

УДК: 519.876.5

Расчет структуры ударной волны в газовой смеси на основе уравнения Больцмана с контролем точности

С. С. Ситников^{1,2,a}, Ф. Г. Черемисин³

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Россия, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
Россия, 123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

³Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук,
Россия, 119333, г. Москва, ул. Вавилова, д. 44

E-mail: ^a mailtosergeysitnikov@yandex.ru

Получено 29.02.2024, после доработки — 23.08.2024.

Принято к публикации 30.08.2024.

В работе проведено исследование структуры ударной волны в бинарной газовой смеси на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана. Для вычисления интеграла столкновений в кинетическом уравнении используется консервативный проекционный метод. Детально описаны применяемые расчетные формулы и методика вычислений. В качестве потенциала взаимодействия молекул используется модель твердых сфер. Численное моделирование проводится с использованием разработанной программно-моделирующей среды, которая позволяет исследовать стационарные и нестационарные течения газовых смесей в различных режимах и для произвольной геометрии задачи. Моделирование выполняется на системе кластерной архитектуры. За счет использования технологий распараллеливания кода достигается значительное ускорение вычислений. С фиксированной точностью, контролируемой параметрами моделирования, получены распределения макроскопических величин компонентов смеси по фронту ударной волны. Расчеты выполнены для различных соотношений молекулярных масс и чисел Маха. Достигнута общая точность моделирования не менее 1 % по локальным значениям концентрации и температуры и 3 % по ширине фронта ударной волны. Проведено сравнение полученных результатов с существующими расчетными данными. Представленные в данной работе результаты имеют теоретическое значение, а также могут служить в качестве тестового расчета, поскольку они получены с использованием точного уравнения Больцмана.

Ключевые слова: динамика разреженных газов, бинарные газовые смеси, кинетическое уравнение Больцмана, проекционный метод, численное моделирование, структура ударной волны

Результаты работы получены с использованием вычислительных ресурсов ОВК НИЦ «Курчатовский институт» (<http://computing.nrcki.ru/>).

UDC: 519.876.5

Computation of a shock wave structure in a gas mixture based on the Boltzmann equation with accuracy control

S. S. Sitnikov^{1,2,a}, F. G. Tcheremissine³

¹Moscow Institute of Physics and Technology,
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia

²National Research Center “Kurchatov Institute”,

1 Akademika Kurchatova pl., Moscow, 123182, Russia

³Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44 Vavilov st., 119333 Moscow, Russia

E-mail: ^a mailtosergeysitnikov@yandex.ru

Received 29.02.2024, after completion — 23.08.2024.

Accepted for publication 30.08.2024.

In this paper, the structure of a shock wave in a binary gas mixture is studied on the basis of direct solution of the Boltzmann kinetic equation. The conservative projection method is used to evaluate the collision integral in the kinetic equation. The applied evaluation formulas and numerical methods are described in detail. The model of hard spheres is used as an interaction potential of molecules. Numerical simulation is performed using the developed simulation environment software, which makes it possible to study both steady and non-steady flows of gas mixtures in various flow regimes and for an arbitrary geometry of the problem. Modeling is performed on a cluster architecture. Due to the use of code parallelization technologies, a significant acceleration of computations is achieved. With a fixed accuracy controlled by the simulation parameters, the distributions of macroscopic characteristics of the mixture components through the shock wave front were obtained. Computations were conducted for various ratios of molecular masses and Mach numbers. The total accuracy of at least 1 % for the local values of molecular density and temperature and 3 % for the shock front width was achieved. The obtained results were compared with existing computation data. The results presented in this paper are of theoretical significance, and can serve as a test computation, since they are obtained using the exact Boltzmann equation.

Keywords: rarefied gas dynamics, binary gas mixtures, Boltzmann kinetic equation, projection method, numerical simulation, shock wave structure

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 5, pp. 1107–1123 (Russian).

The results of the work were obtained using computational resources of MCC NRC “Kurchatov Institute” (<http://computing.nrcki.ru/>).

Введение

Исследование ударных волн в разреженных газах имеет большое значение для аэродинамики [Wu et al., 2013], разработки спутников и космических аппаратов [Cao, White, Kontis, 2021], микропоточных устройств [Gospodinov, Roussinov, Dankov, 2014] и других областей науки и техники [Sharipov, Dias, 2017; Kloss et al., 2011]. Кроме того, получение структуры ударной волны является одной из ключевых классических задач кинетической теории [Dodulad, Tcheremissine, 2013; Raines, 2002]. В данной работе предлагается подход к численному моделированию ударных волн в разреженных газовых смесях.

По степени разрежения газа обычно выделяют свободномолекулярный, переходный и гидродинамический режимы течения. В гидродинамическом режиме для моделирования ударных волн можно использовать уравнения Навье–Стокса (Н.–С.). Однако по мере увеличения длины свободного пробега молекул, уравнения Н.–С. становятся не применимы в переходном и свободномолекулярном режимах. В этих режимах течение газа часто исследуют с помощью модельных кинетических уравнений [Ху, 2021] или метода прямого моделирования Монте-Карло (DSMC) [Bird, 2013]. Однако оба вышеуказанных подхода имеют известные ограничения по применимости и точности моделирования [Sharipov, Seleznev, 1998].

В нашей работе моделирование осуществляется на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана, которое описывает течение газа во всех режимах течения и подходит для исследования процессов, происходящих в ударной волне в газе на масштабах порядка длины свободного пробега молекул. Однако численное решение уравнения Больцмана представляет собой сложную задачу из-за многомерного нелинейного интеграла столкновений в его правой части. Для вычисления интегралов столкновений мы используем консервативный проекционный метод (СРМ), предложенный в [Черемисин, 1997; Черемисин, 2000]. СРМ консервативен по энергии, импульсу и массе и обеспечивает точное равенство интеграла столкновений от максвелловской функции распределения нулю [Черемисин, 2000]. Вычислительная сложность проекционного метода вполне приемлема для численного моделирования.

В данной работе проводится исследование структуры плоской ударной волны в бинарной газовой смеси. Моделирование выполняется для различных соотношений молекулярных масс компонентов смеси и чисел Маха с использованием разработанной программно-моделирующей среды. Расчеты проводятся на системе кластерной архитектуры. За счет использования технологий распараллеливания кода достигается значительное ускорение вычислений. Отдельное внимание уделено контролю величины погрешности, а также валидации полученных результатов.

Теоретические основы

Рассмотрим N -компонентную газовую смесь. Введем функции распределения компонентов смеси: $f_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$, $i = \overline{1, N}$. Макроскопические величины, описывающие состояние каждого компонента, выражаются через функции распределения следующим образом:

концентрация —

$$n_i(t, \mathbf{r}) = \int_{R^3} f_i d^3 p, \quad (1)$$

средняя скорость —

$$\mathbf{u}_i(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{n_i m_i} \int_{R^3} \mathbf{p}_i f_i d^3 p, \quad (2)$$

температура —

$$T_i(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{3k_B n_i m_i} \int_{R^3} (\mathbf{p}_i - m_i \mathbf{u}_i)^2 f_i d^3 p. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{p}_i и m_i — импульс и масса молекул i -го компонента смеси соответственно, а k_B — постоянная Больцмана. Концентрация, средняя скорость и температура смеси выражаются через соответствующие макроскопические величины компонентов следующим образом:

$$n = \sum_{i=1}^N n_i, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^N n_i \mathbf{u}_i, \quad T = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^N n_i T_i. \quad (4)$$

Эволюция функций распределения во времени описывается кинетическим уравнением Больцмана [Коган, 1967], которое для случая N -компонентной газовой смеси можно записать в виде следующей системы:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} = \sum_j I_{ij}, \quad i, j = \overline{1, N}. \quad (5)$$

Здесь $I_{ij} = I_{ij}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_i)$ — интегралы столкновений для взаимодействия i -го и j -го компонента,

$$I_{ij}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_i) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{b_{\max}} b db \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_j (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij}. \quad (6)$$

В выражении для интегралов столкновений (6) $f_i = f_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_i)$, $f_j = f_j(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_j)$, $f'_i = f'_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}'_i)$, $f'_j = f'_j(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}'_j)$, \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_j — начальные импульсы двух сталкивающихся молекул, $g = \left| \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} - \frac{\mathbf{p}_j}{m_j} \right|$ — их относительная скорость, b — прицельный параметр, b_{\max} — радиус действия потенциала взаимодействия, φ — азимутальный угол, \mathbf{p}'_i и \mathbf{p}'_j — импульсы молекул после столкновения, определяемые по начальным импульсам \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_j и параметрам столкновения b , φ с использованием заданного потенциала молекулярного взаимодействия $U(\mathbf{r})$.

В данной работе в качестве потенциала взаимодействия молекул используется модель твердых сфер:

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} \infty, & r < d_{ij}, \\ 0, & r \geq d_{ij}. \end{cases} \quad (7)$$

Здесь $d_{ij} = \frac{d_i + d_j}{2}$, d_i и d_j — диаметры молекул i -го и j -го компонента соответственно [Hirschfelder, Curtiss, Bird, 1954]. Угол разлета молекул для выбранного потенциала взаимодействия зависит только от прицельного параметра:

$$\theta(b) = 2 \arccos \left(\frac{b}{d_{ij}} \right). \quad (8)$$

Для удобства используются безразмерные переменные. Пронумеруем компоненты газовой смеси в порядке убывания молекулярных масс. Положим характеристические параметры m_0 , d_0 равными соответствующим параметрам первого компонента газовой смеси, $n_0 = \sum_i n_i$, $i = \overline{1, N}$, и T_0 — равным начальной температуре смеси (до ударной волны). Определим характеристическую скорость, время и длину свободного пробега молекул:

$$v_0 = \sqrt{\frac{T_0}{m_0}}, \quad \tau = \frac{\lambda}{v_0}, \quad \lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n_0 d_0^2}. \quad (9)$$

Выполним переход к безразмерным переменным по следующей схеме:

$$f \rightarrow \frac{f}{n_0(m_0v_0)^{-3}}, \quad t \rightarrow \frac{t}{\tau}, \quad \mathbf{p} \rightarrow \frac{\mathbf{p}}{m_0v_0}, \quad m \rightarrow \frac{m}{m_0}, \quad \mathbf{r} \rightarrow \frac{\mathbf{r}}{\lambda}, \quad b \rightarrow \frac{b}{d_0}, \quad d \rightarrow \frac{d}{d_0}, \quad g \rightarrow \frac{g}{v_0}.$$

В безразмерных переменных система (5) примет вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_j I_{ij}, \quad i, j = \overline{1, N}, \quad (10)$$

где интеграл столкновений имеет вид

$$I_{ij} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{d_{ij}} b db \int_{R^3} d^3 p_j (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij}. \quad (11)$$

В дальнейшем мы будем использовать систему уравнений Больцмана, записанную в форме (10), для моделирования течения бинарной газовой смеси.

Переход от математической модели к численному моделированию

Для численного решения системы (10) воспользуемся методом расщепления по физическим процессам [Aristov, Cheremisin, 1980]. Суть метода заключается в том, что на каждой итерации по времени вначале решаются уравнения адвекции

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad i = \overline{1, N}, \quad (12)$$

а затем полученные промежуточные значения подставляются в качестве начальных условий для уравнений релаксации

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_j I_{ij}, \quad i, j = \overline{1, N}. \quad (13)$$

Уравнения (13) решаются методом расщепления на последовательность уравнений

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_{ii}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j \neq i} I_{ij}, \quad i, j = \overline{1, N}. \quad (15)$$

Здесь уравнения (14) описывают внутрикомпонентные столкновения молекул, а уравнения (15) — межкомпонентные столкновения. Уравнения (15) расщепляются на последовательность уравнений

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_{ij}, \quad i, j = \overline{1, N}, \quad j \neq i. \quad (16)$$

Таким образом, мы свели решение системы уравнений (10) к последовательному решению систем уравнений (12), (14) и (16) на каждой итерации по времени.

Решение уравнений релаксации с использованием консервативного проекционного метода

Ключевую проблему представляет решение уравнений релаксации (14) и (16). В данной работе для этой цели используется консервативный проекционный метод [Черемисин, 1997; Черемисин, 2000]. Этот метод консервативен по энергии, импульсу и массе и обеспечивает точное равенство интеграла столкновений от максвелловской функции распределения нулю.

Поскольку консервативный проекционный метод имеет ключевое значение в данной работе, проясним его суть. Значение интеграла столкновений в точке $\mathbf{p}_{i\gamma}$ может быть записано с помощью дельта-функции

$$I_{ij}(\mathbf{p}_{i\gamma}) = \int_{R^3} I_{ij}(\mathbf{p}_i) \delta(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_{i\gamma}) d^3 p_i = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{d_{ij}} b db \int_{R^3} d^3 p_j \int_{R^3} d^3 p_i (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} \delta(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_{i\gamma}). \quad (17)$$

Выполнив замену переменных $\mathbf{p}_i \leftrightarrow \mathbf{p}'_i$, $\mathbf{p}_j \leftrightarrow \mathbf{p}'_j$ и приняв во внимание равенства $g'_{ij} = g_{ij}$, $d^3 p'_i d^3 p'_j = d^3 p_i d^3 p_j$, получим

$$I_{ij}(\mathbf{p}_{i\gamma}) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{d_{ij}} b db \int_{R^3} d^3 p_j \int_{R^3} d^3 p_i \{ (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} (\delta(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_{i\gamma}) - \delta(\mathbf{p}'_i - \mathbf{p}_{i\gamma})) \}. \quad (18)$$

Для i -го компонента газовой смеси построим равномерную сетку в импульсном пространстве, заключенную в сферу Ω_i достаточно большого радиуса, чтобы значения функций распределения вне этой сферы можно было считать пренебрежимо малыми. Пусть V_{0i} , N_{0i} — соответственно объем сферы и количество импульсных узлов $S_i = \{\mathbf{p}_\gamma\}$ в ней. Здесь $V_{0i} = N_{0i} \Delta V$, где $\Delta V = (\Delta p)^3$ — объем на узел импульсной сетки, Δp — шаг импульсной сетки, одинаковый для всех компонентов смеси.

В качестве начальных импульсов \mathbf{p}_i , \mathbf{p}_j берутся всевозможные пары узлов сетки \mathbf{p}_{α_ν} , \mathbf{p}_{β_ν} соответственно. Поскольку импульсы после столкновения не попадают в узлы сетки, они разлагаются с одинаковым весовым коэффициентом r_ν по двум узлам сетки, выбранным из восьми ближайших к нему узлов:

$$\mathbf{p}'_i = (1 - r_\nu) \mathbf{p}_{\lambda_\nu} + r_\nu \mathbf{p}_{\lambda_\nu + s_\nu}, \quad \mathbf{p}'_j = (1 - r_\nu) \mathbf{p}_{\mu_\nu} + r_\nu \mathbf{p}_{\mu_\nu - s_\nu}. \quad (19)$$

Здесь s_ν — трехмерный вектор смещения к соседнему узлу сетки, компоненты которого могут принимать значения, равные $0, \pm 1$. Коэффициент r_ν выбирается так, чтобы выполнялось условие сохранения энергии

$$\frac{\mathbf{p}'_i{}^2}{2m_i} + \frac{\mathbf{p}'_j{}^2}{2m_j} = (1 - r_\nu) \left(\frac{\mathbf{p}_{\lambda_\nu}^2}{2m_i} + \frac{\mathbf{p}_{\mu_\nu}^2}{2m_j} \right) + r_\nu \left(\frac{\mathbf{p}_{\lambda_\nu + s_\nu}^2}{2m_i} + \frac{\mathbf{p}_{\mu_\nu - s_\nu}^2}{2m_j} \right). \quad (20)$$

Для произведения функций распределения после столкновения мы используем степенную интерполяцию

$$f'_i f'_j \equiv f_i(\mathbf{p}'_i) f_j(\mathbf{p}'_j) = (f_i(\mathbf{p}_{\lambda_\nu}) f_j(\mathbf{p}_{\mu_\nu}))^{1-r_\nu} (f_i(\mathbf{p}_{\lambda_\nu + s_\nu}) f_j(\mathbf{p}_{\mu_\nu - s_\nu}))^{r_\nu}. \quad (21)$$

Для вычисления (18) перейдем от интегрирования по b к интегрированию по $\sigma = \frac{b^2}{\left(\frac{d_i+d_j}{2}\right)^2}$ и применим равномерную 8-мерную кубатурную сетку Коробова [Коробов, 1989] из N_v узлов $\mathbf{p}_{\alpha_v}, \mathbf{p}_{\beta_v}, \varphi, \sigma$ в области $\Omega_i \times \Omega_j \times [0, 2\pi) \times [0, 1)$. На каждом шаге по времени используется новая сетка Коробова, полученная периодическим сдвигом на случайный вектор. Вектор случайного сдвига не меняет область интегрирования.

В итоге получим следующие формулы для интеграла столкновений, в которых используются только узлы сетки Коробова:

$$I_{ij}(\mathbf{p}_{i_v}) = B_{ij} \sum_{v=1}^{N_v} \left[-\delta_{i_v, \alpha_v} + (1 - r_v)\delta_{i_v, \lambda_v} + r_v\delta_{i_v, \lambda_v + s_v} \right] \Delta_v^{ij}, \quad (22)$$

где $\delta_{\alpha, \beta}$ – символ Кронекера,

$$B_{ij} = \frac{\pi \left(\frac{d_i+d_j}{2}\right)^2 N_{0i} V_{0j}}{2N_v}$$

и

$$\Delta_v^{ij} = \left\{ f_i(\mathbf{p}_{\alpha_v}) f_j(\mathbf{p}_{\beta_v}) - (f_i(\mathbf{p}_{\lambda_v}) f_j(\mathbf{p}_{\mu_v}))^{1-r_v} (f_i(\mathbf{p}_{\lambda_v+s_v}) f_j(\mathbf{p}_{\mu_v-s_v}))^{r_v} \right\} \left| \frac{\mathbf{p}_{\alpha_v}}{m_i} - \frac{\mathbf{p}_{\beta_v}}{m_j} \right|. \quad (23)$$

Аналогично получается значение интеграла I_{ji} в некоторой точке \mathbf{p}_{j_v} .

Для случая внутрикомпонентных столкновений молекул, когда $i = j$, $I_{ij} = I_{ji}$ и формула для вычисления интеграла столкновений несколько изменяется, с учетом симметрии интеграла столкновений,

$$I_{ii}(\mathbf{p}_\gamma) = B_{ii} \sum_{v=1}^{N_v} \{ -(\delta_{\gamma, \alpha_v} + \delta_{\gamma, \beta_v}) + (1 - r_v)(\delta_{\gamma, \lambda_v} + \delta_{\gamma, \mu_v}) + r_v(\delta_{\gamma, \lambda_v+s_v} + \delta_{\gamma, \mu_v-s_v}) \} \Delta_v^{ii}, \quad (24)$$

где

$$B_{ii} = \frac{\pi d_i^2 N_{0i} V_{0i}}{4N_v}$$

и

$$\Delta_v^{ii} = \left\{ f_i(\mathbf{p}_{\alpha_v}) f_i(\mathbf{p}_{\beta_v}) - (f_i(\mathbf{p}_{\lambda_v}) f_i(\mathbf{p}_{\mu_v}))^{1-r_v} (f_i(\mathbf{p}_{\lambda_v+s_v}) f_i(\mathbf{p}_{\mu_v-s_v}))^{r_v} \right\} \left| \frac{\mathbf{p}_{\alpha_v}}{m_i} - \frac{\mathbf{p}_{\beta_v}}{m_i} \right|. \quad (25)$$

Если столкновения молекул (задаваемые узлами сетки Коробова) дают отрицательное значение функции распределения в любом из 6 узлов импульсной сетки в (22) или (24), то такие столкновения необходимо отбросить. Однако значительное количество отбрасываемых столкновений может привести к снижению точности моделирования. В данной работе мы осуществляем пересчет таких столкновений симметричным проекционным методом (SPM), предложенным в [Черемисин, 2006]. Указанный метод позволяет полностью исключить отрицательные значения функций распределения, но не обладает асимптотическим свойством равенства нулю интеграла столкновений от максвелловской функции.

Двухточечный проекционный метод, описанный выше, предназначен для однокомпонентных газов и газовых смесей с малым или умеренным соотношением молекулярных масс компонентов смеси [Anikin et al., 2012]. Для смесей с высоким соотношением молекулярных масс более эффективен многоточечный консервативный проекционный метод, представленный в [Anikin et al., 2014]. В нашей работе мы применяем пятиточечную схему проецирования для расчета интеграла столкновений, если отношение молекулярных масс больше 2. В данной схеме каждый

импульс после столкновения разлагается по 5 соседним специальным образом выбранным узлам. При этом обеспечивается точное выполнение законов сохранения энергии, импульса и массы.

Таким образом, в данной работе интегралы столкновений в правой части уравнений релаксации (14) находятся с использованием формул (19), (20), (24), (25), а интегралы столкновений в уравнениях (16) при отношении молекулярных масс компонентов не более 2 — с помощью формул (19), (20), (22), (23). В обоих случаях применяется пересчет по SPM столкновений, которые дают отрицательные значения функции распределения. Для нахождения интегралов столкновений в (16) при высоком отношении молекулярных масс применяется пятиточечная модификация проекционного метода. Подробное описание СРМ для смеси газов приведено в [Dodulad et al., 2016; Черемисин, 2015].

Постановка задачи

Рассмотрим плоскую ударную волну, распространяющуюся в газовой смеси. Перейдем в систему отсчета волнового фронта. Ось X сонаправлена с течением газа и перпендикулярна фронту ударной волны. Здесь и далее физические величины с индексами 1 и 2 относятся к газовой смеси перед и за ударной волной соответственно. Макроскопические величины компонентов газовой смеси до и после ударной волны связаны соотношениями Рэнкина–Гюгонио:

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

$$\frac{T_2^i}{T_1^i} = \frac{T_2}{T_1} = \frac{(2\gamma M^2 - (\gamma - 1))((\gamma - 1)M^2 + 2)}{(\gamma + 1)^2 M^2}. \quad (26)$$

Здесь $n_{1,2}^i$, $u_{1,2}^i$ и $T_{1,2}^i$ — концентрации, скорости и температуры i -го компонента соответственно, $u_{1,2}$ и $T_{1,2}$ — скорости и температуры газовой смеси, γ — показатель адиабаты, который для одноатомных газов равен $\frac{5}{3}$, M — число Маха, $u_1 = M c_1$, где

$$c_1 = \sqrt{\gamma k_B T_1 \frac{\sum_i n_1^i}{\sum_i m^i n_1^i}}$$

— скорость звука в невозмущенном (перед ударной волной) газе.

Задача одномерная. Вычисления проводятся в области $x \in (-L_1, L_2)$, где $L_1 > 0$ и $L_2 > 0$ берутся достаточно большими, чтобы функции распределения $f^i(x = -L_1)$, $f^i(x = L_2)$ можно было считать максвелловскими. На границах области счета ставятся граничные условия $f^i(x = -L_1) = f_1^i$, $f^i(x = L_2) = f_2^i$. Здесь f_1^i и f_2^i — функции распределения i -го компонента смеси до и после ударной волны соответственно. Начальные условия:

$$f^i(x) = \begin{cases} f_1^i, & -L_1 \leq x \leq 0, \\ f_2^i, & 0 < x \leq L_2. \end{cases}$$

Структура ударной волны получается как результат временной эволюции начального разрыва в точке $x = 0$.

Параметры численного моделирования

Численное моделирование проводилось с использованием ранее разработанной и представленной в работе [Sitnikov, Tcheremissine, 2021] программно-моделирующей среды, которая позволяет исследовать стационарные и нестационарные течения газовых смесей в различных режимах и для произвольной геометрии задачи. Расчеты выполнялись на системе кластерной архитектуры. Использовались технологии распараллеливания MPI и OpenMP [Quinn, 2004]. Благодаря симметрии решение уравнений адвекции осуществлялось только в $\frac{1}{4}$ импульсного пространства. При решении уравнений релаксации также учитывалась симметрия задачи: каждое столкновение, задаваемое узлами интегральной сетки Коробова, симметрично отражалось по осям Y и Z . За счет этого эффективный размер сетки Коробова был в 4 раза выше. В данной работе для повышения точности моделирования на шаге по времени τ использовался симметричный метод расщепления по физическим процессам [Strang, 1968], при котором оператор расщепления имеет вид $A_{\tau/2}R_{\tau/2}A_{\tau/2}$, где $A_{\Delta t}$ — оператор решения системы уравнений адвекции (12), а $R_{\Delta t}$ — оператор решения совокупной системы уравнений релаксации (14) и (16) на шаге Δt . Решение системы уравнений адвекции (12) осуществляется на равномерной пространственной сетке при помощи разностной TVD-схемы, имеющей второй порядок точности как по времени, так и по координате и обладающей свойством монотонности на дискретных значениях импульса.

Для достижения высокой точности вычисления проводились на высоких параметрах дискретизации. Расчеты выполнялись на двух 12-ядерных процессорах Intel Xeon E5 2680 v3, 2,50 GHz. С учетом гиперпоточности моделирование каждой задачи проводилось на 48 виртуальных ядрах. Коэффициент ускорения вычислений составил не менее 30.

Моделирование было выполнено для различных значений числа Маха и отношений молекулярных масс и концентраций компонентов смеси:

$$1) M = 3, \frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}, \frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 9;$$

$$2) M = 2, \frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}, \frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1;$$

$$3) M = 2, \frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{4}, \frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1;$$

$$4) M = 3, \frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{10}, \frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1.$$

Здесь и далее верхними индексами α и β обозначаются компоненты бинарной газовой смеси. Во всех расчетах $m^\beta = 1$, $n_1^\alpha + n_1^\beta = 1$, $d^\alpha = d^\beta = 1$, $T_1^\alpha = T_1^\beta = 1$, $m^\alpha < m^\beta$. Размер области счета был равен $L_1 = L_2 = 10$, шаг по пространству — $h_x = 0,1$, размер кубатурной сетки Коробова — $N_v = 10^6$, шаг импульсной сетки — $h_p^\beta = 0,4$, радиус импульсной сферы — $R^\beta = 15,8$. Таким образом, число узлов в импульсном пространстве составило $N_0^\beta = 3 \cdot 10^5$. Шаг по времени был равен $h_t = 3 \cdot 10^{-2} \cdot \frac{m^\beta h_x}{R^\beta}$, при этом на временном интервале (0; 0,1) шаг по времени линейно увеличивался от околонулевого до h_t , что несколько увеличило точность вычислений. Моделирование проводилось на интервале по времени (0; 20), на котором временная эволюция начального разрыва приводила к формированию устойчивой структуры ударной волны. Соответственно, счет каждой задачи требовал выполнения порядка 10^5 шагов по времени. Радиус импульсной сферы R^α варьировался в зависимости от параметров газовой смеси и ударной волны. Шаг по импульсу h_p^α выбирался таким образом, чтобы сохранить число узлов в импульсном пространстве $N_0^\alpha \approx N_0^\beta = 3 \cdot 10^5$:

$$1) R^\alpha = 15,8, h_p^\alpha = 0,4 \text{ при } M = 3, \frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}, \frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 9;$$

- 2) $R^\alpha = 15,8$, $h_p^\alpha = 0,4$ при $M = 2$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$;
- 3) $R^\alpha = 7,9$, $h_p^\alpha = 0,2$ при $M = 2$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{4}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$;
- 4) $R^\alpha = 5,925$, $h_p^\alpha = 0,15$ при $M = 3$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{10}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$.

Полученные результаты

Здесь и далее для удобства макропараметры компонентов смеси приводятся нормированными на соответствующие значения на границе области счета:

$$\begin{aligned} \tilde{n} &= \frac{n - n_1^\alpha - n_1^\beta}{n_2^\alpha + n_2^\beta - n_1^\alpha - n_1^\beta}, & \tilde{u} &= \frac{u - u_2}{u_1 - u_2}, \\ \tilde{T} &= \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}, & \tilde{T}^{\alpha,\beta} &= \frac{T^{\alpha,\beta} - T_1}{T_2 - T_1}. \end{aligned} \quad (27)$$

На рис. 1–4 представлены полученные распределения n , u , T и $T^{\alpha,\beta}$ вдоль фронта ударной волны для различных значений числа Маха, концентраций и молекулярных масс компонентов газовой смеси. При $M = 3$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 9$ наблюдается немонотонность T^β .

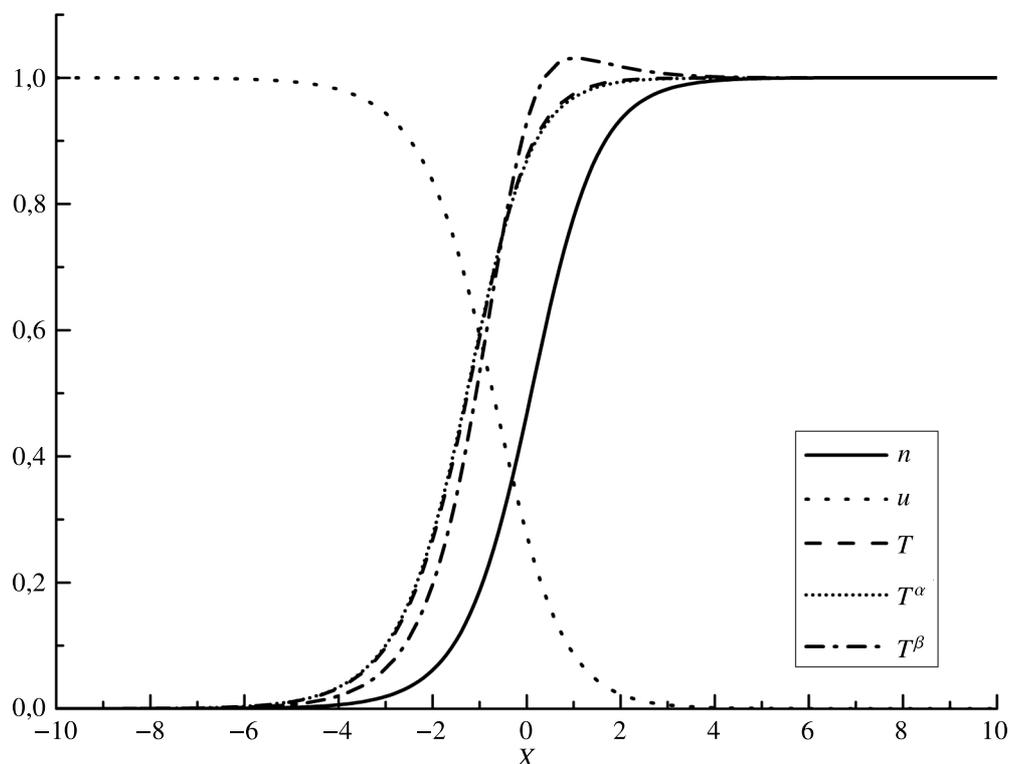


Рис. 1. Распределения нормированных значений концентрации n , средней скорости u , температуры T смеси, а также парциальных температур $T^{\alpha,\beta}$ компонентов вдоль ударного фронта при числе Маха, отношении молекулярных масс и концентраций компонентов $M = 3$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 9$. Все величины безразмерные

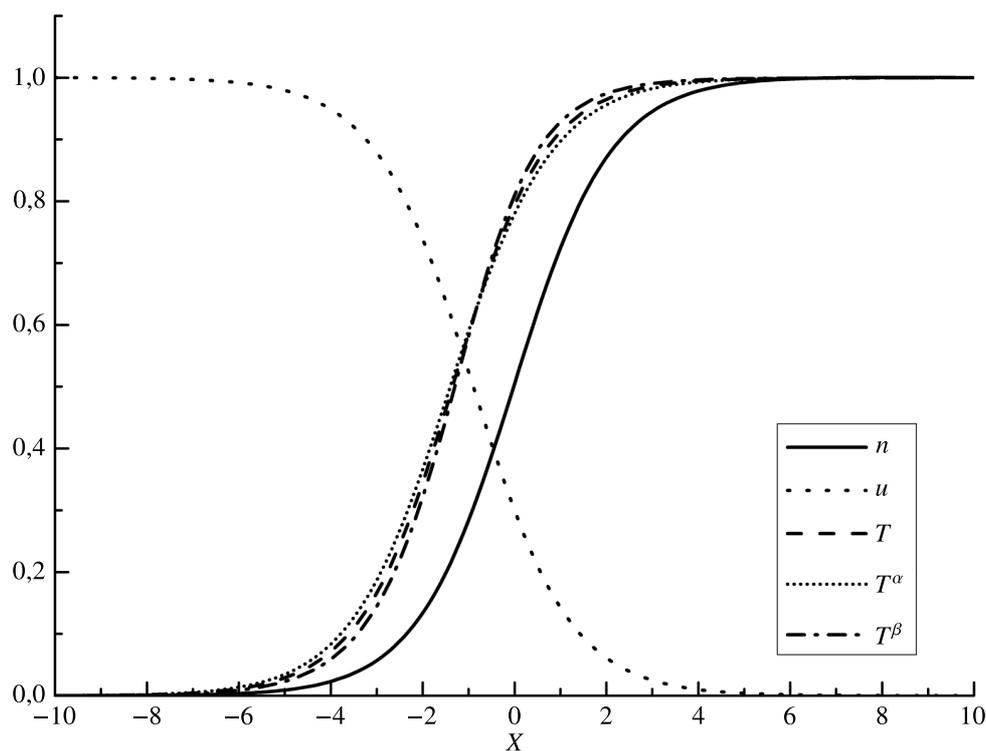


Рис. 2. Распределения нормированных значений концентрации n , средней скорости u , температуры T смеси, а также парциальных температур $T^{\alpha,\beta}$ компонентов вдоль ударного фронта при числе Маха, отношении молекулярных масс и концентраций компонентов $M = 2, \frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}, \frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$

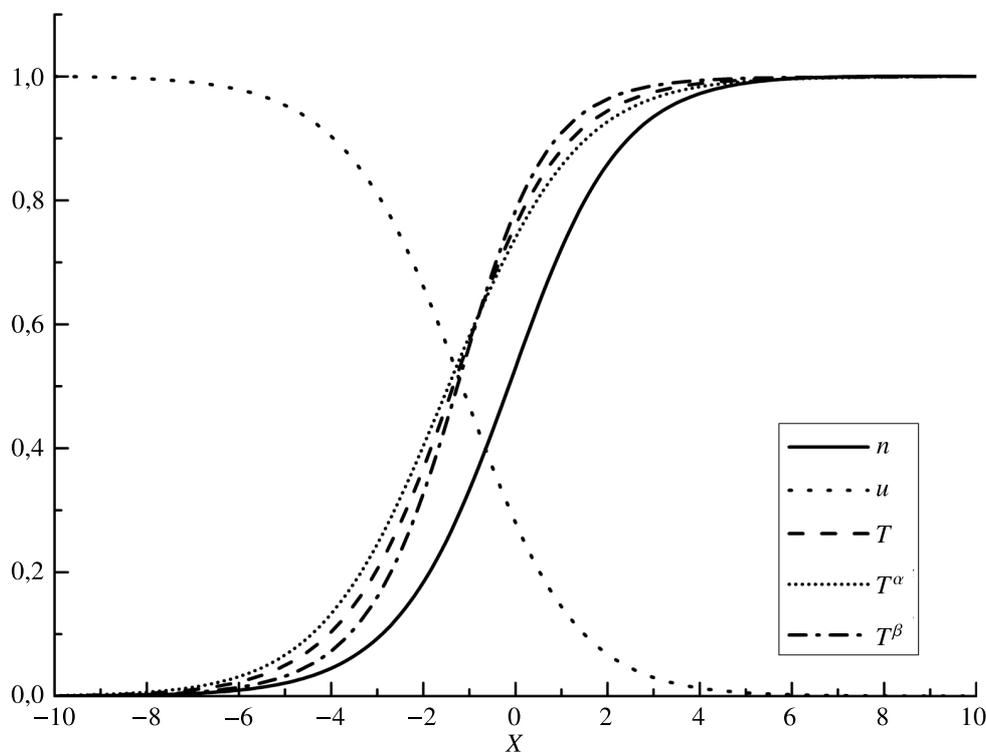


Рис. 3. Распределения нормированных значений концентрации n , средней скорости u , температуры T смеси, а также парциальных температур $T^{\alpha,\beta}$ компонентов вдоль ударного фронта при числе Маха, отношении молекулярных масс и концентраций компонентов $M = 2, \frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{4}, \frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$

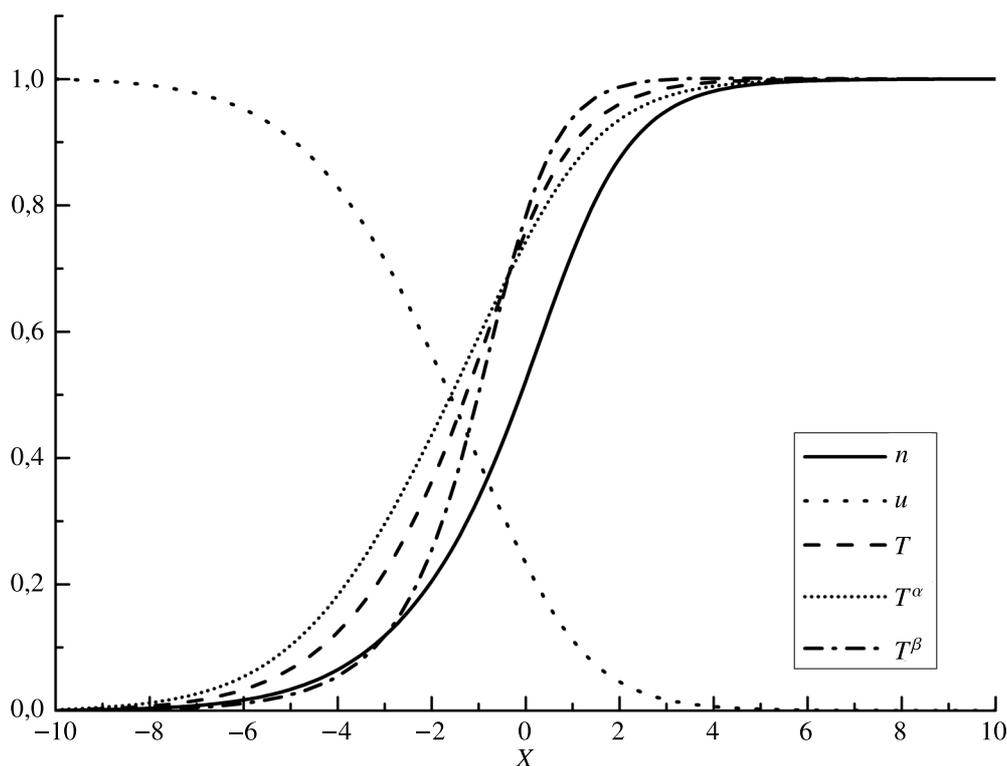


Рис. 4. Распределения нормированных значений концентрации n , средней скорости u , температуры T смеси, а также парциальных температур $T^{\alpha, \beta}$ компонентов вдоль ударного фронта при числе Маха, отношении молекулярных масс и концентраций компонентов $M = 3$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{10}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$

Точность вычислений

Наибольшее влияние на точность вычислений в используемом подходе имеют временной и пространственный шаг, шаг по импульсу и размер кубатурной сетки Коробова. Для определения величины численной погрешности была проведена серия расчетов для $M = 3$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 9$, в которой варьировались вышеперечисленные параметры моделирования, и результаты сравнивались с полученными при изначальных (неизмененных) параметрах. В качестве характеристики совпадения результатов использовались поточечное отклонение концентрации и температуры смеси, а также обратная ширина ударной волны, определяемая по максимальному наклону профиля плотности:

$$\begin{aligned} \Delta_n(x) &= |n'(x) - n(x)|, & \Delta_n &= \max_{x \in (-L_1, L_2)} \Delta_n(x), \\ \Delta_T(x) &= |T'(x) - T(x)|, & \Delta_T &= \max_{x \in (-L_1, L_2)} \Delta_T(x), \\ \Delta_\delta &= \frac{|\delta' - \delta|}{\delta}, & \delta &= \max_{x \in (-L_1, L_2)} \left(\frac{dn(x)}{dx} \right), & \delta' &= \max_{x \in (-L_1, L_2)} \left(\frac{dn'(x)}{dx} \right). \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь все величины приведены в нормированном виде (27). Штрихованными значениями обозначены величины, полученные для вариации одного из параметров, а нештрихованными — величины, полученные при изначальных параметрах счета. Обратная ширина ударной волны имеет вид

$$\delta = \frac{\lambda_1}{n_2 - n_1} \max_{x \in (-L_1, L_2)} \left(\frac{dn(x)}{dx} \right) \approx \frac{1}{n_2 - n_1} \max_{x \in (-L_1, L_2)} \left(\frac{dn(x)}{dx} \right) = \max_{x \in (-L_1, L_2)} \left(\frac{dn(x)}{dx} \right), \quad (29)$$

где λ_1 — характерная длина свободного пробега в невозмущенном (до ударной волны) газе, которая в безразмерном виде равна 1.

Соответствующие величины численной погрешности определяются как

$$\varepsilon_n = \sum_k \lim_{a_k \rightarrow 0} \Delta_n, \quad \varepsilon_T = \sum_k \lim_{a_k \rightarrow 0} \Delta_T, \quad \varepsilon_\delta = \sum_k \lim_{a_k \rightarrow 0} \Delta_\delta, \quad (30)$$

где a_k — один из $k = 4$ параметров моделирования: шаг по времени $a_1 = h_t$, квадрат пространственного шага $a_2 = h_x^2$, квадрат шага импульсной сетки $a_3 = h_p^2$ и обратный размер интегральной сетки Коробова $a_4 = N_v^{-1}$. Значение численной погрешности полученных результатов определяется следующим образом:

$$\varepsilon_{num} = \max(\varepsilon_n, \varepsilon_T). \quad (31)$$

Нами были проведены тестовые расчеты со следующими вариациями параметров: шаг по времени $h_t^{(1)} = 2h_t$, $h_t^{(2)} = 3h_t$, $h_t^{(3)} = 4h_t$ и $h_t^{(4)} = 5h_t$; шаг по пространству $h_x^{(1)} = 1,5h_x$, $h_x^{(2)} = 1,9h_x$, $h_x^{(3)} = 2,2h_x$ и $h_x^{(4)} = 2,5h_x$; шаг по импульсу $h_p^{(1)} = 1,325h_p$, $h_p^{(2)} = 1,575h_p$, $h_p^{(3)} = 1,8h_p$ и $h_p^{(4)} = 2h_p$; размер интегральной сетки Коробова $N_v^{(1)} = 0,5N_v$, $N_v^{(2)} = 0,3N_v$, $N_v^{(3)} = 0,2N_v$ и $N_v^{(4)} = 0,1N_v$. При варьировании шага по пространству значения макроскопических параметров

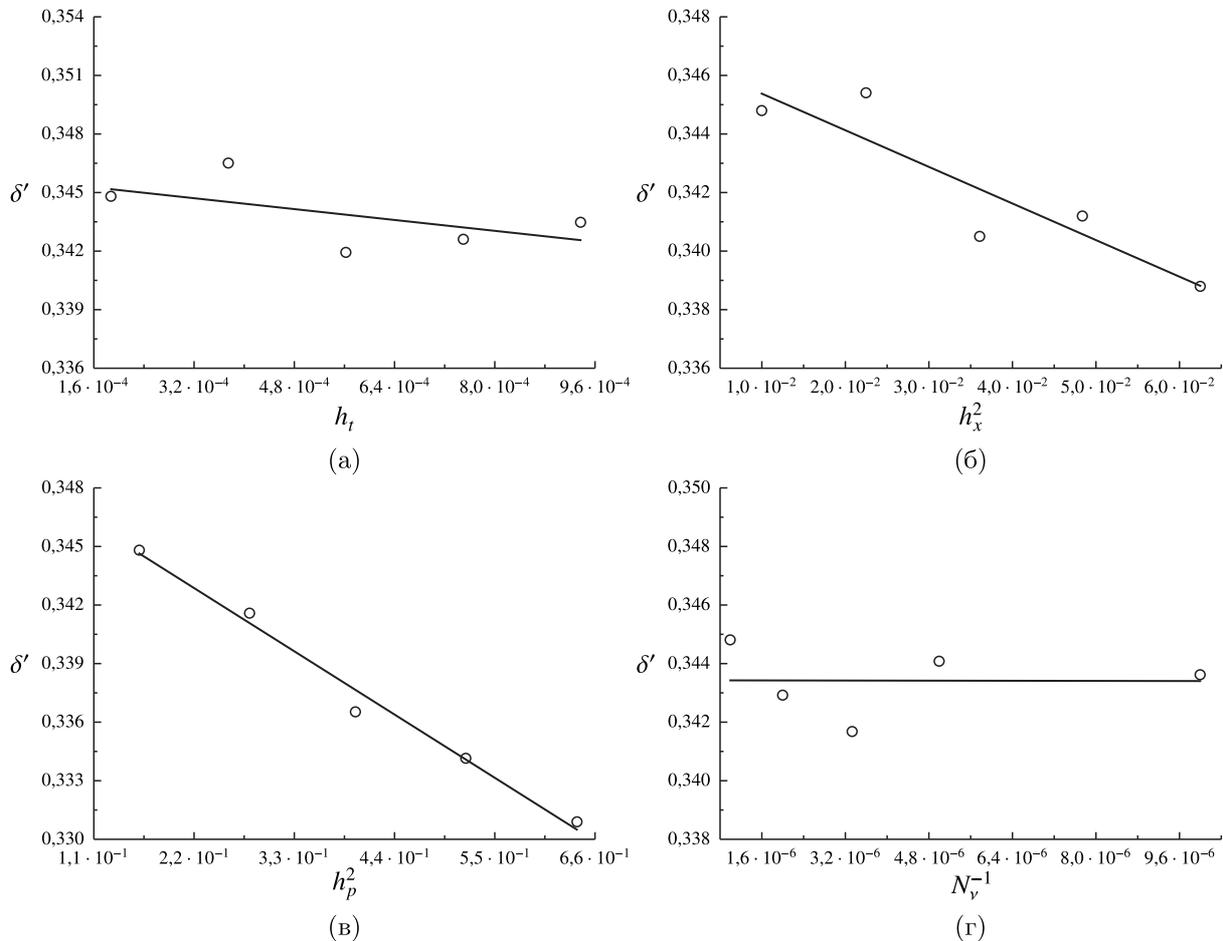


Рис. 5. Численные результаты для обратной ширины ударной волны $\delta'(a_k)$ при варьировании параметра a_k , где в качестве параметров варьирования выступают (а) шаг по времени $a_1 = h_t$, (б) квадрат пространственного шага $a_2 = h_x^2$, (в) квадрат шага по импульсу $a_3 = h_p^2$, (г) обратный размер сетки Коробова $a_4 = N_v^{-1}$. Все величины безразмерные

в недостающих пространственных точках определялись с помощью кубической сплайн-интерполяции. На рис. 5 показаны полученные результаты для $\delta'(a_k)$. Для всех a_k подсчитанные значения приемлемо аппроксимируются линейными зависимостями, что согласуется с теоретическими значениями порядка сходимости величины ошибки по параметрам моделирования.

В соответствии с определением для величины численной погрешности были получены следующие значения:

$$\begin{aligned}\varepsilon_n &= \sum_k \lim_{a_k \rightarrow 0} \widetilde{\Delta}_n(a_k) \approx 9,0 \cdot 10^{-3}, \\ \varepsilon_T &= \sum_k \lim_{a_k \rightarrow 0} \widetilde{\Delta}_T(a_k) \approx 1,1 \cdot 10^{-2}, \\ \varepsilon_\delta &= \sum_k \lim_{a_k \rightarrow 0} \frac{|\widetilde{\delta}'(a_k) - \delta|}{\delta} \approx 2,5 \cdot 10^{-2}.\end{aligned}$$

Здесь $\widetilde{\Delta}_n(a_k)$, $\widetilde{\Delta}_T(a_k)$ и $\widetilde{\delta}'(a_k)$ – линейные аппроксимации соответствующих значений, полученных в серии тестовых расчетов. В соответствии с приведенными оценками величина численной погрешности результатов моделирования составила $\varepsilon_{num} = \max(\varepsilon_n, \varepsilon_T) \approx 1\%$. Более высокое значение величины погрешности по ширине фронта ударной волны объясняется тем, что оценка осуществляется по производной от распределения концентрации.

Сравнение результатов, полученных двухточечным и пятиточечным проекционными методами

Нами было изучено влияние схемы проецирования на результаты моделирования. В качестве метрики совпадения результатов использовался модуль разности нормированных концентраций газовой смеси, полученных для $M = 2$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$ с использованием двухточечного и пятиточечного консервативных проекционных методов

$$\Delta_n(x) = |n_{2p}(x) - n_{5p}(x)|. \quad (32)$$

Максимальное значение отклонения результатов, полученных разными методами, составило $\varepsilon_{method} = \max_{x \in (-L_1, L_2)} \Delta_n(x) = 4,1 \cdot 10^{-3} < \varepsilon_{num}$. Таким образом, используемая схема проецирования не оказывает существенного влияния на результаты моделирования.

Сравнение полученных результатов с расчетными данными

На рис. 6 приведено сравнение результатов, полученных для $M = 3$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 9$ и $M = 2$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{4}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$, с расчетными данными, представленными в [Kosuge, Aoki, Takata, 2001]. Сплошной линией изображены графики нормированных концентраций, полученные в данной работе. Данные [Kosuge, Aoki, Takata, 2001] обозначены крестами.

В качестве метрики совпадения результатов использовался модуль разности нормированных концентраций, полученных в работе и представленных в [Kosuge, Aoki, Takata, 2001]:

$$\Delta_n(x) = |n(x) - n_{validation}(x)|. \quad (33)$$

Максимум отклонения концентраций составил $\varepsilon_{validation} = \max_{x \in (-L_1, L_2)} \Delta_n(x) = 3,7 \cdot 10^{-3} < \varepsilon_{num}$ для $M = 3$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 9$ и $\varepsilon_{validation} = \max_{x \in (-L_1, L_2)} \Delta_n(x) = 3,4 \cdot 10^{-3} < \varepsilon_{num}$ для $M = 2$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{4}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$, что демонстрирует хорошее согласие полученных результатов с приведенными расчетными данными.

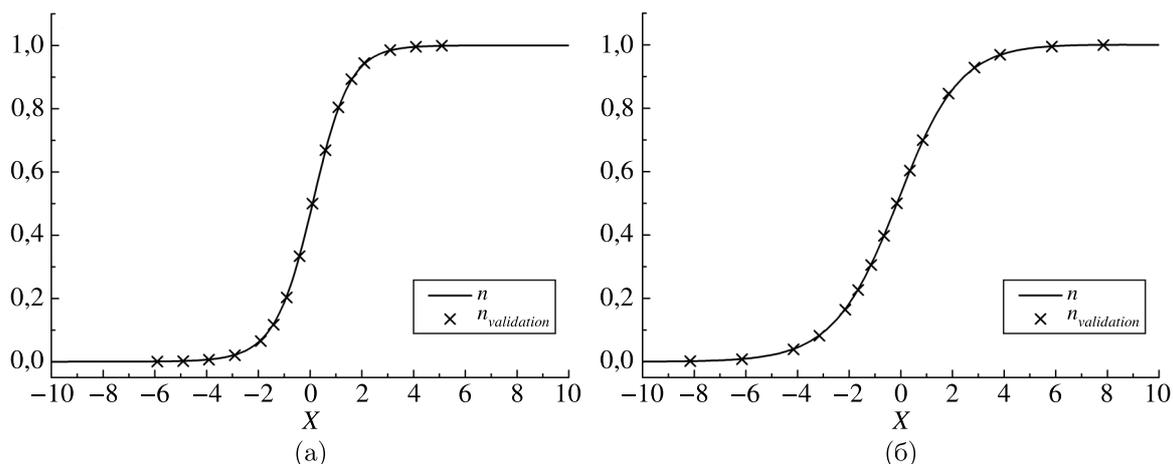


Рис. 6. Сравнение полученных в работе распределений вдоль ударного фронта нормированной концентрации смеси n с расчетными данными в [Kosuge, Aoki, Takata, 2001] $n_{validation}$ для числа Маха, отношения молекулярных масс и концентраций компонентов (а) $M = 3$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 9$, (б) $M = 2$, $\frac{m^\alpha}{m^\beta} = \frac{1}{4}$, $\frac{n_1^\alpha}{n_1^\beta} = 1$. Все величины безразмерные

Заключение

В данной работе на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана проведено исследование структуры ударной волны в бинарной газовой смеси. Детально описаны применяемые подходы и методика вычислений. Приведены счетные параметры для воспроизведения результатов. С фиксированной точностью, контролируемой параметрами моделирования, для различных соотношений молекулярных масс и чисел Маха получены распределения макроскопических величин компонентов смеси по фронту ударной волны. Численная ошибка составила не более 1 % по локальным значениям концентрации и температуры и 3 % по ширине фронта ударной волны. Представленные в работе результаты имеют теоретическое значение, а также могут служить в качестве тестового расчета, поскольку они получены с использованием точного уравнения Больцмана.

Особое внимание уделено верификации полученных результатов. Проведен тщательный анализ погрешности вычислений. Выполнено сравнение результатов расчета структуры ударного фронта с приведенными в [Kosuge, Aoki, Takata, 2001], а также результатов, полученных двухточечным и пятиточечным методами. Достигнутая точность численного моделирования и хорошее согласие всех результатов подтверждают применимость предложенного подхода для моделирования ударных волн в газовых смесях.

Список литературы (References)

- Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — Наука, 1967.
Kogan M. N. Dinamika razrezhenogo gaza [Rarefied gas dynamics]. — Nauka, 1967 (in Russian).
- Коробов Н. М. Тригонометрические суммы и их приложения. — Наука, 1989.
Korobov N. M. Trigonometricheskie summy i ikh prilozheniya [Trigonometric sums and their applications]. — Nauka, 1989 (in Russian).
- Черемисин Ф. Г. Введение в консервативный проекционный метод вычисления интеграла столкновений и метод решения уравнения Больцмана. — МФТИ, 2015.
Tcheremissine F. G. Vvedenie v konservativnyi proektsionnyi metod vychisleniya integrala stolknovenii i metod resheniya uravneniya Bol'tsmana [Introduction to the conservative projection method for calculating the collision integral and the method for solving the Boltzmann equation]. — MFTI, 2015 (in Russian).

- Черемисин Ф. Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады Академии наук. Сер. Физика. — 1997. — Т. 21. — С. 197–203.
Tcheremissine F. G. Conservative method for calculating the Boltzmann collision integral // Doklady Physics. — 1997. — Vol. 42. — P. 607–610. (Original Russian paper: *Черемисин Ф. Г.* Konservativnyi metod vychisleniya integrala stolknovenii Bol'tsmana // Doklady Akademii nauk. Ser. Fizika. — 1997. — Vol. 21. — P. 197–203.)
- Черемисин Ф. Г.* Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2006. — Т. 46, № 2. — С. 329–343.
Tcheremissine F. G. Solution to the Boltzmann kinetic equation for high-speed flows // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2006. — Vol. 46, No. 2. — P. 315–329. (Original Russian paper: *Черемисин Ф. Г.* Reshenie kineticheskogo uravneniya Bol'tsmana dlya vysokoskorostnykh techenii // Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki. — 2006. — Vol. 46, No. 2. — P. 329–343.)
- Черемисин Ф. Г.* Решение уравнения Больцмана при переходе к гидродинамическому режиму течения // Доклады Академии наук. Сер. Физика. — 2000. — Т. 373, № 4. — С. 483–486.
Tcheremissine F. G. Solving the boltzmann equation in the case of passing to the hydrodynamic flow regime // Doklady Physics. — 2000. — Vol. 45, No. 8. — P. 401–404. (Original Russian paper: *Черемисин Ф. Г.* Reshenie uravneniya Bol'tsmana pri perekhode k gidrodinamicheskomu rezhimu techeniya // Doklady Akademii nauk. Ser. Fizika. — 2000. — Vol. 373, No. 4. — P. 483–486.)
- Anikin Yu., Dodulad O. I., Kloss Yu., Martynov D. V., Shuvalov P. V., Tcheremissine F. G.* Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices // Vacuum. — 2012. — Vol. 86. — P. 1770–1777.
- Anikin Yu. A., Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Tcheremissine F. G.* Method of calculating the collision integral and solution of the Boltzmann kinetic equation for simple gases, gas mixtures and gases with rotational degrees of freedom // International Journal of Computer Mathematics. — 2014. — Vol. 92. — P. 1775–1789.
- Aristov V. V., Cheremisin F. G.* The conservative splitting method for solving Boltzmann's equation // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1980. — Vol. 20. — P. 208–225.
- Bird G. A.* The DSMC method. — Create Space Independent Publishing Platform, 2013.
- Cao Z., White C. M., Kontis K.* Numerical investigation of rarefied vortex loop formation due to shock wave diffraction with the use of rorticity // Physics of Fluids. — 2021. — Vol. 33.
- Dodulad O. I., Kloss Y. Y., Potapov A. P., Tcheremissine F. G., Shuvalov P. V.* Simulation of rarefied gas flows on the basis of the Boltzmann kinetic equation solved by applying a conservative projection method // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2016. — Vol. 56. — P. 996–1011.
- Dodulad O. I., Tcheremissine F. G.* Computation of a shock wave structure in monatomic gas with accuracy control // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2013. — Vol. 53. — P. 827–844.
- Gospodinov P., Roussinov V., Dankov D.* Thermoacoustic waves in a cylindrical Couette rarefied gas flow // AIP Conference Proceedings. — 2014. — Vol. 1629.
- Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. B.* Molecular theory of gases and liquids. — John Wiley & Sons, Inc., 1954.
- Kloss Y. Y., Ryabchenkov V. V., Tcheremissine F. G., Shuvalov P. V.* Interaction of a shock wave with a boundary layer in a micro channel // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2011. — Vol. 3.
- Kosuge S., Aoki K., Takata S.* Shock-wave structure for a binary gas mixture: finite-difference analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // European Journal of Mechanics B-fluids. — 2001. — Vol. 20. — P. 87–126.
- Quinn M. J.* Parallel programming in C with MPI and OpenMP. — McGraw-Hill Science, Engineering & Mathematics, 2004.
- Raines A.* Study of a shock wave structure in gas mixtures on the basis of the Boltzmann equation // European Journal of Mechanics B-fluids. — 2002. — Vol. 21. — P. 599–610.

-
- Sharipov F., Dias F. C.* Ab initio simulation of planar shock waves // *Computers & Fluids*. — 2017. — Vol. 150. — P. 115–122.
- Sharipov F., Seleznev V.* Data on internal rarefied gas flows // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. — 1998. — Vol. 27. — P. 657–706.
- Sitnikov S. S., Tcheremissine F. G.* Simulation of mixture components separation in a rarefied argon-neon jet on the basis of direct solution of the Boltzmann kinetic equation // *Journal of Computational Science*. — 2021. — Vol. 55. — 101467.
- Strang G.* On the construction and comparison of difference schemes // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. — 1968. — Vol. 5. — P. 506–517.
- Wu Z., Xu Y., Wang W., Hu R.* Review of shock wave detection method in CFD post-processing // *Chinese Journal of Aeronautics*. — 2013. — Vol. 26. — P. 501–513.
- Xu K.* A unified computational fluid dynamics framework from rarefied to continuum regimes. — Cambridge University Press, 2021.