

Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук

На правах рукописи



Рогозин Олег Анатольевич

**Численный и асимптотический анализ некоторых
классических задач молекулярной газодинамики**

Специальность 01.02.05 —
«Механика жидкости, газа и плазмы»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, профессор
Черемисин Феликс Григорьевич

Москва — 2017

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Кинетическая теория газов	12
1.1 Основные понятия и уравнения	12
1.1.1 Границы применимости физической модели	12
1.1.2 Функция распределения скоростей	13
1.1.3 Уравнение Больцмана	14
1.1.4 Границные условия	20
1.1.5 Модельные уравнения	21
1.2 Математическая теория задачи Коши	22
1.2.1 Пространственно-однородная задача	22
1.2.2 Пространственно-неоднородная задача	26
1.3 Асимптотическая теория	28
1.3.1 Обзор строгих математических результатов	32
1.3.2 Слабовозмущённые течения	33
1.3.3 Медленные неизотермические течения	37
1.3.4 Одномерные течения при конечных чисел Маха	47
Глава 2. Численное решение уравнения Больцмана	50
2.1 Обзор вычислительных методов	50
2.1.1 Стохастические методы	51
2.1.2 Методы дискретных скоростей	52
2.1.3 Проекционные методы	55
2.1.4 Методы консервативной коррекции	57
2.1.5 Неравномерные сетки	58
2.2 Консервативный проекционно-интерполяционный метод дискретных скоростей	58
2.2.1 Дискретизация скоростного пространства	59
2.2.2 Проекционно-интерполяционная техника	60
2.2.3 Решение задачи Коши	61
2.2.4 Сохранение положительности	62

2.2.5	Проекционные шаблоны	64
Глава 3. Классические задачи молекулярной газодинамики		66
3.1	Плоское течение Куэтта	66
3.1.1	Методы решения линейной задачи	68
3.1.2	Методы решения нелинейной задачи	69
3.1.3	Решение на равномерной сетке	71
3.1.4	Решение на неравномерной сетке	74
3.2	Течение между пластинами с синусоидальным распределением температур	85
3.3	Течение между двумя равномерно нагретыми некоаксиальными цилиндрами	92
3.4	Течение между двумя равномерно нагретыми эллиптическими цилиндрами	97
Заключение		105
Список литературы		107
Приложение А. Вычисление транспортных коэффициентов газа твёрдых сфер		132
A.1	Основные формулы	132
A.2	Численные методы	134
A.2.1	Многомерное интегрирование	135
A.2.2	Решение интегральных уравнений	135
A.2.3	Оценка точности	137
A.3	Результаты	138
A.3.1	Вычисление γ_8	138
A.3.2	Вычисление γ_9	141
A.3.3	Вычисление γ_{10}	141
A.4	Сведение интегральных уравнений к одномерным	143
A.4.1	Особенности исчисления	146
A.4.2	Сравнение результатов	147

Введение

Молекулярная газодинамика — это динамика газа, построенная на основе кинетической теории. Под последней обычно понимают теорию неравновесных свойств газа. Ключевую роль при описании газа играет отношение длины свободного пробега молекул газа ℓ к характерному размеру течения L — так называемое число Кнудсена $\text{Kn} = \ell/L$. В континуальном пределе ($\text{Kn} \rightarrow 0$) обычно используют законы классической гидродинамики, основанной на модели сплошной среды, и только в случае конечных Kn учитывают молекулярную структуру газа. Таким образом, в литературе можно встретить разделение на континуальную гидрогазодинамику и динамику разреженного газа. Однако имеется достаточно широкий круг задач, для которых уравнения Навье—Стокса некорректно описывают поведение газа даже при $\text{Kn} \rightarrow 0$. Поэтому в настоящем исследовании используется термин *молекулярная газовая динамика*, подчёркивая тот факт, что методы и представления кинетической теории используются как для разреженного газа, так и для его континуального предела. Этот термин, по-видимому, впервые предложен в 1970 году М. Н. Коганом [239], позже подхвачен Г. Бёрдом [225] и Ё. Соне [186].

Актуальность темы. Становление молекулярной газодинамики можно связать с важными прикладными направлениями, возникшими в первой половине XX века. В частности, задача разделения изотопов стала импульсом для развития асимптотической теории и методов вычисления транспортных коэффициентов на основе кинетической теории. Динамика разреженного газа выделилась в отдельную науку благодаря активному освоению космоса. Первые исследования носили в основном экспериментальный характер, но в XXI веке превалирующую роль играет компьютерное моделирование, что говорит о зрелости теоретических представлений дисциплины. Неравновесное состояние газа описывается в общем случае шестимерной функцией распределения, её эволюция подчиняется уравнению Больцмана. Входящий в него нелинейный интеграл столкновений представляет собой нелокальный квадратичный оператор, что создаёт существенные трудности, как для математического, так и численного анализа. За последние три десятилетия строгая математическая теория пополнилась множеством фундаментальных результатов, а стремительный рост суперкомпьютерных мощностей, доступных исследователям и инженерам, спровоцировал системное развитие численных методов.

На сегодняшний день можно выделить несколько прикладных областей молекулярной газодинамики:

1. *Аэрокосмические исследования.* Движение аппаратов в верхних слоях атмосферы сопровождаются сильно неравновесными течениями и достаточно большими числами Кнудсена.
2. *Микроэлектромеханические системы (МЭМС).* Эта относительно молодая отрасль обуславливает основную волну интереса к изучению разреженного газа в начале XXI века. В таких МЭМС как приводы, микротурбины и газовые хроматографы возникают разреженные течения газа.
3. *Аэрозоли.* Процесс их образования, изменение их дисперсного состава описываются в рамках кинетической теории. Аэрозольные реакторы используются среди прочего для производства стекловолокна, кремниевых пластин и углеродного волокна. Наконец, конечная фаза существования атмосферных загрязнений — это также аэрозольные частицы.
4. *Вакуумные технологии.* Моделирование течений газа, когда число Кнудсена значительно меняется в пространственно-временных масштабах, представляет собой особенно трудную задачу, однако современный уровень развития вычислительных средств позволяет во многих случаях обходиться без дорогостоящих экспериментальных прототипов.

Таким образом, актуальность данного исследования обусловлена

- активным развитием прикладных областей,
- потребностью в высокоточных численных методах,
- быстрым ростом доступных вычислительных ресурсов.

Объект исследования — движение одноатомного газа различной степени разреженности. В исследовании одновременно изучается два **предмета**:

- методы численного и асимптотического анализа,
- физические свойства стационарных течений.

Степень разработанности темы.

Формальная асимптотическая теория уравнения Больцмана была заложена с трудах Д. Гильберта [123], С. Чепмена [68], Д. Энскога [87], позже развита Д. Барнеттом [51], Х. Грэдом [109] и Ё. Соне [185]. Решение уравнения Больцмана для слаборазреженного газа допускает отделение гидродинамической части от существенно неравновесных пространственно-временных кинетических слоёв. Большой цикл работ Киотской группы (Ё. Соне, К. Аоки, Ш. Таката, Т. Овада и др.) посвящён высокоточному численному анализу кнудсеновского слоя перво-

го [163; 190] и второго порядка [118; 119; 162] для диффузного отражения и газа твёрдых сфер. Различные системы гидродинамических уравнений могут быть получены в зависимости от способа асимптотического масштабирования. В частности, для медленных неизотермических течений справедливы *уравнения Когана—Галкина—Фридлендера (КГФ)* [240], содержащие некоторые ненавьё—стоксовские члены.

Огромное множество исследований посвящено численному решению уравнения Больцмана. Среди них можно выделить три магистральных направления в зависимости от способа аппроксимации функции распределения скоростей:

- *методы прямого статистического моделирования (ПСМ)* строятся на основе некоторого случайного процесса марковского типа, способного аппроксимировать большинственную динамику;
- *методы дискретных скоростей* подразумевают фиксированный набор доступных молекулярных скоростей;
- *проекционные методы* используют разложение по базису в определённом функциональном пространстве.

Методы ПСМ в силу своей универсальности и простоты нашли широкое применение в прикладных областях, однако присущие им флуктуации иногда сильно ограничивают точность получаемых результатов. Проекционные методы, напротив, обладают наилучшим соотношением погрешности к размерности аппроксимационного пространства, но, как правило, в достаточно узком классе решений. Оказалось возможным добиться второго порядка точности в рамках метода дискретных скоростей, однако для этого потребовался длинный исторический путь.

Метод дискретных скоростей был впервые использован А. Нордсиком и Б. Хиксом [161]. Для вычисления интеграла столкновения они использовали кубатуры Монте-Карло с последующей консервативной коррекцией функции распределения. В дальнейшем метод дискретных скоростей развивался С. Йеном [219], В. В. Аристовым и Ф. Г. Черемисиным [222]. Д. Гольдштейн, Б. Стёртевант и Дж. Бродуэлл первыми для решения уравнения Больцмана использовали кинетические модели газа, допускающие столкновения только в дискретном пространстве [99]. А. Пальчевский, Ж. Шнайдёр и А. В. Бобылев показали, что, несмотря на присущие им консервативность и энтропийность на микроскопическом уровне¹, теоретический порядок сходимости таких моделей к уравнению Больцмана силь-

¹ Каждое дискретное столкновение не уменьшает энтропию, сохраняет массу, импульс и кинетическую энергию

но меньше единицы [164]. В. Панфёров и А. Гейнц показали, как специальная замена переменных позволяет улучшить сходимость, но лишь вплоть до первого порядка [165]. *Размазывание (mollification) столкновительного процесса* позволяет естественным образом решить проблему консервативной аппроксимации, избегая решения целочисленных уравнений:

- К. Бюе, С. Кордье и П. Дегон продемонстрировали, как с его помощью обеспечить консервативность на макроскопическом уровне (для столкновительного оператора целиком) [50];
- Х. Бабовски построил простейшую схему с консервативностью на мезоскопическом уровне (для всей столкновительной сферы) [22], его подход позже развил Д. Гёрш [107];
- Ф. Г. Черемисин предложил новый класс методов, сохраняющих консервативность на микроскопическом уровне (для отдельной столкновительной пары) [255].

Микроскопическая консервативность, достигнутая Ф. Г. Черемисиным, позволяет построить наиболее эффективную численную схему и может быть интерпретирована как проекционная процедура Петрова—Галёркина, в которой столкновительные инварианты образуют ортогональную оболочку. Кроме того, специальная процедура интерполяции функции распределения обеспечивает энтропийность метода [256]. Поэтому такой метод будем называть *консервативным проекционно-интерполяционным методом дискретных скоростей (КПИМДС)*.

Во многих прикладных задачах эффективная аппроксимация уравнения Больцмана требует существенно неоднородной дискретизации в скоростном пространстве. Неравномерные сетки активно используются как в методах дискретных скоростей [70; 136], так и проекционных [121; 217]. КПИМДС на неравномерных сетках может быть построен с помощью техники *многоточечного проектирования*, впервые предложенной Ф. Варгизом [206].

В настоящем исследовании выделены две основные **цели**:

1. Развитие КПИМДС для неравномерных сеток, его верификация в широком диапазоне неравновесности.
2. Численный анализ некоторых одномерных и медленных неизотермических течений разреженного газа на основе как уравнения Больцмана, так и соответствующих уравнений гидродинамического типа. Оценка области применимости последних при различных граничных условиях.

Для достижения указанных целей поставлены следующие **задачи**:

1. Анализ многоточечных проекционных шаблонов, необходимых для консервативного вычисления интеграла столкновений на неравномерных сетках.
2. Построение асимптотического решения второго порядка для пограничного слоя Прандтля для газа твёрдых сфер.
3. Сравнительный анализ численных решений задачи Куэтта в широком диапазоне параметров, получаемых с помощью КПИМДС и других общепризнанных методов.
4. Исследование сходимости численного решения уравнения Больцмана к асимптотическому для широкого класса течений между параллельными пластинами.
5. Исследование различных подходов к постановке граничных условий для уравнений КГФ, сравнительный анализ с решением уравнения Больцмана.
6. Параметрический анализ течений между некоаксиальными и эллиптическими цилиндрами в континуальном пределе.

Задачи 1–5 позволяют достичь первой цели, задачи 2–6 раскрывают содержание второй цели.

Научная новизна:

1. КПИМДС применяется для существенно неравномерных сеток в пространстве скоростей для достижения высокой точности.
2. Нелинейная асимптотическая теория используется для верификации численного метода решения уравнения Больцмана.
3. Уравнения КГФ решаются с граничными условиями, содержащими члены отличные от теплового скольжения.
4. Рассматриваются неизученные ранее эффекты и свойства известных течений разреженного газа.

Теоретическая и практическая значимость:

1. Результаты анализа нелинейной задачи Куэтта могут служить эталоном для верификации других численных методов.
2. Предложенная методология численного анализа медленных неизотермических течений существенно расширяет возможности их компьютерного моделирования.

Методология и методы исследования. В качестве математической модели неравновесного газа используется кинетическая теория, высокий уровень разви-

тия которой позволяет настоящему исследованию обходиться без эмпирической базы. Методологическая база включает специальные математические и вычислительные методы:

- асимптотические методы нелинейной теории возмущения;
- численные методы интегрирования систем дифференциальных уравнений в частных производных, специальные численные методы вычислительной гидродинамики;
- численные методы многомерного интегрирования;
- квадратурные методы решения интегральных уравнений;
- проекционные методы решения операторных уравнений;
- вариационное исчисление.

В работе использован широкий спектр современных компьютерных технологий и программных комплексов, включая

- системы компьютерной алгебры (SymPy [134]),
- генерацию расчётных сеток (gmsh [97]),
- организацию параллельных вычислений (MPI [115]),
- инструментарий вычислительной гидродинамики (OpenFOAM [213]),
- визуализацию полей (matplotlib [127]).

Численные решения уравнений КГФ и Больцмана получены с помощью соответствующих авторских кодов:

- солвера на основе алгоритма SIMPLE [58] snitSimpleFoam [180],
- программного комплекса анализа газокинетических процессов [11; 236].

В соответствии с результатами решения поставленных задач выдвигаются **основные положения, выносимые на защиту:**

1. Для многоточечных проекционных шаблонов выявлены критерии, минимизирующие требования к мощности множества кубатурных точек [181].
2. С точностью 8–10 знаков вычислены неизвестные ранее транспортные коэффициенты для газа твёрдых сфер, необходимые для вычисления тензора напряжений и вектора потока тепла в пограничном слое Прандтля [181].
3. Получено решение плоской задачи Куэтта для широкого диапазона чисел Кнудсена вплоть до гиперзвуковых скоростей. Абсолютная погрешность первых 13-ти моментов функции распределения не выше 10^{-4} [181].
4. Продемонстрировано, что КПИМДС на неравномерных прямоугольных сетках — надёжный инструмент для высокоточного анализа нелинейных

плоских кинетических слоёв. Отклонение от асимптотического решения не более 10^{-4} для нелинейных течений между параллельными пластина-ми с температурой, распределённой а) константно [181], б) синусоидаль-но [250].

5. На численных примерах показано, что использование совместимых гра-ничных условий первого и второго порядка для уравнений КГФ суще-ственno улучшает точность асимптотического решения. Исследованы, в том числе, граничные условия, учитывающие кривизну граничной по-верхности [250].
6. На основе численного параметрического анализа некоторых нелиней-ных течений газа между равномерно нагретыми телами в континуальном пределе было обнаружено, что обтекаемые тела притягиваются подобно электрически заряженным телам [180].

Достоверность полученных результатов обеспечивается следующими об-стоятельствами:

1. Кинетическое уравнение Больцмана выводится из первых принципов и содержит минимальное количество дополнительных допущений. В на-стоящем исследовании повсеместно используется газ твёрдых сфер и граничные условия полного диффузного отражения. Эксперименталь-ные данные свидетельствуют о том, что эти модели достаточно адекватно отражают реальные кинетические процессы в широком диапазоне нерав-новесности.
2. Проводится систематический сравнительный анализ результатов, полу-ченных с помощью КПИМДС, прямого статистического моделирования и асимптотического анализа уравнения Больцмана.
3. Проводится анализ сходимости численных методов на основе множества решений на разностных сетках различной мелкости.
4. Верификация используемых солверов и систем обработки данных вы-полнена на тестовых задачах, решение которых с высокой точностью пред-ставлено в литературе. Результаты находятся в полном соотвествии с результа-тами, полученными другими авторами.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались лично соис-кательем на

- семинаре сектора кинетической теории отдела механики ВЦ ФИЦ ИУ РАН (Москва, 2016),

- 2 Международном симпозиуме по аэродинамике, охватывающем различные режимы течений (Маньян, Китай, 2017),
- Всероссийской конференции по аэрогидродинамике, посвященной 100-летию со дня рождения С. В. Валландера (Санкт-Петербург, 2017).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 5 печатных изданиях, рекомендованных ВАК.

Объём и структура работы. Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и одного приложения. Полный объём диссертации составляет 147 страниц, включая 52 рисунка и 6 таблиц. Список литературы содержит 260 наименований.

Глава 1. Кинетическая теория газов

1.1 Основные понятия и уравнения

Кинетическая теория основывается на представлении о молекулярном строении вещества. Газом называется совокупность молекул, находящихся на столь больших расстояниях друг от друга, что молекулы большую часть времени слабо взаимодействуют друг с другом. Короткие промежутки времени, в течение которых молекулы сильно взаимодействуют, рассматриваются как *столкновения*. Если усредненной по времени потенциальной энергией взаимодействия молекул можно пренебречь по сравнению с их кинетической энергией, то газ называется *идеальным*. Практически газы из нейтральных молекул при давлениях до сотен атмосфер могут рассматриваться как идеальные. До этих же давлений вероятность тройных столкновений мала по сравнению с вероятностью двойных (или парных). В идеальном газе объём, занятый молекулами, мал по сравнению с объёмом, занятым газом. Другими словами, если d_m — эффективный диаметр молекулы, n_0 — число молекул в единице объёма, то в пределе $d_m \rightarrow 0$, $n_0 \rightarrow \infty$ в идеальном газе $n_0 d_m^3 \rightarrow 0$. Если при этом конечной остаётся *длина свободного пробега* молекул между столкновениями

$$\ell = \frac{1}{\sqrt{2\pi} d_m^2 n_0}, \quad (1.1)$$

то такой предельный континuum принято называть *газом Больцмана*.

1.1.1 Границы применимости физической модели

Предполагается, что движение молекул может быть описано с помощью классической ньютоновской механики. Квантовые эффекты существенны лишь при очень низких температурах и для легких молекул (водород, гелий, электроны). Для водорода и гелия квантовые поправки существенны уже при нормальных условиях. Большинство же газов сжижается при температуре, при которой ещё нет необходимости применять квантовую теорию столкновения молекул. Кванто-

вые эффекты необходимо учитывать при неупругих столкновениях атомов и молекул (возбуждение внутренних степеней свободы молекул, возбуждение электронных уровней и т. п.). Потенциалы упругих взаимодействий молекул также могут быть вычислены лишь с помощью квантовой механики. Однако при известном потенциале взаимодействия упругие столкновения могут быть рассмотрены классически. Релятивистские эффекты существенны лишь при очень больших температурах (больших скоростях молекул). Практически их можно не учитывать при температурах порядка десятков и сотен тысяч градусов.

1.1.2 Функция распределения скоростей

В диссертации повсеместно используются безразмерные переменные. Соответствующие размерные референсные значения содержат верхний индекс (0) . Пусть $x_i L$ (или $x L$) — прямоугольные координаты в физическом пространстве, а $\zeta_i \sqrt{2RT^{(0)}}$ (или $\zeta \sqrt{2RT^{(0)}}$) — молекулярная скорость. Здесь L и $T^{(0)}$ — референсные длина и температура, $R = k_B/m$ — удельная газовая постоянная, где $k_B = 1.380658 \times 10^{-23}$ Дж·К $^{-1}$ — постоянная Больцмана, m — масса отдельной молекулы. В шестимерном объёме $dxd\zeta$ в момент времени t находятся

$$dN = \frac{\rho^{(0)} L^3}{m} f(x, \zeta, t) dx d\zeta \quad (1.2)$$

молекул. f — функция распределения скоростей молекул в газе. $\rho^{(0)}$ — референсная плотность, $f^{(0)} = \rho^{(0)} / (2RT^{(0)})^{3/2}$.

Макроскопические переменные: плотность $\rho\rho^{(0)}$, скорость $v_i \sqrt{2RT^{(0)}}$, температура $TT^{(0)}$, тензор напряжений $p_{ij}p^{(0)} = p_{ij}\rho^{(0)}RT^{(0)}$ и вектор теплового потока $q_ip^{(0)}\sqrt{2RT^{(0)}}$, — определяются как соответствующие моменты функции распределения:

$$\rho = \int f(x, \zeta, t) d\zeta, \quad (1.3)$$

$$\rho v_i = \int \zeta_i f(x, \zeta, t) d\zeta, \quad (1.4)$$

$$\rho T = \frac{2}{3} \int (\zeta_i - v_i)^2 f(x, \zeta, t) d\zeta, \quad (1.5)$$

$$p_{ij} = 2 \int (\zeta_i - v_i)(\zeta_j - v_j) f(x, \zeta, t) d\zeta, \quad (1.6)$$

$$q_i = \int (\zeta_i - v_i)(\zeta_j - v_j)^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t) d\boldsymbol{\zeta}. \quad (1.7)$$

Трехмерное интегрирование по $\boldsymbol{\zeta}$ здесь и далее проводится во всём пространстве $\boldsymbol{\zeta}$. Безразмерное давление $p = p_{ii}/3 = \rho T$.

1.1.3 Уравнение Больцмана

Поведение функции распределения f определяется *уравнением Больцмана*

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \zeta_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial \zeta_i} = \frac{1}{k} J(f, f), \quad (1.8)$$

где билинейный оператор $J(f, g)$ выражается как

$$J(f, g) = \frac{1}{2} \int (f' g'_* + f'_* g' - f g_* - f_* g) B \left(\frac{|\alpha_j V_j|}{V}, V \right) d\Omega(\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\zeta}_*, \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} f &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t), & f_* &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}_*, t), \\ f' &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}', t), & f'_* &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}'_*, t), \\ \zeta'_i &= \zeta_i + \alpha_i \alpha_j V_j, & \zeta'_{i*} &= \zeta_{i*} - \alpha_i \alpha_j V_j, \\ \mathbf{V} &= \boldsymbol{\zeta}_* - \boldsymbol{\zeta}, & V &= \sqrt{V_i^2} = |V_i|. \end{aligned}$$

Предполагается, что внешняя сила $2F_i k_B T^{(0)}/L$, действующая на молекулу, не зависит от молекулярной скорости $\boldsymbol{\zeta}$, $\boldsymbol{\alpha}$ — единичный вектор, выражающий изменение направления молекулярной скорости из-за столкновения молекул, $\Omega(\boldsymbol{\alpha})$ — элемент телесного угла в направлении $\boldsymbol{\alpha}$, *столкновительное ядро* $B(|\alpha_i V_i|/V, V)$ — неотрицательная функция, определяемая межмолекулярным потенциалом. Интегрирование в (1.9) проводится по всему пространству $\boldsymbol{\zeta}_{i*}$ и по всем направлениям α_i (всей сферической поверхности) соответственно. Интеграл $J(f, f)$ называется *интегралом столкновения* или *столкновительным членом* уравнения Больцмана. Модифицированное число Кнудсена k вычисляется как

$$k = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{Kn} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\ell^{(0)}}{L} = \frac{m}{2\sqrt{2\pi} d_m^2 \rho^{(0)} L}. \quad (1.10)$$

В безразмерном виде (1.8) неявно учтено, что число Струхала равно единице, т. е. референсный отрезок времени $t^{(0)} = L/\sqrt{2RT^{(0)}}$.

Классификация столкновительных ядер

В упрощённом виде столкновительный интеграл можно переписать как

$$B = V^\gamma b(\cos \theta), \quad b(\cos \theta) \underset{\theta \rightarrow 0+}{\sim} \theta^{-2-\nu},$$

где θ — угол отклонения частиц, сталкивающихся со скоростями ζ и ζ_* . Степенному потенциалу межмолекулярного взаимодействия $U(r) = r^{1-s}$ ($s > 2$) соответствуют параметры

$$\gamma = \frac{s-5}{s-1} \in (-3,1), \quad \nu = \frac{2}{s-1} \in (0,2).$$

В зависимости от значения γ содержательна следующая классификация:

- модель твёрдых сфер $\gamma = 1$,
- жёсткие потенциалы $\gamma \in (0,1)$,
- максвелловский потенциал $\gamma = 0$,
- мягкие потенциалы $\gamma \in (-3,0)$,
- кулоновский потенциал $\gamma = -3$.

Все степенные потенциалы порождают неинтегрируемую *угловую сингулярность* вследствие слишком большого числа *скользящих столкновений* (при малых θ). Рассмотрение таких сингулярных потенциалов, называемых *дальнодействующими*, требует существенно более продвинутого математического аппарата. Многие результаты оказываются проще для *короткодействующих* потенциалов с обрезанием по углу [235]:

$$\int_0^\pi B(V, \cos \theta) \sin \theta d\theta < +\infty.$$

Для кулоновского потенциала вклад скользящих столкновений становится решающим, поэтому уравнение Больцмана в пределе $\nu \rightarrow 2$ сводится к уравнению Ландау [223].

На практике часто используют модельные потенциалы. Например, для газа, состоящего из упругих жёстких сфер,

$$B_{\text{HS}} = \frac{|\alpha_i V_i|}{4\sqrt{2\pi}}, \quad B^{(0)} = 4\sqrt{\pi} d_m^2 \sqrt{RT^{(0)}} \tag{1.11}$$

Эффективный диаметр молекул d_m обычно связывается с референсной вязкостью газа при $T^{(0)}$. Г. Бёрд предложил однопараметрическую модель [34], в которой

вязкость газа пропорциональна T^s ,

$$B_{\text{VHS}} = \frac{|\alpha_i V_i|}{4\sqrt{2\pi}\Gamma(\frac{5}{2} - s)} \left(\frac{V}{2}\right)^{1-2s}, \quad (1.12)$$

где $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}dt$ — гамма-функция. Среди двухпараметрических моделей наиболее распространена модель Леннарда—Джонса [133]. В настоящий момент с высокой точностью вычислены квантовомеханические *ab initio* потенциалы для всех стабильных инертных газов [122] и некоторых их смесей [131].

Вывод на основе законов механики

Обоснование своего кинетического уравнения, исходя из законов механики, было дано ещё Больцманом в эвристической форме на основании гипотезы *молекулярного хаоса* (*Stosszahlansatz*). Гильберт в своей знаменитой шестой проблеме поставил задачу строгого математического обоснования процессов предельного перехода от атомистического понимания к моделям сплошной среды. Такой переход может быть выполнен через промежуточный *мезоскопический* уровень описания на основе одночастичной функции распределения. Х. Грэду принадлежит первая математическая формулировка вывода уравнения Больцмана из уравнения Лиувилля [112]. Единственный строгий результат в общей постановке принадлежит О. Лэнфорду [138]. Ему удалось показать, что на коротком промежутке времени (порядка времени среднего пробега) цепочка уравнений ББГКИ для газа твёрдых сфер сходится в пределе Грэда—Больцмана почти везде к кинетическому уравнению. Глобальная по времени сходимость известна только для очень частного случая распространения газа в вакуум [129] или для малых флуктуаций отдельных частиц [31]. В. И. Герасименко и Д. Я. Петрина предоставили первые количественные оценки на множество патологических траекторий в оригинальном доказательстве Лэнфорда [248]. С. Юкай упростил и формализовал доказательство, используя теорему Коши—Ковалевской [203]. Обобщение теоремы Лэнфорда для короткодействующих потенцилов потребовало существенно более деликатного анализа событий асимптотически нулевой меры [94; 175]. Недавно французские математики Т. Бодино, И. Галлахер и Л. Сэн-Ремон получили количественные оценки для флуктуационного режима, что позволило обосновать

линейное уравнение Больцмана на временах порядка $\ln \ln N$ [44] и линеаризованное при $d = 2$ на временах порядках $\sqrt[4]{\ln \ln N}$ [43], где N — число частиц, заключённых в d -мерном торе. На основе их работ был достигнут первый успех для дальнодействующих потенциалов [21].

Симметрии и законы сохранения

Для произвольной функции $\varphi(\zeta)$ интеграл столкновения (1.9) удовлетворяет соотношению симметрии

$$\int \varphi(\zeta) J(f,g) d\zeta = \frac{1}{4} \int (\varphi + \varphi_* - \varphi' - \varphi'_*) J(f,g) d\zeta. \quad (1.13)$$

Поскольку $\zeta_i + \zeta_{i*} = \zeta'_i + \zeta'_{i*}$ и $\zeta_i^2 + \zeta_{i*}^2 = \zeta_i'^2 + \zeta_{i*}'^2$, то интеграл столкновений обладает несколькими *сумматорными инвариантами* ψ_r ($r = 0, 1, 2, 3, 4$):

$$\int \psi_r J(f,g) d\zeta = 0, \quad (1.14)$$

$$\psi_0 = 1, \quad \psi_i = \zeta_i, \quad \psi_4 = \zeta_i^2. \quad (1.15)$$

Другими словами, в результате столкновений сохраняются масса, импульс и энергия. Умножая уравнение Больцмана (1.8) на ψ_r и интегрируя результат по всему пространству ζ , получим *уравнения сохранения*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i) = 0, \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho v_i v_j + \frac{p_{ij}}{2} \right) = \rho F_i, \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(v_i^2 + \frac{3}{2} T \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho v_j \left(v_i^2 + \frac{3}{2} T \right) + v_i p_{ij} + q_j \right] = 2 \rho v_j F_j, \quad (1.18)$$

В классической гидрогазодинамике уравнения сохранения (1.16)–(1.18) замыкаются соответствующими феномологическими выражениями для p_{ij} и q_i . Например,

$$p_{ij} = p \delta_{ij}, \quad q_i = 0 \quad (1.19)$$

приводят к *уравнениям Эйлера*, а соотношения

$$p_{ij} = p \delta_{ij} - \Gamma_1(T) \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) k, \quad q_i = -\frac{5}{4} \Gamma_2(T) \frac{\partial T}{\partial x_i} k, \quad (1.20)$$

называемые законами Ньютона и Фурье соответственно, приводят к *уравнениям Навье—Стокса*. $\Gamma_1(T)$ и $\Gamma_2(T)$ — безразмерные коэффициенты *вязкости* и *теплопроводности* газа, зависящие от температуры T .

Равновесное состояние

Столкновительный член в уравнении Больцмана является диссипативным оператором, вызывающим релаксацию любого распределения к равновесному. Л. Больцман ввёл понятие \mathcal{H} -функционала

$$\mathcal{H}(f) = \int f \ln f d\zeta dx. \quad (1.21)$$

и доказал знаменитую \mathcal{H} -теорему, гласящую, что

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = - \int D(f) dx \leq 0, \quad (1.22)$$

где определён функционал *производства энтропии*

$$\mathcal{D}(f) = - \int J(f, f) \ln f d\zeta. \quad (1.23)$$

Равенство в (1.22) достигается только для *распределения Максвелла*

$$f_M = \frac{\rho}{(\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\zeta_i - v_i)^2}{T}\right), \quad (1.24)$$

для которого $J(f_M, f_M) = 0$. \mathcal{H} -теорема отражает второе начало термодинамики.

Линеаризация

Рассмотрим стационарный газ ($\partial/\partial t = 0$) при отсутствии внешних сил ($F_i = 0$) с функцией распределения близкой к абсолютному распределению Максвелла $E(\zeta)$:

$$\varphi = \frac{f}{E} - 1 \ll 1, \quad E(\zeta) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \exp(-\zeta^2). \quad (1.25)$$

В таком случае справедливо линеаризованное уравнение Больцмана

$$\zeta_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = \frac{1}{k} \mathcal{L}(\varphi), \quad (1.26)$$

с линеаризованным интегралом столкновения

$$\mathcal{L}(\varphi) = \int E_*(\varphi' + \varphi'_* - \varphi - \varphi_*) B d\Omega(\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\zeta}_*. \quad (1.27)$$

Возмущённое локальное максвелловское распределение

$$\varphi_M = \omega + 2\zeta_i v_i + \left(\zeta_i^2 - \frac{3}{2} \right) \tau \quad (1.28)$$

удобно выражается через возмущённые макроскопические переменные:

$$\omega = \rho - 1, \quad \tau = T - 1, \quad P = p - 1, \quad P_{ij} = p_{ij} - \delta_{ij}, \quad (1.29)$$

которые вычисляются как моменты φ :

$$\begin{aligned} \omega &= \int \varphi E d\boldsymbol{\zeta}, \quad v_i = \int \zeta_i \varphi E d\boldsymbol{\zeta}, \quad \tau = \frac{2}{3} \int \left(\zeta_i - \frac{3}{2} \right)^2 \varphi E d\boldsymbol{\zeta}, \\ P &= \tau + \omega, \quad P_{ij} = 2 \int \zeta_i \zeta_j \varphi E d\boldsymbol{\zeta}, \quad Q_i = \int \zeta_i \zeta_j^2 \varphi E d\boldsymbol{\zeta} - \frac{5}{2} v_i \end{aligned} \quad (1.30)$$

Линейный оператор $\mathcal{L}(\varphi)$, также как и $J(f,g)$, удовлетворяет соотношению симметрии

$$\int \psi(\boldsymbol{\zeta}) \mathcal{L}(\varphi) E d\boldsymbol{\zeta} = \frac{1}{4} \int EE_*(\psi + \psi_* - \psi' - \psi'_*)(\varphi' + \varphi'_* - \varphi - \varphi_*) B d\Omega d\boldsymbol{\zeta}_* d\boldsymbol{\zeta}. \quad (1.31)$$

С помощью (1.31) несложно показать, что в гильбертовом пространстве со скалярным произведением $\langle \varphi, \psi \rangle = \int \varphi \psi E d\boldsymbol{\zeta}$ оператор $\mathcal{L}(\varphi)$ самосопряжён и неположителен:

$$\langle \varphi, \mathcal{L}\psi \rangle = \langle \mathcal{L}\varphi, \psi \rangle, \quad \langle \varphi, \mathcal{L}\varphi \rangle \leq 0, \quad (1.32)$$

причём равенство выполняется только для инвариантов столкновения ψ_r , которые являются собственными векторами для собственного значения $\lambda = 0$.

Спектр линеаризованного оператора существенно зависит от столкновительного ядра. Качественное изменение спектра степенного потенциала происходит, когда молекулы становятся максвелловскими (табл. 1). Для немягких потенциалов характерна спектральная щель, соответствующая модулю наибольшего отрицательного собственного числа. Спектр максвелловского потенциала всегда дискретен, но ограничен при обрезании по углу, в то время как спектр мягких и жёстких потенциалов становится непрерывным на соответствующем отрезке.

Таблица 1 — Спектр линеаризованного уравнения Больцмана для степенного потенциала.

	мягкие	максвелловский	жёсткие
истинные			
обрезанные			

1.1.4 Границные условия

Для газа заключённого с физическую область Ω граничные условия можно записать в достаточно общем виде

$$f_B(\mathbf{x}, \zeta, t) = \int_{(\zeta_{*i} - v_{Bi})n_i < 0} \mathcal{R}(\zeta, \zeta_*, \mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}, \zeta_*, t) d\zeta_* \quad (x \in \partial\Omega, (\zeta_i - v_{Bi})n_i > 0), \quad (1.33)$$

где n_i — единичная нормаль, направленная в сторону газа, v_{Bi} — скорость перемещения граничной поверхности, а на ядро рассеяния \mathcal{R} может быть наложены следующие условия:

$$\mathcal{R}(\zeta, \zeta_*) \geq 0, \quad (1.34)$$

$$-\int_{(\zeta_i - v_{Bi})n_i > 0} \frac{(\zeta_k - v_{Bk})n_k}{(\zeta_{j*} - v_{Bj})n_j} \mathcal{R}(\zeta, \zeta_*) d\zeta = 1, \quad (1.35)$$

$$\int_{(\zeta_{*i} - v_{Bi})n_i < 0} \mathcal{R}(\zeta, \zeta_*) f_B(\zeta_*) d\zeta_* = f_B(\zeta), \quad f_B = f_M(\rho_B, \mathbf{v}_B, T_B). \quad (1.36)$$

Условие (1.35) соответствует непористой и неабсорбирующей граничной поверхности (поток массы через неё равен нулю). Условие (1.36) требуется только от ядра рассеяния, зависящего от плотности ρ_B , скорости \mathbf{v}_B и температуры T_B граничной поверхности.

На практике для твёрдой непроницаемой границы наиболее распространена однопараметрическая модель Максвелла

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_M(\zeta, \zeta_*) = & (1 - \alpha_M) \delta[\zeta_{*i} - \zeta_i + 2(\zeta_j - v_{Bj})n_j n_i] \\ & - \frac{2\alpha_M}{\pi T_B^2} (\zeta_{j*} - v_{Bj}) n_j \exp\left(-\frac{(\zeta_k - v_{Bk})^2}{T_B}\right), \end{aligned} \quad (1.37)$$

где $\alpha_M \in [0, 1]$ — коэффициент аккомодации, $\delta(\zeta)$ — дельта-функция. В настоящем исследовании повсеместно используются граничные условия *диффузного отражения*.

жения, соответствующие $\alpha_M = 1$. Они линеаризуются следующим образом:

$$\begin{aligned}\varphi_B(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\zeta}) &= \sigma_B + 2\zeta_j v_{Bj} + \left(\zeta_i - \frac{3}{2}\right)^2 \tau_B \quad (\zeta_j - v_{Bj})n_j > 0, \\ \sigma_B &= \sqrt{\pi}v_{Bj}n_j - \frac{\tau_B}{2} - 2\sqrt{\pi} \int_{(\zeta_j - v_{Bj})n_j < 0} \zeta_j n_j \varphi E d\boldsymbol{\zeta}.\end{aligned}\quad (1.38)$$

Зеркальное отражение осуществляется при $\alpha_M = 0$.

М. Лампис и К. Черчиньяни предложили двухпараметрическую модель [66]:

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_{CL}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\zeta}_*) &= \frac{2\zeta_n}{\pi\alpha_n\alpha_t(2-\alpha_t)T_B^2} I_0\left(\frac{2\sqrt{1-\alpha_n}\zeta_n\zeta_{n*}}{\alpha_n T_B}\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{[\zeta_n^2 + (1-\alpha_n)\zeta_{n*}^2]^2}{\alpha_n T_B} - \frac{[\zeta_{tk} + (1-\alpha_t)\zeta_{tk*}]^2}{\alpha_t(2-\alpha_t)T_B}\right),\end{aligned}\quad (1.39)$$

где $\zeta_n = (\zeta_i - v_{Bi})n_i$ и $\zeta_{ti} = \zeta_j(\delta_{ij} - n_i n_j)$,

$$I_0 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(x \cos t) dt. \quad (1.40)$$

В (1.39) используются коэффициенты аккомодации

- касательной компоненты импульса $\alpha_t \in [0, 2]$,
- нормальной кинетической энергии $\alpha_n \in [0, 1]$.

1.1.5 Модельные уравнения

Широкий круг нелинейных задач изучен с высокой точностью для упрощённого (модельного) столкновительного оператора

$$J_{BGK}(f, f) = \frac{\rho}{k}(f_M - f), \quad (1.41)$$

предложенного М. Круком [32] и независимо П. Веландером [212]. В линеаризованной постановке

$$\mathcal{L}_{BGK}(\varphi) = -\varphi + \omega + 2\zeta_i v_i + \left(\zeta_i^2 - \frac{3}{2}\right) \tau. \quad (1.42)$$

Основной недостаток *модели Крука—Веландера* — это фиксированное число Прандтля $\text{Pr} \stackrel{\text{def}}{=} \Gamma_1(T)/\Gamma_2(T)$ ($\text{Pr}_{BGK} = 1$). Этого недостатка лишены *модель Холвея* [125]

$$J_{ES}(f, f) = \rho \left[\frac{\rho \sqrt{\det A_{ij}}}{(\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{A_{ij} c_i c_j}{T}\right) - f \right], \quad A_{ij}^{-1} = \frac{\delta_{ij}}{\text{Pr}} - \frac{1 - \text{Pr}}{\text{Pr}} \frac{p_{ij}}{p}, \quad (1.43)$$

подстраивающая тензор напряжений, и модель Шахова [259]

$$J_S(f,f) = \rho \left[f_M \left(1 + \frac{1 - \Pr}{5} \frac{q_i c_i}{pT} (2c_i^2 - 5) \right) - f \right], \quad (1.44)$$

корректирующая вектор потока тепла. В (1.43) и (1.44) использовано сокращение $c_i = \zeta_i - v_i$.

Модель Шахова, вообще говоря, применима только для слабонеравновесного газа, в противном случае функция распределения может принимать отрицательные значения. Модель Холвея, как видно из определения, больше подходит для медленных неизотермических течений, где процессы теплопроводности существенно превалируют над вязкостными. Её популярность резко возрасла, после того как в 1999 году для неё была доказана \mathcal{H} -теорема [10]. Простота модельного столкновительного оператора обуславливает широкое разнообразие соответствующих численных методов. Практические расчёты показывают, что разреженный газ, особенно с невысокой степенью неравновесности, достаточно адекватно описывается модельными уравнениями, однако в настоящее время не представляется возможным произвести какие-либо априорные оценки отклонения от истинного решения уравнения Больцмана.

1.2 Математическая теория задачи Коши

Методы численного анализа и асимптотическая теория уравнения Больцмана тесно связаны с математической теорией задачи Коши. Строгий анализ краевых задач представляет существенные трудности, поэтому в текущем разделе представлены известные результаты прежде всего для однородной в физическом пространстве задачи, а также для бесконечного пространства $\Omega = \mathbb{R}^d$ и тора $\Omega = \mathbb{T}^d$.

1.2.1 Пространственно-однородная задача

Задача Коши для пространственно-однородного уравнения Больцмана наиболее изучена. Она имеет особую важность для численных методов, поскольку

в большинстве из них используется расщепление на транспортный и столкновительный операторы. Кроме того, пространственная однородность устойчива в том смысле, что слабая неоднородность распространяется во времени [15]. На сегодняшний день известно только одно семейство явных нестационарных решений, найденное А. В. Бобылевым [226] и независимо М. Круком, Т. Ву [137] для максвелловского газа.

Количественные оценки для полиномиальных моментов

$$\|f(t)\|_{L_s^1} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^d} |\zeta|^s f(t, \zeta) d\zeta \quad (s > 2)$$

являются базовым инструментом в пространственно-однородной теории и отражают поведение функции распределения для больших молекулярных скоростей. Равномерная ограниченность полиномиальных моментов позволяет сразу же доказать существование и единственность решения, а также \mathcal{H} -теорему Больцмана. Первые такие результаты принадлежат Т. Карлеману [60] и А. Я. Повзнеру [249] для газа твёрдых сфер, Д. Моргенштерну [154] для макселловского газа. Общую L^1 -теорию для класса жёстких короткодействующих потенциалов развил Л. Аркерюд в 1971 году [17]. С. Мишлер и Б. Веннберг максимально ослабили начальные предположения в задаче Коши, предоставив доказательство в предположении лишь конечности массы и энергии [153]. В общем случае энергия неубывает со временем, однако единственность в L^1 достигается только в классе решений с постоянной энергией [214].

Множество других важных результатов получено для немягких короткодействующих потенциалов:

- существование максвелловской нижней границы [173; 174],
- распространение гладкости, экспоненциальное убывание разрывов [62; 158],
- распространение максвелловской верхней границы [39; 95].

Столкновительное ядро имеет наиболее простой вид $B = B(\cos \theta)$ для максвелловского потенциала, поэтому математические результаты для него, как правило, предшествуют исследованиям других потенциалов, однако в отличие от жёстких потенциалов полиномиальные моменты максвелловского газа равномерно ограничены лишь при условии их ограниченности в начальный момент времени.

Меньше известно о поведении газа с мягкими потенциалами. Прежде всего нет доказательства равномерной ограниченности полиномиальных моментов, есть только оценка $\|f(t)\|_{L_s^1} < C(1+t)$ при $\|f(0)\|_{L_s^1} < \infty$ [61]. При $\gamma < 0$ столкно-

вительное ядро обретает дополнительную *кинетическую сингулярность* в точке $\zeta = \zeta_*$, поэтому смысл в L^1 имеют только слабые формы столкновительного интеграла. Его симметричные свойства (законы сохранения) позволяют построить решения при $\gamma \geq -2$ и $\nu < 2$ [16; 108]. Используя конечность производства энтропии, удаётся регуляризовать столкновительный оператор при $\gamma > -4$ [209].

Сходимость к равновесию

Долгую историю имеет проблема сходимости решения к равновесному максвелловскому распределению M . Она тесно связана со спектральными свойствами линеаризованного столкновительного оператора. Как известно, он имеет пятикратное нулевое собственное значение, остальные отрицательные. Наличие спектральной щели (конечное расстояние между максимальным отрицательным собственным значением и нулевым) для немягких потенциалов ведёт к экспоненциальному затуханию $O(e^{-\lambda t})$ возмущённых решений [110]. Напротив, отсутствие спектральной щели у мягких потенциалов позволяет рассчитывать только на оценку $O(e^{-\lambda t^\alpha})$, где $\alpha \in (0,1)$ [53].

Теория сходимости к равновесию в L^1 также берёт начало с работы Л. Аркерюда 1988 года [18], в которой была показана экспоненциальная скорость для твёрдых потенциалов. Однако этот результат был получен неконструктивными методами. С физической точки зрения крайне важно иметь явные оценки сходимости, поскольку на очень большом временном промежутке уравнение Больцмана теряет смысл (парадокс Цермёло).

\mathcal{H} -функционал (энтропия со знаком минус) выполняет роль функционала Ляпунова для уравнения Больцмана, поэтому в соответствии с принципом Красовского—Ласалля производство энтропии для уравнения Больцмана — основной инструмент для контроля сходимости к равновесию в нелинейной постановке. Более того, согласно неравенству Чисара—Кульбака—Пинскера большинская энтропия гарантирует сходимость непосредственно в L^1 . В связи с этим К. Черчиньи в 1982 году предположил, что производство энтропии связано линейным неравенством с самой энтропией [65; 78], однако позже он вместе с А. В. Бобылевым построили контрпример для $\gamma \in (0,2)$ [38]. Дж. Тоскани и С. Виллані полу-

чили оптимальный результат в виде [199; 200; 207]

$$\mathcal{D}(f) \geq \lambda_\varepsilon [\mathcal{H}(f) - \mathcal{H}(M)]^{1+\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0.$$

Такой результат обеспечивает полиномиальную сходимость $O(t^{-\infty})$. Первоначальная гипотеза Черчиньяни оказалась верна только для нефизичного случая $\gamma = 2$ [207].

Приведённые явные оценки на темп производства энтропии справедливы на чисто функциональном уровне, поэтому они могут быть улучшены для полугруппы, порождаемой уравнением Больцмана. В 1997 году Э. Карлен, Э. Габетта и Дж. Тоскáни получили оптимальный результат для максвелловского газа [62]

$$\|f(t) - M\|_{L^1} \leq C_\varepsilon e^{-(1-\varepsilon)\lambda_g t}, \quad \varepsilon > 0,$$

где λ_g — ширина спектральной щели, а ε тем меньше, чем больше полиномиальных моментов ограничено. Если же в начальном условии ограничена лишь энергия, то существуют сколь угодно медленно сходящиеся к равновесию решения для нежёстких потенциалов [61; 63]. Для жёстких потенциалов К. Муо в 2005 году разработал инструменты расширения функционального пространства для линеаризованной полугруппы, позволяющие соединить спектральные результаты в $L^2(M^{-1})$ с нелинейной L^1 -теорией [155]. Таким образом, явные оценки на ширину спектральной щели [26] обеспечили оптимальную сходимость $O(e^{-\lambda_g t})$.

Дальнодействующие потенциалы

В XX веке дальнодействующим потенциалам было посвящено считанное количество работ. Ё.-П. Пао ещё в 1974 году с помощью теории псевдо-дифференциальных операторов показал, что спектр линеаризованного уравнения полностью дискретен [166]. Давно было известно, что сингулярные операторы способны повышать гладкость решения, однако соответствующие результаты для уравнения Больцмана долгое время были недоступны из-за высокой технической сложности. В 1994 году Л. Девиллет смог доказать, что решение модельного уравнения Каца лежит в пространстве Соболева при $t > 0$ [74]. В 1997 году П.-Л. Лионс впервые установил функциональную связь между производством энтропии и

гладкостью функции распределения [143]. В 1999 году Р. Александре, Л. Девиллет, Б. Веннберг и С. Виллани довели этот результат до оптимальной в некотором смысле оценки [2]

$$\|\sqrt{f}\|_{H^{\nu/2}(|\zeta| < R)} \leq C_R \left[\mathcal{D}(f) + \|f\|_{L_2^1}^2 \right], \quad R > 0.$$

Другими словами, сингулярный бульмановский столкновительный оператор ведёт себя как дробный лапласиан $-(-\Delta)^{\nu/2}$. С физической точки зрения это означает, что процесс межмолекулярного взаимодействия в бульмановском пределе является диффузно-столкновительным. Важную роль в доказательстве этого функционального неравенства играет преобразование Фурье, приложение которого к уравнению Бульмана было систематически изучено А. В. Бобылевым [228].

Единственность решения в глобальном смысле $t \in [0, +\infty]$ в соболевском пространстве установлена для максвелловского газа [198] и жёстких потенциалов в случае умеренной угловой сингулярности $\nu \in (0,1)$ [77] и сильной $\nu \in [1,2)$ [120]. При условии гладкости $b(\cos \theta)$ оказывается, что функция распределения лежит в пространстве Шварца, пока её полиномиальные моменты ограничены [3; 79]. Более того, для максвелловского газа известно, что регулярность по Жевре распространяется [75]. Экспоненциальная сходимость с явными оценками в L^1 для дальнодействующих немягких потенциалов была доказана совсем недавно [150; 201]. Сходимость для мягких потенциалов известна лишь в усреднённом смысле [61].

1.2.2 Пространственно-неоднородная задача

Пространственно-неоднородная задача принципиально сложнее для анализа. Строгая линеаризованная теория была построена Х. Грэдом [110]. Он же в 1964 году получил первые результаты в рамках нелинейной теории возмущения, доказав существование, единственность возмущённого решения и стремление его к термодинамическому равновесию, однако только для локального интервала времени [111]. В 1974 году С. Юкай представил глобальный результат в ограниченной области для жёстких короткодействующих потенциалов [202]. Р. Кафлиш обобщил его для $\gamma > -1$ [54]. Спектральный анализ не позволяет продвинуться дальше границы $\gamma = -2$. Я. Го предложил альтернативный метод, который

позволил рассмотреть очень мягкие потенциалы [117], Экспоненциальная сходимость в ограниченной области для них была доказана позже совместно с Р. Стрейном [194]. В 2010 году Ф. Грессман и Р. Стрейн, используя нетривиальные анизотропные соболевские нормы [157] для метода Го, показали асимптотическую устойчивость для всех дальнодействующих потенциалов [114]. Оказалось, что при наличии угловой сингулярности $\nu > 0$ спектральная щель и соответствующая ей экспоненциальная сходимость имеют место при $\gamma + \nu \geq 0$. Такой же результат, но для неограниченной области был независимо получен гонконгской группой [4—6]. Сходимость в \mathbb{R}^d алгебраическая. Для $\gamma > -1$ С. Юкай и К. Асано доказали это ещё в 1982 году [204]. Р. Стрейн получил оптимальную оценку $O(t^{-\frac{n}{2} + \frac{n}{2r}})$ в $L_x^r L_\zeta^2$ при $r \in [2, \infty]$ [193].

Единственная на сегодняшний день L^1 -теория, описывающая решения полного уравнения Больцмана без дополнительных предположений об их малости, принадлежит Р. ди Перна и П.-Л. Лионсу [84] и отмечена Филдсовской премией 1994 году. Им удалось доказать существование слабого решения в *ренормализованной* форме

$$\frac{\partial \beta(f)}{\partial t} + \zeta_i \frac{\partial \beta(f)}{\partial x_i} = \beta'(f) J(f, f),$$

где $\beta'(f) \leq C/(1 + f)$. Позже П.-Л. Лионс упростил доказательство, используя теорию интегральных операторов Фурье [142], а Р. Александре и С. Виллани обобщили его для дальнодействующих потенциалов [7]. Основная идея ренормализации — получить в правой части сублинейный оператор вместо квадратичного $J(f, f)$. В такой постановке априорных оценок для массы, энергии и энтропии оказывается достаточно для построения сходящейся последовательности глобальных решений. Несмотря на достигнутый успех, связанный с устойчивостью, теория ди-Перна—Лионса ничего не говорит о единственности решения, его положительности, сохранении энергии, стремлении к равновесию. Стоит упомянуть также частный результат Р. Иллнера и М. Шинброта о существовании и единственности решения вблизи вакуума [130].

В теории ди-Перна—Лионса центральную роль играют леммы об осреднении в скоростном пространстве (velocity-averaging lemmas), обеспечивающие гладкость макроскопических величин для достаточно произвольной функции распределения [101]. В. И. Агошкову принадлежит первый подобный результат для уравнения переноса [220]. Независимо лемму открыли Ф. Гольс, Б. Пертам и Р. Сентис [102]. Ф. Гольс и Л. Сэн-Ремон нашли доказательство в L^1 [105].

Несмотря на отсутствие общей теории сходимости к равновесию, Л. Девиллет и С. Виллани смогли получить условный результат в ограниченной области через явные оценки на поведение \mathcal{H} -функционала [73]. Они доказали, что если все полиномиальные моменты равномерно ограничены, то бесконечно гладкое строго положительное решение уравнения Больцмана стремится к равновесию по меньшей мере с полиномиальной скоростью $O(t^{-\infty})$. Характерной особенностью динамики большинства газов на больших временах является чередование режимов близких к гидродинамическому и пространственно-однородному, вследствие чего образуются временные осцилляции производства энтропии [91]. Позже С. Виллани на основе полученного результата развили абстрактную теорию *гипокоэрцитивности* [208] для анализа сходимости полугрупп, порождаемых вырожденными операторами, по аналогии с теорией гипоэллиптичности Колмогорова—Хёрмандера. За эти работы, а также исследование нелинейного затухания Ландау, С. Виллани в 2010 году был удостоен Филдсовской медали. М. Гуалдани, С. Мишлер и К. Муо обобщили пространственно-однородный результат Муо [155] и разработали абстрактный метод сочетания количественного спектрального анализа с энтропийными методами [116].

Ещё один важный результат был получен Т.-П. Лю и Ш.-С. Ю в рамках теории функции Грина [146; 148]. Они продемонстрировали, что затухание любого возмущения, описываемого линеаризованным уравнением Больцмана, может быть разложено на кинетическую составляющую, убывающую экспоненциально, и гидродинамическую, амплитуда которой спадает полиномиально в \mathbb{R}^3 .

1.3 Асимптотическая теория

Состояние газа в уравнении Больцмана определяется функцией распределения $f(\mathbf{x}, \zeta)$. Приняв, что число Кнудсена определённым образом стремится к нулю, можно перейти к менее детальному *гидродинамическому описанию*, которое требует задания лишь первых пяти моментов от f : плотности, скорости и температуры. В общем случае при таком асимптотическом переходе $f(\mathbf{x}, \zeta)$ является функционалом от $\rho(\mathbf{x})$, $v_i(\mathbf{x})$ и $T(\mathbf{x})$. Если ограничиться нулевым порядком по k в уравнении Больцмана (1.8), то $f(\zeta)$ в таком пределе станет точечной функцией от ρ , v_i и T . Другими словами, мы получим уравнения Эйлера, описывающие

локально максвелловское распределение. Если левая часть уравнения Больцмана остаётся конечной при малом k , тогда столкновительный член $J(f,f) = O(k)$, таким образом асимптотическая теория изучает малое отклонение от локально максвелловского распределения.

Формальное разложение уравнения Больцмана по степеням некоторого параметра было впервые предложено Д. Гильбертом [123; 124]:

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} k^n f_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\zeta}, t). \quad (1.45)$$

В общем случае нельзя ожидать сходимость этого ряда. Более того решение вида (1.45) представляет собой весьма узкий класс решений, поскольку всякое такое разложение однозначно определяется гидродинамическим состоянием, что несложно показать используя теорему Гильbertа о единственности.

Если известно, что $f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\zeta})$ зависит только от макроскопических переменных ρ_r :

$$\rho_0 = \rho, \quad \rho_i = v_i, \quad \rho_4 = T, \quad (1.46)$$

и их градиентов произвольного порядка $\nabla \rho_r = \partial \rho_r / \partial x_i, \partial^2 \rho_r / \partial x_i \partial x_j, \dots$, то задача получения совместимых гидродинамических уравнений может быть решена проще с помощью *разложения Чемпена—Энского* [87; 254]:

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} k^n f_n(\rho_r, \nabla \rho_r, \boldsymbol{\zeta}). \quad (1.47)$$

В общем подход Чемпена—Энского является методом сокращения информации, широко применяемого в нелинейной теории возмущения [45; 229].

Существенной особенностью перехода к *континуальному пределу* ($k \rightarrow 0$) в уравнении Больцмана является разделение двух различных временных масштабов времени. Первый масштаб — средний интервал времени между столкновениями $O(k)$, второй — время макроскопического распада посредством механизмов диффузии и теплопередачи $O(k^{-1})$. С физической точки зрения, первый период соответствует релаксации \mathcal{H} -функционала до термодинамической энтропии, а второй — релаксации энтропии к своему максимальному значению.

Асимптотическое решение уравнения Больцмана для слаборазреженного газа допускает отделение достаточно гладкой гидродинамической части от существенно неравновесных пространственно-временных *кинетических пограничных слоёв*:

Эйлер

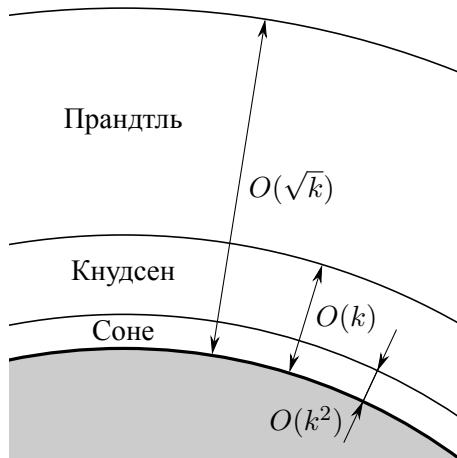


Рисунок 1.1 — Многослойная (многопалубная) структура течения слаборазреженного газа около выпуклого тела: в невязкой области $n_i \partial f / \partial x_i = O(f)$; в слое Прандтля $\sqrt{k} n_i \partial f / \partial x_i = O(f)$; в слое Кнудсена $k n_i \partial f / \partial x_i = O(f)$; в слое Соне f разрывна.

- начальный слой, возникающий в момент времени $t = 0$;
- пристеночный слой, возникающий возле физической границы;
- ударный слой, возникающий непосредственно в газе.

Явное выделение этих слоёв возможно лишь для малых k , когда оба временных масштаба отличаются существенно. Функция распределения в них содержит экспоненциальный фактор с множителем $1/k$. Пристеночный кинетический слой можно разделить на

- слой Кнудсена толщиной $O(k)$,
- слой Соне толщиной $O(k^2)$ [187].

Последний характеризуется проникновением тангенциальных разрывов в скоростном пространстве внутрь области с газом и возникает исключительно вокруг выпуклых поверхностей, поскольку все разрывы распространяются вдоль характеристик. Кроме кинетических можно выделить вязкий пограничный слой (слой Прандтля) толщиной $O(\sqrt{k})$.

В зависимости от максимального порядка рассматриваемых членов из разложения Чемпена—Энскога можно получить уравнения Эйлера, уравнения Навье—Стокса для сжимаемых течений, уравнения Барнетта, супербарнеттовские уравнения и т. д. В отличие от разложения Гильберта, в этих системах растёт порядок дифференциальных уравнений с увеличением порядка учитываемых членов.

При этом известно, что задача Коши для уравнений Барнетта и следующих за ним является некорректно поставленной. В частности, амплитуда акустических волн, описываемых этими уравнениями для максвелловских молекул, растёт со временем [227]. Другими словами, получаемые решения нестабильны по отношению к коротковолновым возмущениям. Для краевой задачи уравнения Барнетта и следующие за ним могут также давать нефизичные решения [258]. Причина этих проблем заключается в том, что в уравнениях, получаемых с помощью разложения Чемпена—Энского, происходит смешивание членов различного порядка по k . По этой же причине, уравнения Навье—Стокса для сжимаемых течений являются поправкой первого порядка к уравнениям Эйлера, но не асимптотическим решением уравнения Больцмана. А. В. Бобылев предложил метод регуляризации уравнений Барнетта, основанный на дополнительном перемешивании членов старшего порядка [37].

Строгое асимптотическое решение можно получить с помощью разложения Гильberta, однако при конечных числах Маха оно имеет весьма сложную структуру (рис. 1.1), поскольку требуется сращивание решений уравнений Эйлера, уравнений Прандтля в вязких граничных слоях и непосредственно уравнения Больцмана в кинетических граничных слоях [189]. Поэтому на практике численный анализ течений проводится с помощью только лишь уравнений Навье—Стокса для сжимаемых течений, сочетающих несколько упомянутых временных масштабов.

При различном пространственно-временном масштабировании асимптотическая система уравнений гидродинамического типа может содержать макроскопические переменные разного порядка [30]. В некоторых случаях это приводит к тому, что инфинитезимальные в континуальном пределе величины конечным образом влияют на поля макроскопических переменных нулевого порядка. Поскольку эти величины ненулевого порядка формально не существуют в континуальном мире, то Ё. Соне предложил ввести понятие призрак-эффекта (ghost effect) для описания такого предельного поведения [184].

1.3.1 Обзор строгих математических результатов

Строгая асимптотическая теория тесно связана с развитием математической теории самих гидродинамических уравнений. Ж. Лерé в своих классических трудах доказал существование слабых решений уравнений Навье—Стокса для несжимаемой жидкости [139]. К. Бардос, Ф. Гольс и Д. Левермор впервые поставили задачу сходимости к ним ренормализованных решений ди-Перна—Лионса [29] и получили первые частные результаты [28] вместе с П.-Л. Лионсом и Н. Масмоуди [144]. В 2004 году Ф. Гольс и Л. Сен-Ремон построили доказательство для ограниченных ядер [104] и позже обобщили для неограниченных [103]. Окончательно *программу Бардоса—Гольса—Левермора* завершил тунисский математик Н. Масмоуди, распространив результат для дальнодействующих потенциалов [140].

Строгая асимптотическая теория для сжимаемых течений далека от своей зрелости. Частичные результаты о сходимости к гладким решениям уравнений Эйлера принадлежат Т. Нишиде [160] и Р. Кафлишу [55]. Больцмановская динамика процессов высокой частоты (сравнимой с частотой столкновений молекул) качественно отличается от классической гидродинамики на основе линейных законов Ньютона и Фурье. На основе множества работ И. В. Карлина, А. Н. Горбаня, М. Слемрода совместно с другими авторами, можно сделать вывод, что в пределе малых чисел Кнудсена и конечных числах Маха корректные уравнения гидродинамического типа должны демонстрировать константную диссиацию высокочастотных мод и существенно нелокальный характер [106].

Пограничные кинетические слои моделируются краевыми задачами в полу-пространстве [113]. Соответствующие им теоремы существования и единственности решения линеаризованного уравнения Больцмана для газа твёрдых сфер были доказаны Н. Б. Масловой [246] и независимо К. Бардосом, Р. Кафлишем, Б. Николаенко [27]. Пограничный слой с конденсацией и испарением изучен К. Черчиньни [64] и учениками К. Бардоса [71]. Нелинейная теория заложена в трудах Л. Аркерюда, А. Нури [19], С. Юкая, Т. Янга, Ши-Сянь Ю [205] и Ф. Гольса [100]. Кинетическая теория ударных волн развита только для малых амплитуд. Для жёстких короткодействующих потенциалов ударный профиль впервые был построен Р. Кафлишем и Б. Николаенко [57]. Его стабильность, позитивность [145] и монотонность [147] была показана Тай-Пин Лю и Ши-Сянь Ю.

1.3.2 Слабовозмущённые течения

Рассмотрим слаборазреженный газ, описываемый стационарным линеаризованным уравнением Больцмана (1.26). Абстрагируясь сначала от граничных условий, будем искать решение в виде степенного ряда, называемого *разложением Грэда—Гильберта* (будем приписывать индекс G),

$$\varphi_G(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\zeta}) = \sum_{m=0}^{\infty} \varphi_{Gm}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\zeta}) k^m, \quad (1.48)$$

подразумевая, что

$$\frac{\partial \varphi_G}{\partial x_i} = O(\varphi_G). \quad (1.49)$$

Соответствующие макроскопические величины $h_G = \omega_G, v_{iG}, \tau_G, \dots$ также могут быть разложены в ряд

$$h_G(\boldsymbol{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} h_{Gm}(\boldsymbol{x}) k^m. \quad (1.50)$$

Подставляя (1.48) в (1.26) и приравнивая члены одного порядка по k , получаем ряд интегральных уравнений для φ_{Gm} :

$$\mathcal{L}(\varphi_{G0}) = 0, \quad (1.51)$$

$$\mathcal{L}(\varphi_{Gm}) = \zeta_i \frac{\partial \varphi_{Gm-1}}{\partial x_i} \quad (m = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.52)$$

Однородное уравнение (1.51) имеет решение в виде возмущённого распределения Максвелла (1.28), а для неоднородных уравнений (1.52) должны выполняться условия разрешимости

$$\int \psi_r \zeta_i \frac{\partial \varphi_{Gm-1}}{\partial x_i} E d\boldsymbol{\zeta} = 0, \quad (1.53)$$

где ψ_r — инварианты столкновений (1.15). В силу изотропных свойств оператора \mathcal{L} первые члены разложения Грэда—Гильберта имеют вид

$$\begin{aligned} \varphi_G = \varphi_{GM} & - \left(\zeta_i \zeta_j B(\zeta) \frac{\partial v_{iG}}{\partial x_j} + \zeta_i A(\zeta) \frac{\partial \tau_G}{\partial x_i} + \frac{1}{\gamma_1} \zeta_i D_1(\zeta) \frac{\partial P_G}{\partial x_i} \right) k \\ & + \left(\zeta_i \zeta_j \zeta_k D_2(\zeta) \frac{\partial^2 v_{iG}}{\partial x_j \partial x_k} - \zeta_i \zeta_j F(\zeta) \frac{\partial^2 \tau_G}{\partial x_i \partial x_j} \right) k^2 + O(k^3) \end{aligned} \quad (1.54)$$

а соответствующие условия разрешимости дают уравнения Стокса:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial P_{G0}}{\partial x_i} &= 0, & \frac{\partial v_{iG0}}{\partial x_i} &= 0, \\ \frac{\partial P_{Gm+1}}{\partial x_i} &= \gamma_1 \frac{\partial^2 v_{iGm}}{\partial x_j^2}, & \frac{\partial^2 \tau_{Gm}}{\partial x_i^2} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (m = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.55)$$

Тензор напряжения и вектор потока могут быть вычислены из (1.54):

$$P_{ijG} = P_G \delta_{ij} - \gamma_1 \left(\frac{\partial v_{iG}}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) k + \left(\gamma_3 \frac{\partial^2 \tau_G}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\gamma_6}{\gamma_1} \frac{\partial^2 P_G}{\partial x_i \partial x_j} \right) k^2 + O(k^4) \quad (1.56)$$

$$Q_{iG} = - \left(\frac{5}{4} \gamma_2 \frac{\partial \tau_G}{\partial x_i} - \frac{\gamma_3}{2 \gamma_1} \frac{\partial P_G}{\partial x_i} \right) k + O(k^4) \quad (1.57)$$

Функции $A(\zeta)$, $B(\zeta)$, $D_1(\zeta)$, $D_2(\zeta)$, $F(\zeta)$ являются решениями следующих интегральных уравнений:

$$\mathcal{L} [\zeta_i A(\zeta)] = -\zeta_i \left(\zeta^2 - \frac{5}{2} \right), \quad (1.58)$$

$$\mathcal{L} \left[\left(\zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij} \right) B(\zeta) \right] = -2 \left(\zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij} \right), \quad (1.59)$$

$$\mathcal{L} \left[\left(\zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij} \right) F(\zeta) \right] = \left(\zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij} \right) A(\zeta), \quad (1.60)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L} [(\zeta_i \delta_{jk} + \zeta_j \delta_{ki} + \zeta_k \delta_{ij}) D_1(\zeta) + \zeta_i \zeta_j \zeta_k D_2(\zeta)] \\ = \gamma_1 (\zeta_i \delta_{jk} + \zeta_j \delta_{ki} + \zeta_k \delta_{ij}) - \zeta_i \zeta_j \zeta_k B(\zeta), \end{aligned} \quad (1.61)$$

при дополнительных условиях:

$$\int_0^\infty \zeta^4 A(\zeta) \exp(-\zeta^2) d\zeta = 0, \quad (1.62)$$

$$\int_0^\infty [5\zeta^4 D_1(\zeta) + \zeta^6 D_2(\zeta)] \exp(-\zeta^2) d\zeta = 0. \quad (1.63)$$

Транспортные коэффициенты вычисляются через соответствующие интегралы от этих функций:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_1 &= I_6(B), & \gamma_2 &= 2I_6(A), \\ \gamma_3 &= I_6(AB) = -2I_6(F), \\ \gamma_6 &= \frac{1}{2} I_6(BD_1) + \frac{3}{14} I_8(BD_2), \end{aligned} \right\} \quad (1.64)$$

где

$$I_n(Z) = \frac{8}{15\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \zeta^n Z(\zeta) \exp(-\zeta^2) d\zeta. \quad (1.65)$$

Для газа твёрдых сфер

$$\left. \begin{array}{ll} \gamma_1 = 1.270042427, & \gamma_2 = 1.922284066, \\ \gamma_3 = 1.947906335, & \gamma_6 = 1.419423836, \end{array} \right\} \quad (1.66)$$

а для модели Крука—Веландера

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_6 = 1. \quad (1.67)$$

Слой Кнудсена и граничные условия

Разложение Грэда—Гильберта не обладает достаточным количеством свободных параметров, чтобы удовлетворить кинетическим граничным условиям, например диффузного отражения (1.38). При малых k решение стационарного уравнения Больцмана допускает разделение пространственных масштабов, так что оно может быть найдено в форме

$$\varphi = \varphi_G + \varphi_K, \quad (1.68)$$

где φ_G — гидродинамическая часть решения с масштабом порядка единицы, φ_K — кнудсеновская часть или поправка кнудсеновского слоя с масштабом порядка k . Оказывается, что кинетические граничные условия могут быть удовлетворены в предположении

$$kn_i \frac{\partial \varphi_K}{\partial x_i} = O(\varphi_K). \quad (1.69)$$

Вводя естественную для слоя Кнудсена локальную систему координат (η, χ_1, χ_2) ,

$$x_i = k\eta n_i(\chi_1, \chi_2) + x_{Bi}(\chi_1, \chi_2), \quad (1.70)$$

где x_{Bi} — граничная поверхность, η — координата, растянутая вдоль нормали n_i , χ_1 и χ_2 — ортогональные координаты поверхности $\eta = const$, получаем уравнение для φ_K :

$$\zeta_i n_i \frac{\partial \varphi_K}{\partial \eta} = \mathcal{L}(\varphi_K) - k\zeta_i \left(\frac{\partial \chi_1}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_K}{\partial \chi_1} + \frac{\partial \chi_2}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_K}{\partial \chi_2} \right). \quad (1.71)$$

Раскладывая φ_K в аналогичный степенной ряд

$$\varphi_K(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}) = \sum_{n=0}^{\infty} k^n \varphi_{Kn}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}) \quad (1.72)$$

и приравнивая члены одного порядка по k , получаем одномерные по физическому пространству уравнения для φ_{K0} и φ_{K1} :

$$\zeta_i n_i \frac{\partial \varphi_{K0}}{\partial \eta} = \mathcal{L}(\varphi_{K0}), \quad (1.73)$$

$$\zeta_i n_i \frac{\partial \varphi_{K1}}{\partial \eta} = \mathcal{L}(\varphi_{K1}) - \zeta_i \left[\left(\frac{\partial \chi_1}{\partial x_i} \right)_0 \frac{\partial \varphi_{K0}}{\partial \chi_1} + \left(\frac{\partial \chi_2}{\partial x_i} \right)_0 \frac{\partial \varphi_{K0}}{\partial \chi_2} \right], \quad (1.74)$$

с граничными условиями:

$$(\varphi_{Km})_0 = \varphi_{Bm} - (\varphi_{Gm})_0 \quad (\zeta_i n_i > 0), \quad \lim_{\eta \rightarrow \infty} \varphi_{Km} = 0, \quad (1.75)$$

где $(\dots)_0$ означает значение на границе ($\eta = 0$). Решение поставленных задач в полупространстве существует при определённых функциональных соотношениях между ω_{Gm} , v_{iGm} , τ_{Gm} и локальными параметрами φ_{Bm} . При дополнительном требовании

$$\varphi_{Km} = O(\eta^{-\infty}), \quad \eta \rightarrow \infty \quad (1.76)$$

достигается единственность, определяющая однозначность декомпозиции (1.68).

Для диффузного отражения (1.38) получаются следующие гидродинамические граничные условия и поправки кнудсеновского слоя:

$$\begin{bmatrix} (v_{jG} - v_{Bj}) \\ v_{jK} \end{bmatrix} (\delta_{ij} - n_i n_j) = - \left(\frac{\partial v_{jG}}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right)_0 (\delta_{ij} - n_i n_j) n_k \begin{bmatrix} k_0 \\ Y_0(\eta) \end{bmatrix} k \quad (1.77)$$

$$- \left(\frac{\partial \tau_G}{\partial x_j} \right)_0 (\delta_{ij} - n_i n_j) \begin{bmatrix} K_1 \\ \frac{1}{2} Y_1(\eta) \end{bmatrix} k + O(k^2),$$

$$\begin{bmatrix} v_{iG} \\ v_{iK} \end{bmatrix} n_i = O(k^2), \quad (1.78)$$

$$\begin{bmatrix} \tau_G - \tau_B \\ \tau_K \\ \omega_K \end{bmatrix} = \left(\frac{\partial \tau_G}{\partial x_i} \right)_0 n_i \begin{bmatrix} d_1 \\ \Theta_1(\eta) \\ \Omega_1(\eta) \end{bmatrix} k + O(k^2). \quad (1.79)$$

За каждым из полученных коэффициентов закреплен соответствующий термин, отражающий его физический смысл. k_0 и d_1 соответствуют *скоростному и температурному скачкам*, а K_1 *тепловому скольжению*. Для газа твёрдых сфер [163; 190; 196]

$$k_0 = -1.25395, \quad d_1 = 2.40014, \quad K_1 = -0.64642. \quad (1.80)$$

Поскольку $K_1 < 0$, направление теплового скольжения совпадает с направлением градиента температуры граничной поверхности. Функции $Y_0(\eta)$, $Y_1(\eta)$, $\Theta_1(\eta)$,

$\Omega_1(\eta)$ убывают экспоненциально от η и табулированы для газа твёрдых сфер в [163; 185; 186; 190; 196].

1.3.3 Медленные неизотермические течения

Для медленных неизотермических течений (малые числа Маха, значительные перепады температур) нелинейная асимптотическая теория приводит к уравнениям Когана—Галкина—Фридлендера (КГФ) [240], описывающим поведение газа в гидродинамической области. В 1970-х годах они были получены и подробно изучены советской группой ЦАГИ (М. Н. Коган, В. С. Галкин, О. Г. Фридлендер). Несмотря на наличие некоторых барнеттовских членов, уравнения КГФ не теряют устойчивости ввиду медленности течений, а движение газа под их действием называется *нелинейным термострессовым течением*. В первых работах эти уравнения были получены наиболее простым способом, на основе разложения Чепмена—Энскога [231; 232]. Такие же уравнения получаются из разложения Гильберта [230]. Кроме коэффициентов вязкости и теплопроводности, в уравнения КГФ входят некоторые термострессовые транспортные коэффициенты. Для некоторых молекулярных потенциалов они были впервые вычислены с помощью полиномов Сонина [51; 254]. Для газа твёрдых сфер более точные значения получены с помощью непосредственного численного решения соответствующих интегральных уравнений [188]. В результате многолетнего труда под руководством О. Г. Фридлендера теория медленных неизотермических течений была подтверждена экспериментально [8; 9].

Далее излагаются основные результаты нелинейной асимптотической теории на основе разложения Гильберта. Решение, как в случае слабовозмущённых течений, может быть найдено в виде суммы

$$f = f_H + f_K, \quad (1.81)$$

где гидродинамическая часть (*разложение Гильберта*) f_H , и поправка кнудсеновского слоя f_K обладают следующими свойствами:

$$\frac{\partial f_H}{\partial x_i} = O(f_H), \quad k \rightarrow 0, \quad (1.82)$$

$$kn_i \frac{\partial f_K}{\partial x_i} = O(f_K), \quad k \rightarrow 0, \quad (1.83)$$

$$f_K = O(\eta^{-\infty}), \quad \eta \rightarrow \infty. \quad (1.84)$$

Гидродинамические уравнения

Функция распределения f_H и макроскопические переменные $h_H = \rho_H, v_{iH}, T_H, \dots$ также разлагаются в ряд по k :

$$f_H = \sum_{m=0}^{\infty} f_{Hm} k^m, \quad h_H = \sum_{m=0}^{\infty} h_{Hm} k^m. \quad (1.85)$$

Будем искать решение уравнения Больцмана в предположении медленности течения ($v_{iH0} = 0$) и слабости поля внешних сил ($F_{iH0} = F_{iH1} = 0$). Подставляя (1.85) в уравнение Больцмана (1.8) и приравнивая члены при равных степенях k , получаем систему интегро-дифференциальных уравнений, для которой должны выполняться условия разрешимости. В нулевом порядке

$$\frac{\partial p_{H0}}{\partial x_i} = 0. \quad (1.86)$$

В первом

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{u_{iH1}}{T_{H0}} \right) = 0, \quad (1.87)$$

$$\frac{\partial p_{H1}}{\partial x_i} = 0, \quad (1.88)$$

$$\frac{\partial u_{iH1}}{\partial x_i} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_2 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \right). \quad (1.89)$$

Во втором при $p_{H1} = 0$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{u_{iH2}}{T_{H0}} \right) = \frac{u_{iH1}}{T_{H0}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{T_{H1}}{T_{H0}} \right), \quad (1.90)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{u_{iH1} u_{jH1}}{T_{H0}} \right) &- \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_1 \left(\frac{\partial u_{iH1}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{jH1}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{kH1}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] \\ &- \left[\frac{\Gamma_7}{\Gamma_2} \frac{u_{jH1}}{T_{H0}} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} + \frac{\Gamma_2^2}{4} \left(\frac{\Gamma_7}{\Gamma_2} \right)' \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)^2 \right] \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (1.91)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial p_{H2}^\dagger}{\partial x_i} + \frac{p_{H0}^2 F_{iH2}}{T_{H0}}, \\ \frac{\partial u_{iH2}}{\partial x_i} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} (\Gamma_2 T_{H1}). \end{aligned} \quad (1.92)$$

Здесь введены следующие обозначения: $u_{iH1} = p_{H0}v_{iH1}$, $u_{iH2} = p_{H0}v_{iH2}$ и

$$p_{H2}^\dagger = p_0 p_{H2} + \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\Gamma_3 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_k} \right) - \frac{\Gamma_7}{6} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_k} \right)^2. \quad (1.93)$$

Уравнения (1.87), (1.89), (1.91) для T_{H0} , u_{iH1} и p_{H2}^\dagger называются *уравнениями Когана—Галкина—Фридлендера (КГФ)*. Они содержат член температурных напряжений, отсутствующий в уравнениях Навье—Стокса. Сравнивая его с $p_{H0}^2 F_{iH2}/T_{H0}$, можно увидеть, что на покоящуюся единицу массы газа действует сила

$$F_i = \frac{\Gamma_2^2}{4} \left(\frac{\Gamma_7}{\Gamma_2^2} \right)' \frac{T_H}{p_H^2} \left(\frac{\partial T_H}{\partial x_j} \right)^2 \frac{\partial T_H}{\partial x_i} k^2 + O(k^3). \quad (1.94)$$

Она исчезает только тогда, когда изотермические поверхности параллельны:

$$e_{ijk} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_l} \right)^2 = 0. \quad (1.95)$$

В (1.95) использован символ Лéви-Чивйтеса e_{ijk} . Движение газа под действием этой силы называется *нелинейным термострессовым* течением. Важно отметить, что p_{H2}^\dagger не входит непосредственно в уравнение состояния, поэтому определяется с точностью до константы.

Транспортные коэффициенты $\Gamma_i = \Gamma_i(T_{H0})$ зависят от температуры. Первые два из них соответствуют размерным вязкости μ и теплопроводности λ газа,

$$\mu = \Gamma_1(T_H) \frac{p^{(0)} L}{\sqrt{2RT^{(0)}}} k, \quad \lambda = \frac{5\Gamma_2(T_H)}{2} \frac{p^{(0)} R L}{\sqrt{2RT^{(0)}}} k. \quad (1.96)$$

Для степенного молекулярного потенциала можно записать

$$\Gamma_{1,2}(T) = \gamma_{1,2} T^s, \quad \Gamma_3(T) = \gamma_3 T^{2s}, \quad \Gamma_7(T) = \Gamma'_3 - \gamma_7 T^{2s-1}. \quad (1.97)$$

Для газа твёрдых сфер

$$s = 0.5, \quad \gamma_7 = 0.189201, \quad \Gamma_7 = 1.758705, \quad (1.98)$$

для модели Крука—Веландера

$$s = 1, \quad \gamma_7 = 1, \quad \Gamma_7 = 1. \quad (1.99)$$

Тензор напряжений и вектор потока тепла вычисляются по следующим формулам:

$$p_{ijH} = p_H \delta_{ij} - \frac{\Gamma_1}{p_H} \left(\frac{\partial u_{iH}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{jH}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{kH}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) k + \frac{\Gamma'_3 - \Gamma_7}{p_H} \left[\frac{\partial T_H}{\partial x_i} \frac{\partial T_H}{\partial x_j} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial T_H}{\partial x_k} \right)^2 \delta_{ij} \right] k^2 \quad (1.100)$$

$$+ \frac{\Gamma_3}{p_H} \left(\frac{\partial^2 T_H}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{1}{3} \frac{\partial^2 T_H}{\partial x_k^2} \delta_{ij} \right) k^2 + O(k^3), \\ q_{iH} = -\frac{5}{4} \Gamma_2 \frac{\partial T_H}{\partial x_i} k + O(k^3). \quad (1.101)$$

Коэффициент Γ_3 входит в выражения температурных напряжений, но не движущую силу. Для степенного потенциала

$$F_i = -\frac{\Gamma_7}{4p_H} \left(\frac{\partial T_H}{\partial x_j} \right)^2 \frac{\partial T_H}{\partial x_i} k^2 + O(k^3), \quad (1.102)$$

поэтому при $\Gamma_7 > 0$ нелинейное термострессовое течение возникает в направлении противоположном градиенту температур.

Слой Кнудсена и граничные условия

Используя локальные координаты кнудсеновского слоя (1.70), находим, что f_K подчиняется уравнению

$$\zeta_i n_i \frac{\partial f_K}{\partial \eta} = 2J(f_H, f_K) + J(f_K, f_K) - k \zeta_i \left(\frac{\partial \chi_1}{\partial x_i} \frac{\partial f_K}{\partial \chi_1} + \frac{\partial \chi_2}{\partial x_i} \frac{\partial f_K}{\partial \chi_2} \right). \quad (1.103)$$

В нулевом порядке гидродинамическая часть решения является максвеллианом, удовлетворяющий граничному условию диффузного отражения при

$$T_{H0} = T_B, \quad (1.104)$$

а значит $f_{K0} = 0$. Используя разложения

$$f_K = f_{K1} k + f_{K2} k^2 + \dots, \quad (1.105)$$

$$f_H = (f_{H0})_0 + \left[(f_{H1})_0 + \eta \left(\frac{\partial f_{H0}}{\partial x_i} \right)_0 n_i \right] k + \dots, \quad (1.106)$$

где $(\cdots)_0$ означает значение на границе ($\eta = 0$), получаем уравнения для f_{K1} и f_{K2} :

$$\zeta_i n_i \frac{\partial f_{K1}}{\partial \eta} = 2J [(f_{H0})_0, f_{K1}], \quad (1.107)$$

$$\begin{aligned} \zeta_i n_i \frac{\partial f_{K2}}{\partial \eta} &= 2J [(f_{H0})_0, f_{K2}] - \zeta_i \left[\left(\frac{\partial \chi_1}{\partial x_i} \right)_0 \frac{\partial f_{K1}}{\partial \chi_1} + \left(\frac{\partial \chi_2}{\partial x_i} \right)_0 \frac{\partial f_{K1}}{\partial \chi_2} \right] \\ &\quad + 2J \left[(f_{H1})_0 + \eta \left(\frac{\partial f_{H0}}{\partial x_i} \right)_0 n_i, f_{K1} \right] + J(f_{K1}, f_{K1}). \end{aligned} \quad (1.108)$$

Поскольку

$$2J [(f_{H0})_0, f_{K1}] = \mathcal{L} \left(\frac{f_{K1}}{(f_{H0})_0} \right) (f_{H0})_0, \quad (1.109)$$

то опять получаем одномерные задачи в полупространстве $\eta \in (0, +\infty)$ для линеаризованного около $(f_{H0})_0$ уравнения Больцмана с граничными условиями

$$(f_{Km})_0 = f_{Bm} - (f_{Hm})_0 \quad (\zeta_i n_i > 0), \quad \lim_{\eta \rightarrow \infty} f_{Km} = (f_{Hm})_0 \quad (m = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.110)$$

Однородное уравнение (1.107) приводит к следующим граничным условиям и поправкам кнудсеновского слоя:

$$\frac{1}{\sqrt{T_{B0}}} \begin{bmatrix} (u_{jH1} - u_{Bj1}) \\ u_{jK1} \end{bmatrix} (\delta_{ij} - n_i n_j) = - \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)_0 (\delta_{ij} - n_i n_j) \begin{bmatrix} K_1 \\ \frac{1}{2} Y_1(\tilde{\eta}) \end{bmatrix}, \quad (1.111)$$

$$\begin{bmatrix} u_{jH1} \\ u_{jK1} \end{bmatrix} n_j = 0, \quad (1.112)$$

$$\frac{p_{H0}}{T_{B0}} \begin{bmatrix} T_{H1} - T_{B1} \\ T_{K1} \\ T_{B0}^2 \rho_{K1} \end{bmatrix} = \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)_0 n_j \begin{bmatrix} d_1 \\ \Theta_1(\tilde{\eta}) \\ p_{H0} \Omega_1(\tilde{\eta}) \end{bmatrix}, \quad (1.113)$$

где $\tilde{\eta} = \eta p_{H0}/T_{B0}$. Неоднородное уравнение (1.108) приводит к следующим граничным условиям и поправкам кнудсеновского слоя:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{T_{B0}}} \begin{bmatrix} (u_{jH2} - u_{Bj2}) \\ u_{jK2} \end{bmatrix} (\delta_{ij} - n_i n_j) &= - \frac{\sqrt{T_{B0}}}{p_{H0}} \left(\frac{\partial u_{jH1}}{\partial x_k} \right)_0 (\delta_{ij} - n_i n_j) n_k \begin{bmatrix} k_0 \\ Y_0(\tilde{\eta}) \end{bmatrix} \\ - \frac{T_{B0}}{p_{H0}} \left(\frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial x_j \partial x_k} \right)_0 (\delta_{ij} - n_i n_j) n_k \begin{bmatrix} a_4 \\ Y_{a4}(\tilde{\eta}) \end{bmatrix} &- \bar{\kappa} \frac{T_{B0}}{p_{H0}} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)_0 (\delta_{ij} - n_i n_j) \begin{bmatrix} a_5 \\ Y_{a5}(\tilde{\eta}) \end{bmatrix} \\ - \kappa_{jk} \frac{T_{B0}}{p_{H0}} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_k} \right)_0 (\delta_{ij} - n_i n_j) \begin{bmatrix} a_6 \\ Y_{a6}(\tilde{\eta}) \end{bmatrix} &- \frac{\partial T_{B1}}{\partial x_j} (\delta_{ij} - n_i n_j) \begin{bmatrix} K_1 \\ \frac{1}{2} Y_1(\tilde{\eta}) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (1.114)$$

$$\frac{1}{\sqrt{T_{B0}}} \begin{bmatrix} (u_{jH2} - u_{Bj2}) \\ u_{jK2} \end{bmatrix} n_j = -\frac{T_{B0}}{p_{H0}} \left[\left(\frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 n_i n_j + 2\bar{\kappa} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \right)_0 n_i \right] \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \int_0^\infty Y_1(\eta_0) d\eta_0 \\ \frac{1}{2} \int_\infty^{\tilde{\eta}} Y_1(\eta_0) d\eta_0 \end{bmatrix}, \quad (1.115)$$

$$\begin{aligned} \frac{p_{H0}}{T_{B0}} \begin{bmatrix} T_{H2} - T_{B2} \\ T_{K2} \\ T_{B0}^2 \rho_{K2} \end{bmatrix} &= \left(\frac{\partial T_{H1}}{\partial x_j} \right)_0 n_j \begin{bmatrix} d_1 \\ \Theta_1(\tilde{\eta}) \\ p_{H0} \Omega_1(\tilde{\eta}) \end{bmatrix} \\ &+ \frac{T_{B0}}{p_{H0}} \left(\frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 n_i n_j \begin{bmatrix} d_3 \\ \Theta_3(\tilde{\eta}) \\ p_{H0} \Omega_3(\tilde{\eta}) \end{bmatrix} + \bar{\kappa} \frac{T_{B0}}{p_{H0}} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \right)_0 n_i \begin{bmatrix} d_5 \\ \Theta_5(\tilde{\eta}) \\ p_{H0} \Omega_5(\tilde{\eta}) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (1.116)$$

где $\bar{\kappa}/L = (\kappa_1 + \kappa_2)/2L$ — средняя кривизна граничной поверхности, главные кривизны $\kappa_1/L, \kappa_2/L$ принимают отрицательные значения, когда центр соответствующей кривизны лежит со стороны газа. Безразмерный тензор кривизны $\kappa_{ij} = \kappa_1 l_i l_j + \kappa_2 m_i m_j$ выражается через единичные векторы соответствующих главных направлений l_i и m_i .

Коэффициент a_4 соответствует термострессовому скольжению второго порядка. Для газа твёрдых сфер [162; 196]

$$a_4 = 0.0331. \quad (1.117)$$

Поскольку $a_4 > 0$, имеет место явление отрицательного термофореза [162]. Коэффициенты, стоящие перед $\bar{\kappa}$ и κ_{ij} , вычислены недавно [119; 196]:

$$a_5 = 0.23353, \quad a_6 = -1.99878, \quad d_3 = 0.4993, \quad d_5 = 4.6180. \quad (1.118)$$

Функции $Y_{a4}(\eta), Y_{a5}(\eta), Y_{a6}(\eta), \Theta_3(\eta), \Omega_3(\eta), \Theta_5(\eta), \Omega_5(\eta)$ убывают также экспоненциально от η и табулированы в [119; 162; 185; 186; 196].

Последние два члена в (1.108) приводят к дополнительным нелинейным слагаемым в (1.114) и (1.116):

$$\frac{1}{p_{H0}^2} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} (\delta_{ij} - n_i n_j) \right)_0 \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_k} n_k \right)_0, \quad \frac{1}{p_{H0}^2} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} n_i \right)_0^2, \quad (1.119)$$

однако полное решение этой неоднородной задачи кнудсеновского слоя для газа твёрдых сфер в литературе не представлено. Для модельного уравнения Крука—Веландера численный анализ второго слагаемого выполнен в [192].

Использование граничных условий старшего порядка

Уравнения следующего порядка для T_{H1} , u_{iH2} и p_{H3} громоздки, и до настоящего времени не были получены в общей форме для произвольного молекулярного потенциала. Поэтому численный анализ медленных течений слаборазреженного газа обычно ведут на основе уравнений КГФ (1.87), (1.89), (1.91) с граничными условиями (1.104), (1.111), (1.112). Однако асимптотическое решение можно улучшить, если привнести в него известные граничные условия следующего порядка. Например, можно вычислить температурное поле $T_H = T_{H0} + T_{H1}k + O(k^2)$ из уравнения

$$\frac{1}{k} \frac{\partial u_{iH}}{\partial x_i} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_2 \frac{\partial T_H}{\partial x_i} \right) + O(k^2), \quad (1.120)$$

получаемого из (1.89) и (1.92), при граничном условии

$$T_H = T_B + d_1 \frac{T_{B0}}{p_{H0}} \left(\frac{\partial T_H}{\partial x_j} \right)_0 n_j k + O(k^2), \quad (1.121)$$

получаемого из (1.104) и (1.113). Поскольку u_{iH2} неизвестно, то температурное поле T_H вычисляется с точностью $O(k)$, однако на границе с точностью $O(k^2)$. В (1.121) вместо $\partial T_{H0}/\partial x_j$ используется производная от T_H , что позволяет учесть температурный скачок в граничном условии следующего порядка. Аналогично можно учесть скоростной скачок на границе:

$$u_{iH} = u_{Bi1}k - \left[K_1 \sqrt{T_{B0}} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)_0 + k_0 \frac{T_{B0}}{p_{H0}} \left(\frac{\partial u_{jH}}{\partial x_k} \right)_0 n_k \right] (\delta_{ij} - n_i n_j)k + O(k^2). \quad (1.122)$$

Таким же образом в граничные условия могут быть включены члены из (1.114) и (1.116), содержащие вторую производную от T_{H0} , а также $\bar{\varkappa}$, \varkappa_{ij} . Граничное условие на нормальную компоненту скорости (1.115) несовместимо с уравнением (1.87), поэтому не используется.

Поля T_H и u_{iH} , полученные вышеописанным способом, качественно лучше описывают поведение разреженного газа, поскольку учитывают дополнительные граничные эффекты. Можно также надеяться, что они количественно лучше аппроксимируют точное решение.

Для вычисления второй производной вдоль нормали от T_{H0} удобно воспользоваться преобразованием (1.89) и (1.111):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial x_i \partial x_j} n_i n_j + 2\bar{\kappa} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} n_i &= -\frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial \chi_\alpha^2} + \frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial x_k^2} = \\ &- \frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial \chi_\alpha^2} - \frac{1}{\Gamma_2} \left[\Gamma'_2 \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} n_i \right)^2 + \left(\Gamma'_2 + \frac{2K_1}{\sqrt{T_{H0}}} \right) \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial \chi_\alpha} \right)^2 \right], \end{aligned}$$

где подразумевается суммирование по парам повторяющихся индексов $\alpha = 1, 2$, а также $|\partial \chi_\alpha / \partial x_i| = 1$.

Силы, действующие на обтекаемые тела

Вследствие неоднородных напряжений в газе, возникает сила второго порядка по k , действующая на единицу площади обтекаемого тела $F_{iH2} = -p_{ijH2} n_j$. С помощью формулы Остроградского—Гаусса член второго порядка по k в (1.100) может быть преобразован во время интегрирования по поверхности тела:

$$\begin{aligned} \oint_S \Gamma_3 \frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial x_i \partial x_j} n_j dS &= \oint_S \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_3 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right) n_j dS - \oint_S \Gamma'_3 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} n_j dS \\ &= \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_3 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right) dV - \oint_S \Gamma'_3 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} n_j dS \\ &= \oint_S \Gamma'_3 \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)^2 n_i dS + \oint_S \Gamma_3 \frac{\partial^2 T_{H0}}{\partial x_j^2} n_i dS - \oint_S \Gamma'_3 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} n_j dS, \end{aligned}$$

где интегрирование производится по всему объёму тела V и всей его поверхности S . Один из вязкостных членов может быть также преобразован аналогичным образом:

$$\begin{aligned} \oint_S \Gamma_1 \frac{\partial u_{jH1}}{\partial x_i} n_j dS &= \oint_S \frac{\partial}{\partial x_i} (\Gamma_1 u_{jH1}) n_j dS \\ &= \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} (\Gamma_1 u_{jH1}) dV = \oint_S (\Gamma_1 + \Gamma'_1 T_{H0}) \frac{\partial u_{jH1}}{\partial x_j} n_i dS. \end{aligned}$$

Здесь использовано граничное условие (1.112) и уравнение непрерывности (1.87).

Таким образом, полная сила, действующая на обтекаемое тело,

$$\begin{aligned} p_{H0} \oint_S F_{i2} dS &= - \oint_S p_{H2}^\dagger n_i dS \\ &+ \oint_S (\Gamma_1 + \Gamma'_1 T_{H0}) \frac{\partial u_{jH1}}{\partial x_j} n_i dS + \oint_S \Gamma_1 \frac{\partial u_{iH1}}{\partial x_j} n_j dS \end{aligned}$$

$$-\oint_S \frac{\Gamma_7}{2} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)^2 n_i dS + \oint_S \Gamma_7 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} n_j dS. \quad (1.123)$$

В частности, если тело равномерно нагрето ($\partial T_B / \partial x_i = 0$) и поконится ($u_{Bi} = 0$), то на него действует сила, состоящая из трёх компонент,

$$p_{H0} \oint_S F_{i2} dS = - \oint_S p_{H2}^\dagger n_i dS + \oint_S \Gamma_1 \frac{\partial u_{iH1}}{\partial x_j} n_j dS + \oint_S \frac{\Gamma_7}{2} \left(\frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)^2 n_i dS. \quad (1.124)$$

Поправка слоя Кнудсена исключена из рассмотрения, поскольку вносит нулевой вклад в значение полной силы. Это легко доказывается, сдвигая область интегрирования за пределы слоя Кнудсена.

Электростатическая аналогия

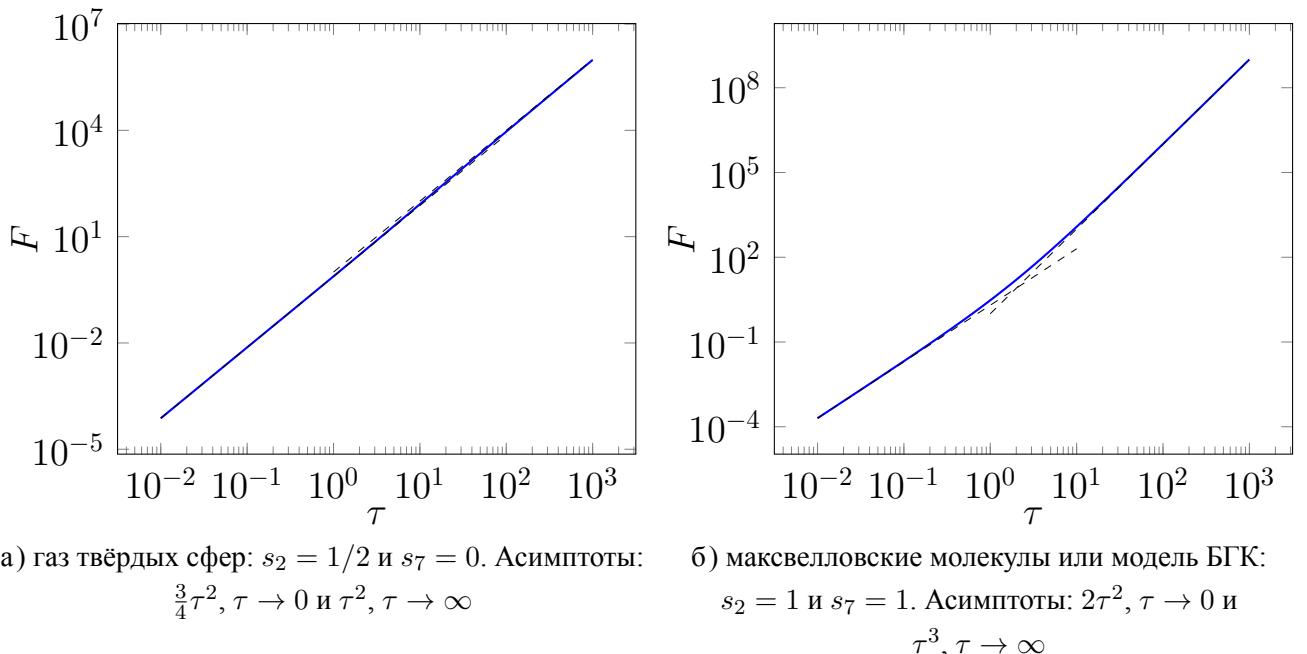


Рисунок 1.2 — Зависимость силы притяжения двух тел F от разности температур $\tau = T_2 - T_1$ при $T_1 = 1$. Тонкие пунктирные линии соответствуют асимптотам.

Сила взаимодействия между равномерно нагретыми телами оказывается подобна электростатической. Впервые на это обратили внимание М. Н. Коган, В. С. Галкин и О. Г. Фридлендер, рассмотрев линейное приближение [240]. Их результат можно естественным образом обобщить в нелинейной постановке.

Если ограничится рассмотрением степенного потенциала, то коэффициент теплопроводности $\Gamma_2 \propto T^s$ (см. (1.97)), а соответствующее уравнение теплопро-

водности нелинейно, которое, однако, является линейным уравнением Лапласа для T^{1+s} . Здесь и далее мы для простоты предполагаем $s > 0$. В соответствии с электростатической теорией можно ввести аналог заряда

$$e_a \stackrel{\text{def}}{=} T_a^s \oint_{S_a} \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i dS = C'_{ab} T_b^{1+s}, \quad \sum_a e_a = 0. \quad (1.125)$$

T^{1+s} можно считать потенциалом, C_{aa} коэффициентами ёмкости, а C_{ab} ($a \neq b$) коэффициентами электростатической индукции. Несложно также построить аналог энергии

$$U \stackrel{\text{def}}{=} \int \left[\frac{\Gamma_7(T)}{2} \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^2 - p \right] dV = \gamma_7 \sum_a T_a^{2s} \oint_{S_a} \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i dS = C_{ab} T_a^s T_b^{1+s}, \quad (1.126)$$

тогда действующая сила находится как вариационная производная

$$F_i^a = \left(\frac{\delta U}{\delta r_i^a} \right)_T = \frac{\partial C_{ab}}{\partial r_i^a} T_a^s T_b^{1+s}. \quad (1.127)$$

В частности, для двух тел с температурами T_1 и T_2 можно записать

$$e = C (T_2^{1+s} - T_1^{1+s}), \quad (1.128)$$

$$U = C (T_2^s - T_1^s) (T_2^{1+s} - T_1^{1+s}), \quad (1.129)$$

$$F_i = \frac{\partial C}{\partial r_i^a} (T_2^s - T_1^s) (T_2^{1+s} - T_1^{1+s}), \quad (1.130)$$

поскольку $e_1 + e_2 = 0$ и $e_1 = e_2 = 0$ при $T_1 = T_2$. C – аналог электростатической ёмкости. При $T = 1 + o(1)$ задача сводится к линейной, где сила притяжения $F \propto (T_2 - T_1)^2$. На рис. 1.2 показаны соответствующие зависимости для некоторых частных случаев.

Континуальный предел

В классической гидродинамике уравнения Навье–Стокса ($\Gamma_7 = 0$) с неподвижными границами ($v_{Bi} = 0$) и условиями без скольжения ($K_1 = 0$) приводят к нулевому полю $v_{iH1} = 0$ и к уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sqrt{T_{H0}} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \right) = 0. \quad (1.131)$$

В общем случае корректное распределение температур в континуальном пределе ($k \rightarrow 0$) находится из уравнений КГФ с соответствующими граничными условиями. Оно будет совпадать с решением (1.131) только для узкого класса задач, где $v_{iH1} = 0$.

В континуальном мире ($k = 0$) не существует величин u_{iH1} и p_{H2}^\dagger , тем не менее инфинитезимальное поле скоростей v_i конечным образом влияет на T . Такое асимптотическое поведение получило название призрак-эффекта (ghost effect) [185; 186].

1.3.4 Одномерные течения при конечных чисел Маха

Как было указано выше, построение асимптотического решения при конечных числах Маха в общем случае дополнительно требует сращивания вязких пограничных слоёв с решением уравнений Эйлера. Рассмотрение одномерных течений, описываемых уравнением

$$\zeta_y \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{1}{k} J(f, f), \quad \int \zeta_y f d\zeta = \int \zeta_z f d\zeta = 0, \quad (1.132)$$

в этом смысле существенно проще, поскольку вырождаются

- члены, содержащие кривизну слоя Прандтля,
- область невязкого течения.

Вплоть до членов второго порядка по k гидродинамическая часть решения одномерных задач совпадает с уравнениями Навье—Стокса

$$\frac{d}{dy} \left(\Gamma_1 \frac{dv_H}{dy} \right) = O(k^2), \quad (1.133)$$

$$\Gamma_1 \left(\frac{dv_H}{dy} \right)^2 + \frac{5}{4} \frac{d}{dy} \left(\Gamma_2 \frac{dT_H}{dy} \right) = O(k^2). \quad (1.134)$$

Давление p_H константно вплоть до второго порядка. Если масса газа $M = \int \rho dx$ постоянна, то давление p_H может быть получено из равенства

$$p_H \int \frac{dx}{T_H} = M + O(k^2), \quad (1.135)$$

поскольку $\rho = \rho_H + \rho_{K1}k + O(k^2)$ и $p_H = \rho_H T_H$. ρ_{K1} не фигурирует в (1.135), так как $\int \rho_{K1} dx = O(k)$. Гидродинамическое давление второго порядка p_{H2} вычис-

ляется из уравнения

$$\frac{3p_H}{2} \frac{dp_{H2}}{dy} + \frac{d}{dy} \left[\Gamma_3 \frac{d^2 T_H}{dy^2} + \Gamma_7 \left(\frac{dT_H}{dy} \right)^2 + (\Gamma_8 - 2\Gamma_9) \left(\frac{dv_H}{dy} \right)^2 \right] = O(k). \quad (1.136)$$

Если газ ограничен неподвижными пластинами с граничными условиями диффузного отражения, то справедливо следующее асимптотическое решение

$$v = v_H - \sum_a \frac{Y_0(\tilde{\eta}_a)}{p_H} \left(T_H \frac{\partial v_H}{\partial y} \right)_a k + O(k^2), \quad (1.137)$$

$$T = T_H - \sum_a \frac{\Theta_1(\tilde{\eta}_a)}{p_H} \left(T_H \frac{\partial T_H}{\partial y} \right)_a k + O(k^2), \quad (1.138)$$

$$p_{xy} = -\Gamma_1 \frac{\partial v_H}{\partial y} k + O(k^3), \quad (1.139)$$

$$q_x = \sum_a H_A(\tilde{\eta}_a) \left(T_H \frac{\partial v_H}{\partial y} \right)_a k + q_{xK2} k^2 + O(k^3), \quad (1.140)$$

$$+ \frac{T_H}{p_H} \left(\frac{\Gamma_3}{2} \frac{\partial^2 v_H}{\partial y^2} + 4\Gamma_{10} \frac{\partial T_H}{\partial y} \frac{\partial v_H}{\partial y} \right) k^2 + O(k^3),$$

$$q_y = -\frac{5}{4}\Gamma_2 \frac{\partial T_H}{\partial y} k + q_{yK2} k^2 + O(k^3), \quad (1.141)$$

$$p = p_H - \mathcal{P}_\eta k + (p_{H2} + p_{K2})k^2 + O(k^3), \quad (1.142)$$

$$p_{xx} - p = -\frac{1}{2}\mathcal{P}_\eta k + [2(\Gamma_8 + \Gamma_9)\mathcal{P}_u - \mathcal{P}_T + p_{xxK2} - p_{K2}]k^2 + O(k^3), \quad (1.143)$$

$$p_{yy} - p = \mathcal{P}_\eta k + [2(\Gamma_8 - 2\Gamma_9)\mathcal{P}_u + 2\mathcal{P}_T + p_{yyK2} - p_{K2}]k^2 + O(k^3), \quad (1.144)$$

$$p_{zz} - p = -\frac{1}{2}\mathcal{P}_\eta k + [2(\Gamma_9 - 2\Gamma_8)\mathcal{P}_u - \mathcal{P}_T + p_{zzK2} - p_{K2}]k^2 + O(k^3), \quad (1.145)$$

где

$$\mathcal{P}_\eta = \sum_a (\Omega_1(\tilde{\eta}_a) + \Theta_1(\tilde{\eta}_a)) \left(\frac{\partial T_H}{\partial y} \right)_a, \quad (1.146)$$

$$\mathcal{P}_T = \frac{1}{3p_H} \left[\Gamma_3 \frac{\partial^2 T_H}{\partial y^2} + \Gamma_7 \left(\frac{\partial T_H}{\partial y} \right)^2 \right], \quad \mathcal{P}_u = \frac{1}{3p_H} \left(\frac{\partial v_H}{\partial y} \right)^2, \quad (1.147)$$

а граничные условия

$$v_H = v_{Ba} - k_0 \frac{T_H}{p_H} \frac{\partial v_H}{\partial y} k + O(k^2), \quad T_H = T_{Ba} + d_1 \frac{T_H}{p_H} \frac{\partial T_H}{\partial y} k + O(k^2). \quad (1.148)$$

Величины с индексом a вычисляются на соответствующей границе. Функции кнудсеновского слоя ($Y_0, \Theta_1, H_A, \Omega_1$) убывают экспоненциально,

$$\tilde{\eta}_a = \frac{p_H}{T_H} \eta_a, \quad \eta_a = \frac{|y - y_a|}{k}, \quad (1.149)$$

где y_a — координаты пластин.

Для степенного потенциала

$$\Gamma_8 = \gamma_8 T^{2s}, \quad \Gamma_9 = \gamma_9 T^{2s}, \quad \Gamma_{10} = \gamma_{10} T^{2s-1}, \quad (1.150)$$

а для модели твёрдых сфер

$$\gamma_8 = 1.495941968, \quad \gamma_9 = 1.636073459, \quad \gamma_{10} = 2.449780. \quad (1.151)$$

Алгоритм вычисления транспортных коэффициентов (1.151) через приближённое решение соответствующих интегральных уравнений изложен в приложении А.

Глава 2. Численное решение уравнения Больцмана

2.1 Обзор вычислительных методов

Огромное множество исследований посвящено численному решению уравнения Больцмана. Среди них можно выделить три магистральных направления в зависимости от способа аппроксимации функции распределения скоростей:

- *методы прямого статистического моделирования (ПСМ)* строятся на основе некоторого случайного процесса марковского типа, способного аппроксимировать большинственную динамику;
- *методы дискретных скоростей* подразумевают фиксированный набор доступных молекулярных скоростей;
- *проекционные методы* используют разложение по базису в определённом функциональном пространстве.

Ввиду широкого распространения методов ПСМ, распространено разделение численных методов на стохастические и детерминистические, однако автору представляется такая классификация неконструктивной, поскольку стохастические приёмы, привносящие численный шум в решение, весьма универсальны и могут применяться практически для всех стандартных методов. Эти приёмы в некоторых случаях позволяют существенно снизить алгоритмическую сложность чисто детерминистического метода, а возникающие флуктуации решения способны в какой-то степени отражать численную невязку. В частности, для многомерного интегрирования эффективны теоретико-числовые методы [242] (квази-Монте Карло [80]). Для методов дискретных скоростей в своё время предложены специальные ускорительные стохастические процедуры [49; 172].

В результате более чем полувекового развития численных методов решения уравнения Больцмана, было выделено три основных свойства, строгое выполнение которых делает вычислительный алгоритм надёжным и высокоэффективным:

- сохранение массы, импульса и энергии (*консервативность*);
- выполнение \mathcal{H} -теоремы (*энтропийность*);
- *положительность* функции распределения.

Первые два свойства гарантируют, что на бесконечности ($t \rightarrow \infty$) численное решение пространственно-однородного уравнения Больцмана будет точно совпа-

дать с аналитическим, а положительность решения, как правило, является необходимым условием устойчивости метода. Нарушение даже всех перечисленных свойств возможно, но только при использовании достаточно подробных сеток во всем фазовом пространстве, что практически возможно только для простейших задач, обладающих дополнительными симметриями. В таком случае степень нарушения консервативности может служить, например, апостериорной оценкой отклонения численного решения от истинного.

2.1.1 Стохастические методы

В тех случаях, когда построение прямых численных методов сталкивается с существенными трудностями, ПСМ нередко позволяет достичь приемлемой точности малой кровью. В настоящее время для численного решения существенно нелинейных задач наиболее распространён метод Бёрда (DSMC), впервые предложенный им на основе общих физических соображений [33]. Современные его реализации используют улучшенные алгоритмы выбора сталкивающихся частиц, разработанные позже самим Г. Бёрдом (схема без счётчика) [36], а также М. С. Ивановым и С. В. Рогазинским (схема мажорантной частоты) [237].

Стохастические модели разреженного газа впервые рассмотрены М. А. Леоновичем ещё в 1935 году [244], но только в 1992 году В. Вагнер показал сходимость полумарковского метода Бёрда к уравнению Больцмана [210], основываясь на результатах А. В. Скорохода [251] и С. Н. Смирнова [253]. До этого времени предлагались альтернативные модели, получаемые эвристически из уравнения Больцмана. В частности, В. Е. Яницкий и О. М. Белоцерковский разработали стохастический метод [224] на основе строго марковского процесса эволюции модели Каца—Леоновича [135; 238], которая асимптотически эквивалента уравнению Больцмана, однако строгое доказательство [24] сходимости к уравнению Больцмана было получено только для метода Нанбу—Бабовского [23; 159].

К основным недостаткам методов ПСМ относятся высокий уровень статистического шума и значительный рост вычислительных затрат при стремлении к континуальному пределу, возникающий из-за нарушения энтропийности для распределений близких к максвелловским. В последние годы предлагаются различ-

ные методы уменьшения дисперсии (variance reduction) для слабо возмущённых течений (information preservation [89; 195], time-relaxed [82; 170], low-variance [25; 126; 176]). Основой этих гибридных подходов является априорное представление о функции распределения и применение статистического моделирования только к возмущённой части решения (алгебраическая декомпозиция). Обобщение дивиационного стохастического подхода, допускающего частицы с отрицательным весом, на нелинейное уравнение Больцмана приводит к значительным вычислительным трудностям [211]. Активно развиваются гибридные методы, использующие классическую схему Бёрда (moment-guide [72; 81], convex combination [56; 83]). Особую сложность представляют также течения с высоким перепадом плотности (например, гиперзвуковые), поскольку очень малая часть ансамбля модельных частиц попадает в области наиболее разреженного газа (например, донную). С вычислительной точки зрения, это многомасштабные задачи с широким диапазоном чисел Кнудсена. Стохастический метод взвешенных частиц позволяет адаптировать уровень дисперсии посредством их деления и аннигиляции, однако ценой высокой сложности алгоритма [177; 178]. Несмотря на то что в широком круге задач метод Бёрда позволяет достичь инженерной точности, множество тонких эффектов остаются за гранью его реальной разрешающей способности.

2.1.2 Методы дискретных скоростей

Методы дискретных скоростей (дискретных ординат) восходят к работам 40-х годов Нобелевского лауреата С. Чандрасекара в области теории излучения [67], ещё до появления методов ПСМ. Первые значительные успехи, связанные с применением этого подхода к численному решению уравнения Больцмана, были получены в США А. Нордсиком и Б. Хиксом [161; 247]. Они использовали метод Монте-Карло для вычисления пятимерного интеграла столкновений и простейшую коррекцию функции распределения для получения устойчивой численной схемы. Начиная с 1965 года, после ввода в эксплуатацию БЭСМ-6, *метод Хикса—Йена—Нордсика* [161; 219] активно развивался в Вычислительном центре АН СССР (Ф. Г. Черемисин, В. В. Аристов и др.). На первых ЭВМ основную трудность представляли ограничения в объёме памяти [257]. Операторное расщепление уравнения Больцмана и полиномиальная коррекция, обеспечивающая консер-

вативность на макроскопическом уровне, существенно повысили надёжность метода [222]. Он успешно применялся во многих прикладных областях, однако в тех случаях, когда вклад, вносимый полиномиальной коррекцией, становился значительным, достижение приемлимой точности сильно осложнялось.

Модели дискретного газа

Одновременно с численными методами бурное развитие получили математические модели дискретного газа. Простейшая такая модель, содержащая только два возможных вектора скорости, была рассмотрена ещё в фундаментальном труде Т. Карлемана [59]. Дж. Бродуэлл в 1964 году использовал шесть и восемь скоростей для численного анализа простейших задач разреженного газа [47; 48]. Его успех вызвал интерес у французских математиков Р. Гатиньоль [96] и А. Кабанна [52], впервые представившие систематическую теорию газа дискретных скоростей. Среди пионеров формальной теории отметим также С. К. Годунова и У. М. Султангазина [233].

Д. Гольдштейн, Б. Стёртевант и Дж. Бродуэлл первыми использовали модель дискретного газа на решётке с постоянным шагом [99]. Важным её преимуществом является присущая на микроскопическом уровне консервативность и энтропийность. В 1995 году А. Пальчевский, Ж. Шнайдер и А. В. Бобылев показали, что последовательность таких моделей сходится к уравнению Больцмана при стремлении шага решётки к нулю ($h \rightarrow 0$), однако порядок сходимости оказался не больше $1/14$ [41; 164]. Только в 2004 году их результат удалось обобщить для двумерного газа [88], для которого сходимость вообще носит логарифмический характер $O(\ln^p h^{-1})$. Рассмотрев интеграл столкновения в координатах Карлемана¹, В. Панфёров и А. Гейнц улучшили сходимость, но лишь вплоть до первого порядка [165]. Ж. Шнайдер совместно с Ф. Рожье [179] и Ф. Мишель [151] на основе последовательностей Фарея построили модель дискретного газа на конечной решётке с общим числом узлов $O(N^3)$ и сходимостью $O(N^{-3/2} \ln N + h^2 N^2)$, что при оптимальном выборе даёт $O(h^{-6/7})$. Порядок сходимости можно повысить,

¹ В прямоугольных координатах Карлемана (2.3) задача о сходимости модели дискретного газа оказывается существенно проще, чем исследование равномерного покрытия столкновительной сферы, поскольку сводится к решению линейных диофантовых уравнений.

если использовать квадратуры высокого порядка [46]. Наконец, С. Мишлер разработал метод доказательства сходимости конечно-разностных схем с операторным расщеплением для дискретного газа к решениям Ди-Перна—Лионса [152].

Размазывание столкновительного процесса

Основная трудность классических моделей дискретного газа связана с малым количеством допустимых пар разлётных скоростей для выбранной столкновительной пары. Для построения консервативной схемы второго порядка точности необходимо так или иначе привнести дополнительную свободу в столкновительный процесс. Другими словами, ослабить его или размазать (to mollify).

К. Бюе, С. Кордье и П. Дегон предложили несколько таких регуляризационных подходов, сохраняющих консервативность численной схемы в слабой форме (для столкновительного оператора целиком) [50]. Один из них основан на размазывании столкновительной сферы; второй, напротив, при локальном сохранении импульса и энергии, допускает нарушения инвариантности массы. Достигение *макроскопической* консервативности в этих подходах создаёт зависимость дискретного столкновительного оператора от функции распределения или по крайней мере отдельных её моментов. Такое требование существенно ограничивает эффективность численной реализации. Х. Бабовски построил простейшую схему с консервативностью на *мезоскопическом* уровне (для всей столкновительной сферы) [22], его подход позже развил Д. Гёрш [107]. Наконец, в 1997 году Ф. Г. Черемисин предложил новый класс методов дискретных скоростей, основанных на консервативном проецировании разлётных частиц [197; 255]². *Микроскопическая* консервативность, достигнутая Ф. Г. Черемисиным, позволяет построить наиболее эффективную численную схему и может быть интерпретирована как проекционная процедура Петрова—Галёркина, в которой столкновительные инварианты образуют ортогональную оболочку. Кроме того, Специальная процедура интерполяции функции распределения обеспечивает энтропийность метода [256].

² Интересно отметить, что все описанные подходы были опубликованы в одном специальном издании журнала *Computers & Mathematics with Applications* (Vol. 35, No. 1/2) по приглашению К. Черчиньи и Р. Иллнера, что явилось в некотором смысле диалектическим ответом на результат Пальчевского—Шнайдера—Бобылева.

Поэтому такой метод будем называть *консервативным проекционно-интерполяционным методом дискретных скоростей (КПИМДС)*.

2.1.3 Проекционные методы

Дополнительное априорное знание о функции распределения в отдельных классах задач может служить основой для построения более эффективных, но менее универсальных численных методов. Проекционные методы имеют экспоненциальную сходимость по отношению к размерности аппроксимационного пространства, однако в общем случае весьма затруднительно добиться консервативности и положительности. Более того, разрывные решения представляют для них особую сложность в связи с явлением Гиббса. Последнюю проблему можно обойти, используя тот факт, что для короткодействующих потенциалов интеграл столкновений может быть записан в форме $J = J^+ - \nu_c f$, где

$$J^+(f, f) = \int f' f'_* B d\Omega(\boldsymbol{\nu}) d\zeta_* \quad (2.1)$$

и частота столкновений

$$\nu_c(f) = \int f_* B d\Omega(\boldsymbol{\nu}) d\zeta_* \quad (2.2)$$

не содержит разрывов. Гладкость интеграла обратных столкновений (2.1) впервые показана П.-Л. Лионсом [142], позже его результат уточнён Б. Веннбергом [215], К. Муо и С. Вилланй [158]. Частота столкновений $\nu_c(f)$ — также гладкая функция, поскольку (2.2) является свёрткой с регулярной функцией.

Проекционные методы вычисления интеграла столкновений, по-видимому, берут своё начало с классического моментного метода Х. Грэда [112], который представляет собой метод Галёркина с многочленами Эрмита в качестве базиса и локальным распределением Максвелла в качестве весовой функции. Если Грэд ограничился в основном рассмотрением первых тринадцати моментов функции распределения, то А. Шорён использовал для численного расчёта профиля ударной волны старшие члены эрмитового базиса [69]. Из-за сильно возрастающей сложности метод Эрмита—Галёркина применяется преимущественно для аппроксимации линеаризованного уравнения Больцмана [98].

А. В. Бобылев показал, что столкновительный оператор в *Фурье*-базисе принимает особенно простой вид для максвелловских молекул [226]. Кроме того, с вычислительной точки зрения такой базис привлекален благодаря алгоритмам быстрого преобразования (БПФ). Первые численные результаты (анализа процессов релаксации высоких моментов функции распределения) на основе метода Фурье—Галёркина для максвелловских молекул принадлежат Ю. Н. Григорьеву и А. Н. Михалицыну [234]. Н. Х. Ибрагимов и С. В. Рязанов использовали представление Фурье для построения консервативного метода второго порядка для произвольного молекулярного потенциала, оставаясь в рамках модели дискретных скоростей [128]. Основная идея метода, предложенная А. В. Бобылевым и С. В. Рязановым [42], состоит в использовании *карлемановского представления* столкновительного оператора

$$J(f, f) = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} B \left(|\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}|, -\frac{\boldsymbol{x} \cdot (\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}| |\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}|} \right) \frac{2^{d-1}}{|\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}|^{d-2}} \delta(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}) (f(\boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{y}) f(\boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{\zeta} + \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) f(\boldsymbol{\zeta})) d\boldsymbol{x} d\boldsymbol{y}, \quad (2.3)$$

позволяющего избежать интегрирования по сфере.

Общая теория метода Фурье—Галёркина была развита Л. Парески совместно с Б. Пертамом [167] и Дж. Руссо [168; 169]. Несмотря на проекционную точность, метод обладает существенными недостатками:

- периодизация скоростного пространства,
- неконсервативность по импульсу и энергии,
- нарушение положительности.

Первая проблема частично решается из-за гауссовского затухания функции распределения, однако чрезмерное увеличение периода приводит к значительным осцилляциям старших мод. Вторая проблема частично решается при использовании достаточного количества мод, поскольку консервативность гарантируется с экспоненциальной точностью. По третьей проблеме важный результат получен Ф. Фильбе и К. Мую. Для возмущённого столкновительного оператора, им удалось доказать асимптотическую стабильность спектральной аппроксимации, не сохраняющей положительность [90]. В общем случае фурье-образ столкновительного ядра не представим в виде свёртки, поэтому алгоритмы БПФ не могут быть применены. К. Мую и Л. Парески показали, что для модели твёрдых сфер при $d = 3$ это возможно в рамках карлемановского представления [156]. Таким образом им удалось понизить вычислительную сложность метода Фурье—Галёркина с $O(N^{2d})$ до

$O(M^{d-1}N^d \ln N)$, где N — число мод на каждой координатной оси, а M — число допустимых углов отклонений в столкновительном процессе. Леи Ву, Дж. Риз и Йонг-Хао Жанг обобщили их результат для более общей формы столкновительного ядра [217].

Все перечисленные недостатки метода Фурье—Галёркина могут быть полностью решены при аппроксимации изотропной функции распределения полиномами Сонина. Их первое применение восходит к работам Д. Барнетта [51] для вычисления транспортных коэффициентов через решение интегральных уравнений Гильберта. И. А. Эндер и А. Я. Эндер первыми предложили общий численный метод на их основе [260], позже построили полностью консервативную схему [241]. Э. Фонн, Ф. Грох и Р. Хиптмайр обобщили метод Фурье—Сонина для произвольной функции распределения, однако только в двумерном случае ввиду сильно возрастающей сложности выражений [92].

Наконец отметим, что метод дискретных скоростей может быть формально интерпретирован как проекционный метод в пространстве дельта-функций. Если же их заменить на кусочно-полиномиальные функции с конечным носителем внутри некоторых ячеек скоростного пространства, то получается известный *разрывный метод Галёркина*. Для решения уравнения Больцмана он впервые был применён Е. Ф. Лымаром [245]. А. Майорана предложил общую методику построения консервативного разрывного метода Галёркина [149].

2.1.4 Методы консервативной коррекции

Макроскопическая консервативность метода в общем может быть достигнута различными процедурами коррекции, которые, однако, способны сильно ухудшать аппроксимационную точность используемого метода. Самая простая идея полиномиальной коррекции (умножение на многочлен) впервые была применена Ф. Г. Черемисиным и В. В. Аристовым [257]. А. В. Бобылев, Н. Х. Ибрагимов и С. В. Рязанов использовали представление Фурье для построения консервативного метода второго порядка для произвольного молекулярного потенциала, оставаясь в рамках модели дискретных скоростей [42; 128]. Для достижения консервативности они впервые, по-видимому, применили методы условной оптимизации. И. М. Гамба и С. Х. Таркабхушанам предложили минимизировать

функционал коррекции в L^2 -норме с помощью множителей Лагранжа. Э. Габетта, Л. Парески и Дж. Тоскани показали, что дискретная равновесная функция распределения должна обладать свойством [93]

$$\ln f_{M\gamma} \in \text{span} \{1, \zeta_\gamma, \zeta_\gamma^2\} \quad (2.4)$$

для того, чтобы наравне с консервативностью добиться энтропийности.

2.1.5 Неравномерные сетки

Во многих прикладных задачах эффективная аппроксимация уравнения Больцмана требует существенно неоднородной дискретизации в скоростном пространстве. В частности, в краевых задачах функция распределения всегда терпит разрывы на граничной поверхности, которые к тому же распространяются вдоль характеристик в окружающий газ при обтекании выпуклых тел. Неравномерные решётки активно используются как в методах дискретных скоростей [70; 136], так и проекционных [121; 217]. Более того, в [20; 136] применяются адаптивные методы построения построения сетки, однако, несмотря на очевидные преимущества, такой подход существенно усложняет численное решение бесстолкновительного уравнения Больцмана. Наконец, КПИМДС на неравномерных сетках может быть построен с помощью техники *многоточечного проецирования*, впервые предложенной Ф. Варгизом [206].

2.2 Консервативный проекционно-интерполяционный метод дискретных скоростей

Уравнение Больцмана (1.8) при отсутствии внешних сил численно решается с помощью операторного расщепления на уравнение переноса

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \zeta_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0, \quad (2.5)$$

для которого используется стандартный метод конечных объёмов с явной TVD-схемой второго порядка, и пространственно-однородное уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} = J(f), \quad (2.6)$$

для которого используется КПИМДС. Л. Девиллет и С. Мишлер доказали сходимость конечно-разностных схем с операторным расщеплением к решениям Ди-Перна—Лионса [76], а А. В. Бобылев и Т. Овада показали, что использование симметричной схемы расщепления позволяет достичь второго порядка аппроксимации [40].

2.2.1 Дискретизация скоростного пространства

Пусть регулярная скоростьная сетка $\mathcal{V} = \{ \zeta_\gamma \in \mathbb{R}^d : \gamma \in \Gamma \}$ построена таким образом, что кубатура в пространстве ζ выражается в виде взвешенной суммы

$$\int F(\zeta) d\zeta \approx \sum_{\gamma \in \Gamma} F_\gamma w_\gamma = \sum_{\gamma \in \Gamma} \hat{F}_\gamma, \quad \sum_{\gamma \in \Gamma} w_\gamma = V_\Gamma, \quad F_\gamma = F(\zeta_\gamma), \quad (2.7)$$

где $F(\zeta)$ — произвольная интегрируемая функция, V_Γ — полный объём скоростьной сетки, Γ — некоторое множество индексов. Тогда кубатурная формула в пространстве (ω, ζ, ζ_*) может быть записана как

$$\int F(\omega, \zeta, \zeta_*) d\Omega(\omega) d\zeta d\zeta_* \approx \frac{4\pi V_\Gamma^2}{\sum_{\nu \in \mathcal{N}} w_\nu w_{*\nu}} \sum_{\nu \in \mathcal{N}} F(\omega_\nu, \zeta_\nu, \zeta_{*\nu}) w_\nu w_{*\nu}, \quad (2.8)$$

где $F(\omega, \zeta, \zeta_*)$ — также произвольная интегрируемая функция. $\zeta_\nu \in \mathcal{V}$, $\zeta_{*\nu} \in \mathcal{V}$ и $\omega_\nu \in S^{d-1} = \{ \omega \in \mathbb{R}^d : |\omega| = 1 \}$ получаются из некоторого $(3d - 1)$ -мерного кубатурного правила, $\mathcal{N} \subset \mathbb{N}$ — его множество индексов. Заметим, что численное интегрирование в (2.8) выполняется по дискретному спектру (ζ, ζ_*) и непрерывному спектру ω .

Интеграл столкновений, записанный в симметризованной форме,

$$J(f_\gamma) = \frac{1}{4} \int (\delta_\gamma + \delta_{*\gamma} - \delta'_\gamma - \delta'_{*\gamma}) (f' f'_* - f f_*) B d\Omega(\omega) d\zeta d\zeta_*, \quad (2.9)$$

где $\delta_\gamma = \delta(\zeta - \zeta_\gamma)$ — дельта-функция Дирака в \mathbb{R}^d , имеет следующий дискретный аналог:

$$\hat{J}_\gamma(\hat{f}_\gamma) = \frac{\pi V_\Gamma^2}{\sum_{\nu \in \mathcal{N}} w_\nu w_{*\nu}} \sum_{\nu \in \mathcal{N}} (\delta_{\nu\gamma} + \delta_{*\nu\gamma} - \delta'_{\nu\gamma} - \delta'_{*\nu\gamma}) \left(\frac{w_\nu w_{*\nu}}{w'_\nu w'_{*\nu}} \hat{f}'_\nu \hat{f}'_{*\nu} - \hat{f}_\nu \hat{f}_{*\nu} \right) B_\nu, \quad (2.10)$$

где $\delta_{\zeta\gamma}$ — символ Кронекера. В общем случае ζ'_ν и $\zeta'_{*\nu}$ не попадают в \mathcal{V} , поэтому величины $\hat{f}'_\nu, \hat{f}'_{*\nu}, w'_\nu, w'_{*\nu}$ и функции $\delta'_{\nu\gamma}, \delta'_{*\nu\gamma}$ должны быть определены некоторым образом.

Максвелловское распределение аппроксимируется следующим образом:

$$\hat{f}_{M\gamma} = \rho \left[\sum_{\zeta \in \Gamma} w_\zeta \exp \left(-\frac{(\zeta - \mathbf{v})^2}{T} \right) \right]^{-1} w_\gamma \exp \left(-\frac{(\zeta_\gamma - \mathbf{v})^2}{T} \right). \quad (2.11)$$

2.2.2 Проекционно-интерполяционная техника

Если скорости после столкновения, $\zeta'_\nu \notin \mathcal{V}$ и $\zeta'_{*\nu} \notin \mathcal{V}$, заменяются, соответственно, ближайшими сеточными скоростями, $\zeta_{\lambda_\nu} \in \mathcal{V}$ и $\zeta_{\mu_\nu} \in \mathcal{V}$, то дискретный интеграл столкновений (2.10) теряет свойство консервативности, и дискретный максвеллиан (2.11) перестаёт быть равновесным состоянием. Для решения этих проблем в КПИМДС применяются две специальные процедуры.

Во-первых, ζ'_ν проецируется на множество сеточных скоростей $\{ \zeta_{\lambda_\nu+s_a} : a \in \Lambda \} \subset \mathcal{V}$ следующим образом:

$$\delta'_{\nu\gamma} = \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda_\nu, a} \delta_{\lambda_\nu+s_a, \gamma}, \quad (2.12)$$

где множество индексов $\Lambda = \{ a : r_{\lambda_\nu, a} \neq 0 \} \subset \mathbb{Z}$. Множество правил смещения $\mathcal{S} = \{ s_a : a \in \Lambda \}$ называется *проекционным шаблоном*. Выражение (2.12) можно формально рассматривать как приближение $\delta(\zeta' - \zeta_\gamma)$ в пространстве дельта-функций $\{ \delta(\zeta - \zeta_\gamma) : \zeta_\gamma \in \mathcal{N} \}$ проекционным методом Петрова—Галёркина на некоторую линейную оболочку функций $\psi_s(\zeta)$:

$$\int \psi_s(\zeta_\gamma) \left(\delta(\zeta' - \zeta_\gamma) - \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda_\nu, a} \delta(\zeta_{\lambda_\nu+s_a} - \zeta_\gamma) \right) d\zeta_\gamma = 0. \quad (2.13)$$

Если множество $\{ \psi_s \}$ содержит все столкновительные инварианты, например

$$\psi_0 = 1, \quad \psi_i = \zeta_i, \quad \psi_4 = \zeta_i^2, \quad (2.14)$$

то при найденных проекционных весах $r_{\lambda_\nu, a}$ для заданных проекционных скоростей $\zeta_{\lambda_\nu + s_a}$ каждый член кубатуры (2.10) обеспечит сохранение массы, импульса и кинетической энергии.

Во-вторых, для того чтобы выполнить

$$\hat{J}_\gamma \left(\hat{f}_{M\gamma} \right) = 0, \quad (2.15)$$

подбирается необходимая интерполяция \hat{f}'_ν . В достаточно общем виде, она может быть рассмотрена в виде среднего взвешенного по Колмогорову

$$\hat{f}'_\nu = \varphi_f^{-1} \left(\sum_{a \in \Lambda} q_{\lambda, a} \varphi_f \left(\hat{f}_{\lambda+s_a} \right) \right), \quad w'_\nu = \varphi_w^{-1} \left(\sum_{a \in \Lambda} p_{\lambda, a} \varphi_w \left(w_{\lambda+s_a} \right) \right), \quad (2.16)$$

где соответствующие *интерполяционные веса* нормированы:

$$\sum_{a \in \Lambda} q_{\lambda, a} = 1, \quad \sum_{a \in \Lambda} p_{\lambda, a} = 1, \quad (2.17)$$

а φ_f и φ_w — непрерывные строго монотонные функции, φ_f^{-1} и φ_w^{-1} — обратные к ним функции. Если положить

$$\varphi_f(x) = \varphi_w(x) = \ln(x), \quad \varphi_f^{-1}(x) = \varphi_w^{-1}(x) = \exp(x), \quad p_{\lambda, a} = q_{\lambda, a} = r_{\lambda, a}, \quad (2.18)$$

то (2.15) выполняется строго. Кроме того, несложно показать, что среднее геометрическое вида (2.18) приводит к выполнению дискретного аналога \mathcal{H} -теоремы (энтропийности) [85]. Этот тип интерполяции требует высоких затрат с вычислительной точки зрения, однако на практике операция возведения в степень может быть выполнена с точностью 10^{-5} , что позволяет в несколько раз ускорить вычисления. Для $\zeta'_{*\nu}$ и $\hat{f}'_{*\nu}$ все формулы аналогичны.

2.2.3 Решение задачи Коши

Обратимся теперь к пространственно-однородному уравнению Больцмана (2.6). Пусть f_γ^n обозначает приближённое решение (2.6) для скорости ζ_γ , $\gamma \in \Gamma$ в момент времени t_n , $n \in \mathbb{N}$. Переписывая (2.10) как

$$\hat{J}_\gamma^n \left(\hat{f}_\gamma^n \right) = \sum_{\nu=1}^N \hat{\Delta}_\gamma^{n+(\nu-1)/N} \left(\hat{f}_\gamma^n \right), \quad N = |\mathcal{N}|, \quad (2.19)$$

где $\hat{\Delta}_\gamma^{n+(\nu-1)/N}$ — это $\nu \in \mathcal{N}_n$ член суммы (2.10), можно применить явный метод Эйлера первого порядка в дробных шагах

$$\hat{f}_\gamma^{n+\nu/N} = \hat{f}_\gamma^{n+(\nu-1)/N} + \Delta t \hat{\Delta}_\gamma^{n+(\nu-1)/N} \left(\hat{f}_\gamma^{n+(\nu-1)/N} \right), \quad (2.20)$$

где $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ — временной шаг. Схема (2.20) имеет порядок сходимости $O(\Delta t |\Gamma| / |\mathcal{N}|)$, если все дискретные скорости ζ_γ распределены равномерно в последовательностях $(\zeta_\nu)_{\nu=1}^N$ и $(\zeta_{*\nu})_{\nu=1}^N$. Этого можно добиться случайной перестановкой кубатурной последовательности. Если $|\Gamma| / |\mathcal{N}| = O(\Delta t)$, то достигается второй порядок точности.

Оптимальные кубатурные правила Коробова [183; 243] используются для аппроксимации восьмимерного интеграла в (2.10). На каждом временном шаге решётка сдвигается на случайный вектор, так что получается последовательность множеств кубатурных точек $(\mathcal{N}_n)_{n \in \mathbb{N}}$.

2.2.4 Сохранение положительности

Схема (2.20) допускает отрицательные значения функции распределения, при которых она теряет свойство устойчивости. Для того чтобы сохранить положительность, достаточно потребовать

$$\hat{f}_\gamma^{n+(\nu-1)/N} + \frac{\Delta t}{N} \hat{\Delta}_\gamma^{n+(\nu-1)/N} > 0 \quad (2.21)$$

для всех $\gamma \in \Gamma$ и $\nu \in \mathcal{N}_n$. Если $\gamma = \nu$, то имеем

$$\hat{f}_\nu - \frac{A}{N} \hat{f}_\nu \hat{f}_{*\nu} > 0, \quad A = \frac{\pi \Delta t V_\Gamma^2 N B_{\max}}{\sum_{\nu \in \mathcal{N}} w_\nu w_{*\nu}} \quad (2.22)$$

или

$$N > A \hat{f}_{\max}, \quad (2.23)$$

где

$$\hat{f}_{\max} = \max_{\gamma \in \Gamma} \hat{f}_\gamma, \quad B_{\max} = \max_{\substack{\gamma, \varsigma \in \Gamma \\ \omega \in S^2}} B(\omega, \zeta_\gamma, \zeta_\varsigma) = O(\zeta_{\max}), \quad \zeta_{\max} = \max_{\gamma \in \Gamma} |\zeta_\gamma|. \quad (2.24)$$

Такая же оценка справедлива, когда $\zeta_\gamma = \zeta_{*\nu}$.

Проекционные узлы $\gamma = \lambda_\nu + s_a$ (и $\gamma = \mu_\nu + s_a$) рассматриваются с интерполяцией (2.18). Дополнительно предположим, что $r_{\lambda_\nu, a} \leq 1$. Если $r_{\lambda_\nu, a} \geq 0$, получаем

$$N > A \hat{f}_{\max} \varepsilon_f^2 \varepsilon_w^2, \quad (2.25)$$

где

$$\varepsilon_f = \max_{\substack{s_a, s_b \in \mathcal{S} \\ \gamma \in \Gamma}} \frac{\hat{f}_{\gamma+s_a}}{\hat{f}_{\gamma+s_b}}, \quad \varepsilon_w = \max_{\gamma, \varsigma \in \Gamma} \frac{w_\gamma}{w_\varsigma}. \quad (2.26)$$

Для гладкой функции распределения ε_f пропорциональна максимальному *диаметру* проекционного шаблона

$$R_S = \max_{\substack{s_a, s_b \in \mathcal{S} \\ \gamma \in \Gamma}} |\zeta_{\gamma+s_a} - \zeta_{\gamma+s_b}|. \quad (2.27)$$

Если $r_{\lambda_\nu, a} < 0$, имеем

$$\hat{f}_{\lambda_\nu+s_a} + \frac{A}{N} r_{\lambda_\nu, a} \hat{f}_\nu \hat{f}_{*\nu} > 0. \quad (2.28)$$

Для произвольной функции распределения получаем дорогостоящую оценку

$$N > A \hat{f}_{\max} \bar{r}_{\max} \max_{\gamma, \varsigma \in \Gamma} \frac{\hat{f}_\gamma}{\hat{f}_\varsigma}, \quad \bar{r}_{\max} = \max_{\gamma \in \Gamma, a \in \Lambda} (-r_{\gamma, a}), \quad (2.29)$$

но для максвеллиана

$$N > A \hat{f}_{\max} \varepsilon_f^2 \bar{r}_{\max}. \quad (2.30)$$

Таким образом, чтобы уменьшить количество точек N , достаточное для (2.21), скоростную сетку необходимо строить, минимизируя $|\Gamma|$, ζ_{\max} и ε_w , а проекционный шаблон выбирать, минимизируя R_S и \bar{r}_{\max} . Величина ε_f уменьшается при сгущении сетки в областях больших градиентов функции распределения.

На практике условие (2.21) для всех ν требует больших вычислительных затрат. Для достижения приемлемой точности достаточно исключать из (2.20) члены, нарушающие (2.21). Другими словами, столкновительный интеграл можно вычислять как

$$\hat{J}_\gamma^n = \sum_{\nu \in \mathcal{N} \setminus \mathcal{M}} \hat{\Delta}_\gamma^{n+(\nu-1)/N}, \quad (2.31)$$

где \mathcal{M} — множество кубатурных точек, исключённых из \mathcal{N} . Для того чтобы не допустить значительной ошибки при такой методике численного интегрирования, необходимо контролировать вклад исключённых узлов в столкновительный интеграл. Например, N может быть выбрано так, чтобы величина

$$\varepsilon_J = \frac{\pi V_\Gamma^2}{\rho \sum_{\nu \in \mathcal{N}} w_\nu w_{*\nu}} \sum_{\nu \in \mathcal{M}} \left| \hat{f}_{\lambda_\nu} \hat{f}_{\mu_\nu} - \hat{f}_\nu \hat{f}_{*\nu} \right| B_\nu. \quad (2.32)$$

была достаточно мала. Интерполяция (2.18) может приводить к огромным значениям \hat{f}'_ν , когда одно из значений $\hat{f}_{\lambda_\nu+s_a}$ очень мало, а соответствующий ему вес $r_{\lambda_\nu,a}$ отрицателен. По этой причине интерполяция в (2.32) не используется.

2.2.5 Проекционные шаблоны

В дальнейшем будем предполагать, что скоростная сетка прямоугольна в \mathbb{R}^3 , поэтому она может быть проиндексирована целочисленным вектором, т. е. $\Gamma = \{\gamma : \gamma \in \mathbb{Z}^3\}$. Правило смещений может также быть представлено как целочисленный вектор, т. е. $\mathcal{S} \subset \mathbb{Z}^3$. Тогда сумму индексов следует интерпретировать как векторную сумму в \mathbb{Z}^3 . В [221] показано, что проекционный метод обладает вторым порядком аппроксимации по отношению к шагу прямоугольной скоростной сетки, поэтому веса w_γ выбираются так, чтобы соответствовать формуле прямоугольников со срединной точкой.

Благодаря симметрии равномерной сетки, достаточно использовать два проекционных узла, чтобы обеспечить консервативность. В общем случае пять проекционных узлов необходимо, чтобы существовало решение (2.13) для (2.14). Диаметр шаблона $R_{\mathcal{S}}$ можно уменьшить, если использовать семь проекционных узлов. Если $|\mathcal{S}| = n$, то схема (2.20) называется *n-точечной схемой*.

2-точечная схема основана на симметричном проецировании

$$\delta'_{\nu\gamma} = (1 - r)\delta_{\lambda\gamma} + r\delta_{\lambda+s,\gamma}, \quad \delta'_{*\nu\gamma} = (1 - r)\delta_{\mu\gamma} + r\delta_{\mu-s,\gamma}, \quad (2.33)$$

где $\zeta_{\lambda+s} + \zeta_{\mu-s} = \zeta_\lambda + \zeta_\mu$ и

$$r = \frac{E_0 - E_1}{E_2 - E_1}, \quad E_0 = \zeta_\nu^2 + \zeta_{*\nu}^2, \quad E_1 = \zeta_\lambda^2 + \zeta_\mu^2, \quad E_2 = \zeta_{\lambda+s}^2 + \zeta_{\mu-s}^2. \quad (2.34)$$

Подстрочный индекс ν опущен для краткости. Для этой схемы выполняются следующие соотношения:

$$0 \leq r < 1, \quad h \leq R_{\mathcal{S}} \leq \sqrt{3}h, \quad (2.35)$$

где $h^3 = w_\gamma = V_\Gamma / |\Gamma|$.

Пусть $\eta = \zeta'_\nu - \zeta_\lambda$, а \mathbf{h}_+ , \mathbf{h}_- — минимальные диагональные смещения от ζ_λ , такие что вектор \mathbf{h}_+ направлен в тот же октант, что и η , а вектор \mathbf{h}_- лежит в

противоположном. Тогда *компактная 5-точечная схема* строится на узлах

$$\zeta_{\lambda+s_0} = \zeta_\lambda, \quad \zeta_{\lambda+s_i} = \zeta_\lambda + (\mathbf{h}_+ \cdot \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i, \quad \zeta_{\lambda+s_4} = \zeta_\lambda + \mathbf{h}_-, \quad (2.36)$$

где \mathbf{e}_i — базис прямоугольной скоростной сетки. Проекционные веса равны

$$r_{\lambda,0} = 1 - \sum_{i=1}^4 r_{\lambda,i}, \quad r_{\lambda,i} = \frac{\eta_i - r_{\lambda,4} h_{-i}}{h_{+i}}, \quad r_{\lambda,4} = \frac{\boldsymbol{\eta} \cdot (\boldsymbol{\eta} - \mathbf{h}_+)}{\mathbf{h}_- \cdot (\mathbf{h}_- - \mathbf{h}_+)}. \quad (2.37)$$

Для равномерной сетки справедливы следующие соотношения:

$$0 < r_{\lambda,0} \leq 1, \quad -\frac{1}{12} \leq r_{\lambda,i} < \frac{11}{24}, \quad -\frac{1}{8} \leq r_{\lambda,4} \leq 0, \quad R_S = \sqrt{6}h. \quad (2.38)$$

Симметричная 7-точечная схема строится на узлах

$$\zeta_{\lambda+s_0} = \zeta_\lambda, \quad \zeta_{\lambda+s_{\pm i}} = \zeta_\lambda + (\mathbf{h}_\pm \cdot \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i. \quad (2.39)$$

Проекционные веса равны

$$r_{\lambda,0} = 1 - \sum_{i=1}^3 r_{\lambda,i} + r_{\lambda,-i}, \quad r_{\lambda,\pm i} = \pm \frac{\eta_i(\eta_i - h_{\mp i})}{h_{\pm i}(h_{+i} - h_{-i})}. \quad (2.40)$$

В (2.40) суммирование по повторяющимся индексам не производится. Для равномерной сетки справедливы следующие соотношения:

$$\frac{1}{4} \leq r_{\lambda,0} \leq q1, \quad 0 \leq r_{\lambda,\pm i} \leq \frac{3}{8}, \quad -\frac{1}{8} \leq r_{\lambda,\mp i} \leq 0, \quad R_S = 2h. \quad (2.41)$$

И 5-точечная, и 7-точечная схемы обладают $\bar{r}_{\max} = 1/8$. Для того чтобы уменьшить это значение, необходимо использовать больше проекционных узлов [86].

Глава 3. Классические задачи молекулярной газодинамики

В трудах Киотской группы реализована масштабная программа высокоточного численного анализа классических задач молекулярной газодинамики на основе линеаризованного уравнения Больцмана для газа твёрдых сфер [185; 186]. В настоящем исследовании рассмотрены некоторые из них при тех же предположениях, но в существенно нелинейной постановке. В представленных результатах численная погрешность макроскопических переменных порядка 10^{-4} по абсолютному значению. Для течения Куэтта она не превышает 10^{-4} .

Для численного решения уравнений гидродинамического типа используются солверы, написанные в рамках вычислительной платформы OpenFOAM [213]. В частности, разработан солвер уравнений КГФ [180] на основе метода конечных объёмов и модифицированного алгоритма SIMPLE [58].

Для численного решения уравнения Больцмана используется программный комплекс анализа газокинетических процессов, разработанный автором в составе коллектива кафедры моделирования ядерных процессов и технологий факультета общей и прикладной физики Московского физико-технического института (государственного университета) [11; 12; 236]. Сетки в физическом пространстве выбираются по такому же критерию, как и при решении уравнений гидродинамического типа, однако дополнительно сгущаются в геометрической прогрессии возле границ с диффузным отражением, чтобы обеспечить аппроксимацию слоя Кнудсена с ошибкой не более 10^{-4} . Сетки в скоростном пространстве выбираются как равномерные, так и неравномерные, причём начальная функция распределения при моделировании на подробной сетке берётся как результат моделирования на грубой сетке. Множество кубатурных точек везде подбирается так, чтобы $\varepsilon_J < 10^{-5}$.

3.1 Плоское течение Куэтта

Рассмотрим одноатомный идеальный газ, заключённый между двумя бесконечными параллельными пластинами с постоянной и одинаковой ($\Delta T = 0$) температурой, принятой за единичную (рис. 3.1) За счёт их движения относительно

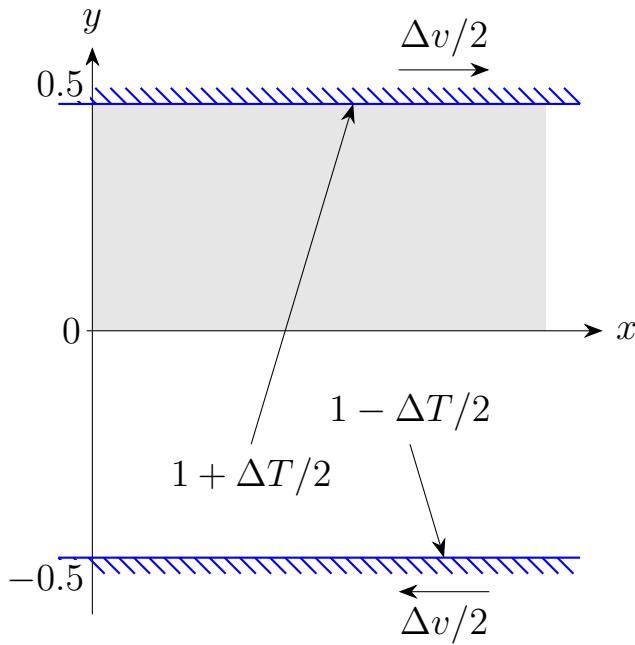


Рисунок 3.1 — Геометрия задачи плоского течения Куэтта

друг друга с продольной скоростью (вдоль оси x) формируется плоское течение Куэтта. Ось y нормальна к пластинам, удалённым друг от друга на единичное расстояние, так что координаты пластин равны $y = \pm 1/2$, а их скорости $\pm \Delta v/2$. В такой постановке задача антисимметрична, поэтому расчётная область заключена в интервал $0 < y < 1/2$. На пластине $y = 1/2$ ставятся граничные условия диффузного отражения:

$$f(\zeta_x, \zeta_y, \zeta_z) = \frac{2}{\pi} \exp \left[- \left(\zeta_x - \frac{\Delta v}{2} \right)^2 - \zeta_y^2 - \zeta_z^2 \right] \int_{\zeta_{*y} > 0} \zeta_{*y} f_* d\zeta_*, \quad \zeta_y < 0, \quad (3.1)$$

а на границе $y = 0$ условие антисимметричности:

$$f(\zeta_x, \zeta_y, \zeta_z) = f(-\zeta_x, -\zeta_y, \zeta_z), \quad \zeta_y > 0. \quad (3.2)$$

Плотность нормируется так, чтобы

$$\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \rho dy = 1. \quad (3.3)$$

Течение Куэтта линеаризуется при $\Delta v \ll 1$, тогда искомое решение может быть найдено в форме

$$\varphi = \Delta v \zeta_x \Phi(y, \zeta_y, \zeta), \quad \zeta = \sqrt{\zeta_x^2}, \quad (3.4)$$

Подставляя (3.4) в (1.26), получаем

$$\zeta_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{1}{k \zeta_x} \mathcal{L}(\zeta_x \Phi) \quad (3.5)$$

со следующими граничными условиями:

$$\Phi_-(1/2, \zeta_y, \zeta) = 1, \quad \Phi_+(0, \zeta_y, \zeta) = -\Phi_-(0, -\zeta_y, \zeta), \quad (3.6)$$

где $\Phi_{\pm} = \Phi(\zeta_y \gtrless 0)$. Возмущенные макроскопические переменные

$$\frac{P_{xy}}{\Delta v} = 2 \int \zeta_x^2 \zeta_y \Phi E d\zeta, \quad \frac{v_x}{\Delta v} = \int \zeta_x^2 \Phi E d\zeta, \quad \frac{q_x}{\Delta v} = \int \zeta_x^2 \zeta^2 \Phi E d\zeta - \frac{5}{2} \frac{v_x}{\Delta v}. \quad (3.7)$$

3.1.1 Методы решения линейной задачи

При $k \rightarrow \infty$ мы получаем бесстолкновительное линеаризованное уравнение Больцмана $\zeta_y \partial \Phi / \partial y = 0$, которое имеет простое решение в виде комбинации двух антисимметричных полумаксвеллов $\Phi_{\pm} = \mp 1$, что даёт

$$\frac{P_{xy}}{\Delta v} = -\frac{1}{\sqrt{\pi}}, \quad v_x = q_x = 0. \quad (3.8)$$

При малых k можно построить решение Грэда—Гильберта

$$\Phi = \frac{2y - \zeta_y \mathcal{B}(\zeta)k}{1 - 2k_0 k}, \quad (3.9)$$

где $\mathcal{B}(\zeta)$ определена в (1.59). Тогда макроскопические переменные равны

$$\frac{P_{xy}}{\Delta v} = -\frac{\gamma_1 k}{1 - 2k_0 k}, \quad \frac{v_x}{\Delta v} = \frac{y - (Y_0^- - Y_0^+)k}{1 - 2k_0 k}, \quad \frac{q_x}{\Delta v} = \frac{(H_A^- - H_A^+)k}{1 - 2k_0 k}, \quad (3.10)$$

где функции кнудсеновского слоя $K^{\pm} = Y_0^{\pm}, H_A^{\pm}$:

$$K^{\pm} = K(\eta_{\pm}), \quad \eta_{\pm} = \frac{1 \mp 2y}{2k}. \quad (3.11)$$

Асимптотическое решение предполагает, что слои Кнудсена обеих пластин не пересекаются.

При произвольных k решение может быть получено путём численного анализа. С высокой точностью эта задача была решена Киотской группой для газа твёрдых сфер [191]. Для сравнения рассмотрим также решение модельного уравнения Крука—Веландера, у которого столкновительный член в линеаризованной форме

$$\mathcal{L}(\varphi) = -\varphi + \omega + 2\zeta_i v_i + \left(\zeta_i^2 - \frac{3}{2} \right) \tau \quad (3.12)$$

приводит к

$$\zeta_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{1}{k} \left(\frac{2v_x}{\Delta v} - \Phi \right). \quad (3.13)$$

Решение (3.13) может быть записано в следующем виде [216]:

$$\Phi_{\pm} = \mp \exp \left(\mp \frac{\eta_{\mp}}{\zeta_y} \right) + \int_{\mp \frac{1}{2}}^y \frac{1}{k \zeta_y} \exp \left(-\frac{y-s}{k \zeta_y} \right) g(s) ds, \quad (3.14)$$

где $g(y) = 2v_x/\Delta v$ находится из интегрального уравнения Фредгольма второго рода

$$\begin{aligned} \sqrt{\pi} g(y) &= \mathcal{T}_0 \left(\frac{1-2y}{2k} \right) - \mathcal{T}_0 \left(\frac{1+2y}{2k} \right) \\ &\quad + \frac{1}{k} \int_0^{\frac{1}{2}} \left[\mathcal{T}_{-1} \left(\frac{|y-s|}{k} \right) - \mathcal{T}_{-1} \left(\frac{y+s}{k} \right) \right] g(s) ds, \end{aligned} \quad (3.15)$$

где $\mathcal{T}_n(s)$ — специальные функции Абрамовица [1]:

$$\mathcal{T}_n(s) = \int_0^{\infty} t^n \exp \left(-t^2 - \frac{s}{t} \right) dt, \quad s \geq 0, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (3.16)$$

Ядро уравнения (3.14) содержит слабую сингулярность, поэтому для получения высокоточного решения необходимо использовать некоторые специальные методы [132; 141]. Остальные макроскопические переменные вычисляются следующим образом:

$$\frac{P_{xy}}{\Delta v} = -\frac{2k}{\sqrt{\pi}} \left(\mathcal{T}_2(0) - \mathcal{T}_2 \left(\frac{1}{k} \right) + \frac{1}{k} \int_0^{\frac{1}{2}} \left[\mathcal{T}_1 \left(\frac{1-2s}{2k} \right) - \mathcal{T}_1 \left(\frac{1+2s}{2k} \right) \right] g(s) ds \right), \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{q_x}{\Delta v} &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\mathcal{T}_2 \left(\frac{1-2y}{2k} \right) - \mathcal{T}_2 \left(\frac{1+2y}{2k} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{k} \int_0^{\frac{1}{2}} \left[\mathcal{T}_1 \left(\frac{|y-s|}{k} \right) - \mathcal{T}_1 \left(\frac{y+s}{k} \right) \right] g(s) ds \right) - \frac{g(y)}{4}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

3.1.2 Методы решения нелинейной задачи

В настоящем исследовании для решения нелинейной задачи используется как численное решение КПИМДС, так и асимптотическое. Для верификации полученных результатов дополнительно используются другие известные методы, перечисленные коротко ниже.

Свободномолекулярный предел

Бесстолкновительное уравнение Больцмана, как и в линеаризованном случае, имеет решение в виде комбинации двух антисимметричных полумаксвеллианов

$$f^\pm = f(\zeta_y \gtrless 0) = \frac{1}{\pi\sqrt{\pi}} \exp \left[- \left(\zeta_x \pm \frac{\Delta v}{2} \right)^2 - \zeta_y^2 - \zeta_z^2 \right], \quad (3.19)$$

дополняющее уравнения (3.8) следующими соотношениями:

$$\frac{\tau}{(\Delta v)^2} = \frac{1}{6}, \quad q_y = 0, \quad \frac{P_{xx}}{(\Delta v)^2} = \frac{1}{2}, \quad P_{yy} = P_{zz} = 0. \quad (3.20)$$

Уравнения Навье—Стокса

Для задачи течения Куэтта уравнения сохранения вырождаются в

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial p_{xy}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial y}(v_x p_{xy} + q_y) = 0. \quad (3.21)$$

Подставляя законы Ньютона и Фурье,

$$p_{xy} = -\gamma_1 k \sqrt{T} \frac{\partial v_x}{\partial y}, \quad q_y = -\frac{5}{4} \gamma_2 k \sqrt{T} \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (3.22)$$

в (3.21), получаем систему дифференциальных уравнений

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\sqrt{T} \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) = 0, \quad \sqrt{T} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)^2 + \frac{5}{4} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \frac{\partial}{\partial y} \left(\sqrt{T} \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0, \quad (3.23)$$

которая обычно решается с граничными условиями без скольжения при $y = 1/2$:

$$v_x = \frac{\Delta v}{2}, \quad T = 1. \quad (3.24)$$

Константное давление p рассчитывается по общей массе газа (см. (3.3)):

$$p = \left(2 \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{dy}{T} \right)^{-1}. \quad (3.25)$$

Прямое статистическое моделирование

Детальное описание метода Бёрда может быть легко найдено в литературе (см., например, [35; 186]). В настоящем исследовании используется его численная реализация, солвер `dsmcFoam` [182], разработанный в рамках вычислительной платформы OpenFOAM.

Численное моделирование газа твёрдых сфер между двумя параллельными пластинами осуществляется в двумерном пространстве (x, y) при периодических граничных условиях вдоль оси y . Размер статистического ансамбля 2×10^6 для $\Delta v = 0.1$ и 2×10^5 для $\Delta v \geq 1$. Область физического пространства $0 < y < 1/2$ разделена на равномерные участки: от 40 для $\text{Kn} = 10$ до 100 для $\text{Kn} = 0.1$. Временной шаг выбирается эмпирически для обеспечения удовлетворительного приближения макроскопических переменных:

$$\Delta t = \frac{\pi}{2} \frac{\sqrt{\text{Kn}}}{1000}. \quad (3.26)$$

Для снижения статистического шума решение усредняется с течением времени после достижения устойчивого состояния.

3.1.3 Решение на равномерной сетке

Прежде всего необходимо продемонстрировать, насколько точное решение возможно получить, используя равномерные сетки в скоростном пространстве. Для этого решается линейная задача методом КПИМДС и сравнивается с известным решением.

На рис. 3.2 показана зависимость p_{xy} от Kn , полученная различными методами. Для бесстолкновительного газа есть превышение p_{xy} на 0.0061, обусловленное квадратурной ошибкой вычисления макроскопических переменных на равномерной сетке. При малых Kn наблюдается отклонение коэффициентов вязкости (+0.0083) и скольжения (-0.012).

На рис. 3.3 и 3.4 видно, что для больших Kn полученное решение сильно отклоняется от истинного. Это вызвано недостаточной аппроксимацией резкого перепада функции распределения около плоскости $\zeta_y = 0$. Если при малых Kn

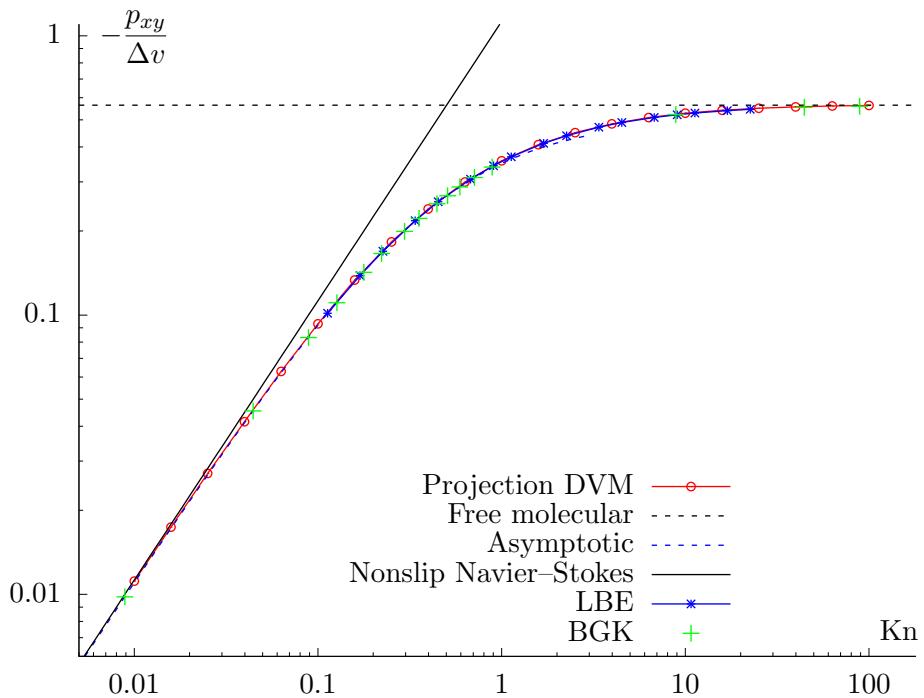


Рисунок 3.2 — Сдвиговое напряжение, полученное КПИМДС на равномерной сетке.

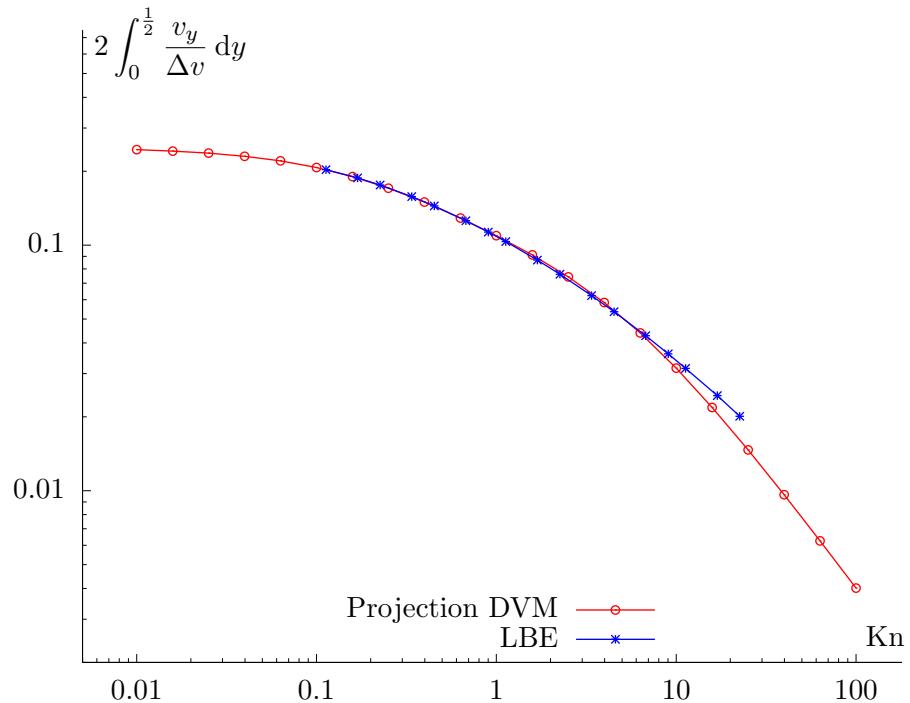


Рисунок 3.3 — Средняя скорость, полученная КПИМДС на равномерной сетке.

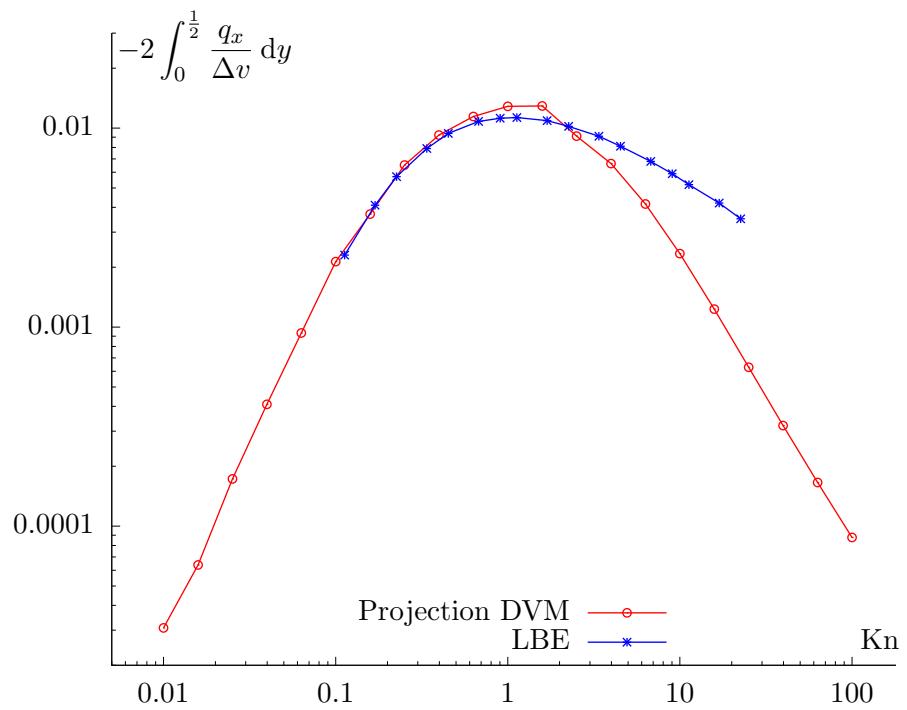


Рисунок 3.4 — Средний поток тепла, полученный КПИМДС на равномерной сетке.

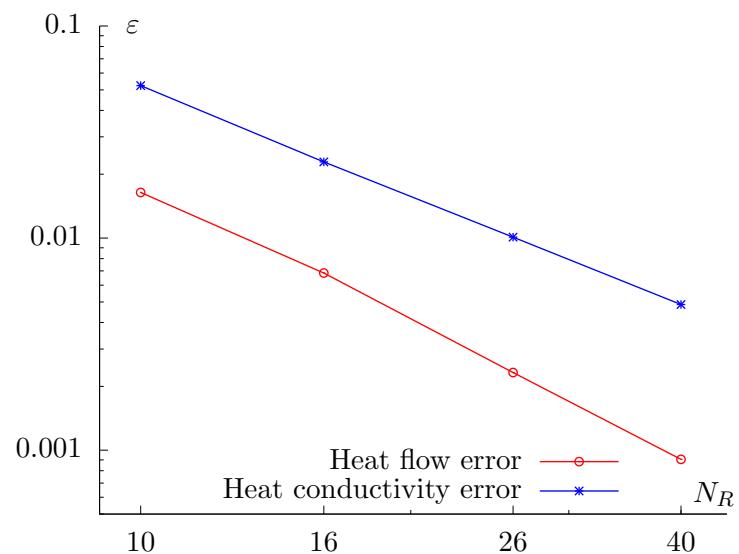


Рисунок 3.5 — Зависимость погрешностей вычисления теплопотока для бесстолкновительного газа и коэффициента теплопроводности для слаборазреженного газа от числа узлов на радиусе равномерной скоростной сетки.

кнудсеновский слой вносит малый вклад в интегральные характеристики, изображённые на рис. 3.3 и 3.4, то с увеличением Кн резкий перепад решения проникает во всю область физического пространства.

Численная погрешность решения убывает со вторым порядком в зависимости от шага скоростной сетки, что продемонстрировано в логарифмическом масштабе на рис. 3.5.

3.1.4 Решение на неравномерной сетке

Этот раздел последовательно описывает пространственную дискретизацию задачи, применяемые методы контроля точности, полученные решения в виде плоских сечений функции распределения и профилей макроскопических переменных, наконец, сравнительный анализ с результатами ПСМ, нелинейного асимптотического анализа, а также с решениями линейной задачи.

Дискретизация пространства

Расчётная область ($0 < y < 1/2$) состоит из N_x ячеек, расположенных в одном ряду. При малых Кн вблизи $y = 1/2$ физическая сетка измельчается так, чтобы разрешить слой Кнудсена с достаточной точностью.

Пространство дискретных скоростей ограничено сфероидом, заполненным центрированной прямоугольной сеткой \mathcal{V} . Ось симметрии сфероида параллельна оси ζ_x . $\zeta_x^{(\text{cut})}$ — большая полуось, $\zeta_r^{(\text{cut})}$ — малая полуось. Функция распределения достаточно гладкая вдоль ζ_x и ζ_z ; более того, ζ_z компонента решения незначительно отличается от максвелловской с $v_z = 0$. Поэтому расстояние между узлами выбирается постоянным вдоль оси ζ_x , а вдоль оси ζ_z узлы располагаются как корни полиномы Эрмита, так как известно, что квадратуры Гаусса—Эрмита обеспечивают максимальный порядок аппроксимации при вычислении интегралов вида $\int h(s) \exp(-s^2) ds$. ζ_y координаты узлов ζ_γ отдаляются от $\zeta_y = 0$ в геометрической прогрессии со знаменателем r . Такое измельчение сетки позволяет аппроксимировать резкий перепад около $\zeta_y = 0$ с хорошей точностью.

Таблица 2 — Параметры сетки скоростей для различных Δv : $\zeta_x^{(\text{cut})}$ — большая полуось сфероида расчётной области, $\zeta_r^{(\text{cut})}$ — малая полуось того же сфероида, N_{ζ_i} — максимальное количество узлов вдоль каждой оси, $|\mathcal{V}|$ — общее число узлов, r — знаменатель геометрической последовательности, $\Delta\zeta_x$ — расстояние между узлами вдоль оси ζ_x , $\min(\Delta\zeta_y)$ — минимальное расстояние между узлами вдоль оси ζ_y .

Δv	$\zeta_x^{(\text{cut})}$	$\zeta_r^{(\text{cut})}$	$N_{\zeta_i}/2$	$ \mathcal{V} $	r	$\Delta\zeta_x$	$\min(\Delta\zeta_y)$
0.1	4.35	4.3	(12, 26, 8)	15008	1.28	0.36	0.0020
1.0	4.80	4.5	(14, 23, 9)	16872	1.29	0.34	0.0037
2.0	5.30	5.0	(16, 24, 10)	23096	1.28	0.33	0.0038
5.0	8.00	8.0	(20, 26, 13)	41520	1.27	0.40	0.0043

Контроль точности

Физическая сетка уточняется таким образом, что ширина краевой ячейки составляет около $\text{Kn}/100$. Это условие обеспечивает точность порядка 10^{-4} при аппроксимации по формуле трапеций функций Кнудсена, таких как $Y_0(\eta)$, $H_A(\eta)$. При $\text{Kn} = 100$, когда решение практически константно в физическом пространстве, $N_x = 30$ достаточно для достижения той же точности.

Для оценки точности дискретного приближения в пространстве скоростей были рассмотрены две противоположные формы функции распределения. Во-первых, 13-моментное приближение Грэда

$$f = \frac{\rho}{(\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c_i^2}{T}\right) \left[1 + \frac{(p_{ij} - p\delta_{ij})c_i c_j}{pT} + \frac{4}{5} \frac{q_i c_i}{pT} \left(\frac{c_j^2}{T} - \frac{5}{2} \right) \right], \quad c_i = \zeta_i - v_i, \quad (3.27)$$

используется для оценки погрешности аппроксимации гладких функций. Во-вторых, комбинация двух разных полумаксвеллианов

$$f(\zeta_y \gtrless 0) = \frac{\rho^\pm}{(\pi T^\pm)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\zeta_x - v_x^\pm)^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}{T^\pm}\right) \quad (3.28)$$

используется для моделирования разрыва при $\zeta_y = 0$. Кроме того, при малых Kn и больших Δu газ значительно нагревается из-за трения, поэтому скоростная сетка должна подходить как для распределения скоростей с $T = 1$ вблизи пластины, так и для большей температуры вблизи плоскости симметрии. Параметры скоростной сетки, достаточные для получения точности порядка 10^{-4} представлены в табл. 2.

Максимальное значение ε_J наблюдается в краевой ячейке, где f меняется сильнее около $\zeta_y = 0$, и практически не зависит от Kn при $\text{Kn} < 1$. Для больших Kn ε_J меньше из-за меньшего размера ячеек по отношению к длине свободного пробега. Пока решение далеко от стационарного состояния, меньшее число кубатурных точек N используется, чтобы ускорить процесс его достижения. Для того чтобы уменьшить статистическую ошибку из-за случайного сдвига решётки интегрирования, значения всех макроскопических переменных усредняются по временным итерациям после достижения стационарного состояния. Хотя для 7-точечной схемы требуется немногое N , 5-точечная схема используется, поскольку требует немногое вычислений.

Стоит сделать замечание о временнóм шаге и процессе достижения стационарного состояния. В силу условия Куранта сходимости явной схемы для уравнения переноса (2.5), шаг по времени имеет тот же порядок, что и размер краевой ячейки. Поэтому для ускорения численного счёта при малых Kn , начальная функция распределения строится как локальный максвеллиан с ρ , v_i и T , полученных при решении на грубой равномерной скоростной сетке. Более того, для самых маленьких Kn , решение не достигает стационарного состояния полностью. Итерационный процесс останавливается, когда амплитуда волновых колебаний уменьшается до 10^{-4} , после чего решение экстраполируется для оценки установившихся профилей макроскопических переменных. Чтобы достичь стационарного состояния для самых больших Kn , требуется также много временных шагов.

Полученные результаты

На рис. 3.6 показаны двумерные поперечные сечения функций распределения при $\Delta v = 2$. Они получены без дополнительного усреднения по времени, поэтому можно заметить небольшие колебания вблизи $\zeta_y = 0$ (например, на рис. 3.6в). Вблизи границы с диффузным отражением функция распределения напоминает комбинацию двух полумаксвеллианов как для малых Kn (рис. 3.6а), так и больших (рис. 3.6д). Видно, что распределение молекулярных скоростей, движущихся к пластине ($\zeta_y > 0$) имеет более высокую температуру, чем распределение движущихся от неё молекул ($\zeta_y < 0$). В промежуточном случае распределение скоростей больше всего отличается от максвелловского, а тепловой поток к

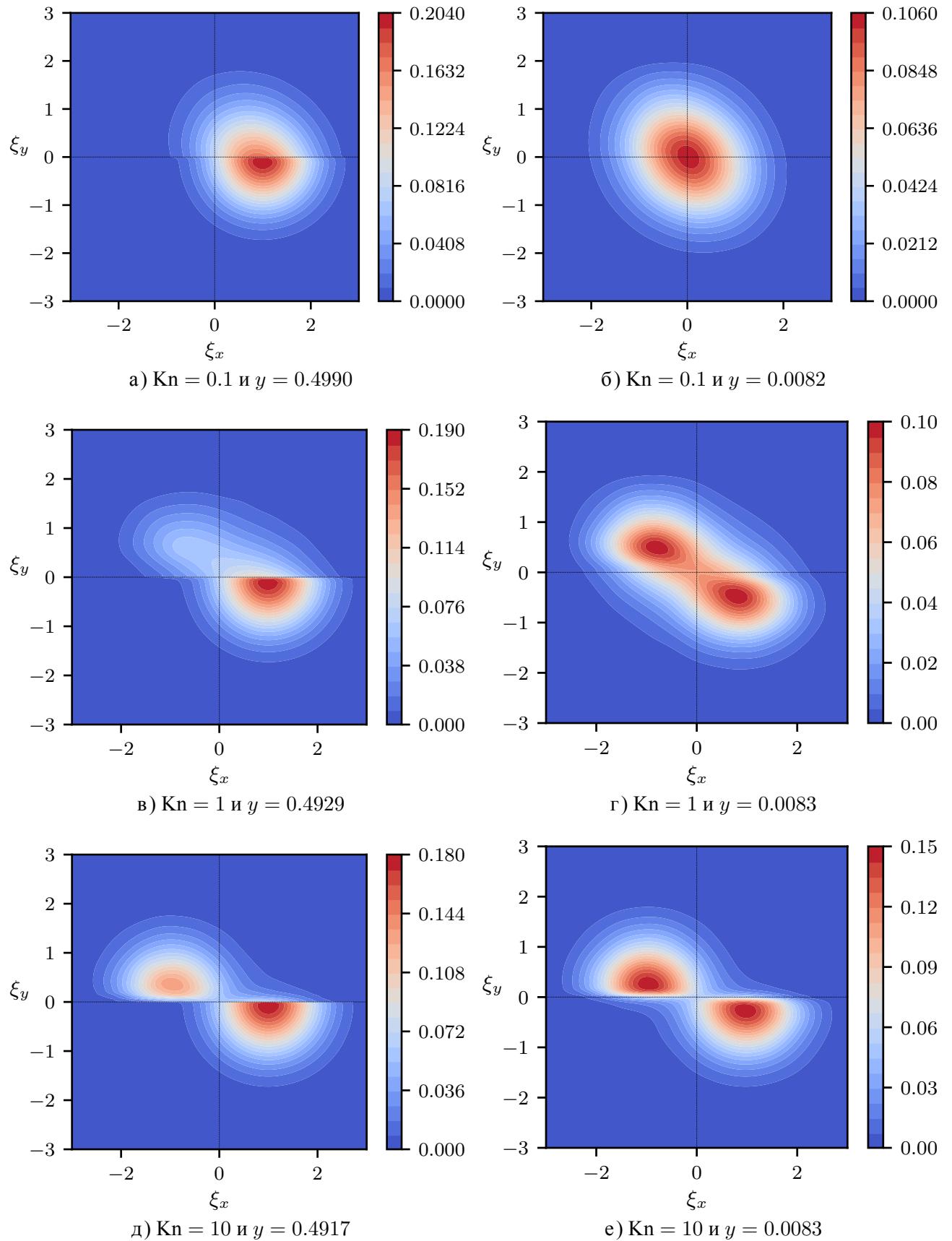


Рисунок 3.6 — Контурные графики функции распределения скоростей для $\Delta v = 2$. Показано поперечное сечение $\zeta_z = 0.1665$.

пластине максимален (рис. 3.6в). Вблизи плоскости симметрии вид функции распределения значительно меняется в зависимости от Kn. Для малых Kn он близок к состоянию равновесия (рис. 3.6б). С ростом Kn возникает седловая точка $\zeta_i = 0$ (рис. 3.6г). Для больших Kn решение несильно отличается от распределения скоростей на границе $y = 1/2$ (рис. 3.6е).

На рис. 3.7 показаны профили макроскопических переменных. Отметим некоторые их особенности. Из-за роста давления газа относительное скольжение газа вдоль пластины уменьшается с увеличением его скорости (см. также асимптотическое решение (1.137)). Таким же образом уменьшается и скачок температуры. В линейном случае продольный вектор теплового потока q_x представлен только в слое Кнудсена, но из-за сильной анизотропии функции распределения при больших Δv его объёмная составляющая увеличивается быстрее, чем $(\Delta v)^2$. Поэтому кривизна профиля q_x меняет свой знак с увеличением Δv . Асимптотическое решение описывает то же самое поведение q_x (см. (1.140)). Благодаря значительному нагреву газа при больших Δv , вектор поперечного потока тепла q_y также растёт быстрее, чем $(\Delta v)^2$, но кривизна профиля сохраняет свой знак. Более того, для большинства Δv и Kn q_x превалирует над q_y . Продольное напряжение P_{xx} всегда больше, чем P_{yy} и P_{zz} . В слое Кнудсена при малых Kn, постоянное напряжение P_{yy} становится больше, чем P_{zz} . Напомним, что P_{ij} не тензор сдвиговых напряжений, а возмущенный тензор напряжений (см. (1.30)). Средняя температура газа увеличивается с ростом Kn, потому что более разреженный газ имеет более низкую теплопроводность.

Сравнение результатов

На рис. 3.8–3.14 показаны макроскопические переменные, интегрированные по половине объёма между пластины $0 < y < 1/2$, в зависимости от числа Кнудсена. Чтобы наглядно отобразить разницу между результатами, мы вычитаем асимптотические решения в двух противоположных пределах ($\text{Kn} \rightarrow 0$ и $\text{Kn} \rightarrow \infty$) и используем логарифмическую шкалу. Величины со звездочкой вычисляются по уравнениям Навье–Стокса (1.20) с граничными условиями без

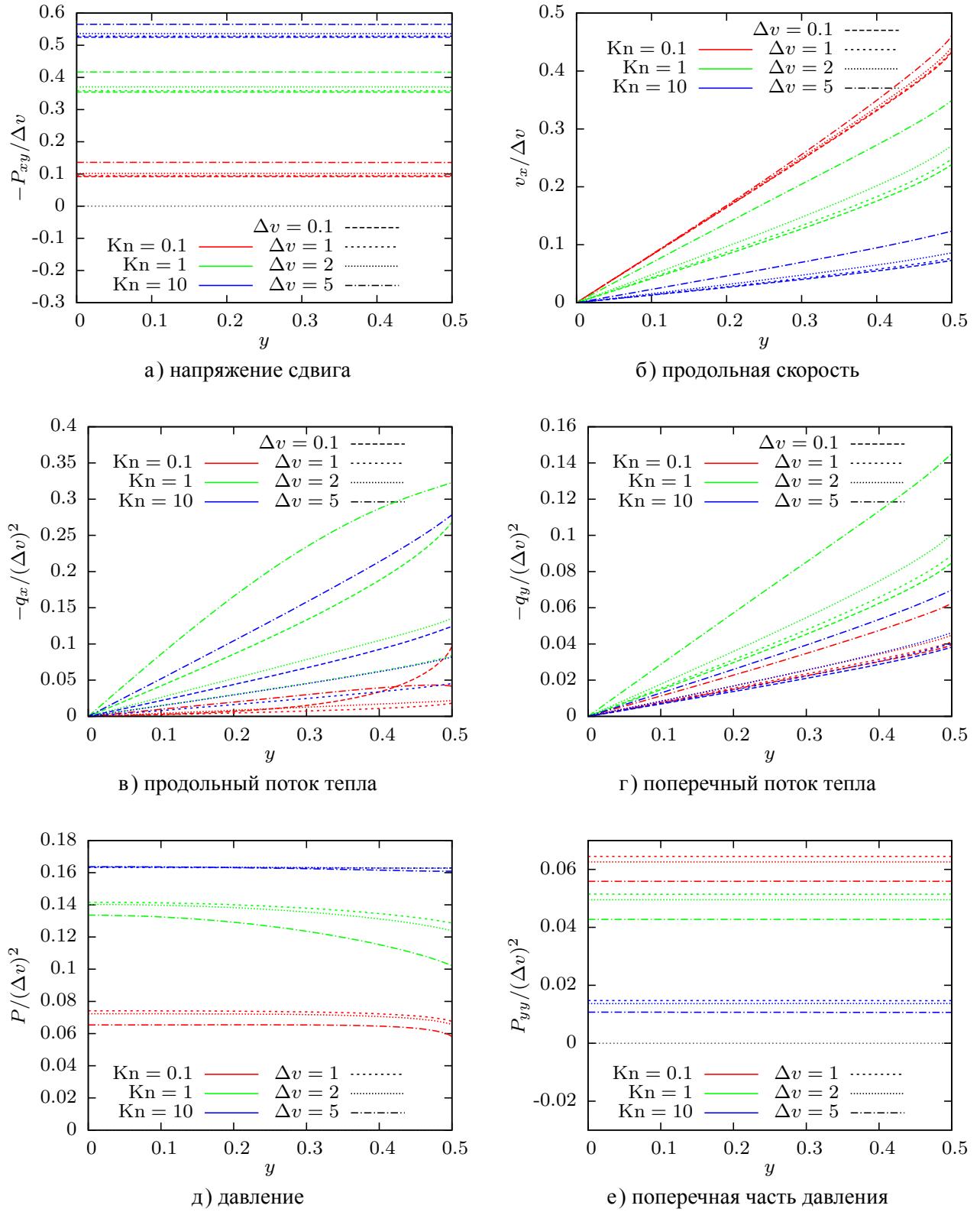


Рисунок 3.7 — Профили макроскопических переменных в плоском течении Куэтта.

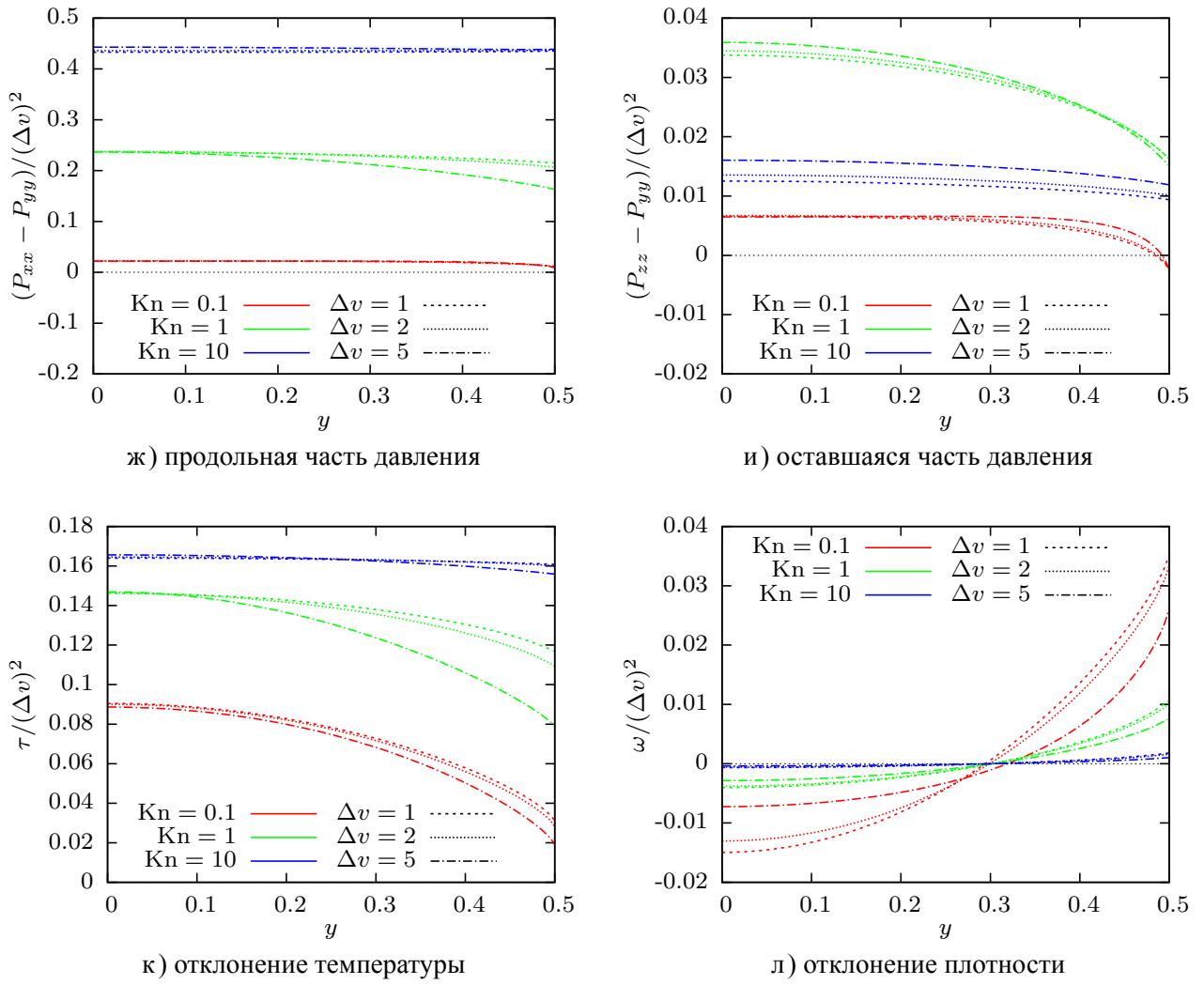


Рисунок 3.7 — (продолжение) Профили макроскопических переменных в плоском течении Куэтта.

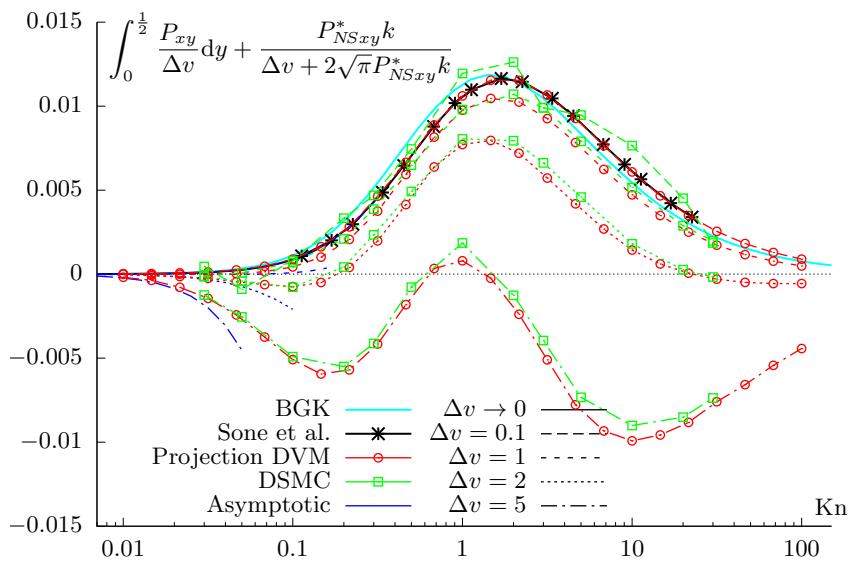


Рисунок 3.8 — Зависимость сдвигового напряжения от числа Кнудсена.

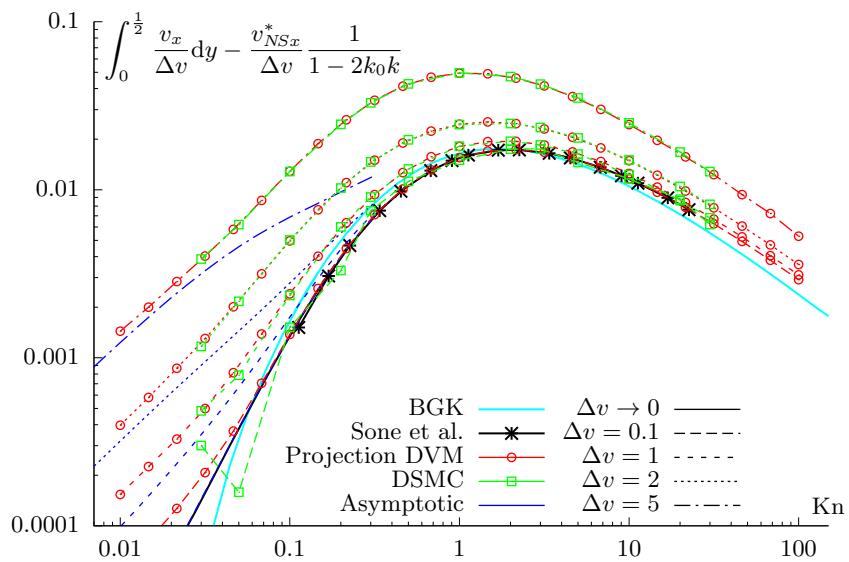


Рисунок 3.9 — Зависимость продольного массового расхода от числа Кнудсена.

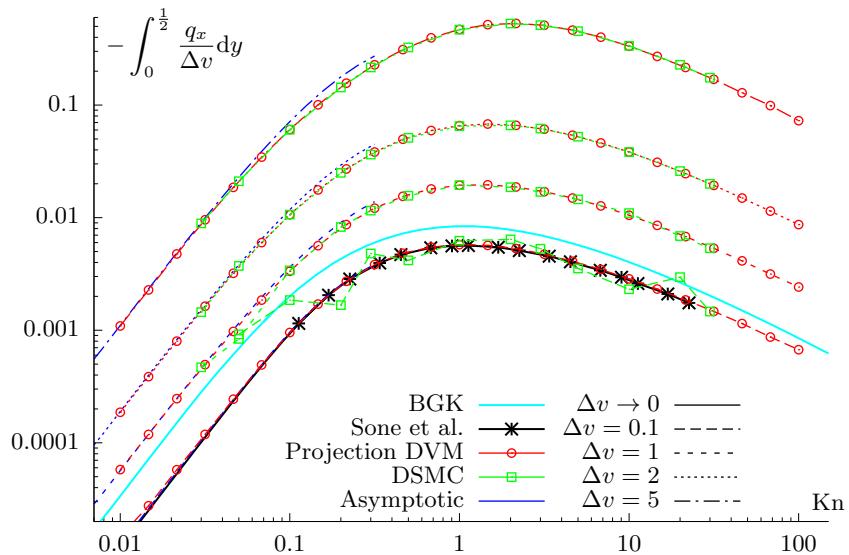


Рисунок 3.10 — Зависимость продольного теплового потока от числа Кнудсена.

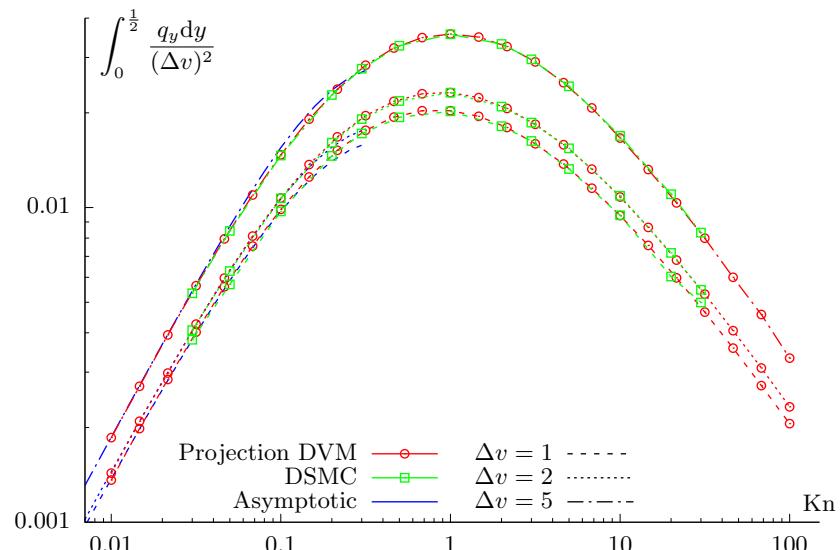


Рисунок 3.11 — Зависимость поперечного теплового потока от числа Кнудсена.

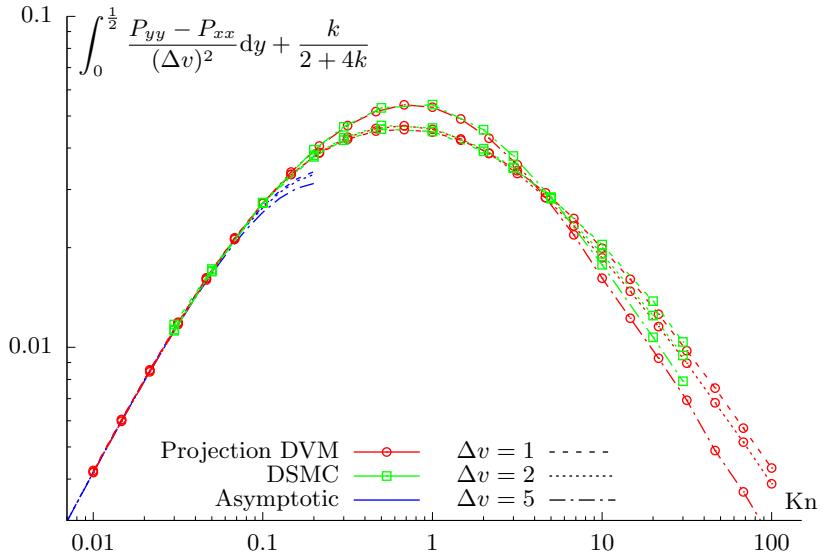


Рисунок 3.12 — Зависимость разности $P_{xx} - P_{yy}$ от числа Кнудсена.

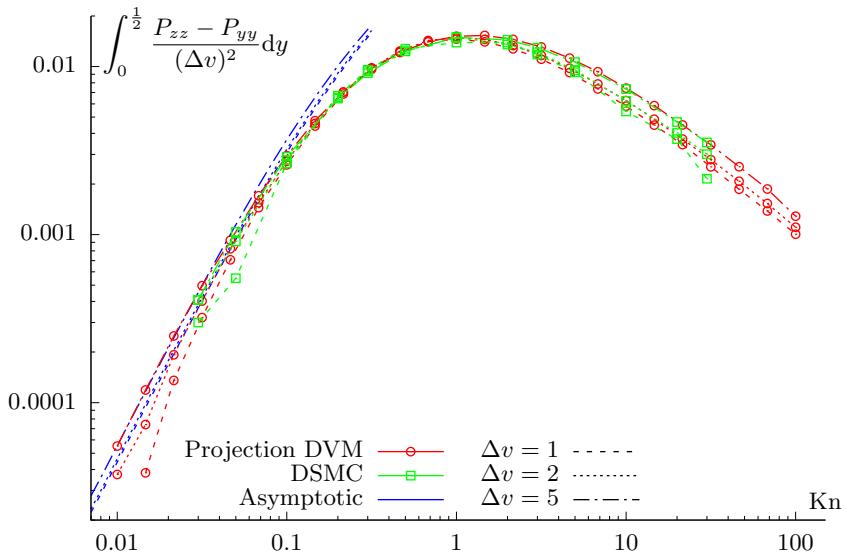


Рисунок 3.13 — Зависимость разности $P_{zz} - P_{yy}$ от числа Кнудсена.

скольжения (3.24):

$$\begin{aligned}
 P_{NSxy}^* &= \frac{1}{k} \int_0^{\frac{1}{2}} P_{xy} dy, \quad P_{NSxy} = P_{NSxy}^*(\Delta v \rightarrow 0) = -\gamma_1 \frac{\Delta v}{2}, \\
 v_{NSx}^* &= \int_0^{\frac{1}{2}} v_x dy, \quad v_{NSx} = v_{NSx}^*(\Delta v \rightarrow 0) = \frac{\Delta v}{8}, \\
 \tau_{NS}^* &= \int_0^{\frac{1}{2}} \tau dy, \quad \tau_{NS} = \tau_{NS}^*(\Delta v \rightarrow 0) = \frac{\gamma_1 (\Delta v)^2}{\gamma_2 30}.
 \end{aligned}$$

Их числовые значения показаны в табл. 3.

На рис. 3.8–3.10 показаны макроскопические переменные, не равные нулю в линеаризованной задаче. При малых Δv верификация результатов может быть

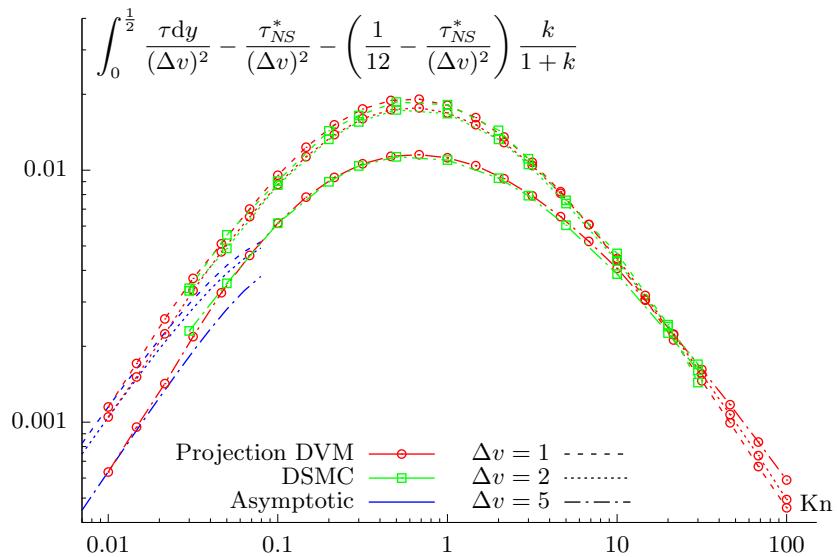


Рисунок 3.14 — Зависимость температуры от числа Кнудсена.

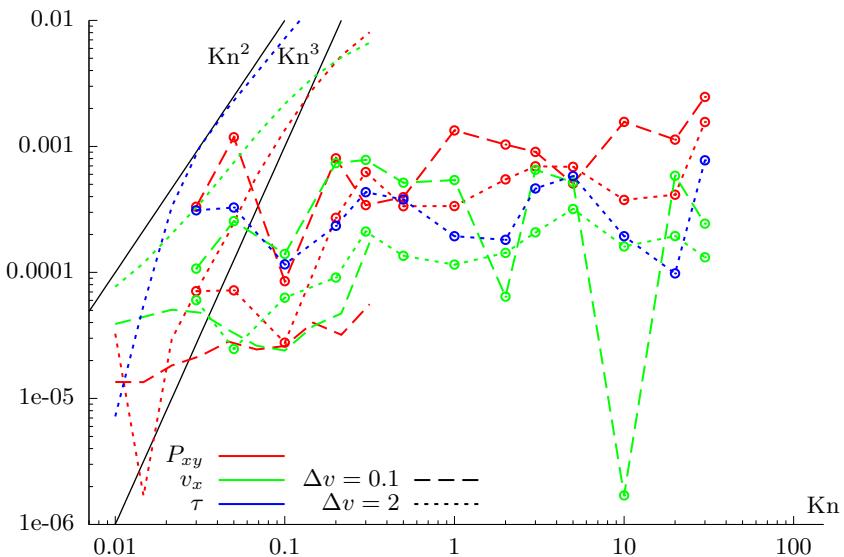


Рисунок 3.15 — Абсолютная разница $|\int_0^{1/2} (h^{(1)} - h^{(2)}) dy|$, где $h = P_{xy}, q_x, \tau$, а верхний индекс обозначает метод, в зависимости от числа Кнудсена: линии без кругов соответствуют разнице между асимптотическим и КПИМДС решениями, линии с кругами соответствуют разнице между решениями, полученными методом Бёрда и КПИМДС.

Таблица 3 — Величины, полученные из численного решения уравнений Навье—Стокса.

Δv	P_{NSxy}^*/P_{NSxy}	v_{NSx}^*/v_{NSx}	τ_{NS}^*/τ_{NS}
0.1	1.000220	0.999945	1.000049
1	1.021740	0.994715	1.004237
2	1.083898	0.981103	1.015173
5	1.438344	0.931106	1.055818

основана на сравнении с точным численным решением линеаризованного уравнения Больцмана [191] (чёрная линия). В отличие от метода Бёрда численные флуктуации КПИМДС уменьшаются, когда задача приближается к линейному случаю (благодаря интерполяции (2.18)).

Для сравнения с решением уравнения Крука—Веландера (голубая линия) k заменяется в (3.14) следующими величинами: $\gamma_1 k$ для рис. 3.8 и 3.9, $\gamma_2 k$ для рис. 3.10. При такой модификации коэффициенты вязкости и теплопроводности модели Крука—Веландера совпадают с твердосферными, поскольку для неё $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$.

На рис. 3.8 и рис. 3.10 видно, что разница между асимптотическим решением (синяя линия) и КПИМДС (красная линия) является $O(\text{Kn}^3)$. Это находится в соответствии с выражениями (1.139) и (1.140). При $\Delta v = 0.1$, асимптотическое решение близко к линейному (3.7), которое имеет больший порядок аппроксимации. На рис. 3.9 отклонение кривых КПИМДС от асимптотического решения при малых Kn указывает на то, что погрешность, достигнутая КПИМДС, находится в интервале от 10^{-5} до 10^{-4} . Это утверждение более наглядно на рис. 3.15, где абсолютная разница между решениями изображена для некоторых макроскопических переменных. Увеличение ошибки для τ и v_x для самых маленьких Kn обусловлено недостаточным количеством временных итераций, выполненных во время моделирования. Другими словами, стационарное состояние не достигается полностью.

Метод Бёрда (зелёная линия) демонстрирует погрешность в интервале от 10^{-4} до 10^{-3} , главным образом из-за высокой дисперсии статистического шума, особенно при $\Delta v = 0.1$. На рис. 3.8 заметна разность с постоянным знаком между решениями, полученными методом Бёрда и КПИМДС. Она может быть уменьшена при устремлении шага по времени к нулю. Меньший временной шаг намеренно не используется в настоящем расчёте DSMC, чтобы проиллюстрировать, что даже такой небольшой временной шаг как (3.26) может оказаться недостаточным для достижения решения высокой точности. Между прочим, другие величины, рассчитанные методом Бёрда, практически не меняются с дальнейшим уменьшением временного шага.

На рис. 3.11–3.14 показаны макроскопические переменные, возникающие как квадрат от Δv . Результаты для $\Delta v = 0.1$ опущены из-за низкой точности. Разница между решениями, полученными асимптотическим методом и КПИМДС, является $O(\text{Kn}^3)$ на рис. 3.11–3.13 и $O(\text{Kn}^2)$ на рис. 3.14. Принимая во внимание

соответствующую точность отдельных подходов, все представленные результаты находятся в полном согласии.

3.2 Течение между пластинами с синусоидальным распределением температур

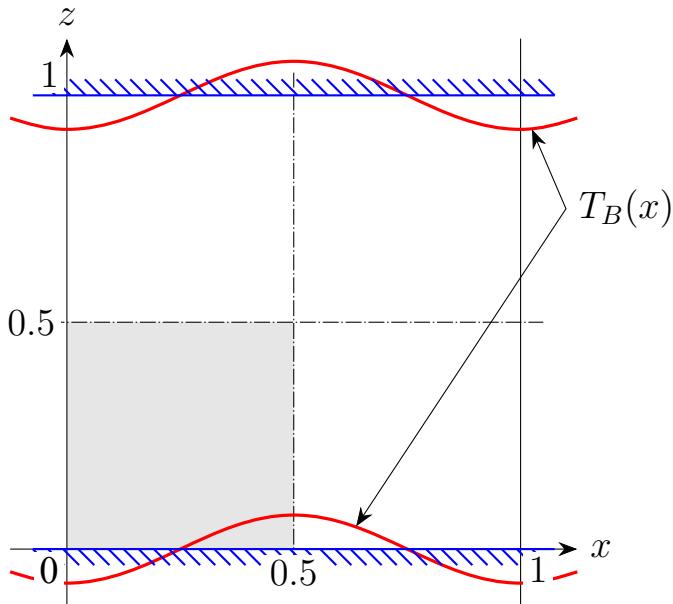


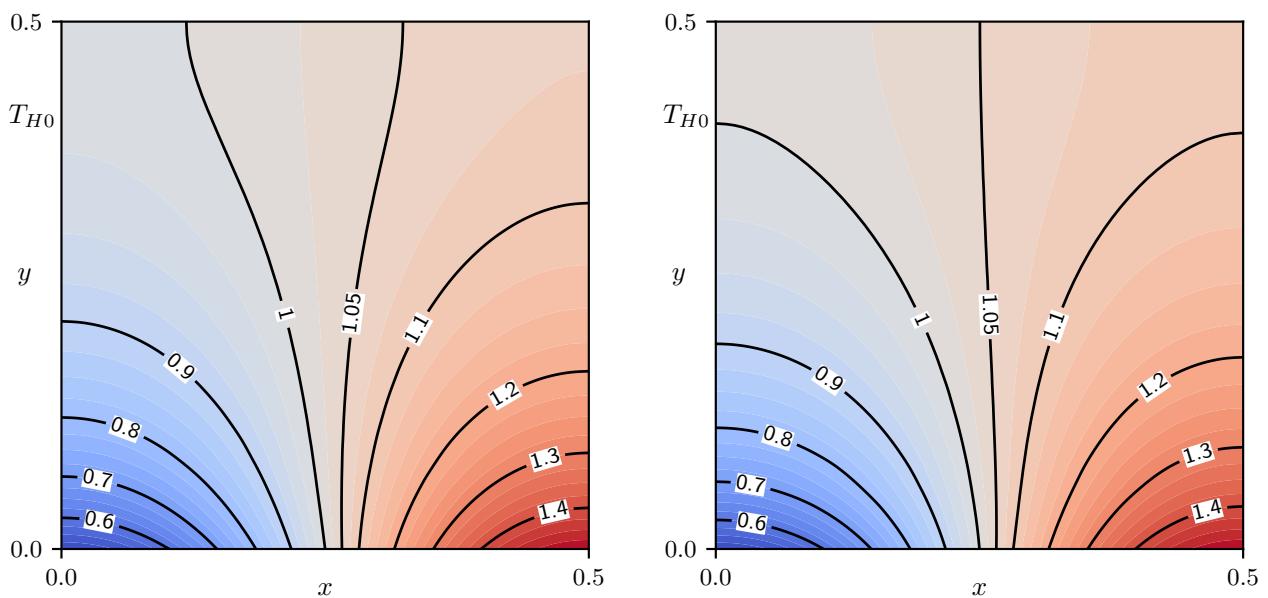
Рисунок 3.16 — Геометрия задачи

Рассмотрим плоскую периодическую геометрию как на рис. 3.16. Газ расположен между двумя покоящимися ($v_{Bi} = 0$) бесконечными параллельными пластинами, разделёнными на единичное расстояние. Их температура распределена по синусоидальному закону:

$$T_B = 1 - \frac{\cos(2\pi x)}{2}. \quad (3.29)$$

Плотность газа нормирована на единицу (3.3). В силу симметрии задачи расчётная область представляет собой квадрат со стороной $1/2$. На рис. 3.16 она выделена серым цветом.

Эта задача изучалась в [188] как с помощью уравнений КГФ, так и на основе кинетического подхода, однако из-за высокой сложности численного решения уравнения Больцмана использовалось уравнение Крука—Веландера. Некоторые результаты моделирования смеси газов для рассматриваемой геометрии можно найти в [218]. В настоящем исследовании получено прямое решение уравнения



а) уравнение теплопроводности (1.131)

б) уравнения КГФ

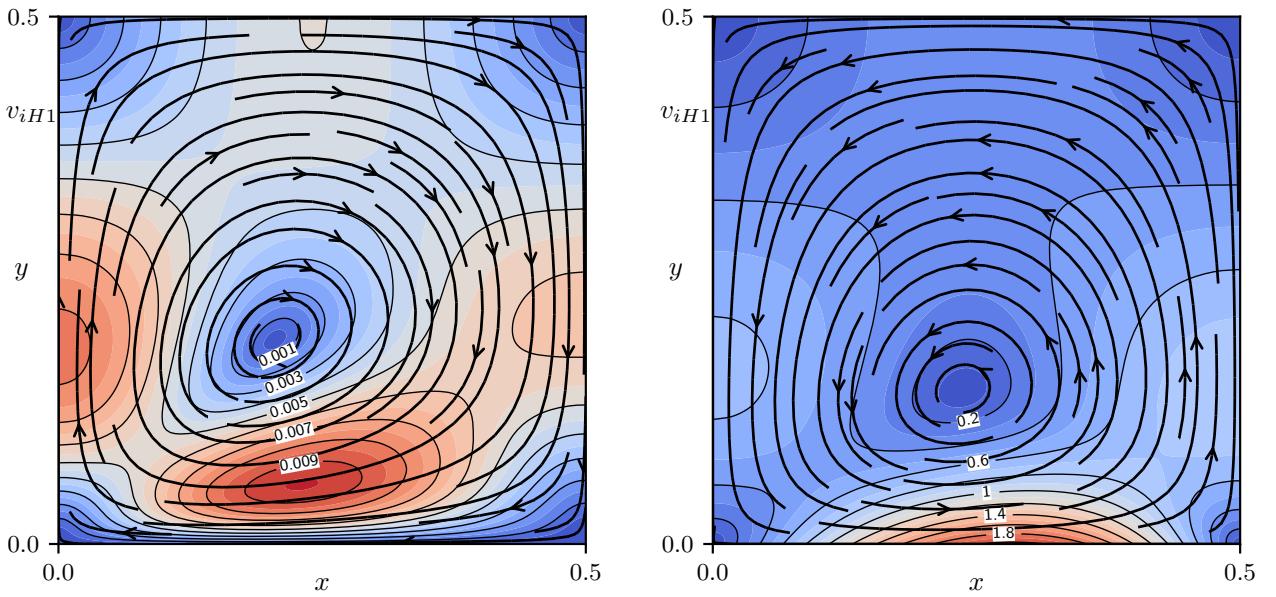
Рисунок 3.17 — Изотермические линии в континуальном пределе

Больцмана для газа твёрдых сфер. Кроме того, в рамках задачи рассматривается асимптотическое решение для малых Kn , основанное на граничных условиях с учётом дополнительных членов старшего порядка.

Решение задачи в континуальном пределе

Для численного решения поставленной задачи в физическом пространстве используется следующая прямоугольная сетка: область $0 < x < 1/2$ разбивается на 30 интервалов одинаковой длины, а область $0 < y < 1/2$ на 40 интервалов, сгущающихся к $y = 0$.

На рис. 3.17 показано стационарное температурное поле, получаемое как при решении уравнения теплопроводности, так и уравнений КГФ. В континуальном пределе уравнение теплопроводности получается из уравнений КГФ, если положить $\Gamma_7 = 0$ и $K_1 = 0$. Эффект теплового скольжения газа значительно превышает влияние нелинейной термострессовой конвекции, что продемонстрировано на рис. 3.18, где уравнения КГФ решены для граничных условий со скольжением и без. Отметим также, что направления течения газа противоположны на рис. 3.18а и 3.18б. Полученные результаты в континуальном пределе совпадают с

а) уравнения КГФ без скольжения ($K_1 = 0$)

б) уравнения КГФ

Рисунок 3.18 — Стационарное поле v_{i1} в континуальном пределе: изолинии соответствуют модулю, кривые со стрелками изображают направление.

Таблица 4 — Параметры сеток в скоростном пространстве: ζ_{cut} — радиус сферы, в которой помещаются все узлы сетки, N_i — максимальное количество узлов вдоль оси x_i , $|\mathcal{V}|$ — полное число узлов, $\min \Delta \zeta_i$ — минимальное расстояние между узлами вдоль оси x_i , $\delta T_M/T$ — относительная невязка температуры максвеллиана, $\delta T_{MM}/T$ — относительная невязка температуры суммы двух полумаксвеллианов, разделённых плоскостью $\zeta_y = 0$.

Сетка	ζ_{cut}	$N_{x,z}/2$	$N_y/2$	$ \mathcal{V} $	$\min \Delta \zeta_{x,z}$	$\min \Delta \zeta_y$	$\delta T_M/T$	$\delta T_{MM}/T$
M1	4.25	8	8	2176	0.53	0.53	$[-20,0.3] \cdot 10^{-5}$	$-[4.0,10] \cdot 10^{-5}$
M2	5.3	11	26	20248	0.4	0.005	$[2.3,4.1] \cdot 10^{-5}$	$[2.7,4.0] \cdot 10^{-5}$
M3	4.5	12	15	15568	0.05	0.005	$[4.0,5.1] \cdot 10^{-3}$	$[4.4,5.5] \cdot 10^{-3}$
M4	8.0	16	16	28640	0.1	0.1	$[1.65,1.79] \cdot 10^{-3}$	$[3.1,3.4] \cdot 10^{-3}$

представленными в [188]. Этот факт может служить верификацией используемого солвера `snitSimpleFoam`.

Решение для произвольных чисел Кнудсена

Для рассмотрения задачи в произвольном диапазоне чисел Кнудсена необходимо обратиться к численному решению уравнения Больцмана. В физическом пространстве использовалась такая же разностная сетка, как и при решении уравнений гидродинамического типа, однако в слое Кнудсена (вблизи $y = 0$) она до-

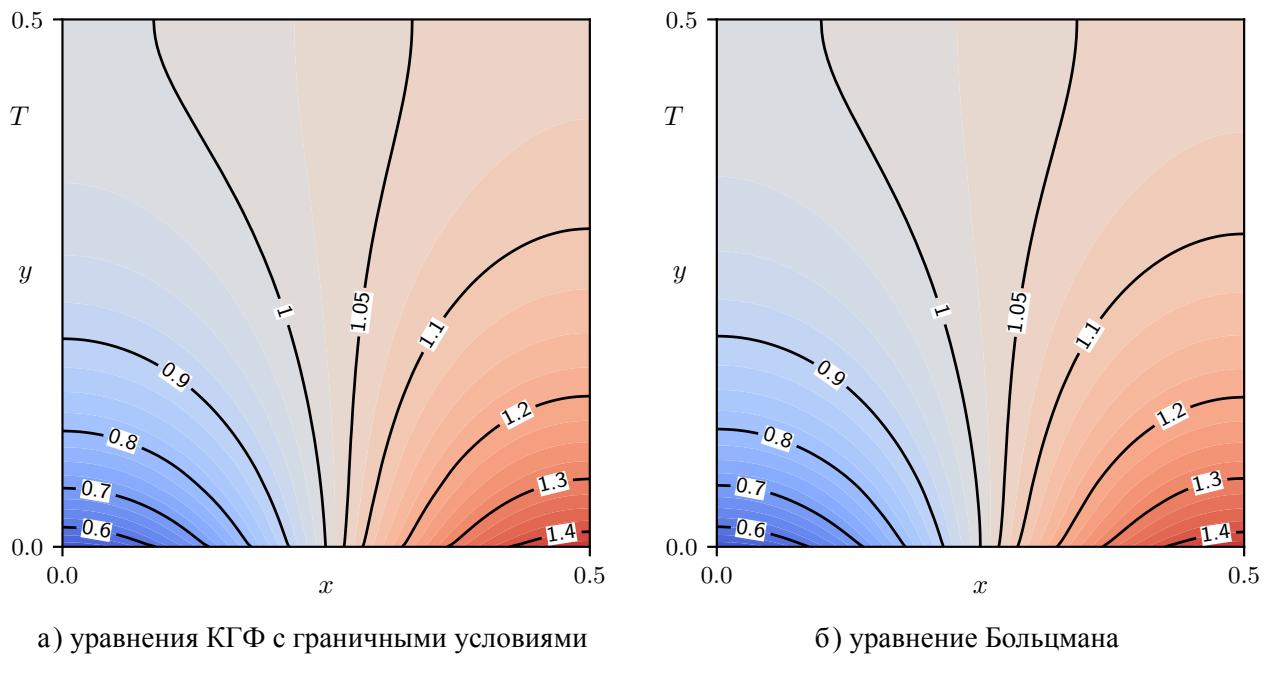


Рисунок 3.19 — Изотермические линии для $\text{Kn} = 0.01$

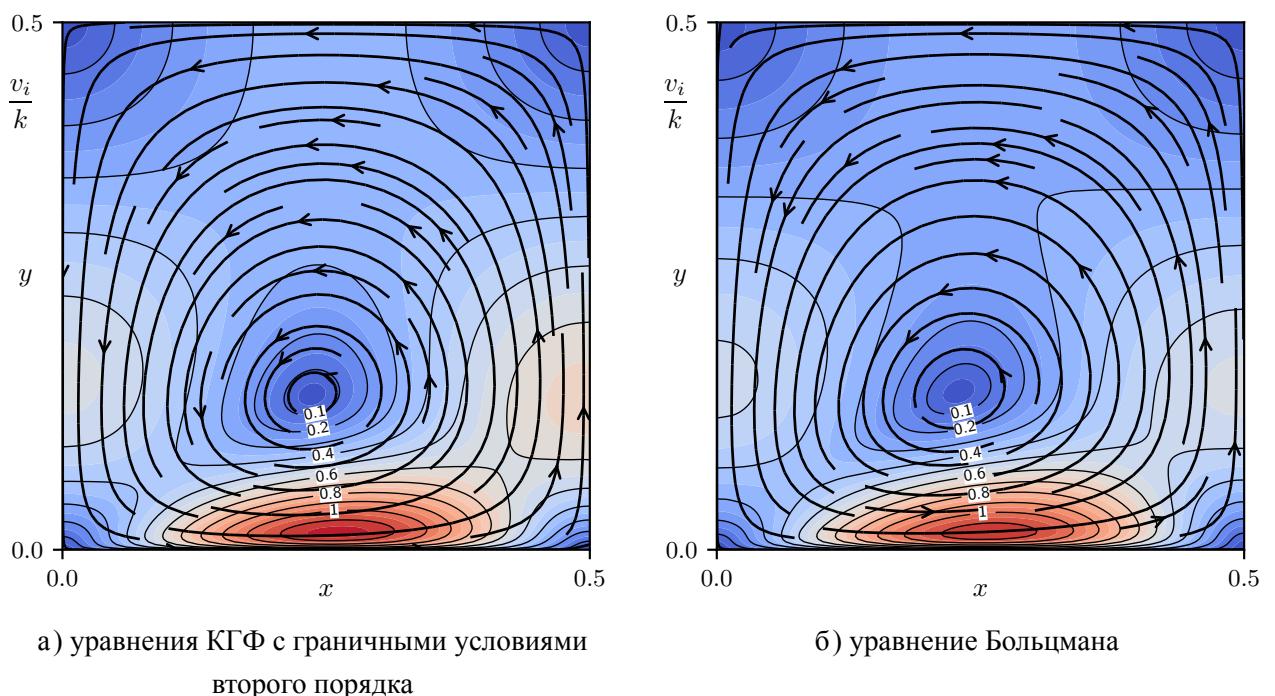


Рисунок 3.20 — Стационарное поле скоростей для $\text{Kn} = 0.01$: изолинии соответствуют модулю, кривые со стрелками изображают направление.

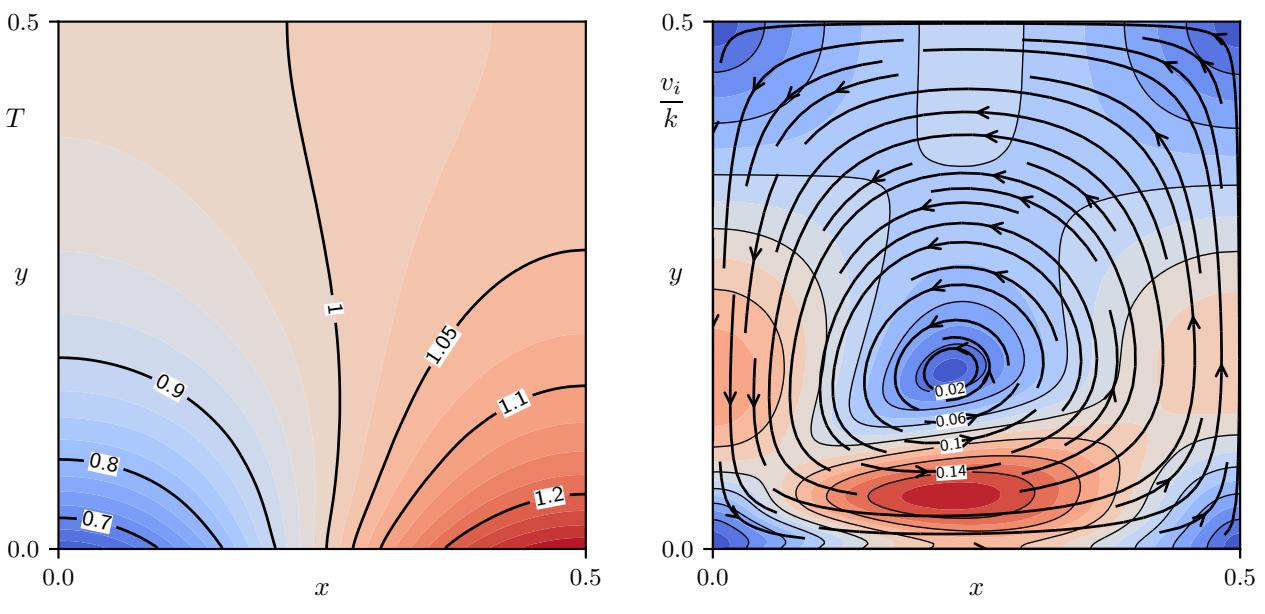


Рисунок 3.21 — Решение уравнения Больцмана для $\text{Kn} = 0.1$

полнительно сгущалась так, что ширина приграничной ячейки равнялась 0.02 от длины свободного пробега.

Для контроля точности в скоростном пространстве использовались несколько сеток (M_1, M_2, M_3), параметры которых представлены в табл. 4. Сначала задача решалась на грубой равномерной прямоугольной сетке M_1 , после чего результат уточнялся на неравномерных сетках. В прямоугольной сетке M_2 узлы вдоль осей x и z располагались как корни полинома Эрмита, а вдоль оси y сгущались в геометрической прогрессии, чтобы адекватно аппроксимировать сильный перепад функции распределения в слое Кнудсена. В прямоугольной сетке M_3 расстояние между узлами растёт квадратично вдоль каждой из осей. В отличие от M_2 , холодные распределения (с температурой близкой к $T = 0.5$) точнее аппроксимируются на M_3 . Множества кубатурных точек также имели разную мощность: около $5 \cdot 10^3$ для равномерной сетки и около $5 \cdot 10^4$ для неравномерной. Кроме того, для очень малых Kn применялась временная экстраполяция распределений температуры и поля скоростей, поскольку достижение стационарного состояния вблизи $y = 1/2$ требует слишком большого числа итераций явной схемы.

При использовании неравномерных скоростных сеток необходимо учитывать не только качество аппроксимирования функции распределения, но и точность кубатур вида (2.7). Например, в последних двух столбцах табл. 4 представлены диапазоны значений невязки температуры максвеллиана δT_M и суммы двух полумаксвелианов δT_{MM} для характерных температур и скоростей задачи. На гру-

бой сетке моменты функции распределения вычисляются достаточно точно, если узлы распределены равномерно или как корни полинома Эрмита. В противном случае необходимо использовать достаточно мелкую сетку, как это сделано вдоль оси y для сетки M2. Для сетки M3 кубатура (2.7) для температуры всегда превышает истинное значение на величину порядка 0.004, что позволяет скорректировать на эту величину поле температур, получаемое из численного решения уравнения Больцмана. Для сетки M1 невязка температуры принимает отрицательные значения для температур близких к $T = 1.5$, поскольку используется недостаточное значение ζ_{cut} .

На рис. 3.19 и 3.20 изображены поля температуры и скорости для $\text{Kn} = 0.01$ и проводится сравнение между численным решением уравнения Больцмана и решением уравнений КГФ для малых Kn . Отчётливо видно, что температурное поле, полученное с использованием граничного условия старшего порядка (рис. 3.19a) существенно лучше приближает точное решение (рис. 3.19б) по сравнению с температурным полем, полученным без его использования (рис. 3.17б).

На рис. 3.21 показаны соответствующие распределения для $\text{Kn} = 0.1$. С увеличением Kn возрастают поток теплового скольжения и температурный скачок возле границы $y = 0$. При этом область максимальной скорости газа отодвигается от пластины.

Чтобы наглядно продемонстрировать сходимость численного решения уравнения Больцмана к решению уравнений КГФ в континуальном пределе, рассмотрим некоторые интегральные величины в зависимости от числа Кнудсена (рис. 3.22). На рис. 3.22а отчётливо видно, что граничные условия для гидродинамических уравнений наряду с соответствующими коррекциями кнудсеновского слоя аппроксимируют численное решение уравнения Больцмана с заявленной точностью. В частности, условие (1.104) даёт погрешность $O(k)$, учёт температурного скачка первого порядка приводит к $O(k^2)$, добавка линейного скачка второго порядка улучшает сходимость до $O(k^3)$. Отметим, что решение, полученное на грубой равномерной сетке M1, практически совпадает с решением на M2, а также с откорректированным решением на M3.

На рис. 3.22б такие же порядки погрешности наблюдаются. Посколько изображено поле v_i/k , то погрешность численного решения уравнения Больцмана возрастает для малых k . Решения, полученные на неравномерных сетках, сгущающихся в области разрыва функции распределения ($y = 0$), совпадают между собой, но отличаются на константную величину (около 0.008) от решения на M1. Та-

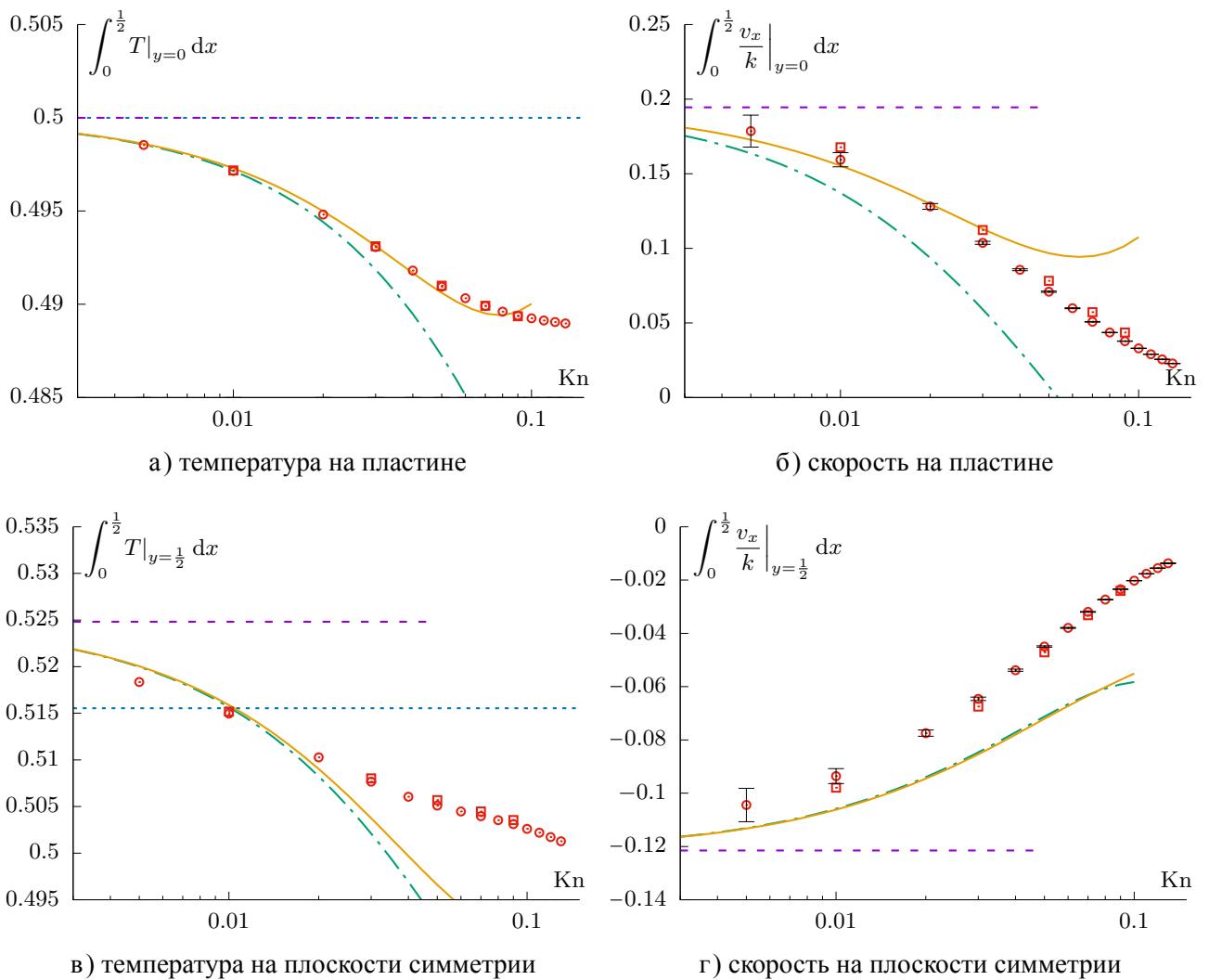


Рисунок 3.22 — Некоторые граничные интегралы в зависимости от числа Кнудсена, полученные разными методами: уравнение теплопроводности ·····, уравнения КГФ с граничными условиями ведущего порядка (только тепловое скольжение) - - -, первого - - - и второго — порядков, уравнение Больцмана на сетках M1 о, M2 □ и M3 △. Планка погрешности у M3 соответствует коррекции температурного поля в соответствии с невязкой температурой максвеллиана. Планка погрешности у M1 соответствует относительной ошибке $3 \cdot 10^{-4}$.

ким образом, разрыв функции распределения на границе диффузного отражения и затухание этого разрыва в слое Кнудсена вносят незначительный вклад в общее решение задачи. Для медленных течений этот факт объясняется тем, что величина разрыва равна $O(k)$. Это наблюдение позволяет считать функцию распределения достаточно гладкой без существенных потерь в точности, а, следовательно, можно пренебречь необходимостью адаптации скоростной сетки к геометрии задачи.

На рис. 3.22в и 3.22г, как и ожидалось, гидродинамическое решение отличается от кинетического на $O(k)$, поскольку изображены интегральные величины, вычисляемые вдали от границы диффузного отражения. На рис. 3.22в отчетливо видно, что решение уравнения Больцмана сходится именно к решению уравнений

КГФ, а не уравнения теплопроводности, при этом скорректированное решение на М3 практически совпадает с М2, немного превышая М1 (около 0.001). Эта разница, по-видимому, объясняется грубой аппроксимацией сетки М1. Кроме того, на рис. 3.22в и 3.22г видно, что граничные условия, учитывающие вторые производные, слабо влияют на решение уравнений КГФ, однако учёт только лишь температурного и скоростного скачков позволяет значительно улучшить точность асимптотического решения для малых k .

3.3 Течение между двумя равномерно нагретыми некоаксиальными цилиндрами

Теперь рассмотрим случай отсутствия градиента температуры на поверхности окружающих тел в покое. Уравнения Навье-Стокса с любыми граничными условиями скольжения имеют тривиальное решение $u_i = 0$, которое, однако, недействительно для уравнений КГФ (1.87), (1.89), (1.91). Как указывалось выше, даже при таких граничных условиях *нелинейное термострессовое течение* может возникнуть из-за непараллельности изотермических поверхностей (см. (1.95)).

Рассмотрим два цилиндра (или две сферы) с радиусами $R_1 = 1$, $R_2 = r$ и с температурами $T_1 = 1$, $T_2 = 1 + \tau$ соответственно. Оси цилиндра параллельны, расстояние между ними равно d вдоль оси x .

Решение задачи в континуальном пределе

На рис. 3.23 представлены результаты численного моделирования для

$$r = 2, \quad d = 0.5.$$

Течения между сферами (рис. 3.23а) и цилиндрами (рис. 3.23б) имеют схожую структуру. При возрастании τ течение газа в широкой области усиливается быстрее, чем в узкой (рис. 3.23в), а смена направления градиента температуры на противоположное разворачивает вихрь в обратном направлении (рис. 3.23г).

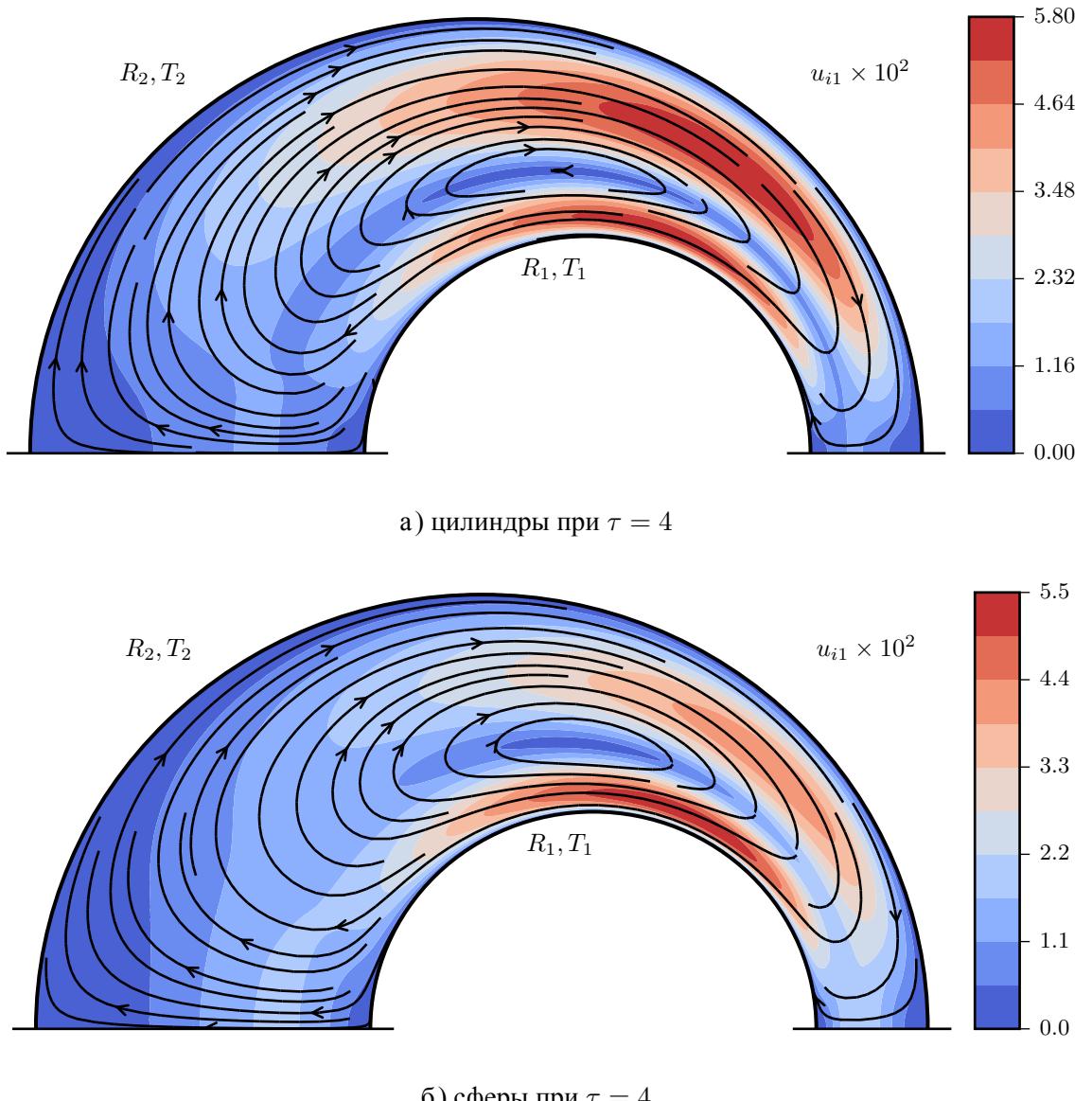


Рисунок 3.23 — Поле скорости u_{i1} между двумя некоаксиальными поверхностями: изолинии соответствуют модулю, кривые со стрелками изображают направление.

Нелинейное термострессовое течение убывает как $O(\tau^3)$ при малых τ (рис. 3.24), поскольку температурный градиент включен в термострессовую силу в виде кубического члена (см. (1.94)). Поэтому, когда τ^3 становится сравнимым с k , следует наравне учитывать эффекты второго порядка по k [14]. С ростом τ наклон кривой становится менее крутым, так как вязкость газа твёрдых сфер растёт с температурой (рис. 3.24).

Рассмотрим теперь силу, действующую на цилиндры. Как указано ранее, r_{H2} определяется с точностью до константы из уравнений КГФ (1.87), (1.89), (1.91). Эта константа не вносит вклада в общую силу, действующую на тело, но для определённости удельной силы на единицу площади

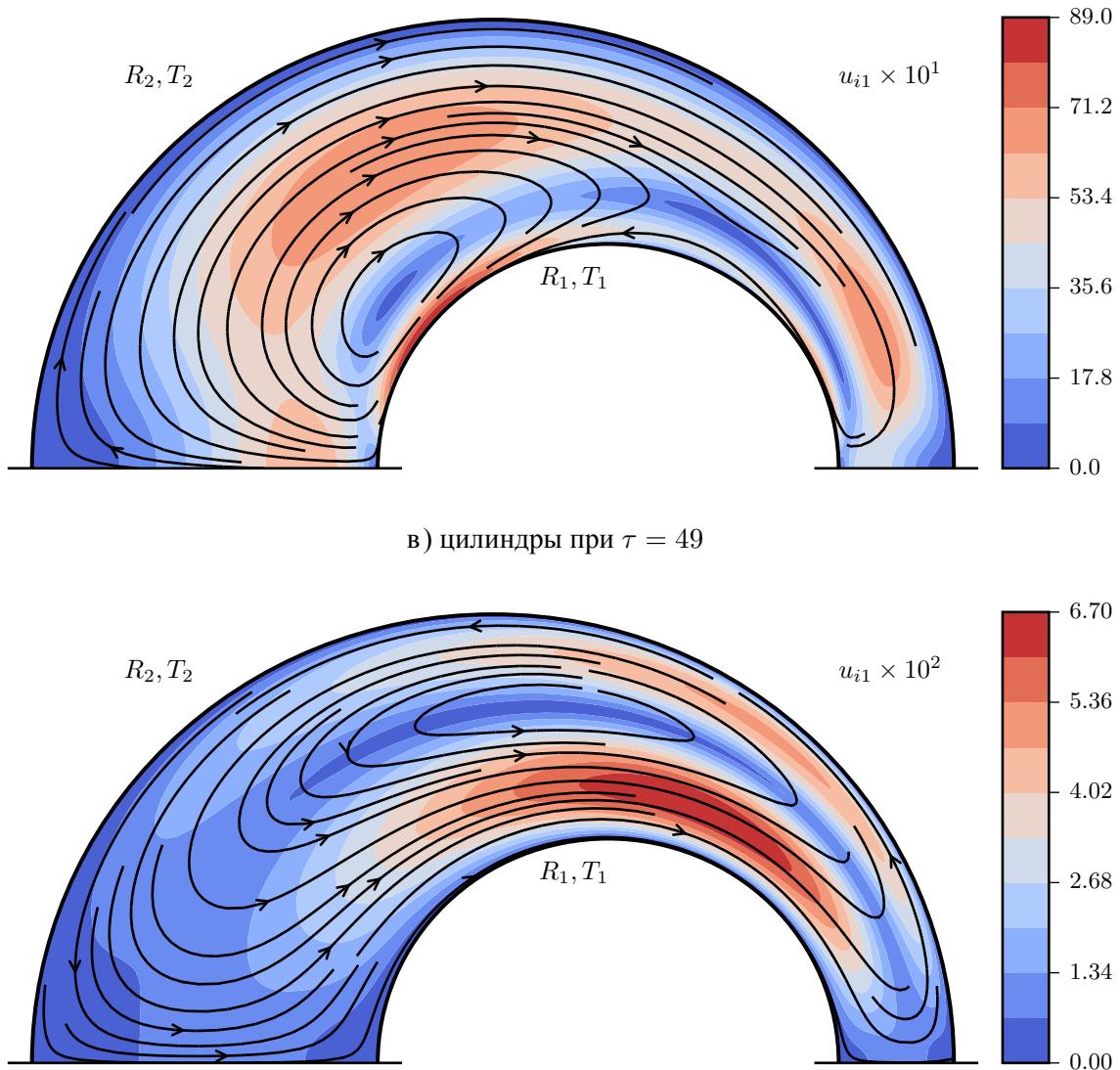


Рисунок 3.23 — (продолжение) Поле скорости u_{i1} между двумя некоаксиальными поверхностями: изолинии соответствуют модулю, кривые со стрелками изображают направление.

необходимо наложить дополнительное условие на p_{ijH2} , например:

$$\int p_{H2}^\dagger d\mathbf{x} = 0. \quad (3.30)$$

Вклад каждого члена (1.124) в общую величину действующей силы показан на рис. 3.25 и 3.26. Отметим, что представленный профиль полного значения соответствует не реальному профилю силы F_{i2} , действующему на единицу площади, а только сумме всех членов в (1.124). Определение действующей силы в конкретной точке требует вычисления смешанных частных производных второго порядка на границе, что является сложной задачей в используемом методе конечных объёмов.

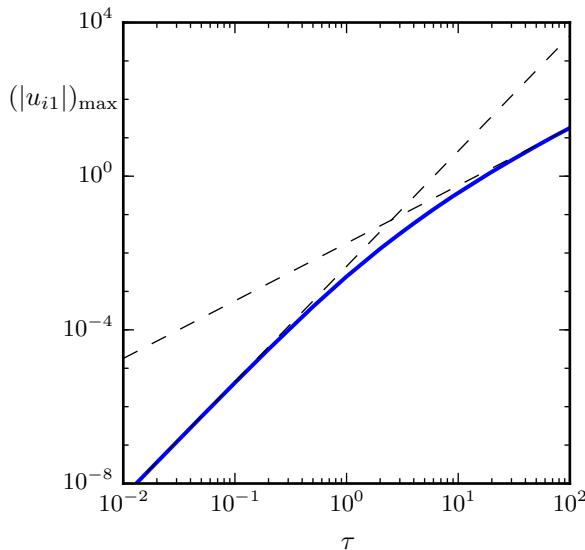


Рисунок 3.24 — Максимальная величина u_{i1} в зависимости от τ при $d = 0.5$. Для малых τ она пропорциональна τ^3 , а для больших τ , она пропорциональна $\tau^{3/2}$.

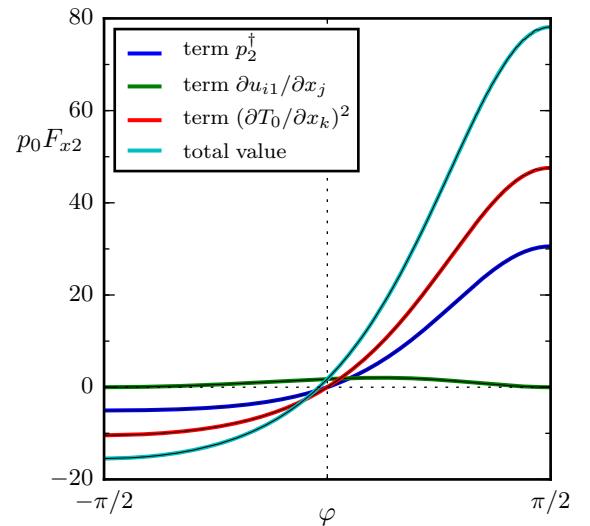
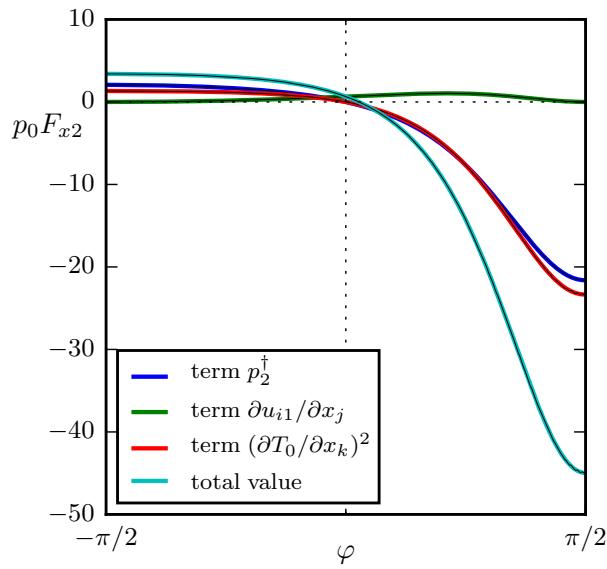
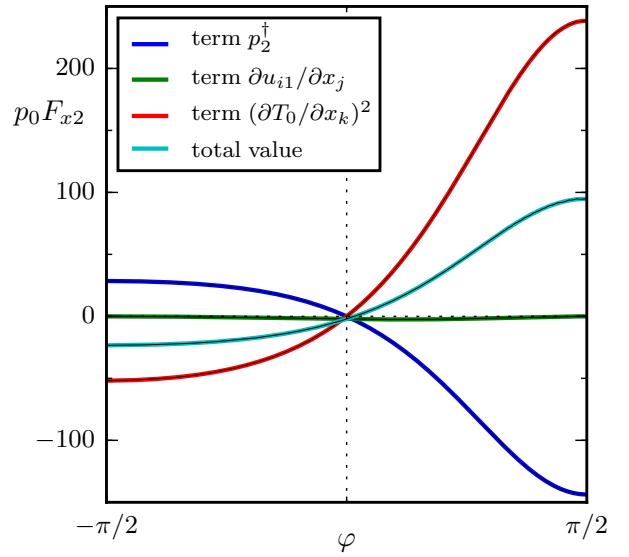


Рисунок 3.25 — Профиль компонентов действующей силы F_{x2} вдоль внутреннего цилиндра в полярных координатах при $d = 0.5$, $T_1 = 5$ и $T_2 = 1$.



а) внешний цилиндр



б) внутренний цилиндр

Рисунок 3.26 — Профиль компонентов действующей силы F_{x2} вдоль поверхности цилиндра в полярных координатах при $d = 0.5$ и $\tau = 4$. $\varphi = -\pi/2$ соответствует точке $x = d - 1$, $\varphi = \pi/2$ соответствует точке $x = d + 1$.

Для модели твёрдых сфер цилиндры притягиваются силой, пропорциональной τ^2 как для больших, так и для малых τ в соответствии с (1.130), хотя отдельные компоненты не подчиняются этому соотношению (рис. 3.27а, 3.27б). Таким образом, положение $d = 0$ является неустойчивым равновесием. Градиент температуры на внутреннем цилиндре растёт пропорционально $\tau^{3/2}$, но компенси-

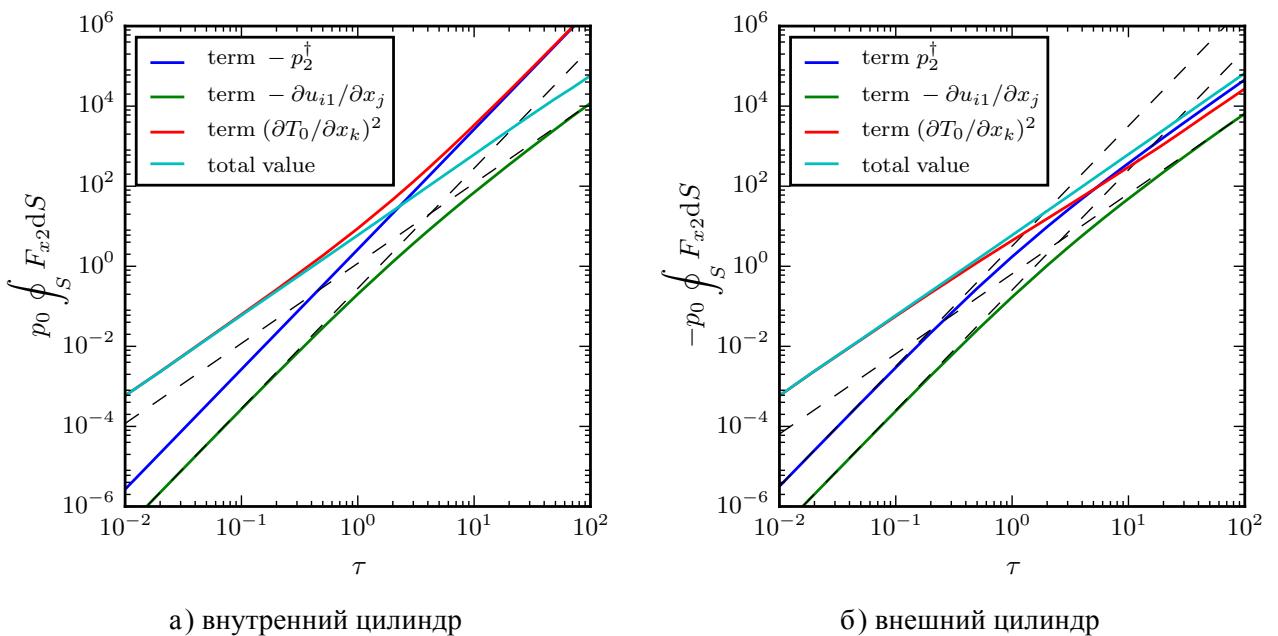


Рисунок 3.27 — Полная сила, действующая на цилиндр, и её составляющие в зависимости от τ при $d = 0.5$.

руется гидростатическим давлением p_{H2}^\dagger (рис. 3.26б, 3.27а). Вязкий член вносит лишь незначительный вклад в общую силу. Если мы поменяем температуры T_1 и T_2 (рис. 3.25), полная сила, естественно, не меняет ни направления, ни своей величины.

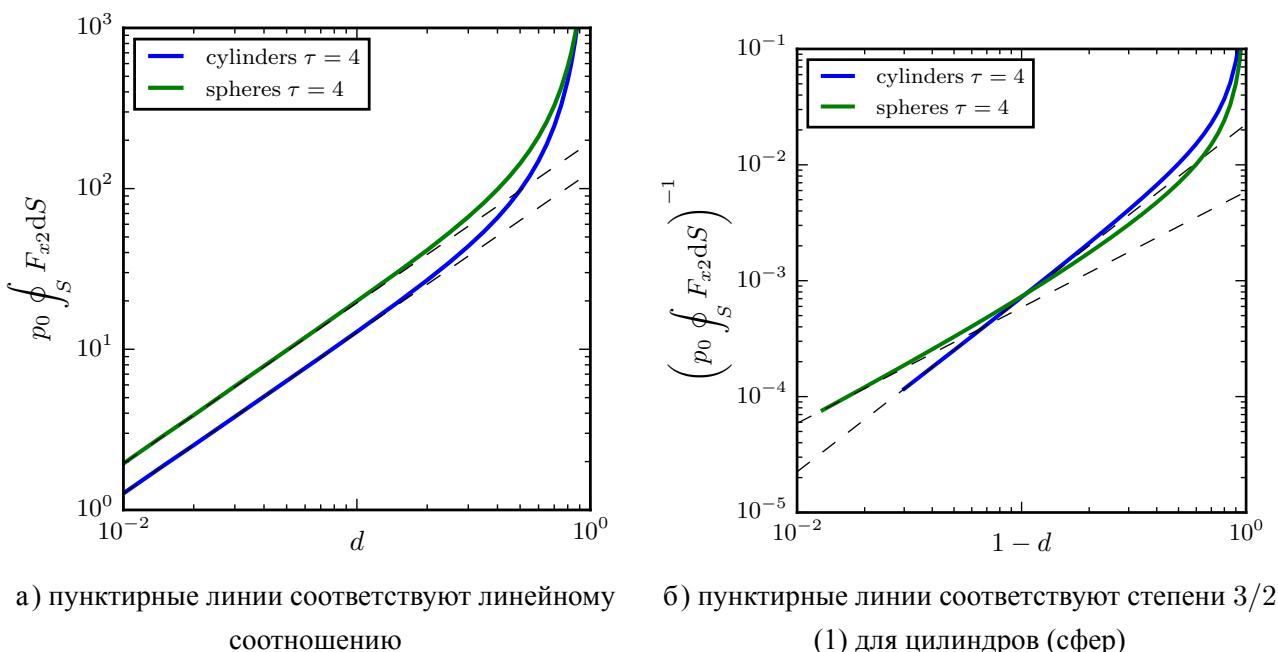


Рисунок 3.28 — Полная сила, действующая на внутренний цилиндр (сферу), в зависимости от расстоянием между их осями d

Как было указано в разделе 1.3 сила притяжения подобна электростатической (см. (1.130)), а значит задача может быть рассмотрена как цилиндрический

(сферический) конденсатор, для которого известны выражения ёмкости [252]:

$$C_{\text{cyl}} \propto \frac{1}{\theta}, \quad C_{\text{sph}} \propto \sum_{n=1}^{\infty} \frac{R_1 R_2 \sinh \theta}{R_2 \sinh n\theta - R_1 \sinh(n-1)\theta}, \quad \cosh \theta = \frac{R_1^2 + R_2^2 - d^2}{2R_1 R_2}. \quad (3.31)$$

Реальная зависимость силы притяжения от расстояния между телами представлена на рис. 3.28.

3.4 Течение между двумя равномерно нагретыми эллиптическими цилиндрами

В последнем примере газ заключён между двумя равномерно нагретыми коаксиальными эллиптическими цилиндрами расположенными так, что большие оси соответствующих эллипсов повёрнуты на угол β . Пусть малая полуось внешнего цилиндра является характерной длиной и расположена на оси y , в то время как большая полуось имеет длину a_1 и лежит на оси x . Оси цилиндров находятся в центре координат (x, y) . Полуоси внутреннего эллипса равны a_0 и b_0 . Температура внутреннего цилиндра $T_1 = 1$, а внешнего $T_2 = 1 + \tau$. Далее рассмотрим задачу при следующих параметрах:

$$a_1 = 1.5, \quad a_0 = 0.3, \quad b_0 = 0.7, \quad \tau = 4.$$

Результаты ПСМ разреженного газа в такой же геометрии при $0.1 \leq \text{Kn} \leq 5$ представлены в [13]. В силу симметрии задачи при $\beta = 0$ и $\beta = \pi/2$ достаточно рассмотреть первый квадрант ($x > 0, y > 0$), при остальных β расчётная область увеличивается вдвое ($x > 0$).

При различных числах Кнудсена возникают несколько видов течений. В континуальном пределе инфинитезимальное поле скоростей во всей области образует завихренность против часовой стрелки, обусловленную нелинейной термостressовой конвекцией, однако уже при $\text{Kn} > 0.1$, наоборот, формируется течение по часовой стрелке, которое доминирует над вихрем против часовой стрелки, находящимся в области, наиболее удалённой от внутреннего цилиндра [13]. Пристеночное течение по часовой стрелке образуется под действием тангенциального градиента температуры газа на границе с диффузным отражением от равномерно нагретых цилиндров. Особый интерес представляет процесс формирования ука-

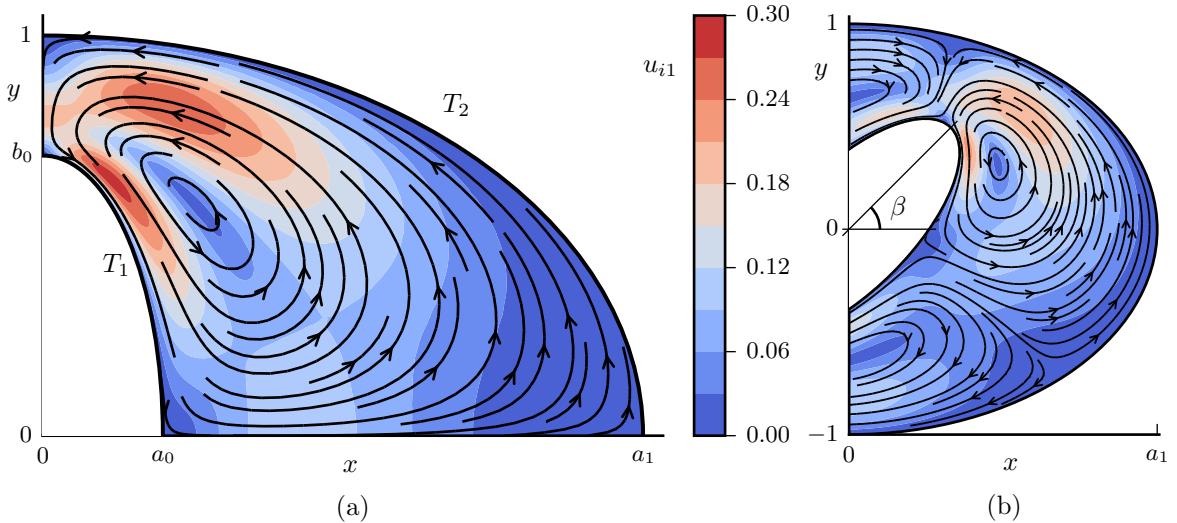


Рисунок 3.29 — Поле скоростей u_{i1} между коаксиальными эллиптическими цилиндрами при а) $\beta = \pi/2$ и б) $\beta = \pi/4$: изолинии соответствуют модулю, кривые со стрелками изображают направление.

занного вихря по часовой стрелке в зависимости от Kn , однако, ввиду того что поле скоростей убывает пропорционально Kn , получение соответствующих картин конкурирующих течений представляет нетривиальную задачу для численного анализа. В настоящем исследовании она решена с помощью КПИМДС.

Решение задачи в континуальном пределе

На рис. 3.29 показано инфинитезимальное поле скоростей в континуальном пределе, полученное путём численного решения уравнений КГФ. Модуль этого поля максимален в области с наибольшим значением градиента температурного поля.

На рис. 3.30 показан момент $M_{i2} = e_{ijk}x_j F_{k2}$ силы, действующей на единицу площади внутреннего цилиндра, в зависимости от угла поворота β . Полный момент равен нулю в симметричных случаях $\beta = 0$ и $\beta = \pi/2$, но только перпендикулярное состояние ($\beta = \pi/2$) устойчиво. Соответствующие профили (в смысле, описанном в предыдущем параграфе) момента силы вдоль внутреннего эллипса при разных β представлены на рис. 3.31.

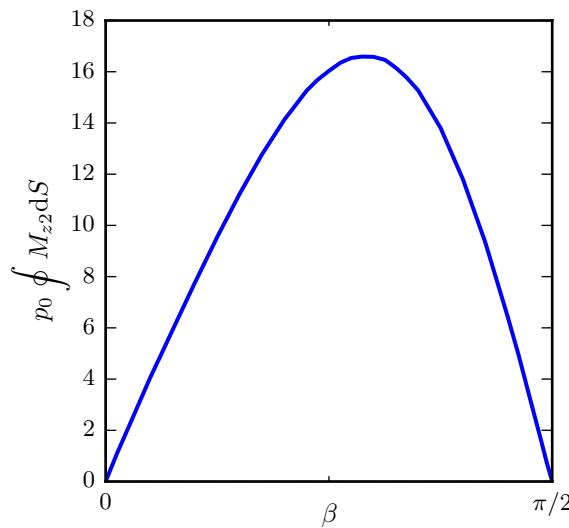


Рисунок 3.30 — Момент силы, действующей на внутренний эллиптический цилиндр, в зависимости от угла между большими осями цилиндров β при $\tau = 4$.

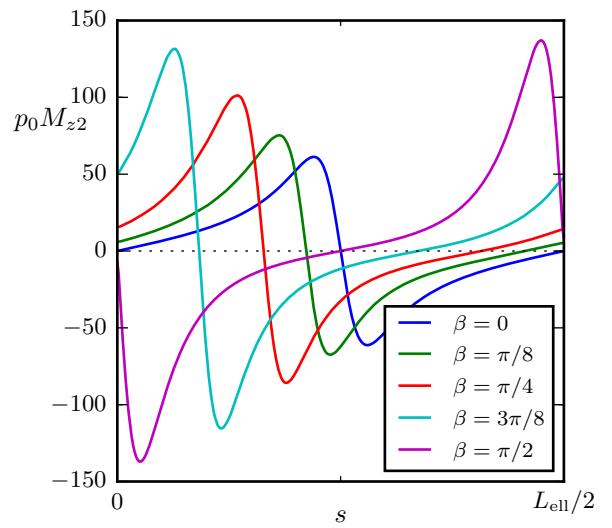
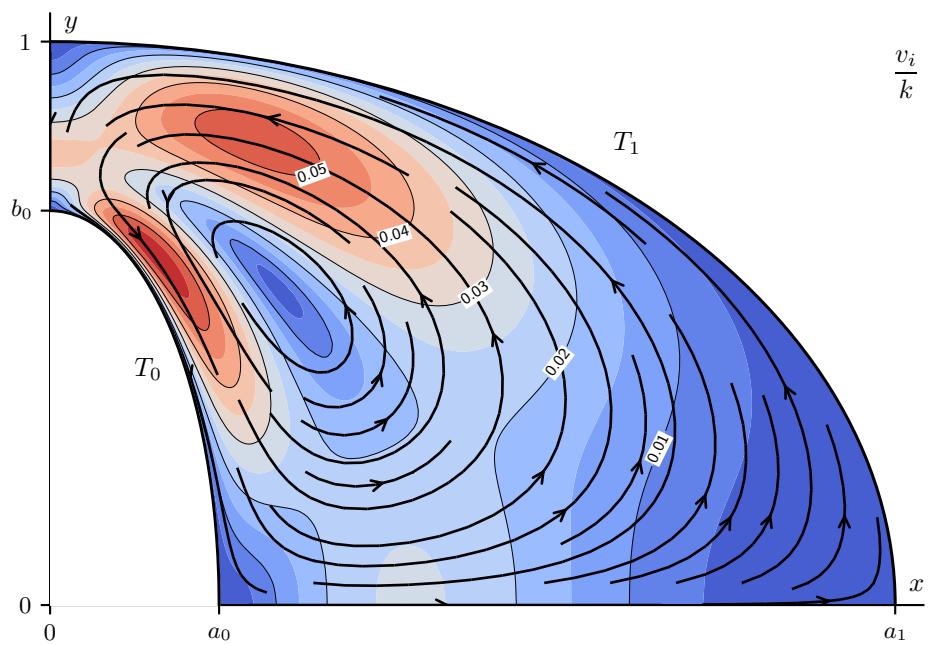


Рисунок 3.31 — Профиль суммы моментов отдельных составляющих силы M_{z2} вдоль внутреннего эллипса при $\tau = 4$. $s = 0$ и $s = L_{\text{ell}}/2$ соответствуют верхней ($y > 0$) и нижней ($y < 0$) точкам на оси ординат ($x = 0$). L_{ell} — периметр внутреннего эллипса.

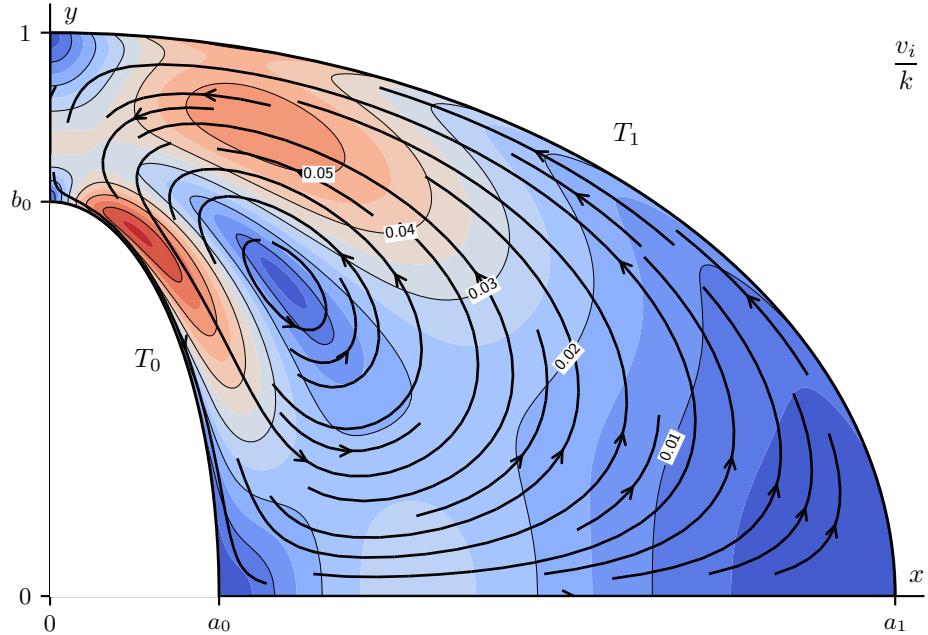
Решение для произвольных чисел Кнудсена

Для численного решения задачи при $\text{Kn} = 0.02$ в физическом пространстве используется структурированная сетка, состоящая из $N_V = 2401$ четырёхугольных ячеек. Она получается методом трансфинитной интерполяции с помощью пакета GMSH [97]. Направления продольных рёбер ячеек близки к касательным к изотермическим поверхностям, а поперечных к градиенту температуры. Вблизи цилиндрических поверхностей и особенно в области высокого градиента температур сетка сгущается так, что минимальная ширина ячейки равна 0.046 длины свободного пробега. В скоростном пространстве используется симметричная неравномерная сетка M4 (табл. 4), в которой расстояние между узлами растёт квадратично вдоль каждой из осей. Такая сетка позволяет удовлетворительно аппроксимировать функцию распределения для широкого диапазона температур от T_1 до T_2 .

Для нахождения стационарного решения уравнения Больцмана потребовалось 10^5 итераций, при этом на каждом шаге использовалось $5 \cdot 10^4$ кубатурных точек. На персональном компьютере с CPU 4×3 GHz такой расчёт занял несколько суток. На последних итерациях поля макроскопических величин усреднялись,

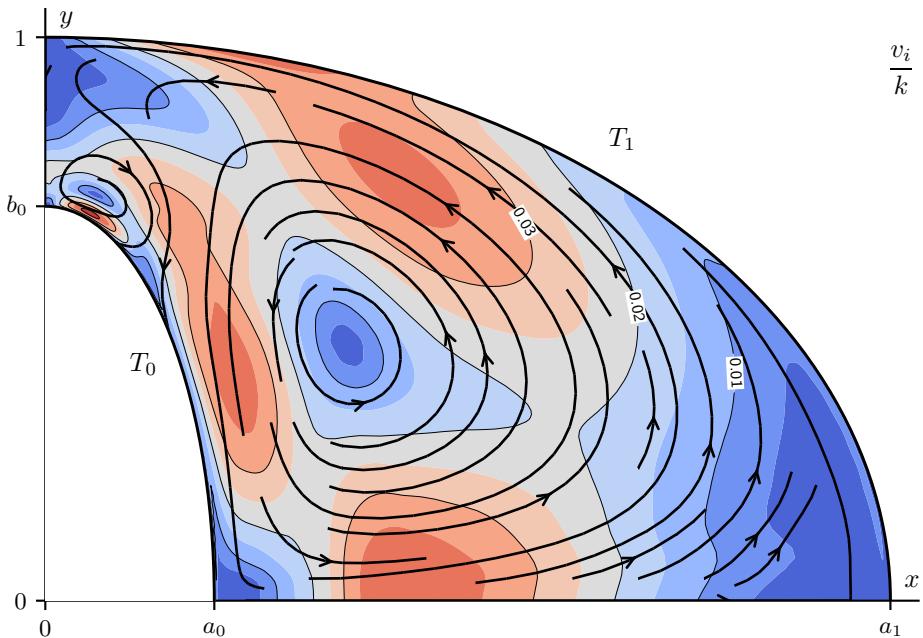


а) уравнения КГФ с граничными условиями первого порядка



б) уравнения КГФ с граничными условиями второго порядка

Рисунок 3.32 — Стационарное поле скоростей для $\text{Kn} = 0.02$: изолинии соответствуют модулю, кривые со стрелками изображают направление.



в) уравнение Больцмана

Рисунок 3.32 — (продолжение) Стационарное поле скоростей для $\text{Kn} = 0.02$: изолинии соответствуют модулю, кривые со стрелками изображают направление.

чтобы уменьшить шум, возникающий от циклического сдвига решётчатого правила Коробова на случайный вектор.

На рис. 3.32 изображены поля скорости, полученные различными методами. Учёт скачков скорости и температуры первого порядка (рис. 3.32а) качественно не меняет картину течения по сравнению с континуальным пределом (рис. 3.29), однако заметно понижает модуль скорости. Границные условия второго порядка, включая члены с тензором кривизны (рис. 3.32б), способны описать скольжение газа вдоль поверхностей цилиндров. Численное решение уравнения Больцмана (рис. 3.32в), однако, демонстрирует существенно отличную картину течения, где наряду с термострессовой конвекцией против часовой стрелки возникает конкурирующий поток в противоположном направлении. Этот поток наблюдается в области, где градиент температуры и кривизна граничной поверхности максимальны, но вне кнудсеновского слоя, поэтому он не может быть описан с помощью граничных условий. Действительно, $t_i \partial T_{H0} / \partial x_i = 0$ (t_i — единичный вектор касательный к границе), поэтому на границе $u_{iH1} = 0$. Термострессовое скольжение второго порядка сонаправлено с нелинейным термострессовым течением ($a_4 > 0$), однако в следующем порядке члены, связанные с кривизной, пропорциональные $\kappa t_i \partial T_{H1} / \partial x_i$ (κ — кривизна поверхности), уравновешивают пристеночное течение ($\kappa(a_6 + a_5/2) > 0$), т. е. $u_{iH2} t_i$ и $u_{iH3} t_i$ имеют противоположные

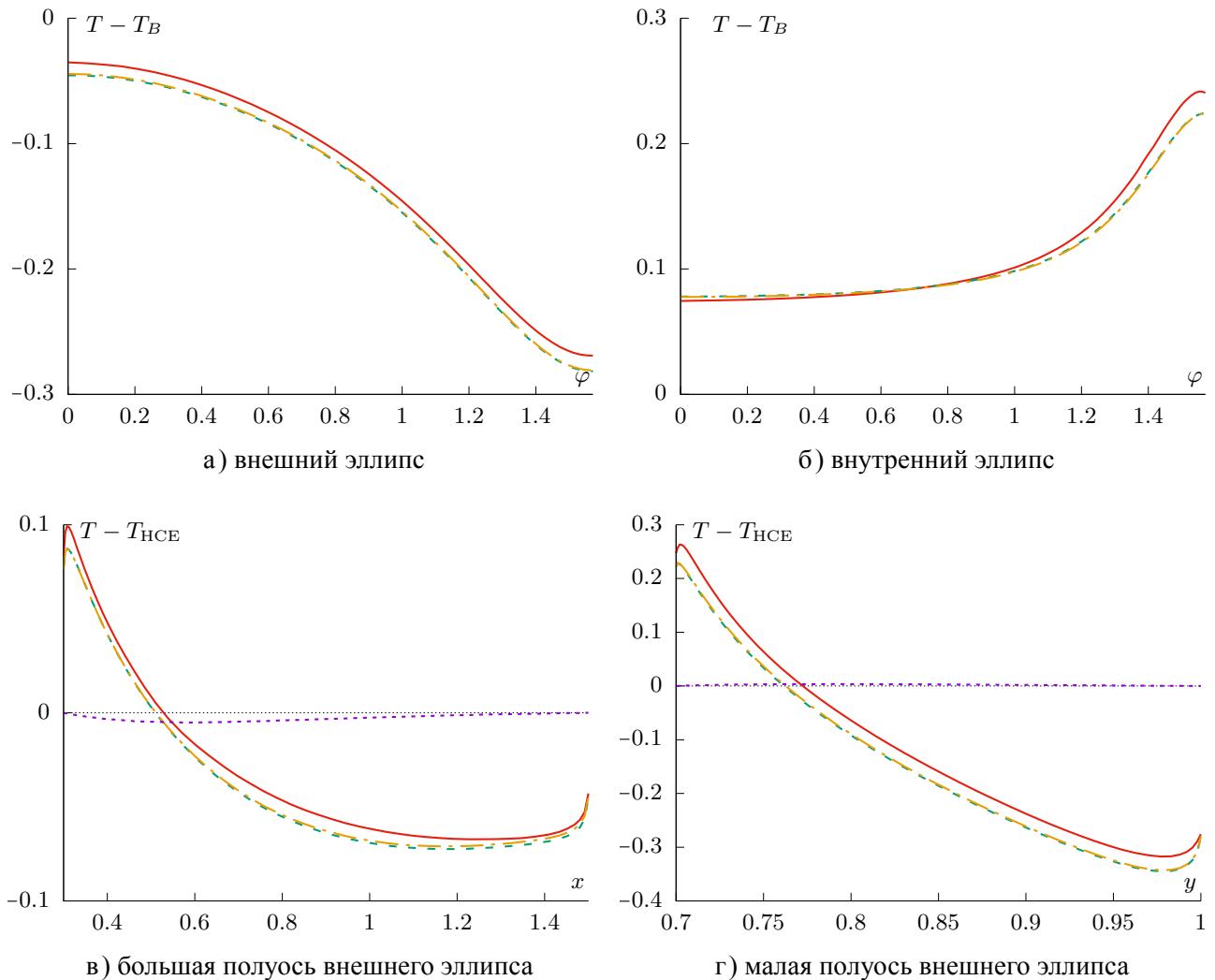


Рисунок 3.33 — Профиль граничной температуры. Угол φ соответствует полярным координатам $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$. T_{HSE} — поле температуры, описываемое уравнением теплопроводности. Представлены следующие решения: уравнение Больцмана — (поделённое на 1.0017), уравнения КГФ с граничными условиями ведущего порядка (только тепловое скольжение) ····, первого --- и второго ---- порядков.

знаки. Численный анализ с нелинейными граничными условиями не проводился, поскольку коэффициент перед членом $(t_i \partial T_{H1} / \partial x_i)(n_j \partial T_{H0} / \partial x_j)$ неизвестен.

Как видно из рис. 3.32, асимптотическое решение ведущего порядка некорректно описывает поле скоростей уже при $\text{Kn} = 0.02$. Действительно, геометрия задачи приводит к образованию области, где градиент температуры оказывается сравним не с единицей, а с обратным числом Кнудсена, что означает $kn_i \partial f / \partial x_i = O(f)$, причём в отличие от слоя Кнудсена градиент спадает медленно. Тем не менее асимптотическое решение действительно справедливо при малых Kn , однако число Кнудсена должно определяться по наименьшему из характерных длин в задаче. В рассмотренной задаче это не геометрические параметры (длина цилиндра или радиус кривизны), а минимальное расстояние, где температура газа изменяется

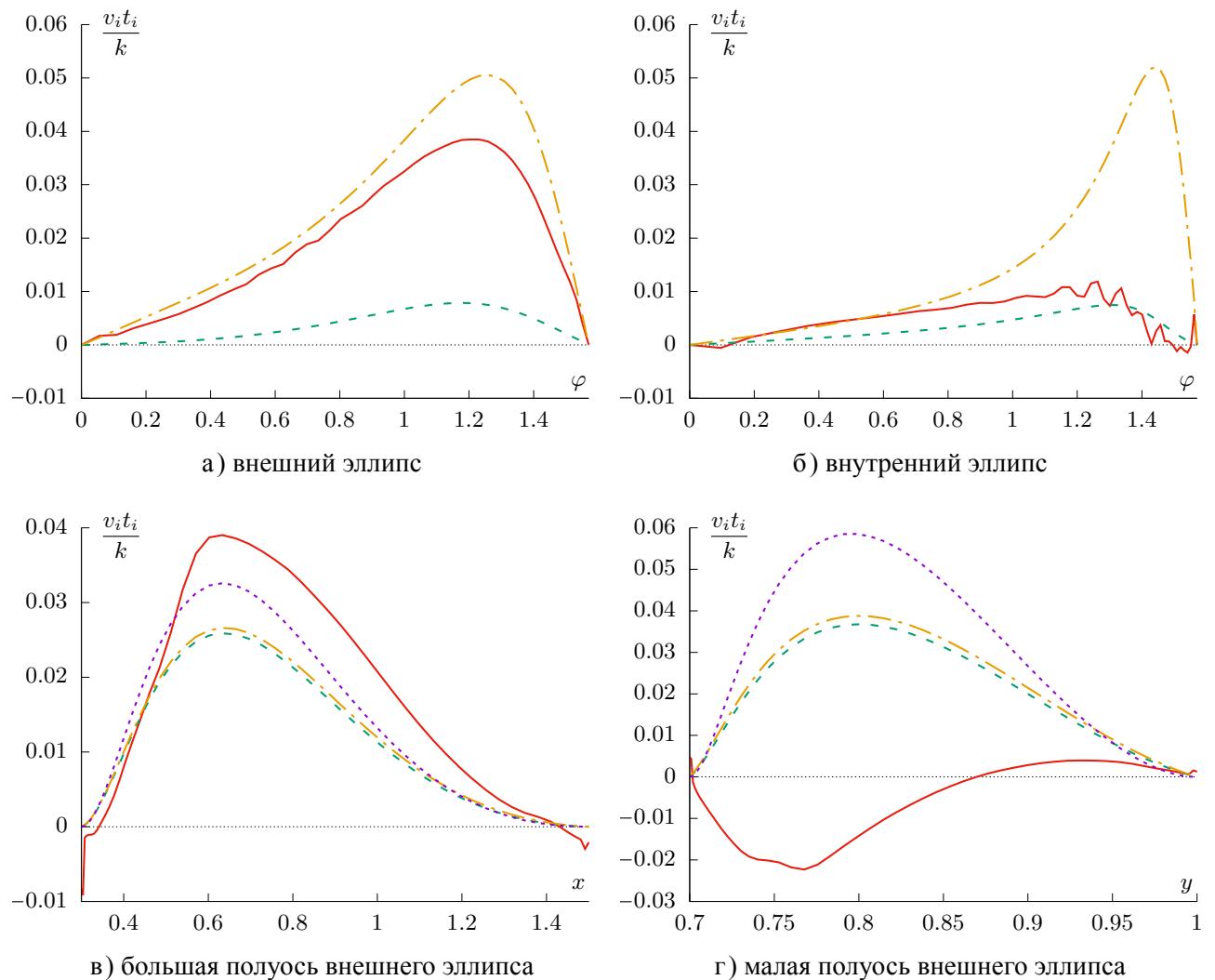


Рисунок 3.34 — Профиль тангенциальной скорости границе. Угол φ соответствует полярным координатам $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$. Единичный вектор t_i направлен против часовой стрелки. Представлены следующие решения: уравнение Больцмана —, уравнения КГФ с тепловым скольжением ···, с граничными условиями, содержащими только первые производные -·-, с граничными условиями, содержащими первые и вторые производные -··-.

ется на единицу. При таком определении число Кнудсена является функцией от разницы температур τ и зависимости коэффициента теплопроводности от температуры $\Gamma_2(T)$.

Перед тем как сравнивать поля температур, уточним способ вычисления температуры непосредственно на поверхностях цилиндров. Дело в том, что численное решение уравнения Больцмана методом конечных объёмов предоставляет значения функции распределения и макроскопических величин в центрах ячеек. Поскольку в слое Кнудсена температура имеет слабую логарифмическую особенность, то граничная температура вычисляется с помощью экстраполяции вида $Ay \ln y + B$, где A и B — константы, а y — расстояние от границы. В предыдущих

задачах линейной экстраполяции было достаточно, поскольку ширина приграничной ячейки и градиент температуры были меньше.

Перейдём к рассмотрению рис. 3.33 и 3.34, где показаны профили температуры и скорости на граничных поверхностях. Использование температурного скачка первого порядка в граничных условиях позволяет существенно улучшить асимптотическое поле температур, в то время как температурный скачок следующего порядка является лишь малой поправкой. Это связано с тем, что $n_i \partial T_{H0} / \partial x_i$ и $n_i n_j \partial^2 T_{H0} / \partial x_i \partial x_j$ сравнимы, но гораздо больше T_{H0} . На рис. 3.33 константное превышение численного решения над асимптотическим в пределах 0.004 объясняется погрешностью кубатуры температуры, однако на рис. 3.33г и в области $\varphi > \pi/3$ на рис. 3.33б разница между решениями увеличивается из-за значительной разницы между скоростными полями v_i/k , влияющими на температурные поля через уравнение энергии (1.89). Действительно, на рис. 3.34г видно, что значение $(v_i/kT) \partial T / \partial x_i$ отличается даже знаком. Граничные условия, содержащие вторые производные, позволяют лучше приблизить численное решение на внешнем цилиндре (рис. 3.34а), но не на внутреннем (рис. 3.34б). Как было указано выше, это связано с тем, что в области максимального градиента температуры граничные условия для v_{iH3} в общем случае имеют порядок $O(v_{iH2}/k)$, но они не учтены при решении уравнений КГФ. Резкие колебания численного решения уравнения Больцмана (особенно на рис. 3.34б) обусловлены погрешностью дискретизации в скоростном пространстве, но не превышают 10^{-4} по абсолютному значению u_i .

Заключение

1. Рассмотрены классические задачи молекулярной газовой динамики, такие как течения между параллельными пластинами, некоаксиальными цилиндрами и сферами, эллиптическими цилиндрами. Полученные решения обладают высокой точностью, верифицированы и могут считаться эталонными. Их детальный анализ обнаружил ряд новых физических эффектов. Некоторые из них практически недоступны для ПСМ, что служит веским основанием к дальнейшему развитию численных методов решения уравнения Больцмана.

2. Обобщение КПИМДС для неравномерных сеток приводит к дополнительным вычислительным трудностям. В частности, усложняется алгоритм консервативного проецирования в интеграле столкновений, повышаются требования к мощности множества кубатурных точек, что в целом приводит к увеличению вычислительных затрат. Кроме того, на неравномерной сетке, в общем случае, снижается точность кубатур функций близких к максвелловским. Тем не менее в настоящем исследовании на численных примерах продемонстрировано, как в рамках КПИМДС неравномерная прямоугольная сетка позволяет достичь высокой точности и эффективности а) для детального разрешения плоских кинетических слоёв, б) для медленных, но сильно неизотермических течений. Настоящая область применения метода значительно шире, включая гиперзвуковые течения и задачи при очень больших числах Кнудсена. Неравномерные сетки позволяют эффективно аппроксимировать как большой объём скоростного пространства в первом случае, так и высокие градиенты функции распределения во втором.

3. Важной задачей математического анализа КПИМДС остаётся вопрос сходимости и особенно влияния проекционного шаблона на её скорость. Неравномерные сетки неизбежно приводят к отрицательным проекционным весам, которые могут стать причиной аномальных численных флюктуаций решения. Этот проблема требует детального анализа.

4. Асимптотическая теория уравнения Больцмана для малых чисел Кнудсена играет важнейшую роль в моделировании разреженного газа. С её помощью можно получить не только значения транспортных коэффициентов из знания молекулярного потенциала, но также истинные граничные условия для гидродинамических уравнений и, что немаловажно, позволяет корректно описать существенно неравновесное поведение газа в слое Кнудсена. На численных примерах

было показано, как использование граничных условий первого и второго порядка позволяет улучшить точность и качество асимптотического решения. В настоящем исследовании применение асимптотической теории оказалось ещё шире. Главным образом, она послужила надёжным инструментом верификации численного метода решения уравнения Больцмана. Кроме того, использование асимптотического решения в качестве начального приближения позволило значительно ускорить решение стационарных задач с малыми числами Кнудсена.

5. Гидродинамическое описание газа может оказаться некорректным на масштабах существенно больше длины свободного пробега, если градиенты макроскопических величин в некоторых областях сравнимы с обратным числом Кнудсена. Достоверно описать поведение газа в этих существенно неравновесных областях возможно только в рамках кинетического подхода. Подобная ситуация встречается во многих реальных задачах. В настоящем исследовании было продемонстрировано кардинальное изменение картины медленного неизотермического течения при больших градиентах температуры.

6. Медленные неизотермические течения представляют интерес в набирающей обороты индустрии МЭМС. В настоящем исследовании показано, что численное решение уравнения Больцмана в континуальном пределе сходится к решению уравнений КГФ с соответствующими граничными условиями, которые, таким образом, верно учитывают влияние сильных температурных неоднородностей на процессы переноса в слаборазреженном газе.

В заключение автор выражает большую признательность научному руководителю Ф. Г. Черемисину за поддержку, помощь, мудрые советы и конструктивные обсуждения. Отдельно автор благодарит К. Аоки за внимательное прочтение отдельных работ и полезные замечания, позволившие значительно улучшить изложение нескольких параграфов, [О. Г. Фридлендера] за плодотворные дискуссии, послужившие отправной точкой к исследованию медленных неизотермических течений, а также О. И. Додулада за программную реализацию КПИМДС для неравномерных сеток.

Список литературы

1. Abramowitz M., Stegun I. A. Handbook of mathematical functions: with formulas, graphs, and mathematical tables. — National Bureau of Standards, 1972.
2. Alexandre R., Desvillettes L., Villani C., Wennberg B. Entropy dissipation and long-range interactions // Arch. Ration. Mech. Anal. — 2000. — Vol. 152, no. 4. — P. 327–355. — DOI: [10.1007/s002050000083](https://doi.org/10.1007/s002050000083).
3. Alexandre R., Morimoto Y., Ukai S., Xu C.-J., Yang T. Smoothing effect of weak solutions for the spatially homogeneous Boltzmann equation without angular cutoff // Kyoto Journal of Mathematics. — 2012. — Vol. 52, no. 3. — P. 433–463. — DOI: [10.1215/21562261-1625154](https://doi.org/10.1215/21562261-1625154).
4. Alexandre R., Morimoto Y., Ukai S., Xu C.-J., Yang T. The Boltzmann equation without angular cutoff in the whole space: I, Global existence for soft potential // Journal of Functional Analysis. — 2012. — Vol. 262, no. 3. — P. 915–1010. — DOI: [10.1016/j.jfa.2011.10.007](https://doi.org/10.1016/j.jfa.2011.10.007).
5. Alexandre R., Morimoto Y., Ukai S., Xu C.-J., Yang T. The Boltzmann equation without angular cutoff in the whole space: II, Global existence for hard potential // Analysis and Applications. — 2011. — Vol. 9, no. 02. — P. 113–134. — DOI: [10.1142/S0219530511001777](https://doi.org/10.1142/S0219530511001777).
6. Alexandre R., Morimoto Y., Ukai S., Xu C.-J., Yang T. The Boltzmann equation without angular cutoff in the whole space: Qualitative properties of solutions // Arch. Ration. Mech. Anal. — 2011. — Vol. 202, no. 2. — P. 599–661. — DOI: [10.1007/s00205-011-0432-0](https://doi.org/10.1007/s00205-011-0432-0).
7. Alexandre R., Villani C. On the Boltzmann equation for long-range interactions // Commun. Pure Appl. Math. — 2002. — Vol. 55, no. 1. — P. 30–70. — DOI: [10.1002/cpa.10012](https://doi.org/10.1002/cpa.10012).
8. Alexandrov V., Boris A., Friedlander O., Kogan M., Nikolsky Y., Perminov V. Thermal stress effect and its experimental detection // Rarefied Gas Dynamics. Proceedings of 20-th International Symposium / ed. by C. Shen. — Beijing, China : Peking University Press, 1997. — Chap. Rarefied Flow Studies. P. 79–84.

9. *Alexandrov V. Y., Friedlander O. G., Nikolsky Y. V.* Numerical and experimental investigations of thermal stress effect on nonlinear thermomolecular pressure difference // Rarefied Gas Dynamics. Proceedings of 23-th International Symposium / ed. by A. D. Ketsdever, E. P. Muntz. — New York : AIP, 2003. — Chap. Rarefied Flow Studies. P. 250–257.
10. *Andries P., Le Tallec P., Perlat J.-P., Perthame B.* The Gaussian-BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl number // Eur. J. Mech. B/Fluids. — 2000. — Vol. 19, no. 6. — P. 813–830. — DOI: [10.1016/S0997-7546\(00\)01103-1](https://doi.org/10.1016/S0997-7546(00)01103-1).
11. *Anikin Y. A., Derbakova E. P., Dodulad O. I., Kloss Y. Y., Martynov D. V., Rogozin O. A., Shuvalov P. V., Tcheremissine F. G.* Computing of gas flows in micro- and nanoscale channels on the base of the Boltzmann kinetic equation // Procedia Comput. Sci. — 2010. — Vol. 1, no. 1. — P. 735–744.
12. *Anikin Y. A., Dodulad O., Kloss Y. Y., Martynov D., Shuvalov P., Tcheremissine F.* Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices // Vacuum. — 2012. — Vol. 86, no. 11. — P. 1770–1777. — DOI: [10.1016/j.vacuum.2012.02.024](https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2012.02.024).
13. *Aoki K., Sone Y., Waniguchi Y.* A rarefied gas flow induced by a temperature field: Numerical analysis of the flow between two coaxial elliptic cylinders with different uniform temperatures // Comput. Math. Appl. — 1998. — Vol. 35, no. 1. — P. 15–28.
14. *Aoki K., Sone Y., Yano T.* Numerical analysis of a flow induced in a rarefied gas between noncoaxial circular cylinders with different temperatures for the entire range of the Knudsen number // Phys. Fluids A. — 1989. — Vol. 1, no. 2. — P. 409–419.
15. *Arkeryd L., Esposito R., Pulvirenti M.* The Boltzmann equation for weakly inhomogeneous data // Commun. Math. Phys. — 1987. — Vol. 111, no. 3. — P. 393–407. — DOI: [10.1007/BF01238905](https://doi.org/10.1007/BF01238905).
16. *Arkeryd L.* Intermolecular forces of infinite range and the Boltzmann equation // Arch. Ration. Mech. Anal. — 1981. — Vol. 77, no. 1. — P. 11–21. — DOI: [10.1007/BF00280403](https://doi.org/10.1007/BF00280403).
17. *Arkeryd L.* On the Boltzmann equation // Arch. Ration. Mech. Anal. — 1972. — Vol. 45, no. 1. — P. 1–16. — DOI: [10.1007/BF00253392](https://doi.org/10.1007/BF00253392).

18. *Arkeryd L.* Stability in L1 for the spatially homogenous Boltzmann equation // Arch. Ration. Mech. Anal. — 1988. — Vol. 103, no. 2. — P. 151–167. — DOI: [10.1007/BF00251506](https://doi.org/10.1007/BF00251506).
19. *Arkeryd L., Nouri A.* On the Milne problem and the hydrodynamic limit for a steady Boltzmann equation model // J. Stat. Phys. — 2000. — Vol. 99, no. 3. — P. 993–1019. — DOI: [10.1023/A:1018655815285](https://doi.org/10.1023/A:1018655815285).
20. *Arslanbekov R. R., Kolobov V. I., Frolova A. A.* Kinetic solvers with adaptive mesh in phase space // Physical Review E. — 2013. — Vol. 88, no. 6. — P. 063301. — DOI: [10.1103/PhysRevE.88.063301](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.88.063301).
21. *Ayi N.* From Newton’s Law to the Linear Boltzmann Equation Without Cut-Off // Commun. Math. Phys. — 2017. — Vol. 350, no. 3. — P. 1219–1274. — DOI: [10.1007/s00220-016-2821-6](https://doi.org/10.1007/s00220-016-2821-6).
22. *Babovsky H.* Discretization and numerical schemes for steady kinetic model equations // Comput. Math. with Appl. — 1998. — Vol. 35, no. 1/2. — P. 29–40. — DOI: [10.1016/S0898-1221\(97\)00256-3](https://doi.org/10.1016/S0898-1221(97)00256-3).
23. *Babovsky H.* On a simulation scheme for the Boltzmann equation // Mathematical methods in the applied sciences. — 1986. — Vol. 8, no. 1. — P. 223–233. — DOI: [10.1002/mma.1670080114](https://doi.org/10.1002/mma.1670080114).
24. *Babovsky H., Illner R.* A convergence proof for Nanbu’s simulation method for the full Boltzmann equation // SIAM J. Numer. Anal. — 1989. — Vol. 26, no. 1. — P. 45–65. — DOI: [10.1137/0726004](https://doi.org/10.1137/0726004).
25. *Baker L. L., Hadjiconstantinou N. G.* Variance reduction for Monte Carlo solutions of the Boltzmann equation // Phys. Fluids. — 2005. — Vol. 17, no. 5. — P. 051703. — DOI: [10.1063/1.1899210](https://doi.org/10.1063/1.1899210).
26. *Baranger C., Mouhot C.* Explicit spectral gap estimates for the linearized Boltzmann and Landau operators with hard potentials // Revista Matemática Iberoamericana. — 2005. — Vol. 21, no. 3. — P. 819–841. — DOI: [10.4171/RMI/436](https://doi.org/10.4171/RMI/436).
27. *Bardos C., Caflisch R. E., Nicolaenko B.* The Milne and Kramers problems for the Boltzmann equation of a hard sphere gas // Comm. Pure Appl. Math. — 1986. — Vol. 39, no. 3. — P. 323–352. — DOI: [10.1002/cpa.3160390304](https://doi.org/10.1002/cpa.3160390304).

28. *Bardos C., Golse F., Levermore C. D.* Fluid dynamic limits of kinetic equations II convergence proofs for the boltzmann equation // Commun. Pure Appl. Math. — 1993. — Vol. 46, no. 5. — P. 667–753. — DOI: [10.1002/cpa.3160460503](https://doi.org/10.1002/cpa.3160460503).
29. *Bardos C., Golse F., Levermore D.* Fluid dynamic limits of kinetic equations. I. Formal derivations // J. Stat. Phys. — 1991. — Vol. 63, no. 1. — P. 323–344. — DOI: [10.1007/BF01026608](https://doi.org/10.1007/BF01026608).
30. *Bardos C., Levermore C. D., Ukai S., Yang T.* Kinetic equations: fluid dynamical limits and viscous heating // Bull. Inst. Math. Acad. Sin. (N.S.) — 2008. — T. 3, № 1. — C. 1—49.
31. *Beijeren H. van, Lanford O., Lebowitz J. L., Spohn H.* Equilibrium time correlation functions in the low-density limit // J. Stat. Phys. — 1980. — Vol. 22, no. 2. — P. 237–257. — DOI: [10.1007/BF01008050](https://doi.org/10.1007/BF01008050).
32. *Bhatnagar P. L., Gross E. P., Krook M.* A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems // Phys. Rev. — 1954. — Vol. 94. — P. 511–525. — DOI: [10.1103/PhysRev.94.511](https://doi.org/10.1103/PhysRev.94.511).
33. *Bird G. A.* Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas // Phys. Fluids. — 1963. — Vol. 6, no. 10. — P. 1518–1519. — DOI: [10.1063/1.1710976](https://doi.org/10.1063/1.1710976).
34. *Bird G. A.* Monte-Carlo simulation in an engineering context // Progress in Astronautics and Aeronautics. — 1981. — Vol. 74. — P. 239–255.
35. *Bird G. A.* Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. — Oxford : Oxford University Press, 1994.
36. *Bird G. A.* Perception of numerical methods in rarefied gasdynamics // Progress in Astronautics and Aeronautics. — 1989. — Vol. 117. — P. 211–226.
37. *Bobylev A. V.* Instabilities in the Chapman–Enskog expansion and hyperbolic Burnett equations // J. Stat. Phys. — 2006. — Vol. 124, no. 2. — P. 371–399. — DOI: [10.1007/s10955-005-8087-6](https://doi.org/10.1007/s10955-005-8087-6).
38. *Bobylev A. V., Cercignani C.* On the rate of entropy production for the Boltzmann equation // J. Stat. Phys. — 1999. — Vol. 94, no. 3/4. — P. 603–618. — DOI: [10.1023/A:1004556522879](https://doi.org/10.1023/A:1004556522879).

39. *Bobylev A. V., Gamba I. M.* Upper Maxwellian bounds for the Boltzmann equation with pseudo-Maxwell molecules // Kinetic and Related Models. — 2017. — Vol. 10, no. 3. — P. 573–585. — DOI: [10.3934/krm.2017023](https://doi.org/10.3934/krm.2017023).
40. *Bobylev A. V., Ohwada T.* The error of the splitting scheme for solving evolutionary equations // Appl. Math. Lett. — 2001. — Vol. 14, no. 1. — P. 45–48. — DOI: [10.1016/S0893-9659\(00\)00110-5](https://doi.org/10.1016/S0893-9659(00)00110-5).
41. *Bobylev A. V., Palczewski A., Schneider J.* On approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models // Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série 1, Mathématique. — 1995. — T. 320, № 5. — C. 639—644.
42. *Bobylev A. V., Rjasanow S.* Fast deterministic method of solving the Boltzmann equation for hard spheres // Eur. J. Mech. B/Fluids. — 1999. — Vol. 18, no. 5. — P. 869–887. — DOI: [10.1016/S0997-7546\(99\)00121-1](https://doi.org/10.1016/S0997-7546(99)00121-1).
43. *Bodineau T., Gallagher I., Saint-Raymond L.* From Hard Sphere Dynamics to the Stokes–Fourier Equations: An Analysis of the Boltzmann–Grad Limit // Annals of PDE. — 2017. — Vol. 3, no. 1. — P. 2. — DOI: [10.1007/s40818-016-0018-0](https://doi.org/10.1007/s40818-016-0018-0).
44. *Bodineau T., Gallagher I., Saint-Raymond L.* The Brownian motion as the limit of a deterministic system of hard-spheres // Inventiones mathematicae. — 2016. — Vol. 203, no. 2. — P. 493–553. — DOI: [10.1007/s00222-015-0593-9](https://doi.org/10.1007/s00222-015-0593-9).
45. *Bogaevski V. N., Povzner A.* Algebraic Methods in Nonlinear Perturbation Theory. — Springer-Verlag, 1991. — P. 266. — DOI: [10.1007/978-1-4612-4438-7](https://doi.org/10.1007/978-1-4612-4438-7).
46. *Brechtken S., Sasse T.* Normal, high order discrete velocity models of the Boltzmann equation // Comput. Math. with Appl. — 2017. — DOI: [10.1016/j.camwa.2017.09.024](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2017.09.024).
47. *Broadwell J. E.* Shock structure in a simple discrete velocity gas // Phys. Fluids. — 1964. — Vol. 7, no. 8. — P. 1243–1247. — DOI: [10.1063/1.1711368](https://doi.org/10.1063/1.1711368).
48. *Broadwell J. E.* Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method // J. Fluid Mech. — 1964. — Vol. 19, no. 03. — P. 401–414. — DOI: [10.1017/S0022112064000817](https://doi.org/10.1017/S0022112064000817).
49. *Buet C.* A discrete-velocity scheme for the Boltzmann operator of rarefied gas dynamics // Transp. Theory Stat. Phys. — 1996. — Vol. 25, no. 1. — P. 33–60. — DOI: [10.1080/00411459608204829](https://doi.org/10.1080/00411459608204829).

50. *Buet C., Cordier S., Degond P.* Regularized Boltzmann operators // Comput. Math. with Appl. — 1998. — Vol. 35, no. 1/2. — P. 55–74. — DOI: [10.1016/S0898-1221\(97\)00258-7](https://doi.org/10.1016/S0898-1221(97)00258-7).
51. *Burnett D.* The distribution of velocities in a slightly non-uniform gas // P. London Math. Soc. — 1935. — Vol. 2, no. 1. — P. 385–430. — DOI: [10.1112/plms/s2-39.1.385](https://doi.org/10.1112/plms/s2-39.1.385).
52. *Cabannes H.* The discrete Boltzmann equation (Theory and applications). — 1980. — Lecture notes.
53. *Caflisch R. E.* The Boltzmann equation with a soft potential. I. Linear, spatially-homogeneous // Commun. Math. Phys. — 1980. — Vol. 74, no. 1. — P. 71–95. — DOI: [10.1007/BF01197579](https://doi.org/10.1007/BF01197579).
54. *Caflisch R. E.* The Boltzmann equation with a soft potential. II. Nonlinear, spatially-periodic // Commun. Math. Phys. — 1980. — Vol. 74, no. 2. — P. 97–109. — DOI: [10.1007/BF01197752](https://doi.org/10.1007/BF01197752).
55. *Caflisch R. E.* The fluid dynamic limit of the nonlinear Boltzmann equation // Commun. Pure Appl. Math. — 1980. — Vol. 33, no. 5. — P. 651–666. — DOI: [10.1002/cpa.3160330506](https://doi.org/10.1002/cpa.3160330506).
56. *Caflisch R. E., Dimarco G., Pareschi L.* An hybrid method for the Boltzmann equation // 30TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON RAREFIED GAS DYNAMICS. Vol. 1786. — AIP Publishing. 2016. — P. 180001. — DOI: [10.1063/1.4967670](https://doi.org/10.1063/1.4967670).
57. *Caflisch R. E., Nicolaenko B.* Shock profile solutions of the Boltzmann equation // Commun. Math. Phys. — 1982. — Vol. 86, no. 2. — P. 161–194. — DOI: [10.1007/BF01206009](https://doi.org/10.1007/BF01206009).
58. *Caretto L. S., Curr R. M., Spalding D. B.* Two numerical methods for three-dimensional boundary layers // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. — 1972. — Vol. 1, no. 1. — P. 39–57.
59. *Carleman T.* Problèmes mathématiques dans la théorie cinétique de gaz. T. 2. — Almqvist & Wiksell, 1957.
60. *Carleman T.* Sur la théorie de l'équation intégral-différentielle de Boltzmann // Acta Mathematica. — 1933. — T. 60, № 1. — C. 91—146. — DOI: [10.1007/BF02398270](https://doi.org/10.1007/BF02398270).

61. *Carlen E. A., Carvalho M. C., Lu X.* On strong convergence to equilibrium for the Boltzmann equation with soft potentials // J. Stat. Phys. — 2009. — Vol. 135, no. 4. — P. 681–736. — DOI: [10.1007/s10955-009-9741-1](https://doi.org/10.1007/s10955-009-9741-1).
62. *Carlen E. A., Gabetta E., Toscani G.* Propagation of smoothness and the rate of exponential convergence to equilibrium for a spatially homogeneous Maxwellian gas // Commun. Math. Phys. — 1999. — Vol. 199, no. 3. — P. 521–546. — DOI: [10.1007/s002200050](https://doi.org/10.1007/s002200050).
63. *Carlen E. A., Lu X.* Fast and slow convergence to equilibrium for Maxwellian molecules via Wild sums // J. Stat. Phys. — 2003. — Vol. 112, no. 1/2. — P. 59–134. — DOI: [10.1023/A:1023623503092](https://doi.org/10.1023/A:1023623503092).
64. *Cercignani C.* Half-space problems in the kinetic theory of gases // Trends in Applications of Pure Mathematics to Mechanics. — Berlin, Heidelberg : Springer, 1986. — P. 35–50. — DOI: [10.1007/BFb0016381](https://doi.org/10.1007/BFb0016381).
65. *Cercignani C.* H-theorem and trend to equilibrium in the kinetic theory of gases // Archiv of Mechanics. — 1982. — Vol. 34. — P. 231–241.
66. *Cercignani C., Lampis M.* Kinetic models for gas-surface interactions // Transp. Theory Stat. Phys. — 1971. — Vol. 1, no. 2. — P. 101–114.
67. *Chandrasekhar S.* Radiative transfer. — Oxford : Clarendon Press, 1950.
68. *Chapman S.* On the law of distribution of molecular velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monatomic gas // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A. — 1916. — Vol. 216. — P. 279–348.
69. *Chorin A. J.* Numerical solution of Boltzmann's equation // Commun. Pure Appl. Math. — 1972. — Vol. 25, no. 2. — P. 171–186. — DOI: [10.1002/cpa.3160250207](https://doi.org/10.1002/cpa.3160250207).
70. *Clarke P., Varghese P., Goldstein D., Morris A., Bauman P., Hegermiller D., Mareschal M., Santos A.* A novel discrete velocity method for solving the Boltzmann equation including internal energy and non-uniform grids in velocity space // AIP Conference Proceedings. Vol. 1501. — AIP. 2012. — P. 373–380. — DOI: [10.1063/1.4769545](https://doi.org/10.1063/1.4769545).
71. *Coron F., Golse F., Sulem C.* A classification of well-posed kinetic layer problems // Commun. Pure Appl. Math. — 1988. — Vol. 41, no. 4. — P. 409–435. — DOI: [10.1002/cpa.3160410403](https://doi.org/10.1002/cpa.3160410403).

72. *Degond P., Dimarco G., Pareschi L.* The moment-guided Monte Carlo method // Int. J. Numer. Methods Fluids. — 2011. — Vol. 67, no. 2. — P. 189–213. — DOI: [10.1002/fld.2345](https://doi.org/10.1002/fld.2345).
73. *Desvillettes L., Villani C.* On the trend to global equilibrium for spatially inhomogeneous kinetic systems: the Boltzmann equation // Inventiones mathematicae. — 2005. — Vol. 159, no. 2. — P. 245–316. — DOI: [10.1007/s00222-004-0389-9](https://doi.org/10.1007/s00222-004-0389-9).
74. *Desvillettes L.* About the regularizing properties of the non-cut-off Kac equation // Commun. Math. Phys. — 1995. — Vol. 168, no. 2. — P. 417–440. — DOI: [10.1007/BF02101556](https://doi.org/10.1007/BF02101556).
75. *Desvillettes L., Furioli G., Terraneo E.* Propagation of Gevrey regularity for solutions of the Boltzmann equation for Maxwellian molecules // Transactions of the American Mathematical Society. — 2009. — Vol. 361, no. 4. — P. 1731–1747. — DOI: [10.1090/S0002-9947-08-04574-1](https://doi.org/10.1090/S0002-9947-08-04574-1).
76. *Desvillettes L., Mischler S.* About the splitting algorithm for Boltzmann and BGK equations // Math. Models Methods Appl. Sci. — 1996. — Vol. 6, no. 08. — P. 1079–1101. — DOI: [10.1142/S0218202596000444](https://doi.org/10.1142/S0218202596000444).
77. *Desvillettes L., Mouhot C.* Stability and uniqueness for the spatially homogeneous Boltzmann equation with long-range interactions // Arch. Ration. Mech. Anal. — 2009. — Vol. 193, no. 2. — P. 227–253. — DOI: [10.1007/s00205-009-0233-x](https://doi.org/10.1007/s00205-009-0233-x).
78. *Desvillettes L., Mouhot C., Villani C.* Celebrating Cercignani’s conjecture for the Boltzmann equation // Kinetic and related models. — 2011. — Vol. 4, no. 1. — P. 277–294. — DOI: [10.3934/krm.2011.4.277](https://doi.org/10.3934/krm.2011.4.277).
79. *Desvillettes L., Wennberg B.* Smoothness of the solution of the spatially homogeneous Boltzmann equation without cutoff // Communications in Partial Differential Equations. — 2005. — Vol. 29, no. 1/2. — P. 133–155. — DOI: [10.1081/PDE-120028847](https://doi.org/10.1081/PDE-120028847).
80. *Dick J., Kuo F. Y., Sloan I. H.* High-dimensional integration: the quasi-Monte Carlo way // Acta Numerica. — 2013. — Vol. 22. — P. 133–288. — DOI: [10.1017/S0962492913000044](https://doi.org/10.1017/S0962492913000044).

81. *Dimarco G.* The moment guided Monte Carlo method for the Boltzmann equation // Kinetic and Related Models. — 2013. — Vol. 6, no. 2. — P. 291–315. — DOI: [10.3934/krm.2013.6.291](https://doi.org/10.3934/krm.2013.6.291).
82. *Dimarco G., Pareschi L.* Exponential Runge-Kutta methods for stiff kinetic equations // SIAM J. Numer. Anal. — 2011. — Vol. 49, no. 5. — P. 2057–2077. — DOI: [10.1137/100811052](https://doi.org/10.1137/100811052).
83. *Dimarco G., Pareschi L.* Hybrid multiscale methods II. Kinetic equations // Multiscale Modeling & Simulation. — 2008. — Vol. 6, no. 4. — P. 1169–1197. — DOI: [10.1137/070680916](https://doi.org/10.1137/070680916).
84. *DiPerna R. J., Lions P.-L.* On the Cauchy problem for Boltzmann equations: global existence and weak stability // Annals of Mathematics. — 1989. — P. 321–366. — DOI: [10.2307/1971423](https://doi.org/10.2307/1971423).
85. *Dodulad O. I., Tcheremissine F. G.* Computation of a shock wave structure in monatomic gas with accuracy control // Comput. Math. Math. Phys. — 2013. — Vol. 53, no. 6. — P. 827–844. — DOI: [10.1134/s0965542513060055](https://doi.org/10.1134/s0965542513060055).
86. *Dodulad O. I., Tcheremissine F. G.* Multipoint conservative projection method for computing the Boltzmann collision integral for gas mixtures // AIP Conf. Proc. — 2012. — Vol. 1501. — P. 302–309. — DOI: [10.1063/1.4769529](https://doi.org/10.1063/1.4769529).
87. *Enskog D.* Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünnten Gasen : Dissertation / Enskog David. — Upsala, 1917.
88. *Fainsilber L., Kurlberg P., Wennberg B.* Lattice points on circles and discrete velocity models for the Boltzmann equation // SIAM J. Math. Anal. — 2006. — Vol. 37, no. 6. — P. 1903–1922. — DOI: [10.1137/040618916](https://doi.org/10.1137/040618916).
89. *Fan J., Shen C.* Statistical Simulation of Low-Speed Rarefied Gas Flows // J. Comput. Phys. — 2001. — Vol. 167, no. 2. — P. 393–412. — DOI: [10.1006/jcph.2000.6681](https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6681).
90. *Filbet F., Mouhot C.* Analysis of spectral methods for the homogeneous Boltzmann equation // Transactions of the american mathematical society. — 2011. — Vol. 363, no. 4. — P. 1947–1980. — DOI: [10.1090/S0002-9947-2010-05303-6](https://doi.org/10.1090/S0002-9947-2010-05303-6).
91. *Filbet F., Mouhot C., Pareschi L.* Solving the Boltzmann equation in $N \log_2 N$ // SIAM J. Sci. Comput. — 2006. — Vol. 28, no. 3. — P. 1029–1053. — DOI: [10.1137/050625175](https://doi.org/10.1137/050625175).

92. *Fonn E., Grohs P., Hiptmair R.* Polar Spectral Scheme for the Spatially Homogeneous Boltzmann Equation: tech. rep. / Seminar for Applied Mathematics, ETH Zürich. — Switzerland, 2014. — No. 2014–13. — URL: https://www.sam.math.ethz.ch/sam_reports/reports_final/reports2014/2014-13.pdf.
93. *Gabetta E., Pareschi L., Toscani G.* Relaxation schemes for nonlinear kinetic equations // SIAM J. Numer. Anal. — 1997. — Vol. 34, no. 6. — P. 2168–2194. — DOI: [10.1137/S0036142995287768](https://doi.org/10.1137/S0036142995287768).
94. *Gallagher I., Saint-Raymond L., Texier B.* From Newton to Boltzmann: hard spheres and short-range potentials. — European mathematical society, 2013. — 135 p.
95. *Gamba I. M., Panferov V., Villani C.* Upper Maxwellian bounds for the spatially homogeneous Boltzmann equation // Arch. Ration. Mech. Anal. — 2009. — Vol. 194, no. 1. — P. 253–282. — DOI: [10.1007/s00205-009-0250-9](https://doi.org/10.1007/s00205-009-0250-9).
96. *Gatignol R.* Théorie cinétique des gaz à répartition discrète de vitesses. — Springer verlag, 1975. — DOI: [10.1007/3-540-07156-3](https://doi.org/10.1007/3-540-07156-3).
97. *Geuzaine C., Remacle J.-F.* Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities // Int. J. Numer. Methods Eng. — 2009. — Vol. 79, no. 11. — P. 1309–1331. — DOI: [10.1002/nme.2579](https://doi.org/10.1002/nme.2579).
98. *Gobbert M. K., Webster S. G., Cale T. S.* A Galerkin method for the simulation of the transient 2-D/2-D and 3-D/3-D linear Boltzmann equation // J. Sci. Comput. — 2007. — Vol. 30, no. 2. — P. 237–273. — DOI: [10.1007/s10915-005-9069-1](https://doi.org/10.1007/s10915-005-9069-1).
99. *Goldstein D., Sturtevant B., Broadwell J. E.* Investigations of the motion of discrete-velocity gases // Progress in Astronautics and Aeronautics. — 1989. — Vol. 117. — P. 100–117.
100. *Golse F.* Analysis of the boundary layer equation in the kinetic theory of gases // Bulletin of the Institute of Mathematics, Academia Sinica. — 2008. — Vol. 3, no. 1. — P. 211–242.
101. *Golse F., Lions P.-L., Perthame B., Sentis R.* Regularity of the moments of the solution of a transport equation // Journal of functional analysis. — 1988. — Vol. 76, no. 1. — P. 110–125. — DOI: [10.1016/0022-1236\(88\)90051-1](https://doi.org/10.1016/0022-1236(88)90051-1).

102. *Golse F., Perthame B., Sentis R.* Un résultat de compacité pour les équations de transport et application au calcul de la limite de la valeur propre principale d'un opérateur de transport // C R Acad. Sci. Paris. — 1985. — T. 301, № 7. — C. 341—344.
103. *Golse F., Saint-Raymond L.* The incompressible Navier–Stokes limit of the Boltzmann equation for hard cutoff potentials // Journal de mathématiques pures et appliquées. — 2009. — Vol. 91, no. 5. — P. 508–552. — DOI: [10.1016/j.matpur.2009.01.013](https://doi.org/10.1016/j.matpur.2009.01.013).
104. *Golse F., Saint-Raymond L.* The Navier–Stokes limit of the Boltzmann equation for bounded collision kernels // Inventiones mathematicae. — 2004. — Vol. 155, no. 1. — P. 81–161. — DOI: [10.1007/s00222-003-0316-5](https://doi.org/10.1007/s00222-003-0316-5).
105. *Golse F., Saint-Raymond L.* Velocity averaging in L^1 for the transport equation // C.R. Math. — 2002. — Vol. 334, no. 7. — P. 557–562. — DOI: [10.1016/S1631-073X\(02\)02302-6](https://doi.org/10.1016/S1631-073X(02)02302-6).
106. *Gorban A., Karlin I.* Hilbert's 6th Problem: exact and approximate hydrodynamic manifolds for kinetic equations // Bulletin of the American Mathematical Society. — 2014. — Vol. 51, no. 2. — P. 187–246. — DOI: [10.1090/S0273-0979-2013-01439-3](https://doi.org/10.1090/S0273-0979-2013-01439-3).
107. *Görsch D.* Generalized discrete velocity models // Math. Models Methods Appl. Sci. — 2002. — Vol. 12, no. 01. — P. 49–75. — DOI: [10.1142/S0218202502001544](https://doi.org/10.1142/S0218202502001544).
108. *Goudon T.* On Boltzmann equations and Fokker–Planck asymptotics: Influence of grazing collisions // J. Stat. Phys. — 1997. — Vol. 89, no. 3. — P. 751–776. — DOI: [10.1007/BF02765543](https://doi.org/10.1007/BF02765543).
109. *Grad H.* Asymptotic theory of the Boltzmann equation // The physics of Fluids. — 1963. — Vol. 6, no. 2. — P. 147–181. — DOI: [10.1063/1.1706716](https://doi.org/10.1063/1.1706716).
110. *Grad H.* Asymptotic theory of the Boltzmann equation II // Rarefied Gas Dynamics. Proc. of the 3rd Intern. Sympos. Vol. 1. — Palais de l'UNESCO, Paris, 1963. — P. 26–59.
111. *Grad H.* On Boltzmann's H-theorem // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. — 1965. — Vol. 13, no. 1. — P. 259–277. — DOI: [10.1137/0113016](https://doi.org/10.1137/0113016).

112. *Grad H.* On the kinetic theory of rarefied gases // Commun. Pure Appl. Math. — 1949. — Vol. 2, no. 4. — P. 331–407. — DOI: [10.1002/cpa.3160020403](https://doi.org/10.1002/cpa.3160020403).
113. *Grad H.* Singular and nonuniform limits of solutions of the Boltzmann equation // Transport Theory. — AMS, Providence, 1969. — P. 269–308.
114. *Gressman P., Strain R.* Global classical solutions of the Boltzmann equation without angular cut-off // Journal of the American Mathematical Society. — 2011. — Vol. 24, no. 3. — P. 771–847. — DOI: [10.1090/S0894-0347-2011-00697-8](https://doi.org/10.1090/S0894-0347-2011-00697-8).
115. *Gropp W., Lusk E., Skjellum A.* Using MPI: portable parallel programming with the message-passing interface. Vol. 1. — MIT press, 1999. — 350 p.
116. *Gualdani M. P., Mischler S., Mouhot C.* Factorization for non-symmetric operators and exponential H-theorem. — arXiv: [1006.5523](https://arxiv.org/abs/1006.5523).
117. *Guo Y.* Classical solutions to the Boltzmann equation for molecules with an angular cutoff // Arch. Ration. Mech. Anal. — 2003. — Vol. 169, no. 4. — P. 305–353. — DOI: [10.1007/s00205-003-0262-9](https://doi.org/10.1007/s00205-003-0262-9).
118. *Hattori M., Takata S.* Second-order Knudsen-layer analysis for the generalized slip-flow theory I // Bull. Inst. Math. Acad. Sinica. — 2015. — Vol. 10. — P. 423–448.
119. *Hattori M., Takata S.* Second-order Knudsen-layer analysis for the generalized slip-flow theory II: curvature effects // J. Stat. Phys. — 2015. — Vol. 161, no. 4. — P. 1010–1036. — DOI: [10.1007/s10955-015-1364-0](https://doi.org/10.1007/s10955-015-1364-0).
120. *He L.* Well-posedness of spatially homogeneous Boltzmann equation with full-range interaction // Commun. Math. Phys. — 2012. — P. 1–30. — DOI: [10.1007/s00220-012-1481-4](https://doi.org/10.1007/s00220-012-1481-4).
121. *Heintz A., Kowalczyk P., Grzhibovskis R.* Fast numerical method for the Boltzmann equation on non-uniform grids // J. Comput. Phys. — 2008. — Vol. 227, no. 13. — P. 6681–6695. — DOI: [10.1016/j.jcp.2008.03.028](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.03.028).
122. *Hellmann R., Jäger B., Bich E.* State-of-the-art ab initio potential energy curve for the xenon atom pair and related spectroscopic and thermophysical properties // The Journal of Chemical Physics. — 2017. — Vol. 147, no. 3. — P. 034304. — DOI: [10.1063/1.4994267](https://doi.org/10.1063/1.4994267).

123. *Hilbert D.* Begründung der kinetischen Gastheorie // *Mathematische Annalen*. — 1912. — T. 72, № 4. — C. 562—577. — DOI: [10.1007/BF01456676](https://doi.org/10.1007/BF01456676).
124. *Hilbert D.* Gründzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen. — Leipzig : Teubner, 1924.
125. *Holway Jr L.* New Statistical Models for Kinetic Theory: Methods of Construction // *Phys. Fluids*. — 1966. — Vol. 9, no. 9. — P. 1658–1673. — DOI: [10.1063/1.1761920](https://doi.org/10.1063/1.1761920).
126. *Homolle T. M., Hadjiconstantinou N. G.* A low-variance deviational simulation Monte Carlo for the Boltzmann equation // *J. Comput. Phys.* — 2007. — Vol. 226, no. 2. — P. 2341–2358. — DOI: [10.1016/j.jcp.2007.07.006](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.07.006).
127. *Hunter J. D.* Matplotlib: A 2D graphics environment // *Computing In Science & Engineering*. — 2007. — Vol. 9, no. 3. — P. 90–95. — DOI: [10.1109/MCSE.2007.55](https://doi.org/10.1109/MCSE.2007.55).
128. *Ibragimov I., Rjasanow S.* Numerical solution of the Boltzmann equation on the uniform grid // *Computing*. — 2002. — Vol. 69, no. 2. — P. 163–186. — DOI: [10.1007/s00607-002-1458-9](https://doi.org/10.1007/s00607-002-1458-9).
129. *Illner R., Pulvirenti M.* Global validity of the Boltzmann equation for two-and three-dimensional rare gas in vacuum: Erratum and improved result // *Commun. Math. Phys.* — 1989. — Vol. 121, no. 1. — P. 143–146. — DOI: [10.1007/BF01218628](https://doi.org/10.1007/BF01218628).
130. *Illner R., Shinbrot M.* The Boltzmann equation: global existence for a rare gas in an infinite vacuum // *Commun. Math. Phys.* — 1984. — Vol. 95, no. 2. — P. 217–226. — DOI: [10.1007/BF01468142](https://doi.org/10.1007/BF01468142).
131. *Jäger B., Bich E.* Thermophysical properties of krypton-helium gas mixtures from ab initio pair potentials // *The Journal of Chemical Physics*. — 2017. — Vol. 146, no. 21. — P. 214302. — DOI: [10.1063/1.4984100](https://doi.org/10.1063/1.4984100).
132. *Jiang S., Luo L.-S.* Analysis and accurate numerical solutions of the integral equation derived from the linearized BGKW equation for the steady Couette flow // *J. Comput. Phys.* — 2016. — Vol. 316. — P. 416–434. — DOI: [10.1016/j.jcp.2016.04.011](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.04.011).
133. *Jones J. E.* On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas. — The Royal Society, 1924. — DOI: [10.1098/rspa.1924.0082](https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0082).

134. Joyner D., Čertík O., Meurer A., Granger B. E. Open source computer algebra systems: SymPy // ACM Communications in Computer Algebra. — 2012. — Vol. 45, no. 3/4. — P. 225–234. — DOI: [10.1145/2110170.2110185](https://doi.org/10.1145/2110170.2110185).
135. Kac M. Some probabilistic aspects of the Boltzmann equation // The Boltzmann Equation. — Springer, 1973. — P. 379–400. — DOI: [10.1007/978-3-7091-8336-6_17](https://doi.org/10.1007/978-3-7091-8336-6_17).
136. Kolobov V. I., Arslanbekov R. R., Frolova A. A. Boltzmann solver with adaptive mesh in velocity space // AIP Conference Proceedings. Vol. 1333. — AIP. 2011. — P. 928–933. — DOI: [10.1063/1.3562764](https://doi.org/10.1063/1.3562764).
137. Krook M., Wu T. T. Formation of Maxwellian tails // Phys. Rev. Lett. — 1976. — Vol. 36, no. 19. — P. 1107. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.36.1107](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.36.1107).
138. Lanford O. E. Time evolution of large classical systems // Dynamical systems, theory and applications / ed. by J. Moser. — Berlin, Heidelberg : Springer, 1975. — P. 1–111. — DOI: [10.1007/3-540-07171-7_1](https://doi.org/10.1007/3-540-07171-7_1).
139. Leray J. Sur le mouvement d'un liquide visqueux emplissant l'espace // Acta mathematica. — 1934. — T. 63, № 1. — C. 193—248. — DOI: [10.1007/BF02547354](https://doi.org/10.1007/BF02547354).
140. Levermore C. D., Masmoudi N. From the Boltzmann equation to an incompressible Navier–Stokes–Fourier system // Arch. Ration. Mech. Anal. — 2010. — Vol. 196, no. 3. — P. 753–809. — DOI: [10.1016/j.matpur.2009.01.013](https://doi.org/10.1016/j.matpur.2009.01.013).
141. Li W., Luo L.-S., Shen J. Accurate solution and approximations of the linearized BGK equation for steady Couette flow // Comput. Fluids. — 2015. — Vol. 111. — P. 18–32. — DOI: [10.1016/j.compfluid.2014.12.018](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2014.12.018).
142. Lions P.-L. Compactness in Boltzmann's equation via Fourier integral operators and applications // Journal of Mathematics of Kyoto University. — 1994. — Vol. 34, no. 2. — P. 391–427. — DOI: [10.1215/kjm/1250519017](https://doi.org/10.1215/kjm/1250519017).
143. Lions P.-L. Régularité et compacité pour des noyaux de collision de Boltzmann sans troncature angulaire // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics. — 1998. — T. 326, № 1. — C. 37—41. — DOI: [10.1016/S0764-4442\(97\)82709-7](https://doi.org/10.1016/S0764-4442(97)82709-7).

144. *Lions P.-L., Masmoudi N.* From the Boltzmann Equations to the Equations of Incompressible Fluid Mechanics // Arch. Ration. Mech. Anal. — 2001. — Vol. 158, no. 3. — P. 173–193. — DOI: [10.1007/s002050100143](https://doi.org/10.1007/s002050100143).
145. *Liu T.-P., Yu S.-H.* Boltzmann equation: micro-macro decompositions and positivity of shock profiles // Commun. Math. Phys. — 2004. — Vol. 246, no. 1. — P. 133–179. — DOI: [10.1007/s00220-003-1030-2](https://doi.org/10.1007/s00220-003-1030-2).
146. *Liu T.-P., Yu S.-H.* Green's function and large-time behavior of solutions of Boltzmann equation, 3-D waves // Bull. Inst. Math. Acad. Sin. (N.S.) — 2006. — Vol. 1, no. 1. — P. 1–78. — DOI: [10.1090/S0065-9266-09-00567-5](https://doi.org/10.1090/S0065-9266-09-00567-5).
147. *Liu T.-P., Yu S.-H.* Invariant Manifolds for Steady Boltzmann Flows and Applications. // Archive for Rational Mechanics & Analysis. — 2013. — Vol. 209, no. 3. — DOI: [10.1007/s00205-013-0640-x](https://doi.org/10.1007/s00205-013-0640-x).
148. *Liu T.-P., Yu S.-H.* The Green's function and large-time behavior of solutions for the one-dimensional Boltzmann equation // Commun. Pure Appl. Math. — 2004. — Vol. 57, no. 12. — P. 1543–1608. — DOI: [10.1002/cpa.20011](https://doi.org/10.1002/cpa.20011).
149. *Majorana A.* A numerical model of the Boltzmann equation related to the discontinuous Galerkin method // Kinetic and Related Models. — 2011. — Vol. 4, no. 1. — P. 139–151. — DOI: [10.3934/krm.2011.4.139](https://doi.org/10.3934/krm.2011.4.139).
150. *Meng F., Yang X.-P.* Exponential convergence to equilibrium of solutions of the Kac equation and homogeneous Boltzmann equation for Maxwellian without angular cut-off // Asymptotic Analysis. — 2017. — Vol. 101, no. 4. — P. 251–271. — DOI: [10.3233/ASY-171407](https://doi.org/10.3233/ASY-171407).
151. *Michel P., Schneider J.* Approximation simultanée de réels par des nombres rationnels et noyau de collision de l'équation de Boltzmann // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series I-Mathematics. — 2000. — T. 330, № 9. — C. 857—862. — DOI: [10.1016/S0764-4442\(00\)00258-5](https://doi.org/10.1016/S0764-4442(00)00258-5).
152. *Mischler S.* Convergence of discrete-velocity schemes for the Boltzmann equation // Arch. Ration. Mech. Anal. — 1997. — Vol. 140, no. 1. — P. 53–77. — DOI: [10.1007/s002050050060](https://doi.org/10.1007/s002050050060).
153. *Mischler S., Wennberg B.* On the spatially homogeneous Boltzmann equation // Annales de l'Institut Henri Poincaré (C) Non Linear Analysis. — 1999. — Vol. 16, no. 4. — P. 467–501. — DOI: [10.1016/S0294-1449\(99\)80025-0](https://doi.org/10.1016/S0294-1449(99)80025-0).

154. *Morgenstern D.* General existence and uniqueness proof for spatially homogeneous solutions of the Maxwell-Boltzmann equation in the case of Maxwellian molecules // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 1954. — Vol. 40, no. 8. — P. 719–721.
155. *Mouhot C.* Rate of convergence to equilibrium for the spatially homogeneous Boltzmann equation with hard potentials // Commun. Math. Phys. — 2006. — Vol. 261, no. 3. — P. 629–672. — DOI: [10.1007/s00220-005-1455-x](https://doi.org/10.1007/s00220-005-1455-x).
156. *Mouhot C., Pareschi L.* Fast algorithms for computing the Boltzmann collision operator // Math. Comput. — 2006. — Vol. 75, no. 256. — P. 1833–1852. — DOI: [10.1090/S0025-5718-06-01874-6](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-06-01874-6).
157. *Mouhot C., Strain R. M.* Spectral gap and coercivity estimates for linearized Boltzmann collision operators without angular cutoff // Journal de mathématiques pures et appliquées. — 2007. — Vol. 87, no. 5. — P. 515–535. — DOI: [10.1016/j.matpur.2007.03.003](https://doi.org/10.1016/j.matpur.2007.03.003).
158. *Mouhot C., Villani C.* Regularity theory for the spatially homogeneous Boltzmann equation with cut-off // Arch. Ration. Mech. Anal. — 2004. — Vol. 173, no. 2. — P. 169–212. — DOI: [10.1007/s00205-004-0316-7](https://doi.org/10.1007/s00205-004-0316-7).
159. *Nanbu K.* Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation. I. Monocomponent gases // J. Phys. Soc. Jpn. — 1980. — Vol. 49, no. 5. — P. 2042–2049. — DOI: [10.1143/JPSJ.49.2042](https://doi.org/10.1143/JPSJ.49.2042).
160. *Nishida T.* Fluid dynamical limit of the nonlinear Boltzmann equation to the level of the compressible Euler equation // Commun. Math. Phys. — 1978. — Vol. 61, no. 2. — P. 119–148. — DOI: [10.1007/BF01609490](https://doi.org/10.1007/BF01609490).
161. *Nordsieck A., Hicks B. L.* Monte Carlo evaluation of the Boltzmann collision integral: tech. rep. / University of Illinois. — Urbana, Illinois, 1966. — R-307.
162. *Ohwada T., Sone Y.* Analysis of thermal stress slip flow and negative thermophoresis using the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // Eur. J. Mech. B/Fluids. — 1992. — Vol. 11. — P. 389–414.
163. *Ohwada T., Sone Y., Aoki K.* Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over a plane wall on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules // Phys. Fluids A. — 1989. — Vol. 1, no. 9. — P. 1588–1599. — DOI: [10.1063/1.857304](https://doi.org/10.1063/1.857304).

164. *Palczewski A., Schneider J., Bobylev A. V.* A consistency result for a discrete-velocity model of the Boltzmann equation // SIAM J. Numer. Anal. — 1997. — Vol. 34, no. 5. — P. 1865–1883. — DOI: [10.1137/S0036142995289007](https://doi.org/10.1137/S0036142995289007).
165. *Panferov V. A., Heintz A. G.* A new consistent discrete-velocity model for the Boltzmann equation // Mathematical methods in the applied sciences. — 2002. — Vol. 25, no. 7. — P. 571–593. — DOI: [10.1002/mma.303](https://doi.org/10.1002/mma.303).
166. *Pao Y.-P.* Boltzmann collision operator with inverse-power intermolecular potentials, I // Commun. Pure Appl. Math. — 1974. — Vol. 27, no. 4. — P. 407–428. — DOI: [10.1002/cpa.3160270402](https://doi.org/10.1002/cpa.3160270402).
167. *Pareschi L., Perthame B.* A Fourier spectral method for homogeneous Boltzmann equations // Transp. Theory Stat. Phys. — 1996. — Vol. 25, no. 3–5. — P. 369–382. — DOI: [10.1080/00411459608220707](https://doi.org/10.1080/00411459608220707).
168. *Pareschi L., Russo G.* Numerical solution of the Boltzmann equation I: Spectrally accurate approximation of the collision operator // SIAM J. Numer. Anal. — 2000. — T. 37, № 4. — C. 1217–1245.
169. *Pareschi L., Russo G.* On the stability of spectral methods for the homogeneous Boltzmann equation // Transp. Theory Stat. Phys. — 2000. — Vol. 29, no. 3–5. — P. 431–447. — DOI: [10.1080/00411450008205883](https://doi.org/10.1080/00411450008205883).
170. *Pareschi L., Russo G.* Time relaxed Monte Carlo methods for the Boltzmann equation // SIAM J. Sci. Comput. — 2001. — Vol. 23, no. 4. — P. 1253–1273. — DOI: [10.1137/S1064827500375916](https://doi.org/10.1137/S1064827500375916).
171. *Pekeris C. L., Alterman Z.* Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation II. The coefficients of viscosity and heat conduction // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. — 1957. — Vol. 43, no. 11. — P. 998–1007. — DOI: [10.1073/pnas.43.11.998](https://doi.org/10.1073/pnas.43.11.998).
172. *Płatkowski T., Waluś W.* An acceleration procedure for discrete velocity approximation of the Boltzmann collision operator // Comput. Math. with Appl. — 2000. — Vol. 39, no. 5. — P. 151–163. — DOI: [10.1016/S0898-1221\(00\)00051-1](https://doi.org/10.1016/S0898-1221(00)00051-1).
173. *Pulvirenti A., Wennberg B.* A Maxwellian lower bound for solutions to the Boltzmann equation // Commun. Math. Phys. — 1997. — Vol. 183, no. 1. — P. 145–160. — DOI: [10.1007/BF02509799](https://doi.org/10.1007/BF02509799).

174. *Pulvirenti A., Wennberg B.* Lower bounds for the solutions to the Kac and the Boltzmann equation // *Transp. Theory Stat. Phys.* — 1996. — Vol. 25, no. 3–5. — P. 437–446. — DOI: [10.1080/00411459608220712](https://doi.org/10.1080/00411459608220712).
175. *Pulvirenti M., Saffirio C., Simonella S.* On the validity of the Boltzmann equation for short range potentials // *Rev. Math. Phys.* — 2014. — Vol. 26, no. 02. — P. 1450001. — DOI: [10.1142/S0129055X14500019](https://doi.org/10.1142/S0129055X14500019).
176. *Radtke G. A., Hadjiconstantinou N. G., Wagner W.* Low-noise Monte Carlo simulation of the variable hard sphere gas // *Phys. Fluids*. — 2011. — Vol. 23, no. 3. — P. 030606. — DOI: [10.1063/1.3558887](https://doi.org/10.1063/1.3558887).
177. *Rjasanow S., Wagner W.* A stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation // *J. Comput. Phys.* — 1996. — Vol. 124, no. 2. — P. 243–253. — DOI: [10.1006/jcph.1996.0057](https://doi.org/10.1006/jcph.1996.0057).
178. *Rjasanow S., Wagner W.* Stochastic numerics for the Boltzmann equation. — Springer, 2005. — DOI: [10.1007/3-540-27689-0](https://doi.org/10.1007/3-540-27689-0).
179. *Rogier F., Schneider J.* A direct method for solving the Boltzmann equation // *Transp. Theory Stat. Phys.* — 1994. — Vol. 23, no. 1–3. — P. 313–338. — DOI: [10.1080/00411459408203868](https://doi.org/10.1080/00411459408203868).
180. *Rogozin O.* Computer simulation of slightly rarefied gas flows driven by significant temperature variations and their continuum limit // *Theor. Comput. Fluid Dyn.* — 2014. — Vol. 28, no. 6. — P. 573–587.
181. *Rogozin O.* Numerical analysis of the nonlinear plane Couette-flow problem of a rarefied gas for hard-sphere molecules // *Eur. J. Mech. B/Fluids*. — 2016. — Vol. 60. — P. 148–163.
182. *Scanlon T. J., Roohi E., White C., Darbandi M., Reese J. M.* An open source, parallel DSMC code for rarefied gas flows in arbitrary geometries // *Comput. Fluids*. — 2010. — Vol. 39, no. 10. — P. 2078–2089. — DOI: [10.1016/j.compfluid.2010.07.014](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.07.014).
183. *Sloan I. H., Joe S.* Lattice methods for multiple integration. — Oxford University Press, 1994.
184. *Sone Y.* Flows induced by temperature fields in a rarefied gas and their ghost effect on the behavior of a gas in the continuum limit // *Annu. Rev. Fluid Mech.* — 2000. — Vol. 32, no. 1. — P. 779–811. — DOI: [10.1146/annurev.fluid.32.1.779](https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.32.1.779).

185. *Sone Y.* Kinetic theory and fluid dynamics. — Boston : Birkhäuser, 2002.
186. *Sone Y.* Molecular gas dynamics: theory, techniques, and applications. — Boston : Birkhäuser, 2007.
187. *Sone Y.* New kind of boundary layer over a convex solid boundary in a rarefied gas // *Phys. Fluids*. — 1973. — Vol. 16, no. 9. — P. 1422–1424. — DOI: [10.1063/1.1694535](https://doi.org/10.1063/1.1694535).
188. *Sone Y., Aoki K., Takata S., Sugimoto H., Bobylev A. V.* Inappropriateness of the heat-conduction equation for description of a temperature field of a stationary gas in the continuum limit: Examination by asymptotic analysis and numerical computation of the Boltzmann equation // *Phys. Fluids*. — 1996. — Vol. 8. — P. 628–638.
189. *Sone Y., Bardos C., Golse F., Sugimoto H.* Asymptotic theory of the Boltzmann system, for a steady flow of a slightly rarefied gas with a finite Mach number: General theory // *Eur. J. Mech. B/Fluids*. — 2000. — Vol. 19, no. 3. — P. 325–360. — DOI: [10.1016/S0997-7546\(00\)00110-2](https://doi.org/10.1016/S0997-7546(00)00110-2).
190. *Sone Y., Ohwada T., Aoki K.* Temperature jump and Knudsen layer in a rarefied gas over a plane wall: Numerical analysis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules // *Phys. Fluids A*. — 1989. — Vol. 1, no. 2. — P. 363–370. — DOI: [10.1063/1.857457](https://doi.org/10.1063/1.857457).
191. *Sone Y., Takata S., Ohwada T.* Numerical analysis of the plane Couette flow of a rarefied gas on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules // *Eur. J. Mech. B/Fluids*. — 1990. — Vol. 9. — P. 273–288.
192. *Sone Y., Yamamoto K.* Flow of rarefied gas over plane wall // *J. Phys. Soc. Japan*. — 1970. — T. 29, № 2. — C. 495–508. — DOI: [10.1143/JPSJ.29.495](https://doi.org/10.1143/JPSJ.29.495).
193. *Strain R. M.* Optimal time decay of the non cut-off Boltzmann equation in the whole space // *Kinetic and Related Models*. — 2012. — Vol. 5, no. 3. — P. 583–613. — DOI: [10.3934/krm.2012.5.583](https://doi.org/10.3934/krm.2012.5.583).
194. *Strain R. M., Guo Y.* Exponential decay for soft potentials near Maxwellian // *Arch. Ration. Mech. Anal.*. — 2008. — Vol. 187, no. 2. — P. 287–339. — DOI: [10.1007/s00205-007-0067-3](https://doi.org/10.1007/s00205-007-0067-3).
195. *Sun Q., Boyd I. D.* A direct simulation method for subsonic, microscale gas flows // *J. Comput. Phys.* — 2002. — Vol. 179, no. 2. — P. 400–425. — DOI: [10.1006/jcph.2002.7061](https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7061).

196. *Takata S., Hattori M.* Numerical data for the generalized slip-flow theory. — 2015. — <http://hdl.handle.net/2433/199811>.
197. *Tcheremissine F. G.* Conservative evaluation of Boltzmann collision integral in discrete ordinates approximation // *Comput. Math. with Appl.* — 1998. — Vol. 35, no. 1. — P. 215–221. — DOI: [10.1016/s0898-1221\(97\)00269-1](https://doi.org/10.1016/s0898-1221(97)00269-1).
198. *Toscani G., Villani C.* Probability metrics and uniqueness of the solution to the Boltzmann equation for a Maxwell gas // *J. Stat. Phys.* — 1999. — Vol. 94, no. 3. — P. 619–637. — DOI: [10.1023/A:1004508706950](https://doi.org/10.1023/A:1004508706950).
199. *Toscani G., Villani C.* Sharp entropy dissipation bounds and explicit rate of trend to equilibrium for the spatially homogeneous Boltzmann equation // *Commun. Math. Phys.* — 1999. — Vol. 203, no. 3. — P. 667–706. — DOI: [10.1007/s002200050631](https://doi.org/10.1007/s002200050631).
200. *Toscani G., Villani C.* On the trend to equilibrium for some dissipative systems with slowly increasing a priori bounds // *J. Stat. Phys.* — 2000. — Vol. 98, no. 5/6. — P. 1279–1309. — DOI: [10.1023/A:1018623930325](https://doi.org/10.1023/A:1018623930325).
201. *Tristani I.* Exponential convergence to equilibrium for the homogeneous Boltzmann equation for hard potentials without cut-off // *J. Stat. Phys.* — 2014. — Vol. 157, no. 3. — P. 474–496. — DOI: [10.1007/s10955-014-1066-z](https://doi.org/10.1007/s10955-014-1066-z).
202. *Ukai S.* On the existence of global solutions of mixed problem for non-linear Boltzmann equation // *Proceedings of the Japan Academy.* — 1974. — Vol. 50, no. 3. — P. 179–184. — DOI: [10.3792/pja/1195519027](https://doi.org/10.3792/pja/1195519027).
203. *Ukai S.* The Boltzmann–Grad limit and Cauchy–Kovalevskaya theorem // *Jpn. J. Ind. Appl. Math.* — 2001. — Vol. 18, no. 2. — P. 383–392. — DOI: [10.1007/BF03168581](https://doi.org/10.1007/BF03168581).
204. *Ukai S., Asano K.* On the Cauchy problem of the Boltzmann equation with a soft potential // *Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences.* — 1982. — Vol. 18, no. 2. — P. 477–519. — DOI: [10.2977/prims/1195183569](https://doi.org/10.2977/prims/1195183569).
205. *Ukai S., Yang T., Yu S.-H.* Nonlinear boundary layers of the Boltzmann equation: I. Existence // *Commun. Math. Phys.* — 2003. — Vol. 236, no. 3. — P. 373–393. — DOI: [10.1007/s00220-003-0822-8](https://doi.org/10.1007/s00220-003-0822-8).
206. *Varghese P. L.* Arbitrary post-collision velocities in a discrete velocity scheme for the Boltzmann equation // *Proc. of the 25th Intern. Symposium on Rarefied Gas Dynamics.* — 2007. — P. 225–232.

207. *Villani C.* Cercignani's conjecture is sometimes true and always almost true // Commun. Math. Phys. — 2003. — Vol. 234, no. 3. — P. 455–490. — DOI: [10.1007/s00220-002-0777-1](https://doi.org/10.1007/s00220-002-0777-1).
208. *Villani C.* Hypocoercivity. — American Mathematical Society, 2009. — 141 p. — DOI: [10.1090/S0065-9266-09-00567-5](https://doi.org/10.1090/S0065-9266-09-00567-5).
209. *Villani C.* On a new class of weak solutions to the spatially homogeneous Boltzmann and Landau equations // Arch. Ration. Mech. Anal. — 1998. — Vol. 143, no. 3. — P. 273–307. — DOI: [10.1007/s002050050106](https://doi.org/10.1007/s002050050106).
210. *Wagner W.* A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation // J. Stat. Phys. — 1992. — Vol. 66, no. 3/4. — P. 1011–1044. — DOI: [10.1007/BF01055714](https://doi.org/10.1007/BF01055714).
211. *Wagner W.* Deviational particle Monte Carlo for the Boltzmann equation // Monte Carlo Methods and Applications. — 2008. — Vol. 14, no. 3. — P. 191–268. — DOI: [10.1515/MCMA.2008.010](https://doi.org/10.1515/MCMA.2008.010).
212. *Welander P.* On the temperature jump in a rarefied gas // Arkiv Fysik. — 1954. — Vol. 7.
213. *Weller H. G., Tabor G., Jasak H., Fureby C.* A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques // Comput. Phys. — 1998. — Vol. 12, no. 6. — P. 620–631. — DOI: [10.1063/1.168744](https://doi.org/10.1063/1.168744).
214. *Wennberg B.* An example of nonuniqueness for solutions to the homogeneous Boltzmann equation // J. Stat. Phys. — 1999. — Vol. 95, no. 1. — P. 469–477. — DOI: [10.1023/A:1004546031908](https://doi.org/10.1023/A:1004546031908).
215. *Wennberg B.* The geometry of binary collisions and generalized Radon transforms // Arch. Ration. Mech. Anal. — 1997. — Vol. 139, no. 3. — P. 291–302. — DOI: [10.1007/s002050050](https://doi.org/10.1007/s002050050).
216. *Willis D. R.* Comparison of kinetic theory analyses of linearized Couette flow // Phys. Fluids. — 1962. — Vol. 5, no. 2. — P. 127–135. — DOI: [10.1063/1.1706585](https://doi.org/10.1063/1.1706585).
217. *Wu L., Reese J. M., Zhang Y.* Solving the Boltzmann equation deterministically by the fast spectral method: application to gas microflows // J. Fluid Mech. — 2014. — Vol. 746. — P. 53–84. — DOI: [10.1017/jfm.2014.79](https://doi.org/10.1017/jfm.2014.79).

218. *Wu L., Zhang J., Reese J. M., Zhang Y.* A fast spectral method for the Boltzmann equation for monatomic gas mixtures // *J. Comput. Phys.* — 2015. — Vol. 298. — P. 602–621. — DOI: [10.1016/j.jcp.2015.06.019](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.06.019).
219. *Yen S. M.* Numerical solution of the nonlinear Boltzmann equation for nonequilibrium gas flow problems // *Annu. Rev. Fluid Mech.* — 1984. — Vol. 16, no. 1. — P. 67–97. — DOI: [10.1146/annurev.fl.16.010184.000435](https://doi.org/10.1146/annurev.fl.16.010184.000435).
220. *Агошков В. И.* Пространства функций с дифференциально-разностными характеристиками и гладкость решений уравнения переноса // *Докл. АН СССР*. — 1984. — Т. 276, № 6. — С. 1289—1293.
221. *Аникин Ю. А.* О точности проекционного счета интеграла столкновений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* — 2012. — Т. 52, № 4. — С. 697—719. — DOI: [10.1134/S0965542512040021](https://doi.org/10.1134/S0965542512040021).
222. *Аристов В. В., Черемисин Ф. Г.* Консервативный метод расщепления для решения уравнения Больцмана // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* — 1980. — Т. 20, № 1. — С. 191—207. — DOI: [10.1016/0041-5553\(80\)90074-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(80)90074-9).
223. *Арсеньев А. А., Буряк О. Е.* О связи между решением уравнения Больцмана и решением уравнения Ландау–Фоккера–Планка // *Математический сборник*. — 1990. — Т. 181, № 4. — С. 435—446. — DOI: [10.1070/SM1991v069n02ABEH001244](https://doi.org/10.1070/SM1991v069n02ABEH001244).
224. *Белоцерковский О. М., Яницкий В. Е.* Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. I. Основы построения метода // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* — 1975. — Т. 15, № 5. — С. 1195—1208. — DOI: [10.1016/0041-5553\(85\)90027-8](https://doi.org/10.1016/0041-5553(85)90027-8).
225. *Бёрд Г.* Молекулярная газовая динамика / пер. с англ. А. И. Ерофеева, О. Г. Фридлендера, В. Е. Яницкого. — М. : Мир, 1981. — 319 с.
226. *Бобылев А. В.* Метод преобразования Фурье в теории уравнения Больцмана для максвелловских молекул // *Докл. АН СССР*. — 1975. — Т. 225, № 5. — С. 1041—1044.
227. *Бобылев А. В.* О методах Чепмена–Энскога и Грэда решения уравнения Больцмана // *Докл. АН СССР*. — 1982. — Т. 262, № 1. — С. 71—75.
228. *Бобылев А. В.* Точные решения нелинейного уравнения Больцмана и теория релаксации максвелловского газа // *Теоретическая и математическая физика*. — 1984. — Т. 60, № 2. — С. 280—310. — DOI: [10.1007/BF01018983](https://doi.org/10.1007/BF01018983).

229. *Богаевский В. Н., Повзнер А. Я.* Алгебраические методы в нелинейной теории возмущений. — М. : Наука, 1987.
230. *Галкин В. С.* Вывод уравнений медленных течений смесей газов из уравнения Больцмана // Ученые записки ЦАГИ. — 1974. — Т. 5, № 4. — С. 40—47.
231. *Галкин В. С., Коган М. Н., Фридлендер О. Г.* О некоторых кинетических эффектах в течениях сплошной среды // Изв. АН СССР. Механ. жидкости и газа. — 1970. — № 3. — С. 13—21.
232. *Галкин В. С., Коган М. Н., Фридлендер О. Г.* О свободной конвекции в газе в отсутствие внешних сил // Изв. АН СССР. Механ. жидкости и газа. — 1971. — № 3.
233. *Годунов С. К., Султангазин У. М.* О дискретных моделях кинетического уравнения Больцмана // Успехи математических наук. — 1971. — Т. 26, вып. 3, № 159. — С. 3—51. — DOI: [10.1070/RM1971v026n03ABEH003822](https://doi.org/10.1070/RM1971v026n03ABEH003822).
234. *Григорьев Ю. Н., Михалицын А. Н.* Спектральный метод численного решения кинетического уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1983. — Т. 23, № 6. — С. 1454—1463. — DOI: [10.1016/S0041-5553\(83\)80083-4](https://doi.org/10.1016/S0041-5553(83)80083-4).
235. *Грэд Г.* Кинетическая теория газов / пер. с англ. В. С. Зуева // Термодинамика газов. — Машиностроение, 1970. — С. 5—109.
236. *Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В., Рогозин О. А., Рябченков В. В., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В.* Проблемно-моделирующая среда для расчётов и анализа газокинетических процессов // Нано- и микросистемная техника. — 2011. — № 2. — С. 12—17.
237. *Иванов М. С., Рогазинский С. В.* Сравнительный анализ алгоритмов метода прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1988. — Т. 28, № 7. — С. 1058—1070. — DOI: [10.1016/0041-5553\(88\)90112-7](https://doi.org/10.1016/0041-5553(88)90112-7).
238. *Кац М.* Вероятность и смежные вопросы в физике. — М. : Мир, 1965.
239. *Коган М. Н.* Некоторые вопросы молекулярной газодинамики // Ученые записки ЦАГИ. — 1971. — Т. 2, № 1. — С. 49—59.

240. Коган М. Н., Галкин В. С., Фридлендер О. Г. О напряжениях, возникающих в газах вследствие неоднородности температуры и концентраций. Новые типы свободной конвекции // Успехи физических наук. — 1976. — Т. 119. — С. 111—125.
241. Колышкин И. Н., Эндер А. Я., Эндер И. А. Численное решение задач изотропной релаксации методом разложения по максвеллианам // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1988. — Т. 28, № 6. — С. 901—916. — DOI: [10.1016/0041-5553\(88\)90198-X](https://doi.org/10.1016/0041-5553(88)90198-X).
242. Коробов Н. М. Теоретико-числовые методы в приближенном анализе. — М. : Физматгиз, 1963. — 224 с.
243. Коробов Н. О приближенном вычислении кратных интегралов // Докл. АН СССР. — 1959. — Т. 124, № 6. — С. 1207—1210.
244. Леонтьевич М. А. Основные уравнения кинетической теории с точки зрения случайных процессов // ЖЭТФ. — 1935. — Т. 5. — С. 3—5.
245. Лимар Е. Ф. О численном решении уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1973. — Т. 13, № 6. — С. 1573—1580. — DOI: [10.1016/0041-5553\(73\)90018-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(73)90018-9).
246. Маслова Н. Б. Задача Крамерса в кинетической теории газов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1982. — Т. 22, № 3. — С. 700—709. — DOI: [10.1016/0041-5553\(82\)90141-0](https://doi.org/10.1016/0041-5553(82)90141-0).
247. Нордсик А., Хикс Б. Вычисление интеграла столкновений Больцмана методом Монте-Карло // Вычислительные методы в динамике разреженных газов / под ред. В. П. Шидловского ; пер. с англ. Е. Ф. Лимара. — М. : Мир, 1969. — С. 215—230.
248. Петрина Д. Я., Герасименко В. И. Математические проблемы статистической механики системы упругих шаров // Успехи математических наук. — 1990. — Т. 45, 3 (273. — С. 135—182. — DOI: [10.1070/RM1990v045n03ABEH002360](https://doi.org/10.1070/RM1990v045n03ABEH002360).
249. Повзнер А. Я. Об уравнении Больцмана кинетической теории газов // Математический сборник. — 1962. — Т. 58, № 1. — С. 65—86.
250. Рогозин О. А. Медленные неизотермические течения: численный и асимптотический анализ уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2017. — Т. 57, № 7. — С. 1205—1229.

251. Скороход А. В. Стохастические уравнения для сложных систем. — М. : Наука, 1983. — С. 192.
252. Смайт В. Электростатика и электродинамика. — М. : ИЛ, 1954. — 390 с.
253. Смирнов С. Н. К обоснованию одного стохастического метода решения уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1989. — Т. 29, № 2. — С. 270—276. — DOI: [10.1016/0041-5553\(89\)90064-5](https://doi.org/10.1016/0041-5553(89)90064-5).
254. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов / под ред. Н. Н. Боголюбова ; пер. с англ. Е. В. Малиновской. — М. : ИЛ, 1960. — 510 с.
255. Черемисин Ф. Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. — 1997. — Т. 357, № 1. — С. 1—4.
256. Черемисин Ф. Г. Решение уравнения Больцмана при переходе к гидродинамическому режиму течения // Доклады РАН. — 2000. — Т. 373, № 4. — С. 483—486.
257. Черемисин Ф. Г. Численное решение кинетического уравнения Больцмана для одномерных стационарных движений газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1970. — Т. 10, № 3. — С. 654—665. — DOI: [10.1016/0041-5553\(70\)90119-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(70)90119-9).
258. Черчиньяни К. Математические методы в кинетической теории газов / пер. с англ. В. С. Галкина, В. А. Перепухова, О. Г. Фридлендера. — М. : Мир, 1973. — 246 с.
259. Шахов Е. М. Об обобщении релаксационного кинетического уравнения Крука // Изв. АН СССР. Механ. жидкости и газа. — 1968. — Т. 3, № 5. — С. 142—145.
260. Эндер И. А., Эндер А. Я. Об одном представлении уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. — 1970. — Т. 193, № 1. — С. 61—64.

Приложение А

Вычисление транспортных коэффициентов газа твёрдых сфер

A.1 Основные формулы

В [185; 189] представлены общие формулы для вычисления γ_8 , γ_9 и γ_{10} :

$$\gamma_8 = I_6 \left(\mathcal{Q}_2^{(0)} - \tilde{\mathcal{Q}}_{22}^{(0)} \right) + \frac{1}{7} I_8 \left(\mathcal{Q}_3^{(0)} - \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)} \right), \quad (\text{A.1})$$

$$\gamma_9 = -I_6 \left(\mathcal{B}^{(4)} \right), \quad (\text{A.2})$$

$$\gamma_{10} = \frac{5}{8} I_6 \left(\mathcal{T}_1^{(1)} + \mathcal{T}_1^{(2)} - 2\tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)} \right) + \frac{1}{8} I_8 \left(\mathcal{T}_2^{(1)} + \mathcal{T}_2^{(2)} - 2\tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right), \quad (\text{A.3})$$

где

$$I_n[Z(\zeta)] = \frac{8}{15\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \zeta^n Z(\zeta) \exp(-\zeta^2) d\zeta, \quad (\text{A.4})$$

а подынтегральные функции выражаются как линейные комбинации решений соответствующих интегральных уравнений:

$$\mathcal{L} [\zeta_i \mathcal{A}(\zeta)] = -\zeta_i \left(\zeta^2 - \frac{5}{2} \right), \quad (\text{A.5})$$

$$\mathcal{L} \left[\left(\zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij} \right) \mathcal{B}(\zeta) \right] = -2 \left(\zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij} \right), \quad (\text{A.6})$$

$$\mathcal{L} \left[\left(\zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij} \right) \mathcal{B}^{(4)}(\zeta) \right] = IB_{ij}^{(4)}, \quad IB_{ij}^{(4)} = \left(\zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij} \right) \mathcal{B}(\zeta), \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left[(\zeta_i \delta_{jk} + \zeta_j \delta_{ki} + \zeta_k \delta_{ij}) \mathcal{T}_1^{(m)}(\zeta) + \zeta_i \zeta_j \zeta_k \mathcal{T}_2^{(m)}(\zeta) \right] &= IT_{ijk}^{(m)}, \\ IT_{ijk}^{(1)} &= -\zeta_i \zeta_j \zeta_k \left(2\mathcal{A}(\zeta) - \frac{1}{\zeta} \frac{d\mathcal{A}(\zeta)}{d\zeta} \right), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$IT_{ijk}^{(2)} = -\zeta_i \zeta_j \zeta_k \left((\zeta^2 - 3)\mathcal{B}(\zeta) - \frac{\zeta}{2} \frac{d\mathcal{B}(\zeta)}{d\zeta} \right) + \frac{\gamma_1}{2} (\zeta_i \delta_{jk} + \zeta_j \delta_{ki} + \zeta_k \delta_{ij}),$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left[\zeta_i \delta_{jk} \tilde{\mathcal{T}}_{11}^{(0)}(\zeta) + (\zeta_j \delta_{ki} + \zeta_k \delta_{ij}) \tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)}(\zeta) + \zeta_i \zeta_j \zeta_k \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)}(\zeta) \right] &= I\tilde{T}_{i,jk}^{(0)}, \\ I\tilde{T}_{i,jk}^{(0)} &= \mathcal{J}(\zeta_i \mathcal{A}(\zeta), \zeta_j \zeta_k \mathcal{B}(\zeta)), \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left[(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \mathcal{Q}_1^{(0)}(\zeta) \right. \\ \left. + (\zeta_i\zeta_j\delta_{kl} + \zeta_i\zeta_k\delta_{jl} + \zeta_i\zeta_l\delta_{jk} + \zeta_j\zeta_k\delta_{il} + \zeta_j\zeta_l\delta_{ik} + \zeta_k\zeta_l\delta_{ij}) \mathcal{Q}_2^{(0)}(\zeta) \right. \\ \left. + \zeta_i\zeta_j\zeta_k\zeta_l \mathcal{Q}_3^{(0)}(\zeta) \right] = IQ_{ijkl}^{(0)}, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} IQ_{ijkl}^{(0)} = \frac{1}{3} \left[\zeta^2 \mathcal{B}(\zeta) + 2\gamma_1 \left(\zeta^2 - \frac{3}{2} \right) \right] (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\ - \zeta_i\zeta_j\zeta_k\zeta_l \left(2\mathcal{B}(\zeta) - \frac{1}{\zeta} \frac{d\mathcal{B}(\zeta)}{d\zeta} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left[\delta_{ij}\delta_{kl} \tilde{\mathcal{Q}}_{11}^{(0)}(\zeta) + (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \tilde{\mathcal{Q}}_{12}^{(0)}(\zeta) + (\zeta_i\zeta_j\delta_{kl} + \zeta_k\zeta_l\delta_{ij}) \tilde{\mathcal{Q}}_{21}^{(0)}(\zeta) \right. \\ \left. + (\zeta_i\zeta_k\delta_{jl} + \zeta_i\zeta_l\delta_{jk} + \zeta_j\zeta_k\delta_{il} + \zeta_j\zeta_l\delta_{ik}) \tilde{\mathcal{Q}}_{22}^{(0)}(\zeta) + \zeta_i\zeta_j\zeta_k\zeta_l \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)}(\zeta) \right] = I\tilde{Q}_{ij,kl}^{(0)}, \\ I\tilde{Q}_{ij,kl}^{(0)} = \mathcal{J}(\zeta_i\zeta_j\mathcal{B}(\zeta), \zeta_k\zeta_l\mathcal{B}(\zeta)) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

с дополнительными условиями для \mathcal{A} , $\mathcal{T}_1^{(m)}$, $\tilde{\mathcal{T}}_{11}^{(0)}$, $\tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)}$, $\mathcal{Q}_1^{(0)}$, $\tilde{\mathcal{Q}}_{11}^{(0)}$ и $\tilde{\mathcal{Q}}_{12}^{(0)}$:

$$\int_0^\infty \zeta^4 \mathcal{A} E(\zeta) d\zeta = 0, \quad (\text{A.12})$$

$$\int_0^\infty \left(5\zeta^4 \mathcal{T}_1^{(m)} + \zeta^6 \mathcal{T}_2^{(m)} \right) E(\zeta) d\zeta = 0, \quad (\text{A.13})$$

$$\int_0^\infty \left(5\zeta^4 \tilde{\mathcal{T}}_{11}^{(0)} + \zeta^6 \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right) E(\zeta) d\zeta = 0, \quad (\text{A.14})$$

$$\int_0^\infty \left(5\zeta^4 \tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)} + \zeta^6 \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right) E(\zeta) d\zeta = 0, \quad (\text{A.15})$$

$$\int_0^\infty (1, \zeta^2) \left(15\zeta^2 \mathcal{Q}_1^{(0)} + 10\zeta^4 \mathcal{Q}_2^{(0)} + \zeta^6 \mathcal{Q}_3^{(0)} \right) E(\zeta) d\zeta = 0, \quad (\text{A.16})$$

$$\int_0^\infty (1, \zeta^2) \left(15\zeta^2 \tilde{\mathcal{Q}}_{11}^{(0)} + 10\zeta^4 \tilde{\mathcal{Q}}_{21}^{(0)} + \zeta^6 \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)} \right) E(\zeta) d\zeta = 0, \quad (\text{A.17})$$

$$\int_0^\infty (1, \zeta^2) \left(15\zeta^2 \tilde{\mathcal{Q}}_{12}^{(0)} + 10\zeta^4 \tilde{\mathcal{Q}}_{22}^{(0)} + \zeta^6 \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)} \right) E(\zeta) d\zeta = 0, \quad (\text{A.18})$$

где

$$E(\zeta) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \exp(-\zeta^2). \quad (\text{A.19})$$

Коэффициент вязкости был вычислен с высокой точностью ещё на первом израильском компьютере WEIZAC [171]¹:

$$\gamma_1 \equiv I_6(\mathcal{B}) = 1.270042427, \quad (\text{A.20})$$

¹ Столь высокая точность была получена при решении обыкновенного дифференциального уравнения четвёртого порядка, к которому может быть сведено интегральное уравнение (A.6).

Операторы \mathcal{L} и \mathcal{J} связаны с интегралом столкновения J следующим образом:

$$E\mathcal{L}(\varphi) = 2J(1, E\varphi), \quad E\mathcal{J}(\varphi, \psi) = J(E\varphi, E\psi). \quad (\text{A.21})$$

Пятимерный интеграл \mathcal{J} вычисляется как

$$\mathcal{J}(\varphi, \psi) = \frac{1}{2} \int E_*(\varphi' \psi'_* + \varphi'_* \psi' - \varphi \psi_* - \varphi_* \psi) B d\Omega(\boldsymbol{\alpha}) d\zeta_*, \quad (\text{A.22})$$

где $d\Omega(\boldsymbol{\alpha})$ — элемент телесного угла в направлении единичного вектора α_i , определяющего направление разлёта скоростей:

$$\zeta'_i = \zeta_i + \alpha_i \alpha_j (\zeta_{j*} - \zeta_j), \quad \zeta'_{i*} = \zeta_{i*} - \alpha_i \alpha_j (\zeta_{j*} - \zeta_j). \quad (\text{A.23})$$

Для модели твёрдых сфер

$$B = \frac{|\alpha_i(\zeta_{i*} - \zeta_i)|}{4\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{A.24})$$

Линеаризованный интеграл столкновения может быть сведён к трёхмерному интегралу. Для модели твёрдых сфер \mathcal{L} принимает следующий вид:

$$\mathcal{L}(\varphi) = \mathcal{L}_1(\varphi) - \mathcal{L}_2(\varphi) - \nu(\zeta)\varphi, \quad (\text{A.25})$$

$$\mathcal{L}_1(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{1}{|\zeta - \xi|} \exp\left(-\xi^2 + \frac{|\zeta_i \times \xi|^2}{|\zeta - \xi|^2}\right) \varphi(\xi) d\xi, \quad (\text{A.26})$$

$$\mathcal{L}_2(\varphi) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int |\zeta - \xi| \exp(-\xi^2) \varphi(\xi) d\xi, \quad (\text{A.27})$$

$$\nu(\zeta) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\exp(-\zeta^2) + \left(2\zeta + \frac{1}{\zeta}\right) \int_0^\zeta \exp(-\xi^2) d\xi \right]. \quad (\text{A.28})$$

A.2 Численные методы

Ниже приводится описание метода вычисления соответствующих многомерных интегралов и решения трёхмерных интегральных уравнений.

A.2.1 Многомерное интегрирование

Для вычисления трёх- и пятимерных интегралов вида

$$\int f(\zeta_i) d\zeta = \frac{4\pi}{3} \frac{\zeta_{\text{cut}}^3}{N} \sum_{k=0}^N f(\zeta_i^{(k)}) + R, \quad (\text{A.29})$$

$$\int f(\zeta_i, \alpha_i) d\Omega(\alpha) d\zeta = \frac{16\pi^2}{3} \frac{\zeta_{\text{cut}}^3}{N} \sum_{k=0}^N f(\zeta_i^{(k)}, \alpha_i^{(k)}) + R, \quad (\text{A.30})$$

на дискретном пространстве скоростей, ограниченным сферой $\zeta = \zeta_{\text{cut}}$, использовались следующие кубатурные сетки Коробова:

$$\zeta_i^{(k)} = \zeta_{\text{cut}} \left(\left\{ \frac{k}{N} \right\}, \left\{ \frac{ka_2}{N} \right\}, \left\{ \frac{ka_3}{N} \right\} \right), \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} \alpha_i^{(k)} &= \left(\sin \theta^{(k)} \cos \varphi^{(k)}, \sin \theta^{(k)} \sin \varphi^{(k)}, \cos \theta^{(k)} \right), \\ \theta^{(k)} &= \pi \left\{ \frac{ka_4}{N} \right\}, \quad \varphi^{(k)} = 2\pi \left\{ \frac{ka_5}{N} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

где фигурные скобки соответствуют остатку от деления. Некоторые оптимальные коэффициенты представлены в табл. 5.

A.2.2 Решение интегральных уравнений

Интегральные уравнения вида $\mathcal{L}[\varphi(\zeta_i)Z(\zeta)] = \Phi(\zeta_i)$ могут быть решены итерационным методом релаксации

$$Z_k^{(n+1)} = (1 - \tau_k)Z_k^{(n)} + \tau_k \mathcal{F}_k^{(n)}, \quad (\text{A.33})$$

$$\mathcal{F}_k^{(n)} = \frac{\mathcal{L}_1(\varphi_k Z_k^{(n)}) - \mathcal{L}_2(\varphi_k Z_k^{(n)}) - \Phi_k}{\nu_k \varphi_k}, \quad (\text{A.34})$$

где индекс k соответствует дискретному значению функции при $\zeta_i = \zeta_i^{(k)}$. Для выбранного модуля $\zeta^{(k)}$ имеется свобода выбора вектора $\zeta_i^{(k)}$. В общем случае можно положить $\zeta_i^{(k)} = (1, 1, 1)/\sqrt{3}$. Если Φ не зависит от ζ_z , то разумно использовать $\zeta_i^{(k)} = (1, 1, 0)/\sqrt{2}$. Аналогично, при $\Phi = \Phi(\zeta_x)$ пусть $\zeta_i^{(k)} = (1, 0, 0)$.

Таблица 5 — Таблица оптимальных коэффициентов для вычисления трёхмерных (а) и пятимерных (б) интегралов.

N	a_2	a_3	a_4	a_5
10007	544	5733		
50021	12962	42926		
100003	47283	15021		
200003	9488	20794		
500009	33606	342914		
1000003	342972	439897		
2000003	235672	1208274		
5000011	889866	4755875		
10000019	4341869	594760		

N	a_2	a_3	a_4	a_5
10007	198	9183	6967	8507
50021	7255	12933	39540	42286
100003	11729	65316	68384	51876
200003	62638	60193	112581	142904
500009	191775	488648	283447	69999
1000003	335440	656043	403734	126676
2000003	701679	680513	965077	1248525
5000011	1516505	2355509	3317359	442579
10000019	3669402	5455092	7462912	2188321

Значение $\mathcal{F}_k^{(n)}$ вычисляется с помощью численного интегрирования, описанного в А.2.1. Для достижения большей точности для каждого n сетка Коробова сдвигается на произвольный вектор. Модуль τ_k выбирается достаточно малым, чтобы, обеспечить устойчивость метода, а также снизить флюктуационные колебания, вызванные сменой кубатурной сетки. Знак τ определяется как в методе секущей:

$$\frac{\tau_k}{|\tau_k|} = \operatorname{sgn} \left(1 - \frac{\mathcal{F}_k^{(n)} - \mathcal{F}_k^{(n-1)}}{Z_k^{(n)} - Z_k^{(n-1)}} \right). \quad (\text{A.35})$$

Для нахождения решения интегрального уравнения с дополнительным условием типа (А.12) достаточно после каждой итерации корректировать аппроксимацию с помощью соответствующей константы.

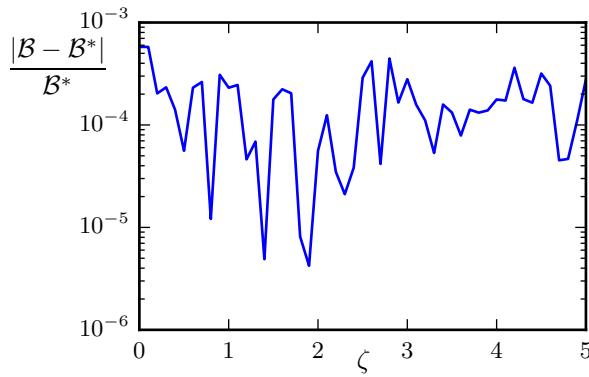


Рисунок А.1 — Погрешность вычисления функции $\mathcal{B}(\zeta)$ по сравнению с референсной $\mathcal{B}^*(\zeta)$

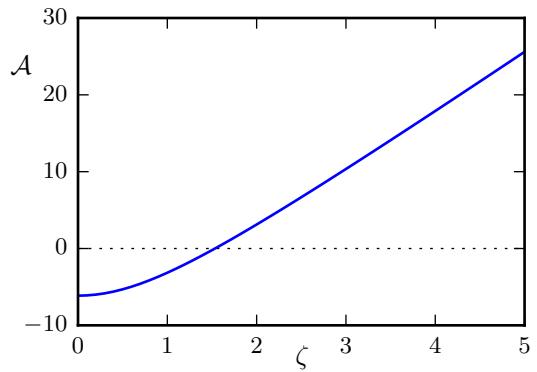


Рисунок А.2 — Транспортная функция $\mathcal{A}(\zeta)$

A.2.3 Оценка точности

Для оценки точности сравним результат вычисления функции $\mathcal{B}(\zeta)$ с референсными данными, взятыми, например, из [185].

Функция \mathcal{B} вычисляется из интегрального уравнения

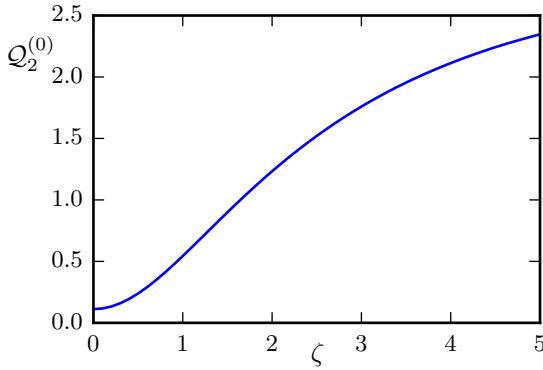
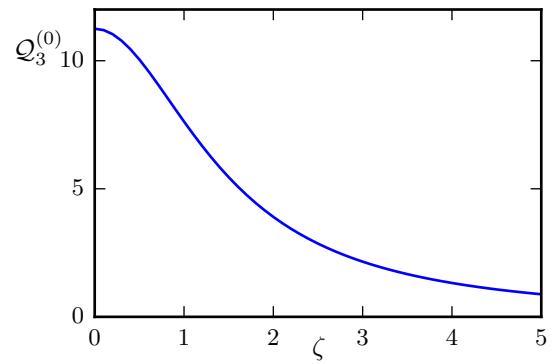
$$\mathcal{L}(\zeta_x \zeta_y \mathcal{B}) = -2\zeta_x \zeta_y. \quad (\text{A.36})$$

Значение $\mathcal{B}(0)$ не может быть вычислено непосредственно из (A.36) с помощью метода, изложенного в A.2.2, поэтому должно быть получено с помощью экстраполяции.

Погрешность решения для мощности сетки Коробова порядка 10^7 изображена на рис. A.1, а сама функция \mathcal{B} на рис. A.8. Погрешность вычисления коэффициента вязкости γ_1 равна

$$\frac{|\gamma_1 - \gamma_1^*|}{\gamma_1^*} < 5 \cdot 10^{-5}. \quad (\text{A.37})$$

Ввиду структурной схожести интегральных уравнений (A.6)–(A.11), можно ожидать аналогичной точности для всех полученных результатов. При вычислении $\mathcal{Q}_3^{(0)}$ и $\tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)}$ погрешность увеличивается для малых ζ , что, однако, мало влияет на точность оценки интегралов вида (A.4).

Рисунок A.3 — Транспортная функция $Q_2^{(0)}(\zeta)$ Рисунок A.4 — Транспортная функция $Q_3^{(0)}(\zeta)$

A.3 Результаты

В дальнейшем будем использовать функции \mathcal{A} (рис. A.2) и \mathcal{B} (рис. A.8), которые подробно и с высокой точностью табулированы, например, в [185].

A.3.1 Вычисление γ_8

Для вычисления γ_8 необходимо провести некоторые преобразования. Подставляя в форм. (A.10) $i = y, j = k = l = x$, а также $i = j = z, k = x, l = y$, получаем

$$\mathcal{L} \left[\zeta_x \zeta_y \left(3Q_2^{(0)} + \zeta_x^2 Q_3^{(0)} \right) \right] = -\zeta_x^3 \zeta_y \left(2\mathcal{B} - \frac{1}{\zeta} \frac{d\mathcal{B}}{d\zeta} \right), \quad (\text{A.38})$$

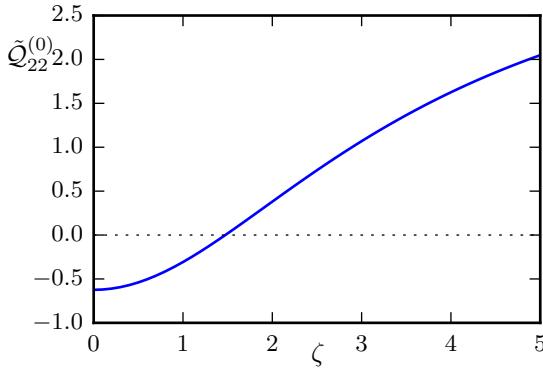
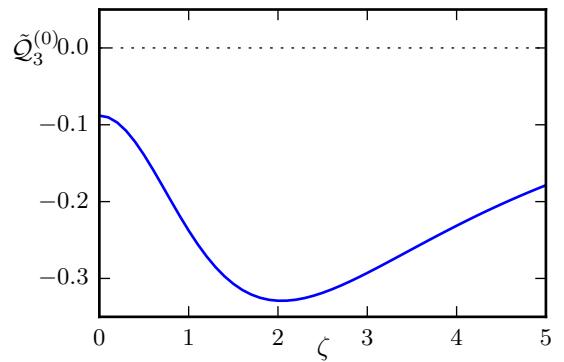
$$\mathcal{L} \left[\zeta_x \zeta_y \left(Q_2^{(0)} + \zeta_z^2 Q_3^{(0)} \right) \right] = -\zeta_x \zeta_y \zeta_z^2 \left(2\mathcal{B} - \frac{1}{\zeta} \frac{d\mathcal{B}}{d\zeta} \right), \quad (\text{A.39})$$

откуда в силу линейности \mathcal{L} имеем

$$\mathcal{L} \left[\zeta_x \zeta_y \left(3\zeta_z^2 - \zeta_x^2 \right) Q_3^{(0)} \right] = -\zeta_x \zeta_y \left(3\zeta_z^2 - \zeta_x^2 \right) \left(2\mathcal{B} - \frac{1}{\zeta} \frac{d\mathcal{B}}{d\zeta} \right). \quad (\text{A.40})$$

Таким образом, вычислив сначала $Q_3^{(0)}$ с помощью (A.40), можно найти $Q_2^{(0)}$ из (A.38). Полученные функции изображены на рис. A.3 и A.4. Соответствующие интегралы от них равны

$$I_6 \left(Q_2^{(0)} \right) = 0.544(4), \quad \frac{1}{7} I_8 \left(Q_3^{(0)} \right) = 0.993(3). \quad (\text{A.41})$$

Рисунок А.5 — Транспортная функция $\tilde{Q}_{22}^{(0)}(\zeta)$ Рисунок А.6 — Транспортная функция $\tilde{Q}_3^{(0)}(\zeta)$

Аналогичными подстановками в форм. (A.11) получаем

$$\mathcal{L} \left[\tilde{Q}_{11}^{(0)} + 2\tilde{Q}_{12}^{(0)} + 2\zeta_x^2\tilde{Q}_{21}^{(0)} + 4\zeta_x^2\tilde{Q}_{22}^{(0)} + \zeta_x^4\tilde{Q}_3^{(0)} \right] = \mathcal{J} (\zeta_x^2\mathcal{B}, \zeta_x^2\mathcal{B}) \equiv \mathcal{J}_x^{(1)}, \quad (\text{A.42})$$

$$\mathcal{L} \left[\tilde{Q}_{11}^{(0)} + (\zeta_x^2 + \zeta_y^2)\tilde{Q}_{21}^{(0)} + \zeta_x^2\zeta_y^2\tilde{Q}_3^{(0)} \right] = \mathcal{J} (\zeta_x^2\mathcal{B}, \zeta_y^2\mathcal{B}) \equiv \mathcal{J}_{xy}^{(2)}, \quad (\text{A.43})$$

$$\mathcal{L} \left[\tilde{Q}_{12}^{(0)} + (\zeta_x^2 + \zeta_y^2)\tilde{Q}_{22}^{(0)} + \zeta_x^2\zeta_y^2\tilde{Q}_3^{(0)} \right] = \mathcal{J} (\zeta_x\zeta_y\mathcal{B}, \zeta_x\zeta_y\mathcal{B}) \equiv \mathcal{J}_{xy}^{(3)}, \quad (\text{A.44})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_x\zeta_y \left(\tilde{Q}_{21}^{(0)} + 2\tilde{Q}_{22}^{(0)} + \zeta_x^2\tilde{Q}_3^{(0)} \right) \right] = \mathcal{J} (\zeta_x\zeta_y\mathcal{B}, \zeta_x^2\mathcal{B}) \equiv \mathcal{J}_{xy}^{(4)}, \quad (\text{A.45})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_x\zeta_y \left(\tilde{Q}_{21}^{(0)} + \zeta_z^2\tilde{Q}_3^{(0)} \right) \right] = \mathcal{J} (\zeta_x\zeta_y\mathcal{B}, \zeta_z^2\mathcal{B}) \equiv \mathcal{J}_{xyz}^{(5)}, \quad (\text{A.46})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_x\zeta_y \left(\tilde{Q}_{22}^{(0)} + \zeta_z^2\tilde{Q}_3^{(0)} \right) \right] = \mathcal{J} (\zeta_x\zeta_y\mathcal{B}, \zeta_x\zeta_z\mathcal{B}) \equiv \mathcal{J}_{xyz}^{(6)}. \quad (\text{A.47})$$

Неоднородные члены интегральных уравнений (A.42)–(A.47) представлены на рис. А.7.

С помощью линейных преобразований соответственно над (A.42)–(A.44) и (A.45)–(A.47) получаем уравнения

$$\mathcal{L} \left[(6\zeta_x^2\zeta_y^2 - \zeta_x^4 - \zeta_y^4) \tilde{Q}_3^{(0)} \right] = 2\mathcal{J}_{xy}^{(2)} + 4\mathcal{J}_{xy}^{(3)} - \mathcal{J}_x^{(1)} - \mathcal{J}_y^{(1)}, \quad (\text{A.48})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_x\zeta_y (3\zeta_z^2 - \zeta_x^2) \tilde{Q}_3^{(0)} \right] = \mathcal{J}_{xyz}^{(5)} + 2\mathcal{J}_{xyz}^{(6)} - \mathcal{J}_{xy}^{(4)}, \quad (\text{A.49})$$

позволяющие вычислить $\tilde{Q}_3^{(0)}$. На практике уравнение (A.49) позволяет получить большую точность. $\tilde{Q}_{22}^{(0)}$ находится из (A.47). Полученные функции изображены на рис. А.5 и А.6. Соответствующие интегралы от них равны

$$I_6 \left(\tilde{Q}_{22}^{(0)} \right) = 0.121(2), \quad \frac{1}{7} I_8 \left(\tilde{Q}_3^{(0)} \right) = -0.0787(7). \quad (\text{A.50})$$

Подставляя (A.41) и (A.50) в (A.1), получаем

$$\gamma_8 = 1.496(3). \quad (\text{A.51})$$

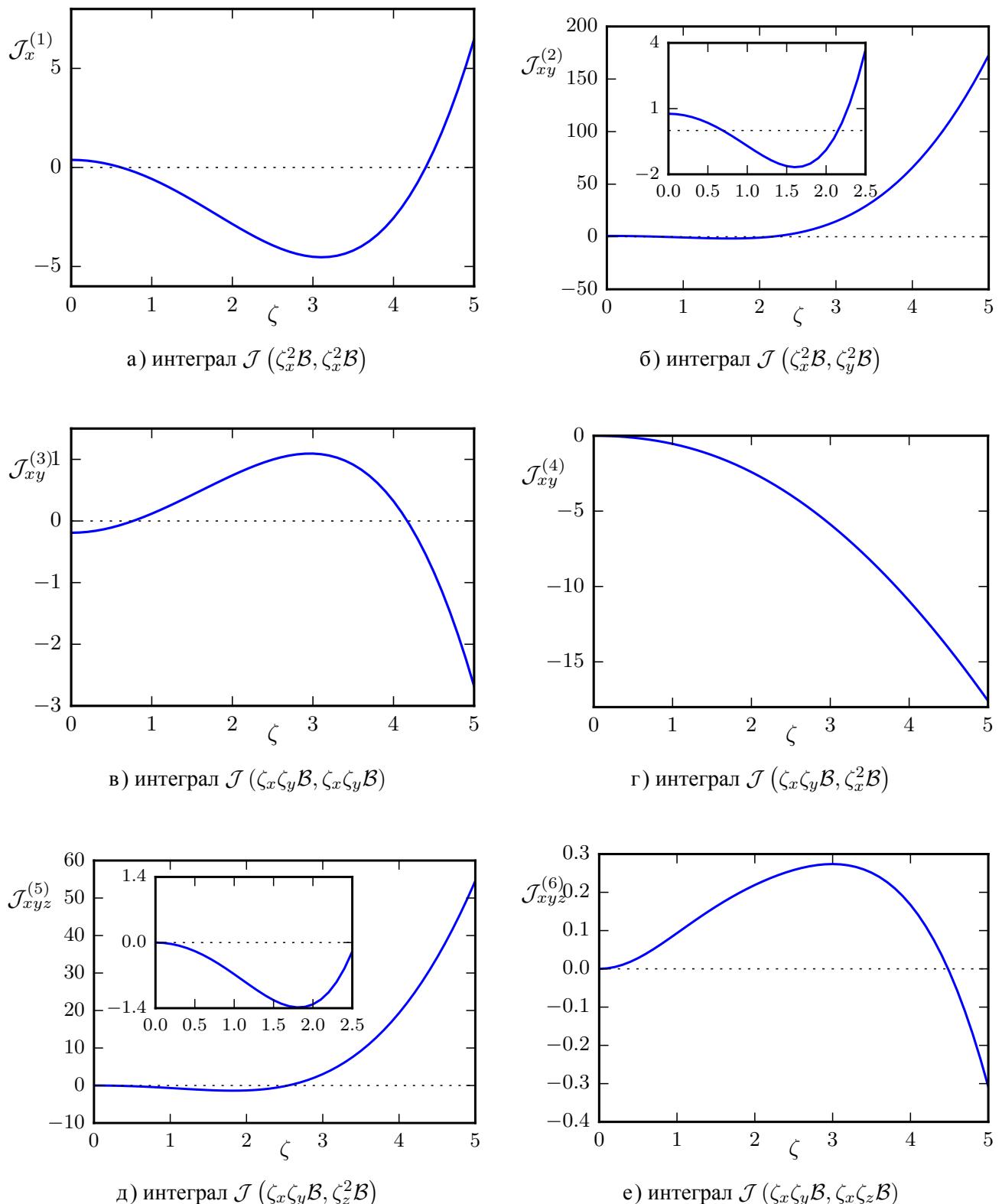
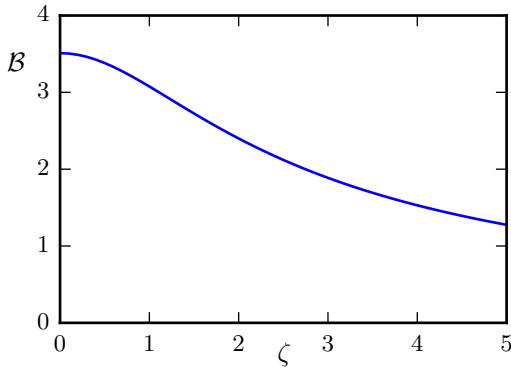
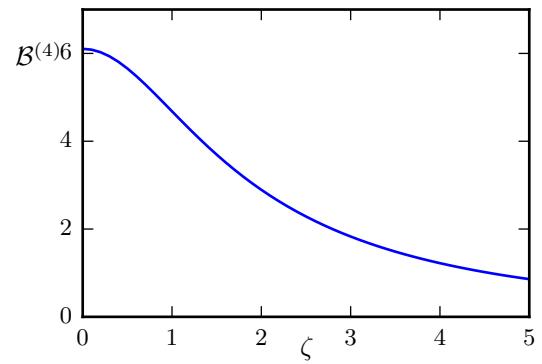
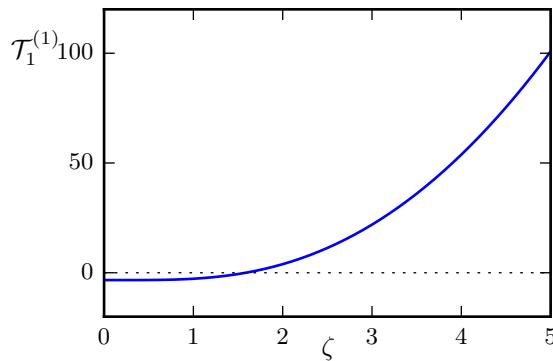
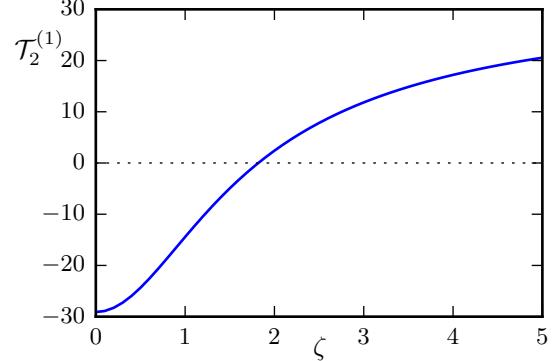


Рисунок А.7 — Интеграл столкновения $\mathcal{J}(\varphi, \psi)$, вычисленный для $\zeta_x = \zeta_y = \zeta / \sqrt{2}$ (а, б, в) и для $\zeta_x = \zeta_y = \zeta_z = \zeta / \sqrt{3}$ (г, д, е)

Рисунок А.8 — Транспортная функция $\mathcal{B}(\zeta)$ Рисунок А.9 — Транспортная функция $\mathcal{B}^{(4)}(\zeta)$ Рисунок А.10 — Транспортная функция $\mathcal{T}_1^{(1)100}(\zeta)$ Рисунок А.11 — Транспортная функция $\mathcal{T}_2^{(1)}(\zeta)$ 

A.3.2 Вычисление γ_9

Функция $\mathcal{B}^{(4)}(\zeta)$ (рис. А.9) вычисляется непосредственно из уравнения

$$\mathcal{L} \left(\zeta_x \zeta_y \mathcal{B}^{(4)} \right) = \zeta_x \zeta_y \mathcal{B}. \quad (\text{A.52})$$

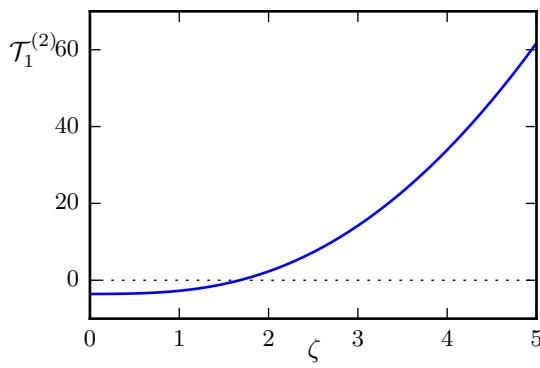
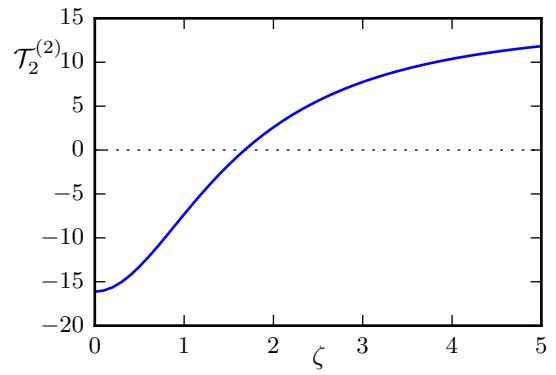
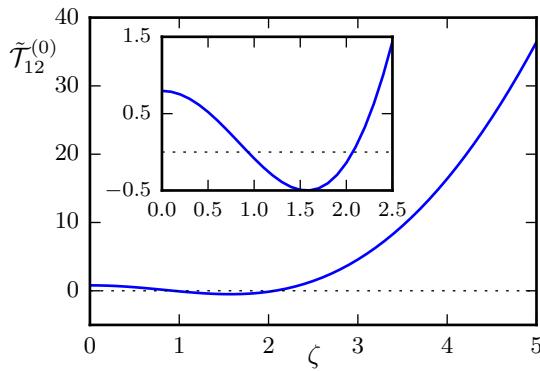
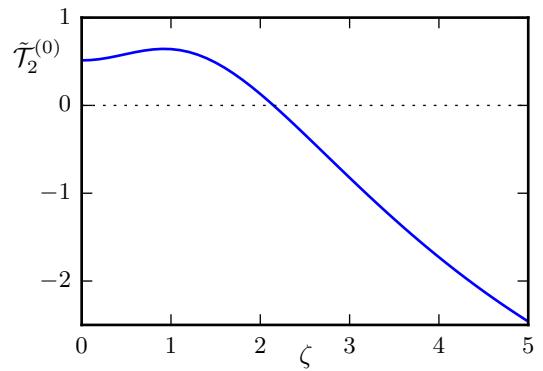
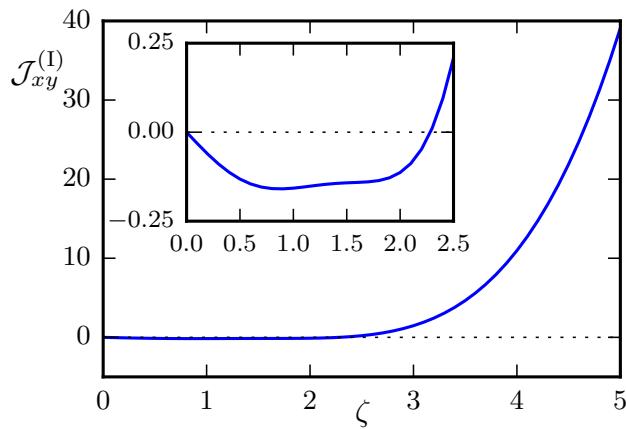
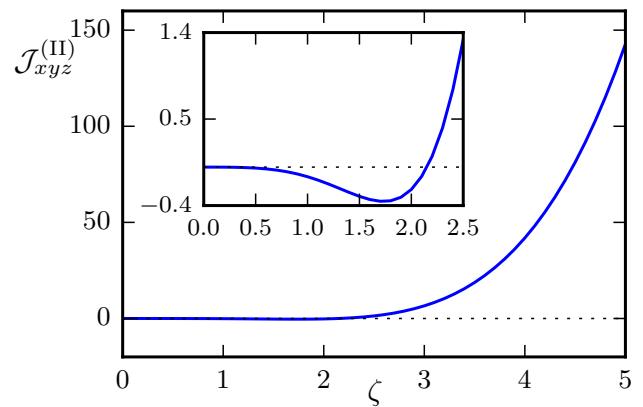
Интегрирование по формуле (А.2) даёт

$$\gamma_9 = 1.635(7). \quad (\text{A.53})$$

A.3.3 Вычисление γ_{10}

Из (А.8) следует, что функции $\mathcal{T}_1^{(m)}$ (рис. А.10, А.12) и $\mathcal{T}_2^{(m)}$ (рис. А.11, А.13) можно вычислить по формулам

$$\mathcal{L} \left(\zeta_x \zeta_y \zeta_z \mathcal{T}_2^{(1)} \right) = -\zeta_x \zeta_y \zeta_z \left(2\mathcal{A} - \frac{1}{\zeta} \frac{d\mathcal{A}}{d\zeta} \right), \quad (\text{A.54})$$

Рисунок А.12 — Транспортная функция $\mathcal{T}_1^{(2)}(\zeta)$ Рисунок А.13 — Транспортная функция $\mathcal{T}_2^{(2)}(\zeta)$ Рисунок А.14 — Транспортная функция $\tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)}(\zeta)$ Рисунок А.15 — Транспортная функция $\tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)}(\zeta)$ а) интеграл $\mathcal{J}(\zeta_x \mathcal{A}, \zeta_x \zeta_y \mathcal{B})$ б) интеграл $\mathcal{J}(\zeta_x \mathcal{A}, \zeta_y \zeta_z \mathcal{B})$ Рисунок А.16 — Интеграл столкновения $\mathcal{J}(\varphi, \psi)$, вычисленный для $\zeta_x = \zeta_y = \zeta / \sqrt{2}$ (а) и для $\zeta_x = \zeta_y = \zeta_z = \zeta / \sqrt{3}$ (б)

$$\mathcal{L} \left[\zeta_x \left(3\mathcal{T}_1^{(1)} + \zeta_x^2 \mathcal{T}_2^{(1)} \right) \right] = -\zeta_x^3 \left(2\mathcal{A} - \frac{1}{\zeta} \frac{d\mathcal{A}}{d\zeta} \right), \quad (\text{A.55})$$

$$\mathcal{L} \left(\zeta_x \zeta_y \zeta_z \mathcal{T}_2^{(2)} \right) = -\zeta_x \zeta_y \zeta_z \left((\zeta^2 - 3)\mathcal{B} - \frac{\zeta}{2} \frac{d\mathcal{B}}{d\zeta} \right), \quad (\text{A.56})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_x \left(3\mathcal{T}_1^{(2)} + \zeta_x^2 \mathcal{T}_2^{(2)} \right) \right] = -\zeta_x^3 \left((\zeta^2 - 3)\mathcal{B} - \frac{\zeta}{2} \frac{d\mathcal{B}}{d\zeta} \right) + \frac{3\gamma_1}{2} \zeta_x \quad (\text{A.57})$$

при дополнительном условии (A.13). Соответствующие интегралы в (A.3) равны

$$\frac{5}{8} I_6 \left(\mathcal{T}_1^{(1)} \right) = 0.986(2), \quad \frac{1}{8} I_8 \left(\mathcal{T}_2^{(1)} \right) = 0.505(3), \quad (\text{A.58})$$

$$\frac{5}{8} I_6 \left(\mathcal{T}_1^{(2)} \right) = 0.508(4), \quad \frac{1}{8} I_8 \left(\mathcal{T}_2^{(2)} \right) = 0.540(7). \quad (\text{A.59})$$

Функции $\tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)}$ (рис. A.14) и $\tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)}$ (рис. A.15) находятся из уравнений

$$\mathcal{L} \left(\zeta_x \zeta_y \zeta_z \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right) = \mathcal{J} (\zeta_x \mathcal{A}, \zeta_y \zeta_z \mathcal{B}) \equiv \mathcal{J}_{xyz}^{(\text{II})}, \quad (\text{A.60})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_y \left(\tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)} + \zeta_x^2 \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right) \right] = \mathcal{J} (\zeta_x \mathcal{A}, \zeta_x \zeta_y \mathcal{B}) \equiv \mathcal{J}_{xy}^{(\text{I})}. \quad (\text{A.61})$$

Неоднородные члены представлены на рис. A.16. Численное интегрирование приводит к

$$\frac{5}{8} I_6 \left(\tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)} \right) = 0.038(0), \quad \frac{1}{8} I_8 \left(\tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right) = 0.0068(2). \quad (\text{A.62})$$

Объединяя (A.58), (A.59) и (A.62), находим

$$\gamma_{10} = 2.463(3). \quad (\text{A.63})$$

A.4 Сведение интегральных уравнений к одномерным

Для модели твёрдых сфер трёхмерные интегралы (A.26) и (A.27) могут быть упрощены, если положить $\zeta = (0, 0, \zeta)$ и $\varphi(\zeta) = \zeta^n f(\zeta_z/\zeta)$:

$$\mathcal{L}_1 = \sqrt{2} \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{\xi^{n+2} f(\cos \theta) \sin \theta}{\sqrt{\zeta^2 - 2\zeta \xi \cos \theta + \xi^2}} \exp \left(\frac{\zeta^2 \xi^2 \sin^2 \theta}{\zeta^2 - 2\zeta \xi \cos \theta + \xi^2} - \xi^2 \right) d\xi d\theta, \quad (\text{A.64})$$

$$\mathcal{L}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty \int_0^\pi \xi^{n+2} f(\cos \theta) \sin \theta \sqrt{\zeta^2 - 2\zeta \xi \cos \theta + \xi^2} \exp(-\xi^2) d\xi d\theta. \quad (\text{A.65})$$

Интегральные уравнения (A.7)–(A.11) преобразуются к следующим:

$$\mathcal{L} \left[(3\zeta_z^2 - \zeta^2) \mathcal{B}^{(4)} \right] = 3IB_{zz}^{(4)}, \quad (\text{A.66})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_z (5\zeta_z^2 - 3\zeta^2) \mathcal{T}_2^{(m)} \right] = 2IT_{zzz}^{(m)} - 6IT_{zxx}^{(m)}, \quad (\text{A.67})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_z \left(5\mathcal{T}_1^{(m)} + \zeta^2 \mathcal{T}_2^{(m)} \right) \right] = IT_{zzz}^{(m)} + 2IT_{zxx}^{(m)}, \quad (\text{A.68})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_z (5\zeta_z^2 - 3\zeta^2) \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right] = 2 \left(I\tilde{T}_{z,zz}^{(0)} - I\tilde{T}_{z,xx}^{(0)} - 2I\tilde{T}_{x,xz}^{(0)} \right), \quad (\text{A.69})$$

$$\mathcal{L} \left[\zeta_z \left(5\tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)} + \zeta^2 \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right) \right] = I\tilde{T}_{z,zz}^{(0)} - I\tilde{T}_{z,xx}^{(0)} + 3I\tilde{T}_{x,xz}^{(0)}, \quad (\text{A.70})$$

$$\mathcal{L} \left[(35\zeta_z^4 - 30\zeta_z^2\zeta^2 + 3\zeta^4) \mathcal{Q}_3^{(0)} \right] = 2 \left(4IQ_{zzzz}^{(0)} + 3IQ_{xxxx}^{(0)} - 24IQ_{zxxx}^{(0)} + 3IQ_{xxyy}^{(0)} \right), \quad (\text{A.71})$$

$$\mathcal{L} \left[(3\zeta_z^2 - \zeta^2) \left(7\mathcal{Q}_2^{(0)} + \zeta^2 \mathcal{Q}_3^{(0)} \right) \right] = 2 \left(IQ_{zzzz}^{(0)} - IQ_{xxxx}^{(0)} + 2IQ_{zxxx}^{(0)} - 2IQ_{xxyy}^{(0)} \right), \quad (\text{A.72})$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{L} \left[(35\zeta_z^4 - 30\zeta_z^2\zeta^2 + 3\zeta^4) \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)} \right] \\ &= 2 \left(4I\tilde{Q}_{zz,zz}^{(0)} + 3I\tilde{Q}_{xx,xx}^{(0)} - 16I\tilde{Q}_{zx,zx}^{(0)} + 2I\tilde{Q}_{xy,xy}^{(0)} - 8I\tilde{Q}_{zz,xx}^{(0)} + I\tilde{Q}_{xx,yy}^{(0)} \right), \end{aligned} \quad (\text{A.73})$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{L} \left[(3\zeta_z^2 - \zeta^2) \left(7\tilde{\mathcal{Q}}_{22}^{(0)} + \zeta^2 \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)} \right) \right] \\ &= 2 \left(I\tilde{Q}_{zz,zz}^{(0)} - I\tilde{Q}_{xx,xx}^{(0)} + 3I\tilde{Q}_{zx,zx}^{(0)} - 3I\tilde{Q}_{xy,xy}^{(0)} - 2I\tilde{Q}_{zz,xx}^{(0)} + 2I\tilde{Q}_{xx,yy}^{(0)} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.74})$$

С помощью (A.64) и (A.65) получаются одномерные интегральные уравнения:

$$\int_0^\infty K_2(\zeta, \xi) \mathcal{B}^{(4)}(\xi) d\xi - \nu \mathcal{B}^{(4)} = \mathcal{B}, \quad (\text{A.75})$$

$$\int_0^\infty K_3(\zeta, \xi) \mathcal{T}_2^{(1)}(\xi) d\xi - \nu \mathcal{T}_2^{(1)} = \frac{1}{\zeta} \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \zeta} - 2\mathcal{A}, \quad (\text{A.76})$$

$$\begin{cases} \int_0^\infty K_1(\zeta, \xi) \mathcal{T}_1^{(1)}(\xi) d\xi - \nu \mathcal{T}_1^{(1)} \\ = \frac{1}{5} \left(\zeta \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \zeta} - 2\zeta^2 \mathcal{A} - \int_0^\infty K_1(\zeta, \xi) \xi^2 \mathcal{T}_2^{(1)}(\xi) d\xi + \nu \zeta^2 \mathcal{T}_2^{(1)} \right), \\ \int_0^\infty (5\mathcal{T}_1^{(1)} + \zeta^2 \mathcal{T}_2^{(1)}) \zeta^4 \exp(-\zeta^2) d\zeta = 0, \end{cases} \quad (\text{A.77})$$

$$\int_0^\infty K_3(\zeta, \xi) \mathcal{T}_2^{(2)}(\xi) d\xi - \nu \mathcal{T}_2^{(2)} = \frac{\zeta}{2} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \zeta} - (\zeta^2 - 3) \mathcal{B}, \quad (\text{A.78})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^\infty K_1(\zeta, \xi) \mathcal{T}_1^{(2)}(\xi) d\xi - \nu \mathcal{T}_1^{(2)} \\ = \frac{\gamma_1}{2} + \frac{1}{5} \left(\frac{\zeta^3}{2} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \zeta} - \zeta^2 (\zeta^2 - 3) \mathcal{B} - \int_0^\infty K_1(\zeta, \xi) \xi^2 \mathcal{T}_2^{(2)}(\xi) d\xi + \nu \zeta^2 \mathcal{T}_2^{(2)} \right), \\ \int_0^\infty \left(5\mathcal{T}_1^{(2)} + \zeta^2 \mathcal{T}_2^{(2)} \right) \zeta^4 \exp(-\zeta^2) d\zeta = 0, \end{array} \right. \quad (\text{A.79})$$

$$\int_0^\infty K_3(\zeta, \xi) \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)}(\xi) d\xi - \nu \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} = \frac{1}{\zeta^3} \left(I\tilde{T}_{z,zz}^{(0)} - I\tilde{T}_{z,xx}^{(0)} - 2I\tilde{T}_{x,xz}^{(0)} \right), \quad (\text{A.80})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^\infty K_1(\zeta, \xi) \tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)}(\xi) d\xi - \nu \tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)} \\ = \frac{1}{5\zeta} \left(I\tilde{T}_{z,zz}^{(0)} - I\tilde{T}_{z,xx}^{(0)} + 3I\tilde{T}_{x,xz}^{(0)} \right) - \frac{1}{5} \left(\int_0^\infty K_1(\zeta, \xi) \xi^2 \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)}(\xi) d\xi - \nu \zeta^2 \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right), \\ \int_0^\infty \left(5\tilde{\mathcal{T}}_{12}^{(0)} + \zeta^2 \tilde{\mathcal{T}}_2^{(0)} \right) \zeta^4 \exp(-\zeta^2) d\zeta = 0, \end{array} \right. \quad (\text{A.81})$$

$$\int_0^\infty K_4(\zeta, \xi) \mathcal{Q}_3^{(0)}(\xi) d\xi - \nu \mathcal{Q}_3^{(0)} = \frac{1}{\zeta} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \zeta} - 2\mathcal{B}, \quad (\text{A.82})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^\infty K_2(\zeta, \xi) \mathcal{Q}_2^{(0)}(\xi) d\xi - \nu \mathcal{Q}_2^{(0)} \\ = \frac{1}{7} \left(\zeta \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \zeta} - 2\zeta^2 \mathcal{B} - \int_0^\infty K_2(\zeta, \xi) \xi^2 \mathcal{Q}_3^{(0)}(\xi) d\xi + \nu \zeta^2 \mathcal{Q}_3^{(0)} \right), \end{array} \right. \quad (\text{A.83})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^\infty K_4(\zeta, \xi) \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)}(\xi) d\xi - \nu \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)} \\ = \frac{1}{4\zeta^4} \left(4I\tilde{Q}_{zz,zz}^{(0)} + 3I\tilde{Q}_{xx,xx}^{(0)} - 16I\tilde{Q}_{zx,zx}^{(0)} + 2I\tilde{Q}_{xy,xy}^{(0)} - 8I\tilde{Q}_{zz,xx}^{(0)} + I\tilde{Q}_{xx,yy}^{(0)} \right), \end{array} \right. \quad (\text{A.84})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^\infty K_2(\zeta, \xi) \tilde{\mathcal{Q}}_{22}^{(0)}(\xi) d\xi - \nu \tilde{\mathcal{Q}}_{22}^{(0)} \\ = \frac{1}{7\zeta^2} \left(I\tilde{Q}_{zz,zz}^{(0)} - I\tilde{Q}_{xx,xx}^{(0)} + 3I\tilde{Q}_{zx,zx}^{(0)} - 3I\tilde{Q}_{xy,xy}^{(0)} - 2I\tilde{Q}_{zz,xx}^{(0)} + 2I\tilde{Q}_{xx,yy}^{(0)} \right) \\ - \frac{1}{7} \left(\int_0^\infty K_2(\zeta, \xi) \xi^2 \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)}(\xi) d\xi - \nu \zeta^2 \tilde{\mathcal{Q}}_3^{(0)} \right). \end{array} \right. \quad (\text{A.85})$$

$$(\text{A.86})$$

Ядра $K_i(\zeta, \xi)$ в интегральных уравнениях определены как

$$K_1(\zeta, \xi) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\xi^3}{\zeta} (4G_1 - 2J_1) \exp(-\xi^2), \quad (\text{A.87})$$

$$K_2(\zeta, \xi) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\xi^4}{\zeta^2} (6G_2 - 2G_0 - 3J_2 + J_0) \exp(-\xi^2), \quad (\text{A.88})$$

$$K_3(\zeta, \xi) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\xi^5}{\zeta^3} (10G_3 - 6G_1 - 5J_3 + 3J_1) \exp(-\xi^2), \quad (\text{A.89})$$

$$K_4(\zeta, \xi) = \frac{1}{8\sqrt{2}} \frac{\xi^6}{\zeta^4} (70G_4 - 60G_2 + G_0 - 35J_4 + 30J_2 - 3J_0) \exp(-\xi^2), \quad (\text{A.90})$$

где

$$\begin{aligned} G_n &= \int_0^\pi \frac{\cos^n \theta \sin \theta}{\sqrt{R_s - 2\xi\zeta \cos \theta}} \exp\left(\frac{\xi^2\zeta^2 \sin^2 \theta}{R_s - 2\xi\zeta \cos \theta}\right) d\theta \\ &= \frac{1}{2^n \xi^{n+1} \zeta^{n+1}} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} R_s^{n-k} (-1)^k C_k, \end{aligned} \quad (\text{A.91})$$

$$\begin{cases} C_0 = \sqrt{\pi} \exp\left(\frac{R_s - R_d}{2}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{r_s - r_d}{2}\right), \\ C_1 = (2 + R_d)C_0 - 2(r_s - r_d), \\ C_n = 2(2n - 1)C_{n-1} + R_d^2 C_{n-2} - 2(r_s^{2n-1} - r_d^{2n-1}), \end{cases} \quad (\text{A.92})$$

$$\begin{aligned} J_n &= \int_0^\pi \cos^n \theta \sin \theta \sqrt{R_s - 2\xi\zeta \cos \theta} d\theta \\ &= \frac{1}{2^n \xi^{n+1} \zeta^{n+1}} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} R_s^{n-k} (-1)^k \frac{r_s^{2k+3} - r_d^{2k+3}}{2k+3}, \end{aligned} \quad (\text{A.93})$$

$$\begin{cases} R_s = \xi^2 + \zeta^2, & R_d = |\xi^2 - \zeta^2|, \\ r_s = \xi + \zeta, & r_d = |\xi - \zeta|. \end{cases} \quad (\text{A.94})$$

По аналогичным формулам ранее были вычислены другие транспортные коэффициенты для модели твёрдых сфер [162].

A.4.1 Особенности исчисления

Для вычисления $K_i(\zeta, \xi)$ при малых ζ используется разложение K_i в ряд по ζ . Функции $(\partial A / \partial \zeta) / \zeta$ и $(\partial B / \partial \zeta) / \zeta$ также требуют асимптотического анализа для малых ζ .

Интегральные уравнения Фредгольма второго рода решаются методом квадратур. Поскольку $K_i(\zeta, \xi)$ быстро убывает вместе с ξ , то область численного интегрирования ограничивалась до $[0, \zeta^{(\text{cut})}]$ вместо $[0, \infty]$. Во всех случаях ис-

Таблица 6 — Сравнение транспортных коэффициентов. Красным цветом показаны недостоверные знаки. В скобках указаны используемые сетки $N_\zeta/100$.

Коэффициент	\mathcal{L} в \mathbb{R}^3	\mathcal{L} в \mathbb{R} (60)	\mathcal{L} в \mathbb{R} (12-14-16)	\mathcal{L} в \mathbb{R} (30-32-34)	Литература [185]
γ_1	1.2701	1.2700434	1.2700424271	1.2700424271	1.270042427
γ_2	—	1.9222856	1.9222840656	1.9222840656	1.922284066
γ_3	—	1.9479097	1.947906335	1.947906335	1.947906335
γ_7	0.2201	0.1892040	0.1892011	0.1892001	0.189201
γ_8	1.4963	1.4959457	1.495941968	1.495941968	—
γ_9	1.6357	1.6360755	1.6360734585	1.6360734585	—
γ_{10}	2.4633	2.4497955	2.44977960	2.44977953	—

пользовалось $\zeta^{(\text{cut})} = 6.4$. На этом отрезке были равномерно распределены N_ζ точек.

Применялось два способа повышения точности метода квадратур. Во-первых, применялись достаточно подробные сетки. Во-вторых, уравнения решались на трёх различных сетках, после чего результаты экстраполировались в предположении, что искомая функция $F(\zeta)$ содержит невязку вида

$$F_h(N_\zeta) = F(\zeta) + \frac{C_1}{N_\zeta^2} + \frac{C_2}{N_\zeta^4}, \quad (\text{A.95})$$

где $F_h(N_\zeta)$ — разностное решение, C_i — произвольные коэффициенты.

A.4.2 Сравнение результатов

В табл. 6 приводится сравнение транспортных коэффициентов, вычисленных различными методами, а также приведённых в литературе. Вычисление коэффициента γ_3 возможно несколькими способами

$$\gamma_3 = 2I_6(\mathcal{B}_1) = 5I_6\left(\mathcal{T}_1^{(0)}\right) + I_8\left(\mathcal{T}_2^{(0)}\right). \quad (\text{A.96})$$

По второй формуле получается значение $\gamma_3 = 1.94790635$.