

Научная статья

УДК 533.6.011.8

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-4-150

МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ ПО СКОРОСТЯМ

Тимохин М. Ю.^{1,2,*}, Бондарь Е. А.^{1,2}

¹ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация

² Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, Российская Федерация

*Корреспондирующий автор, e-mail: timokhin@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 22.10.2025

Принята к публикации 31.10.2025

Аннотация

Цель. Исследование применимости классических макроскопических приближений для получения неравновесной локальной функции распределения внутри структуры сильной ударной волны.

Процедура и методы. В настоящей работе рассматриваются возможности аппроксимации неравновесной молекулярной функции распределения с помощью различных макроскопических моделей (уравнения Навье – Стокса – Фурье, уравнения Барнетта, оригинальные и регуляризированные 13-моментные уравнения Грэда).

Результаты. Результаты восстановления локальной функции распределения по макропараметрам течения для рассматриваемых моделей сравниваются друг с другом и с эталонным решением в различных точках структуры плоской ударной волны. В качестве эталонного решения используется метод прямого статистического моделирования (ПСМ) Монте-Карло, который обеспечивает макропараметры потока, необходимые для восстановления функции распределения.

Теоретическая значимость. Сделаны выводы, что все рассмотренные классические модели довольно плохо предсказывают функцию распределения в сверхзвуковой части структуры ударной волны, где наблюдаются сильные осцилляции и нефизичные отрицательные значения.

Ключевые слова: метод Чепмена – Энскога; метод ПСМ; моментный метод Грэда; неравновесность; динамика разреженного газа; ударная волна; функция распределения молекул

Благодарности и источники финансирования. Численные исследования на основе ПСМ выполнены в рамках государственного задания ИТПМ СО РАН (номер государственной регистрации: 124021400040-4). Получение и анализ континуальных приближений выполнены при поддержке гранта РФФИ № 22-71-10045-П.

Для цитирования:

Тимохин М. Ю., Бондарь Е. А. Макроскопические газодинамические приближения локальной неравновесной функции распределения молекул по скоростям // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 4. С. 59–76. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-150>

Original research article**MACROSCOPIC GAS-DYNAMIC APPROXIMATIONS OF THE LOCAL NONEQUILIBRIUM MOLECULAR VELOCITY DISTRIBUTION FUNCTION**

M. Timokhin^{1,2,*}, *Ye. Bondar*^{1,2,*}

¹ *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

² *Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Science, Novosibirsk, Russian Federation*

*Corresponding author, e-mail: timokhin@physics.msu.ru

Received by the editorial office 22.10.2025

Accepted for publication 31.10.2025

Abstract

Aim. The investigation into the applicability of classical macroscopic approximations to obtain the nonequilibrium local distribution function inside the structure of a strong shock wave.

Methodology. This paper examines the capability of various macroscopic models (the Navier – Stokes – Fourier equations, the Burnett equations, and the original and regularized 13-moment Grad equations) to approximate a nonequilibrium molecular velocity distribution function.

Results. The locally reconstructed distribution functions obtained from the flow macro-parameters for the considered models are compared with each other and with a benchmark solution at different locations within the structure of a planar shock wave. The benchmark solution is provided by the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method, which supplies the flow macro-parameters required for the reconstruction of the distribution function.

Research implications. All considered models predict the distribution function rather poorly in the supersonic part of the shock-wave structure, where strong oscillations and nonphysical negative values are observed.

Keywords: Chapman-Enskog method; DSMC method; Grad moment method; kinetic theory of gases; rarefied gas dynamics; shock wave; velocity distribution function.

Acknowledgments. Numerical studies based on the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method were carried out within the framework of the state assignment of the Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of the RAS (state registration number: 124021400040-4). The development and analysis of continuum approximations were supported by the Russian Science Foundation Grant No. 22-71-10045-P.

For citation:

Timokhin, M. Yu. & Bondar, Ye. A. (2025). Macroscopic Gas-Dynamic Approximations of the Local Nonequilibrium Molecular Velocity Distribution Function. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, pp. 59–76. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-150>.

Введение

Кинетическое уравнение Больцмана является центральной математической моделью динамики разреженных газов и кинетической теории газов [1]. Разреженные течения идеального газа могут быть с высокой точностью смоделированы либо путём непосредственного решения уравнения Больцмана [2; 3], либо методом прямого статистического моделирования Монте-Карло (PCM, DSMC) [4; 5]. Обычно такой подход к численному моделированию газовых течений называют «кинетическим». Искомым решением уравнения является функция распределения молекул в фазовом пространстве. Все локальные макропараметры течения газа в данной точке могут быть получены как моменты функции распределения путём усреднения молекулярных характеристик (функций скорости) по пространству скоростей.

Когда локальная средняя длина свободного пробега молекул мала по сравнению с характерным масштабом задачи, кинетический подход становится вычислительно затратным [6]. С другой стороны, для таких течений отклонение от равновесия можно считать малым. Для подобных близких к континуальному режимов может быть применён «континуальный» подход, основанный на различных макроскопических моделях газовой динамики, требующий существенно меньших вычислительных ресурсов по сравнению с кинетическим подходом [7; 8]. Эти модели описывают течение конечным числом макропараметров и строятся так, чтобы аппроксимировать решение уравнения Больцмана в условиях близости к равновесию [7; 9].

Для вывода макроскопических моделей используются различные методы. Метод Чепмена – Энскога позволяет получить уравнения Эйлера, Навье – Стокса – Фурье (НСФ, NSF), Барнетта и супер-Барнетта непосредственно из кинетического уравнения Больцмана [1; 7; 9; 10]. Различные системы моментных уравнений могут быть получены с помощью разложения функции распределения по полиномам Эрмита методом Грэда [11] с возможной последующей регуляризацией (например, [7]). Эти макроскопические модели обеспечивают удовлетворительное согласие с решениями уравнения Больцмана в ряде задач динамики разреженных газов, особенно для близких к континуальному режимов, с точки зрения пространственных распределений макропараметров (см., например, [12–17]).

Важно отметить, что упомянутые выше модели основаны на определённых предположениях о том, как локальная неравновесная функция распределения по скоростям зависит от локальных макропараметров и, в некоторых случаях, от их градиентов. Это означает, что для каждой модели можно восстановить функцию распределения по известным полям соответствующих макропараметров. Представляет существенный интерес сравнить аппроксимации неравновесной функции распределения, задаваемые макроскопическими моделями, с решением уравнения Больцмана.

Цель настоящей работы – выполнить такое сравнение для иерархии макроскопических моделей в условиях заметного теплового неравновесия.

Реконструкции функций распределения по скоростям выполняются по полям макропараметров, полученным методом ПСМ, а функция распределения, вычисленная методом ПСМ, рассматривается как эталонное решение уравнения Больцмана.

Для анализа качества получаемых приближений используется классическая задача о структуре плоской ударной волны. В работе исследуются аппроксимации функции распределения по скоростям, соответствующие уравнениям Эйлера, НСФ, Барнетта, исходной 13-моментной системе Грэда (G13) и регуляризированной 13-моментной системе (R13).

Аппроксимации функции распределения молекул по скоростям

Метод Чепмена – Энскога позволяет вывести уравнения Эйлера, НСФ и Барнетта непосредственно из кинетического уравнения Больцмана [7; 9]. Равновесная максвелловская функция распределения молекул по скоростям f_M принимается в качестве нулевого приближения; поэтому уравнения Эйлера, получаемые при максвелловской фазовой плотности, имеют нулевой порядок (Kn^0). Следующий шаг (Kn^1) соответствует уравнениям Навье – Стокса – Фурье первого порядка с фазовой плотностью

$$f_{\text{NSF}} = f_M \left[1 + \frac{\sigma_{ij}^{\text{NSF}}}{2p\theta} C_{<i} C_{j>} + \frac{2}{5} \frac{q_k^{\text{NSF}}}{p\theta} C_k \left(\frac{C^2}{2\theta} - \frac{5}{2} \right) \right], \quad (1.1)$$

где $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{v}$ – тепловая молекулярная скорость, p – давление, $\theta = \frac{k}{m} T$ –

температура в энергетических единицах, k – постоянная Больцмана, m – масса молекулы, а T – температура газа в кельвинах. Угловые скобки в индексах означают безследовую симметричную часть тензора. Компоненты тензора напряжений σ_{ij}^{NSF} и теплового потока q_i^{NSF} в модели НСФ вычисляются соответственно по градиентам скорости и температуры:

$$\sigma_{ij}^{\text{NSF}} = -2\mu \frac{\partial v_i}{\partial x_j}, \quad q_i^{\text{NSF}} = -\frac{15}{4} \mu \frac{\partial \theta}{\partial x_i}, \quad (1.2)$$

где μ – локальная вязкость.

Приближение Барнетта имеет второй порядок (Kn^2). В настоящей работе рассматривается «ограниченная» функция распределения Барнетта f_{Burnett} [10; 17], в которой учитываются вклады Барнетта только в компоненты теплового потока и тензора напряжений. Таким образом, f_{Burnett} в данном исследовании совпадает с f_{NSF} , заданной формулой (1.1), если заменить σ_{ij}^{NSF} на $\sigma_{ij}^{\text{Burnett}}$, а q_i^{NSF} – на q_i^{Burnett} . Компоненты тензора напряжений и теплового потока Барнетта можно представить следующим образом (см., например, [7; 9]):

$$\sigma_{ij}^{\text{Burnett}} = \sigma_{ij}^{\text{NSF}} + \frac{\mu^2}{p} \left[K_1 \frac{\partial v_k}{\partial x_k} A_{ij} + K_2 \left(\frac{\partial}{\partial x_{\langle i}} \left(\frac{F_{j\rangle}}{m} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_{j\rangle}} \right) - \frac{\partial v_k}{\partial x_{\langle i}} \frac{\partial v_{j\rangle}}{\partial x_k} - 2 \frac{\partial v_k}{\partial x_{\langle i}} A_{j\rangle k} \right) \right. \\ \left. + K_3 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_{\langle i} \partial x_{j\rangle}} + K_4 \frac{1}{p} \frac{\partial \theta}{\partial x_{\langle i}} \frac{\partial p}{\partial x_{j\rangle}} + K_5 \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x_{\langle i}} \frac{\partial \theta}{\partial x_{j\rangle}} + K_6 A_{k\langle i} A_{j\rangle k} \right], \quad (1.3)$$

$$q_i^{\text{Burnett}} = q_i^{\text{NSF}} + \frac{\mu^2}{\rho} \left[B_1 \frac{1}{\theta} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} + B_2 \left(\frac{2}{3} \frac{\partial^2 v_k}{\partial x_k \partial x_i} + \frac{2}{3\theta} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} + \frac{2}{\theta} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \right) \right. \\ \left. + B_3 \frac{A_{ik}}{p} \frac{\partial p}{\partial x_k} + B_4 \frac{\partial A_{ik}}{\partial x_k} \frac{\partial p}{\partial x_j} + B_5 A_{ik} \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \right], \quad (1.4)$$

где F_i – компоненты вектора внешней силы. Значения коэффициентов K_i и B_i зависят от закона межмолекулярного взаимодействия. Здесь они взяты для максвелловских молекул (см. [9]).

Метод Грэда позволяет получить 13- и 26-моментные системы уравнений с использованием разложения по полиномам Эрмита [7; 9]. 13-моментная функция распределения Грэда (G13), подобно функции распределения Барнетта, приводит к уравнениям второго порядка (Kn^2). Функция распределения G13 f_{G13} аналогична f_{NSF} , заданной формулой (1.1), но величины σ_{ij}^{NSF} и q_i^{NSF} заменяются значениями тензора напряжений и теплового потока, полученными из точного решения уравнения Больцмана, представленного фазовой плотностью f :

$$\sigma_{ij} = m \int \left(C_i C_j - \frac{1}{3} C^2 \delta_{ij} \right) f \, d\mathbf{c}, \quad q_i = \frac{m}{2} \int C^2 c_i f \, d\mathbf{c}. \quad (1.5)$$

Регуляризованная система R13 [7] вместе с соответствующей функцией распределения является примером приближения третьего порядка. Функция распределения R13 может быть записана следующим образом [7]:

$$f_{\text{R13}} = f_M \left[1 + \frac{\sigma_{ij}}{2p\theta} C_{\langle i} C_{j\rangle} + \frac{2}{5} \frac{q_k}{p\theta} C_k \left(\frac{C^2}{2\theta} - \frac{5}{2} \right) \right. \\ \left. - \frac{R_{ij}}{4p\theta^2} C_{\langle i} C_{j\rangle} \left(1 - \frac{1}{7} \frac{C^2}{\theta} \right) + \frac{m_{ijk}}{6\rho\theta^3} C_{\langle i} C_j C_{k\rangle} + \frac{\Delta}{8p\theta} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{C^2}{\theta} + \frac{1}{15} \frac{C^4}{\theta^2} \right) \right]. \quad (1.6)$$

Моменты более высокого порядка m_{ijk} , R_{ij} и Δ могут быть вычислены через первые 13 моментов (плотность, температура, тензор напряжений и тепловой поток). Существует несколько нелинейных вариантов уравнений R13, различающихся соотношениями для моментов более высокого порядка [7; 18]. В линейном варианте уравнений R13 (градиентный механизм переноса [19]), используемом в настоящем исследовании [20], моменты более высокого порядка имеют вид

$$m_{ijk} = -2 \frac{\mu\theta}{p} \frac{\partial \sigma_{\langle ij\rangle}}{\partial x_k}, \quad R_{ij} = -\frac{24}{5} \frac{\mu\theta}{p} \frac{\partial q_{\langle i}}{\partial x_{j\rangle}}, \quad \Delta = -12 \frac{\mu\theta}{p} \frac{\partial q_i}{\partial x_i}. \quad (1.7)$$

Результаты

Как уже отмечалось выше, метод ПСМ используется здесь для получения решения уравнения Больцмана (эталонной функции распределения молекулярных скоростей и различных макропараметров). Межмолекулярное взаимодействие моделируется в рамках модели переменных твёрдых сфер (Variable Hard Spheres, VHS) [4]. Шаг по времени в расчётах выбирался достаточно малым (меньше среднего времени между столкновениями), что обеспечивало высокую точность результатов. Настоящие вычисления выполнены с использованием двух различных ПСМ-кодов: SMILE и SMILE++ [21; 22]. Заметных различий между результатами не выявлено.

Одномерная структура плоской ударной волны в одноатомном газе является классической задачей динамики разреженных газов. Множество публикаций посвящено аналитическому (см., например, [23–25]), численному (см., например, [3; 7; 18; 26]) и экспериментальному (см., например, [27–30]) исследованию этой задачи.

Обычно рассматривают систему отсчёта, связанную с фронтом ударной волны. Тогда граничные условия задаются следующим образом: ρ_1 , u_1 и θ_1 – значения плотности, скорости и температуры на входной границе (в набегающем потоке), а ρ_2 , u_2 и θ_2 – соответствующие значения на выходной границе (за ударной волной), которые могут быть определены из соотношений Ранкина – Гюнио [31].

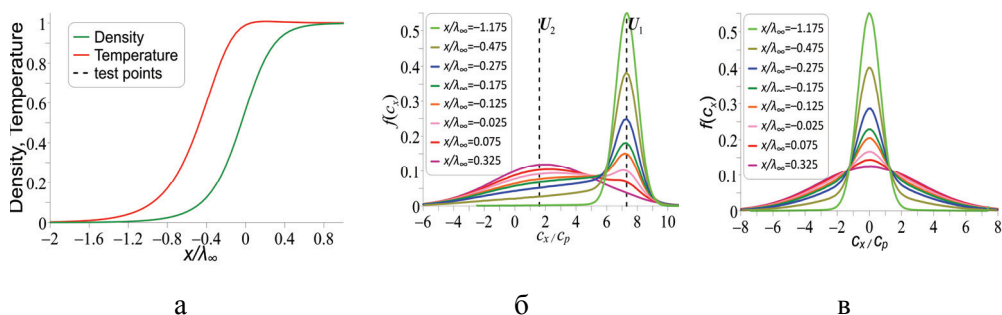


Рис. 1 / Fig. 1. Профили плотности и температуры в структуре плоской ударной волны (а), результаты ПСМ для функций распределения в различных точках для параллельной (б) и перпендикулярной (в) компонент молекулярной скорости / Density and temperature profiles in the structure of a plane shock wave (а), DSMC results for distribution functions at different points for parallel (б) and perpendicular (в) components of molecular velocity

Источник: составлено авторами

Рис. 1 (а) демонстрирует профили плотности и температуры, полученные методом ПСМ, для числа Маха $Ma = 8.0$. Пространственная координата

нормирована на длину свободного пробега в набегающем потоке. Плотность и температура нормированы следующим образом:

$$\hat{\rho} = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}, \quad \hat{\theta} = \frac{\theta - \theta_1}{\theta_2 - \theta_1}. \quad (1.8)$$

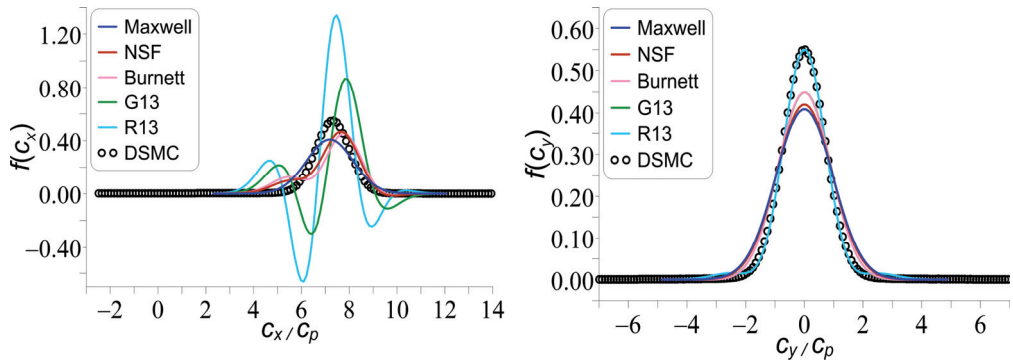
Начало координат помещено в точку, где нормированная плотность равна 0.5. Число Кнудсена для данной задачи нельзя определить однозначно из-за отсутствия явного характерного масштаба длины. Однако можно определить локальное число Кнудсена через градиенты макропараметров либо по отклонению неравновесных макропараметров от приближения НСФ [18; 32]. Структура ударной волны при $Ma = 8.0$ является весьма экстремальным случаем для макроскопических моделей течения вследствие высокой степени неравновесности. В этом случае локальное число Кнудсена изменяется в широком диапазоне – от 0 до 0.5 – в различных областях течения [18].

Локальная функция распределения молекул была получена в расчётах ПСМ в различных точках структуры плоской ударной волны. Функции распределения для рассматриваемых макроскопических моделей были восстановлены в тех же точках с использованием данных ПСМ по макропараметрам. Примеры локальных функций распределения скоростей, полученных в расчётах ПСМ, представлены на рис. 1 (б, в). Функция распределения компоненты молекулярной скорости c_x в направлении x и безразмерная молекулярная скорость \hat{c}_x определяются следующим образом (определения для направлений y и z аналогичны):

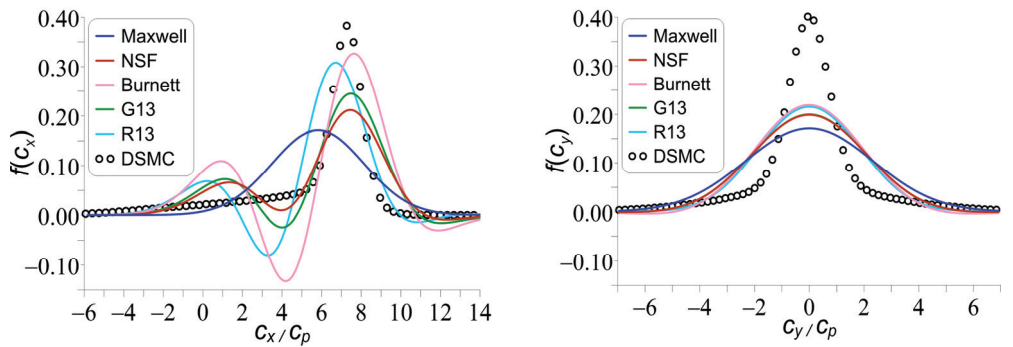
$$f(c_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(c_i, c_j, c_k) dc_j dc_k, \quad \hat{c}_i = \frac{c_i}{\sqrt{2\theta_1}}. \quad (1.9)$$

Функции распределения ПСМ внутри ударной волны имеют типичную бимодальную форму, обусловленную вкладом набегающего и уходящего максвеллианов, центрированных соответственно на скорости набегающего потока U_1 и скорости потока за ударной волной U_2 .

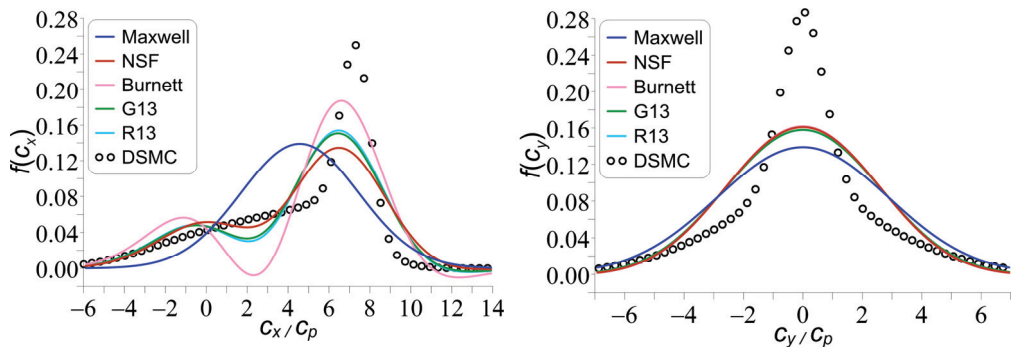
Функции распределения для различных макроскопических моделей были сопоставлены между собой и с результатами ПСМ. Примеры некоторых точек представлены на рис. 2-4. Первый ряд представляет результаты для $f(c_x)$, а второй – для $f(c_y)$. Наиболее трудной для описания макроскопическими методами областью структуры ударной волны является сверхзвуковая часть [13]. Как видно из рис. 2-4, уже в первой рассматриваемой точке ударной волны ($x/\lambda_\infty = -1.175$, $\hat{\rho} = 0.006$) локальная функция распределения начинает заметно отличаться от максвелловской. Появляется хвост распределения, формируемый медленными молекулами. Иными словами, начинает возрастать мода распределения, соответствующая равновесным значениям справа от ударной волны (см. рис. 1 (а)).



$$x/\lambda_\infty = -1.175, \hat{\rho} = 0.006$$



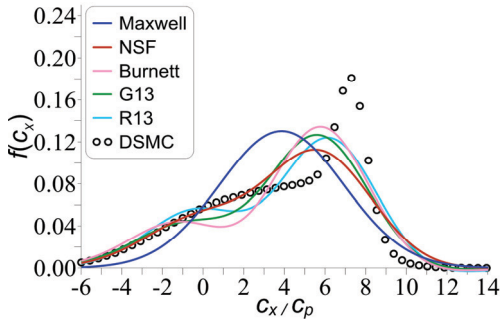
$$x/\lambda_\infty = -0.475, \hat{\rho} = 0.091$$



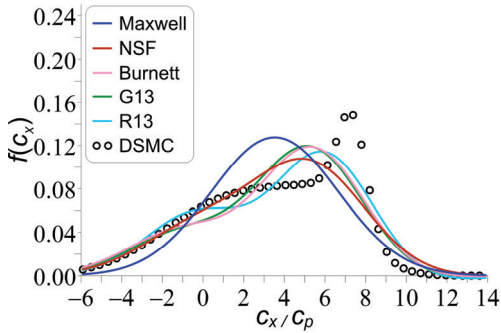
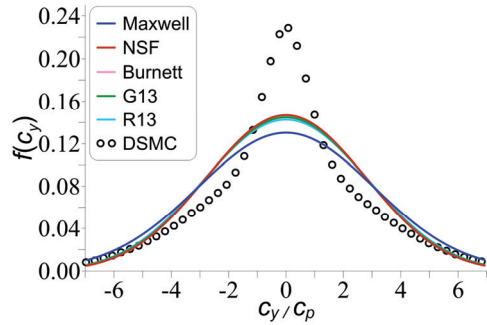
$$x/\lambda_\infty = -0.275, \hat{\rho} = 0.214$$

Рис. 2 / Fig. 2. Примеры сопоставления функций распределения для различных макроскопических моделей между собой и с результатами ПСМ / Examples of comparison of distribution functions for various macroscopic models with each other and with the results of the DSMC

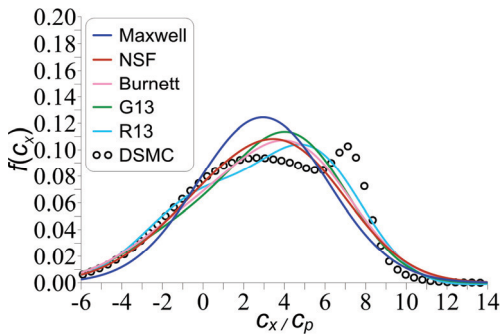
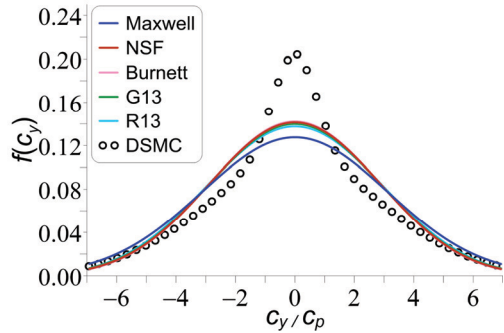
Источник: составлено авторами



$$x / \lambda_{\infty} = -0.175, \hat{\rho} = 0.319$$



$$x / \lambda_{\infty} = -0.125, \hat{\rho} = 0.384$$



$$x / \lambda_{\infty} = -0.025, \hat{\rho} = 0.528$$

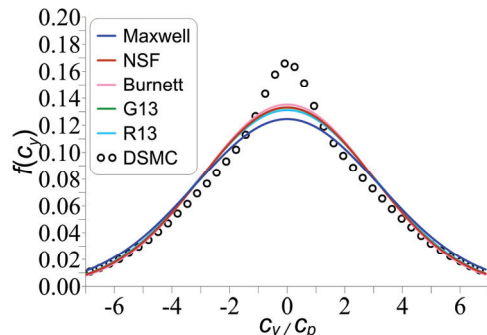


Рис. 3 / Fig. 3. Примеры сопоставления функций распределения для различных макроскопических моделей между собой и с результатами ПСМ / Examples of comparison of distribution functions for various macroscopic models with each other and with the results of the DSMC

Источник: составлено авторами

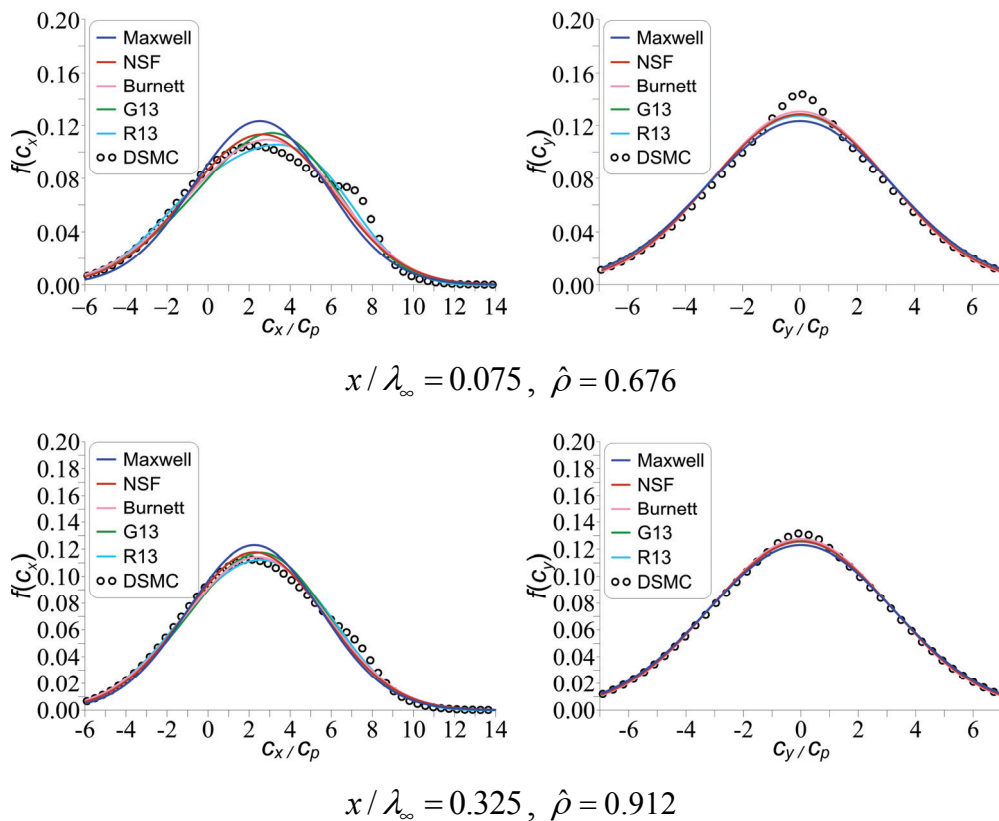


Рис. 4 / Fig. 4. Примеры сопоставления функций распределения для различных макроскопических моделей между собой и с результатами ПСМ / Examples of comparison of distribution functions for various macroscopic models with each other and with the results of the DSMC

Источник: составлено авторами

Функция распределения продольной компоненты скорости (x -скорости) в моделях G13 и R13 демонстрирует крайне сильные осцилляции и оказывается существенно отрицательной на некоторых скоростях. Хорошо известно, что даже распространённые макроскопические модели, такие как уравнения НСФ, могут давать нефизические отрицательные значения фазовой плотности [1; 7; 11; 33]. Здесь проявляется ограничение на распределение высокоскоростных молекул, обсуждаемое в работе [34]. В рассматриваемой иерархии в этом случае сходимость отсутствует. Для структуры ударной волны с числом Маха набегающего потока $Ma = 8.0$, рассматриваемой в настоящей работе, сходимость континуальных приближений наблюдается при локальном числе Маха $Ma < 1.4$. Результаты для всех остальных моделей по продольной молекулярной скорости значительно ближе к предсказаниям ПСМ.

Продвижение дальше вниз по течению (при уменьшении локального числа Маха) приводит к более выраженному хвосту распределения ПСМ в области малых скоростей. Для второй точки ($x/\lambda_\infty = -0.475$, $\hat{\rho} = 0.091$) модели G13 и R13 предсказывают распределения по продольной скорости, существенно более близкие к результатам ПСМ, чем в первой точке; при этом модель G13 уже не демонстрирует отрицательных значений. С другой стороны, приближения НСФ и Барнетта показывают значительно более сильные осцилляции, чем в первой точке; в случае Барнетта распределение достигает наибольших отрицательных значений среди всех моделей. В целом все макроскопические модели в данном исследовании дают качественно сходные распределения с двумя локальными максимумами и двумя локальными минимумами. Распределения по поперечной скорости для всех моделей в обеих точках выглядят более типично и напоминают гауссов «колокол».

Распределения в третьей точке ($x/\lambda_\infty = -0.275$, $\hat{\rho} = 0.214$) качественно похожи, но менее экстремальны: интервалы отрицательных значений в распределении продольной молекулярной скорости появляются лишь в модели Барнетта. Далее в трёх следующих точках (в координатах $x/\lambda_\infty = -0.175$, $x/\lambda_\infty = -0.125$ и $x/\lambda_\infty = -0.025$) мода малых скоростей начинает оформляться, и распределение ПСМ для продольной компоненты молекулярной скорости приобретает отчётливо бимодальный характер. Все распределения макроскопических моделей становятся значительно менее осциллирующими, имеют лишь один максимум и не содержат отрицательных участков. Примеры двух последних точек ($x/\lambda_\infty = 0.075$ и $x/\lambda_\infty = 0.325$), расположенные ниже по течению относительно центра ударной волны, распределения ПСМ близки к равновесным и имеют лишь небольшой «бугорок» как в продольном, так и в поперечном распределении скорости, напоминающий вклад высокоскоростного максвеллиана. В этой точке распределения всех макроскопических моделей практически совпадают друг с другом.

Можно заключить, что все рассмотренные макроскопические модели довольно плохо предсказывают функцию распределения по скоростям в области малого значения плотности на ведущем фронте ударной волны. Для количественной оценки этого расхождения была вычислена интегральная ошибка всех приближений функции распределения для каждой из компонент:

$$\Delta f(c_i) = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} (f(c_i) - f_{\text{DSMC}}(c_i))^2 dc_i \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.10)$$

Зависимость этой величины от локальной нормированной плотности приведена на рис. 5. Отметим, что данное определение ошибки не является инвариантным относительно поворотов, поскольку сравниваемые фазовые плотности f и f_{DSMC} – это интегралы, заданные формулой (1.9), а значит, они зависят от выбора системы отсчёта. Более того, сами уравнения Барнетта не инвариантны относительно поворотов [1; 7]. Поэтому приведённые данные по ошибке следует рассматривать лишь в качестве качественной характеристики

макроскопических моделей. В то же время, значительно большие значения ошибок для аппроксимаций продольной компоненты молекулярной скорости, нежели поперечной, объясняется существенно значительно большей неравновесностью продольного направления.

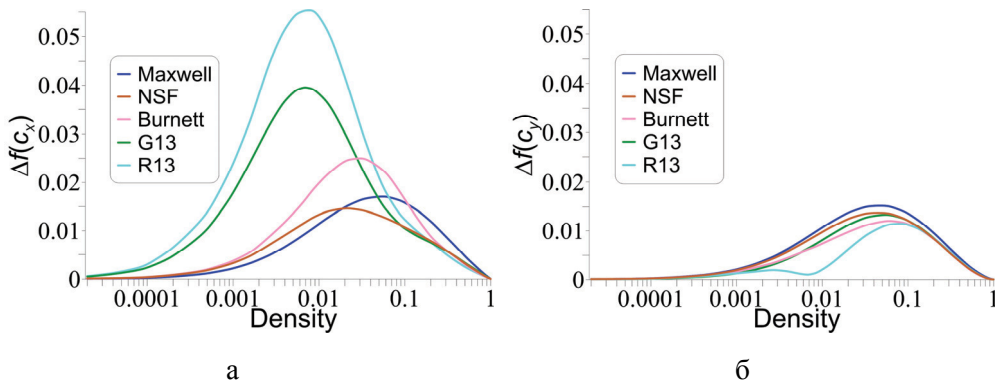


Рис. 5 / Fig. 5. Погрешности аппроксимации для $f(c_x)$ и $f(c_y)$ различными макроскопическими моделями для структуры плоской ударной волны / Approximation errors for $f(c_x)$ and $f(c_y)$ by various macroscopic models for the structure of a plane shock wave

Источник: составлено авторами

Результаты подтверждают, что наибольшая ошибка при малой плотности наблюдается для моделей, основанных на методе Града: G13 и R13. С другой стороны, при промежуточных плотностях порядка 0.05 ошибка этих моделей становится меньше, чем у уравнений Барнетта. Интересно отметить, что равновесное максвелловское распределение имеет заведомо большую ошибку по сравнению со всеми остальными рассмотренными неравновесными моделями лишь при плотностях выше 0.1.

Заключение

Функции распределения молекулярных скоростей, предсказанные различными макроскопическими моделями течения одноатомного газа, были сопоставлены с эталонным решением ПСМ для плоской ударной волны и задачи стационарного регулярного отражения ударной волны. Для обеих задач рассматривались сильные ударные волны с числом Маха 8, что обеспечивало существенную степень неравновесности течения и нематвелловскую, многомодальную форму функции распределения скоростей по ПСМ. Можно заключить, что все макроскопические модели довольно плохо предсказывают функцию распределения скоростей в верхней по потоку области низкой плотности, где течение по сути является неравновесным. Наблюдается не только высокая ошибка аппроксимации, но и нефизические осцилляции фазовой плотности со значительно отрицательными значениями. Примечательно, но

наиболее сложная и точная модель (в смысле предсказания распределений макропараметров) – система уравнений R13 – оказывается худшей при предсказании неравновесных распределений. По мере продвижения вниз по потоку, в сторону более высокой плотности и более локально равновесных условий, все осцилляции и расхождения между моделями постепенно исчезают. В нижней по потоку части течения в обеих задачах все макроскопические модели предсказывают картину достаточно хорошо.

ЛИТЕРАТУРА

1. Cercignani C. The Boltzmann Equation and Its Applications. Berlin: Springer, 1988. 455 p.
2. Аристов В. В., Черемисин Ф. Г. Консервативный метод расщепления для решения уравнения Больцмана // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1980. Т. 20. № 1. С. 191–207.
3. Ohwada T. Structure of normal shock waves: Direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // Physics of Fluids A: Fluid Dynamics. 1993. Vol. 5. Iss. 1. P. 217–234. DOI: 10.1063/1.858777.
4. Bird G. A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 476 p.
5. Иванов М. С., Рогазинский С. В. Сравнительный анализ алгоритмов метода прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1988. Т. 28. № 7. С. 1058–1070.
6. Ivanov M. S., Gimelshein S. F. Computational Hypersonic Rarefied Flows // Annual Review of Fluid Mechanics. 1998. Vol. 30. P. 469–505. DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.469.
7. Struchtrup H. Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows. Berlin: Springer, 2005. 258 p.
8. Torrilhon M. Modeling Nonequilibrium Gas Flow Based on Moment Equations // Annual Review of Fluid Mechanics. 2016. Vol. 48. No. 1. P. 429–458. DOI: 10.1146/annurev-fluid-122414-034259.
9. Коган М. Н. Динамика разреженного газа: кинетическая теория. М.: Наука, 1967. 440 с.
10. Chapman S., Cowling T. G. The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases. Cambridge: Cambridge University Press, 1991. 423 p.
11. Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1949. Vol. 2. Iss. 4. P. 331–407. DOI: 10.1002/cpa.3160020403.
12. Pham-Van-Diep G. C., Erwin D. A., Muntz E. P. Testing continuum descriptions of low-Mach-number shock structures // Journal of Fluid Mechanics. 1991. Vol. 232. P. 403–413. DOI: 10.1017/S0022112091003749.
13. Erofeev A. I., Friedlander O. G. Macroscopic Models for Non-equilibrium Flows of Monatomic Gas and Normal Solutions // Rarefied Gas Dynamics: Proceedings of 25th

- International Symposium. Novosibirsk: Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2007. P. 117–124.
14. Study of the Shock Wave Structure by Regularized Grad's Set of Equations / I. E. Ivanov, M. Y. Timokhin, I. A. Kryukov, Y. A. Bondar, A. A. Kokhanchik, M. S. Ivanov // AIP Conference Proceedings. 2012. Vol. 1501. Iss. 1. P. 215–222. DOI: 10.1063/1.4769507.
 15. Timokhin M. Yu., Ivanov I. E., Kryukov I. A. Moment equations and gas-kinetic scheme application to numerical simulation of gas flows in micro scale devices // AIP Conference Proceedings. 2014. Vol. 1628. Iss. 1. P. 748–755. DOI: 10.1063/1.4902668.
 16. Westerkamp A., Torrilhon M. Finite element methods for the linear regularized 13-moment equations describing slow rarefied gas flows // Journal of Computational Physics. 2019. Vol. 389. P. 1–21. DOI: 10.1016/j.jcp.2019.03.022.
 17. Zheng Y., Struchtrup H. Burnett equations for the ellipsoidal statistical BGK model // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2004. Vol. 16. P. 97–108. DOI: 10.1007/s00161-003-0143-3.
 18. The analysis of different variants of R13 equations applied to the shock-wave structure / M. Yu. Timokhin, H. Struchtrup, A. A. Kokhanchik, Ye. A. Bondar // AIP Conference Proceedings. 2016. Vol. 1786. Iss. 1. Article no. 140006. DOI: 10.1063/1.4967637.
 19. Gu X. J., Emerson D. R. A high-order moment approach for capturing non-equilibrium phenomena in the transition regime // Journal of Fluid Mechanics. 2009. Vol. 636. P. 177–216. DOI: 10.1017/S002211200900768X.
 20. Timokhin M. Yu., Ivanov I. E., Kryukov I. A. 2D Numerical Simulation of Gas Flow Interaction with Solid Wall by Regularized Grad's Set of Equations // AIP Conference Proceedings. 2012. Vol. 1501. Iss. 1. P. 843–848. DOI: 10.1063/1.4769630.
 21. Семейство программных систем SMILE для прямого статистического моделирования течений разреженных газов / А. В. Кашковский, П. В. Ващенко, А. А. Шевырин, А. Н. Молчанова, А. С. Литвинцев и др. // Инженерно-физический журнал. 2025. Т. 98. № 7. С. 1850–1878.
 22. Parallel Object-Oriented Software System for DSMC Modeling of High-Altitude Aerothermodynamic Problems / M. S. Ivanov, A. V. Kashkovsky, P. V. Vashchenkov, Ye. A. Bondar // AIP Conference Proceedings. 2011. Vol. 1333. Iss. 1. P. 211–218. DOI: 10.1063/1.3562650.
 23. Becker R. Stoßwelle und Detonation // Zeitschrift für Physik. 1922. Vol. 8. No. 1. P. 321–362. DOI: 10.1007/BF01329605.
 24. Mott-Smith H. M. The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave // Physical Review. 1951. Vol. 82. P. 885–892. DOI: 10.1103/PhysRev.82.885.
 25. Yen S. M. Temperature Overshoot in Shock Waves // Physics of Fluids. 1966. Vol. 9. Iss. 1. P. 1417–1418. DOI: 10.1063/1.1761862.
 26. Xu K., Huang J.-C. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows // Journal of Computational Physics. 2010. Vol. 229. Iss. 20. P. 7747–7764. DOI: 10.1016/j.jcp.2010.06.032.
 27. Hansen K., Hornig D. F. Thickness of Shock Fronts in Argon // Journal of Chemical Physics. 1960. Vol. 33. Iss. 3. P. 913–916. DOI: 10.1063/1.1731288.

28. Alsmeyer H. Density Profiles in Argon and Nitrogen Shock Waves Measured by the Absorption of an Electron Beam // *Journal of Fluid Mechanics*. 1976. Vol. 74. Iss. 3. P. 497–513. DOI: 10.1017/S0022112076001912.
29. Pham-Van-Diep G., Erwin D., Muntz E. P. Nonequilibrium Molecular Motion in a Hypersonic Shock Wave // *Science*. 1989. Vol. 245. Iss. 4918. P. 624–626. DOI: 10.1126/science.245.4918.624.
30. Shock-wave Thickness Influence to the Light Diffraction on a Plane Shock Wave / M. Yu. Timokhin, M. Tikhonov, I. V. Mursenkova, I. A. Znamenskaya // *Physics of Fluids*. 2020. Vol. 32. Iss. 11. Article no. 116103. DOI: 10.1063/5.0029612.
31. Rankine W. J. M. On the thermodynamic theory of waves of finite longitudinal disturbance // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. 1870. Vol. 160. P. 277–288. DOI: 10.1098/rstl.1870.0015.
32. Lockerby D. A., Reese J. M., Struchtrup H. Switching criteria for hybrid rarefied gas flow solvers // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2009. Vol. 465. Iss. 2105. P. 1581–1598. DOI: 10.1098/rspa.2008.0497.
33. Timokhin M., Rukhnikov D. Local non-equilibrium phase density reconstruction with Grad and Chapman-Enskog methods // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1959. Iss. 1. Article no. 012049. DOI: 10.1088/1742-6596/1959/1/012049.
34. Cai Z., Torrillon M. On the Holway-Weiss debate: Convergence of the Grad-moment-expansion in kinetic gas theory // *Physics of Fluids*. 2019. Vol. 31. Iss. 12. Article no. 126105. DOI: 10.1063/1.5127114.

REFERENCES

1. Cercignani, C. (1988). *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Berlin: Springer.
2. Aristov, V. V. & Cheremisin, F. G. (1980). The conservative splitting method for solving Boltzmann's equation. In: *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 20 (1), 191–207 (in Russ.).
3. Ohwada, T. (1993). Structure of normal shock waves: Direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules. In: *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 5 (1), 217–234. DOI: 10.1063/1.858777.
4. Bird, G. A. (1994). *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Clarendon Press.
5. Ivanov, M. S. & Rogazinskii, S. V. (1988). Comparative analysis of direct simulation algorithms in rarefied gas dynamics. In: *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 28 (7), 1058–1070 (in Russ.).
6. Ivanov, M. S. & Gimelshein, S. F. (1998). Computational Hypersonic Rarefied Flows. In: *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30, 469–505. DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.469.
7. Struchtrup, H. (2005). *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows*. Berlin: Springer.
8. Torrillon, M. (2016). Modeling Nonequilibrium Gas Flow Based on Moment Equations. In: *Annual Review of Fluid Mechanics*, 48 (1), 429–458. DOI: 10.1146/annurev-fluid-122414-034259.
9. Kogan, M. N. (1967). *Dynamics of rarefied gas: kinetic theory*. Moscow: Nauka (in Russ.).

10. Chapman, S. & Cowling, T. G. (1991). *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases*. Cambridge: Cambridge University Press.
11. Grad, H. (1949). On the kinetic theory of rarefied gases. In: *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 2 (4), 331–407. DOI: 10.1002/cpa.3160020403.
12. Pham-Van-Diep, G. C., Erwin, D. A. & Muntz, E. P. (1991). Testing continuum descriptions of low-Mach-number shock structures. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 232, 403–413. DOI: 10.1017/S0022112091003749.
13. Erofeev, A. I. & Friedlander, O. G. (2007). Macroscopic Models for Non-equilibrium Flows of Monatomic Gas and Normal Solutions. In: *Rarefied Gas Dynamics: Proceedings of 25th International Symposium*. Novosibirsk: Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, pp. 117–124.
14. Ivanov, I. E., Timokhin, M. Y., Kryukov, I. A., Bondar, Y. A., Kokhanchik, A. A. & Ivanov, M. S. (2012). Study of the Shock Wave Structure by Regularized Grad's Set of Equations. In: *AIP Conference Proceedings*, 1501 (1), 215–222. DOI: 10.1063/1.4769507.
15. Timokhin, M. Yu., Ivanov, I. E. & Kryukov, I. A. (2014). Moment equations and gas-kinetic scheme application to numerical simulation of gas flows in micro scale devices. In: *AIP Conference Proceedings*, 1628 (1), 748–755. DOI: 10.1063/1.4902668.
16. Westerkamp, A. & Torrilhon, M. (2019). Finite element methods for the linear regularized 13-moment equations describing slow rarefied gas flows. In: *Journal of Computational Physics*, 389, 1–21. DOI: 10.1016/j.jcp.2019.03.022.
17. Zheng, Y. & Struchtrup, H. (2004). Burnett equations for the ellipsoidal statistical BGK model. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 16, 97–108. DOI: 10.1007/s00161-003-0143-3.
18. Timokhin, M. Yu., Struchtrup, H., Kokhanchik, A. A. & Bondar, Ye. A. (2016). The analysis of different variants of R13 equations applied to the shock-wave structure. In: *AIP Conference Proceedings*, 1786 (1), 140006. DOI: 10.1063/1.4967637.
19. Gu, X. J. & Emerson, D. R. (2009). A high-order moment approach for capturing non-equilibrium phenomena in the transition regime. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 636, 177–216. DOI: 10.1017/S002211200900768X.
20. Timokhin, M. Yu., Ivanov, I. E. & Kryukov, I. A. (2012). 2D Numerical Simulation of Gas Flow Interaction with Solid Wall by Regularized Grad's Set of Equations. In: *AIP Conference Proceedings*, 1501 (1), P. 843–848. DOI: 10.1063/1.4769630.
21. Kashkovsky, A. V., Vashchenkov, P. V., Shevyrin, A. A., Molchanova, A. N. & Litvintsev, A. S. et al. (2025). SMILE family of software systems for the direct Monte Carlo simulations of rarefied gas flows. In: *Journal of engineering physics and thermophysics*, 98, 1872–1897. DOI: 10.1007/s10891-026-03266-8.
22. Ivanov, M. S. Kashkovsky, A. V., Vashchenkov, P. V. & Bondar, Ye. A. (2011). Parallel Object-Oriented Software System for DSMC Modeling of High-Altitude Aerothermodynamic Problems. In: *AIP Conference Proceedings*, 1333 (1), 211–218. DOI: 10.1063/1.3562650.

23. Becker, R. (1922). Stoßwelle und Detonation. In: *Zeitschrift für Physik*, 8 (1), 321–362. DOI: 10.1007/BF01329605.
24. Mott-Smith, H. M. (1951). The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave. In: *Physical Review*, 82, 885–892. DOI: 10.1103/PhysRev.82.885.
25. Yen, S. M. (1966). Temperature Overshoot in Shock Waves. In: *Physics of Fluids*, 9 (1), 1417–1418. DOI: 10.1063/1.1761862.
26. Xu, K. & Huang, J.-C. (2010). A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. In: *Journal of Computational Physics*, 229 (20), 7747–7764. DOI: 10.1016/j.jcp.2010.06.032.
27. Hansen, K. & Hornig, D. F. (1960). Thickness of Shock Fronts in Argon. In: *Journal of Chemical Physics*, 33 (3), 913–916. DOI: 10.1063/1.1731288.
28. Alsmeyer, H. (1976). Density Profiles in Argon and Nitrogen Shock Waves Measured by the Absorption of an Electron Beam. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 74 (3), 497–513. DOI: 10.1017/S0022112076001912.
29. Pham-Van-Diep, G., Erwin, D. & Muntz, E. P. (1989). Nonequilibrium Molecular Motion in a Hypersonic Shock Wave. In: *Science*, 245 (4918), 624–626. DOI: 10.1126/science.245.4918.624.
30. Timokhin, M. Yu., Tikhonov, M., Mursenkova, I. V. & Znamenskaya, I. A. (2020). Shock-wave Thickness Influence to the Light Diffraction on a Plane Shock Wave. In: *Physics of Fluids*, 32 (11), 116103. DOI: 10.1063/5.0029612.
31. Rankine, W. J. M. (1870). On the thermodynamic theory of waves of finite longitudinal disturbance. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 160, 277–288. DOI: 10.1098/rstl.1870.0015.
32. Lockerby, D. A., Reese, J. M. & Struchtrup, H. (2009). Switching criteria for hybrid rarefied gas flow solvers. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 465 (2105), 1581–1598. DOI: 10.1098/rspa.2008.0497.
33. Timokhin, M. & Rukhmakov, D. (2021). Local non-equilibrium phase density reconstruction with Grad and Chapman-Enskog methods. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 1959 (1), 012049. DOI: 10.1088/1742-6596/1959/1/012049.
34. Cai, Z. & Torrilhon, M. (2019). On the Holway-Weiss debate: Convergence of the Grad-moment-expansion in kinetic gas theory. In: *Physics of Fluids*, 31 (12), 126105. DOI: 10.1063/1.5127114.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Тимохин Максим Юрьевич (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносов; старший научный сотрудник Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук;
<http://orcid.org/0000-0001-8529-5300>; e-mail: timokhin@physics.msu.ru

Бондарь Евгений Александрович (г. Новосибирск) – кандидат физико-математических наук, заместитель директора по научной работе Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук; старший научный сотрудник физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносов;
<https://orcid.org/0000-0002-9439-6573>; e-mail: bond@itam.nsc.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Maksim Yu. Timokhin (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University; Senior Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Science;
<http://orcid.org/0000-0001-8529-5300>; e-mail: timokhin@physics.msu.ru

Yevgeniy A. Bondar (Novosibirsk) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Deputy Director for Research, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Science (ITAM SB RAS); Senior Researcher, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University.
<https://orcid.org/0000-0002-9439-6573>; e-mail: bond@itam.nsc.ru