

УДК 532.529:536.24

DOI: 10.18384/2310-7251-2023-2-51-64

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОТОКА С РЕЛЬЕФНЫМ ТЕЛОМ

Н. В. Зубова¹, И. А. Амелюшкин²

¹ *Московский государственный университет технологий и управления
им. К. Г. Разумовского*

109004, г. Москва, ул. Земляной Вал, д. 73, Российская Федерация

² *Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)*

*141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9,
Российская Федерация*

Аннотация

Цель: создание алгоритмов, позволяющих рассчитывать взаимодействие гетерогенного потока с наноструктурированными поверхностями твёрдых веществ из различных материалов, процессов смачивания и движения частиц на поверхности в потоке воздуха. Процедуры и методы. Используются методы молекулярного моделирования, известные физические закономерности и анализ исследований других авторов.

Результаты. В настоящей работе развит метод расчёта взаимодействия потока твёрдым телом, покрытие которого имеет рельеф и обладает различной степенью гидрофобности. Методом молекулярной динамики проведены параметрические исследования.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты могут быть использованы при исследовании возможностей управления состоянием пограничного слоя и зарождением турбулентности на молекулярном уровне.

Ключевые слова: рельефное тело, молекулярное моделирование, потенциалы взаимодействия, атомы кристаллической решётки

Благодарности: Исследование выполнено при поддержке РФФИ в рамках проекта № 19–29–13024

MOLECULAR MODELLING OF A FLOW INTERACTION WITH A RELIEF BODY

N. Zubova¹, I. Amelyushkin²

¹ *Moscow State University of Technology and Management
Zemlyanoi Val 73, Moscow 109004, Russian Federation*

² *Moscow Institute of Physics and Technology
Institutskii per. 9, Dolgoprudnyi 117303, Moscow Region, Russian Federation*

Abstract

Aim. We construct algorithms that allow calculating the interaction of a heterogeneous flow with nanostructured surfaces of solids made of various materials, as well as wetting processes and movement of particles on the surface in an air flow.

Methodology. Use is made of methods of molecular modeling and known physical laws; studies performed by other authors are analyzed.

Results. A method is developed for calculating the interaction of a flow with a solid body, whose coating has a relief and a different degree of hydrophobicity. Parametric studies are performed using the molecular dynamics method.

Research implications. The results can be used to study the possibilities of controlling the state of the boundary layer and the initiation of turbulence at the molecular level.

Keywords: relief body, molecular modeling, interaction potentials, crystal lattice atoms

Acknowledgments: The study was supported by the Russian Foundation for Basic Research under project No. 19-29-13024

Введение

Моделирование управления взаимодействием потока с обтекаемой поверхностью представляет большой интерес в различных областях науки и техники: разработка противообледенительных покрытий, изменение тепломассообмена, транспорт веществ по каналам, ламинаризация и турбулизация потока, управление пограничным слоем и ряд других приложений.

Развиваемый в настоящей работе подход позволяет учесть возможность прилипания молекул к поверхности обтекаемого тела для различных режимов взаимодействия, например, формирования пограничного слоя у рельефного тела, образования инея и конденсации.

В работе [1] представлены результаты молекулярно-динамического моделирования пограничного слоя однокомпонентной жидкости на волнистой поверхности с использованием упрощённого расчёта с помощью известного термостата Ланжевена и искусственного коэффициента трения. Взаимодействие твёрдых микрочастиц с шероховатой поверхностью исследовалось ранее теоретически и экспериментально [2; 3].

Принятая в настоящей работе расчётная область (рис. 1) – параллелепипед $x_{\max} \cdot y_{\max} \cdot z_{\max} = L \cdot H \cdot D$, длина расчётной области $L = 2H$, ширина расчётной области $D = H = 20 \div 100$ нм. Граничные условия в плоскостях $z = 0$ и $z = D$ являются периодическими с характерным периодом шероховатости λ . В

плоскости $x = 0$ задаётся массовый поток $q_x = \rho V_x$. По мере прохождения плоскостей $x = L$ и $y = H$ молекулы покидают расчётную область. В этом случае в плоскостях $x = 0$, $x = L$ и $y = H$ задаются дополнительные плотности потоков, обусловленные тепловым движением молекул $q_x = q_y = \rho \langle V \rangle / 2\sqrt{3} = \rho \sqrt{RT} / 2$. Здесь $\langle V \rangle$ – средняя скорость теплового движения молекул газа, T – температура.

Нижней границей расчётной области (рис. 1) является шероховатая поверхность обтекаемого тела, взаимодействие с которой описывается математическими моделями, определёнными далее. В этой области молекулы воды и воздуха взаимодействуют с атомами твёрдого тела с учётом их физических свойств и температуры. Тепловые скорости всех молекул газа и частиц определяются в соответствии с максвелловским распределением скоростей.

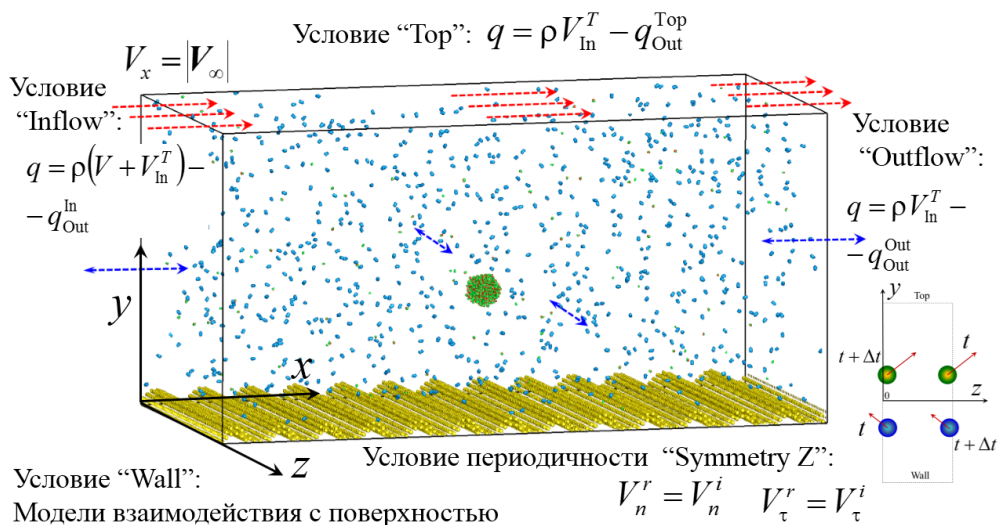


Рис. 1 / Fig. 1. Расчётная область и граничные условия / Computational domain and boundary conditions

Источник: подготовлен авторами

Математическая модель и численный метод

В рассматриваемом подходе важную роль играют параметры межмолекулярного взаимодействия, которые могут быть получены как на основе квантовомеханических расчетов, так и из уравнения состояния реального газа, например, Ван-дер-Ваальса:

$$(P - a\rho / V\mu) (1 - b\rho / \mu) = \rho R_0 T / \mu, \quad (1)$$

где

$$a = -2\pi N_A^2 \int_d^\infty U(r) r^2 dr = \pi N_A^2 \frac{10\sqrt{2}}{9} \varepsilon \sigma_0^3 = N_A \frac{5}{3} b \varepsilon, \quad (2)$$

$$b = N_A \frac{2}{3} \pi d^3, \quad \sigma_0 = \frac{d}{\sqrt[5]{2}} = \frac{1}{\sqrt[5]{2}} \sqrt[3]{\frac{3b}{2\pi N_A}}. \quad (3)$$

Здесь предполагается, что потенциал взаимодействия молекул сферически симметричный и описывается законом Леннарда-Джонса (см., напр., [4]), параметры которого связаны с константами уравнения состояния реального газа Ван-дер-Ваальса. Сферическая симметрия потенциала существенно упрощает молекулярное моделирование микро- и макроскопических аэрогидродинамических явлений. В приведённых выше формулах μ – молярная масса, d – «диаметр» молекулы.

В более общем случае сферически симметричный потенциал имеет вид:

$$U(r) = A \left(\chi \left(\frac{\sigma}{r} \right)^p - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^q \right), \quad (4)$$

В настоящей работе в предположении о потенциальной природе взаимодействия между атомами или молекулами протестированы различные схемы интегрирования уравнений молекулярной динамики [4] и выбор был сделан в пользу схемы Хокни-Иствуда (Hockney-Eastwood) [4].

Предполагается, что частица аэрозольного потока, соударяющаяся с поверхностью твёрдого тела, ускорена обтекающим его воздухом, представляющим собой смесь азота (79%) и кислорода (21%) с параметрами газа Ван-дер-Ваальса, которые вычислялись по правилу смешения Лоренца-Бертло:

$$a = \left(\sum \alpha_j \mu_j \right)^2 \cdot \left(\sum \frac{\alpha_j}{\mu_j} \sqrt{a_j} \right)^2; \quad b = \left(\sum \alpha_j \mu_j \right) \cdot \sum \frac{\alpha_j}{\mu_j} b_j; \quad R = R_0 \sum \frac{\alpha_j}{\mu_j} \quad (5)$$

Вещество стенки описывается параметром, введённым ранее [5],

$$AK = \epsilon_{w-m} / \epsilon_{m-m} \approx 0.5 (1 + \cos \theta_0) \quad (6)$$

коэффициентом растекания, который можно рассматривать как отношение энергии ϵ_{w-m} взаимодействия (A – адгезия) между молекулой потока (индекс m) и поверхностью атома (индекс w) к характерной энергии ϵ_{m-m} взаимодействия молекул потока друг с другом (K – когезия). Этот параметр характеризует свойства материала твёрдого тела, определяющие интенсивность прилипания к нему жидкости. Рассматриваются взаимодействия молекул, принадлежащих ко всем трём фазовым состояниям веществ: газа, налетающей частицы, жидкой или твёрдой, и поверхности обтекаемого тела.

Таблица 1 / Table 1

Характерные масштабы физических величин /
Characteristic scales of physical quantities

Физическая величина	Формула	Значение
Координата	σ_0	$2.6 \cdot 10^{-10}$ м
Скорость	$V_0 = \sqrt{\epsilon_0 / m_0}$	612.023 м/с
Время	$t_0 = \sigma_0 / V_0$	$0.425 \cdot 10^{-12}$ с
Угловая скорость	t_0^{-1}	$2.3529 \cdot 10^{12}$ с ⁻¹
Энергия межмолекулярного взаимодействия	ϵ_0	$1.12 \cdot 10^{-20}$ Дж
Ускорение молекул	V_0 / t_0	$1466 \cdot 10^{12}$ м/с ²
Плотность	m_0 / σ_0^3	1701 кг/м ³
Температура	$\epsilon_0 / 3k_B$	270.39 ° К
Давление поверхностных сил	ϵ_0 / σ_0^3	$6.828 \cdot 10^5$ Па
Сила межмолекулярного взаимодействия	ϵ_0 / σ_0	$4.308 \cdot 10^{-11}$ Н
Поверхностное натяжение	ϵ_0 / σ_0^2	0.165 Н/м
Период решётки тела	$a = 1.0954 \sigma_0$	$2.848 \cdot 10^{-10}$ м
Амплитуда колебаний атомов тела	$\Delta a = 0.2319 \sigma_0$	$0.603 \cdot 10^{-10}$ м
Скорость колебаний атомов	$V_A = \sqrt{k / m_0} \Delta a_0 = 13.16 \cdot V_0$	8055.160 м/с
Период колебаний атомов тела	$T_A = \sqrt{m_0 / k} = 0.3411 t_0$	$0.145 \cdot 10^{-12}$ с
Жёсткость модельной пружины	$k = Ea = 8.5949 \cdot \epsilon_0 / \sigma_0^2$	1.424 Н/м
Энергия колебаний	$k \Delta a^2 / 2 = Ea \Delta a^2 / 2 = 0.2312 \epsilon_0$	$0.2589 \cdot 10^{-20}$ Дж

Источник: [5]

С использованием выражения для потенциала взаимодействия, амплитуды колебаний атомов решётки твёрдого тела Δa , теплопроводности и теплоёмкости веществ в настоящей работе получены значения коэффициентов взаимодействия молекул воды с твёрдым телом в предположении, что характерные размеры рельефа поверхности λ , h (рис. 1) значительно превышают размеры молекул. Исходя из закона изменения импульса, выражение для скорости отражённых (верхний индекс r – reflected) от поверхности тела молекул частицы в зависимости от их начальной (верхний индекс i – incident) скорости можно получить в следующем виде:

$$\mathbf{V}^r = \frac{\mathbf{V}^i (1 - \mu_A / \mu) + (2 / \sqrt{3}) (\mu_A / \mu) (\mathbf{n} + 2\boldsymbol{\tau}) \Delta a \omega \sin \omega t}{1 + \mu_A / \mu}. \quad (7)$$

Здесь $\mathbf{n}$ и $\boldsymbol{\tau}$ – орты нормали и касательной. Для взаимодействия воды с алюминиевой поверхностью имеем $\mathbf{V}^r = -0.2 \mathbf{V}^i + 0.693 (\mathbf{n} + 2\boldsymbol{\tau}) \Delta a \omega \sin \omega t$,

$\omega = \frac{\sqrt{3 R_0 T / \mu_A}}{\Delta a \sqrt{2}}$ – циклическая частота колебаний атомов кристаллической решётки обтекаемого тела. Отметим, что второе слагаемое в числителе

выражения для V^r содержит одну степень свободы колебаний по нормали и две – по касательной к поверхности, описывающие вклад колебаний атомов кристаллической решётки рельефного тела (рис. 2) по направлениям колебаний поверхности. Индекс A означает атом твёрдого тела. Амплитуда колебаний атомов поверхности Δa в зависимости от температуры T определяется известным выражением из физики твёрдого тела:

$$\Delta a^2(T) = \frac{9\hbar^2}{4m_A k_B \theta_D} \left(1 + 4 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x dx}{e^x - 1} \right). \quad (8)$$

Здесь θ_D – температура Дебая материала твёрдого тела, k_B , $\hbar$ – постоянные Больцмана и Планка, соответственно. В расчётах использовались данные табл. 1. Достоинством такой модели является возможность учёта тепловых колебаний атомов и более приближенное к реальности (по сравнению с традиционными моделями) описание взаимодействия молекул потока с твёрдым телом. К её недостаткам следует отнести большие вычислительные затраты при расчёте потоков в крупной расчётной области. Так, например, при моделировании двух слоёв поверхности обтекаемого тела (алюминий) размером $100 \cdot 100 \text{ нм}^2$ требуется порядка 10^5 атомов, с которыми взаимодействуют молекулы потока. С увеличением шероховатости эта цифра значительно увеличивается.

В случае плоской поверхности и в предположении, что взаимодействие молекулы воды с атомом описывается потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами $\epsilon_w = AK \cdot \epsilon_{H_2O}$ (индекс $w \equiv \text{wall}$), выражение для потенциала взаимодействия между молекулой потока и поверхностью обтекаемого тела имеет следующий вид [5]:

$$U(h) = \frac{8}{15} \frac{\rho_w}{m_A} \pi \epsilon_w \sigma_w^3 \left(\frac{5}{33} \left(\frac{\sigma_w}{h} \right)^9 - \left(\frac{\sigma_w}{h} \right)^3 \right). \quad (9)$$

Для оценки плотности энергии взаимодействия частиц, размер которых значительно больше размера молекулы, используем модель двух плоских поверхностей – твёрдого тела и «подножия» частицы. Заметим, что выражение для поверхностной плотности сил P -взаимодействия между пластиной заданного материала и плоской поверхностью воды имеет следующий вид:

$$P = -\frac{1}{S} \frac{\rho}{m_m} \frac{\partial}{\partial h} Y(h) = B \left(\frac{5}{33} \left(\frac{\xi \sigma_0}{h} \right)^9 - \left(\frac{\xi \sigma_0}{h} \right)^3 \right), \quad (10)$$

$$B = \frac{8}{15} \frac{\rho_w \rho \pi \xi^3}{m_A m_m} AK \epsilon_0 \sigma_0^3 \quad (11)$$

$$\frac{Y(h)}{S} = \frac{\rho}{m_m} \int_{y=h}^{\infty} U(y) dy = \frac{B \sigma_0}{2} \left(\frac{5}{132} \left(\frac{\xi \sigma_0}{h} \right)^8 - \left(\frac{\xi \sigma_0}{h} \right)^2 \right). \quad (12)$$

Из последних соотношений определяется равновесное расстояние между двумя поверхностями при отсутствии внешних сил: $h_* = \xi \sigma_0 (5/33)^{1/6}$. Здесь ξ – безразмерная величина, равная отношению характерной длины взаимодействия молекулы обтекаемого тела с молекулой воды, к характерной длине взаимодействия молекул воды друг с другом. Для алюминия $\xi \approx 1.19$.

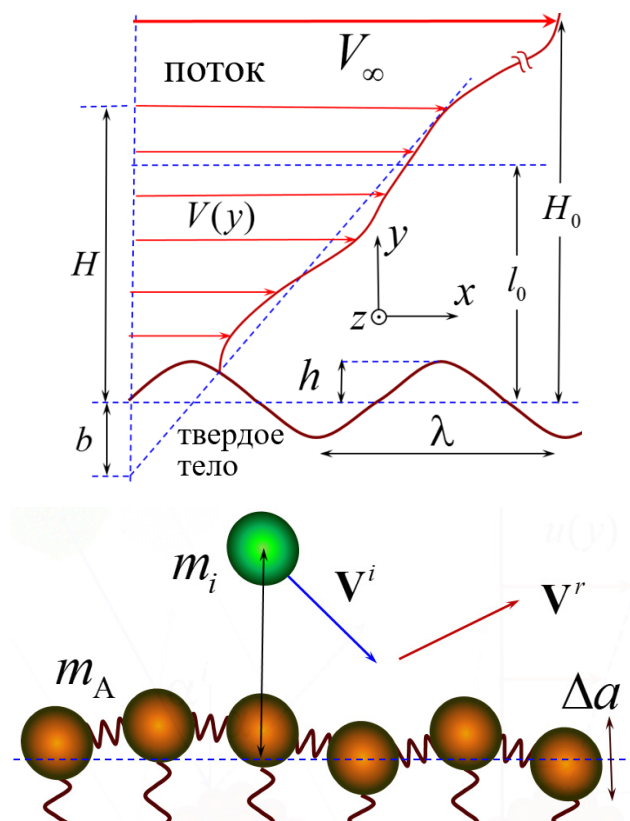


Рис. 2 / Fig. 2. Схема взаимодействия молекул потока m_i с атомами твёрдого тела m_A .

Углы α^i , α^r – между вектором скорости частицы и нормалью к средней поверхности тела. Справа – схема взаимодействия потока с твёрдым телом / Scheme of interaction of flow molecules m_i with atoms of a solid body m_A . Angles α^i and α^r are between the particle velocity vector and the normal to the average surface of the body. On the right is a diagram of the interaction of a flow with a solid body

Отметим, что используемый в настоящей работе подход позволяет преодолеть трудности учёта непарного характера взаимодействия молекул, а также угловой зависимости межмолекулярных сил, для определения которых, строго говоря, необходимы методы квантовой химии решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы атомов. Этот подход позволяет рассчитывать как континуальный, так и свободномолекулярный режимы взаимодействия частиц и капель с твёрдым телом, учитывая ряд физических

явлений: фазовые переходы, зависимость коэффициента поверхностного натяжения от кривизны межфазной границы, процессы дробления, коагуляции и теплообмена с рельефным телом, атомы которого находятся в тепловом движении. При этом достоверность полученных в настоящей работе результатов обоснована сравнением с теоретическими и с экспериментальными оценками других исследователей, описанными в [2; 5] (рис. 3). Развитые в настоящей работе численные алгоритмы и программное обеспечение позволяют использовать различные потенциалы взаимодействия молекул и схемы интегрирования уравнений движения.

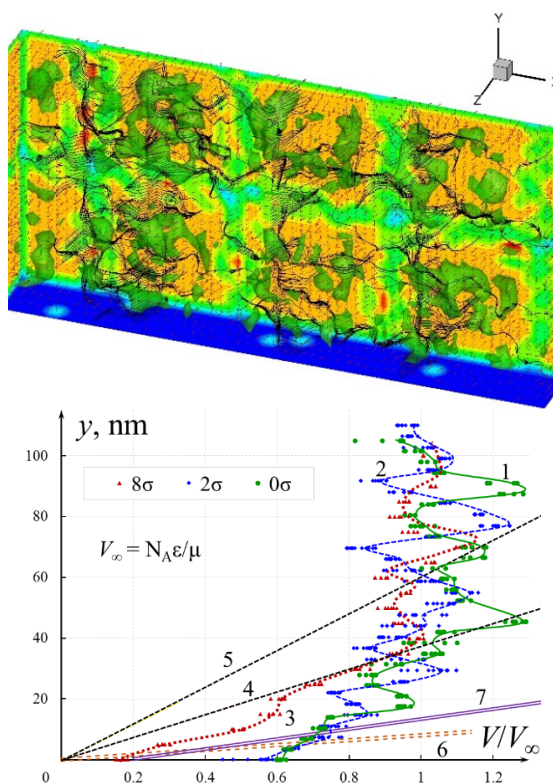


Рис. 3 / Fig. 3. Слева – поверхности равных значений скорости потока, трёхмерное векторное поле скорости, линии тока и сетка, в ячейках которой проходило осреднение; справа – влияние шероховатости поверхности (кривые 1–3) обтекаемого тела на профиль скорости в пограничном слое воздуха, сравнение расчётов с аналитическими решениями [6] (4, 5) и результатами (6, 7 [1]) / (on the left) Surfaces of equal values of the flow velocity, a three-dimensional vector velocity field, streamlines and a grid, in the cells of which the averaging took place; (on the right) effect of surface roughness (curves 1–3) of a streamlined body on the velocity profile in the boundary layer of air, comparison of calculations with analytical solutions [6] (4, 5) and results (6, 7 [1])

Источник: авторские результаты и [1; 6]

Результаты численных исследований

Ниже даны иллюстрации результатов расчётов, которые получены на основе разработанной в рамках настоящего исследования программы, которая написана на языке C++. Во всех расчётах угол падения частицы $\alpha_i = \pi/4$, модуль её скорости $|V| = 50$ м/с; число молекул в частице $N = 650, 1100$ и 4660 ; твёрдое тело – алюминий (табл. 2). Согласно [7], угол θ_0 смачивания водой гладкой поверхности алюминия приблизительно равен 110 град. Параметры газового потока определялись температурой и атмосферным давлением, используемый в работе численный алгоритм и программа ЭВМ позволяют определять параметры состояния пограничного слоя в расчётных областях, размеры которых значительно превышают длину свободного пробега молекул.

Таблица 2 / Table 2

Свойства кристаллических решёток Al и H₂O при температуре -10°C /

Properties of crystal lattices of Al and H₂O at a temperature of -10°C

Материал	ρ , кг/м ³	μ , г/моль	m	a_c , Å	E , ГПа	θ_D , К	Δa , Å	ω , 10^{12} с ⁻¹
Al	2700	27	4	4.05	68	394	0.14	48
H ₂ O (лёд)	917	18	2	2.85	5	192	0.51	17

Источник: [5]

Понятно, что чем мельче частица, тем скорее она тормозится в пограничном слое на обтекаемом теле, но тем большую роль в её динамике играют тепловые флуктуации (броуновское движение). Если для молекулы воды средняя скорость теплового движения около 600 м/с, то для рассмотренных кластеров её значения составляют приблизительно $25, 20$ и 10 м/с. Таким образом, несмотря на быструю релаксацию мелких частиц вблизи поверхности твёрдого тела, суммарная скорость их соударения с твёрдым телом может достигать десятков метров в секунду.

Отметим, что реальный газ состоит не только из молекул, но содержит также их агломераты – молекулярные кластеры (ди-, три-, ..., N -меры), причём их концентрация и количество составляющих их молекул N растёт с понижением температуры. Это касается в особенности паров воды, находящихся в предконденсационном состоянии; их кластеры, обтекающие вместе с несущим воздухом элементы конструкции летательного аппарата, могут участвовать в «подготовке» последних к обледенению.

Под наночастицами [8; 9] обычно понимают частицы размером от 1 до 100 нанометров. В то же время под кластерами понимают скопления молекул, а под большими молекулярными кластерами [10] скопления молекул, число которых 100 – 1000 молекул.

Между объектами, входящими в понятие кластер и объектами, входящими в понятие наночастица, есть пересечение, т. к. кластер в 1000 молекул может

заметно превышать минимальный размер наночастицы, т. е. 1 нанометр. Так, кластер воды из $N = 333$ молекул (999 атомов) имеет размер порядка

$$D = 2\sqrt[3]{\frac{3\mu_{\text{H}_2\text{O}}N}{4\pi\rho_l N_A}} \cong 2.7 \text{ нм, где } \mu_{\text{H}_2\text{O}} - \text{молярная масса воды, } \rho_l - \text{её плотность, } N_A -$$

число Авогадро. Таким образом, под наночастицами подразумеваются молекулярные кластеры размером до 100 нанометров, в которых число молекул $N \gg 10$. Под частицами аэрозольного потока подразумеваются твёрдые тела, размеры которых на порядки превосходят размеры молекул.

Хотя метод молекулярной динамики применим для описания поведения как отдельных молекул, так и их объединений – молекулярных кластеров, в настоящей работе метод молекулярной динамики применяется к описанию поведения частиц произвольного размера при выполнении следующих условий: 1) число молекул в частице $\gg 10$; 2) размер частицы значительно превышает толщину δ_σ поверхностного слоя, в котором действуют поверхностные силы; 3) при выполнении первых двух условий и основных критериев подобия (число Вебера $We = D\rho_l V^2/\sigma_l$ и капиллярности) результаты, полученные для наночастиц, справедливы для микро- и макро частиц, здесь D – диаметр капли, σ_l – коэффициент поверхностного натяжения, V – скорость удара капли; 4) взаимодействие молекул парное, потенциал симметричный, не учитывается распределение зарядов, но обеспечивается соответствие упругих, гидродинамических и термодинамических свойств дисперсной фазы аэрозольного потока.

Строго говоря, молекулярное моделирование удара капель и кристаллов льда требует учёта непарности потенциала межмолекулярного взаимодействия, зависимости его от ориентации и образования водородных связей, не говоря о более тонких физических эффектах, таких как квантово-химические явления и электризация. Необходимость развития алгоритмов численного метода вызвана тем, что моделирование описанных выше явлений даже для малых молекулярных соединений, например, для исследования удара капли радиусом в несколько нанометров, требует колоссальных вычислительных затрат, не говоря о корректности постановки задачи, в которой могут иметь место множество неустойчивых конфигураций молекулярных объединений – кластеров.

На рис. 4 показаны зависимости коэффициентов изменения скорости (отношения компонент скорости после удара к соответствующему значению до удара) частиц от относительных значений параметра шероховатости поверхности твёрдого тела λ/σ_0 . Соединяющие их линии проведены лишь для более чёткой привязки к одному из двух семейств точек; на самом деле между каждой их парой следовало бы указать значения коэффициентов ещё при нескольких значениях λ/σ_0 . Коэффициенты изменения скорости частиц при их ударе о поверхность оценены для частиц радиусом $a_p = 3.2$ нм и 20 мкм также на основе выражений, приведённых в [5] для плоской поверхности при

одинаковых значениях числа Вебера для частиц, и отмечены горизонтальными точечными прямыми. В расчётах были использованы параметры, которые приведены в табл. 2.

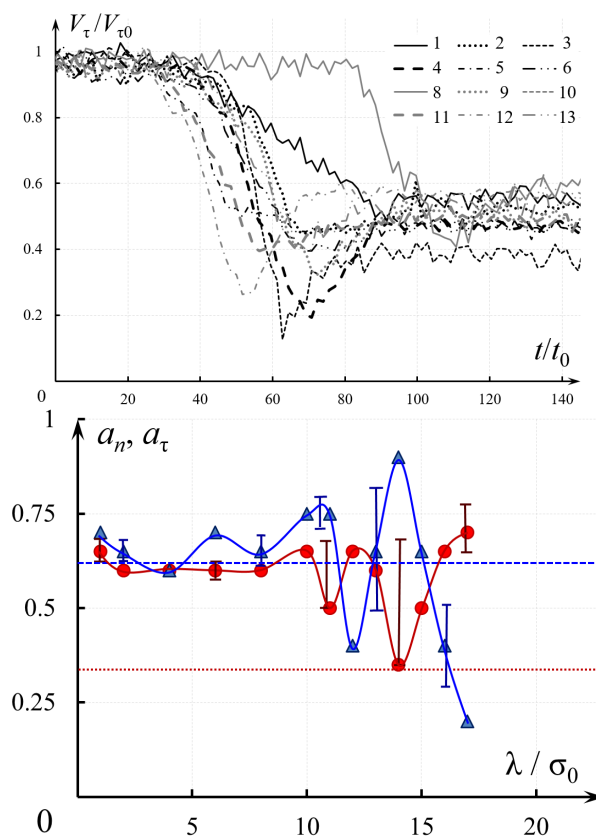


Рис. 4 / Fig. 4. Зависимость полученных в настоящей работе коэффициентов восстановления компонент скорости частиц на поверхности s ($h = 1$ нм) при различных значениях параметра шероховатости поверхности; кружки – нормальная компонента скорости, треугольники – тангенциальная. / Dependence of the recovery coefficients of the particle velocity components on the surface which were obtained in the present study ($h = 1$ nm) for different values of the surface roughness parameter; circles, normal velocity component and triangles, tangential

Источник: составлено авторами по результатам исследования

Вопрос о фазовом состоянии рассмотренных частиц нетривиален. Еще М. Фарадей предполагал (в 1842 г.) существование жидких слоёв на поверхности кристалла льда ниже температуры замерзания. В недавней работе [11] существование таких слоёв подтверждено в диапазоне температур от -90 до -1 °C. Ситуация аналогична отсутствию резкой границы между жидкостью и паром [12]. Однако, поскольку размеры рассмотренных кластеров имеют

порядок толщины переходных межфазных слоёв, в настоящей работе такие молекулярные образования называются просто частицами.

Заключение

Развит метод, позволяющий моделировать гидромеханические свойства жидкости со свободными границами, используя осесимметричные потенциалы, параметры которых определены из макроскопических табличных значений параметров, характеризующих гидродинамические свойства жидкости. Используемый в работе метод учитывает свободномолекулярные явления, реологические свойства жидкости, тепломассообмен на межфазных границах, особенности граничных условий на обтекаемом теле, обладающем гидрофобными свойствами, зависимость коэффициента поверхностного натяжения от радиуса кривизны межфазной границы жидкости и ряд других явлений. При этом, в отличие от метода молекулярной динамики, пренебрегается атомарной структурой молекул воды, т.е. асимметрией и непарностью потенциалов межмолекулярного взаимодействия, а также квантово-химическими явлениями. Такое пренебрежение вполне оправдано в задачах молекулярного моделирования макроскопических явлений, т.к. позволяет с высокой точностью моделировать гидродинамические процессы в движущейся жидкости.

Статья поступила в редакцию 24.04.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Priezjev N. V. Collective nonaffine displacements in amorphous materials during large-amplitude oscillatory shear // Physical Review E. 2017. Vol. 95. Iss. 2. P. 023002_1–023002_7. DOI: 10.1103/PhysRevE.95.023002.
2. Лашков В. А. Взаимодействие твердых частиц газовзвеси с поверхностью сложного профиля // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2008. № 4. С. 125–130.
3. Panfilov S. V., Tsirkunov Yu. M. Scattering of nonspherical particles rebounding from a smooth and a rough surface in a high-speed gas-particle flow // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2008. Vol. 49. P. 222–230. DOI: 10.1007/s10808-008-0032-4.
4. Allen M., Tildesley D. Computer Simulation of Liquids. London: Clarendon Press, 1987. 385 p.
5. Амелюшкин И. А., Стасенко А. Л. Взаимодействие нанокapель аэрозольного потока с твердым телом // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. 2016. Т. 14. № 2. С. 5–23.
6. Blasius H. Grenzschichten in Flüssigkeiten mit kleiner Reibung // Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik. 1908. Vol. 56. P. 1–37.
7. A comparison of contact angle measurement results obtained on bare, treated, and coated alloy samples by both dynamic sessile drop and Wilhelmy method / Románszki L.,

- Mohos M., Telegdi J., Keresztes Zs., Nyiko L. // *Periodica Polytechnica. Chemical Engineering*. 2014. Vol. 58 (Supplement). P. 53–59. DOI: 10.3311/PPch.7188.
8. ISO/TS 27687:2008. Nanotechnologies – Terminology and definitions for nano-objects – Nanoparticle, nanofibre and nanoplate [Электронный ресурс]. <https://www.iso.org/obp/ui/#iso:std:iso:ts:27687:ed-1:v2:en> (дата обращения: 20.02.2020).
9. Batista C. A. S., Larson R. G., Kotov N. A. Nonadditivity of nanoparticle interactions // *Science*. 2015. Vol. 350 (6257). P. 1242477. DOI: 10.1126/science.1242477.
10. Rattunde O., Haberland H. Clusterphysik [Электронный ресурс] // *Spektrum* : [сайт]. URL: <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/clusterphysik/2464> (дата обращения: 19.01.2022).
11. Two types of quasiliquid crystals are formed kinetically / Asakava H., Sazaki G., Nagashima K., Nakatsubo S., Furukava Y. // *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*. 2016. Vol. 113 (7). P. 1749–1753. DOI: 10.1073/pnas.1521607113.
12. Радченко И. В. Молекулярная физика. М.: Наука, 1965. 480 с.

REFERENCES

1. Priezjev N. V. Collective nonaffine displacements in amorphous materials during large-amplitude oscillatory shear. In: *Physical Review E*, 2017, vol. 95, iss. 2, pp. 023002_1–023002_7. DOI: 10.1103/PhysRevE.95.023002.
2. Lashkov V. A. [Interaction of solid particles of two-phase flow with a surface of complicated profile]. In: *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universiteta. Matematika. Mekhanika. Astronomiya* [Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy], 2008, no. 4, pp. 125–130.
3. Panfilov S. V., Tsirkunov Yu. M. Scattering of nonspherical particles rebounding from a smooth and a rough surface in a high-speed gas-particle flow. In: *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2008, vol. 49, pp. 222–230. DOI: 10.1007/s10808-008-0032-4.
4. Allen M., Tildesley D. *Computer Simulation of Liquids*. London, Clarendon Press, 1987. 385 p.
5. Amelyushkin I. A., Stasenko A. L. [Interaction of aerosol flow nanodroplets with a solid body]. In: *Nanostruktury. Matematicheskaya fizika i modelirovaniye* [Nanostuctures. Mathematical physics and Modelling], 2016, vol. 14, no 2, pp. 5–23.
6. Blasius H. Grenzsichten in Flüssigkeiten mit kleiner Reibung. In: *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, 1908, vol. 56, pp. 1–37.
7. Románszki L., Mohos M., Telegdi J., Keresztes Zs., Nyiko L. A comparison of contact angle measurement results obtained on bare, treated, and coated alloy samples by both dynamic sessile drop and Wilhelmy method. In: *Periodica Polytechnica. Chemical Engineering*, 2014, vol. 58 (Supplement), pp. 53–59. DOI: 10.3311/PPch.7188.
8. ISO/TS 27687:2008. Nanotechnologies – Terminology and definitions for nano-objects – Nanoparticle, nanofibre and nanoplate. available at: <https://www.iso.org/obp/ui/#iso:std:iso:ts:27687:ed-1:v2:en> (accessed: 20.02.2020).
9. Batista C. A. S., Larson R. G., Kotov N. A. Nonadditivity of nanoparticle interactions. In: *Science*, 2015, vol. 350 (6257), pp. 1242477. DOI: 10.1126/science.1242477.
10. Rattunde O., Haberland H. Clusterphysik. In: *Spektrum*. Available at: <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/clusterphysik/2464> (accessed: 19.01.2022).

11. Asakava H., Sazaki G., Nagashima K., Nakatsubo S., Furukava Y. Two types of quasiliquid crystals are formed kinetically. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*, 2016, vol. 113 (7), pp. 1749–1753. DOI: 10.1073/pnas.1521607113.
12. Radchenko I. V. *Molekulyarnaya fizika* [Molecular physics]. Moscow, Nauka Publ., 1965. 480 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Зубова Наталья Валерьевна – кандидат педагогических наук, доцент кафедры физики Московского государственного университета технологий и управления им. К. Г. Разумовского;

e-mail: Na448@yandex.ru;

Амелюшкин Иван Алексеевич – кандидат физико-математических наук, программист лаборатории информационных технологий и прикладной математики Физтех-школы аэрокосмических технологий Московского физико-технического института (национального исследовательского университета);

e-mail: Amelyushkin_Ivan@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Natalya V. Zubova – Cand. Sci. (Education), Assoc. Prof., Department of Physics, Moscow State University of Technology and Management;

e-mail: Na448@yandex.ru;

Ivan A. Amelyushkin – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Programmer, Laboratory of Information Technologies and Applied Mathematics, Phystech School of Aerospace Technology, Moscow Institute of Physics and Technology

e-mail: Amelyushkin_Ivan@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Зубова Н. В., Амелюшкин И. А. Молекулярное моделирование взаимодействия потока с рельефным телом // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2023. № 2. С. 51–64.

DOI: 10.18384/2310-7251-2023-2-51-64.

FOR CITATION

Zubova N. V., Amelyushkin I. A. Molecular modelling of a flow interaction with a relief body. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2023, no. 2, pp. 51–64.

DOI: 10.18384/2310-7251-2023-2-51-64.