



Contribution ID: 92

Type: oral presentations

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЗОВОГО ПОТОКА С МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ СТЕНКОЙ

Wednesday, August 27, 2014 12:50 PM (20 minutes)

Настоящая работа посвящена молекулярному моделированию взаимодействия газового потока с металлической стенкой в целях определения параметров граничных условий, использующихся в макроскопических моделях газовой динамики. Актуальность проблемы состоит в том, что при моделировании низкоразмерных технических систем, включающих микроканалы, по которым течет жидкость или газ, обычно неизвестны условия и параметры взаимодействия флюидов со стенками каналов. Стандартные граничные условия прилипания или скольжения к сожалению могут сильно исказить истинную картину течения. Поэтому наиболее адекватным является расчёт свойств взаимодействия из первых принципов, например, с помощью методов молекулярной динамики (МД).

В данной работе предлагается численная процедура расчёта базы данных, содержащей параметры граничных условий, применительно к газовым смесям водорода и азота, а также хром-никель-железистых сплавов, использующихся в качестве материалов стенки. Внимание именно к этим веществам связано с тем, что они наиболее часто используются в технических микросистемах. В рассматриваемом случае речь идет о системах холодного сверхзвукового напыления наночастиц на подложки. Подающая частицы техническая система включает в себя резервуары, сопла и микроканалы, изготовленные из вышеупомянутых сплавов, а газовый поток обычно является смесью водорода и азота. В работе предложена модель, алгоритм и компьютерная параллельная реализация расчёта параметров граничных условий в зависимости от микро- и макропараметров газового потока и материала стенки. Верификация разработанного численного подхода выполнена для чистого никеля и смеси водорода и азота. Проведенные численные эксперименты подтвердили высокую эффективность разработанной методики. Последующее развитие работы связано с разработкой программного комплекса для моделирования процессов холодного сверхзвукового напыления наночастиц на поверхности материалов, использующихся в электронике и медицине.

Primary author: Dr PODRYGA, Victoria (Keldysh Institute of Applied Mathematics)

Co-author: Prof. POLYAKOV, Sergey (Keldysh Institute of Applied Mathematics)

Presenter: Dr PODRYGA, Victoria (Keldysh Institute of Applied Mathematics)