Теплофизика и аэромеханика, 2025, том 32, № 2

УДК 533.5
DOI: 10.63430/TIA2025020015

Влияние модели столкновений частиц на результаты расчета прямым статистическим моделированием теплового потока в разреженном газе*

М.Ю. Плотников[1], Е.В. Шкарупа[2]

[1]*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск*

[2]*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск*

E-mails: plotnikov@itp.nsc.ru, sev@osmf.sscc.ru

Метод прямого статистического моделирования (ПСМ) широко применяется для решения задач динамики разреженного газа. Выбор модели столкновений частиц между собой при реализации алгоритма ПСМ существенно влияет на точность моделирования и трудоемкость вычислений. Одной из наиболее часто используемых моделей столкновений является VSS-модель. В представленной работе моделируется течение, возникающее при помещении нагретой проволочки в атмосферу покоящегося газа. В качестве покоящегося газа рассматриваются гелий и аргон. Показано, что использование VSS-модели с параметрами, основанными на вязкости и диффузии, может приводить к погрешности при оценке теплового потока с проволочки в окружающий газ.

Ключевые слова: прямое статистическое моделирование, VSS-модель, теплопроводность, аргон, гелий.

Введение

Метод прямого статистического моделирования (ПСМ) [1, 2] был разработан в начале 60-х годов прошлого столетия для моделирования течений разреженного газа. За последующие десятилетия он был значительно усовершенствован, что уменьшило трудоемкость расчетов и обеспечило большую точность результатов моделирования (см., например, работы [2 – 9]). В настоящее время метод ПСМ является основным численным инструментом для решения задач динамики разреженного газа. В его основе лежит расщепление непрерывного движения частиц на два последовательно рассматриваемых этапа: перемещение моделируемых частиц согласно их скоростям за некоторое время Δt и столкновение частиц между собой в этот промежуток времени. При этом каждая моделируемая частица представляет большое количество реальных частиц. На каждом временном шаге производится суммирование информации, необходимой для вычисления макропараметров течения газа.

* Работа выполнена при финансовой поддержке бюджетных грантов ([1]121031800218-5 и [2]FWNM-2025-0002).

© **Плотников М.Ю., Шкарупа Е.В., 2025**

Для моделирования столкновений частиц используются модели с конечным полным сечением столкновений, что позволяет рассматривать столкновения как дискретную последовательность событий. Параметры этих моделей обычно выбираются таким образом, чтобы получить соответствие расчетных макроскопических коэффициентов переноса (вязкости, диффузии и теплопроводности) моделируемого газа исходным.

Выбор модели столкновений существенно влияет на точность моделирования и трудоемкость вычислений. Ранние реализации метода ПСМ основывались на модели взаимодействия твердых сфер (Hard Sphere, HS) [10]. Модель обеспечивает пропорциональность коэффициентов переноса квадратному корню температуры. Однако получаемая при использовании этой модели зависимость вязкости от температуры отличается от экспериментальных наблюдений. Модель переменной твердой сферы (Variable Hard Sphere, VHS), представленная в монографии [1], обеспечивает возможность получения более корректной зависимости изменения коэффициента вязкости от температуры. В модели переменной мягкой сферы (Variable Soft Sphere, VSS) [1, 3] закон рассеяния, применяемый в модели VHS, получил несколько измененный вид за счет использования параметра рассеяния α, что позволило воспроизводить в дополнение к коэффициенту вязкости заданный коэффициент диффузии. Указанные модели не учитывают силу притяжения между молекулами на больших расстояниях. Для моделирования упругих столкновений доступны модели с более высокой точностью, но они нашли ограниченное применение в ПСМ из-за дополнительной сложности и вычислительных требований [11 – 13]. В последние годы разрабатываются подходы для моделирования в рамках ПСМ более реалистичного с точки зрения физики процесса межмолекулярного потенциала Леннарда – Джонса [14, 15]. Альтернативой рассмотренным выше моделям является использование потенциалов, полученных на базе основных физических принципов (потенциалы ab initio (AI)). В настоящее время потенциалы AI доступны для всех благородных газов, практически для всех их смесей, и ведется работа по оптимизации расчетов с их использованием [16, 17].

Каждая модификация модели взаимодействия молекул требует верификации путем сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными или с теоретическими результатами, полученными другими методами. В кинетической теории газов одним из критериев для оценки модели является ее способность воспроизводить для моделируемых течений газа корректные коэффициенты переноса (вязкости, диффузии и теплопроводности) в широком диапазоне температур. В настоящее время наиболее часто применяемыми являются три модели столкновений: HS, VHS и VSS.

Целью представленной работы являлось исследование возможностей VSS-модели. Она содержит три параметра, которые позволяют воспроизводить при моделировании заданные коэффициенты диффузии и вязкости. Отметим, что обычно параметры VSS-модели выбирают на основе зависимости коэффициента вязкости газа от температуры [1]. Однако для реальных газов зависимости коэффициентов вязкости и теплопроводности от температуры могут существенно отличаться, поэтому такой выбор параметров модели может приводить к погрешностям при вычислении тепловых потоков. В представленной работе проведено исследование влияния параметров VSS-модели, выбранных исходя из зависимости от температуры коэффициентов вязкости и теплопроводности, на макропараметры течения, рассчитанные методом ПСМ.

Влияние параметров VSS-модели на результаты моделирования исследовалось на примере течения, возникающего при нагреве бесконечной проволочки в атмосфере покоящегося газа. В качестве покоящегося газа рассматривались гелий и аргон. Основной

интерес представляло пространственное распределение температуры и тепловой поток с проволочки в газ. Для оценки точности полученных результатов проведено их сравнение с результатами решения задачи теплопроводности.

Представленная статья состоит из введения, четырех разделов и заключения. Первый раздел включает краткое описание алгоритма ПСМ и формулы, используемые для вычисления параметров VSS-модели. Во втором разделе приведена формулировка физической постановки моделируемой задачи, в третьем — постановка задачи теплопроводности. Четвертый раздел содержит результаты расчетов и их анализ.

1. Метод ПСМ и параметры VSS-модели

В основе алгоритма метода ПСМ лежит расщепление непрерывного движения частиц и их столкновений на два последовательных этапа, определяемых временным интервалом Δt.

Этап 1. Все частицы перемещаются на расстояние, определяемое их скоростями и временем Δt. Проводятся определенные действия, если частицы пересекают граничные поверхности.

Этап 2. Моделируются столкновения между частицами, соответствующие интервалу Δt. Скорости частиц до столкновения заменяются скоростями, приобретенными ими после столкновения.

При этом моделируемый объем физического пространства разбивается на ячейки и в каждой ячейке моделируется некоторое количество частиц. Изменение времени проводится дискретными шагами Δt, малыми по сравнению со средним временем между столкновениями частиц. На каждом временном шаге выполняется суммирование информации, необходимой для вычисления макропараметров течения газа. В ходе моделирования вычисляются макропараметры течения: числовая плотность, скорость, поступательная температура и тепловой поток.

Широко используемый приближенный подход к представлению зависимости коэффициентов вязкости, диффузии и теплопроводности от температуры имеет вид степенной функции:

$$\mu = \mu_{\text{ref}} (T/T_{\text{ref}})^{\omega 1}, \quad D = D_{\text{ref}} (T/T_{\text{ref}})^{\omega 2}, \quad \lambda = \lambda_{\text{ref}} (T/T_{\text{ref}})^{\omega 3}, \tag{1}$$

здесь μ_{ref}, D_{ref}, λ_{ref} — соответственно значения (экспериментальные или теоретические) коэффициентов вязкости, диффузии и теплопроводности при температуре T_{ref}. Причем показатели степени $\omega 1$, $\omega 2$, $\omega 3$ для реальных газов могут быть различными.

VSS-модель определяется тремя параметрами [1]:

— базовым диаметром частицы d_{ref} при выбранной температуре T_{ref};

— показателем степени ω;

— параметром α, определяющим степенной закон распределения для косинуса угла отклонения после столкновения.

В этом случае полное сечение столкновения пропорционально степени $(1 - 2\omega)$ относительной скорости сталкивающихся частиц. Коэффициенты переноса такого газа зависят от температуры по степенному закону с заданным показателем степени ω.

Алгоритм выбора параметров VSS-модели для конкретного газа следующий [1]. Для VSS-модели принято, что показатель степени ω определяется по коэффициенту вязкости [1]. Далее выбирается базовая температура T_{ref}. По данным о коэффициентах вязкости и диффузии при T_{ref} вычисляется α:

$$\mu_{\text{ref}}/(D_{\text{ref}}\rho) = (2+\alpha)/((3/5)\cdot(7-2\omega)\cdot\alpha). \quad (2)$$

Затем определяется диаметр частицы d_{ref}:

$$d_{\text{ref}} = (5(\alpha+1)(\alpha+2)(mkT_{\text{ref}}/\pi)^{1/2}/(4\alpha(5-2\omega)(7-2\omega)\mu_{\text{ref}}))^{1/2}, \quad (3)$$

здесь ρ — плотность газа, m — его молекулярная масса, k — постоянная Больцмана.

2. Физическая постановка задачи

Предполагается, что цилиндр бесконечной длины, нагретый до температуры T_w, помещается в газовую атмосферу (рис. 1). Такая постановка задачи относится к классическим в области газовой динамики, интерес к ней объясняется широким использованием проволочек в различных практических приложениях. В частности, нагретые проволочки применяются для активации газов в методе газофазного осаждения (метод HFCVD (Hot Filament Chemical Vapor Deposition)) [18–20]. Другое направление их использования связано с проведением измерений макропараметров течений газа [21, 22], теплопроводности газов [23, 24], коэффициентов аккомодации [25–27], а также измерений, связанных с процессами рекомбинации и диссоциации [28–31].

В представленной работе диаметр цилиндра $D = 2R_w = 0{,}003$ м, $T_w = 2360$ K. На расстоянии $R_1 = 0{,}006$ м от поверхности цилиндра располагается цилиндрическая поверхность, на которой моделируется невозмущенное состояние газа (давление $P_0 = 20$ Торр, температура $T_0 = 1040$ K) (рис. 1). Для проведения исследования использовался одномерный алгоритм метода ПСМ [31]. Решалась стационарная задача. Процесс взаимодействия частиц газа с поверхностью с обменом импульсом и энергией описывался с помощью модели зеркально-диффузного отражения [1], определяемой коэффициентом аккомодации K_a. Выбор параметров алгоритма ПСМ осуществлялся согласно рекомендациям [6, 32].

Данное исследование ориентировано на область высоких температур, характерных для метода химического осаждения из газовой фазы с горячей нити (HFCVD) алмазных пленок [19, 28, 29, 33]. Поэтому параметры задачи (диаметр проволочки, давление и температуры) взяты из работ [33, 34]. Отметим, что в нашем случае выбор конкретных значений параметров задачи не является принципиальным. Исследование проводилось для двух газов: гелий и аргон. Коэффициенты аккомодации были взяты для гелия $K_a = 0{,}4$, для аргона — $K_a = 1{,}0$.

В табл. 1 приведены показатели степени ω зависимости коэффициентов вязкости и теплопроводности от температуры для рассматриваемых газов. Можно заметить, что и у гелия, и у аргона показатели степени ω для коэффициентов вязкости и теплопроводности отличаются, причем отличие разнонаправленное.

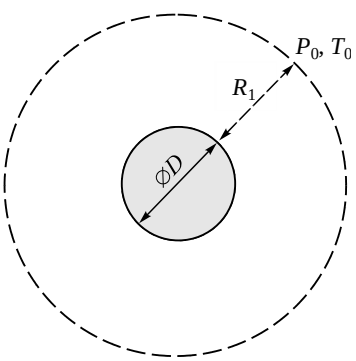

Рис. 1. Расчетная область.

Из кинетической теории газов известна формула, связывающая коэффициенты теплопроводности и вязкости:

$$\lambda = \mu k(9\gamma - 5)/(4m(\gamma - 1)), \quad (4)$$

здесь γ — отношение удельных теплоемкостей.

На рис. 2 представлены зависимости от температуры коэффициента теплопроводности λ, полученные

Таблица 1

Показатели степени ω зависимости коэффициентов вязкости и теплопроводности от температуры для He и Ar

Показатели степени ω \ Газ	He	Ar
Значение ω для коэффициента вязкости [1]	0,66	0,81
Значение ω для коэффициента теплопроводности [35]	0,71	0,65

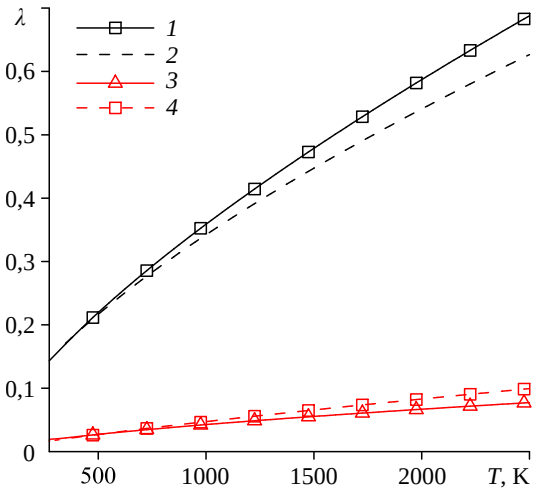

Рис. 2. Зависимости от температуры коэффициента теплопроводности λ (вт/(м·град)), полученные по данным работы [35] и в результате вычислений по формуле (4) через коэффициент вязкости.
Данные работы [35] : *1* — He, *3* — Ar; результаты вычислений (4): *2* — He, *4* — Ar.

по данным работы [35] и вычисленные по формуле (4) через коэффициент вязкости для гелия и аргона. Можно заметить различие в данных [35] и рассчитанных по формуле (4). Возникает вопрос, насколько это различие существенно при моделировании методом ПСМ состояния газа. Для сравнения и оценки влияния показателя степени ω на результаты ПСМ-расчетов была построена VSS-модель с использованием ω из зависимости от температуры коэффициента теплопроводности (табл. 1). Также для сравнения была использована модель VSS, предложенная в работе [15] для моделирования течений газа в широком диапазоне температур от 20 до 2200 K.

3. Постановка задачи теплопроводности

Для оценки точности полученных методом ПСМ результатов решалось уравнение теплопроводности в цилиндрической постановке:

$$\partial(r\cdot\lambda(T)\partial T/\partial r)/(r\partial r) = 0. \qquad (5)$$

При этом использовались два варианта граничных условий:

— на поверхности проволочки задавался поток тепла Q_w, а на расстоянии R_1 от поверхности — температура газа;

— температура газа задавалась у поверхности проволочки и на расстоянии R_1 от поверхности.

Необходимые для постановки граничных условий значения потока тепла Q_w и температуры газа вблизи поверхности T_{gw} и на внешней границе T_{g0} брались из соответствующих ПСМ-расчетов. Далее для задачи теплопроводности с первым вариантом граничных условий будем использовать обозначение *QT*, а со вторым — *TT*. В первом случае в результате решения задачи теплопроводности получаем радиальное распределение температуры. Во втором — радиальное распределение температуры и поток тепла *Q*.

Задача решалась методом установления. Рассматривалось два варианта коэффициента теплопроводности: вычисленного по формуле (4) и из работы [35]. Далее в обозначениях *QT* и *TT* нижние индексы 1 и 2 будем использовать для обозначения результатов расчетов с первым и вторым вариантами значений коэффициента теплопроводности.

4. Результаты расчетов

В табл. 2 приведены параметры VSS-моделей для гелия и аргона. Параметры первой VSS-модели взяты из [1], второй — рассчитаны по формулам (2) и (3) для выбранного ω, третьей — взяты из [15]. Значения μ_{ref}, D_{ref} для аргона и гелия при T_{ref} = 273 K также взяты из [1].

Далее для расчетов методом ПСМ с первой VSS-моделью будем использовать обозначение ПСМ_1, со второй — ПСМ_2, а с третьей — ПСМ_3. Полученные в этих расчетах значения плотности тепловых потоков обозначим соответственно q_1, q_2 и q_3. Для анализа полученных результатов будем применять формулу относительной погрешности вычисления величины плотности теплового потока:

$$\Delta^{(j)}(i) = |q^{(j)}(TT_i) - q_j| / q_j \cdot 100,$$

здесь j = 1, 2, 3 — номер VSS-модели в ПСМ-расчете, i = 1, 2 — вариант используемого при решении задачи теплопроводности коэффициента теплопроводности, $q^{(j)}(TT_i)$ — величина плотности теплового потока, рассчитанная при решении задачи теплопроводности TT для i-го варианта коэффициента теплопроводности и при использовании данных о радиальном распределении температуры и потоке тепла, полученных в ПСМ_j-расчете, для постановки соответствующих граничных условий.

На первом этапе проводилась проверка корректности сравнения результатов расчета методом ПСМ и путем решения задачи теплопроводности. Для этой цели было выполнено моделирование методом ПСМ с использованием первой модели VSS: рассчитаны радиальное распределение температуры и плотность теплового потока q. Далее решались задачи теплопроводности для двух коэффициентов теплопроводности и для двух вариантов постановки граничных условий.

На рис. 3 представлены радиальные распределения температуры, полученные методом ПСМ с использованием первой модели VSS и путем решения задач теплопроводности QT и TT. Видно, что оба подхода (ПСМ_1 и решение задачи теплопроводности) дают близкие распределения температуры при использовании первой VSS-модели и коэффициента теплопроводности, определенного по вязкости. Отметим, что при решении задачи теплопроводности для коэффициента теплопроводности [35] TT_2 также получено близкое распределение температуры.

В табл. 3 приведены значения теплового потока q_1, полученные методом ПСМ_1, значения плотности теплового потока $q^{(1)}(TT_1)$ и $q^{(1)}(TT_2)$, полученные при решении задач теплопроводности TT_1 и TT_2, а также относительная погрешность. Плотность теплового потока рассчитана в Вт/м^2.

Таблица 2

Параметры VSS-модели для гелия и аргона

Газ	Номер VSS-модели	T_{ref}, K	ω	α	d_{ref}, м
He	1	273	0,66	1,26	$2{,}30 \cdot 10^{-10}$
	2	273	0,71	1,30	$2{,}352 \cdot 10^{-10}$
	3	350	0,712	1,429	$2{,}298 \cdot 10^{-10}$
Ar	1	273	0,81	1,40	$4{,}11 \cdot 10^{-10}$
	2	273	0,65	1,27	$3{,}82 \cdot 10^{-10}$
	3	523,15	0,697	1,311	$3{,}5645 \cdot 10^{-10}$

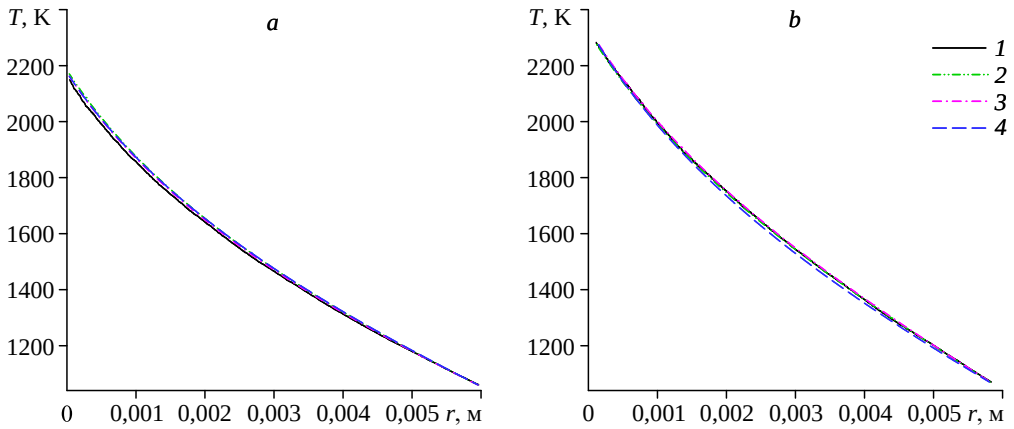

Рис. 3. Радиальные распределения температуры газов He (*a*) и Ar (*b*), полученные методом ПСМ и путем решения задач теплопроводности *QT* и *TT*.
1 — расчет $ПСМ_1$, *2, 3* — соответственно расчеты QT_1 и TT_1 с коэффициентом теплопроводности (4), *4* — расчеты TT_2 с коэффициентом теплопроводности из работы [35].

Таблица 3

Значения плотности теплового потока, полученные методом $ПСМ_1$ и в результате решения задач TT_1 и TT_2, и соответствующая относительная погрешность

Параметры / Газ	q_1	$q^{(1)}(TT_1)$	$\Delta^{(1)}(1)$	$q^{(1)}(TT_2)$	$\Delta^{(1)}(2)$
He	215544	215088	0,2 %	231000	7,2 %
Ar	37912,3	38596,5	1,8 %	31905,3	15,8 %

Отметим, что значения q_1 близки к значениям $q^{(1)}(TT_1)$, полученным при решении задачи теплопроводности с коэффициентом теплопроводности, вычисленным по формуле (4) через коэффициент вязкости. Это свидетельствует о согласованности используемых методов. Однако наблюдается явное расхождение между результатами расчетов плотности теплового потока методом $ПСМ_1$ и решением задачи теплопроводности TT_2.

На втором этапе проводилась проверка корректности использования метода ПСМ с разными VSS-моделями. Были выполнены расчеты с первой VSS-моделью ($ПСМ_1$), со второй VSS-моделью ($ПСМ_2$) и с третьей VSS-моделью ($ПСМ_3$).

На рис. 4 представлены радиальные распределения температуры, полученные методом ПСМ для рассматриваемых VSS-моделей. Отметим, что, несмотря на использование разных VSS-моделей, радиальные распределения температуры достаточно хорошо совпадают, особенно для гелия.

Полученные данные о радиальном распределении температуры и плотностях теплового потока q_1, q_2 и q_3 были использованы при решении задачи теплопроводности для коэффициента теплопроводности [35] как наиболее реалистичного физически.

На рис. 5 представлены радиальные распределения температуры, полученные методом $ПСМ_1$ и с помощью решения задачи теплопроводности QT_2. Отметим, что для гелия эти распределения достаточно хорошо совпадают для всех проведенных расчетов. Для аргона использование второй и третьей моделей VSS позволило уменьшить разницу между распределениями температуры, полученными методом $ПСМ_1$ и с помощью решения QT_2.

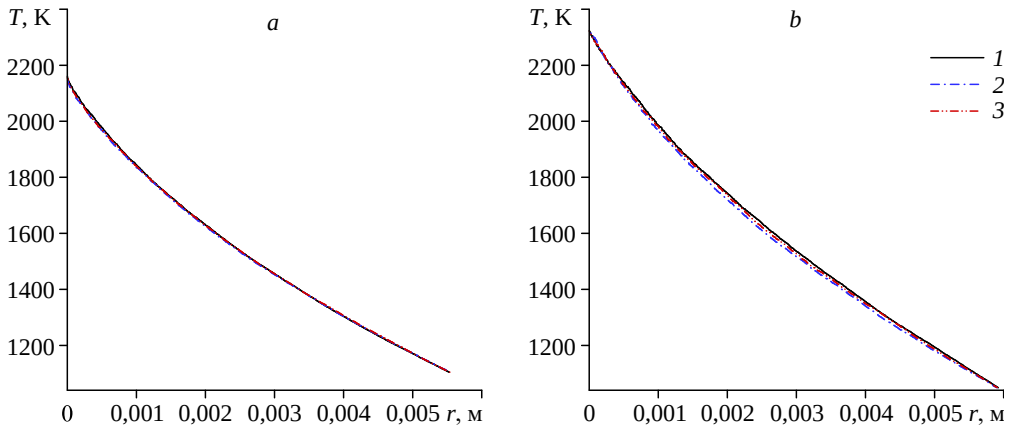

Рис. 4. Радиальные распределения температуры газов He (*a*), и Ar (*b*), полученные методом ПСМ.

1 — расчет для первой модели VSS, *2* — расчет для второй модели VSS, *3* — расчет для третьей модели VSS.

В табл. 4 приведены соответствующие значения плотности теплового потока и их относительная погрешность. Видно, что для гелия использование второй и третьей VSS-моделей позволило существенно уменьшить погрешность в оценке плотности теплового потока. Для аргона результаты расчета по второй и третьей VSS-моделям показали уменьшение погрешности в оценке плотности теплового потока соответственно примерно в 2 и 3 раза.

Проведенный анализ показал, что использование метода ПСМ может приводить к погрешности при оценке плотности теплового потока в случае применения VSS-моделей, построенных на основе вязкости и диффузии. Поэтому для получения корректных данных о тепловом потоке при моделировании методом ПСМ при использовании VSS-модели требуется анализ зависимости от температуры коэффициентов вязкости и теплопроводности для выбранного газа. При большой разнице показателей степени ω для получения корректных данных о тепловом потоке необходимо уточнение параметров VSS-модели или использование более сложных моделей столкновений.

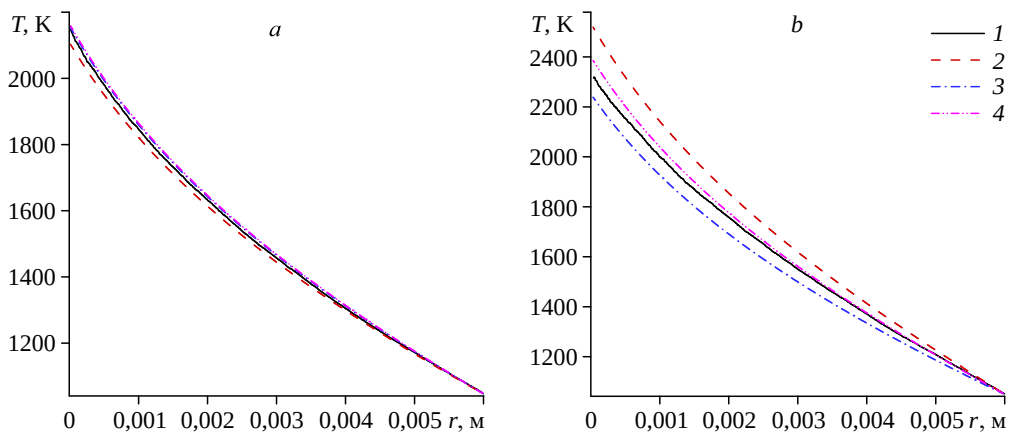

Рис. 5. Радиальные распределения температуры газов He (*a*) и Ar (*b*), полученные методом ПСМ_1 и при решении задачи теплопроводности QT_2.

1 — расчет методом ПСМ для первой модели VSS, *2–4* — решение $QT_2(q_j)$ с граничными условиями из расчета ПСМ_j ($j = 1, 2, 3$).

Таблица 4

Значения плотности тепловых потоков и соответствующая относительная погрешность, полученные с помощью метода ПСМ и TT_2

Метод и параметры / Газ	$ПСМ_1$			$ПСМ_2$			$ПСМ_3$		
	q_1	$q^{(1)}(TT_2)$	$\Delta^{(1)}(2)$	q_2	$q^{(2)}(TT_2)$	$\Delta^{(2)}(2)$	q_3	$q^{(3)}(TT_2)$	$\Delta^{(3)}(2)$
He	215544	231000	7,2%	228246	228632	0,2 %	229754	230228	0,2%
Ar	37912,3	31905,3	15,8%	29157,9	32000,0	9,7 %	33666,7	32052,6	4,8%

К похожему выводу пришли авторы публикаций [14, 15]. В работе [14] проводилось исследование влияния моделей межмолекулярного взаимодействия с помощью анализа вязкости и теплопроводности при решении методом ПСМ задач Куэтта и Фурье для аргона. Сравнивались модель VSS и потенциал Леннарда – Джонса. Было показано, что потенциал Леннарда – Джонса более точно описывает вязкость и теплопроводность, чем модель VSS. В работе [15] для ряда газов были найдены параметры VSS-модели, минимизирующие погрешность искомых коэффициентов вязкости и диффузии в широком диапазоне температур. Для разных температур проводилось сравнение полученных для VSS-моделей коэффициентов вязкости и теплопроводности с экспериментальными данными. В частности, было показано, что правильный подбор параметров VSS-модели значительно повышает точность прогнозирования коэффициента теплопроводности.

Заключение

В настоящей работе использовались метод ПСМ и численное решение задачи теплопроводности для расчета радиального распределения температуры и теплового потока в задаче нагрева окружающего газа горячей проволочкой бесконечной длины. В качестве моделируемого газа рассматривались гелий и аргон. Сравнение теплового потока и радиального распределения температуры, полученных методом ПСМ и при решении задачи теплопроводности, показало, что использование VSS-модели с параметрами, основанными на вязкости и диффузии, может приводить к погрешности при оценке методом ПСМ теплового потока с проволочки в окружающий газ.

Предложена VSS-модель, основанная на учете зависимости коэффициента теплопроводности от температуры. Установлено, что использование данной модели с параметрами, учитывающими теплопроводность, позволяет снижать погрешность оценки теплового потока методом ПСМ.

Выполнены расчеты для VSS-модели, предложенной в работе [15] для моделирования течений газа в диапазоне температур от 20 до 2200 K. Показано, что эта VSS-модель также позволила снизить погрешность в оценке теплового потока методом ПСМ.

Проведенное исследование продемонстрировало влияние параметров выбираемой модели столкновений на результаты расчетов методом ПСМ теплового потока в разреженном газе.

Список литературы

1. **Bird G.A.** Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 458 p.
2. **Иванов М.С., Рогазинский С.В.** Метод прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа. Новосибирск: ВЦ СО РАН, 1988. 117 с.
3. **Koura K., Matsumoto H.** Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard–Jones potential // Phys. Fluids A. 1991. Vol. 3, No. 10. P. 2459–2465.
4. **Ivanov M.S., Kashkovsky A.V., Gimelshein S.F. et al.** SMILE system for 2D/3D DSMC computations // Proc. of 25th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics, St. Petersburg, Russia, 2006. P. 21–28.
5. **Gallis M.A., Torczynski J., Rader D., Bird G.A.** Convergence behavior of a new DSMC algorithm // J. Comput. Phys. 2009. Vol. 228. P. 4532–4548.

6. Plotnikov M.Yu., Shkarupa E.V. Theoretical and numerical analysis of approaches to evaluation of statistical error of the DSMC method // Comput. Fluids. 2014. Vol. 105. P. 251–261.

7. Molchanova A.N., Kashkovsky A.V., Bondar Ye.A. Surface recombination in the direct simulation Monte Carlo method // Phys Fluids. 2018. Vol. 30. P. 107105-1–107105-16.

8. Jaiswal S., Pikus A., Strongrich A. et al. Quantification of thermally-driven flows in microsystems using Boltzmann equation in deterministic and stochastic contexts // Phys. Fluids. 2019. Vol. 31. P. 082002-1–082002-27.

9. Stefanov S.K. On the basic concepts of the direct simulation Monte Carlo method // Phys Fluids. 2019. Vol. 31. P. 067104-1–067104-17.

10. Bird G. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. P. 1518–1519.

11. Kim J.G., Kwon O.J., Park C. Modification and expansion of the generalized soft-sphere model to high temperature based on collision integrals // Phys. Fluids. 2008. Vol. 20. P. 017105-1–017105-14.

12. Jaiswal S., Sebastiao I.B., Alexeenko A.A. DSMC-SPARTA implementation of M-1 scattering model // Proc. of 31st Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conf. Proc. 2019. Vol. 2132. P. 070023-1–070023-11.

13. Горелов С.Л., Русаков С.В. Модель шероховатых сферических молекул переменного диаметра // Матем. моделирование. 1997. Т. 9, № 10. С. 43–49.

14. Weaver A.B., Alexeenko A.A. Effect of molecular models on viscosity and thermal conductivity calculations // Proc. of 29th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conf. Proc. 2014. Vol. 1628. P. 115–122.

15. Weaver A.B., Alexeenko A.A. Revised variable soft sphere and Lennard-Jones model parameters for eight common gases up to 2200 K // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2015. Vol. 44. P. 023103-1–023103-14.

16. Sharipov F. Direct simulation Monte Carlo method based on ab initio potential: Recovery of transport coefficients of multi-component mixtures of noble gases // Phys. Fluids. 2022. Vol. 34. P. 097114-1–097114-15.

17. Sharipov F. Ab initio modelling of transport phenomena in multi-component mixtures of rarefied gases // Intern. J. Heat and Mass Transfer 2024. Vol. 220. P. 124906-1–124906-10.

18. Matsumura H., Masuda A., Umemoto H. Present status and future feasibility for industrial implementation of Cat-CVD (Hot-Wire CVD) technology // Thin Solid Films. 2006. Vol. 501. P. 58–60.

19. May P.W. Diamond thin films: a 21st-century material // Philos. Trans. Rog. Soc. London. Ser A. 2000. Vol. 358. P. 473–495.

20. Rebrov A.K., Maltsev R.V., Safonov A.I., Timoshenko N.I. Activated gas jet deposition // Thin Solid Films. 2011. Vol. 519. P. 4542–4544.

21. Lomas C. Fundamentals of hot wire anemometry. Cambridge University Press, 1986. 224 p.

22. Лебига В.А. Термоанемометрия сжимаемых потоков. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1997. 70 с.

23. Springer G.S.,Wingeier E.W. Thermal conductivity of neon, argon, and xenon at high temperatures // J. Chem. Phys. 1973. Vol. 59, No. 5. P. 2747–2750.

24. Roder H.M., Perkins R.A., Laesecke A. Absolute steady-state thermal conductivity measurements by use of a transient hot-wire system // J. Research of the National Institute of Standards and Technology. 2000. Vol. 105, No. 2. P. 221–253.

25. Zampella C., Lane M., Nacer M.H., Greiner M. Measurement of the thermal accommodation coefficient between helium and a stainless steel surface // Proc. of 19th Intern. Symp. on the Packaging and Transportation of Radioactive Materials PATRAM 2019. 2019, New Orleans, USA. P. 1–10.

26. Sheldon D.B., Springer G.S. Experimental study of rarefied argon contained between concentric cylinders // Phys. Fluids. 1968. Vol. 11. P. 1312–1320.

27. Морозов А.А., Плотников М.Ю., Ребров А.К., Тимошенко Н.И., Шишкин А.В. Аккомодация поступательной и вращательной энергии газа при свободномолекулярном обтекании тонкой проволоки // Журн. эксперим. и теорет. физики. 2003. Т. 124, вып. 4. С. 820–828.

28. Comerford D.W., Smith J.A., Ashfold M.N.R., Mankelevich Yu.A. On the mechanism of H atom production in hot filament activated H_2 and CH_4/H_2 gas mixtures // J. Chem. Phys. 2009. Vol. 131. P. 044326-1–044326-12.

29. Mankelevich Yu.A., Ashfold M.N.R., Umemoto H. Molecular dissociation and vibrational excitation on a metal hot filament surface // J. Phys. D: Appl. Phys. 2014. Vol. 47. P. 025503-1–025503-11.

30. Plotnikov M.Yu., Shkarupa E.V. DSMC simulation of two-step dissociation-recombination of hydrogen on tantalum surface // Comput. Fluids. 2021. Vol. 214. P. 104778-1–104778-11.

31. Плотников М.Ю., Шкарупа Е.В. Использование теплового баланса для оценки константы скорости диссоциации водорода на поверхности тантала // Теплофизика и аэромеханика. 2021. Т. 28, № 4. С. 591–598.

32. Плотников М.Ю., Шкарупа Е.В. Оценка погрешности и оптимизация метода прямого статистического моделирования с учетом пространственной регуляризации // Журнал вычислит. математики и математ. физики. 2023. Т. 63, № 8. С. 1367–1379.

33. Redman S.A., Chung C., Rosser K.N., Ashfold M.N.R. Resonance enhanced multiphoton ionisation probing of H atoms in a hot filament chemical vapour deposition reactor // Phys. Chem. Chem. Phys. 1999. Vol. 1. P. 1415–1424.

34. Plotnikov M.Yu., Shkarupa E.V. DSMC simulation of hydrogen dissociation on wire surface in resting gas // J. Phys: Conf. Ser. 2019. Vol. 1382. P. 012166-1–012166-6.

35. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. 2 изд. М.: Наука, 1972. 721 с.

Статья поступила в редакцию 27 ноября 2024 г.,
принята к публикации 5 декабря 2024 г.