

^{1,2}[Амелюшкин И.А.](#), ³Кудров М.А., ³Морозов А.О.,
^{1,3}Стасенко А.А., ^{1,3}Щеглов А.С.

¹ Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского

² Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

³ Московский физико-технический институт

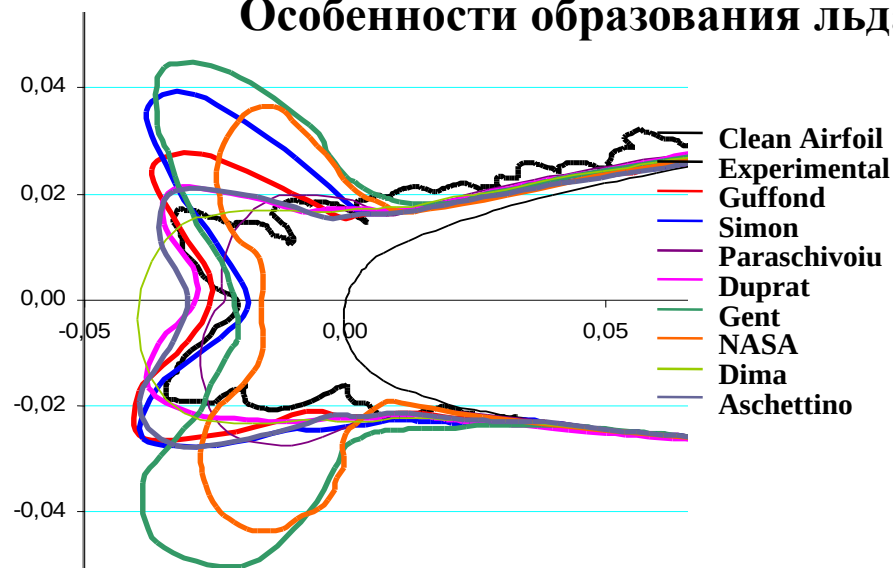
Модели процессов, сопровождающих кристаллизацию переохлажденных капель

Содержание

1. Введение
2. Особенности моделирования кристаллизации метастабильных капель
3. Метод расчета взаимодействия аэрозольного потока с твердым телом
4. Результаты моделирования
5. Заключение

25 сентября 2020, г. Орел

Особенности образования льда на поверхности летательного аппарата

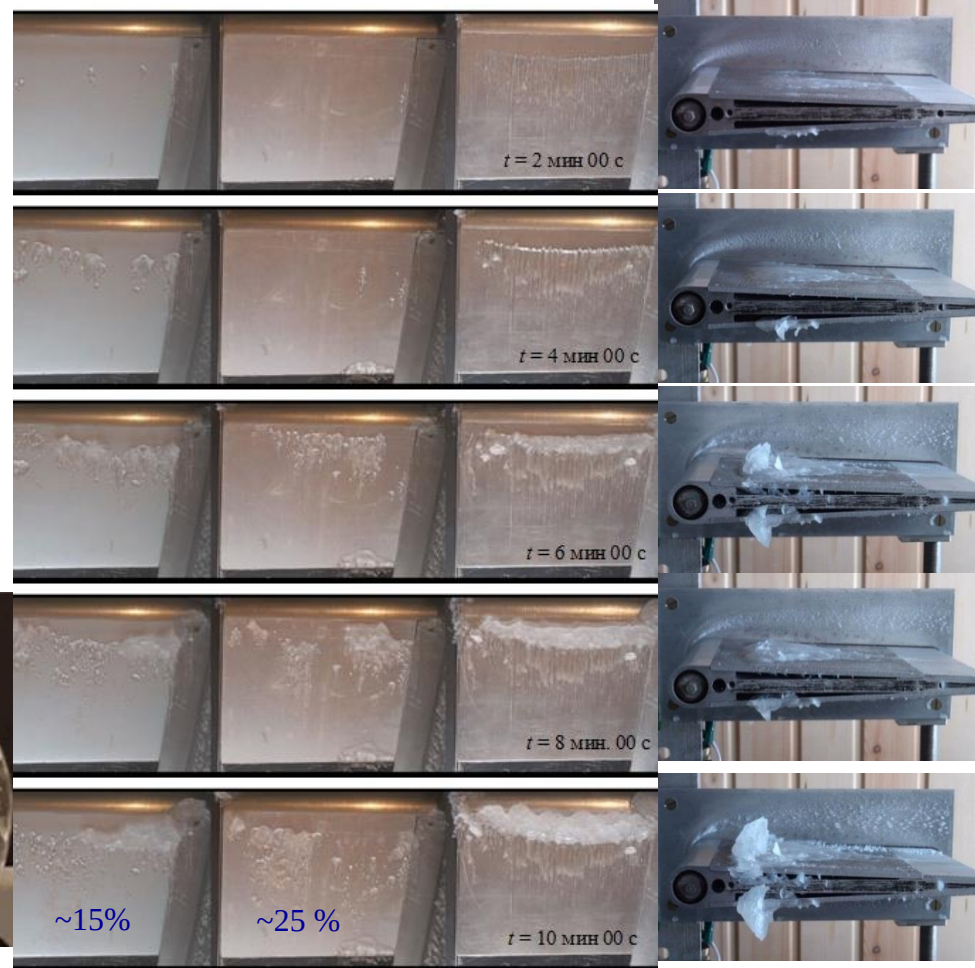


Численные расчеты всегда дают форму наледи, выступающей за пределы экспериментально зафиксированной

Образец А

Образец Б

Алюминий

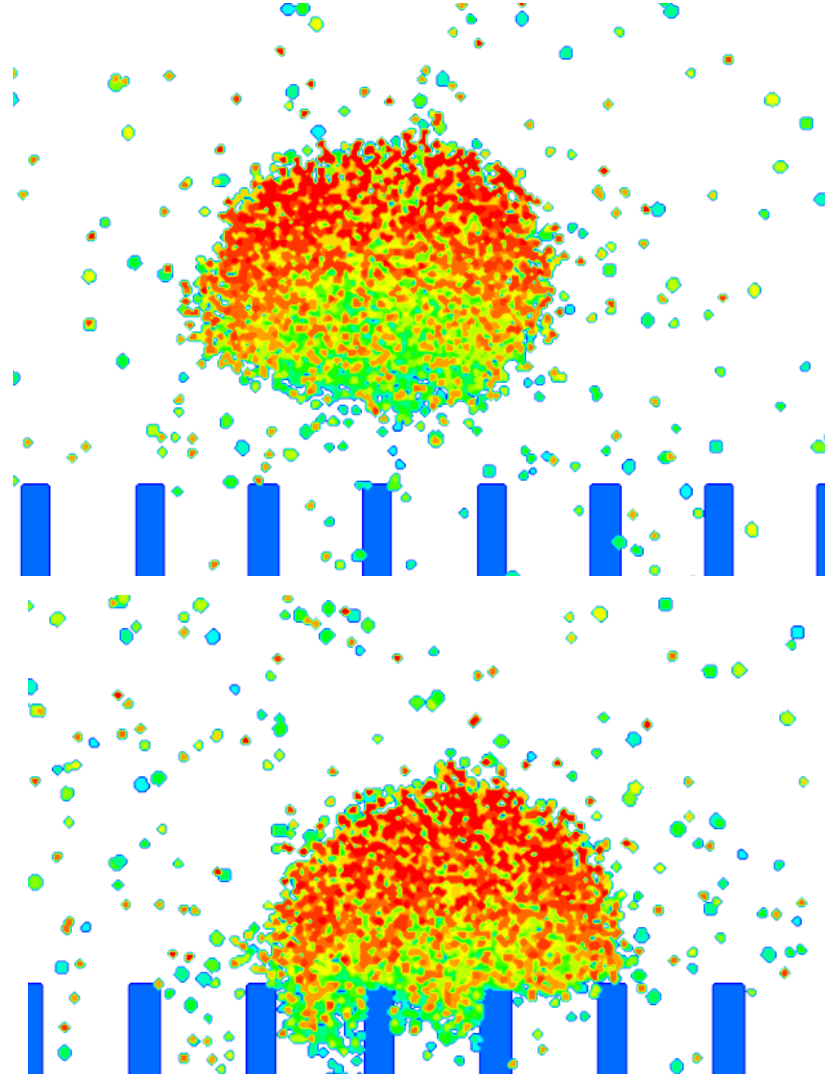
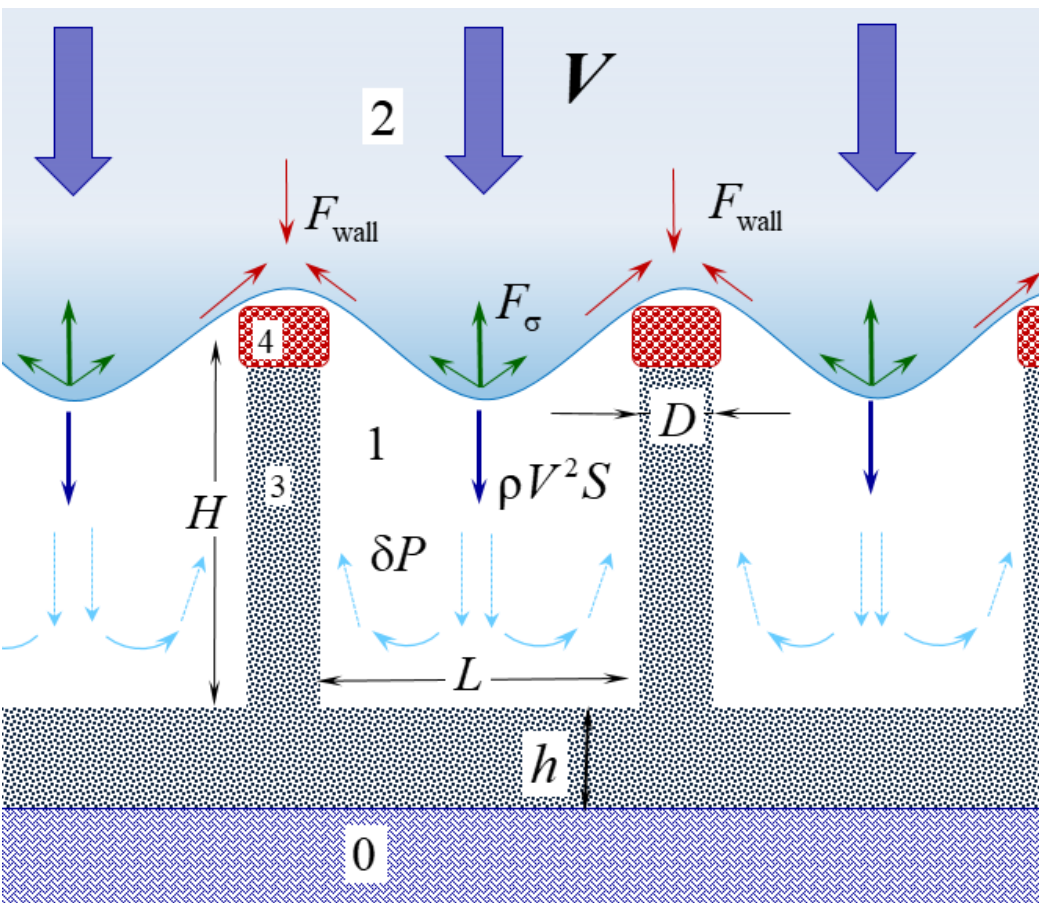


Фундаментальные проблемы обледенения: [1] Миллер А.Б., Потапов Ю.Ф., Токарев О.Д., Яшин А.Е. ЦАГИ, 2012-2013

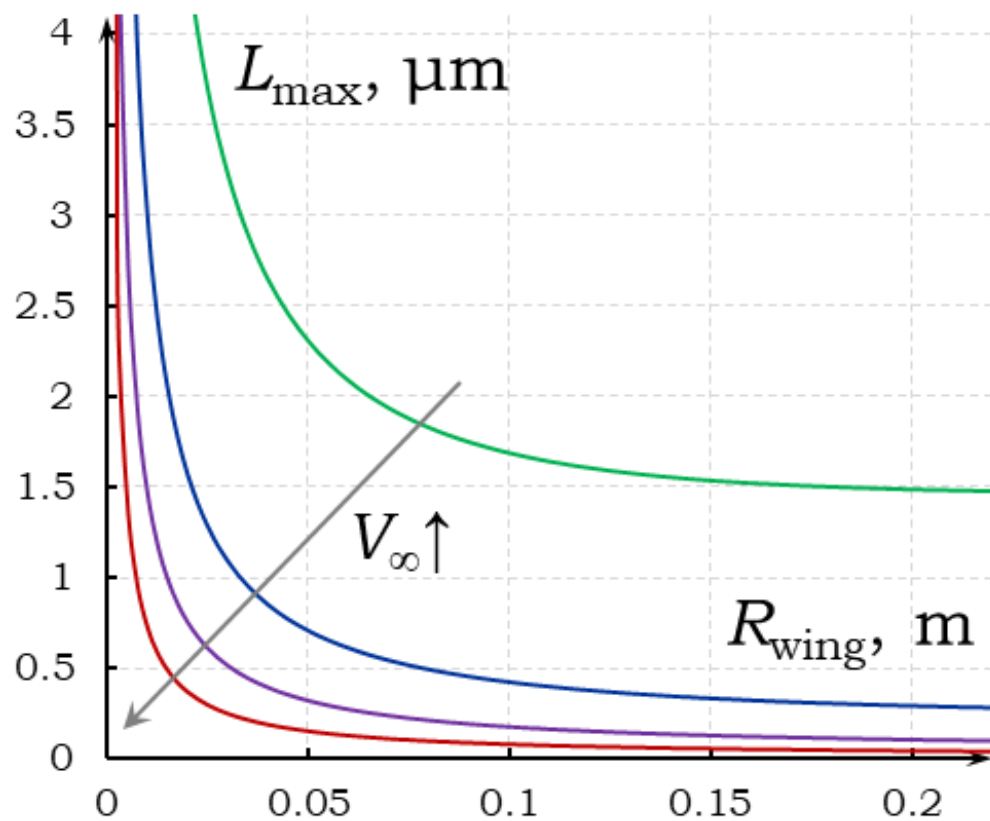
I Математическое и численное моделирование прилипания к поверхности, обладающей различной степенью гидрофобности

II Каковы условия кристаллизации переохлажденных метастабильных капель?

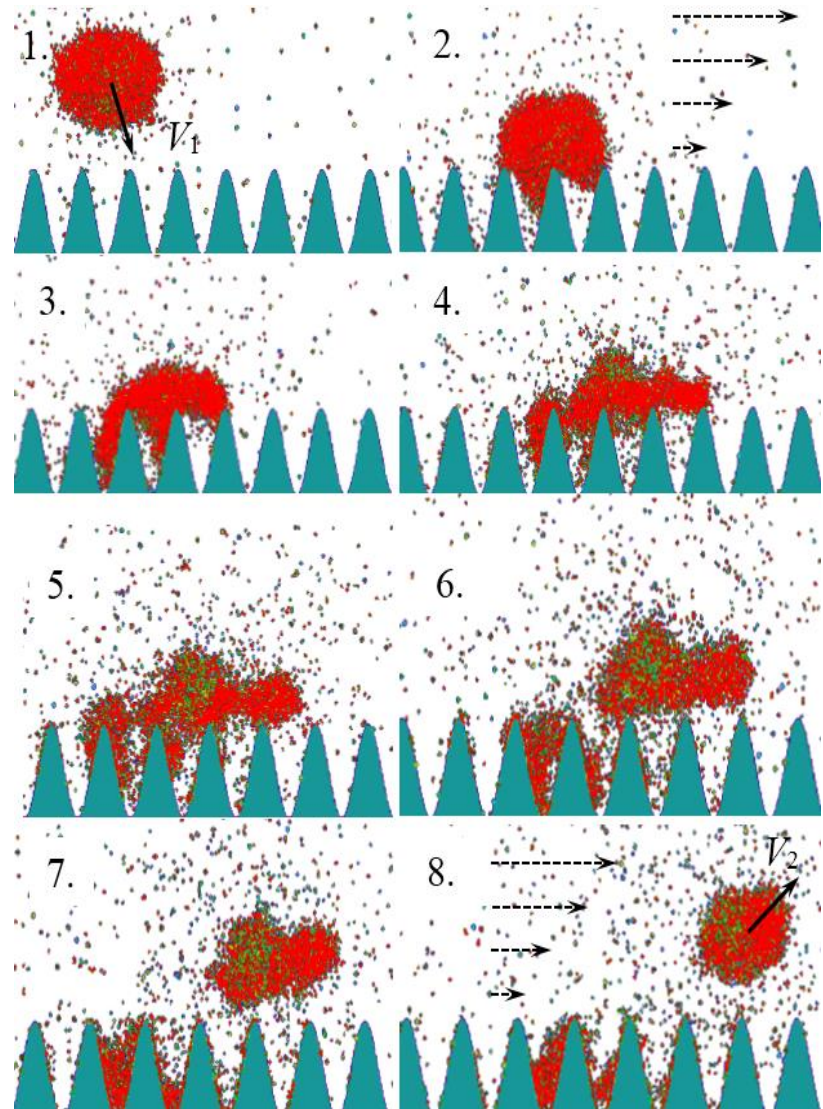
III Модели взаимодействия кристаллов льда с поверхностью покрытой пленкой



Структура гидрофобного покрытия и схема взаимодействия с ним жидкости: 0 – материал конструкции обтекаемого тела, 1 – газ (воздух), 2 – жидкость, 3 – покрытие из гидрофобного материала, 4 – гидрофильные шляпки. Внизу пример удара капли о гидрофобное тело с целью оптимизации рельефа.



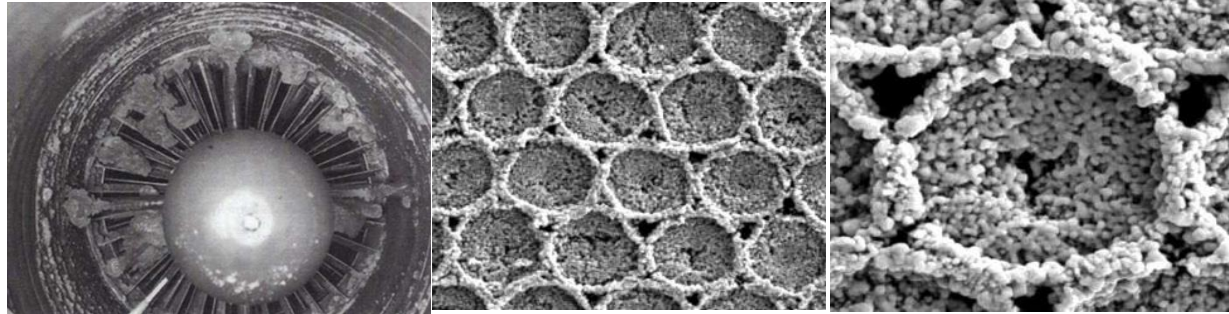
Оценка зависимости максимального значения расстояния между выступами рельефа гидрофобного тела $L_{\max}$ от радиуса кривизны обтекаемого тела R_{wing} и скорости полета V_{∞} . Кривые соответствуют значениям скорости 10, 25, 50 и 100 м/с .



Для соответствия ударов капль физической реальности необходимо обеспечить подобие по числу Вебера

$$\text{We}^{\text{Crit}} = 12 \cdot (1 + 1.077 \text{Oh}^{1.6})$$

The flow control is of great practical interest: resistance reduction, anti-icing, mixing in microchannels, etc.



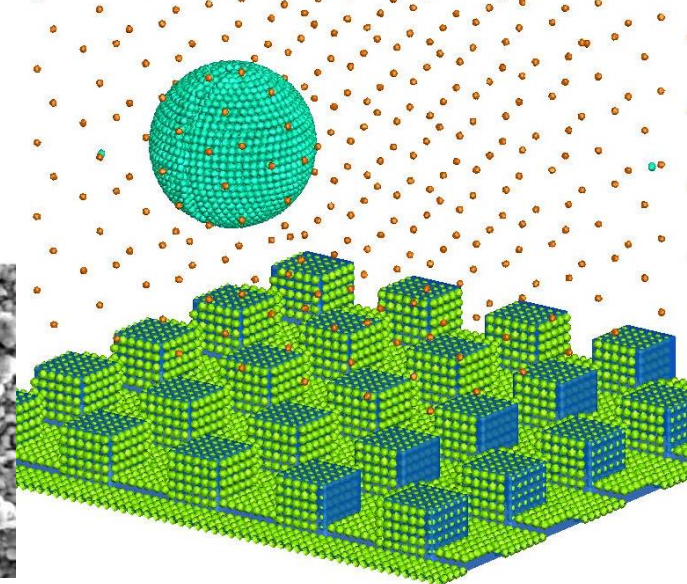
Tropea C. et.al., 2017 Y.Li, C.Li, S.O.Cho, G.Duan, W.Cai., 2007

Numerous experimental and theoretical studies have been devoted to the study of the interaction of flows with the surface

However the solution of the problem is far from its completion

Goal of present study:

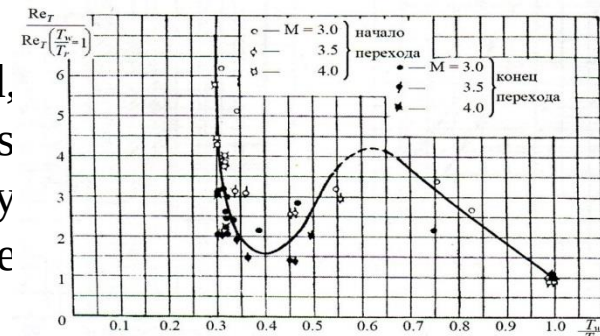
- I.** Investigation of the interaction of aerosol flows with a solid, modeling of boundary conditions, creation of numerical algorithms
- II.** Investigation of the peculiarities of crystallization and stability of the metastable state of a supercooled liquid in application to the icing problem
- III.** Nonspherical ice crystals' dynamics simulation near the streamline aircraft surface



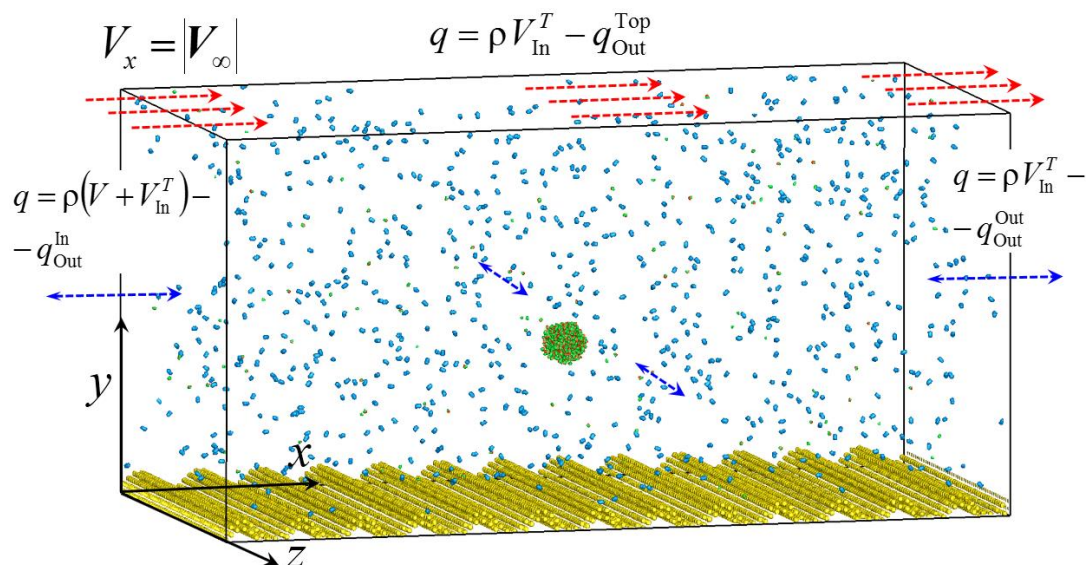
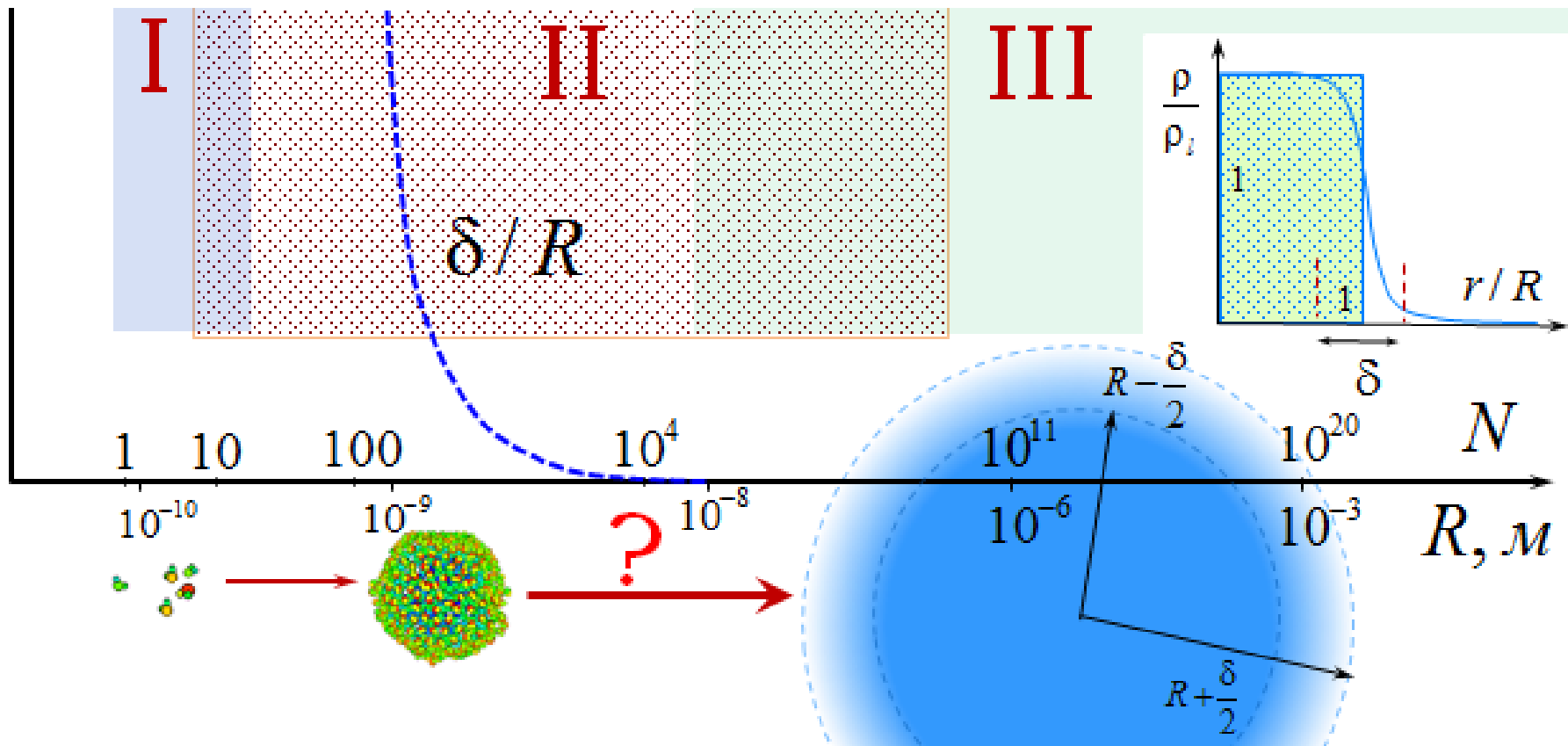
Amelyushkin I.A., 2020



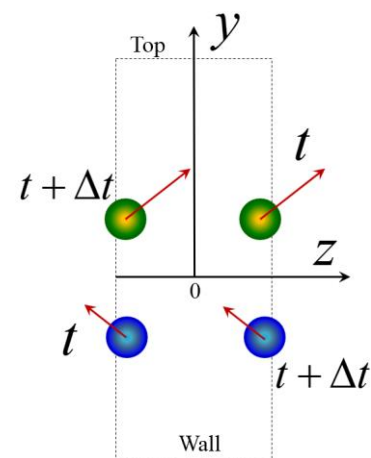
Miller A.B., et.al., 2011



Kuzminsky V.A. et. al. 1976



$$\begin{aligned}
 q_x &= q_y = \\
 &= \frac{\rho \langle V \rangle}{2\sqrt{3}} \\
 &= \frac{\rho \sqrt{RT}}{2} =
 \end{aligned}$$



Условие по z

Число
Вебера

$$We = \frac{2\rho V^2 R_p}{\sigma}$$

Для соответствия ударов
капель физической реальности
необходимо обеспечить
подобие по числу Вебера

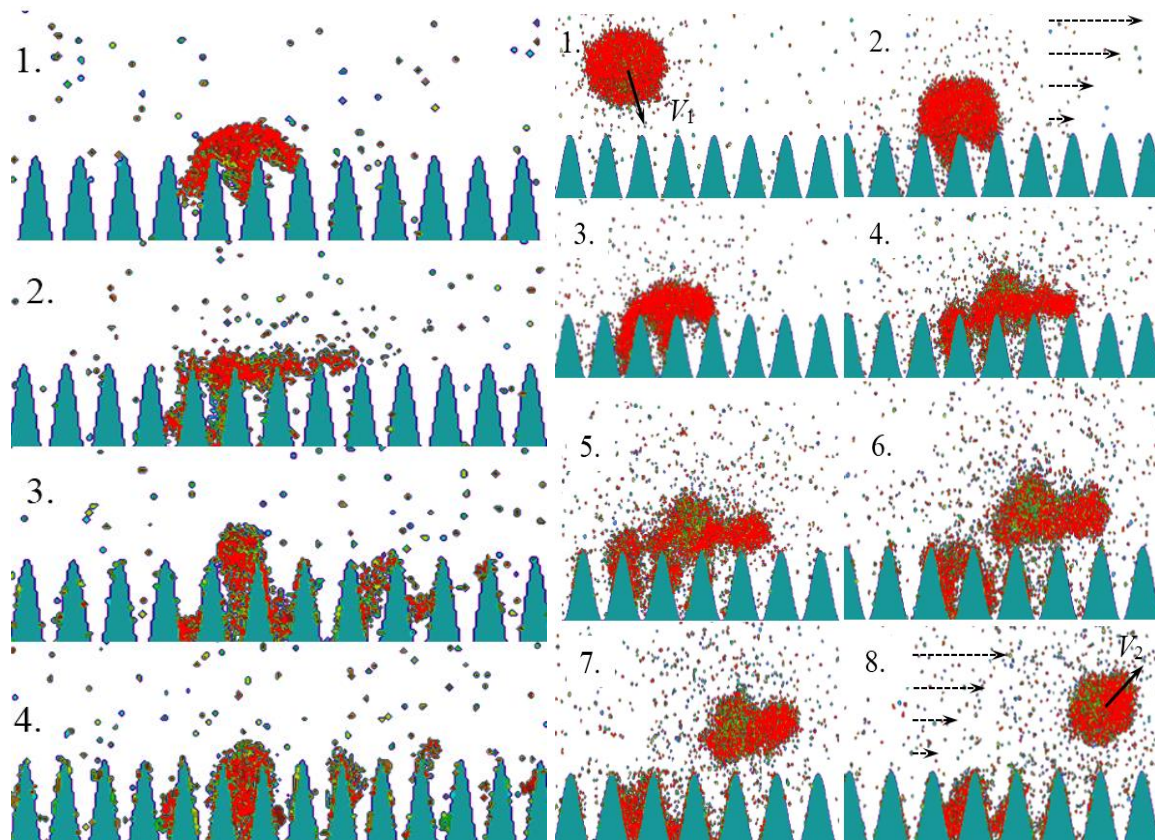
$$We^{Crit} = 12 \cdot (1 + 1.077 Oh^{1.6})$$

Число Онизорге

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho 2 R_p \sigma}}$$

$$\frac{V_2}{V_1} = \sqrt{\frac{R_1}{R_2}}$$

$$V_2 = 1 \sqrt{\frac{10}{0.004}} = 50 \text{ m/s}$$



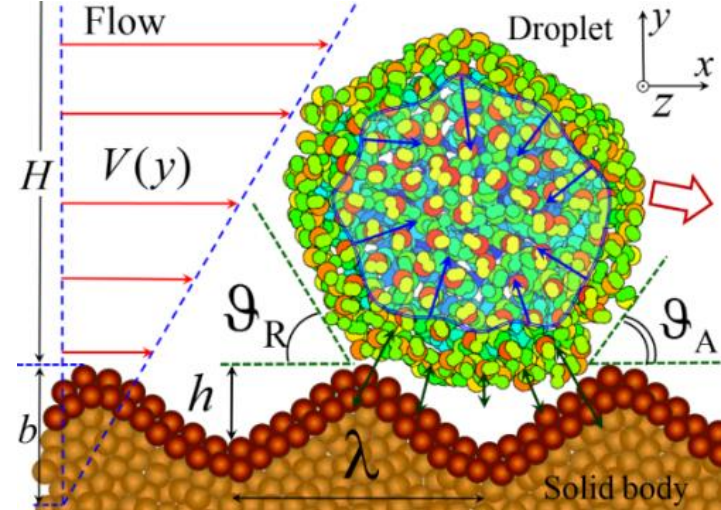
Основные предположения и допущения

1. Число молекул в частице $\gg 10$;
2. Размер частицы значительно превышает толщину поверхностного слоя;

$$\delta_{\sigma} = \left(\frac{a_{vw} \langle r_m^2 \rangle}{\sigma_l} \right) \cdot (\rho_l - \rho_{sv}(T))^2 \cong 5 \text{ нм}$$

3. При выполнении первых двух условий и основных критериев подобия (число Вебера и капиллярности, последнее незначительно влияет) результаты полученные для наночастиц справедливы для микро и макро частиц;

4. Взаимодействие молекул парное, потенциал симметричный, не учитывает распределения зарядов, но обеспечивается соответствие гидродинамических и термодинамических свойств жидкости. При фазовых переходах изменение свойств материала приводит к изменению свойств потенциала взаимодействия молекул, между которыми образуются водородные и другие связи.



Управляющие параметры:
 Ak, λ, h, We

$$We = \frac{2\rho V^2 R_p}{\sigma}$$

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

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

Связь параметров уравнения состояния реального газа с параметрами потенциалов парного взаимодействия молекул

$$\left(P - \frac{a\rho}{V\mu} \right) \left(1 - \frac{b\rho}{\mu} \right) = \frac{\rho R_0 T}{\mu}$$

$$a = -2\pi N_A^2 \int_d^\infty U(r) r^2 dr =$$

$$= \pi N_A^2 \frac{10\sqrt{2}}{9} \varepsilon \sigma_0^3 = N_A \frac{5}{3} b \varepsilon$$

$$b = N_A \frac{2}{3} \pi d^3$$

$$\sigma_0 = \frac{d}{\sqrt[6]{2}} = \frac{1}{\sqrt[6]{2}} \sqrt[3]{\frac{3b}{2\pi N_A}}$$

Газ	Параметры газа ВдВ		Параметры потенциала ЛД	
	<i>a</i> Па·м ⁶ /моль ²	<i>b</i> , 10 ⁻⁵ м ³ /моль	σ, Å	ε / кВ, К
N ₂	0.1408	3.913	2.80	260
O ₂	0.1378	3.183	2.61	313
H ₂ O	0.5536	3.049	2.58	1310
Воздух	0.141	3.771	—	—

Взаимодействующие элементы	A/ε ₀	σ/ σ ₀	χ	p	q
H ₂ O–H ₂ O	1	1	1	12	6
H ₂ O–Al	AK	1.19	1	12	6
H ₂ O–H ₂ O(w)	2.53	1	5/33	9	3
H ₂ O–Al(w)	2.99 AK	1.19	5/33	9	3
H ₂ O(w)–Al(w)	13AK·S _{HM} ²	1.19	5/132	8	2

Уравнения движения и метод вычислений

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{V}_i$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}} \frac{d\mathbf{V}_i}{dt} = -\nabla \sum_j U_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} q_0^i & q_1^i & q_2^i & q_3^i \end{pmatrix}^T = \frac{1}{2} \mathbf{B}_i \begin{pmatrix} 0 & \omega_X^i & \omega_Y^i & \omega_Z^i \end{pmatrix}^T$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \omega_X^i \\ \omega_Y^i \\ \omega_Z^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_X^i / I_{xx} \\ M_Y^i / I_{yy} \\ M_Z^i / I_{zz} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \omega_Y^i \omega_Z^i (I_{yy} - I_{zz}) / I_{xx} \\ \omega_Z^i \omega_X^i (I_{zz} - I_{xx}) / I_{yy} \\ \omega_X^i \omega_Y^i (I_{xx} - I_{yy}) / I_{zz} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} q_0^i & -q_1^i & -q_2^i & -q_3^i \\ q_1^i & q_0^i & -q_3^i & q_2^i \\ q_2^i & q_3^i & q_0^i & -q_1^i \\ q_3^i & -q_2^i & q_1^i & q_0^i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_X^i \\ M_Y^i \\ M_Z^i \end{pmatrix} = \mathbf{A}_i \begin{pmatrix} M_X^i \\ M_Y^i \\ M_Z^i \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} q_0^{i^2} + q_1^{i^2} - q_2^{i^2} - q_3^{i^2} & 2(q_1^i q_2^i + q_0^i q_3^i) & 2(q_1^i q_3^i - q_0^i q_2^i) \\ 2(q_1^i q_2^i - q_0^i q_3^i) & q_0^{i^2} - q_1^{i^2} + q_2^{i^2} - q_3^{i^2} & 2(q_2^i q_3^i + q_0^i q_1^i) \\ 2(q_1^i q_3^i + q_0^i q_2^i) & 2(q_2^i q_3^i - q_0^i q_1^i) & q_0^{i^2} - q_1^{i^2} - q_2^{i^2} + q_3^{i^2} \end{pmatrix}$$

$$U_{ij}(\mathbf{r}_{CM}) = 4\epsilon_{\text{OO}} \left[\left(\frac{\sigma_{\text{OO}}}{r_{\text{OO}}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\text{OO}}}{r_{\text{OO}}} \right)^6 \right] + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right] + \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 14.93 |U_{min}^{\text{OH}}| \left[\left(\frac{r_{\sigma}^{\text{OH}}}{r_{ij}^{\text{OH}}} \right)^{12} - \left(\frac{r_{\sigma}^{\text{OH}}}{r_{ij}^{\text{OH}}} \right)^{10} \right]$$

Метод интегрирования:

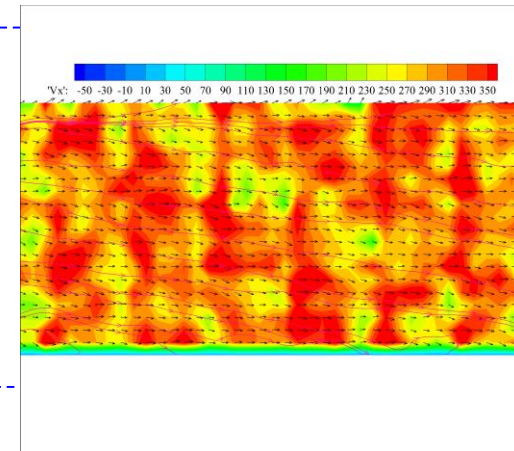
$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \left(\frac{2}{3} \mathbf{a}_i(t) - \frac{1}{6} \mathbf{a}_i(t - \Delta t) \right) \Delta t^2$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \left(\frac{1}{3} \mathbf{a}_i(t + \Delta t) + \frac{5}{6} \mathbf{a}_i(t) - \frac{1}{6} \mathbf{a}_i(t - \Delta t) \right) \Delta t$$

$$\mathbf{a}_i(t + \Delta t) = \frac{-\sum_j \nabla U_{ij}(\mathbf{r}_i(t + \Delta t) - \mathbf{r}_j(t + \Delta t))}{m_i}$$

$$\mathbf{Q}^i(t + \Delta t) = \mathbf{Q}^i(t) + \Delta t \cdot \dot{\mathbf{Q}}^i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right)$$

$$\boldsymbol{\omega}_{\text{SF}}^i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \boldsymbol{\omega}_{\text{SF}}^i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \Delta t \cdot \dot{\boldsymbol{\omega}}_{\text{SF}}^i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right)$$



[1] Amelyushkin I.A., Stasenko A.L. Dynamics of molecules in a supercooled water nanoparticle during the ice accretion on the aircraft surface // *EUCASS-Paper*. – Flight Physics. – 2014.

[2] Амелюшкин И.А., Стасенко А.Л. Взаимодействие нанокнопель аэрозольного потока с твердым телом // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование*. – 2016. – Т. 14. – № 2

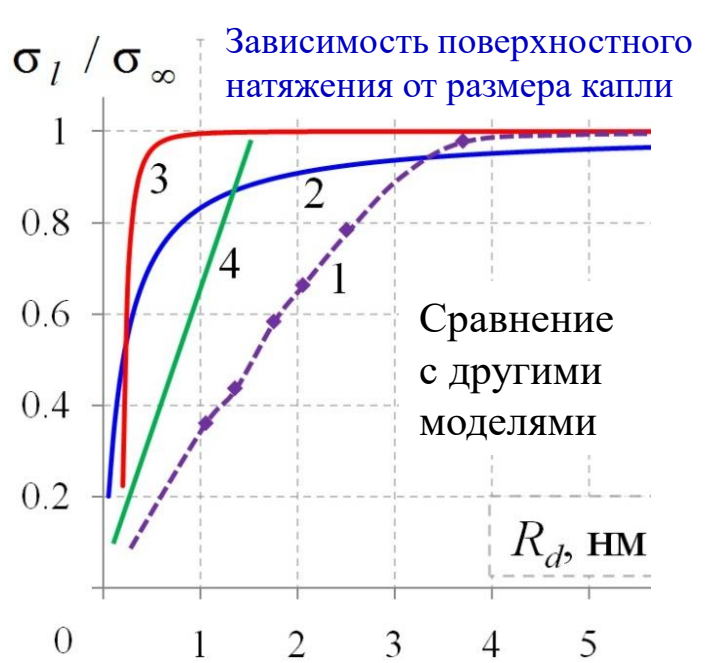
[3] Amelyushkin I.A., Stasenko A.L. Interaction of supercooled droplets and nonspherical ice crystals with a solid body in a mixed cloud // *CEAS Aeronautics Journal*. 2018. – V. 9. – Issue 4.

Параметры состояния газа, пограничного слоя и капле (частиц)

Число Маха:	Число Рейнольдса:	Характерный размер капли	$R_{\text{Drop}} : \rho(R_{\text{Drop}}) \approx 10 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}; \quad \frac{\partial^2 W_{\sigma}(R_{\text{Drop}})}{\partial r^2} = 0;$
-------------	-------------------	--------------------------	---

Толщина вытеснения пограничного слоя	$\delta = \int_0^{\infty} (1 - (u/V_{\infty})^2) dy$	Плотность	Температура
		$\rho = m_{\text{H}_2\text{O}} \frac{\Delta N}{\Delta V}$	$T = \frac{2}{3} \frac{1}{k_B} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{m_{\text{H}_2\text{O}} v_i^2}{2} + T_I$

Трение	Вязкость	Длина скольжения	Распределение молекул по скоростям
$\tau = \frac{\Delta P}{\Delta x}$	$\mu = \tau / \frac{\Delta u}{\Delta y}$	b_s	$\frac{dN}{N} = \frac{4\pi m^{\frac{3}{2}} \sqrt{I_x I_y I_z}}{(2\pi k_B T)^3} V^2 \exp \left[-\frac{\frac{mV^2}{2} + \frac{I_x \omega_x^2}{2} + \frac{I_y \omega_y^2}{2} + \frac{I_z \omega_z^2}{2}}{k_B T} \right] d\omega_x d\omega_y d\omega_z dV$



Амелиюшкин И.А., Стасенко А.Л. Взаимодействие нанокapлеl аэрозольного потока с твердым телом // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. – 2016. – Т. 14. – № 2

Внутренняя энергия	Плотность внутренней энергии
$W_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_i U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$	$\rho_{W_{\sigma}} = \frac{\Delta W_{\sigma}}{\Delta V}$

Напряженность поля	Давление
$E_{\sigma}(\mathbf{r}) = -\bar{\nabla} \cdot W_{\sigma}(\mathbf{r})$	$P = P_T + P_{\sigma} = \frac{1}{\Delta S} \left \frac{\Delta \mathbf{p}(t)}{\Delta t} \right + \frac{\Delta W_{\sigma}}{\Delta V}$

Средняя пот-я энергия, приходящая на одну молекулу
$W_{\sigma}^1(\mathbf{r}, T) = \frac{\Delta W_{\sigma}(\mathbf{r}, T)}{\Delta N(\mathbf{r}, T)} \cong 42.2 \cdot k_B T \quad (\text{для } \text{H}_2\text{O}, T = 10^{\circ}\text{C})$

Коэффициент поверхностного натяжения	$\sigma_l(R, T) = \int_0^{\infty} \frac{1}{4\pi r^2} \left(-\frac{\partial W_{\sigma}(r, T)}{\partial r} \right) dr$
--------------------------------------	---

Уравнения движения потенциально взаимодействующих между собой молекул

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{V}_i$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}} \frac{d\mathbf{V}_i}{dt} = -\nabla \sum_j U_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} q_0^i & q_1^i & q_2^i & q_3^i \end{pmatrix}^T = \frac{1}{2} \mathbf{B}_i \begin{pmatrix} 0 & \omega_X^i & \omega_Y^i & \omega_Z^i \end{pmatrix}^T$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \omega_X^i \\ \omega_Y^i \\ \omega_Z^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_X^i / I_{xx} \\ M_Y^i / I_{yy} \\ M_Z^i / I_{zz} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \omega_Y^i \omega_Z^i (I_{yy} - I_{zz}) / I_{xx} \\ \omega_Z^i \omega_X^i (I_{zz} - I_{xx}) / I_{yy} \\ \omega_X^i \omega_Y^i (I_{xx} - I_{yy}) / I_{zz} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} q_0^i & -q_1^i & -q_2^i & -q_3^i \\ q_1^i & q_0^i & -q_3^i & q_2^i \\ q_2^i & q_3^i & q_0^i & -q_1^i \\ q_3^i & -q_2^i & q_1^i & q_0^i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_X^i \\ M_Y^i \\ M_Z^i \end{pmatrix} = \mathbf{A}_i \begin{pmatrix} M_X^i \\ M_Y^i \\ M_Z^i \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} q_0^{i^2} + q_1^{i^2} - q_2^{i^2} - q_3^{i^2} & 2(q_1^i q_2^i + q_0^i q_3^i) & 2(q_1^i q_3^i - q_0^i q_2^i) \\ 2(q_1^i q_2^i - q_0^i q_3^i) & q_0^{i^2} - q_1^{i^2} + q_2^{i^2} - q_3^{i^2} & 2(q_2^i q_3^i + q_0^i q_1^i) \\ 2(q_1^i q_3^i + q_0^i q_2^i) & 2(q_2^i q_3^i - q_0^i q_1^i) & q_0^{i^2} - q_1^{i^2} - q_2^{i^2} + q_3^{i^2} \end{pmatrix}$$

$$U_{ij}(\mathbf{r}_{CM}) = 4\epsilon_{\text{OO}} \left[\left(\frac{\sigma_{\text{OO}}}{r_{\text{OO}}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\text{OO}}}{r_{\text{OO}}} \right)^6 \right] + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right] + \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 14.93 |U_{min}^{\text{OH}}| \left[\left(\frac{r_{\sigma}^{\text{OH}}}{r_{ij}^{\text{OH}}} \right)^{12} - \left(\frac{r_{\sigma}^{\text{OH}}}{r_{ij}^{\text{OH}}} \right)^{10} \right]$$

Метод интегрирования:

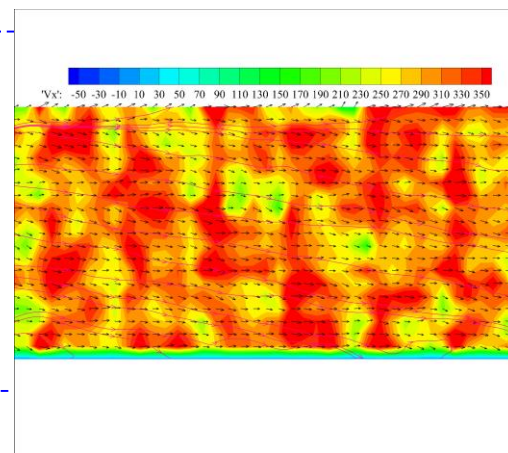
$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \left(\frac{2}{3} \mathbf{a}_i(t) - \frac{1}{6} \mathbf{a}_i(t - \Delta t) \right) \Delta t^2$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \left(\frac{1}{3} \mathbf{a}_i(t + \Delta t) + \frac{5}{6} \mathbf{a}_i(t) - \frac{1}{6} \mathbf{a}_i(t - \Delta t) \right) \Delta t$$

$$\mathbf{a}_i(t + \Delta t) = \frac{-\sum_j \nabla U_{ij}(\mathbf{r}_i(t + \Delta t) - \mathbf{r}_j(t + \Delta t))}{m_i}$$

$$\mathbf{Q}^i(t + \Delta t) = \mathbf{Q}^i(t) + \Delta t \cdot \dot{\mathbf{Q}}^i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right)$$

$$\omega_{\text{SF}}^i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \omega_{\text{SF}}^i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \Delta t \cdot \dot{\omega}_{\text{SF}}^i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right)$$

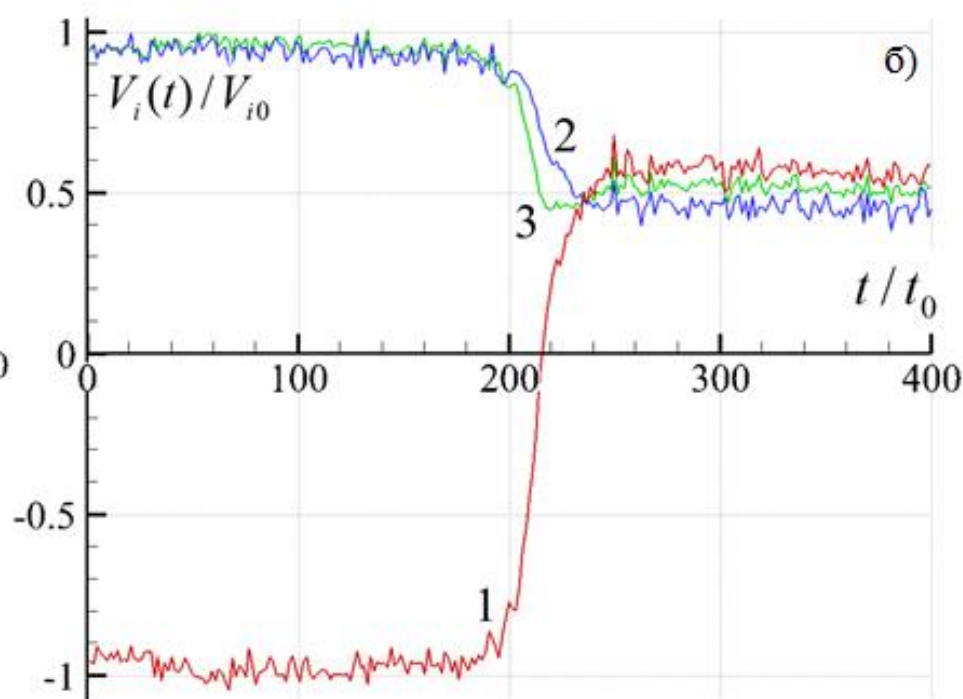
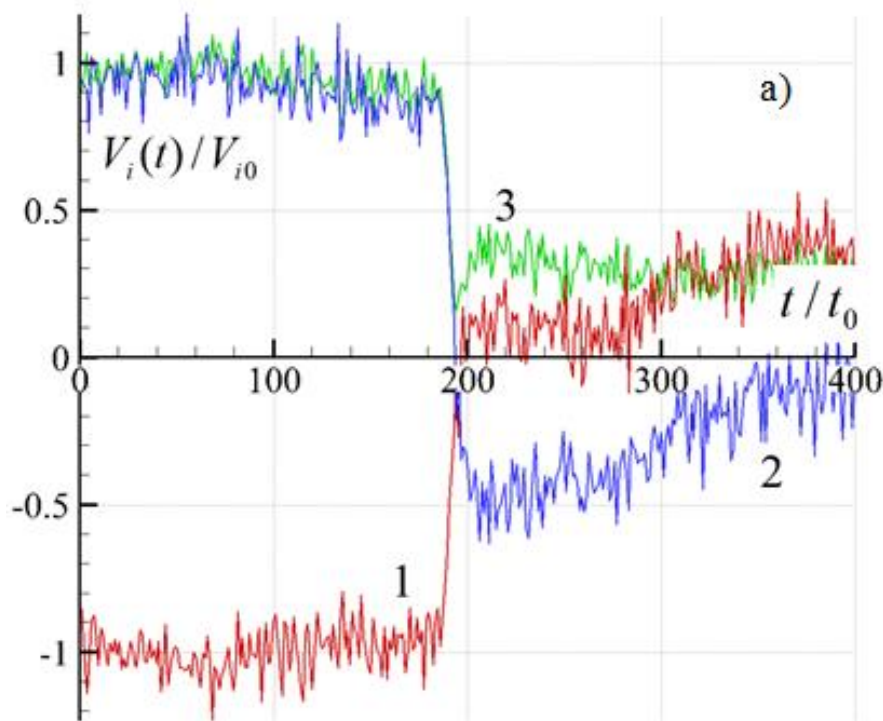
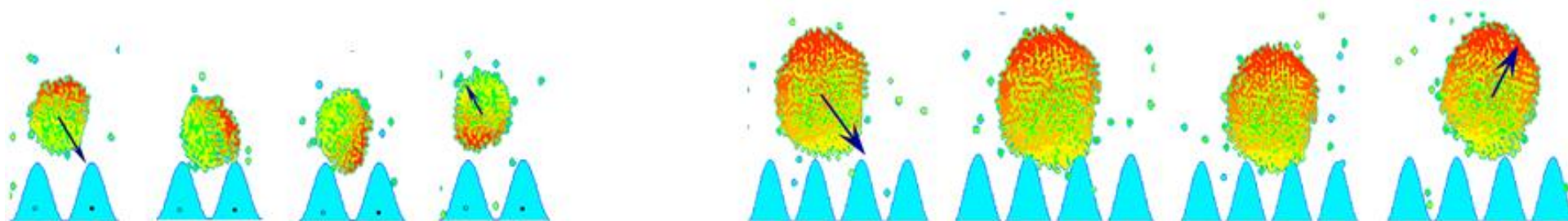


[1] Amelyushkin I.A., Stasenko A.L. Dynamics of molecules in a supercooled water nanoparticle during the ice accretion on the aircraft surface // *EUCASS-Paper*. – Flight Physics. – 2014.

[2] Амелюшкин И.А., Стасенко А.Л. Взаимодействие нанокнопель аэрозольного потока с твердым телом // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование*. – 2016. – Т. 14. – № 2

[3] Amelyushkin I.A., Stasenko A.L. Interaction of supercooled droplets and nonspherical ice crystals with a solid body in a mixed cloud // *CEAS Aeronautics Journal*. 2018. – V. 9. – Issue 4.

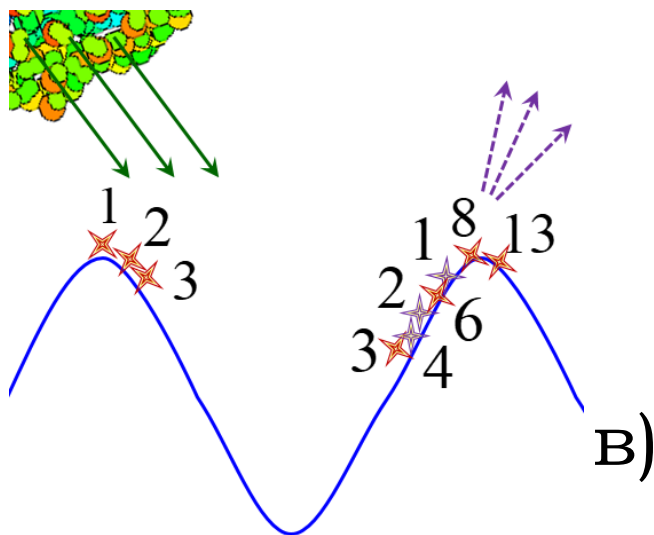
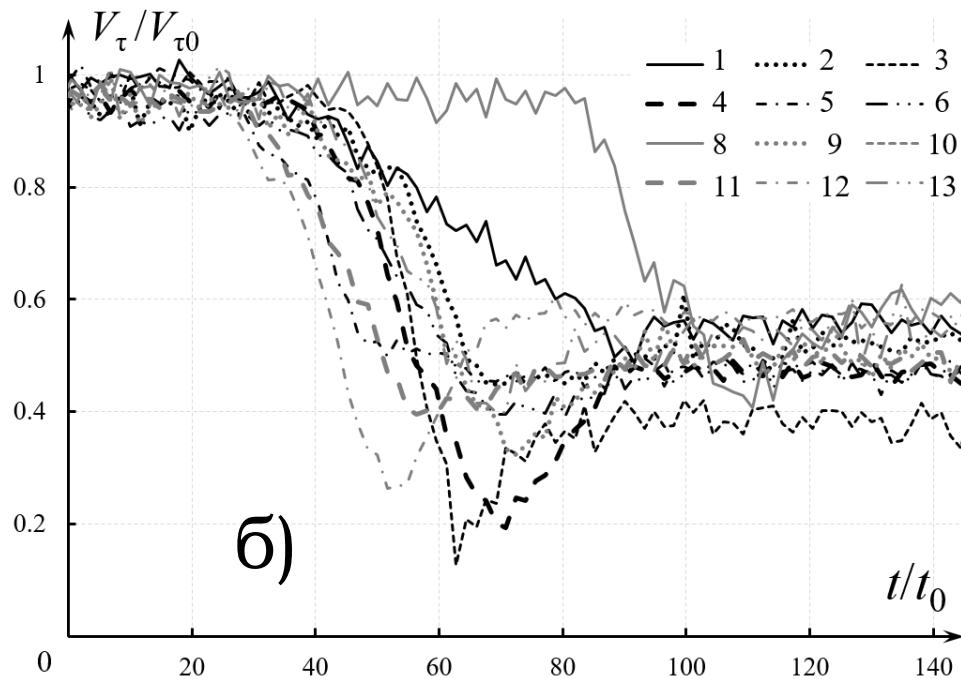
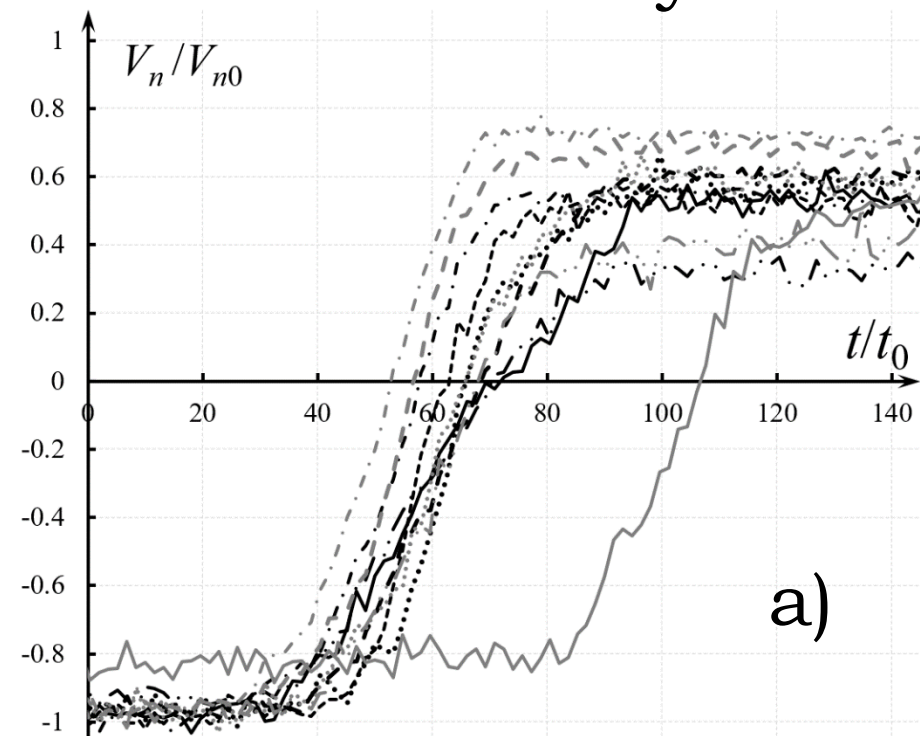
Временной ход компонент скорости частиц, соударяющихся с поверхностью:



а) $N \approx 650$, $\Delta x_0/\sigma_0 = 0.05$, б) $N \approx 2500$, $\Delta x_0/\sigma_0 = 0.03$.

Компоненты скорости частиц в процессе соударения с поверхностью отнесены к их начальным значениям: 1 – нормальная компонента, 2 – тангенциальная компонента, 3 – модуль скорости

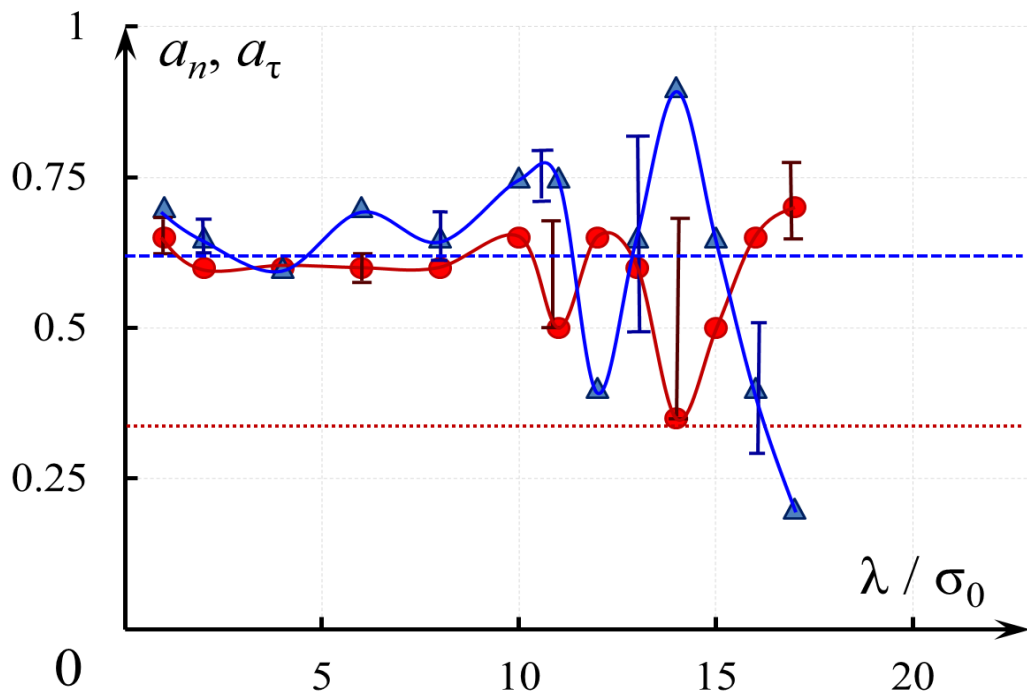
Результаты расчетов



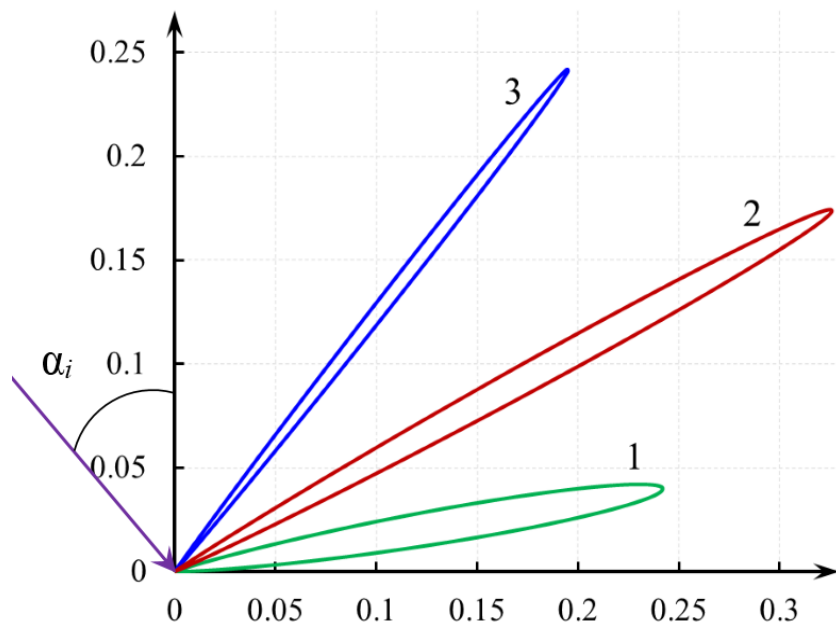
Изменение с течением времени

а) нормальной и б) касательной компонент скорости частиц воды с $N \approx 2500$ молекул при их ударе о волнистую поверхность при различных значениях прицельного параметра: номера кривых соответствуют значению Δx_0 , отнесенному к $0.01\sigma_0$, $\lambda = 8\sigma_0$; в) расположение точек соударения частиц с поверхностью

Результаты расчетов взаимодействия частиц с твердым телом



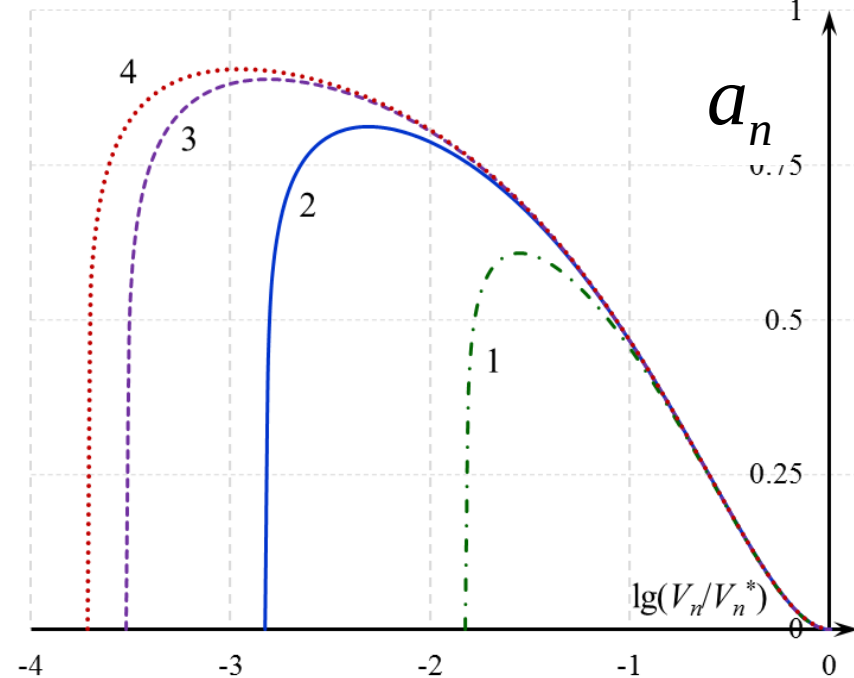
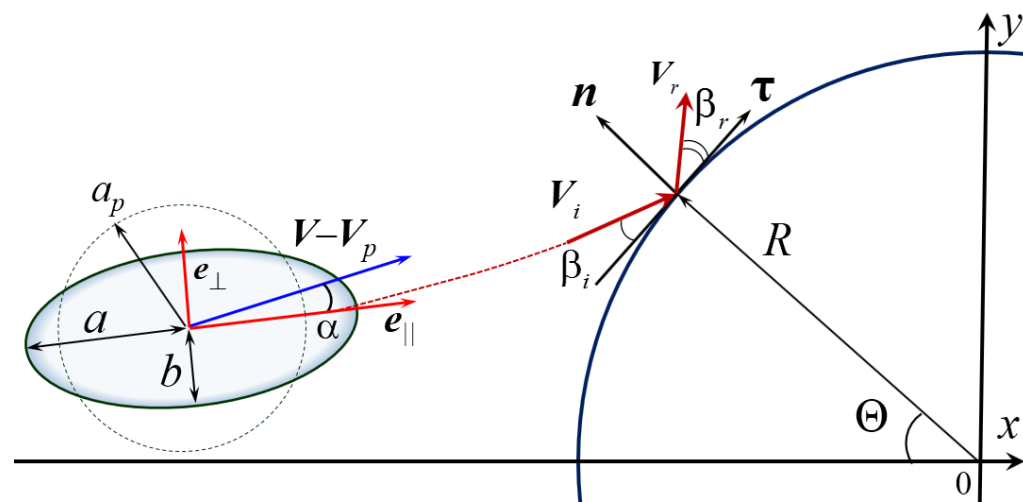
Зависимость коэффициентов восстановления компонент скорости частиц на поверхности с ($h = 1$ нм) при различных значениях параметра шероховатости поверхности; кружки – нормальная компонента скорости, треугольники – тангенциальная



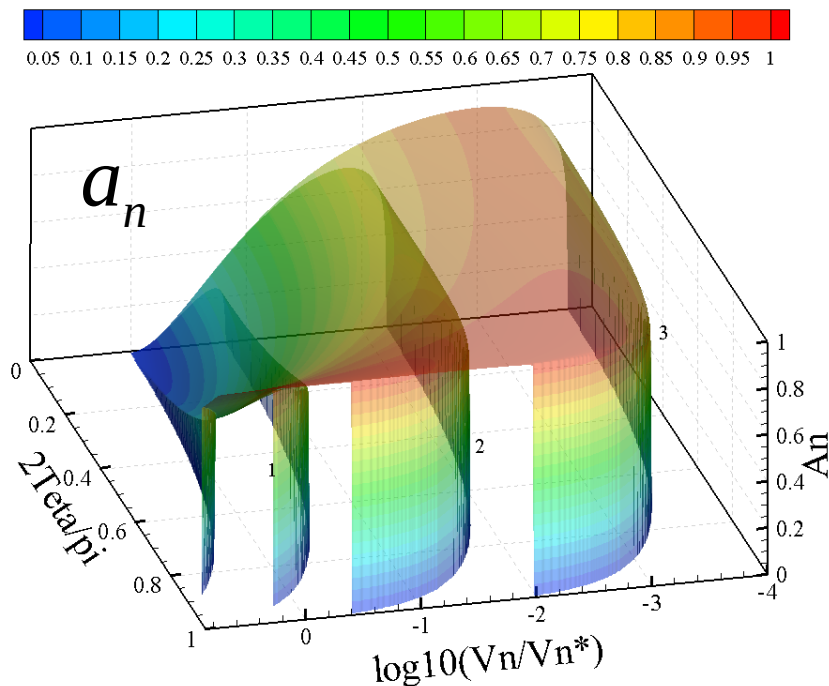
Сечение диаграммы направленности отраженных от поверхности рельефного тела частиц:

- 1 – $N=650$, $\lambda/\sigma_0 = 10$;
- 2 – $N=1100$, $\lambda/\sigma_0 = 2$;
- 3 – $N=4600$, $\lambda/\sigma_0 = 4$

Схема стохастического движения



Иллюстрации параметрических расчетов



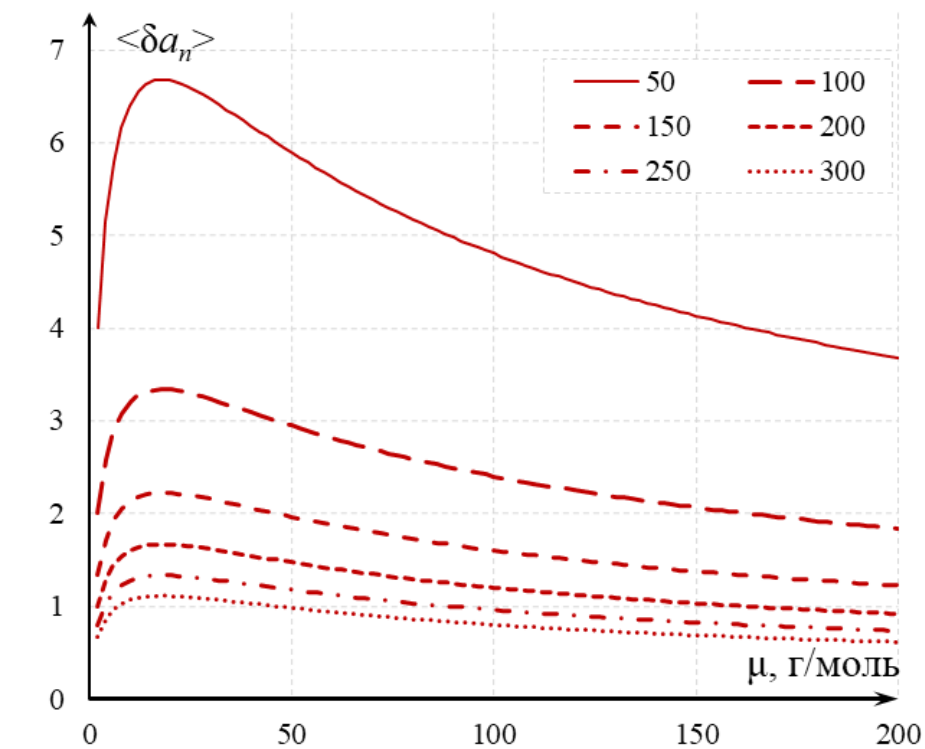
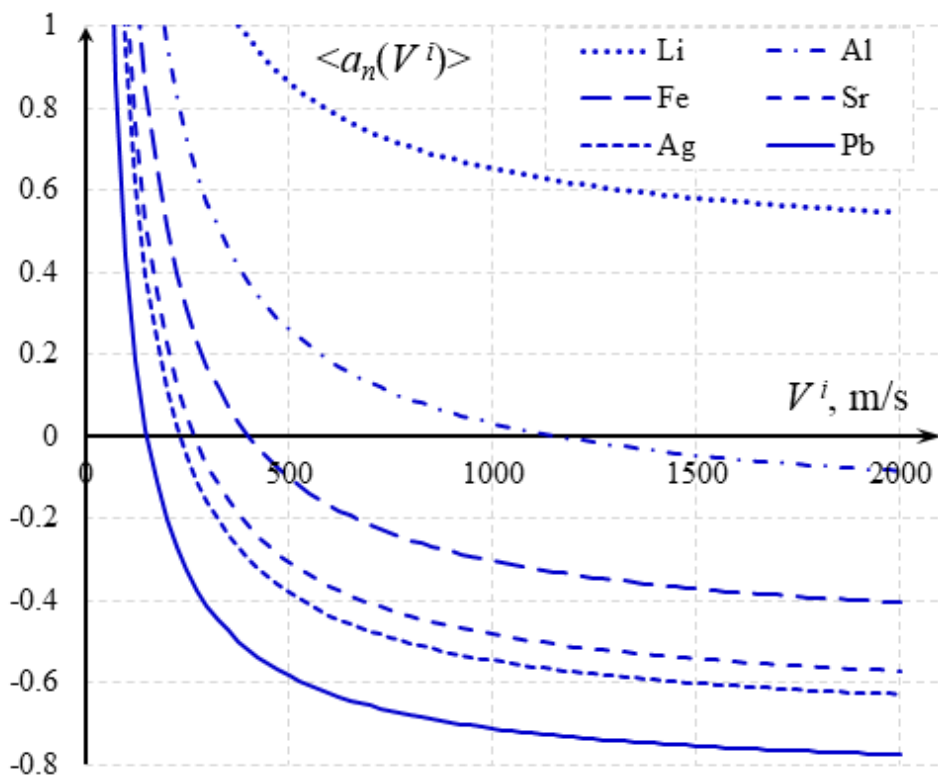
Зависимость коэффициента восстановления нормальной компоненты скорости частицы от скорости их столкновения с телом и радиусов объемно-эквивалентных шаров: 1, 2, 3 и 4 относится к частицам 1, 10, 50 и 200 мкм, соответственно

$$V_n^r = -a_n V_n^i \quad V_\tau^r = a_\tau V_\tau^i + \omega_p^i a_p (a_\tau - 1)$$

$$\omega_p^r = \frac{5}{2} (a_\tau - 1) \frac{V_\tau^i}{a_p} + \frac{5}{2} \omega_p^i \left(a_\tau - \frac{3}{5} \right)$$

[1] Амелюшкин И.А., Стасенко А.Л. Моделирование взаимодействия кристаллов льда с поверхностью летательного аппарата: область орошения и коэффициенты восстановления скорости // *Инженерно-физический журнал*, 2020, Т. 93, № 2.

Коэффициенты восстановления скорости молекул



$$a_n = \frac{V_n^+}{V_n^-} = \frac{1 - \xi + \xi \frac{\sqrt{R_0 T / 2 \mu_A}}{V^i \cos \alpha^i} \sin \omega t}{1 + \xi}$$

$$\langle a_n \rangle = \frac{1 - \xi + \xi \frac{1.39 \sqrt{R_0 T / \mu_A}}{V^i}}{1 + \xi}$$

$$\delta a_n = \frac{\xi}{1 + \xi} \frac{\sqrt{2 R_0 T / \mu_A}}{V^i \cos \alpha^i}$$

1. Потенциал взаимодействия двух молекул

$$U(r) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

2. Потенциал взаимодействия молекулы с полубесконечным плоским телом

$$U(h) = \frac{8}{15} \frac{\rho_w}{m_{0w}} \pi \varepsilon_w \sigma_w^3 \left(\frac{5}{33} \left(\frac{\sigma_w}{h} \right)^9 - \left(\frac{\sigma_w}{h} \right)^3 \right)$$

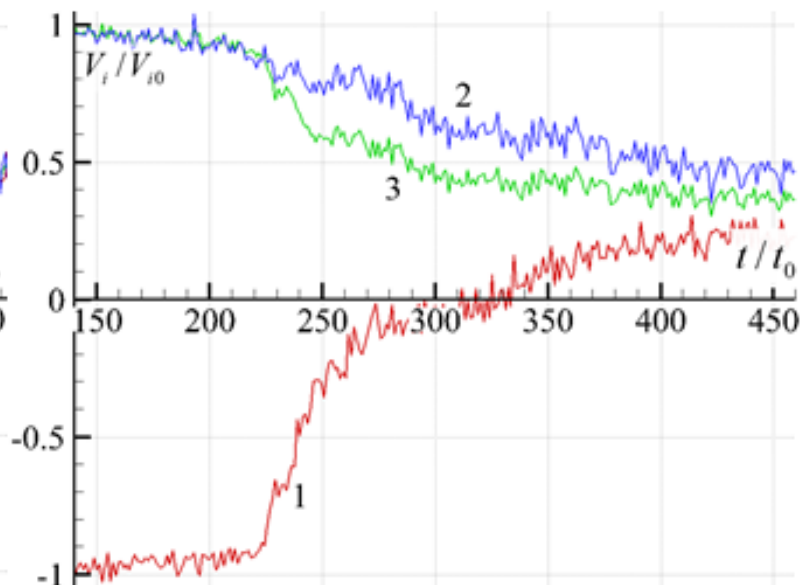
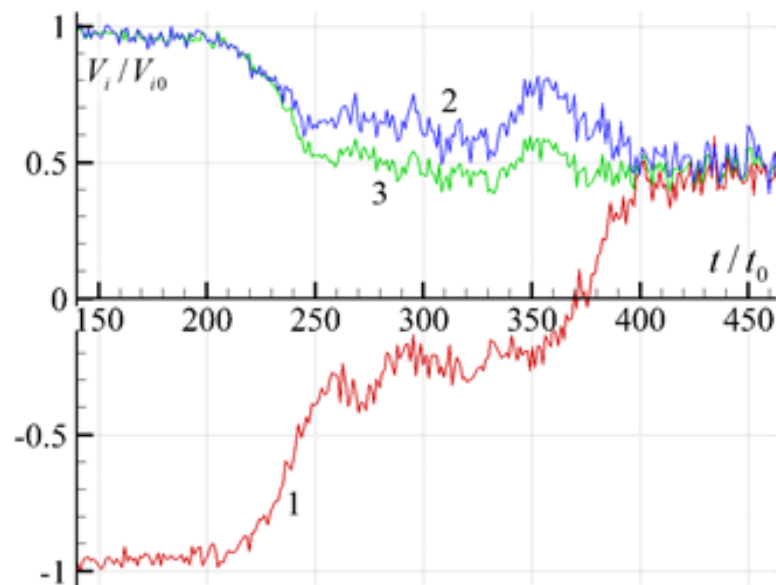
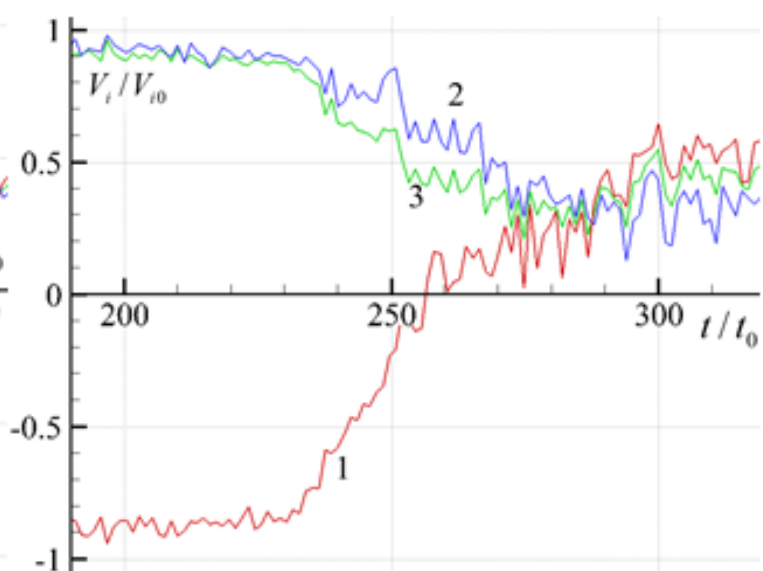
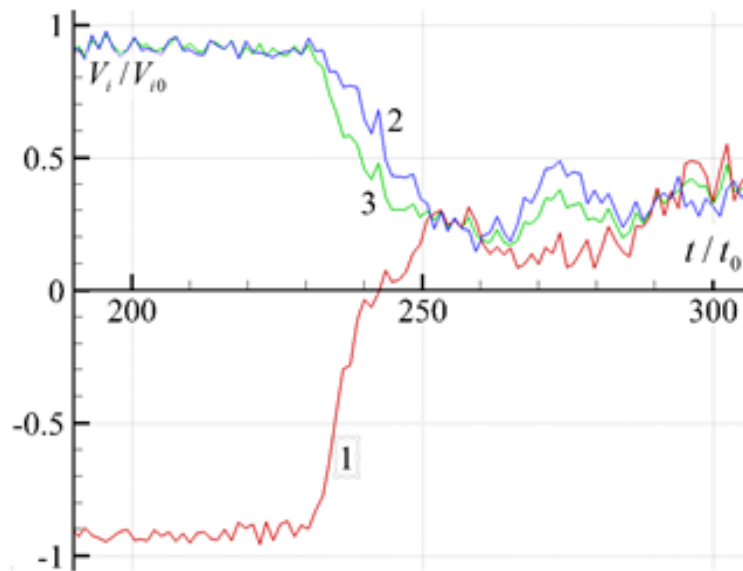
3. Взаимодействие двух полубесконечных плоских тел

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

$$B = \frac{8}{15} \frac{\rho_w \rho \pi \xi^3}{m_A m_m} A K \varepsilon_0 \sigma_0^3$$

$$AK = \frac{\varepsilon_{w-H_2O}}{\varepsilon_{H_2O-H_2O}} \approx \frac{1 + \cos \theta_{Wet}}{2}$$

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



Влияние температуры на временные зависимости компонент скорости частиц в процессе их удара о волнистое тело: $N \approx 1100$, $\lambda = 8\sigma_0$, $\Delta x_0/\sigma_0 = 0.03$. Слева: температура $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$, справа $+40\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Заключение

I Разработаны математические модели и численные алгоритмы взаимодействия частиц аэрозольного потока с рельефной поверхностью твердого тела в приложении к проблеме обледенения летательных аппаратов.

II Получены численные оценки параметров столкновения частиц с наномодифицированной поверхностью – время взаимодействия, коэффициенты восстановления компонент скорости, индикатриса отскока.

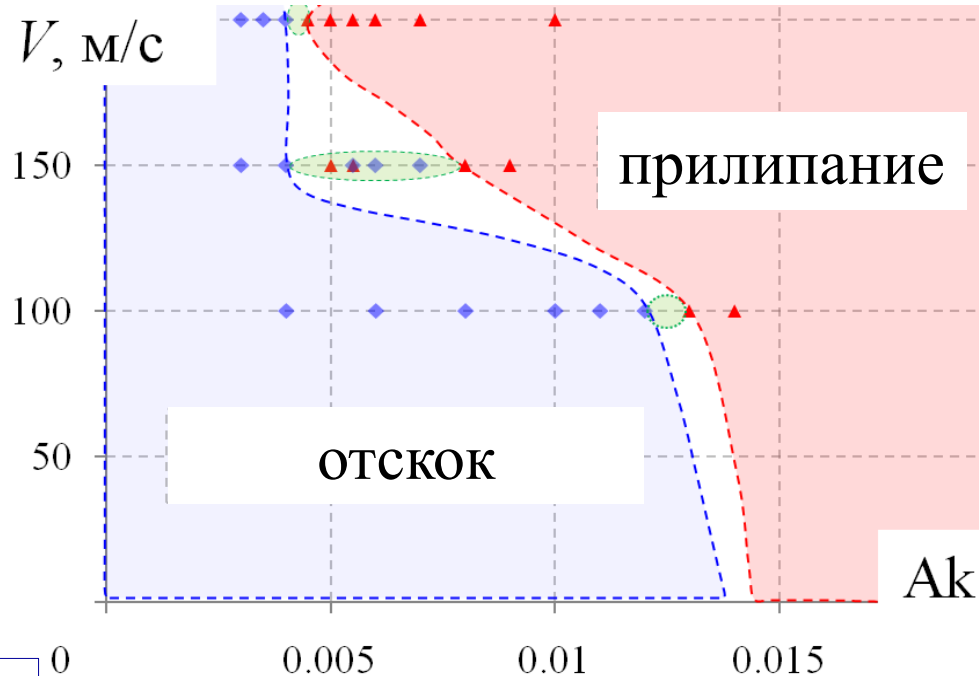
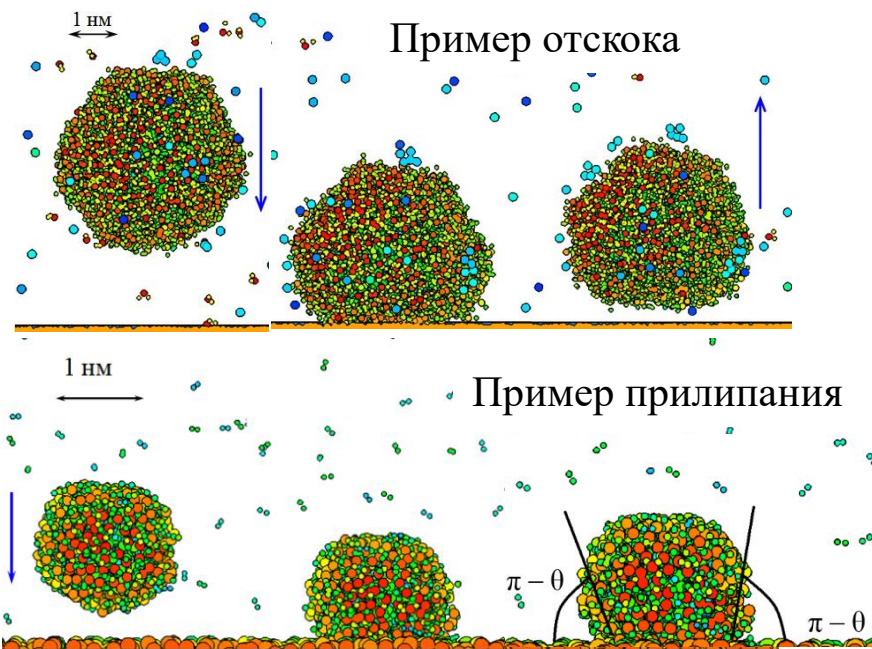
III Развитая методика позволяет исследовать взаимодействие частиц с твердым телом в широком диапазоне значений чисел Вебера и коэффициента растекания

Спасибо за внимание!

Работа выполнена при поддержке РФФИ

проект № 19-29-13016

Результаты молекулярного моделирования аэрогидродинамических явлений



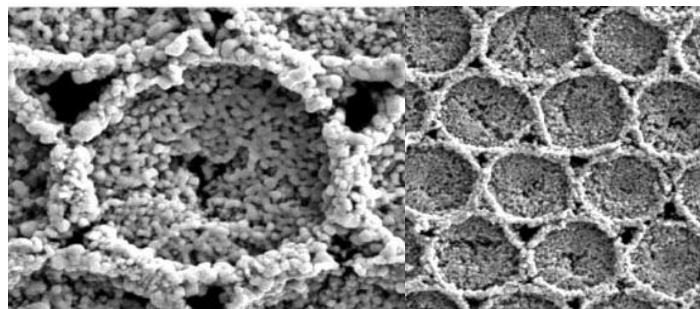
Коэффициент растекания:

$$Ak = \frac{\epsilon_{w-H_2O}}{\epsilon_{H_2O-H_2O}} \approx \frac{1 + \cos\theta_{Wet}}{2}$$

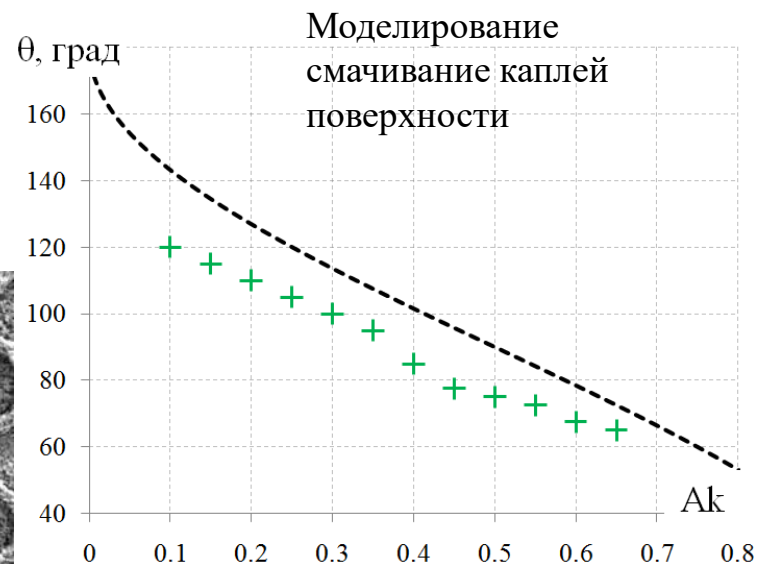
Потенциал поверхности

$$U(h) = \frac{8}{15} \frac{\rho_w}{m_{0w}} \pi \epsilon_w \sigma_w^3 \left(\frac{5}{33} \left(\frac{\sigma_w}{h} \right)^9 - \left(\frac{\sigma_w}{h} \right)^3 \right)$$

- [1] Amelyushkin I.A., Stasenko A.L. Dynamics of molecules in a supercooled water nanoparticle during the ice accretion on the aircraft surface // *Progress in flight physics*. – 2015.
- [2] Амелюшкин И.А., Стасенко А.Л. Взаимодействие нанокapлеи аэрозольного потока с твердым телом // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование*. – 2016.



Y.Li, C.Li, S.O.Cho, G.Duan, W.Cai., 2007



Уравнения движения двухфазного потока

1. Уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho_p^v}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho_p^v \mathbf{V}_p = q_m$$

$$q_m = \frac{\rho_p^v}{m_p} \frac{dm_p}{dt}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho \mathbf{V} = -q_m$$

Испарение капель (межфазный массообмен):

 — облако частиц
  — газ

$$m_p = \frac{4}{3} \rho_p a^3$$

2. Уравнение изменения импульса

$$\rho_p^v \frac{d\mathbf{V}_p}{dt} = \mathbf{f}$$

$$\mathbf{f} = \frac{\rho_p^v}{m_p} \left(\mathbf{F}_p + \mathbf{V}_p \frac{dm_p}{dt} \right)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \bar{\nabla} \hat{\mathbf{P}} - \mathbf{f}$$

$$\mathbf{F}_p = \frac{1}{2} C_D \pi a_p^2 \rho |\mathbf{V} - \mathbf{V}_p| (\mathbf{V} - \mathbf{V}_p) + \dots$$

$$\frac{dm_p}{dt} = 2\pi D_{\text{vap}} \rho a_p (\alpha - \alpha_s) \text{Sh}$$

$$\frac{\mu_{V_p}}{\mu} = 1 + \frac{5}{2} \frac{\rho_p^v}{\rho_p} \quad \text{Sh} = 2 + \frac{1}{2} \text{Re}_p^{\frac{1}{2}} \text{Sc}^{\frac{1}{3}}$$

$$\text{Re}_p = \frac{\rho |\mathbf{V} - \mathbf{V}_p| a_p}{\mu}$$

3. Уравнение изменения энергии

$$\rho_p^v \frac{de_p}{dt} = \varepsilon$$

$$\varepsilon = \frac{\rho_p^v}{m_p} \left(\mathbf{F}_p \mathbf{V}_p + (e_p + L) \frac{dm_p}{dt} + Q_p \right)$$

$$Q_p = 2\pi a \lambda (T_p - T) \text{Nu}$$

$$\rho \frac{de}{dt} = \bar{\nabla} \hat{\mathbf{P}} \mathbf{V} - \bar{\nabla} \left(-\lambda_{\rho_p^v} \bar{\nabla} T \right) - \varepsilon$$

$$e_p = CT_p + \frac{|\mathbf{V}_p|^2}{2}$$

$$\text{Nu} = 2 + \frac{1}{2} \text{Re}_p^{\frac{1}{2}} \text{Pr}^{\frac{1}{3}}$$

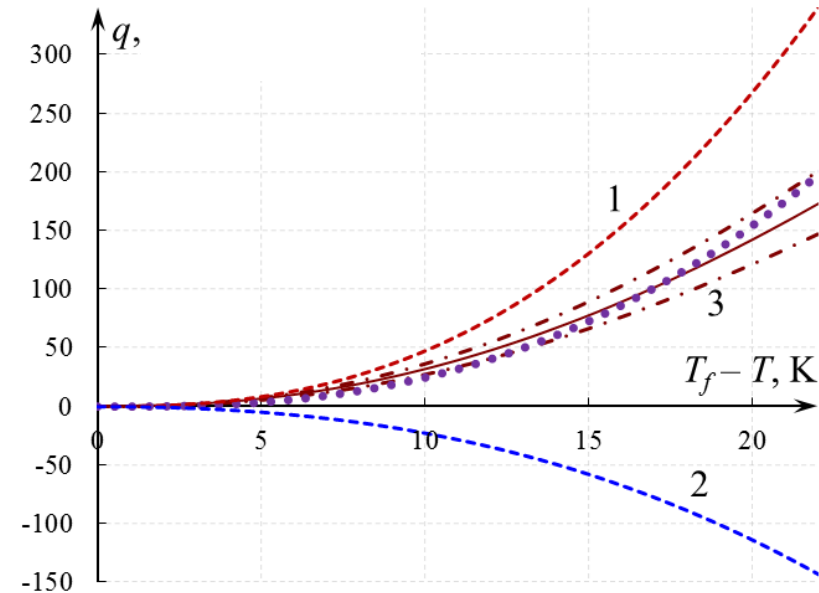
Оценки излучения при движении межфазной границы

$$q\Delta S\Delta t = C\Delta m(T_f - T) - L\Delta m\alpha_m = \\ = (C(T_f - T) - L\alpha_m)\rho_l\Delta Su\Delta t$$

$$q = \rho_l u (C(T_f - T) - L\alpha_m)$$

Уравнение движения фронта кристаллизации:

$$\frac{\oint_S \mathbf{q} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}}{\oint_S dS} + \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial n} - \lambda_{ls} \frac{\partial T_{ls}}{\partial n} = L_{ls} \rho_l \alpha_m u \\ q \cong L_{ls} \rho_l \alpha_m u - \lambda_l \left[\left(1 + \alpha_m \frac{\rho_l}{\rho_s} \right)^n - 1 \right] \frac{T_f - T}{\delta}$$



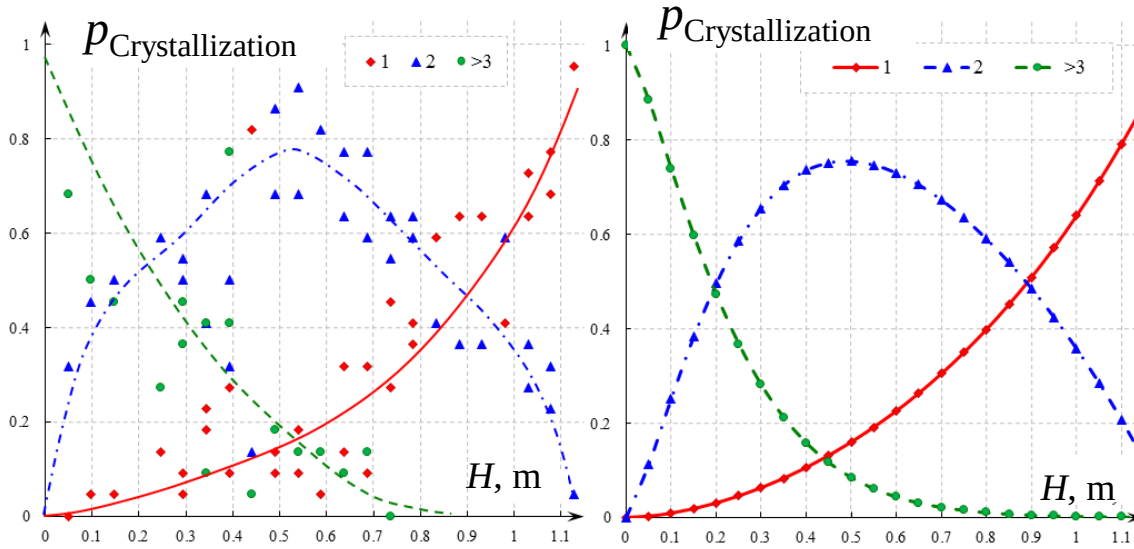
u – Скорость фронта s – solid l – liquid
 α_m – Массовая доля кристаллов льда
 C – Удельная теплоемкость
 L – Удельная теплота плавления
 δ – Толщина межфазной границы

[1] Татарченко В.А. Инфракрасное характеристическое излучение фазовых переходов первого рода и его связь с оптикой атмосферы // Оптика атмосферы и океана. – 2010

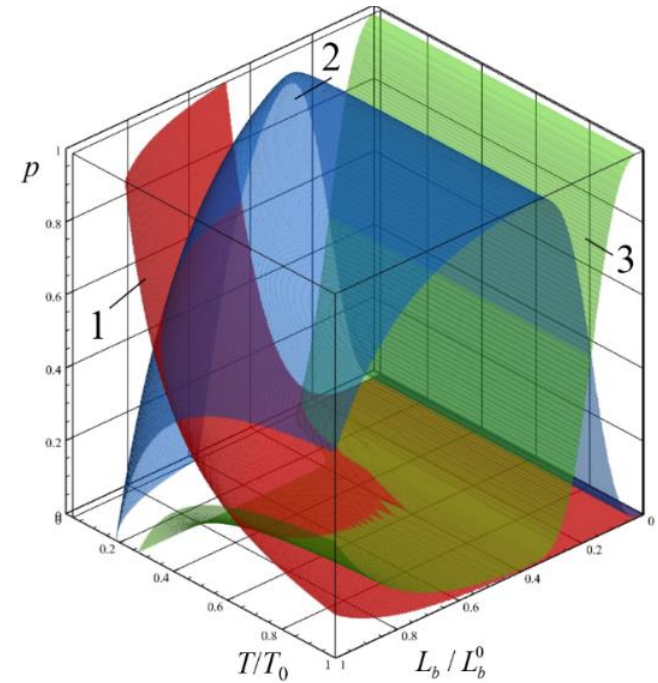
[2] Шавлов А.В. Электрический потенциал на фронте кристаллизации воды и растворов. Роль протонов и ориентационных дефектов // Журн. физ. химии. – 2005

[3] Stefan J. Über die Theory der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung in Polarmeere // Sitzangbericht Acad. Wiss. Wien. Math. – Naturwiss (Ber.). – 1989.

Accumulating of kinetic energy for crystallization



Probability of crystallization dependence on mechanical energy actuation



3D statistical diagram of crystallization probability

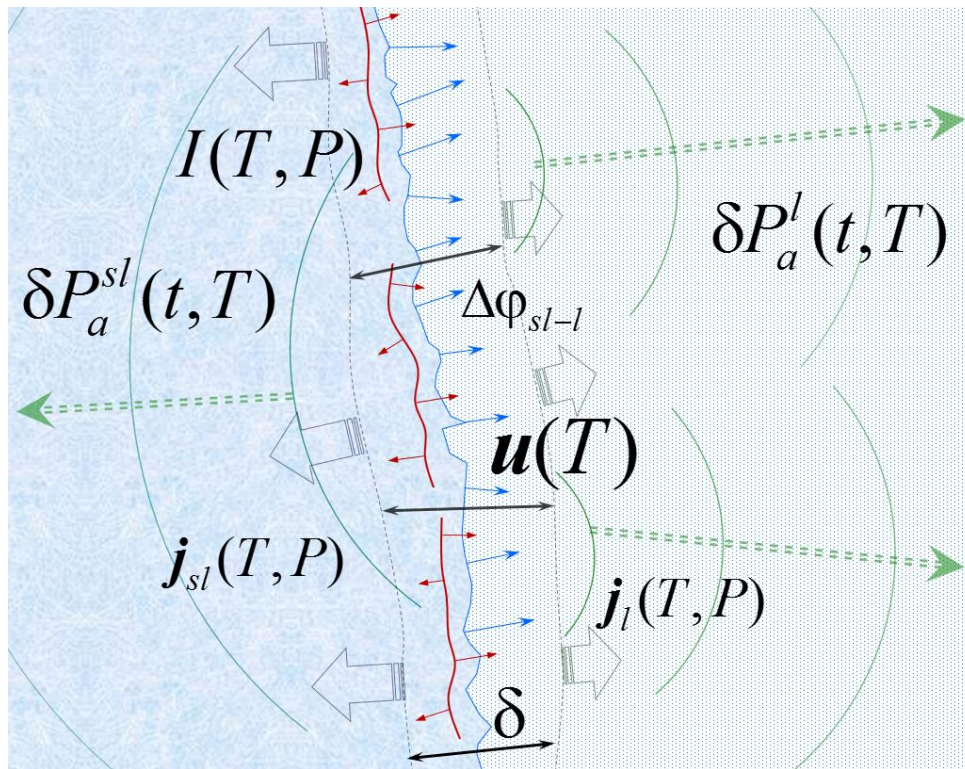
$$\left\{ \begin{array}{l} p_1 = \exp[(2H/3)^4] - 1 = \exp[(gH/15)^4] - 1 = \exp\left[\left(\frac{V_{\text{Imp}}^2}{2L_1^b}\right)^4\right] - 1 \\ p_3 = \exp[-(4H)^3] = \exp[-(2gH/5)^3] = \exp\left[-\left(\frac{V_{\text{Imp}}^2}{2L_3^b}\right)^3\right] \\ p_2 = 1 - (p_1 + p_3) \end{array} \right.$$

$$L_1^b = 15 \text{ J/kg}$$

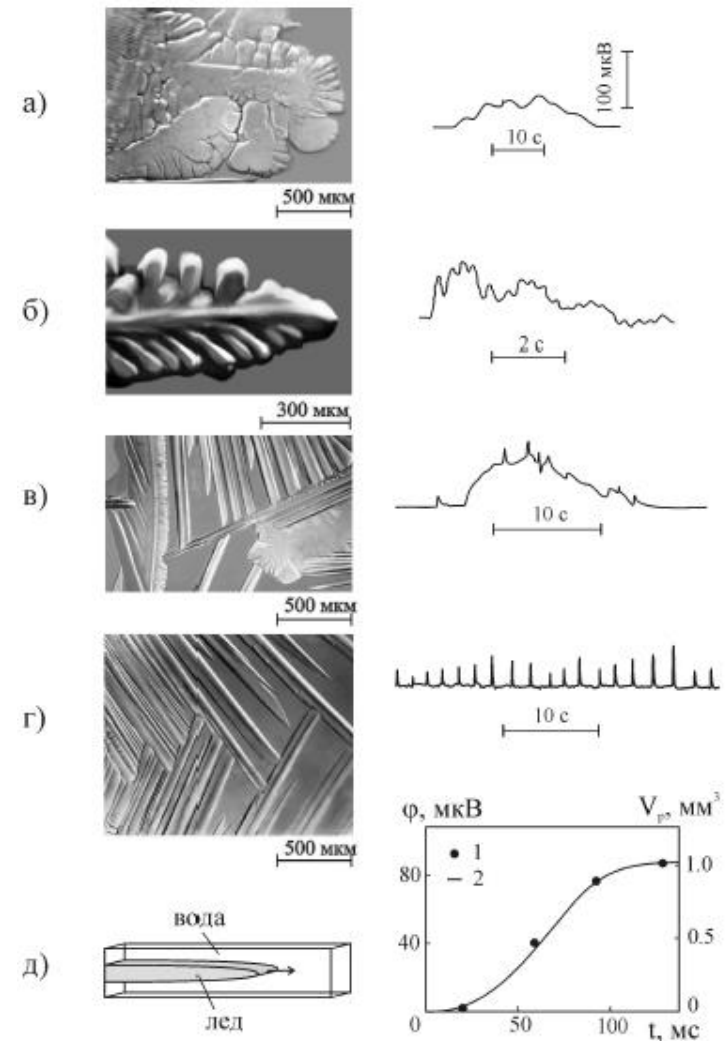
$$L_3^b = 2.5 \text{ J/kg}$$

$$K_i = \frac{V_{\text{Imp}}^2}{2L_i^b}$$

Physical effects which may take place at interphase boundary



- ✦ Interphase boundary heating
- ✦ Acoustic waves
- ✦ Phase transition electrization
- ✦ Infrared electromagnetic radiation



Two types of pulses
I-t type: $t_{fr} \sim 10$ ms, $\tau \approx 50$ ms and II-nd type
 $t_{fr} \sim 1-3$ mks,
 $\tau \sim 10-100$ mks.

[1] Татарченко В.А. Инфракрасное характеристическое излучение фазовых переходов первого рода и его связь с оптикой атмосферы // Оптика атмосферы и океана. – 2010

[2] Шавлов А.В. Электрический потенциал на фронте кристаллизации воды и растворов. Роль протонов и ориентационных дефектов // Журн. физ. химии. – 2005

[3] Шибков А.А. Собственное электромагнитное излучение растущего льда // ISSN 1810-0198 Вестник ТГУ, т.14, вып.6, 2009 С. 1192-1195.