

УДК 533.7

© 1999 г. А.А. АБРАМОВ, С.Ф. ГИМЕЛЬШЕЙН, М.С. ИВАНОВ, Н.К. МАКАШЕВ

**ВЫСОКОСКОРОСТНЫЕ "ХВОСТЫ" ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ  
МОЛЕКУЛ ДЛЯ ОДНОМЕРНЫХ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЙ**

Установленные ранее свойства неравновесных высокоскоростных "хвостов" функций распределения – решений модельного кинетического уравнения БГК – в случае неизотермических течений при малых числах Кнудсена сравниваются со свойствами численных решений уравнения Больцмана, полученных для аналогичных условий с помощью методов прямого статистического моделирования (Монте-Карло). Рассмотрение проводится на примере плоского течения Куэтта и одномерной теплопередачи.

Вычисление макроскопических скоростей химических реакций с большими энергетическими порогами требует знания высокоэнергетических "хвостов" функций распределения молекул по их скоростям или внутренним энергиям. Однако обычно используемые численные и аналитические методы решения кинетических уравнений ориентированы на область тепловых энергий частиц и соответственно на вычисление макропараметров и переносных свойств газов. По этой причине существует необходимость в достаточно эффективных методах решения при больших энергиях молекул, опирающихся на реальные свойства "хвостов" функций распределения.

В случае течений газа многоатомных молекул исследование свойств решений уравнений уровневой кинетики на "хвостах" распределений молекул по их внутренним энергиям сначала было проведено для упрощенных уравнений и лишь затем – для уравнений точных [1–5]. С помощью полученных решений продемонстрирован вклад неравновесных "хвостов" распределений по колебательным уровням двухатомных молекул в макроскопическую скорость реакции их термической диссоциации [2–7]. Затем был разработан приближенный метод асимптотического решения кинетических уравнений Больцмана – Ванг-Чанга – Уленбека на "хвостах" распределений молекул по их колебательным энергиям [8].

В случае высокоскоростных "хвостов" функций распределения молекул аналогичные вопросы рассматривались в [9, 10] для уравнения Больцмана и в [11–13] – для модельного кинетического уравнения БГК, причем асимптотические и численные решения получены лишь во втором случае. Сравнение этих решений между собой продемонстрировало хорошее взаимное согласие результатов вычислений.

Однако до сих пор нет ответа на вопрос: соответствуют ли свойствам решений уравнения Больцмана те особенности неравновесных высокоскоростных "хвостов" молекулярных распределений в пространственно неоднородных течениях, которые были обнаружены при анализе и решении приближенного модельного уравнения БГК?

В данной работе приводятся результаты численного решения уравнения Больцмана, полученные для "хвостов" функций распределения по скоростям при следующих условиях: рассматриваются а) одномерные теплопередача и течение Куэтта; б) число Кнудсена  $Kn \ll 1$ ; в) используются модели молекул – твердые сферы и псевдомаквелловские молекулы. Для решения уравнения Больцмана применяются известные эффективные методы прямого статистического моделирования (Монте-Карло), которые

в данной работе используются в случае пространственно неоднородных течений для вычисления не только полей макропараметров, но и функций распределения в диапазоне скоростей молекул, заметно превышающих скорости их "теплового" движения и, следовательно, для вычисления макропараметров, а также переносных свойств газа. Возможности современных ЭВМ и большие затраты времени расчетов позволили вычислить функции распределения при достаточно больших скоростях молекул.

**1. Свойства решений модельного кинетического уравнения.** Отсылая за подробностями процедур асимптотического и численного решения уравнения БГК к [11-13], приведем основные результаты этих исследований, качественно согласующиеся с данными [9, 10].

Сильное нарушение локально-равновесных распределений Максвелла происходит при скоростях молекул  $C \approx C_T \text{Kn}^{-1/3}$  и  $C \approx C_T \text{Kn}^{-1/2}$  соответственно для максвелловских молекул (БГК-модели в том числе) и молекул – твердых сфер. Здесь число  $\text{Kn}$  определено по локальному масштабу изменения температуры газа  $L \approx |\nabla \ln T|^{-1}$ ,  $C_T = \sqrt{2RT}$ ,  $R$  – газовая постоянная. Отсюда можно заключить, что в случае, например, одномерной теплопередачи нарушение локально-максвелловского распределения около менее нагретой пластины происходит при меньших скоростях молекул, чем вблизи более нагретой пластины, где локальный масштаб течения больше. По той же причине в области максимума температуры газа в одномерном течении Куэтта нарушение локального распределения Максвелла существенно при больших скоростях молекул, чем в том же течении, но около пластин.

Локальная часть решения БГК-уравнения для функции распределения в задаче об одномерной теплопередаче и основная часть решения того же уравнения в случае течения Куэтта после усреднения соответствующих функций распределения по компонентам скорости молекул, параллельным ограничивающим газ пластинам, с хорошей точностью описываются асимптотическим разложением приведенной функции распределения

$$F_1 = \frac{1}{A_1} + \frac{\text{Kn} V_x}{A_1^3} \frac{dA_1}{ds} + \dots, \quad A_1 = 1 + \text{Kn} V_x \left( \frac{V_x^2}{\tau} - \frac{3}{2} \right) \frac{d \ln \tau}{ds} \quad (1.1)$$

$$F_1 = \frac{f_1(V_x)}{f_{1,0}(V_x)}, \quad V = \frac{C}{C_T^*}, \quad C_T^* = \sqrt{2RT_*}$$

$$T_* = \min(T_w), \quad \tau = \frac{T}{T_*}, \quad \eta = \frac{n}{n_*}, \quad n_* L = \int_0^L n dx, \quad x_1 = \frac{x}{L}$$

$$s = \int_0^{x_1} \eta dx_1, \quad \text{Kn} = \frac{C_T^*}{An_* L} \ll 1, \quad S = \frac{W}{C_T^*}$$

где использованы обозначения:  $f$  – функция распределения,  $f_0$  – распределение Максвелла, индексом 1 обозначены функции распределения, усредненные по двум из трех компонент скорости молекул,  $L$  – расстояние между пластинами,  $T_w$  – температура поверхности пластины (в случае теплопередачи  $T_{w1} < T_{w2}$ ), ось  $x$  направлена по нормали к поверхности пластин в сторону от холодной к более нагретой или, в случае течения Куэтта, в сторону от неподвижной пластины, в то время как другая пластина считается движущейся со скоростью  $W$  в направлении оси  $x$ .

Обладающее локальными свойствами решение (1.1) справедливо, если  $A_1 > 0$ . В случае теплопередачи это условие выполняется для всех значений  $V_x > 0$ , т.е. для всех молекул, летящих в сторону увеличения температуры газа. В противном случае всегда найдется такая скорость молекулы  $V_x^* < 0$ ,  $V_x^* = 0$  ( $\text{Kn}^{-1/3}$ ), что в некоторой точке

$s = s_0$ , принадлежащей полю течения

$$A_1(s_0, V_x^*) = 0$$

Заметим, что это равенство является уравнением для одной из входящих в него величин при известной второй величине. Для  $V_x < V_x^* < 0$ ,  $|V_x| > |V_x^*|$  и  $s < s_0$  решение в главном приближении имеет вид

$$F_1 \approx -\frac{1}{\text{Kn} V_x} \exp\left(\int_s^{s_0} \frac{A_1 dz}{\text{Kn} V_x}\right) \sqrt{-\frac{2 \text{Kn} V_x \pi}{dA_1(s_0)/ds}} \gg 1 \quad (1.2)$$

или, после перехода к функциям распределения

$$f_1(s, V_x) \approx f_{1,0}(s_0, V_x) \exp\left(\frac{s_0 - s}{\text{Kn} V_x}\right) \sqrt{\frac{2\pi}{-\text{Kn} V_x dA_1(s_0)/ds}} \gg f_{1,0}(s, V_x)$$

Данный результат означает, что, несмотря на малость числа  $\text{Kn}$ , решение для функции распределения при больших отрицательных скоростях молекул (в данном случае – направленных в сторону уменьшения температуры газа) приобретает не-локальные свойства и в полном согласии с решением (1.1) значительно превосходит по величине локальное равновесное распределение Максвелла. В итоге можно сделать вывод, что, согласно решениям (1.1) и (1.2), приведенная функция распределения  $F_1$  в случае задачи о теплопередаче заметно меньше единицы при  $V_x \gg 1$  для молекул, летящих в сторону увеличения температуры газа. Для больших скоростей молекул обратного направления функция  $F_1 \gg 1$ . Важно, что указанный "перекок" приведенной функции в пространстве скоростей молекул тем сильнее, чем ближе расчетная точка к менее нагретой пластине, т.е. чем больше локальное значение числа  $\text{Kn}$ .

В случае течения Куэтта при равных температурах пластин, ограничивающих газ, максимум температуры газа достигается на середине расстояния между пластинами. Поэтому здесь величина перекока  $F_1$  максимальна около каждой из пластин (причем с разными знаками). В плоскости симметрии поля температуры приведенная функция распределения близка к единице, а усредненная функция распределения  $f_1(V_x)$  – к локально-равновесному распределению  $f_{01}(V_x)$ .

Численные решения БГК-модели, полученные в [11–13] для аналогичных условий, подтвердили результаты теоретического анализа, приведенные выше.

**2. Два численных метода решения уравнения Больцмана.** Методы прямого статистического моделирования, примененные в данной работе для решения уравнения Больцмана, традиционно рассматриваются как методы компьютерного воспроизведения движения десятков и сотен тысяч модельных молекул. Основной принцип рассматриваемых методов состоит в расщеплении непрерывного движения и столкновений молекул, происходящих на временном шаге  $\Delta t$ , на два последовательных этапа: свободно-молекулярный перенос и столкновительную релаксацию. Область рассчитываемого течения делится на ячейки с характерным размером, меньшим локальной длины пробега молекул, а величина временного интервала  $\Delta t$  выбирается таким образом, чтобы траектории молекул за один шаг не пересекали более одной ячейки.

В настоящее время существует два подхода к формулированию и обоснованию методов прямого статистического моделирования. Первый подход [14] может быть определен как физический, поскольку он основан на физических предположениях, лежащих в основе феноменологического вывода уравнения Больцмана. Второй подход – математический. С его помощью получен ряд различных как по степени обоснованности, так и по эффективности схем метода прямого статистического моделирования. В настоящей работе используются две схемы рассматриваемого метода.

Во-первых, это схема мажорантной частоты [15, 16], полученная из основного

кинетического уравнения с учетом специфики  $N$ -частичной модели газа, обобщения известного метода максимального сечения с дополнительной хаотизацией – и являющаяся точной схемой реализации столкновительной релаксации. Важное достоинство этой схемы – ее экономичность, а именно линейная зависимость объема вычислений от числа модельных частиц. Принцип мажорантной частоты распространен на пространственно неоднородный случай в [17], где на основе кинетического уравнения Леонтовича для  $N$ -частичной функции распределения получены точные экономичные численные схемы метода прямого статистического моделирования (связь уравнения Леонтовича с уравнением Больцмана проанализирована в [18]).

Во-вторых, кроме схемы мажорантной частоты в настоящей работе использовался вариант метода прямого статистического моделирования, предложенный в [19, 20] на основе строгого теоретико-вероятностного анализа, позволившего построить приближенную схему моделирования этапа столкновительной релаксации при малом числе модельных частиц в ячейке и минимальной погрешности в частоте столкновений.

Следует отметить, что при использовании первого из двух подходов производился контроль степени статистической зависимости между модельными частицами. Для этого применялась предложенная в [21] методика: определялось число повторных столкновений, т.е. число многократных столкновений двух произвольно выбранных частиц за время их жизни между последовательными столкновениями с диффузно отражающими стенками. Вычисления показали, что при использовании числа частиц порядка  $10^5$  относительное число повторных столкновений не превышает 0,1%. Таким образом, полученные здесь результаты, в том числе и для "хвостов" функций распределения, свободны от статистической зависимости.

Расчеты проводились для часто употребляемой в настоящее время модели межмолекулярного взаимодействия, известной как модель переменных твердых сфер [22]. Модель характеризуется классическим законом рассеяния твердых сфер с диаметром  $d$ , являющимся обратной степенной функцией энергии относительного движения сталкивающихся частиц, сечение столкновений которых, следовательно, может быть представлено в виде

$$\sigma_T = \pi d^2 = c \left( \frac{\mu g^2}{2} \right)^{-\alpha}$$

где  $c$  и  $\alpha$  – константы, остальные обозначения традиционны. Расчеты проводились для  $\alpha = 0$  (твердые сферы) и 0,5 (псевдомаксвелловские молекулы).

При проведении расчетов в заданных точках рассматриваемых течений вычислялись макропараметры газа и одномерные функции распределения

$$f_1(V_i) \equiv \iint f(V_i, V_j, V_k) dV_j dV_k$$

Вычисленные функции  $f_1(V_i)$  делением на максвелловские распределения  $f_{01}(V_i)$ , определенные по значениям макропараметров газа в той же точке, преобразовывались в так называемые приведенные функции распределения, отличие которых от единицы служит удобной мерой неравновесности  $f(V)$ .

Задача о теплопередаче рассматривалась как одномерная стационарная задача в пространстве между двумя бесконечными параллельными пластинами, расположенными в плоскостях  $x = 0$  и  $h$ , температуры которых полагались равными  $T_1$  и  $T_2 = 4T_1$  соответственно.

Это достаточно простая и хорошо "освоенная" задача – классическая с точки зрения верификации и сравнения различных подходов, применяемых в динамике разреженного газа. Кроме того, в данном случае она служит основой при переходе к более сложной задаче о течении Куэтта. При моделировании последнего пластина  $x = 0$  полагалась движущейся в направлении оси  $y$  со скоростью  $W = 3,64 C_T^*$ , а температура этой пластины  $T_1$  считалась равной температуре другой пластины  $T_2$ .

В качестве начальных условий принят покоящийся однородно нагретый до температуры  $T_1$  газ с постоянной по пространству числовой плотностью молекул  $n_*$ . Отражение молекул от пластин диффузное, с полной аккомодацией энергии частиц. Число Кн определялось как отношение длины свободного пробега молекул при температуре  $T_1$  и числовой плотности  $n_*$  к расстоянию между пластинами  $h$ . Основные расчеты проведены для Кн = 0,02 и 0,06.

Расчетная область разбивалась на  $N$  одинаковых ячеек, которые использовались как для моделирования столкновений, так и для осреднения макропараметров. При расчетах методом мажорантной частоты использовалось 100 измерительных ячеек и  $10^5$  модельных частиц; расчеты методом [19, 20] проводились при числе ячеек 105 и числе моделирующих молекул 1000.

Значения макропараметров определялись после выхода решения к стационарному состоянию двумя способами: "по пересечению" и "по присутствию". Величины плотности и температуры молекул нормировались на среднюю плотность  $n_*$  и начальную температуру  $T_1$ .

В случае расчетов методом мажорантной частоты число шагов по времени для осреднения как макропараметров, так и вычисляемых функций распределения соответствовало примерно  $1,4 \cdot 10^8$  столкновениям моделирующих молекул с "холодной" пластиной. Это позволило вычислить с достаточно высокой точностью не только макропараметры, но и функции распределения вплоть до четырех локальных тепловых скоростей. Указанное число необходимых столкновений молекул с пластиной  $x = 0$  подтверждается оценкой вероятности  $P \approx 3 \cdot 10^{-8}$ , с какой модельная молекула при столкновении с холодной стенкой попадает в скоростной интервал (3,8–4,0)  $C_T^*$ .

При расчетах методом [19, 20] аналогичная точность и диапазон вычислений также достигались при числе ударов модельных молекул о плоскость  $x = 0$ , равном  $N_w \approx 10^8$ .

Верификация результатов, полученных методами прямого статистического моделирования, осуществлялась, во-первых, путем сравнения полученных решений между собой (см. ниже). Во-вторых, проведены расчеты с помощью уравнений Навье – Стокса (как без, так и с условиями скольжения на стенках), результаты которых практически совпали с полученными методами Монте-Карло (см. далее). Наконец, для независимой оценки точности вычисления функций распределения проведены расчеты теплопередачи при равных температурах неподвижных стенок (равновесный случай). Эти расчеты показали, что вычисляемая функция распределения совпадает с максвелловским распределением вплоть до четырех тепловых скоростей  $\sqrt{2RT}$  с погрешностью не хуже 5%.

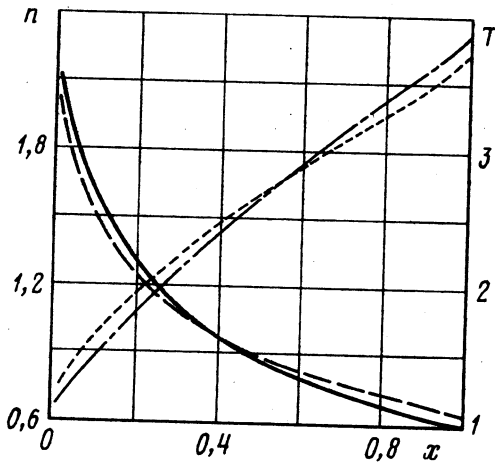
**3. Обсуждение результатов.** Сравнение получаемых статистическими методами полей макропараметров с решениями уравнений Навье – Стокса показало, что расчеты теплопередачи в газе молекул – твердых сфер для Кн = 0,02, проведенные методом мажорантной частоты, дали практически те же результаты, что и соответствующие этой модели молекул уравнения Навье – Стокса с известными условиями скольжения.

Примеры результатов расчета профилей числовой плотности и температуры газа для двух рассматриваемых молекулярных моделей, полученные статистическим методом мажорантной частоты при Кн = 0,02, представлены на фиг. 1.

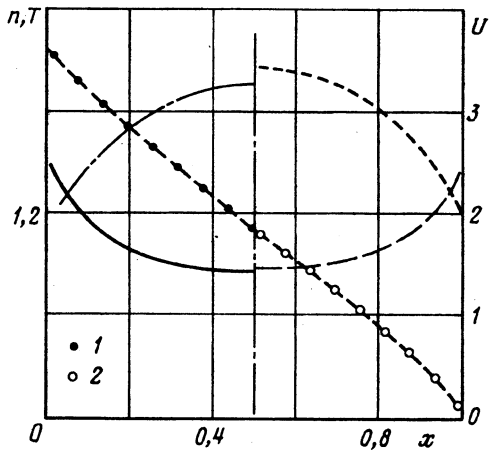
Аналогично на фиг. 2 показаны рассчитанные тем же методом профили макропараметров в случае течения Куэтта при Кн = 0,02. Расчеты проведены для обеих описанных выше моделей молекул. Из приведенных данных видно, что "газодинамические" части рассматриваемых задач решаются с высоким качеством.

Полученная при решении задачи о теплопередаче приведенная функция распределения  $F_1(V_x)$  демонстрируется на фиг. 3 и 4 в зависимости от принятой в расчетах модели молекул, от числа Кн и от точки вычисления функции распределения, т.е. от локального значения числа Кн.

На фиг. 4 для сравнения представлены также данные, полученные при решении



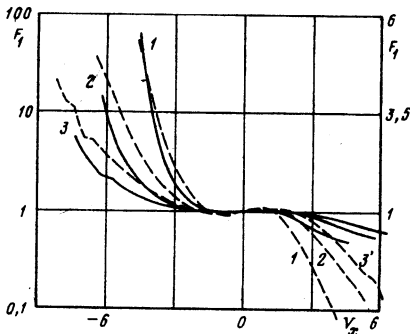
Фиг. 1



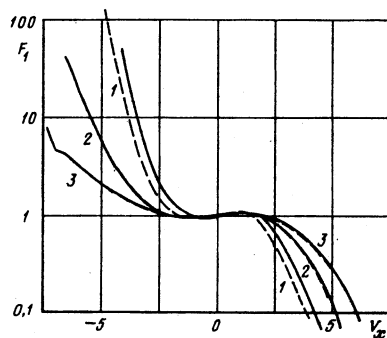
Фиг. 2

Фиг. 1. Полученные статистическим методом мажорантной частоты профили числовой плотности  $n$  и температуры газа  $T$  в условиях плоской теплопередачи при  $Kn = 0,02$ . Модель молекул – твердые сферы:  $n$  – сплошная кривая,  $T$  – штрихпунктирная; модель псевдомаксвелловских молекул:  $n$  – штриховая кривая,  $T$  – пунктирная

Фиг. 2. Рассчитанные тем же статистическим методом профили безразмерных плотности, температуры и скорости газа в течении Куэтта при  $Kn = 0,02$ . Для профилей плотности и температуры обозначения те же, что и на фиг. 1, кривые для скорости соответствуют расчетам с моделями молекул – твердых сфер (точки 1) и псевдомаксвелловских молекул (точки 2)



Фиг. 3



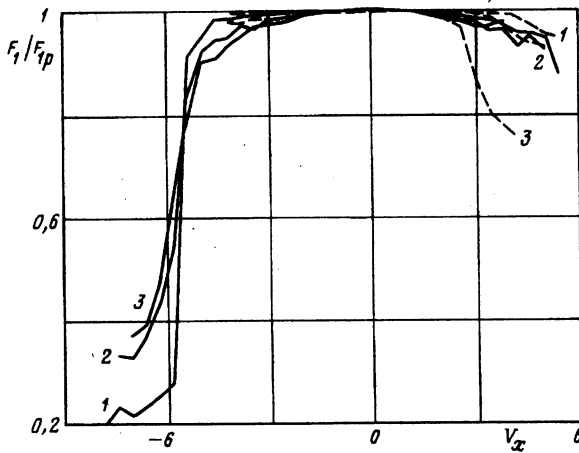
Фиг. 4

Фиг. 3. Приведенная функция распределения  $F_1(V_x)$  для плоской теплопередачи в газе молекул – твердых сфер при  $Kn = 0,02$  (сплошные кривые, правая вертикальная ось) и  $0,06$  (пунктирные кривые, левая вертикальная ось) в точках  $x_1 = 0,1$  (кривая 1),  $0,5$  (2) и  $0,9$  (3)

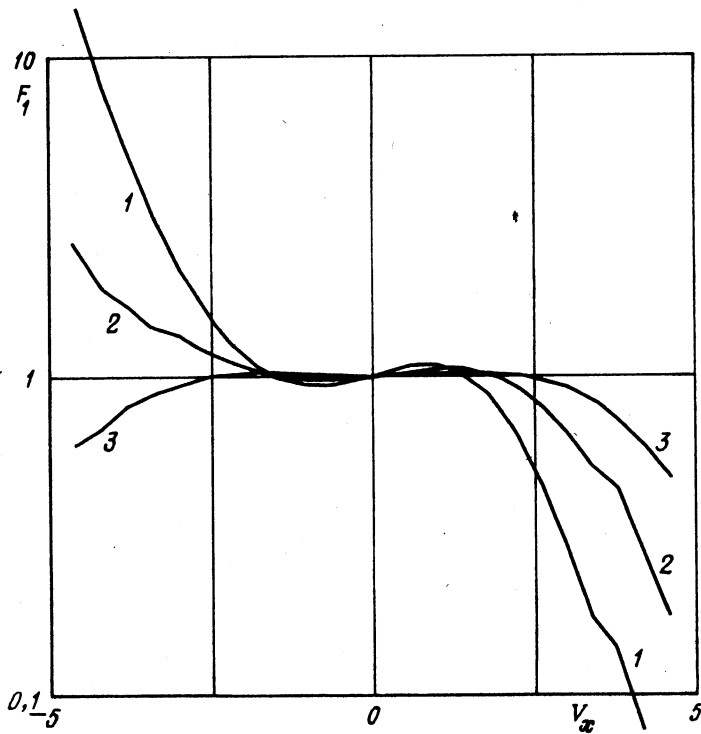
Фиг. 4. Приведенная функция распределения  $F_1(V_x)$  для плоской теплопередачи в газе псевдомаксвелловских молекул, полученная статистическим методом мажорантной частоты при  $Kn = 0,02$  (сплошные кривые) в точках  $x_1 = 0,1$  (1),  $0,5$  (2) и  $0,9$  (3). Штриховые кривые получены для тех же условий вторым используемым в расчета статистическим методом

задачи о теплопередаче с помощью второго из упомянутых двух статистических методов в условиях, соответствующих фиг. 4. Данным расчетов по методу [19, 20] соответствуют штриховые кривые. Сравнение результатов указывает на их достаточно хорошее согласие: сплошные и штриховые кривые 2 и 3 практически слились.

Рассматривавшееся выше свойство нелокальности функции распределения для



Фиг. 5. Отношение невозмущенной приведенной функции  $F_1(V_x)$  к возмущенной для плоской теплопередачи в газе псевдомаксвелловских молекул при  $Kn = 0,02$  в точках  $x_1 = 0,9$  (1), 0,5 (2) и 0,1 (3)



Фиг. 6. Приведенная функция распределения  $F_1(V_x)$  в течении Куэтта для псевдомаксвелловских молекул, полученная статистическим методом мажорантной частоты при  $Kn = 0,02$  в точках  $x_1 = 0,1$  (1), 0,3 (2) и 0,5 (3)

больших "отрицательных" (в принятой системе координат) значений компоненты скорости молекул  $V_x$  демонстрируют данные расчетов одномерной теплопередачи в газе псевдомаксвелловских молекул, показанные на фиг. 5 и полученные для  $Kn = 0,02$  при условии, что отраженные от поверхностей пластин молекулы имеют функции распределения, возмущенные относительно максвелловских распределений с помощью умножения текущего значения функции на коэффициент  $5 \chi(|V_x| - 5,6)$  в случае "горячей" стенки и  $5 \chi(V_x - 2,8)$  – в случае "холодной", но обладающие при этом прежней нормировкой. Заметим, что в приведенных выражениях скорости молекул в обоих случаях обезразмерены на одну и ту же величину  $\sqrt{2RT_1}$ .

Из данных фиг. 5 следует, что в принятых условиях возмущения функции распределения на более нагретой пластине, несмотря на малость числа  $Kn$ , проникают в газ практически на всю его толщину. В то же время возмущения функции распределения на менее нагретой пластине локализируются вблизи нее.

Из данных, представленных, на фиг. 3–5, можно заключить, что качественные выводы относительно свойств "хвостов" функций распределения в неизотермических течениях, которые были сформулированы ранее, численным решением уравнения Больцмана подтверждаются.

На фиг. 6 показаны данные расчетов приведенной функции распределения  $F_1(V_x)$  в течении Куэтта газа псевдомаксвелловских молекул при оговоренных выше условиях и числе  $Kn = 0,02$ . Рассмотрение кривых на фиг. 6 совместно с фиг. 2 и 4 позволяет сделать вывод о близости свойств неравновесных функций распределения в сходных по величине температуры и ее градиента условиях. Это вполне коррелирует с выводом [9, 10, 13] о том, что в случае неизотермических течений при малых числах  $Kn$  (простейший пример – течение Куэтта) именно неоднородное поле температуры, созданное в газе тем или иным способом, является основной причиной сильного нарушения высокоскоростных хвостов локально-максвелловских функций распределения.

В то же время результаты расчетов, приведенные на фиг. 6, показывают, что неравновесность функции распределения в случае течения Куэтта заметно слабее, чем для теплопередачи при близких значениях локального числа  $Kn$ , что можно объяснить влиянием особенностей распределений температуры газа в этих течениях.

На фиг. 7 для течения Куэтта и условий, оговоренных выше для фиг. 6, показаны результаты расчета приведенных функций распределения  $F_1(V_x)$  и  $F_1(V_y)$ .

Очевидно, что для задачи о теплопередаче вид функций  $F_1(V_x)$  и  $F_1(V_y)$  должен быть одинаково "симметричным". В случае течения Куэтта в дополнение к аналогичной по виду симметричной приведенной функции распределения  $F_1(V_x)$ , которой на фиг. 7 соответствуют штриховые кривые, решение статистическим методом мажорантной частоты привело к получению "несимметричного" приведенного распределения  $F_1(V_y)$ , показанного на фиг. 7 сплошными кривыми. О происхождении таких решений можно судить из следующего анализа БГК-модели.

Исходное уравнение этой модели для течения Куэтта можно записать в виде

$$C_x \frac{\partial f}{\partial x} - C_x \frac{\partial f}{\partial C_y} \frac{dU}{dx} = An(f_0 - f)$$

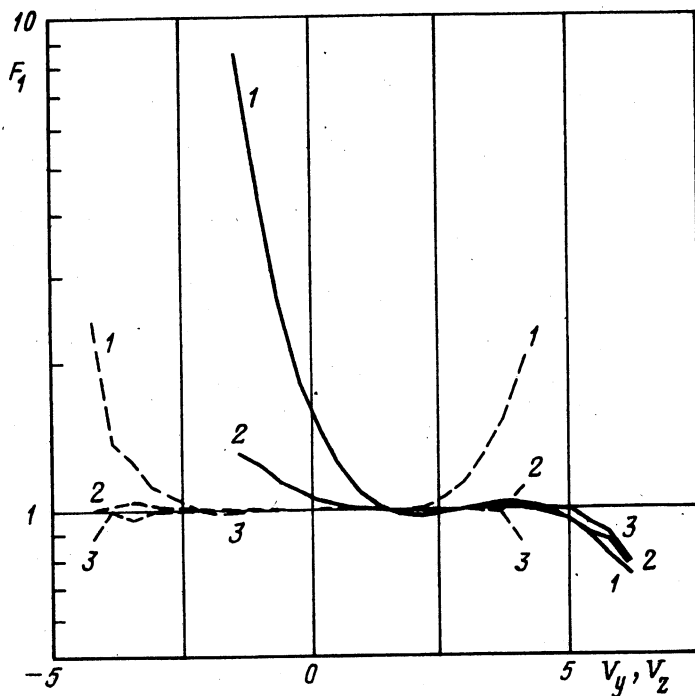
откуда для усредненных функций  $f_1(C_i)$  находим уравнения

$$C_x \frac{\partial f_1(C_x)}{\partial x} = An[f_{01}(C_x) - f_1(C_x)]$$

$$\frac{\partial \Phi_1(C_x)}{\partial x} = An[f_{01}(C_x) - f_1(C_x)], \quad \Phi_1(C_x) \equiv \int C_x f dC_y dC_z$$

$$\frac{\partial \Phi_1(C_y)}{\partial x} - \frac{dU}{dx} \frac{\partial \Phi_1(C_y)}{\partial C_y} = An[f_{01}(C_y) - f_1(C_y)]$$





Фиг. 7. Приведенные функции распределения  $F_1(V_z)$  и  $F_1(V_y)$  в течении Куэтта, полученные статистическим методом мажорантной частоты для условий, соответствующих фиг. 6. Штриховые кривые – "симметричная" функция  $F_1(V_z)$ , сплошные кривые – "несимметричная" функция  $F_1(V_y)$

Два последних уравнения незамкнуты (в отличие от первого уравнения, решаемого в [11–13]). Это не позволяет только с помощью выписанной системы равенств получить решение для приведенных функций  $F_1(V_z)$ ,  $F_1(V_y)$ . Однако, воспользовавшись решением Чепмена – Энскога для полной функции распределения, можно показать, что в условиях малости чепмен-энскоговских поправок к функции распределения при достаточно больших скоростях молекул справедливы оценки

$$F_1(V_z) = 1 + O(\text{Kn}^2 V_z^4 (\nabla_1 \ln T)^2)$$

$$F_1(V_y) = 1 + O(\text{Kn}^2 V_y^4 (\nabla_1 \ln T)^2 + \text{Kn}^2 V_y^3 (\nabla_1 \ln T)(\nabla_1 S))$$

где  $S = U/C_{T1}$  – безразмерная макроскопическая скорость газа. Выписанные выражения служат качественным объяснением причин появления при рассмотрении течения Куэтта симметричных и несимметричных решений для усредненных приведенных функций распределения и только симметричных решений – в задаче о теплопередаче.

**Заключение.** Численные решения уравнения Больцмана, проведенные известными статистическими методами, подтвердили представления о свойствах высокоскоростных "хвостов" функций распределения в пространственно неоднородных течениях при малых числах  $\text{Kn}$ , сформированные с помощью асимптотического анализа как этого уравнения, так и модельного уравнения БГК, а также аналитического и численного решений последнего. Это обстоятельство позволяет предположить, что до момента создания эффективных методов решения уравнения Больцмана при больших скоро-

стях молекул в случае неоднородных течений модельное уравнение может быть использовано в оценочных вычислениях вклада неравновесных "хвостов" функций распределения в кинетику высокопороговых химических реакций и процессов релаксации, происходящих в газовых потоках.

Следует, однако, отметить один существенный факт. Как было сказано в разд. 2, решение для функций распределения, обладающее приемлемой точностью, оказалось возможным (при максимальных, но разумных затратах ресурсов ЭВМ) получить в диапазоне скоростей, ограниченном лишь четырьмя тепловыми скоростями молекул. Такой результат (и это неудивительно) дали оба использованных в работе статистических метода. Нетрудно понять, что в такой ситуации желание увеличить диапазон решения до, например, пяти тепловых скоростей молекул приводит к увеличению потребных вычислительных ресурсов минимум в  $e^9$  раз. Такое увеличение не может быть реализовано путем более искусного программирования или с помощью дополнительных затрат ресурсов однотипных компьютеров, а требует кардинального прорыва в компьютерных технологиях. В связи со сказанным можно предложить использовать рассмотренные здесь задачи в качестве тестов, характеризующих качество не столько программирования, сколько используемого класса компьютеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 96-01-00573) и Государственной программы для ведущих научных школ (грант 96-15-9603).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Макашев Н.К.* Неравновесные явления в газодинамике и сильно возбужденные молекулы // Учен. зап. ЦАГИ. 1984. Т. 15. № 2. С. 30–42.
2. *Макашев Н.К.* О влиянии движения газа на кинетику реакций колебательно-возбужденных молекул // Изв. АН СССР. МЖГ. 1984. № 6. С. 100–105.
3. *Макашев Н.К., Провоторов В.П.* Неравновесная диссоциация двухатомных молекул в пограничном слое // Изв. АН СССР. МЖГ. 1985. № 1. С. 161–170.
4. *Makashev N.K.* The kinetic theory of high threshold reactions and dissociation in gas flow // Proc. 19th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics / Ed. J. Harvey, G. Lord. Oxford: Univ. Press, 1995. V. 1. P. 3–12.
5. *Носик В.И.* Неравновесная термическая диссоциация двухатомных молекул с учетом VV-, VT- и VT'-обменов // Изв. РАН. МЖГ. 1994. № 1. С. 171–179.
6. *Бузыкин О.Г., Носик В.И.* К моделированию колебательно-диссоционного взаимодействия // Изв. РАН. МЖГ. 1996. № 6. С. 145–154.
7. *Бузыкин О.Г., Носик В.И.* О влиянии неравновесности колебаний на диссоциацию и течение в пограничном слое // Изв. РАН. МЖГ. 1999. № 2. С. 147–158.
8. *Макашев Н.К.* О методах вывода уравнений газовой динамики в случае высокопороговых реакций // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1986. Т. 26. № 10. С. 1512–1526.
9. *Макашев Н.К.* О поведении решения уравнения Больцмана в области высокоскоростного "хвоста" функции распределения // Динамика разреженного газа. Новосибирск: Ин-т теплофизики СО АН СССР, 1980. Ч. 1. С. 80–85.
10. *Макашев Н.К.* Свойства решения уравнения Больцмана при высоких энергиях поступательного движения молекул и их следствия // Докл. АН СССР. 1981. Т. 258. № 1. С. 52–56.
11. *Абрамов А.А., Макашев Н.К.* Химические реакции, теплопередача и быстрые частицы // Инж.-физ. журн. 1982. Т. 43. № 1. С. 37–43.
12. *Абрамов А.А., Макашев Н.К.* Нарушение равновесной кинетики высокопороговых реакций в течениях с переменной по пространству температурой газа // Докл. АН СССР. 1982. Т. 263. № 5. С. 1083–1087.
13. *Вермель А.В., Макашев Н.К.* Особенности неравновесных высокоскоростных "хвостов" функции распределения молекул в плоском течении Куэтта сжимаемого газа // Изв. РАН. МЖГ. 1998. № 4. С. 183–190.

14. *Bird G.A.* Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. P. 458.
15. *Иванов М.С., Рогазинский С.В.* Сравнительный анализ алгоритмов метода прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28. № 7. С. 1058–1070.
16. *Ivanov M.S., Rogasinsky S.V.* Analysis of numerical techniques of the direct simulation Monte-Carlo method in rarefied gas dynamics // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1988. V. 2. № 6. P. 453–465.
17. *Иванов М.С., Рогазинский С.В.* Экономичные схемы прямого статистического моделирования течений разреженного газа // Мат. моделирование. 1989. Т. 1. № 7. С. 130–145.
18. *Климонтович Ю.Л.* Диссипативные уравнения для многочастичных функций распределения // Успехи физ. наук. 1983. Т. 139. Вып. 4. С. 689–700.
19. *Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е.* Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. I // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1975. Т. 15. № 5. С. 1195–1208.
20. *Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е.* Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. II // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1975. Т. 15. № 6. С. 1553–1567.
21. *Gimelshein S.F., Ivanov M.S., Rogasinsky S.V.* Investigation of shock wave structure by majorant cell and free cell schemes of DSMC // Proc. 17th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. Aachen, 1991. P. 718–726.
22. *Bird G.A.* Monte-Carlo simulation in an engineering context // Proc. 12th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N.Y.: AIAA, 1981. Pt I. P. 239–255.

Москва

Поступила в редакцию  
20.XI.1997