ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ
2015 июль–сентябрь 3(28)

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 531.15;533.15;538.93

СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКОСТИ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ

В.Я. Рудяк[1], Е.В. Лежнев[1,2]
[1]*Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин)*
[2]*Новосибирский государственный технический университет*

Молекулярное моделирование процессов переноса во многих случаях является единственно возможным. Наиболее последовательным методом такого моделирования является метод молекулярной динамики. Он является, однако, весьма затратным с точки зрения необходимых вычислительных ресурсов. Несмотря на то что метод молекулярной динамики имеет предсказательную силу эксперимента, он не дает точных фазовых траекторий исследуемой системы вследствие того, что движение молекулярных систем неустойчиво по Ляпунову относительно вносимых возмущений (а при численном моделировании они всегда существуют) и имеет место перемешивание фазовых траекторий. В данной статье предлагается алгоритм, в основе которого лежит стохастическое моделирование фазовых траекторий рассматриваемой молекулярной системы. При этом, естественно, должны выполняться законы сохранения. Алгоритм реализован для описания процессов переноса в разреженных газах. Рассматриваются системы молекул, взаимодействующие между собой посредством потенциала твердых сфер. В начальный момент времени все молекулы в некотором произвольном порядке вносятся в список. Затем последовательно для каждой молекулы реализуется процесс ее свободного сдвига и соударения со случайно выбранной молекулой. Вероятность столкновения определяется из сравнения разыгранного числа со средней вероятностью за выбранный интервал времени. В результате моделирования получаются данные о координатах и импульсах всех рассматриваемых молекул в последовательные моменты времени. Затем методами неравновесной статистической механики по этим данным вычисляются коэффициенты переноса. Работоспособность алгоритма продемонстрирована на примере моделирования коэффициента вязкости нескольких газов. Показано, что точность порядка 1–2 % удается получить при использовании сравнительно небольшого числа молекул. Эта точность растет с увеличением числа используемых в моделировании молекул и числа членов ансамбля (числа независимых фазовых траекторий), по которому производится усреднение результата

Ключевые слова: процессы переноса, разреженный газ, стохастическое моделирование, молекулярное моделирование, вязкость, статистическое моделирование

DOI: 10.17212/1727-2769-2015-3-99-108

Введение

Идея использовать молекулярную систему непосредственно для моделирования свойств вещества родилась в начале второй половины прошлого века [1]. Столь сравнительно позднее рождение метода молекулярной динамики (МД) объясняется несколькими причинами. Во-первых, реальные физические системы, свойства которых можно было бы исследовать, состояли из огромного числа молекул. Необходим был специальный инструмент, который позволил бы решать большое число уравнений движения. Такой инструмент (ЭВМ) и появился в конце 50-х годах двадцатого столетия.

Работа выполнена при частичном финансировании РНФ (соглашение № 14-19-00312).

© 2015 В.Я. Рудяк, Е.В. Лежнев

Вторая причина была методологической. Несмотря на победное шествие кинетической теории газов и статистической физики, все еще не было достаточной ясности относительно того, как данные о координатах и импульсах молекул превратить в давление, напряжение, коэффициенты переноса и т.п. С развитием статистической механики необратимых процессов эта методологическая проблема была решена. Сначала в теории линейной реакции [2, 3] была сформулирована идея, восходящая к эйнштейновской теории броуновского движения, о связи неравновесного процесса с временной эволюцией равновесных флуктуаций. Позднее удалось сформулировать полный спектр флуктуационно-диссипационных теорем, связывающих все коэффициенты переноса с соответствующими данному процессу корреляционными функциями [4–8].

Систематическое исследование идеологии и результатов метода МД, однако, показало, что он не позволяет получить истинные фазовые траектории молекулярной системы (см., например, [8, 9–12]). Нередко высказывается мнение, что связано это лишь с неточностью решения системы уравнений Ньютона [13]. И если разработать некоторый метод коррекции решения этих уравнений на каждом шаге, то получаемые фазовые траектории окажутся истинными. Это, конечно, заблуждение. Истинных траекторий нельзя получить даже для системы твердых сфер, где уравнений Ньютона вообще не приходится решать [8, 14, 15].

Конечно, вывод о том, что метод МД принципиально не позволяет получать информацию о точных фазовых траекториях многочастичной системы, для многих представляется почти безысходным. К счастью, это не так. Удачей является то, что эволюция фазовой траектории, как правило, нас и не интересует. Мы же не задумываемся о характере фазовых траекторий системы, когда выполняем тот или иной физический эксперимент. Связано это с тем, что на практике нам необходимы лишь данные о некоторых интегральных характеристиках системы, ее энергии, температуре, давлении, коэффициентах переноса и т. п. Метод МД и дает такие интегральные характеристики системы, при этом они получаются усреднением по времени и по ансамблю большого числа фазовых траекторий.

Но если метод не дает точных фазовых траекторий, стоит ли стараться их получать? Косвенный ответ на этот вопрос дает успешное применение для описания течений разреженного газа метода прямого статистического моделирования Берда или его аналогов [16–19] и псевдостохастического метода, развитого для описания диффузии жидкостей [20]. Цель данной работы состоит в разработке стохастического алгоритма для моделирования процессов переноса в разреженных газах. В данной статье алгоритм реализован для молекул в виде твердых сфер. В основе алгоритма, как и метода Берда, лежит идея расщепления процесса движения молекул на их свободный пролет и столкновения.

1. Алгоритм имитации динамики разреженного газа в объеме

В дальнейшем в этой статье предполагается, что молекулы рассматриваемого газа взаимодействуют друг с другом посредством потенциала твердых сфер:

$$\Phi(r) = \begin{cases} \infty \text{ при } r \le d, \\ 0 \text{ при } r > d. \end{cases} \tag{1}$$

Здесь d – эффективный диаметр сферы, которой моделируется молекула. Так как время взаимодействия твердых сфер равно нулю, то здесь возможны лишь парные соударения. Потенциал (1) широко используется для моделирования процессов переноса, и при надлежащем выборе эффективного диаметра молекул с его помощью получаются и качественно, и количественно вполне хорошие результаты.

Область моделирования заданного объема V, представляющая собой куб (прямоугольный параллелепипед), разбивается на ячейки кубической формы со стороной, равной диаметру молекулы. В начальный момент времени молекулы распределяются равномерно по объему моделирования в соответствии с заданной числовой плотностью n. При этом в каждой ячейке может быть только одна молекула. Чтобы это реализовать, используется специальная процедура, исключающая пересекающиеся конфигурации частиц. В случае если рассматривается система, ограниченная твердыми стенками, взаимодействие молекул с ними моделируется зеркальным законом (угол падения равен углу отражения) или зеркально-диффузным [7, 16, 17]. При диффузном отражении скорость частицы меняется в соответствии с распределением Максвелла, в качестве параметра которого берется температура на стенках. Для моделирования процессов переноса в объеме, а именно такая ситуация рассматривается в данной статье, используются периодические граничные условия [8]. В этом случае, если какая-либо молекула выходит через грань моделируемого объема с импульсом $\mathbf{p}_i$, то через его противолежащую грань входит молекула с таким же импульсом. В результате наряду с основным объемом рассматривается и эволюция всех окружающих его копий.

В начальный момент времени молекулы распределяются равномерно по объему моделирования в соответствии с заданной числовой плотностью n. Скорости молекул $\mathbf{v}_i$ в объеме моделирования разыгрываются согласно распределению Максвелла при заданной температуре T:

$$f_M(\mathbf{v}_i) = n\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}_i^2}{2kT}\right), \tag{2}$$

где m – масса молекулы, k – постоянная Больцмана. При этом, поскольку моделируется равновесное состояние, то суммарный импульс молекул системы должен быть равным нулю, а энергия соответствовать температуре. Равенство суммарного импульса нулю достигается следующим образом: генерируются скорости $N-\sqrt{N}$ молекул и подсчитывается их суммарный импульс. Затем полученный импульс с противоположным знаком распределяется между $\left(\sqrt{N}-1\right)$ оставшимися молекулами, после этого подсчитывается суммарный импульс этих молекул, и он с обратным знаком присваивается оставшейся молекуле. Таким образом, удается достичь состояния, при котором суммарный импульс системы молекул равен нулю и нет молекулы с очень большой скоростью. Следует, однако, иметь в виду, что приготовленная таким образом система в общем случае равновесной не является. Чтобы достичь равновесия, производится предварительный расчет, в результате которого распределение частиц по пространству станет случайным и равномерным, а по скоростям – максвелловским (2). Последнее проверяется. Расчет начинается после достижения максвелловского распределения.

Входными параметрами моделируемой системы являются объем моделирования $V = L^3$, где L – длина грани кубического объема (или его длина X, ширина Y и высота $|Z$ для параллелепипеда), диаметр молекулы d, ее масса m, массовая плотность газа $\rho = mn$ и его температура T.

Имитация динамики рассматриваемой молекулярной системы начинается с составления списка всех молекул. В начальный момент времени t все молекулы в некотором произвольном порядке вносятся в список, в список заносятся все их координаты и скорости: $\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{r}_N, \mathbf{v}_N$. Это соответствует списку в фазовом пространстве системы. Порядок частиц в списке определяет различные

микросостояния рассматриваемой молекулярной системы. И, следовательно, определяет разные фазовые траектории. Затем выбирается интервал времени $\tau_1 = d / \mathrm{v}_{\max}(t)$, где $\mathrm{v}_{\max}$ – максимальная по модулю скорость молекул в рассматриваемой системе в данный момент времени. Таким образом, частица за это время не может пройти расстояние, большее ее диаметра. Формирование списка для момента $(t+\tau_1)$ начинается с рассмотрения молекулы 1. Сначала она сдвигается в конфигурационном пространстве на расстояние $\vec{r}_1^{\,'} = \vec{r}_1 + \vec{\mathrm{v}}_1 \tau_1$. При этом пересекающиеся конфигурации молекул исключаются. Затем анализируется возможность ее соударения с окружающими молекулами. Для этого генерируется случайное число из интервала $[0,1]$ и если оно окажется меньше средней вероятности соударения $P_{\tau_1} = 4\tau_1 n d^2 \sqrt{\pi kT / m}$, тогда считается, что соударение произошло. Молекула j, с которой молекула 1 столкнулась, выбирается случайно из оставшихся $(N-1)$ молекул.

После того как обработаны все смещения молекул, последовательно обрабатываются все соударения молекул i и j. Скорости молекул изменяются в соответствие с законами упругого соударения:

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i + (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e})\mathbf{e}, \quad \mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j + (\mathbf{v}_{ji} \cdot \mathbf{e})\mathbf{e}, \tag{3}$$

где $\mathbf{v}_{ji} = (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i)$ – вектор относительной скорости, а $\mathbf{e}$ – единичный вектор направления от центра молекулы j к центру молекулы i. В результате формируется список для момента $(t+\tau_1)$: $\mathbf{r}'_1, \mathbf{v}'_1, \mathbf{r}'_2, \mathbf{v}'_2, ..., \mathbf{r}'_N, \mathbf{v}'_N$.

На следующем шаге $(t+\tau_1)$ снова выбирается время $\tau_2 = d / \mathrm{v}_{\max}(t+\tau_1)$ и процедура повторяется. Описанная процедура выполняется до тех пор, пока не закончится заданное время расчета t_s: $t_s = \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + ... + \tau_k$. В результате в процессе расчета получаются наборы динамических переменных рассматриваемой системы в последовательные моменты времени $\tau_1, \tau_2, ..., \tau_k$, используя которые, можно затем вычислить все необходимые макроскопические величины.

2. Алгоритм имитации динамики разреженного газа в объеме

Описанный алгоритм предназначен для моделирования процессов переноса в разреженных газах. В частности, таким образом можно рассчитать коэффициенты самодиффузии, диффузии, вязкости и т.д. В настоящей работе для иллюстрации возможностей представленного алгоритма рассчитан коэффициент вязкости разреженного газа. Для вычисления коэффициента вязкости используется соотношение Гельфанда–Эйнштейна [21]:

$$\eta = \frac{m^2}{2VkTs} \left\langle \left[\sum_{i=1}^{N} \dot{x}_i(t+s) y_i(t+s) - \dot{x}_i(t) y_i(t) \right] \right\rangle, \tag{4}$$

где s – смещение по времени; $\dot{x}_i$ – x-компонента скорость частицы; y_i – y-компонента координаты частицы. Угловые скобки означают усреднение по ансамблю фазовых траекторий. В примере, приведенном ниже, усреднение проводилось по 1000 фазовым траекториям. Траектории получены следующим образом. Время расчета t_s равнялось ста временам свободного пробега. Спустя это время образуется некоторая конфигурация молекул, которая используется для расчета следующей фазовой траектории. Таким образом, каждая траектория рассчитыва-

ется по независимым временным интервалам. Полное время расчета равнялось 10^5 времен свободного пробега. В расчетах использовалось 3200 молекул.

В табл. 1 представлены данные моделирования коэффициента вязкости благородных газов Ar, Kr, Xe при температуре 273 К и атмосферном давлении. Диаметры молекул газов взяты из монографии [16] и равнялись: 0,366 нм для Ar, 0,42 нм для Kr и 0,494 нм для Xe. Здесь η_e – экспериментальное значение, η – полученное разработанным в данной работе алгоритмом. Экспериментальные данные взяты из справочника [22]. В последней строке приводится относительная погрешность моделирования Δ.

Таблица 1 / Table 1

Сопоставление данных моделирования коэффициента вязкости газов с экспериментальными

A comparison of the simulation data of the viscosity of gases with the experimental

	Ar	*Kr*	*Xe*
η, 10^{-6} Па · с	22,97	25,87	23,7
η_e, 10^{-6} Па · с	22,7	25,7	23,3
Δ, %	1,18	1,43	1,72

Приведенные данные свидетельствуют о том, что коэффициенты вязкости моделируются с точностью не ниже 2 %.

Заключение

В заключение стоит отметить, что представленный алгоритм чрезвычайно прост в реализации и, как показывает проведенное тестирование, вполне жизнеспособен. Его эффективность определяется несколькими обстоятельствами. Прежде всего, числом использующихся молекул. При применении метода МД достаточно высокая точность моделирования коэффициентов переноса достигается лишь при использовании десятков тысяч молекул [23]. Стоит отметить, что метод МД фактически вообще не удается применить для моделирования умеренно разреженного газа, рассматриваемого в настоящей статье. Точность предлагаемого алгоритма растет с увеличением числа используемых для моделирования молекул. Это иллюстрируют данные табл. 2, где приведены значения коэффициента вязкости для аргона, полученные при использовании 3200, 1600 и 400 молекул.

Таблица 2 / Table 2

Зависимость моделируемого значения коэффициента вязкости Ar от числа используемых молекул

The dependence of the simulated values of the coefficient of viscosity Ar to the number of molecules

	3200	1600	400
η, 10^{-6} Па · с	22,97	23,31	23,4
η_e, 10^{-6} Па · с	22,7	22,7	22,7
Δ, %	1,2	2,7	3,1

Вторым важным обстоятельством, определяющим время расчета, является число членов ансамбля, по которому производится усреднение полученных данных. Точность моделирования с ростом числа членов ансамбля растет. Так, например, при расчете коэффициента вязкости аргона с использованием 3200 молекул и 1000 траекторий относительная погрешность составляла 1,2 %, при использовании 500 – 2,4 %, а 125 – 5,9 %.

Наконец, для разреженного газа интервал τ_i вполне можно увеличить, важно только, чтобы он был существенно меньше среднего времени свободного пробега молекул. Еще одним способом упрощения алгоритма является отказ от рассмотрения переноса молекул в конфигурационном пространстве. Для моделирования коэффициентов переноса в общем случае достаточно рассмотреть пространственно-однородную систему.

В данной статье алгоритм реализован для молекул с потенциалом взаимодействия (1). Однако его вполне можно обобщить и для практически любого реального потенциала межмолекулярного взаимодействия.

Конечно, кинетическая теория позволяет вычислить коэффициенты переноса, если известны межчастичные потенциалы взаимодействия. На практике осуществить это не так просто. Во-первых, для произвольного потенциала взаимодействия не известны значения так называемых Ω-интегралов, а их расчет является совсем не тривиальной задачей. Во-вторых, для вычисления ряда коэффициентов переноса необходимо использовать достаточно много полиномов Сонина или использовать достаточно сложные вариационные процедуры, что делает вычисление коэффициентов переноса нетривиальной задачей. Таким образом, иметь для расчета коэффициентов переноса альтернативный метод моделирования весьма полезно. Помимо этого данный алгоритм вполне можно обобщить и для описания неравновесных состояний газа.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Alder B.J., Wainwright T.E.** Phase transition for a hard sphere system // The Journal of Chemical Physics. – 1957. – Vol. 27, iss. 5. – P. 1208–1209. – doi: 10.1063/1.1743957.
2. **Kubo R.** Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems // Journal of the Physical Society of Japan. – 1957. – Vol. 12, iss. 6. – P. 570–584. – doi: 10.1143/JPSJ.12.570.
3. **Kubo R., Yokota M., Nakajima S.** Statistical-mechanical theory of irreversible processes. 2. Reaction on thermal disturbances // Journal of the Physical Society of Japan. – 1957. – Vol. 12, iss. 11. – P. 1203–1226. – doi: 10.1143/JPSJ.12.1203.
4. **Green H.S.** Theories of transport in fluids // Journal of Mathematical Physics. – 1961. – Vol. 2, iss. 3. – P. 344–348. – doi: 10.1063/1.1703720.
5. **McLennan J.A.** The formal statistical theory of transport processes // Advances in Chemical Physics. – 1963. – Vol. 5. – P. 261–317. – doi: 10.1002/9780470143513.ch6.
6. **Зубарев Д.Н.** Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 415 с.
7. **Рудяк В.Я.** Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. – Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1987. – 272 с.
8. **Рудяк В.Я.** Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 2. Гидромеханика. – Новосибирск: НГАСУ, 2005. – 468 с.
9. **Валуев А.А., Норман Г.Э., Подлипчук В.Ю.** Энтропия Крылова–Колмогорова неупорядоченных Леннард-Джонсоновских систем // Математическое моделирование. – 1990. – Т. 2, № 5. – С. 3–7.
10. **Норман Г.Э., Стегайлов В.В.** Стохастические свойства молекулярно-динамической Ленард-Джонсовской системы в равновесном и неравновесном состояниях // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2001. – Т. 119, № 5. – С. 1011–1020.

11. **Norman G.E., Stegailov V.V.** Stochastic and dynamic properties of molecular dynamics systems: simple liquids, plasma and electrolytes, polymers // Computer Physics Communications. – 2002. – Vol. 147, iss. 1–2. – P. 678–683. – doi: 10.1016/S0010-4655(02)00376-4.
12. **Норман Г.Э., Стегайлов В.В.** Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. – 2012. – Т 24, № 6. – С. 3–44.
13. **Komatsu N., Abe T.** Numerical irreversibility in time reversible molecular dynamics simulation // Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2004. – Vol. 195, iss. 3–4. – P. 391–397. – doi: 10.1016/j.physd.2004.05.004.
14. **Рудяк В.Я., Иванов Д.А.** Компьютерное моделирование динамики конечного числа взаимодействующих частиц // Доклады Академии наук высшей школы Российской Федерации. – 2003. – № 1. – С. 30–38.
15. **Рудяк В.Я., Иванов Д.А.** Динамические и стохастические свойства открытой системы конечного числа упруго взаимодействующих частиц // Труды НГАСУ. – 2004. – Т. 7, № 3. – С. 47–58.
16. **Берд Г.** Молекулярная газовая динамика / пер. с англ. А.И. Ерофеева, О.Г. Фридлендера, В.Е. Яницкого. – М.: Мир, 1981. – 320 с.
17. **Рудяк В.Я.** Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 1. Кинетическая теория. – Новосибирск: НГАСУ, 2004. – 320 с.
18. **Гимельшейн С.Ф., Рудяк В.Я.** Моделирование разреженного газа системой малого числа частиц // Письма в ЖТФ. – 1991. – Т. 17, № 19. – С. 74–77.
19. **Гимельшейн С.Ф., Рудяк В.Я.** Новая схема метода прямого статистического моделирования // Сибирский физико-технический журнал. – 1992. – № 3. – С. 3–6.
20. **Рудяк В.Я., Лежнев Е.В.** Имитационный алгоритм моделирования диффузии в жидкостях // Научный вестник НГТУ. – 2014. – № 4 (57). – С. 167–174. – doi: 10.17212/1814-1196-2014-4-167-174.
21. **Helfand E.** Transport coefficients from dissipation in canonical ensemble. Theory of molecular friction constant // Physical Review. – 1960. – Vol. 119, iss. 1. – P. 1–9. – doi: 10.1103/PhysRev.119.1.
22. Физические величины: справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1234 с.
23. Моделирование процессов переноса на основе метода молекулярной динамики. Коэффициент самодиффузии / В.Я. Рудяк, А.А. Белкин, Д.А. Иванов, В.В. Егоров // Теплофизика высоких температур. – 2008. – Т. 46, № 1. – С. 35–44.
24. **Чепмен С., Каулинг Т.Д.** Математическая теория неоднородных газов. – М.: Госиноиздат, 1960. – 510 с.

STATISTICAL SIMULATION OF RAREFIED GAS VISCOSITY

Rudyak V.Ya.[1], Lezhnev E.V.[1,2]
[1]*Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Novosibirsk, Russian Federation*
[2]*Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russian Federation*

Molecular modeling of the transport processes is unique in many cases. The most adequate method of such modeling is the molecular dynamics method. However it is hang-the-expense approach from the point of view of necessary computing resources. In spite of the fact that the method of molecular dynamics has predictive force of experiment, it does not give exact phase trajectories of investigated because movement of molecular systems unstably on Lyapunov concerning brought disturbances (at numerical modeling they always exist) and takes place mixing of phase trajectories. In present paper the algorithm was constricted in which the phase trajectories of the considered molecular systems are simulated stochastically. Naturally, the conservative laws should be carried out at such simulation. The algorithm is realized for the description of the transport processes in the rarefied gases. The molecules interact each other is described by the hard spheres potential. At the initial moment of time all molecules in some any order are entered in the list. Then in consecutive order for each molecule the process of its free shift and impact with randomlly chosen molecule from the list is realized. The probability of collision is defined

from comparison of the random number with average probability for the chosen interval of time. As a result of modeling data about co-ordinates and impulses of all considered molecules during the consecutive moments of time are obtained. Using these data the transport coefficients are calculated by means of nonequilibrium statistical mechanics method. As a test the viscosity coefficients of several rarefied gases are simulated. It is shown, that accuracy of an order of 1-2 % can be received using rather a small number of molecules. This accuracy grows with increase of the molecules number in the system and number of independent phase trajectories on which result averaging is made.

Keywords: transport processes, rarefied gas, stochastic modeling, molecular simulation, viscosity, statistical modeling.

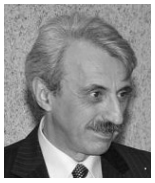
DOI: 10.17212/1727-2769-2015-3-99-108

REFERENCES

1. Alder B.J., Wainwright T.E. Phase transition for a hard sphere system. *The Journal of Chemical Physics*, 1957, vol. 27, iss. 5, pp. 1208–1209. doi: 10.1063/1.1743957
2. Kubo R. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1957, vol. 12, iss. 6, pp. 570–584. doi: 10.1143/JPSJ.12.570
3. Kubo R., Yokota M., Nakajima S. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. 2. Reaction on thermal disturbances. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1957, vol. 12, iss. 11, pp. 1203–1226. doi: 10.1143/JPSJ.12.1203
4. Green H.S. Theories of transport in fluids. *Journal of Mathematical Physics*, 1961, vol. 2, iss. 3, pp. 344–348. doi: 10.1063/1.1703720
5. McLennan J.A. The formal statistical theory of transport processes. *Advances in Chemical Physics*, 1963, vol. 5, pp. 261–317. doi: 10.1002/9780470143513.ch6
6. Zubarev D.N. *Neravnovesnaya statisticheskaya termodinamika* [Nonequilibrium statistical thermodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1971. 415 p.
7. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya teoriya dissipativnykh protsessov v gazakh i zhidkostyakh* [Statistical theory of dissipative processes in gases and liquids]. Novosibirsk, Nauka Publ., Siberian Branch, 1987. 272 p.
8. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya aerogidromekhanika gomogennykh i geterogennykh sred.* T. 2. *Gidromekhanika* [Statistical aerohydrodynamics homogeneous and heterogeneous environments. Vol. 2. Hydromechanics]. Novosibirsk, NGASU Publ., 2005. 468 p.
9. Valuev A.A., Norman G.E., Podlipchuk V.Yu. Entropiya Krylova–Kolmogorova neuporyadochennykh Lennard–Dzhonsonovskikh sistem [The Krylov–Kolmogorov enthropy of a disordered Lennard–Jones systems]. *Matematicheskoe modelirovanie – Mathematical Models and Computer Simulations,* 1990, vol. 2, iss. 5, pp. 3–7. (In Russian)
10. Norman G.E., Stegailov V.V. Stochastic properties of molecular dynamics Lennard-Jones system in equilibrium and nonequilibrium conditions. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2001, vol. 92, iss. 5, pp. 879–886. doi: 10.1134/1.1378182. Translated from *Zhurnal eksperimental'noi i teoreticheskoi fiziki*, 2001, vol. 119, iss. 5, pp. 1011–1020.
11. Norman G.E., Stegailov V.V. Stochastic and dynamic properties of molecular dynamics systems: simple liquids, plasma and electrolytes, polymers. *Computer Physics Communications*, 2002, vol. 147, iss. 1–2, pp. 678–683. doi: 10.1016/S0010-4655(02)00376-4
12. Norman G.E., Stegailov V.V. Stochastic theory of the classical molecular dynamics method. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2013, vol. 5, iss. 4, pp. 305–333. doi: 10.1134/S2070048213040108. Translated from *Matematicheskoe modelirovanie*, 2012, vol. 24, iss. 6, pp. 3–44.
13. Komatsu N., Abe T. Numerical irreversibility in time reversible molecular dynamics simulation. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 2004, vol. 195, iss. 3–4, pp. 391–397. doi: 10.1016/j.physd.2004.05.004
14. Rudyak V.Ya., Ivanov D.A. Komp'yuternoe modelirovanie dinamiki konechnogo chisla vzaimodeistvuyushchikh chastits [Computer simulation of the dynamics of a finite number of interacting particles]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2003, no. 1, pp. 30–38.

15. Rudyak V.Ya., Ivanov D.A. Dinamicheskie i stokhasticheskie svoistva otkrytoi sistemy konechnogo chisla uprugo vzaimodeistvuyushchikh chastits [Dynamic and stochastic properties of an open system of a finite number of elastically interacting particles]. *Trudy NGASU – Proceedings NSUACE*, 2004, vol. 7, no. 3, pp. 47–58.
16. Bird G.A. *Molecular gas dynamics*. Oxford, Clarendon Press, 1976. 415 p. (Russ. ed.: Berd G. *Molekulyarnaya gazovaya dinamika*. Translated from English A.I. Erofeev, O.G. Fridlender, V.E. Yanitskii. Moscow, Mir Publ., 1981. 319 p.).
17. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya aerogidromekhanika gomogennykh i geterogennykh sred*. T. 1. *Kineticheskaya teoriya* [Statistical aerohydrodynamics homogeneous and heterogeneous environments. Vol. 1. Kinetic theory]. Novosibirsk, NGASU Publ., 2004. 320 p.
18. Gimel'shein S.F., Rudyak V.Ya. Modelirovanie razrezhennogo gaza sistemoi malogo chisla chastits [Simulation of rarefied gas system a small number of particles]. *Pis'ma v ZhTF – Soviet Technical Physics Letters*, 1991, vol. 17, no. 19, pp. 74–77.
19. Gimel'shein S.F., Rudyak V.Ya. Novaya skhema metoda pryamogo statisticheskogo modelirovaniya [The new scheme of direct statistical modeling]. *Sibirskii fiziko-tekhnicheskii zhurnal – Siberian Physics-Techniques Journal*, 1992, no. 3, pp. 3–6.
20. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Imitatsionnyi algoritm modelirovaniya diffuzii v zhidkostyakh [An imitation algorithm of diffusion simulation in liquids]. *Nauchnyi vestnik Novosibirskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta – Science bulletin of the Novosibirsk state technical university*, 2014, no. 4 (57), pp. 167–174. doi: 10.17212/1814-1196-2014-4-167-174
21. Helfand E. Transport coefficients from dissipation in canonical ensemble. Theory of molecular friction constant. *Physical Review*, 1960, vol. 119, iss. 1, pp. 1–9. doi: 10.1103/PhysRev.119.1
22. Grigor'ev I.S., Meilikhov E.Z., eds. *Fizicheskie velichiny: spravochnik* [Physical quantities: reference book]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 1234 p.
23. Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Ivanov D.A., Egorov V.V. The simulation of transport processes using the method of molecular dynamics. Self-diffusion coefficient. *High Temperature*, 2008, vol. 46, no. 1, pp. 30–39. doi: 10.1134/s10740-008-1006-1. Translated from *Teplofizika vysokikh temperatur*, 2008, vol. 46, no. 1, pp. 35–44.
24. Chapman S., Cowling T.G. *The mathematical theory of non-uniform gases. An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases*. Cambridge, Cambridge University Press, 1952 (Russ. ed.: Chepmen S., Kauling T.D. *Matematicheskaya teoriya neodnorodnykh gazov*. Translated from English E.V. Malinovskaya. Moscow, Gosinoizdat Publ., 1960. 510 p.).

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), заведующий кафедрой теоретической механики НГАСУ (Сибстрин). 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 5 монографий. (Адрес: 630008, Россия, Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

Rudiak Valerii Iakovlevich (b. 1945) – Doctor of Science (Phys.&Math.), Professor, Honored Worker of Higher School of Russia, member of the MAS HS, member of the American Nano Society, Head of the Department of Theoretical Mechanics NGASU (Sibstrin). 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 5 monographs. (Address: 113, Leningradskaya st., Novosibirsk, 630008, Russian Federation. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

Лежнев Евгений Васильевич – родился в 1976 году, канд. техн. наук, доцент кафедры высшей математики НГТУ. Основное научное направление исследований: моделирование процессов переноса. Имеет 9 публикаций. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: lionlev@yandex.ru).

Lezhnev Evgenii Vasil'evich (b. 1976) – Candidate of Science (Eng.), assistant professor of higher mathematics NSTU. His research interests are currently focused on: modeling of transport processes. He is author of 9 scientific publications. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russian Federation. E-mail: lionlev@yandex.ru).

Статья поступила 29 мая 2015 г.
Received May 29, 2015

To Reference:

Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stokhasticheskoe modelirovanie vyazkosti razrezhennykh gazov [Statistical simulation of rarefied gas viscosity]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2015, no. 3 (28), pp. 99–108. doi: 10.17212/1727-2769-2015-3-99-108