

УДК 533.15;538.93

Стохастический алгоритм моделирования бинарной диффузии газов*

В.Я. РУДЯК¹, Е.В. ЛЕЖНЕВ^{1,2}

¹ 630008, РФ, г. Новосибирск, Ленинградская, 113, Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (СИБСТРИН), доктор физико-математических наук, профессор. E-mail: valery.rudyak@mail.ru

² 630073, РФ, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20, Новосибирский государственный технический университет, кандидат технических наук, E-mail: lionlev@yandex.ru

Надежное прогнозирование характеристик течений жидкостей и газов важно как с точки зрения теории, так и практически. Методов моделирования коэффициентов переноса разреженных газов до недавнего времени не было. Нами разработан стохастический алгоритм моделирования динамики разреженного газа, с помощью которого были вычислены соответствующие коэффициенты самодиффузии и вязкости. В данной работе этот алгоритм обобщается для моделирования бинарных смесей разреженных газов. 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 соударения. Пары сталкивающихся молекул выбираются случайно. Тестирование алгоритма проведено на примере расчета коэффициента диффузии. Вследствие того, что для вычисления коэффициента диффузии по формулам Грина–Кубо необходима информация только о скоростях молекул, время расчета удастся существенно сократить, убрав фазу обработки смещений молекул. Рассмотрена диффузия бинарных смесей Кг–Аг, Хе–Кг, Хе–Аг при нормальных условиях. Диаметры молекул определялись на основе кинетической теории разреженных газов. Сопоставление данных моделирования коэффициента диффузии с экспериментальными показывает, что предлагаемый алгоритм позволяет получить достаточно хорошую точность: около 3 % при 3200 молекулах. Однако эту точность нетрудно повысить, увеличив число молекул в системе. Точность растет и с увеличением числа фазовых траекторий системы, по которым производится усреднение рассчитываемых коэффициентов переноса.

Ключевые слова: процессы переноса, диффузия, разреженный газ, стохастическое моделирование, бинарные смеси, молекулярное моделирование, твердые сферы

DOI: 10.17212/1814-1196-2017-3-95-103

* Статья получена 05 июня 2017 г.
Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 17-01-00040).

ВВЕДЕНИЕ

Изучение течений жидкостей и газов важно как практически, так и теоретически. Это невозможно без надежного прогнозирования характеристик этих течений. Физическое моделирование с экспериментальным определением параметров течений в различных режимах, как правило, требует больших временных и финансовых затрат. Кроме того, вследствие ограниченных возможностей современных экспериментальных датчиков и измерительных приборов экспериментальные наблюдения в ряде случаев не дают полного представления об исследуемом явлении. В разреженном газе вычисление коэффициентов переноса в принципе решается кинетической теорией Больцмана. Здесь получены явные формулы, определяющие коэффициенты переноса (см., например, работы [1–6]). Несмотря на это, расчет коэффициентов переноса – совсем не тривиальная задача, решить которую нередко не удастся. Методов моделирования коэффициентов переноса разреженных газов до недавних пор не существовало. В работах [7–9] предложен стохастический алгоритм моделирования коэффициентов самодиффузии и вязкости. Тестирование этого алгоритма показало, что с его помощью можно рассчитывать указанные коэффициенты с точностью, по крайней мере, не ниже точности их измерения. В настоящей статье данный алгоритм обобщается для описания диффузии бинарной смеси разреженных газов. В качестве потенциала взаимодействия молекул используется потенциал твердых сфер.

1. АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Молекулы моделируемого газа помещаются в ячейку моделирования, которая представляет собой прямоугольный параллелепипед (куб). Для моделирования газа в объеме используются периодические граничные условия, т. е. если какая-либо молекула выходит через грань моделируемого объема с импульсом \mathbf{p}_i , то через его противоположащую грань входит молекула с таким же импульсом. В результате наряду с эволюцией молекул в основной ячейке учитывается и их эволюция во всех окружающих ее копиях.

В начальный момент времени молекулы распределяются равномерно по объему моделирования (по ячейке) в соответствии с заданными плотностями ρ_1 , ρ_2 и массовых долей x_i . Кроме того, даны массы молекул m_1 , m_2 , температура среды T и объем V . Скорости молекул \mathbf{v}_i в ячейке моделирования разыгрываются согласно распределению Максвелла при заданной температуре T :

$$f_M(\mathbf{v}_i) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m|\mathbf{v}_i|^2}{2kT} \right), \quad (1)$$

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 для каждой компоненты достигается следующим образом: генерируются скорости $(N - \sqrt{N})$ молекул, и подсчи-

тывается их суммарный импульс. Затем полученный импульс с противоположным знаком распределяется между $(\sqrt{N} - 1)$ оставшимися молекулами, после этого подсчитывается суммарный импульс этих молекул, и он с обратным знаком присваивается оставшейся молекуле. Таким образом, удается достичь того, что суммарный импульс системы равен нулю и нет молекул с очень большими скоростями. Однако приготовленная таким образом система в общем случае равновесной все еще не является. Чтобы достичь равновесия, производится предварительный расчет, в результате которого распределение молекул по скоростям становится максвелловским (1).

Молекулы газа взаимодействуют друг с другом посредством потенциала твердых сфер:

$$\Phi(r) = \begin{cases} \infty & \text{при } r \leq d, \\ 0 & \text{при } r > d. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $d = (d_1 + d_2) / 2$, где d_1, d_2 – диаметры молекул изучаемых газов.

Имитация динамики рассматриваемого разреженного газа начинается с составления списка. В начальный момент времени t все молекулы в некотором произвольном порядке вносятся в список. Это соответствует списку и в фазовом пространстве. Меняя порядок молекул в списке, мы будем получать различные фазовые траектории. Затем выбирается интервал времени $\tau_1 = d_{\min} / v_{\max}$, где v_{\max} – максимальная по модулю скорость молекул системы в данный момент времени, $d_{\min} = \min(d_1, d_2)$. Формирование списка для момента $(t + \tau_1)$ начинается с рассмотрения молекулы 1. Поскольку в общем случае для расчета коэффициентов переноса разреженного газа достаточно информации лишь о скоростях молекул [1, 8, 9], то эволюцию в физическом пространстве можно не рассматривать. Таким образом, фактически можно рассматривать пространственно однородную систему и исследовать только динамику изменения скоростей молекул. Тем не менее координаты молекул $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ нужны для корректной обработки столкновений, поэтому достаточно, чтобы в начальный момент времени молекулы были распределены по пространству равномерно, и в дальнейшем положение молекул меняться не будет.

Итак, на момент времени t молекулы имеют скорости $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$. Обработка ведется по списку, начиная с молекулы 1. Для того чтобы понять, столкнулась ли за время τ_1 молекула 1 с какой-либо другой, генерируется случайное число u , равномерно распределенное на интервале $(0; 1)$. Если оно окажется меньше средней вероятности столкновения, тогда столкновение произойдет. Пусть для определенности у нас молекула первого вида (для второго вида формулы аналогичны). В этом случае вероятность столкновения равна $P_\tau = \frac{\tau_1}{\tau_1^t} = 4\tau_1\rho_1\sigma_1^2 \sqrt{\frac{\pi RT}{m}} + 2\tau_1\rho_2\sigma_{12}^2 \sqrt{\frac{2\pi RT}{x_1 m_2}} = P_1 + P_{12}$ (τ_1^t – время свободного пробега молекул первого вида). Тогда для молекулы 1 случайно из $N - 1$ оставшихся молекул выбирается молекула j , с которой это столкнове-

ние будет реализовано. Причем если $u < P_1$, то выбирается молекула первого типа; если $P_1 \leq u < P_1 + P_{12}$, тогда выбирается молекула второго типа. В результате столкновения скорости молекул меняются согласно законам упругого соударения:

$$\mathbf{v}'_1 = (m_1 \mathbf{v}_1 + m_j \mathbf{v}_j) / (m_1 + m_j) + (\mathbf{v}_{1j} \cdot \mathbf{e}) \mathbf{e} m_j / (m_1 + m_j),$$

$$\mathbf{v}'_j = (m_1 \mathbf{v}_1 + m_j \mathbf{v}_j) / (m_1 + m_j) - (\mathbf{v}_{1j} \cdot \mathbf{e}) \mathbf{e} m_1 / (m_1 + m_j),$$

где $\mathbf{v}_{j1} = (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_1)$ – вектор относительной скорости, а \mathbf{e} – единичный вектор направления от центра молекулы j к центру молекулы 1.

В случае если генерируемое число оказалось больше средней вероятности столкновения, молекула 1 в промежутке времени τ_1 не сталкивается и ее скорость остается равной \mathbf{v}_1 . Если же она столкнулась, то в исходном списке изменяются скорости молекул 1 и j . Аналогично последовательно обрабатываются все оставшиеся молекулы. В результате в конце формируется новый список скоростей молекул $(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2, \dots, \mathbf{v}'_N)$, при этом часть молекул из этого списка могла за это время не столкнуться, например молекула k . Тогда ее скорость остается прежней, т. е. $\mathbf{v}'_k \equiv \mathbf{v}_k$.

После формирования списка на момент времени $(t + \tau_1)$ выбирается интервал времени $\tau_2 = d_{\min} / v_{\max}$, где v_{\max} – максимальная по модулю скорость молекул системы в момент времени $(t + \tau_1)$ и процедура повторяется. Описанная процедура повторяется до тех пор, пока не закончится заданное время расчета t_s , которое равно $t_s = \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \dots + \tau_N$. Результатом расчета является полный набор скоростей всех молекул моделируемой системы в последовательные моменты времени. Используя эту информацию, можно рассчитать практически все наблюдаемые характеристики газа, включая коэффициент диффузии.

2. РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ

Коэффициенты переноса в общем случае определяются флуктуационно-диссипационными теоремами, которые связывают их значения с корреляторами соответствующих динамических переменных. В литературе эти формулы принято называть формулами Грина–Кубо [10–13]. В частности, коэффициент бинарной диффузии определяется выражением [14]:

$$D = \frac{1 - x_1}{x_1} L_{11} + \frac{x_1}{1 - x_1} L_{22} - L_{12} - L_{21}, \quad (3)$$

где коэффициенты L_{ij} определяются соотношениями

$$L_{ij} = \frac{1}{3N} \int_0^{\tau_p} \chi_{ij}(t) dt, \quad \chi_{ij}(t) = \sum_{k=1}^{N_i} [v_k^i(0) - v(0)] \sum_{l=1}^{N_j} [v_l^j(t) - v(t)]. \quad (4)$$

Здесь $v(t) = \frac{x_1}{N_1} \sum_{k=1}^{N_1} v_k^1(t) + \frac{(1-x_1)}{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} v_l^2(t)$, а τ_p – так называемое платовое

значение времени расчета, т. е. время, за которое коэффициент переноса (в данном случае диффузии) достигает постоянного значения [15]. Подынтегральное выражение и определяет корреляционные функции скоростей молекул, интегралы по времени от которых и дают значение коэффициента диффузии.

Используя полученные данные моделирования скоростей всех молекул в последовательные моменты времени, можно вычислить последовательно сначала корреляционные функции, а затем уже и коэффициенты диффузии. Поскольку в данном случае рассматривается разреженный газ, то все корреляционные функции должны затухать экспоненциально быстро с характерным временем порядка времени свободного пробега молекулы. Расчеты подтверждают это. На рис. 1 в качестве примера приведена эволюция автокорреляционной функции χ_{11} (4) для смеси Кг-Аг. Здесь время $t' = t / \tau$, где τ – время свободного пробега молекул типа 1. Автокорреляционная функция скорости молекул действительно затухает экспоненциально. Это, в частности, означает, что соответствующий коэффициент переноса быстро выходит на платовое значение. На рис. 2 приведена эволюция коэффициента диффузии (3) для указанной смеси газов при равных молярных долях. Выход на платовое значение происходит за 5–10 времен свободного пробега.

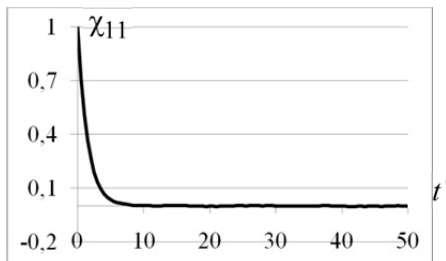


Рис. 1. График автокорреляционной функции

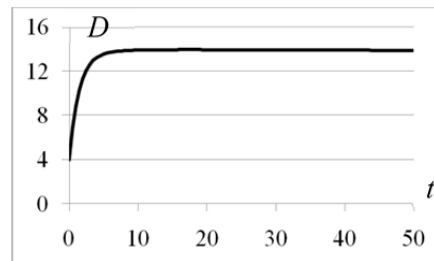


Рис. 2. График коэффициента диффузии

Мы сравнивали рассчитанные данные по коэффициенту диффузии для смесей Кг-Аг, Хе-Аг, Хе-Кг при атмосферном давлении и температуре 295 К. Экспериментальные данные коэффициентов диффузии смесей D_e взяты из работы [16]. Диаметры молекул вычислены на основе кинетической теории по коэффициенту самодиффузии, взятому из работы [14]: 0.302 нм, 0.357 нм и 0.412 нм для Аг, Кг, Хе соответственно. Расчет коэффициента диффузии D_c проводился на 1000 независимых траекторий, каждая траектория – 50 времен свободного пробега.

Таблица 1

Сопоставление данных моделирования коэффициента диффузии с экспериментальными данными [17]

T	Kr-Ar	Xe-Ar	Xe-Kr
$D_e, \text{см}^2/\text{с}$	13.58	11.1	7.43
$D_c, \text{см}^2/\text{с}$	13.22	11.42	7.19
$\Delta, \%$	2.63	2.88	3.28

Согласно этой таблице, точность вычисления коэффициента диффузии для смеси оказалась около 3 %, что практически близко к точности измерений.

Кроме того, необходимо исследовать влияние на точность числа траекторий и числа молекул. Рассматривать будем на примере Kr-Ar. В табл. 2 приводятся результаты: В зависимости от числа молекул N и числа траекторий L рассчитывалась точность Δ вычисления коэффициента диффузии.

Таблица 2

Точность вычисления коэффициента диффузии при различном числе молекул N и числе траекторий L для смеси Kr-Ar

N	6800	3400	1700	850		L	1000	500	250	125
$\Delta, \%$	1,88	2,63	3,97	4,97		$\Delta, \%$	2,63	3,82	4,42	5,76

Эти значения очень хорошо описываются зависимостью точности от \sqrt{L} и \sqrt{N} . Коэффициент корреляции был 0.97 для зависимости от числа траекторий и 0.98 – для зависимости от числа молекул, что очень хорошо согласуется с теоретической зависимостью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлены результаты работы стохастического алгоритма моделирования бинарной смеси разреженных газов. Точность вычисления коэффициента диффузии при использовании сравнительно небольшого числа молекул оказалась около 3 %. Время расчета на типичном ядре современной ЭВМ коэффициентов диффузии разреженного газа, приведенных выше, составляет часы. На основе этого можем утверждать, что данный алгоритм хорошо моделирует диффузию смесей разреженных газов, при этом не требует большой вычислительной мощности.

Другим важным обстоятельством, определяющим время расчета, является число траекторий, по которому производится усреднение полученных данных или число молекул. Время расчета по данному алгоритму растет линейным образом от числа молекул, причем зависимость одна и та же в обоих случаях. Таким образом, точность можно улучшить увеличением числа траекторий либо числа молекул.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чепмен С., Каулинг Е. Математическая теория неоднородных газов. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1960. – 510 с.
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. – 892 p.
3. Ferziger J.H., Kaper H.G. Mathematical theory of transport processes in gases. – Amsterdam: North-Holland Publ., 1972. – 428 p.
4. Burnett D. The distribution of velocities in a slightly non-uniform gas // Proceedings of the London Mathematical Society. – 1935. – Vol. 39, iss. 1. – P. 385–430.
5. Резибуа П., Леннер М. де. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов. – М.: Мир, 1980. – 424 с.
6. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. – М.: Наука, 1989. – 335 с.
7. Рудяк В.Я., Лежнев Е.В. Стохастическое моделирование коэффициентов переноса плотных газов // Доклады Академии наук высшей школы Российской Федерации. – 2016. – № 4 (33). – С. 22–32.
8. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic method for modeling of the rarefied gas transport coefficients // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – Vol. 738. – P. 012086.
9. Рудяк В.Я., Лежнев Е.В. Стохастический метод моделирования коэффициентов переноса разреженного газа // Математическое моделирование. – 2017. – Т. 29, № 3. – С. 113–122.
10. Kubo R., Yokota M., Nakajima S. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. II. Reaction on thermal disturbances // Journal of the Physical Society of Japan. – 1957. – Vol. 12, N 11. – P. 1203–1226.
11. Green H.S. Theories of transport in fluids // Journal of Mathematical Physics. – 1961. – Vol. 2, N 3. – P. 344–348.
12. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 415 с.
13. Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 2. Гидромеханика. – Новосибирск: НГАСУ, 2005. – 468 с.
14. Krishna R., Wesselingh J.A. The Maxwell-Stefan approach to mass transfer // Chemical Engineering Science. – 1997. – Vol. 52, N 6. – P. 861–911.
15. Моделирование процессов переноса на основе метода молекулярной динамики. Коэффициент самодиффузии / В.Я. Рудяк, А.А. Белкин, В.В. Егоров, Д.А. Иванов // ТВТ. – 2008. – Т. 46, № 1. – С. 35–44.
16. Heijningen R.J.J. van, Harpe J.P., Beenakker J.J.M. Determination of the diffusion coefficients of binary mixtures of the noble gases as a function of temperature and concentration // Physica. – 1968. – Vol. 38. – P. 1–34.
17. Григорьев И.С., Мейлихова Е.З. Физические величины: справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1234 с.

Рудяк Валерий Яковлевич, доктор физико-математических наук, 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 пять монографий. E-mail: valery.rudyak@mail.ru

Лежнев Евгений Васильевич, кандидат технических наук, доцент кафедры высшей математики Новосибирского государственного технического университета. Основное научное направление исследований: моделирование процессов переноса. Имеет 19 публикаций. E-mail: lionlev@yandex.ru

*A stochastic algorithm for simulating binary diffusion of gases**

V.Y. RUDYAK¹, E.V. LEZHNEV^{1,2}

¹Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering (Sibstrin), 114 Leningradskaya St., 630008, Russian Federation, D.Sc. (Physics&Mathematics), professor. E-mail: valery.rudyak@mail.ru

²Novosibirsk State Technical University, 20, K. Marx Prospekt, Novosibirsk, 630073, Russian Federation, PhD (Eng.). E-mail: lionlev@yandex.ru

A reliable prediction of characteristics of liquid and gas flows is important both for theory and practice. There have been no methods of modeling the transfer coefficients of rarefied gases until recently. We have developed a stochastic algorithm for modeling the dynamics of a rarefied gas with the help of which the corresponding coefficients of self-diffusion and viscosity were calculated. In this paper, this algorithm is generalized for modeling binary mixtures of rarefied gases. We consider systems of molecules interacting with one another through the potential of hard spheres. At the initial moment of time, all molecules in some arbitrary order are listed. Then, successively for each molecule, the collision process is realized. The pairs of colliding molecules are selected randomly. The algorithm was tested using the example of calculating the diffusion coefficient. Because the calculation of the Green-Kubo diffusion coefficient requires information only about the molecular velocities, the calculation time can be substantially reduced by eliminating the phase of processing molecular displacements. The diffusion of binary mixtures Kr-Ar, Xe-Kr, Xe-Ar under normal conditions is considered. The diameters of the molecules were determined on the basis of the kinetic theory of rarefied gases. Comparison of modeling data of the diffusion coefficient with the experimental data shows that the proposed algorithm makes it possible to obtain a fairly good accuracy of about 3% with 3200 molecules. However, this accuracy can be easily increased by increasing the number of molecules in the system. The accuracy also increases with the increase in the number of phase trajectories of the system based on which the calculated transport coefficients are averaged.

Keywords: Transfer processes; diffusion; rarefied gas; stochastic modeling; binary mixtures; molecular modeling; solid spheres

DOI: 10.17212/1814-1196-2017-3-95-103

REFERENCES

1. 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. 506 p. (Russ. ed.: Chepman S., Kauling T.D. *Matematicheskaya teoriya neodnorodnykh gazov.* Translated from English E.V. Malinovskaya. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1960. 510 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. 892 p.
3. Ferziger J.H., Kaper H.G. *Mathematical theory of transport processes in gases.* Amsterdam, North-Holland Publ., 1972. 428 p.
4. Burnett D. The distribution of velocities in a slightly non-uniform gas. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 1935, vol. 39, iss. 1, pp. 385–430.
5. Resibois P., Leener M. de. *Classical kinetic theory of fluids.* New York, Wiley, 1977 (Russ. ed.: Rezibua P., Lenner M. de. *Klassicheskaya kineticheskaya teoriya zhidkosti i gazov.* Moscow, Mir Publ., 1980. 424 p.).
6. Zhdanov V.M., Alievskii M.Ya. *Protsessy perenosa i relaksatsii v molekulyarnykh gazakh* [Transport and relaxation processes in molecular gases]. Moscow, Nauka Publ., 1989. 336 p.

* Received 05 June 2017.

7. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stokhasticheskoe modelirovanie koeffitsientov perenosa plotnykh gazov [Stochastic simulation of transport coefficients of dense gases]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school academy of sciences*, 2016, no. 4 (33), pp. 22–32.
8. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic method for modeling of the rarefied gas transport coefficients. *Journal of Physics: Conference Series*, 2016, vol. 738, p. 012086.
9. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stokhasticheskii metod modelirovaniya koeffitsientov perenosa razrezhenogo gaza [Stochastic simulation of rarefied gas transport coefficients]. *Matematicheskoe modelirovanie – Mathematical Models and Computer Simulations*, 2017, vol. 29, no. 3, pp. 113–122. (In Russian).
10. Kubo R., Yokota M., Nakajima S. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. II. Reaction on thermal disturbances. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1957, vol. 12, no. 11, pp. 1203–1226.
11. Green H.S. Theories of transport in fluids. *Journal of Mathematical Physics*, 1961, vol. 2, no. 3, pp. 344–348.
12. Zubarev D.N. *Neravnovesnaya statisticheskaya termodinamika* [Nonequilibrium statistical thermodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1974. 398 p.
13. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya aerogidromekhanika gomogennykh i geterogennykh sred. T. 2. Gidromekhanika* [Statistical aerohydrodynamics of homogeneous and heterogeneous media. Vol. 2. Hydromechanics]. Novosibirsk, NGASU Publ., 2005. 468 p.
14. Krishna R., Wesselingh J.A. The Maxwell-Stefan approach to mass transfer. *Chemical Engineering Science*, 1997, vol. 52, no. 6, pp. 861–911.
15. Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Ivanov D.A., Egorov V.V. Modelirovanie protsessov perenosa na osnove metoda molekulyarnoi dinamiki. Koeffitsient samodiffuzii [The simulation of transport processes using the method of molecular dynamics. Self-diffusion coefficient]. *Teplofizika vysokikh temperature – High Temperature*, 2008, vol. 46, no. 1, pp. 30–39. (In Russian).
16. Heijningen R.J.J. van, Harpe J.P., Beenakker J.J.M. Determination of the diffusion coefficients of binary mixtures of the noble gases as a function of temperature and concentration. *Physica*, 1968, vol. 38, pp. 1–34.
17. Grigor'ev I.S., Meilikhova E.Z. *Fizicheskie velichiny: spravochnik* [Physical quantities: handbook]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 1234 p.