

УДК 533.5, 533.15

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ
СТОХАСТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ*****В.Я. Рудяк^{1,2}, Е.В. Лежнев², Д.Н. Любимов²**¹ *Новосибирский государственный университет*² *Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет*

Прямое молекулярное моделирование физических систем, явлений и процессов уже более полувека является одним из главных трендов развития различных разделов физики. Постоянно растущая доступная вычислительная мощность современных компьютеров позволяет решать все более сложные задачи. Прямое молекулярное моделирование фактически является одним из немногих методов описания соответствующих процессов или явлений из первых принципов. С другой стороны, оно способствует существенной экономии времени и материальных ресурсов по сравнению с проведением экспериментальных исследований. Наконец, таким образом появляется возможность исследовать процессы и явления, в которых прямые измерения в силу тех или иных причин невозможны.

Наиболее распространенным методом прямого молекулярного моделирования является метод молекулярной динамики. Этот метод, однако, все еще недоступен для моделирования процессов переноса разреженных газов, поскольку требует использования огромного числа молекул. В нормальных условиях при расчетах в ячейке моделирования должны находиться десятки или даже сотни миллионов молекул. Вместе с тем известно, что численная реализация метода молекулярной динамики не позволяет получить истинные фазовые траектории рассматриваемой системы. В моделируемой системе имеет место динамический хаос. Данная работа посвящена развитию метода стохастического молекулярного моделирования (СММ) процессов переноса в разреженных газах. В этом методе фазовые траектории молекулярной системы имитируются стохастически. Все наблюдаемые, включая коэффициенты переноса, получаются усреднением по большому числу таких независимых фазовых траекторий. Ранее работоспособность метода СММ была продемонстрирована расчетом коэффициентов самодиффузии, диффузии и вязкости различных разреженных газов. Вместе с тем до сих пор не рассматривалась возможность моделирования методом СММ самого сложного процесса переноса – процесса переноса энергии. Целью данной работы и является моделирование методом СММ коэффициента теплопроводности. Рассматривались как одноатомные (Ar, Kr, Ne, Xe), так и многоатомные газы (CH₄, O₂). Показано, что метод СММ дает вполне приемлемые результаты, сопоставимые с данными измерений, даже при использовании сравнительно небольшого числа молекул. Изучена точность моделирования. Установлено, что она монотонно растет с увеличением числа молекул и фазовых траекторий, по которым проводится усреднение.

Ключевые слова: молекулярное моделирование, процессы переноса, разреженный газ, теплопроводность.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-19-29

Введение

Одним из главных успехов кинетической теории газов является явное вычисление коэффициентов переноса разреженных газов [1, 2]. Решение кинетического уравнения Больцмана методом Чепмена–Энскога позволило позднее Барнетту [3] развить последовательный метод расчета коэффициентов переноса. Метод этот,

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 19-01-00399 и № 20-01-00041).

однако, не прост. Он требует решения ряда интегральных уравнений. Эти уравнения решаются обычно методом разложения по полиномам Сонина. Для определения различных коэффициентов переноса, вообще говоря, необходимо использовать разное число членов такого разложения. Наибольшие проблемы возникают при расчете коэффициента теплопроводности, особенно для многоатомных газов. Помимо этого, при использовании различных потенциалов необходимо систематически вычислять так называемые Ω -интегралы, что само по себе является достаточно сложной задачей. По этой причине актуально и прямое численное молекулярное моделирование процессов переноса разреженных газов, в частности расчет их коэффициентов переноса.

Хорошо известным методом такого моделирования является метод молекулярной динамики (см., например, [4, 5]). Этот метод уже более шестидесяти лет с успехом используется для моделирования самых разных процессов и явлений в физике, механике, химии и биологии. К сожалению, до сих пор этот метод недоступен для моделирования процессов переноса разреженных газов. Действительно, характерный размер ячейки моделирования в этом случае должен быть много больше (или хотя бы больше!) длины свободного пробега молекул моделируемого газа. Нетрудно оценить, что в нормальных условиях в такой ячейке должны находиться десятки или даже сотни миллионов молекул.

Вместе с тем ясно, что численная реализация метода молекулярной динамики сопровождается систематическим появлением ошибок (из-за неточности задания начальных данных для динамических переменных молекул моделируемой системы, ошибок округления, конечно-разностной аппроксимации уравнений Ньютона и т. п.). Это приводит к развитию локальной неустойчивости фазовых траекторий в молекулярных системах, что является причиной появления динамического хаоса [5, 6]. Очевидно поэтому, что при таком моделировании не вычисляются истинные фазовые траектории рассматриваемой системы, определяемые системой уравнений Ньютона. Актуальные результаты моделирования получаются лишь усреднением по большому числу независимых фазовых траекторий. Поэтому, естественным образом, возникает идея разработки метода моделирования процессов переноса, в котором фазовые траектории не вычисляются на основе законов Ньютона, а имитируются, и далее используются для расчета любых наблюдаемых. В работах [7, 8] развит метод стохастического молекулярного моделирования (СММ) процессов переноса разреженного газа, где эта идея и была реализована. Работоспособность метода СММ была продемонстрирована расчетом коэффициентов самодиффузии, диффузии и вязкости как одноатомных газов, так и многоатомных газов [9]. Вместе с тем до сих пор не рассматривалась возможность моделирования методом СММ самого сложного процесса переноса – процесса переноса энергии. Целью данной работы и является моделирование методом СММ коэффициента теплопроводности. Рассматривались как одноатомные (Ar, Kr, Ne, Xe), так и многоатомные газы (CH_4 , O_2).

1. СММ метод

Основная идея прямого численного моделирования процессов переноса, в частности методов молекулярной динамики и СММ, состоит в расчете фазовых траекторий рассматриваемых систем в последовательные моменты времени. Затем, используя эту информацию, методами неравновесной статистической механики [5, 8] можно вычислить все наблюдаемые. В частности, коэффициенты переноса вычисляются с помощью флуктуационно-диссипационных теорем (ФДТ), которые представляют их как интегралы по времени от соответствующих двухвременных корреляционных функций [5, 10–12]. В разреженном газе взаимодействие молекул не дает вклада в коэффициенты переноса и в уравнение состояния.

Такие вклады появляются лишь в следующем приближении по плотности [13, 14]. Коэффициенты переноса разреженного газа определяются лишь эволюцией молекул в пространстве скоростей (импульсов.) В частности, коэффициент теплопроводности разреженного газа определяется следующей ФДТ:

$$\lambda = \frac{k}{3VT^2} \int_0^{\tau_p} \langle \mathbf{j}(0) \cdot \mathbf{j}(t) \rangle dt = \frac{k}{3VT^2} \int_0^{\tau_p} \chi(0, t) dt, \quad (1)$$

$$\mathbf{j}(t) = 0.5 \sum_i m_i \mathbf{v}_i v_i^2(t).$$

Здесь V – объем; k – постоянная Больцмана; \mathbf{v}_{ij} – вектор относительной скорости молекул i и j соответственно.

Эквивалентность ФДТ, и в частности (1), традиционно используемым в кинетической теории газов для вычисления коэффициентов переноса формулам доказана в работах [15, 16] (см. также [5]). Входящая в (1) двухвременная корреляционная функция $\chi = \langle \mathbf{j}(0) \cdot \mathbf{j}(t) \rangle$ вычисляется по равновесной функции распределения и зависит только от скоростей молекул. Поэтому для ее расчета (а значит, и соответствующих коэффициентов переноса) необходимо имитировать динамику системы молекул лишь в пространстве скоростей. Используемый для этого алгоритм метода СММ подробно описан в работах [7, 8], ниже кратко приводятся его основные моменты.

Рассматривается равновесное состояние газа с заданной плотностью ρ и температурой T . В начальный момент времени N молекулы равномерно распределяются по объему моделирования так, чтобы средняя плотность газа равнялась ρ . Затем каждой молекуле присваивается скорость \mathbf{v}_i , для этого скорости разыгрываются согласно распределению Максвелла при заданной температуре T . Суммарный импульс всех N молекул делается равным нулю. Таким образом, в начальный момент времени t молекулы имеют скорости $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N$. После того как сформировано начальное состояние системы, определяется интервал времени t_s , в течение которого система будет моделироваться. В разреженном газе все корреляционные функции затухают экспоненциально с характерным временем порядка времени свободного пробега τ_λ . Это означает, что для времени расчета должно выполняться соотношение $t_s \gg \tau_\lambda$. Затем время расчета делится на интервалы длительностью $\tau_n = \sigma / v_{n, \max}$ где σ – эффективный диаметр молекул, а $v_{n, \max}$ – максимальная из скоростей молекул в данный момент времени (на интервале n). Далее по начальным значениям скоростей всех молекул в момент времени t необходимо найти их значения в момент времени $(t + \tau_1)$. Скорости молекул могут измениться только в результате соударений. Поэтому на основе кинетической теории вычисляется вероятность соударения за время τ_1 каждой из молекул системы с любой другой: $P_{c1} = 4\tau_1 \rho \sigma^2 \sqrt{\pi RT / m}$ [1]. Если молекула сталкивается с какой-либо другой молекулой, тогда случайным образом из оставшихся $(N - 1)$ молекул определяется пара для соударения с данной, для которой такое соударение должно произойти. В результате скорости этих двух столкнувшихся молекул изменятся в соответствии с законами сохранения импульса и энергии

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + (\mathbf{v}_{1j} \cdot \mathbf{e})\mathbf{e}, \quad \mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j + (\mathbf{v}_{j1} \cdot \mathbf{e})\mathbf{e}.$$

Молекулы, которые не сталкивались за время τ_1 , своих скоростей не меняют. После выполнения описанной процедуры формируется полный список новых фазовых переменных системы (скоростей) в момент времени $(t + \tau_1)$, и подобная процедура реализуется для следующего момента времени $(t + \tau_2)$. Этот процесс повторяется до тех пор, пока не закончится заданное время расчета t_s . Таким образом, получаем набор динамических переменных всех молекул моделируемой системы в последовательные моменты времени.

Используя полученный набор динамических переменных моделируемой системы, далее можно вычислить любые ее наблюдаемые. Их значения получаются усреднением по l независимым фазовым траекториям системы. Получаемые в процессе имитации динамики соударений скорости молекул в общем случае зависят от потенциалов межмолекулярного взаимодействия. В данной работе использовался потенциал Леннарда–Джонса [6–12].

2. Расчет коэффициента теплопроводности

Вычисление коэффициента теплопроводности разреженных газов до сих пор остается достаточно сложной проблемой кинетической теории. Если для вычисления коэффициентов диффузии и вязкости обычно достаточно первого приближения разложения по полиномам Сонина, то для теплопроводности это не так. Ниже в этом разделе представлены данные моделирования коэффициента теплопроводности нескольких разреженных газов методом СММ. Расчет проводится с помощью ФДТ (1). Усреднение проводилось по тысяче независимых фазовых траекторий.

Поскольку газ разреженный, то корреляционная функция χ , по которой вычисляется коэффициент (1), должна затухать экспоненциально, что и показывают данные расчета, приведенные на рис. 1, а. Здесь представлен расчет нормированной на начальные значения корреляционной функции $\chi_j(t)$ для ксенона при температуре 300 К и атмосферном давлении, время нормировано на среднее время свободного пробега молекулы. Затухание корреляционной функции происходит за несколько времен свободного пробега.

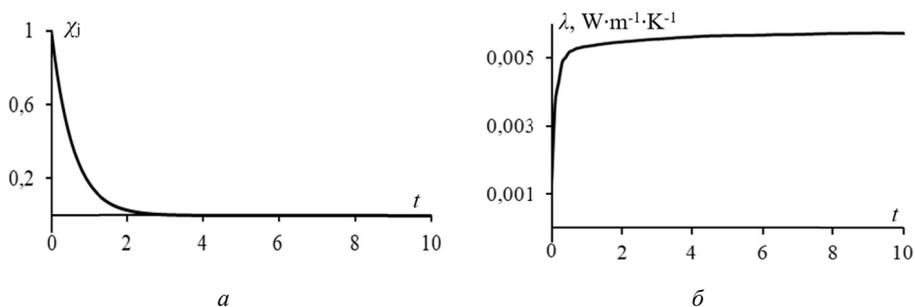


Рис. 1 – Эволюция нормированной корреляционной функции тепловых потоков ксенона (а) и соответствующего коэффициента теплопроводности (б)

Fig. 1 – Evolution of the normalized correlation function of the heat fluxes of xenon (a) and the corresponding coefficient of thermal conductivity (b)

Экспоненциальное затухание корреляционной функции означает достаточно быстрый выход на плато значение соответствующего коэффициента переноса – коэффициента теплопроводности. Рис. 1, б и иллюстрирует это, выход на плато

вое значение происходит за 8–10 времен свободного пробега молекул. Это плато-вое значение собственно и определяет экспериментально измеримое значение коэффициента теплопроводности.

Систематические данные расчета коэффициентов теплопроводности для всех указанных выше газов приведены в табл. 1. Все данные получены при атмосферном давлении и температуре 300 К. Использовалось 3000 молекул, усреднение проводилось по 1000 независимым фазовым траекториям. Полученные методом СММ значения коэффициента теплопроводности оказываются вполне сопоставимыми с экспериментальными λ_e , здесь и ниже использовались экспериментальные данные [17]. Для аргона, криптона и ксенона расчетные данные получены в пределах точности измерения, которая обычно и составляет 2–3 %. Для трех оставшихся газов точность несколько хуже.

Таблица 1 / Table 1

**Сравнение коэффициентов теплопроводности λ и λ_e при 300 К
и атмосферном давлении**

| | Ar | Kr | Ne | Xe | O ₂ | CH ₄ |
|-----------------------|--------|--------|-------|--------|----------------|-----------------|
| λ , W/m · K | 0.0175 | 0.0098 | 0.051 | 0.0055 | 0.028 | 0.0328 |
| λ_e , W/m · K | 0.0177 | 0.0096 | 0.049 | 0.0057 | 0.0267 | 0.0342 |
| погр., Δ % | 1.23 | 2.52 | 3.36 | 3.17 | 4.48 | 3.92 |

Сопоставление данных расчетов методом СММ с экспериментальными, приведенное в табл. 1, показало, что в ряде случаев точность моделирования оказывается несколько ниже обычно имеющей место в экспериментах. Причем это имеет место не только для многоатомных, но и для одноатомных газов. Поэтому важнейший вопрос, требующий ответа при применении метода СММ: можно ли повысить его точность? Вообще говоря, точность любого молекулярного моделирования, включая и метод СММ, зависит от нескольких факторов. Прежде всего, она зависит от выбора используемого потенциала взаимодействия молекул (частиц). Строго говоря, здесь нельзя сформулировать универсальных рецептов их выбора. Все, прежде всего, зависит от решаемой задачи. При расчете интегральных характеристик флюидов ситуация несколько упрощается. Здесь можно выбирать достаточно простые потенциалы. Успешность расчета коэффициента вязкости воды [18], когда с помощью потенциала Леннарда–Джонса удалось получить высокую точность, это подтверждает. Правда, успех здесь в значительной мере определяется выбором параметров потенциала. К этому надо относиться очень внимательно. Определяя, например, параметры потенциала по данным о диффузии, трудно ожидать получения высокой точности моделирования вязкости. Тем не менее можно констатировать, что метод СММ достаточно консервативен относительно такого выбора. Высокую точность удается получить, даже используя известные параметры потенциала Леннарда–Джонса, которые получались по самым разным экспериментальным данным.

На точность расчета оказывает влияние и число используемых молекул, и число независимых траекторий, по которым проводится затем усреднение. В данной работе систематически изучено влияние обоих факторов на точность расчета коэффициента теплопроводности. В качестве примера на рис. 2 приведена зависимость рассчитанных значений коэффициента теплопроводности ксенона от числа молекул. В расчетах использовалось 750, 1500, 3000 и 6000 молекул, расчетным данным на рис. 2 соответствуют ромбы. Погрешность расчета с увеличением

числа молекул систематически снижается и хорошо (коэффициент корреляции равен 0.97) описывается зависимостью $\Delta = 175.17 / \sqrt{N}$, которой на рис. 2 соответствует непрерывная кривая.

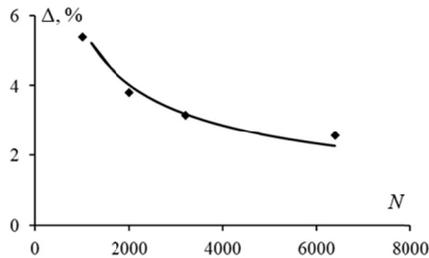


Рис. 2 – Зависимость относительной погрешности Δ расчета коэффициента теплопроводности ксенона от числа молекул
Fig. 2 – Dependence of the relative error Δ for calculating the thermal conductivity of xenon on the number of molecules

Высокую точность вычисления коэффициента теплопроводности удастся получить и для многоатомных молекул. Это иллюстрируют данные табл. 2. При использовании в расчетах 6400 молекул погрешность определения коэффициента теплопроводности оказывается меньше одного процента (усреднение проводилось по 1000 фазовым траекториям).

Таблица 2 / Table 2

Точность расчета коэффициента теплопроводности кислорода и метана при числе молекул $N = 6440$

| | O ₂ | CH ₄ |
|---------------------|----------------|-----------------|
| λ , W/m · K | 0.0269 | 0.0034 |
| Δ , % | 0.93 | 0.67 |

Вторым важным обстоятельством, определяющим время расчета, является число членов ансамбля (число независимых фазовых траекторий), по которому производится усреднение полученных данных. Ансамбль, по которому проводится усреднение, – это типичный гиббсовский ансамбль, характеризуемый разными начальными фазовыми состояниями молекул при заданных средних значениях макроскопических наблюдаемых. Точность моделирования коэффициента теплопроводности с ростом числа членов ансамбля также растет. На рис. 3 приведена зависимость относительной погрешности, полученной при расчете коэффициента теплопроводности ксенона. Здесь во всех случаях число использованных молекул равнялось 3000, а число траекторий изменялось от 250 до 1000 (ромбы). С увеличением числа фазовых траекторий относительные ошибки монотонно уменьшаются и хорошо описываются зависимостью $\Delta_l = 91.29 / \sqrt{l}$ (коэффициент корреляции равен 0.98). Чтобы получить точность порядка процента при вычислении коэффициента теплопроводности при использовании 3000 молекул, необходимо использовать около 8000 траекторий.

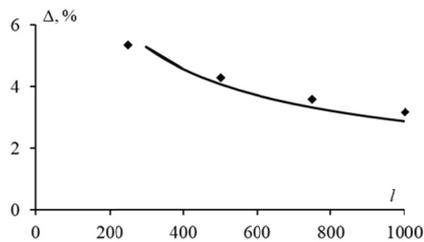


Рис. 3 – Зависимость относительной погрешности коэффициента теплопроводности от числа траекторий

Fig. 3 – Dependence of the relative error of the thermal conductivity coefficient on the number of trajectories

Заключение

В данной работе методом СММ выполнено моделирование теплопроводности благородных газов, а также кислорода и метана при 300 К и атмосферном давлении. Показано, что этот метод позволяет вполне удовлетворительно моделировать теплопроводность даже при использовании сравнительно небольшого числа молекул (около 3000). Метод СММ достаточно прост и вполне воспроизводим практически любым пользователем.

Систематически изучена точность моделирования и ее зависимость от числа используемых для усреднения траекторий и числа молекул. Показано, что относительная ошибка моделирования $\Delta \sim 1/\sqrt{N}$. Это соответствует и оценкам, полученным при моделировании других коэффициентов переноса (см. [7–9]). То, что ошибка обратно пропорциональна корню из произведения числа траекторий и числа молекул, дает определенную свободу в выборе и того, и другого для достижения заданной точности. В общем случае время моделирования линейно растет с увеличением числа молекул. Его можно уменьшать, «разменивая» на число фазовых траекторий.

Следующим важным фактором, определяющим точность и эффективность алгоритма, является выбор длительности шага τ_i . В приведенных примерах оно выбиралось достаточно малым. Для разреженного газа это условие можно существенно ослабить. Важно, однако, чтобы выполнялось условие $\tau_i \ll \tau_\lambda$.

Наконец, важной характеристикой является время расчета одной фазовой траектории t_s . В представленных данных это время варьировалось и обычно составляло десятки времен среднего свободного пробега. При выборе интервала моделирования важно, чтобы он был не меньше времени выхода на платовые значения данной моделируемой характеристики: $t_s > t_p$. Однако важно понимать что системы с различным числом частиц могут иметь (и имеют!) различные платовые значения. Платовые значения различны и для разных коэффициентов переноса.

Для моделирования коэффициентов переноса в общем случае достаточно рассмотреть пространственно-однородную систему. Однако, строго говоря, определение скоростей молекул после соударения требует знания вектора $\mathbf{e}_{ij} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) / |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$, определяющего угол рассеяния молекул i и j , здесь \mathbf{r}_i , \mathbf{r}_j – радиус-векторы этих молекул соответственно. Существует два разных пути определения этих векторов на каждом шаге по времени. В первом случае в каждый момент времени должны определяться все координаты молекул $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$. Тогда на данном временном интервале τ_n координаты молекулы i меняются в соответствии с законом: $\mathbf{r}_i(t_{n-1} + \tau_n) = \mathbf{r}_i(t_{n-1}) + \mathbf{v}_i(t_{n-1})\tau_n$. В этом случае результатом вычисления будет полный ряд и скоростей, и координат молекул в каждый момент времени. Во втором случае для определения векторов \mathbf{e}_{ij} можно использовать начальные пространственные фазы молекул. Ясно, что второй путь значительно экономичнее. Обе описанные процедуры использовались в наших расчетах и показано, что точность моделирования коэффициентов переноса в обоих случаях практически одинакова.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Chapman S., Cowling T.G.** The mathematical theory of non-uniform gases. – Cambridge: Cambridge University Press, 1990. – 423 p.

2. Гиршфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: Иностранная литература, 1961. – 928 с.
3. Burnett D. The distribution of velocities in a slightly non-uniform gas // Proceedings of the London Mathematical Society. – 1935. – Vol. 39 (1). – P. 385–430.
4. Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995. – 548 p.
5. Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 2. Гидромеханика. – Новосибирск: НГАСУ, 2005. – 320 с.
6. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 6. – С. 3–44.
7. Рудяк В.Я., Лежнев Е.В. Стохастический метод моделирования коэффициентов переноса разреженного газа // Математическое моделирование. – 2017. – Т. 29, № 3. – С. 113–122.
8. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic algorithm for simulating gas transport coefficients // Journal of Computational Physics. – 2018. – Vol. 355. – P. 95–103. – DOI: 10.1016/j.jcp.2017.11.001.
9. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic molecular modeling the transport coefficients of rarefied gas and gas nanosuspensions // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. – 2020. – Vol. 46. – P. 51–54. – DOI: 10.17586/2220-8054-2020-11-3-285-293.
10. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 415 с.
11. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. – Oxford: Oxford University Press, 1987. – 385 p.
12. Rudyak V.Ya. Fluctuation-dissipation theorems and transport coefficients of the gases, liquids and nanofluids // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – Vol. 1560. – P. 012002. – DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012002.
13. Климонтович Ю.Л. Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы. – М.: Наука, 1975. – 352 с.
14. Рудяк В.Я. Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. – Новосибирск: Наука, 1987. – 271 с.
15. Ernst M.H. Formal theory of transport coefficients to general order in the density // Physica. – 1966. – Vol. 32, N 2. – P. 209–243. – DOI: 10.1016/0031-8914(66)90055-3.
16. Хонькин А.Д. Уравнения для пространственно-временных и временных корреляционных функций и доказательство эквивалентности результатов методов Чепмена–Энскога и временных корреляционных функций // Теоретическая и математическая физика. – 1970. – Т. 5, № 1. – С. 125–135.
17. Григорьев И.С., Мейлихова Е.З. Физические величины. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1234 с.
18. Molecular dynamics simulation of water based nanofluids viscosity / V.Ya. Rudyak, S.L. Krasnolutskii, A.A. Belkin, E.V. Lezhnev // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2020. – DOI: 10.1007/s10973-020-09873-8.

SIMULATION OF THERMAL CONDUCTIVITY OF RARE GASES BY THE STOCHASTIC METHOD

Rudyak V.Ya.¹, Lezhnev E.V.², Ljubimov D.N.²

¹*Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia*

²*Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Novosibirsk, Russia*

One of the main successes of the kinetic theory of gases is the explicit calculation of the transport coefficients of rarefied gases. However, the greatest problems arise when calculating the thermal conductivity coefficient, especially for polyatomic gases. Also, when using different potentials, it is necessary to systematically calculate the so-called Ω -integrals, which in itself is

a rather difficult task. For this reason, direct numerical molecular modeling of the processes of transfer of rarefied gases, in particular, the calculation of their transfer coefficients, is also relevant.

A well-known method for such modeling is the molecular dynamics method. Unfortunately, until now this method is not available for modeling the processes of rarefied gas transfer. Under normal conditions, the simulation cell should contain tens or even hundreds of millions of molecules during calculations.

At the same time, the numerical implementation of the molecular dynamics method is accompanied by a systematic appearance of errors, which is the reason for the appearance of dynamic chaos. With this simulation, the true phase trajectories of the system under consideration cannot be obtained. Therefore, naturally, the idea of developing a method for modeling transport processes arises, in which phase trajectories are not calculated based on Newton's laws, but are simulated, and then are used to calculate any observables. In our works, we developed a method of stochastic molecular modeling (STM) of rarefied gas transfer processes, where this idea was implemented. The efficiency of the SMM method was demonstrated by calculating the coefficients of self-diffusion, diffusion, and viscosity of both monoatomic gases and polyatomic gases. At the same time, the possibility of modeling the most complex transfer process - the energy transfer process - has not yet been considered. This work aims to simulate the thermal conductivity coefficient by the SMM method. Both monoatomic (Ar, Kr, Ne, Xe) and polyatomic gases (CH₄, O₂) were considered.

Keywords: molecular modelling, rarefied gas, transport coefficients, thermal conductivity.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-19-29

REFERENCES

1. Chapman S., Cowling T.G. *The mathematical theory of non-uniform gases*. Cambridge, Cambridge University Press, 1990. 423 p.
2. Hirschfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B. *Molecular theory of gases and liquids*. New York, John Wiley and Sons, London, Chapman and Hall, 1954. 342 p. (Russ. ed.: Girshfel'der Dzh., Kertis Ch., Berd R. *Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkosti*. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1961. 928 p.).
3. Burnett D. The distribution of velocities in a slightly non-uniform gas. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 1935, vol. 39 (1), pp. 385–430.
4. Rapaport D.C. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge, Cambridge University Press, 1995. 548 p.
5. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya aerogidromekhanika gomogennykh i geterogennykh sred*. T. 2. *Gidromekhanika* [Statistical aerohydrodynamics of homogeneous and heterogeneous media. Vol. 2. Hydrodynamics]. Novosibirsk, NSUACE Publ., 2005. 320 p.
6. Norman G.E., Stegailov V.V. Stokhasticheskaya teoriya metoda klassicheskoi molekulyarnoi dinamiki [Stochastic theory of the classical molecular dynamics method]. *Matematicheskoe modelirovanie = Mathematical Models and Computer Simulations*, 2012, vol. 24, no. 6, pp. 3–44. (In Russian).
7. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stokhasticheskii metod modelirovaniya koeffitsientov perenosa razreznogo gaza [Stochastic method for modeling rarefied gas transport coefficients]. *Matematicheskoe modelirovanie = Mathematical Models and Computer Simulations*, 2017, vol. 29, no. 3, pp. 113–122. (In Russian).
8. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic algorithm for simulating gas transport coefficients. *Journal of Computational Physics*, 2018, vol. 355, pp. 95–103. DOI: 10.1016/j.jcp.2017.11.001.
9. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic molecular modeling the transport coefficients of rarefied gas and gas nanosuspensions. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2020, vol. 46, pp. 51–54. DOI: 10.17586/2220-8054-2020-11-3-285-293.
10. Zubarev D.N. *Neravnovesnaya statisticheskaya termodinamika* [Nonequilibrium statistical thermodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1971. 415 p.]
11. Allen M.P., Tildesley D.J. *Computer simulation of liquids*. Oxford, Oxford University Press, 1987. 385 p.

12. Rudyak V.Ya. Fluctuation-dissipation theorems and transport coefficients of the gases, liquids and nanofluids. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1560, p. 012002. DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012002.
13. Klimontovich Yu.L. *Kineticheskaya teoriya neideal'nogo gaza i neideal'noi plazmy* [Kinetic theory of non-ideal gases and non-ideal plasmas]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 352 p.
14. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya teoriya dissipativnykh protsessov v gazakh i zhidkostyakh* [Statistical theory of dissipative processes in gases and liquids]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1987. 271 p.
15. Ernst M.H. Formal theory of transport coefficients to general order in the density. *Physica*, 1966, vol. 32, no. 2, pp. 209–243. DOI: 10.1016/0031-8914(66)90055-3.
16. Khon'kin A.D. Uravneniya dlya prostranstvenno-vremennykh i vremennykh korrelyatsionnykh funktsii i dokazatel'stvo ekvivalentnosti rezul'tatov metodov Chepmana–Enskoga i vremennykh korrelyatsionnykh funktsii [Equations for space-time and time correlation functions and proof of the equivalence of results of the Chapman–Enskog and time correlation methods]. *Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika = Theoretical and Mathematical Physics*, 1970, vol. 5, no. 1, pp. 125–135. (In Russian).
17. Grigor'ev I.S., Meilikhova E.Z. *Fizicheskie velichiny* [Physical values]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 1234 p.
18. Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L., Belkin A.A., Lezhnev E.V. Molecular dynamics simulation of water based nanofluids viscosity. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2020. DOI: 10.1007/s10973-020-09873-8.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Рудяк Валерий Яковлевич – родился в 1945 году, д-р физ.-мат., профессор, заслуженный работник высшей школы РФ, действительный член МАН ВШ, действительный член Американского нанообщества (American Nano Society), главный научный сотрудник НГАСУ (Сибстрин), профессор кафедры нанокompозитных материалов НГУ. Основные научные направления исследований: неравновесная статистическая механика, кинетическая теория газов, теплофизика процессов переноса, физика наножидкостей, гидромеханика, ламинарно-турбулентный переход, математическое моделирование. Имеет более 500 публикаций, в том числе 7 монографий. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

Rudyak Valery Ya. (b. 1945) – Doctor of Sciences (Phys & Math.), Professor, Honored Worker of Higher School of Russia, member of the MAS HS, member of the American Nano Society, Chief Scientist of NSUACE and professor of the Nanocomposite Material Department of NSU. His research interests are currently focused on: non-equilibrium statistical mechanics, kinetic theory of gases, thermal transfer processes, nanofluids physics, fluid mechanics, laminar-turbulent transition, mathematical modeling. He is author of more than 500 publications, including 7 monographs. (Address: 113, Leningradskaya st., Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).



Лежнев Евгений Васильевич – родился в 1976 году, кандидат технических наук, доцент кафедры теоретической механики НГАСУ (Сибстрин). Основное научное направление исследований: моделирование процессов переноса. Имеет более 20 публикаций. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: lionlev@yandex.ru).

Lezhnev Evgenii Vasil'evich (b. 1976) – Candidate of Sciences (Eng.), assistant professor of theoretical physics NSUACE (Sibstrin). His research interests are currently focused on: modeling of transport processes. He is author of 15 scientific publications. (Address: 113, Leningradskaya st., Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: lionlev@yandex.ru).



Любимов Даниил Николаевич – родился в 1996 году, магистрант НГАСУ (Сибстрин). Основное научное направление исследований: моделирование процессов переноса. Имеет две публикации. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: danillch@mail.ru).

Ljubimov Daniil Nikolaevich (b. 1996) – master of science, NSUACE (Sibstrin). His research interests are currently focused on: modeling of transport processes. He is author of 2 scientific publications. (Address: 113, Leninskaya st., Novosibirsk, 630008, Russia, e-mail: danillch@mail.ru).

*Статья поступила 06 февраля 2021 г.
Received February 06, 2021*

To Reference:

Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V., Ljubimov D.N. Modelirovanie teploprovodnosti razrezhennykh gazov stokhasticheskim metodom [Simulation of thermal conductivity of rare gases by the stochastic method]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2021, no. 1 (50), pp. 19–29. DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-19-29.