.75$. На фиг. 18 представлены поле доли легкого газа χ^α и распределение температуры на стенках устройства в зависимости от продольной координаты.

Разделение смеси газов в многоступенчатом насосе дополнительно рассматривалось при использовании потенциала Леннарда–Джонса взаимодействия молекул $U(r) = 4\epsilon((\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6)$.

Моделирование проведено для смеси неона и аргона, при этом использовались следующие параметры потенциала Леннарда–Джонса: $\varepsilon^{\text{Ne}} = 35.7$ К, $\varepsilon^{\text{Ar}} = 122.4$ К, $\sigma^{\text{Ne}} = 2.789$ А, $\sigma^{\text{Ar}} = 3.482$ А. Параметры взаимодействия различных атомов определились из следующих комбинационных соотношений: $\varepsilon^{\alpha, \beta} = \sqrt{\varepsilon^{\alpha} \varepsilon^{\beta}}$, $\sigma^{\alpha, \beta} = ((\sigma^{\alpha} + \sigma^{\beta}))/2$.

На фиг. 19 показаны в виде сравнения распределения давления p и доли неона χ^{Ne} на линии симметрии. Сплошная линия соответствует потенциалу твердых сфер, пунктирная – потенциалу Леннарда–Джонса. Наблюдается совпадение распределения давления в насосе для обоих потенциалов взаимодействия, но имеется отличие в отношении разделения смеси. Для реалистичного потенциала Леннарда–Джонса разделение смеси примерно в 2 раза слабее. Качественно процессы разделения для потенциалов твердых сфер и Леннарда–Джонса совпадают.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье представлены основные моменты консервативного проекционного метода решения кинетического уравнения Больцмана и его модификации для случая смеси газов. Рассмотрены примеры моделирований: нестационарные сверхзвуковые течения с ударными волнами и медленные слабо возмущенные течения, вызванные эффектом термотранспирации. Показано, что проекционный метод решения уравнения Больцмана и разработанная на его основе программно-моделирующая среда являются эффективными инструментами для расчета течений простых газов и газовых смесей в переходном режиме.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е. Статистический метод частиц ячейках для решения задач динамики разреженного газа. 1. Основы построения метода // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1975. Т. 15. № 5. С. 1195–1208.
2. Nordsieck A., Hicks B.L. Monte Carlo evaluation of the Boltzmann collision integral // Rarefied Gas Dynamics. 1967. V. 1. P. 695–710.
3. Аристов В.В., Черемисин Ф.Г. Консервативный метод расщепления для решения уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1980. Т. 21. № 1. С. 208–225.
4. Tcheremissine F.G. Conservative discrete ordinates method for solving Boltzmann kinetic equation // Commun. Appl. Mathem. M.: Russian Acad. Sci. Comput. Center. 1996. P. 50.
5. Черемисин Ф. Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. Т. 357. № 1. С. 53–56.
6. Черемисин Ф.Г. Решение уравнения Больцмана при переходе к гидродинамическому режиму течения // Докл. РАН. 2000. Т. 373. № 4. С. 483–486.
7. Черемисин Ф.Г. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2006. Т. 46. № 2. С. 329–343.
8. Райнес А.А. Метод решения уравнения Больцмана для смеси газов в случае цилиндрической симметрии в пространстве скоростей // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2002. Т. 42. № 8. С. 1258–1269.
9. Dodulad O.I., Tcheremissine F.G. Multipoint conservative projection method for computing the Boltzmann collision integral for gas mixtures // In 28th Internat. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. 2012. AIP Conf. Proc. 1501. P. 302–309.
10. Черемисин Ф.Г. Решение кинетического уравнения Больцмана для многоатомного газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2012. Т. 52. № 2. С. 270–287.
11. Аникин Ю.А., Додулад О.И. Решение кинетического уравнения для двухатомного газа с использованием дифференциальных сечений рассеяния, рассчитанных методом классических траекторий // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2013. Т. 53. № 7. С. 1193–1211.
12. Аристов В.В., Черемисин Ф.Г. Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. 1976. Т. 231. № 1. С. 49–52.
13. Bobylev A.V., Ohwada T. On the generalization of Strang's splitting scheme // Riv. Math. Univ. Parma. 1999. V. 6. № 2. P. 235–243.
14. Коробов Н.М. Теоретикочисловые методы в приближенном анализе М., Физматгиз, 1963.
15. Anikin Y.A., Dodulad O.I., Kloss Y.Y., Martynov D.V., Shuvalov P.V., Tcheremissine F.G. Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices // Vacuum. 2012. V. 86. № 11. P. 1770–1777.
16. Bazhenov I.I., Dodulad O.I., Ivanova I.D., Kloss Y.Y., Rjabchenkov V.V., Shuvalov P.V., Tcheremissine F.G. Problem Solving environment for gas flow simulation in micro structures on the base of the Boltzmann equation. CMMSE2013 // Proc. 13th Intern. Conf. on Math. Meth. Sci. Engny. Spain, 2013. P. 246–257.

17. *Клосс Ю.Ю., Хохлов Н.И., Черемисин Ф.Г., Шурыгин Б.А.* Разработка численных схем решения кинетического уравнения в кластерных средах на основе технологии MPI // Информационные процессы. 2007. Т. 7. № 4. С. 425–431.
18. *Kloss Yu.Yu., Shuvalov P.V., Tcheremissine F.G.* Solving Boltzmann equation on GPU // Proc. Computer Sci. ICCS 2010, ISSN 1877-0509, 2010.04.120, 2010. V. 1. 1. P. 1077–1085.
19. *Додулад О.И., Черемисин Ф.Г.* Расчеты структуры ударной волны в одноатомном газе с контролем точности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2013. Т. 53. № 6. С. 169–187.
20. *Alsmeyer H.* Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam // J. Fluid. Mech. 1976. V. 74. P. 497–513.
21. *Garen W., Synofzik R., Frohn A.* Shock tube for generation of weak shock waves // AIAA-Journal. 1974. V. 12. P. 1132–1134.
22. *Великодный В.Ю., Емельянов А.В., Еремин А.В.* Неадиабатическое возбуждение молекул йода в зоне поступательной неравновесности ударной волны // Ж. теоретич. физ. 1999. Т. 69. № 10. С. 23–33.
23. *Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г.* Расчеты структуры ударной волны с смеси газов на основе решения уравнения Больцмана // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т. 14. № 1. С. 1–18.
24. *Gmurczyk A.S., Tarczynski M., Walenta Z.A.* Shock wave structure in the binary mixtures of gases with disparate molecular masses // In: 11th Intern. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. 1978. V. 1. P. 333–341.
25. *Chung C., Witt K.J.D., Jeng D., Penko. P.F.* Internal structure of shock waves in disparate mass mixture // J. Thermophysic. 1993. V. 7. № 4. P. 742–744.
26. *Nobuya Miyoshi et al.* Development of ultra small shock tube for high energy molecular beam source // In: 26th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proc. 1084, 2009. P. 557–562.
27. *Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В.* Решение уравнения Больцмана для нестационарных течений с ударными волнами в узких каналах // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2010. Т. 50. № 6. С. 1148–1158.
28. *Гирифельд Д., Кертисс Ч., Берд. Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во Иностран. лит-ры, 1961. 976 с.
29. *Takata S., Sugimoto H., Kosuge S.* Gas separation by means of the Knudsen compressor // European J. Mechanics – B/Fluids. 2007. V. 26. № 2. P. 155–181.