УДК 532.13, 536.2, 538.9

# Новый метод молекулярного моделирования коэффициентов переноса жидкостей<sup>\*</sup>

## В.Я. Рудяк, Е.В. Лежнев

Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

E-mail: Valery.rudyak@mail.ru; lionlev@yandex.ru

В работе представлен метод молекулярного моделирования коэффициентов переноса жидкостей, являющийся альтернативой методу молекулярной динамики. Коэффициенты переноса определяются с помощью флуктуационно-диссипационных теорем. Динамика молекул рассчитывается стохастически, причем межмолекулярные силы задаются с помощью созданной базы данных межмолекулярных сил. Построена функция распределения межмолекулярных сил и получена формула для ее аналитической аппроксимации. Эффективность метода продемонстрирована на примере расчета коэффициентов вязкости и теплопроводности жидких аргона и бензола. Полученные данные сопоставлены с данными экспериментов и молекулярно-динамического моделирования, установлено их хорошее согласование. Показано, что при сопоставимой точности моделирования развиваемый метод оказывается существенно более экономичным по времени по сравнению с методом молекулярной динамики.

Ключевые слова: вязкость, жидкость, коэффициенты переноса, молекулярное моделирование, стохастическое моделирование, теплопроводность.

#### Введение

В обычных условиях для описания и моделирования течений жидкостей вполне достаточно использовать методы механики сплошных сред, в частности, уравнения Навье – Стокса. Однако применение этих уравнений требует знания коэффициентов переноса: диффузии, вязкости, теплопроводности и т.д. Эти коэффициенты в общем случае являются функциями температуры, плотности и давления. В отсутствие последовательной теории процессов переноса в жидкостях фактически единственным источником соответствующей информации является эксперимент и различные экспериментальные или другие полуфеноменологические корреляции (см. например, [1]).

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup> Работа выполнена при поддержке мегагранта Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-575).

Строгие формулы для коэффициентов переноса были получены методами неравновесной статистической механики [2-4]. Формально они применимы для любой системы частиц, включая простые и дисперсные жидкости. Однако их использование требует умения рассчитывать эволюцию этих частиц. Сделать это для жидкостей не удается, поскольку необходимо решить аналитически задачу взаимодействия многих частиц. По этой причине необходимо использовать те или иные методы молекулярного моделирования. Фактически единственным пригодным для этой цели до настоящих пор является метод молекулярной динамики (МД) [3, 5-8]. Этот метод, возникший более пятидесяти лет тому назад, с успехом применяется для решения различных задач физики, механики, биологии и химии. Однако известным его недостатком является большая ресурсоемкость. Кроме того, строго говоря, он не моделирует ньютоновских траекторий исследуемой системы частиц [3, 7, 8]. Этот метод практически неприменим и для моделирования процессов переноса в разреженных газах из-за необходимости учета информации об огромном числе молекул в расчетах.

В работах авторов [9–11] был развит метод стохастического молекулярного моделирования (СММ) коэффициентов переноса разреженных газов. Фазовые траектории молекул в этом методе рассчитывались стохастически. В этом смысле он идеологически близок известному методу Берда [12, 13], с помощью которого решаются различные задачи динамики разреженного газа. Метод СММ позволил с высокой точностью моделировать коэффициенты переноса как одноатомных, так и многоатомных газов [14, 15]. Затем он был обобщен для моделирования коэффициентов переноса в стесненных условиях, и с его помощью впервые была систематически изучена анизотропия газов [16–19]. Метод СММ оказался достаточно простым, однако применим для газов, где имеют место лишь парные соударения, для которых разработана кинетическая теория. Благодаря этой теории удается без затруднений определять вероятность соударения молекул [20, 21] и затем имитировать их динамику.

В жидкостях, в отличие от разреженных газов, взаимодействие молекул всегда коллективное. Расчет с достаточно высокой точностью коэффициентов переноса плотных газов и жидкостей требует информации о десятках тысяч молекул. Если же речь идет о сложных флюидах, например, о наножидкостях, то необходимо использовать сотни тысяч или миллионы молекул. Наконец, для молекулярного моделирования в последние годы открылось новое важное поле применения: описание процессов переноса и течений флюидов в наноканалах и нанопористых средах. Применение для этой цели метода молекулярной динамики в настоящее время в большинстве случаев пока бесперспективно, поскольку требует огромного числа молекул. Чрезвычайно актуально поэтому создание метода, который бы, с одной стороны, сохранил основное достоинство метода молекулярной динамики — расчет свойств переноса, исходя из обработки фазовых переменных рассматриваемой системы (координат и скоростей всех ее частиц), а с другой, был бы значительно более экономичным и эффективным. Создание метода молекулярного моделирования коэффициентов переноса жидкостей, альтернативного методу молекулярной динамики, и является целью настоящей работы. Идея такого метода была сформулирована в работе [22]. В представленной статье предлагается дальнейшее развитие этой идеи, которое позволяет сформулировать уже достаточно замкнутый метод. Работоспособность предлагаемого метода, который в дальнейшем также будет называться методом СММ, проверяется на расчете коэффициентов переноса нескольких простых жидкостей.

#### 1. Идея метода СММ и база данных межмолекулярных сил

Неравновесная статистическая механика выработала наиболее общий подход к описанию процессов переноса. В частности, было установлено, что коэффициенты переноса определяются флуктуационно-диссипационными теоремами (ФДТ):

$$\mu_{1} = \int_{0}^{\tau_{p}} \mathrm{d}t_{1}\chi_{i}(t, t-t_{1}), \tag{1}$$

которые связывают коэффициенты переноса  $\mu_i$  (диффузии, вязкости, теплопроводности и т.д.) с эволюцией двувременных корреляционных функций  $\chi_i$  соответствующих динамических переменных. Эти соотношения известны как формулы Грина–Кубо (см., например, работы [2–6]). В формуле (1)  $\tau_p$  — это так называемое платовое значение эволюции коэффициентов переноса. Собственно, по достижении этого времени и получается экспериментально измеримое значение коэффициента переноса [23].

Расчет корреляционных функций требует знания динамических переменных системы в последовательные моменты времени на промежутке [0,  $\tau_{\rm n}$ ]. В методе МД для получения систематической информации о фазовых переменных системы (скоростях  $v_i$ и координатах  $\mathbf{r}_i$  всех молекул) решается система уравнений Ньютона. Сложность реализации метода МД и сопряжена главным образом с необходимостью решать эти уравнения. Конечно, ситуация существенно упростится, если вместо необходимости определения на каждом шаге сил, действующих на молекулу *i*, появится инструмент задания этих сил. Исходным пунктом для построения такого инструментария является гипотеза о некоторой универсальности в среднем сил, действующих на каждую молекулу. На это, в частности, указывает наличие ближнего порядка в жидкости, существование устойчивых координационных чисел, различные модели самосогласованного поля для нейтральной жидкости и т.д. Гипотеза эта кажется тем разумнее, что взаимодействие молекул в жидкости является многочастичным. На каждую молекулу действует некоторая усредненная сила. Конечно, эта сила будет зависеть от типа жидкости, то есть от параметров межмолекулярных потенциалов, и от температуры. Для того чтобы силы можно было бы задавать тем или иным способом на каждом шаге, необходимо иметь соответствующую базу данных. Такая база данных должна включать для заданной молекулярной системы все возможные значения межмолекулярных сил. В принципе, ее можно создать методом МД. И это является первым шагом построения метода СММ для описания процессов переноса в жидкостях.

В представленной работе база данных межмолекулярных сил строилась с использованием метода МД. Выбиралась некоторая молекулярная система с некоторой плотностью жидкости. Межмолекулярное взаимодействие задавалось потенциалом Леннарда – Джонса:

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \sigma/r \right)^{12} - \left( \sigma/r \right)^{6} \right],$$
<sup>(2)</sup>

параметры которого варьировались в широких пределах.

При моделировании в файле базы данных сохраняются значения сил, действующих на каждую молекулу в последовательные моменты времени. База данных построена с использованием стандартного пакета LAMMPS [24]. В ячейке моделирования содержалась информация о 64000 молекулах при атмосферном давлении и заданной температуре. Расчет начинался после некоторого начального релаксационного процесса для достижения равновесия в системе, которое проверялось различными способами, в частности, распределение молекул по скоростям должно было быть максвелловским. Уравнения Ньютона решались с использованием схемы Верле. Также использовался NVT-ансамбль, хотя для определения объема ячейки применялся и NPT-ансамбль.

При заданных параметрах потенциала (2) и температуре база данных содержит около 200 млн значений сил, действующих на молекулу. Эта база данных была представлена в работе [22]. Ее можно использовать непосредственно, но для оптимизации расчетов была построена соответствующая функция распределения. Пример такой функции распределения сил *P* для жидкого аргона при атмосферном давлении и температуре T = 87 К приведен на рис. 1 (сплошная линия). Здесь сила, действующая на молекулу *i*, задана в единицах Ккал/моль-Å или в ньютонах:  $F_{i\gamma} \cdot 1,984 \cdot 10^{-12}$  H (y = x, y, z). Функция распределения построена с шагом 0,00344 в диапазоне от – 10 до 10. Таким образом, «хвосты» функции распределения позволяет в любой момент времени «разыграть» силы, действующие на молекулу, и тем самым последовательно имитировать динамику системы. Во всех случаях с достаточно высокой точностью (около 3 %) полученные распределения аппроксимируются функцией гиперболического тангенса

$$P = \left[ \operatorname{th} \left( a F_{i\gamma} \right) + 1 \right] / 2, \tag{3}$$

где *а* — некоторый параметр. На рис. 1 эта функция при *a* = 1 представлена штриховой линией.

Функция распределения (3) дает хороший и достаточно простой рецепт определения сил, действующих на каждую молекулу моделируемой жидкости в конкретный момент времени. Однако база данных, пример использования которой приведен на рис. 1, была создана на основе двух простых жидкостей — аргона и криптона. Вместе с тем полученные силы будут зависеть от типа жидкости, то есть от параметров межмолекулярных потенциалов (2), и от температуры. Для использования базы данных межмолекулярных сил на практике необходима ее определенная универсальность. Для этого требуется найти зависимость параметра *a* в (3) и от температуры, и от параметров потенциала (2). С этой целью были выполнены систематические МД-расчеты, в которых варьировались параметры потенциала (2) и температура. Параметр  $\sigma$  изменялся от 0,170 до 0,681 нм, параметр  $\varepsilon/k$  — от 60 до 480 K, а температура — от 43,5 до 400 K. В результате получилось чуть больше 100 расчетов со значениями сил 200 миллионов в каждом. По каждому из этих расчетов были построены функции распределения сил. Таким образом, в базе данных содержится около 20 миллиардов значений сил.





При варьировании параметров потенциала (2) и температуры было установлено, что значения *a* в (3) непрерывно меняются в зависимости от указанных величин. Часть полученных данных иллюстрирует рис. 2a-2c. Здесь фрагментам рисунка a-c соответствуют значения параметра  $\sigma$ , равные 0,1705, 0,3405 и 0,681 нм. Чтобы найти соответствующую функциональную зависимость, были выполнены серии расчетов изменения параметра *a* в зависимости от  $\varepsilon$  и *T* при фиксированных  $\sigma$ . Множество полученных точек были затем с помощью метода наименьших квадратов аппроксимированы поверхностями  $\ln(a) = b - c - dT$ , где *b*, *c* и *d* — некоторые константы. Пример полученной таким образом зависимости для  $\sigma = 0,681$  приведен на рис. 3.

Далее при изучении зависимости *a* от  $\sigma$  было установлено, что  $a(\sigma) \sim \sigma^k$ , где k — некоторая константа. В результате для параметра *a* получена следующая зависимость от  $\varepsilon$ ,  $\sigma$  и *T*:



*Рис. 3.* Зависимость параметра  $\ln(a)$  от температуры и параметра  $\varepsilon$  из потенциала (2) при  $\sigma = 0,681$  нм.

$$a(\varepsilon, T, \sigma) = \sigma^{2,062} \exp(1,665 - 0,003637\varepsilon - 0,0014T).$$
(4)

Формула (4) задает значения параметра *a*, а тем самым и распределения (3), зависящие от температуры и параметров потенциала Леннарда–Джонса. Таким образом, можно констатировать, что полученная база данных достаточно универсальна и применима для любых леннард–джонсоновских жидкостей.

### 2. Алгоритм метода СММ

Алгоритм метода СММ для жидкости в значительной степени формулируется так же, как и для разреженного газа в стесненных условиях [16–19]. Поскольку для расчета коэффициентов переноса достаточно смоделировать равновесное состояние системы, то начальная скорость молекул в ячейке моделирования «разыгрывается» по распределению Максвелла, а в пространстве частицы распределяются равномерно с заданной плотностью. Таким образом, в результате в начальный момент времени *t* заданы скорости и координаты всех молекул системы:  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$ ,  $\mathbf{v}_2$ ,...,  $\mathbf{r}_N$ ,  $\mathbf{v}_N$ . Затем выбирается некоторый интервал времени  $t_p$ , в течение которого будет выполняться расчет данного коэффициента переноса. Это время должно быть таким, чтобы корреляционная функция  $\chi_i$  в (1) затухла, т.е. это время должно быть порядка выхода соответствующего коэффициента переноса на платовое значение  $\tau_p$ . Затем время  $t_p$  разбивается на интервалы  $\tau_i = \sigma/v_{imax}(t)$ , где  $v_{imax}$  — максимальная по модулю скорость молекул в рассматриваемой системе в конкретный момент времени (на шаге i).

Расчет начинается с формирования списка динамических переменных для момента  $(t + \tau_1)$ , при этом следует учесть, что в данный момент времени должны измениться и скорости, и координаты всех молекул. Чтобы реализовать соответствующую процедуру, используется расщепление динамики по процессам. Сначала изменяется координата молекулы *i*:  $\mathbf{r}_i(t + \tau_i) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\tau_i$ , а затем ее скорость. Для определения скорости  $\mathbf{v}_i(t + \tau_1)$  с помощью распределения сил определяется действующая на молекулу *i* сила  $\mathbf{F}_i$ , а затем эта скорость изменяется по закону:  $\mathbf{v}_i(t + \tau_1) = \mathbf{v}_i(t) + \mathbf{F}_i(t)\tau_1$ . Описанная процедура реализуется для каждой молекулы системы, после чего она повторяется на каждом временном шаге до полного окончания времени расчета. В результате получается полная информация о всех динамических переменных системы в последовательные моменты времени. Используя эту информацию, можно рассчитать любые наблюдаемые системы. Полученные данные усредняются по *l* независимым фазовым траекториям, длительность каждой из которых равна  $t_p$ .

#### 3. Моделирование коэффициентов переноса

Поскольку основная цель работы состоит в создании алгоритма молекулярного моделирования процессов переноса, альтернативного методу МД, то точность моделирования проверялась преимущественно сопоставлением данных СММ-расчета с данными, полученными методом МД. В частности, ниже приводятся данные по расчету коэффициентов теплопроводности и вязкости двух жидкостей: одноатомной (аргона при температуре 87 К) и многоатомной (бензола ( $C_6H_6$ ) при температуре 288 К). Во всех случаях давление было атмосферным. Молекулярно-динамические расчеты были выполнены с помощью пакета LAMMPS. Как при использовании метода МД, так и метода СММ усреднение данных выполнялось по тысяче независимых фазовых траекторий, время расчета одной фазовой траектории равнялось 20 нс. В расчетах в том и в другом случаях рассматривалось 64000 молекул жидкости, что позволило получить методом МД достаточно высокую точность, которая проверялась путем сопоставления с экспериментальными данными.

Сложность молекулярного моделирования, в котором межмолекулярное взаимодействие описывается теми или иными потенциалами (например, (2)), определяется тем, что не существует универсальных параметров этих потенциалов. Для расчета различных свойств (коэффициентов переноса, уравнения состояния, фазового перехода и т.п.) необходимо использовать различные параметры. Однако дело в том, что сами эти параметры определяются по некоторым экспериментальным данным. Поэтому нельзя рассчитывать на успешное моделирование вязкости жидкости, применяя параметры потенциала, полученные по диффузии или по вязкости разреженного газа. Использовавшиеся в настоящей работе параметры потенциала (2) приведены в табл. 1. Здесь  $\eta$  и  $\lambda$  — соответственно коэффициенты вязкости и теплопроводности. Анализ таблицы показывает, что эти параметры для расчета вязкости и теплопроводности достаточно разнятся.

Коэффициент вязкости жидкости вычисляется с помощью ФДТ (1), которая в данном случае имеет вид:

$$\eta = \frac{V}{3T} \int_{0}^{\tau_{p}} \chi_{\mu}(0, t) dt = \int_{0}^{\tau_{p}} \left\langle \mathbf{J}_{2}(0) \mathbf{J}_{2}(t) \right\rangle dt, \qquad (5)$$
$$\mathbf{J}_{2} = \frac{1}{V} \sum_{i}^{N} \left( m \mathbf{v}_{i} \mathbf{v}_{i} + \frac{1}{2} \sum_{j=i}^{N} \mathbf{F}_{ij} \mathbf{r}_{ij} \right),$$

здесь  $J_2$  — микроскопический тензор напряжений,  $\chi_{\eta}$  — двухвременная автокорреляционная функция вязкости,  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ ,  $\mathbf{F}_{ij}$  — межмолекулярная сила. Кроме того, поскольку ниже будет рассматриваться лишь коэффициент динамической вязкости, то в формуле (5) следует сохранить только недиагональные члены.

Коэффициент теплопроводности имеет подобный вид и вычисляется следующим образом:

$$\lambda = \frac{V}{3T^2} \int_0^{\tau_p} \chi_\lambda(0, t) dt = \int_0^{\tau_p} \langle \mathbf{J}_2(0) \, \mathbf{J}_2(t) \rangle dt, \qquad (6)$$
$$\mathbf{J}_2 = \frac{1}{V} \sum_i^N \left[ \mathbf{v}_i e_i + \frac{1}{2} \sum_{j=i}^N \mathbf{r}_{ij} \left( \mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{v}_j \right) \right],$$

где *e*<sub>*i*</sub> — полная энергия молекулы *i*.

Результаты расчетов коэффициентов вязкости (мПа·с) и теплопроводности (мВт/(м·К)) методом СММ и их сопоставление с данными, полученными методом МД,

Таблица 1

Параметры потенциала Леннарда – Джонса (2) для коэффициентов вязкости *п* и теплопроводности *λ* 

Коэффициенты вязкости и теплопроводности Параметры (2)	Ar, η	Ar, $\lambda$	$C_6H_6$ , $\eta$	$C_6H_6, \lambda$
$\sigma$ , HM	0,411	0,408	0,5034	0,4807
$\varepsilon/k, K$	137,84	165,94	544,36	664,85

#### Таблица 2

Сопоставление данных моделирования коэффициентов вязкости $\eta$ (м	illa•c)				
и теплопроводности <b>λ</b> (мВт/(м·К)) методами МД и СММ					

Параметры моделирования и методы Жидкости	МД, η	$\Delta_{\lambda}, \\ \%$	CMM, $\eta$	Δ <sub>λ</sub> , %	МД, λ	Δ <sub>λ</sub> , %	$\underset{\lambda}{\text{CMM}},$	Δ <sub>λ</sub> , %
Ar	0,275	1,1	0,271	2,5	0,134	1,5	0,130	1,5
$C_6H_6$	0,613	1,5	0,597	1,1	0,144	1,4	0,139	2,1

представлены в табл. 2. Здесь же приведены относительные ошибки определения этих коэффициентов, которые устанавливались по соответствующим экспериментальным данным. Экспериментальные значения коэффициентов вязкости и теплопроводности аргона при указанной температуре составили соответственно 0,278 мПа·с и 0,132 мВт/(м·K) [25], а бензола — 0,604 мПа·с и 0,142 мВт/(м·K) [26].

Сопоставление данных, приведенных в табл. 2, демонстрирует, что во всех случаях относительная точность расчетов методом СММ оказывается достаточно высокой. Все коэффициенты переноса рассчитаны с точностью получения экспериментальных данных. Сравнение данных моделирования методом СММ с методом МД показывает, что они достаточно близки.

Помимо точности расчета, важным параметром эффективности метода является затрачиваемое на расчет время. Это время определяется несколькими обстоятельствами. Первое зависит от времени выхода соответствующего коэффициента переноса на платовое значение. Это время является разным для коэффициентов вязкости и теплопроводности. В качестве примера на рис. 4 представлена эволюция коэффициентов вязкости (рис. 4*a*) и теплопроводности (рис. 4*b*) бензола.

Анализ рис. 4 показывает, что метод СММ позволяет достичь платового значения значительно (вдвое или даже больше) раньше, чем метод МД. Соответственно, время расчета можно было бы уменьшить, по крайней мере, вдвое. Кроме того, эффективность метода определяется еще и временем расчета одной фазовой траектории. Чтобы сопоставить эти времена в обоих методах, ниже приводятся данные моделирования одной фазовой траектории жидкого аргона при температуре 87 К и атмосферном давлении. Число частиц N в моделируемой системе изменялось от ста до десяти тысяч. Полученные данные приведены в табл. 3. Во всех случаях время расчета методом СММ ( $t_s$ ) существенно меньше, чем соответствующее время методом МД ( $t_M$ ). Начиная с N = 2000, отношение времен  $t_M/t_s$  растет практически линейно. При использовании 10000 молекул для расчета одной фазовой траектории в методе МД необходимо в 30 раз больше времени, чем в методе СММ. При решении современных задач, например, при моделировании коэффициентов переноса наножидкостей необходимо использовать порядка миллиона или нескольких миллионов молекул. В этом случае необходимое время для расчета





жидкого аргона методами СММ и МД для разного числа молекул N							
Ν	100	1000	2000	5000	10000		
<i>t</i> <sub>S</sub> , пс	0,498	1,084	1,761	2,941	4,823		
<i>t</i> <sub>M</sub> , пс	1,87	15,43	32,904	68,032	141,756		

Сопоставление времени расчета одной фазовой траектории

Таблица З

одной фазовой траектории методом МД будет на три порядка больше, чем при использовании метода СММ.

#### Заключение

В настоящей работе предложен новый метод моделирования коэффициентов переноса жидкостей и плотных газов. Метод СММ оказался эффективным: он позволяет достигнуть точности, сопоставимой с методом МД, затрачивая на это существенно меньше машинного времени. Такой эффективности удалось достигнуть благодаря использованию предварительно созданной базы данных межмолекулярных сил. Конечно, создание указанной базы данных потребовало затраты определенных вычислительных ресурсов. Однако важно подчеркнуть, что в результате она получилась достаточно универсальной (см. формулу (4)), ее можно использовать для моделирования любых леннард – джонсоновских жидкостей и газов.

Работоспособность метода СММ была продемонстрирована в расчете коэффициентов переноса. Вместе с тем метод может использоваться для решения самых разных задач, включая моделирование неравновесных состояний.

#### Список литературы

- **1. Reid R.C., Prausnitz J.M., Sherwood T.K.** The properties of gases and liquids. New York: McGraw-Hill, 2004. 803 p.
- 2. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 415 с.
- **3.** Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 2. Гидромеханика. Новосибирск: НГАСУ, 2005. 468 с.
- 4. Evans D.J., Morriss G.P. Statistical mechanics of nonequilibrium liquids. Elsevier, 2013. 316 p.
- 5. Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. 549 p.
- 6. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. Oxford: Oxford University Press, 2017. 385 p.
- Norman G.E., Stegailov V.V. Stochastic and dynamic properties of molecular dynamics systems: simple liquids, plasma and electrolytes, polymers // Comp. Physics Comm. 2002. Vol. 147, No. 4. P. 678–684.
- Norman G.E., Stegailov V.V. Stochastic theory of the classical molecular dynamics method // Mathematical Models and Computer Simulations. 2013. Vol. 5, No. 4. P. 305–333.
- 9. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic method for modeling of the rarefied gas transport coefficients // J. of Physics: Conf. Series. 2016. Vol. 738. P. 012086-1–012086-4.
- 10. Рудяк В.Я., Лежнев Е.В. Стохастический метод моделирования коэффициентов переноса разреженного газа // Математическое моделирование. 2017. Т. 29, № 3. С. 113–122.
- Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic algorithm for simulating gas transport coefficients // J. of Computational Physics. 2018. Vol. 355. P. 95–103.
- Bird G.A. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6, No. 10. P. 1518–1519.
- 13. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Clarendon Press, Oxford. 1994. 458 p.
- 14. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic molecular modeling the transport coefficients of rarefied gas and gas nanosuspensions // Nanosystems: Phys., Chem., Math. 2020. Vol. 11, No. 3. P. 285–293.
- 15. Рудяк В.Я., Лежнев Е.В., Любимов Д.Н. Моделирование теплопроводности разреженных газов стохастическим методом // Докл. АН ВШ РФ. 2021. Т. 50, № 1. С. 19–29.

- 16. Рудяк В.Я., Лежнев Е.В. Вязкость газов в наноканалах // Письма в ЖТФ. 2020. Т. 46, № 20. С. 51–54.
- Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Lezhnev E.V. Simulation of the transport processes in confined conditions // AIP Conf. Proceedings. 2021. Vol. 2351, No. 1. P. 030043-1–030043-9.
- 18. Рудяк В.Я., Лежнев Е.В., Любимов Д.Н. Об анизотропии процессов переноса газа в нано- и микроканалах // Вестн. СПбГУ. Математика, Механика, Астрономия. 2022. Т. 9, № 1. С. 152–163.
- Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Modeling the rarefied gas thermal conductivity in nanochannels // Nanosystems: Phys. Chem. Math. 2023. Vol. 14, No. 2, P. 186–194.
- **20. Chapman S., Cowling T.G.** The mathematical theory of non-uniform gases. Cambridge: Cambridge University Press, 1990. 457 p.
- 21. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554 с.
- Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic modelling of transport processes in liquids // J. of Physics. Conf. Series. 2019. Vol. 1382. P. 012088-1–012088-6.
- 23. Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Krasnolutskii S.L. Molecular dynamics modelling transport processes of fluids and nanofluids in bulk and nanochannels // Advances in Molecular Dynamics Simulations Research / Ed. S. Köhler. New York: Nova Science Publisher, 2021. P. 1–86.
- 24. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., et al. LAMMPS a flexible simulation tool for particle-based materials modelling at the atomic, meso, and continuum scales // Comp. Phys. Comm. 2022. Vol. 271. P. 108171-1–108171-34.
- 25. Hanley H.J.M., McCarty R.D., Haynes W.M. The viscosity and thermal conductivity coefficients for dense gaseous and liquid argon, krypton, xenon, Nitrogen, and Oxygen // J. of Phys. and Chem. Reference Data 3. 1974. P. 979–1017.
- Charitidou E., Molidou Ch., Assael M.J. The thermal conductivity and viscosity of benzene // Intern. J. of Thermophysics. 1988. Vol. 9. P. 37–45.

Статья поступила в редакцию 9 июля 2023 г., после доработки — 24 июля 2023 г., принята к публикации 17 августа 2023 г.