



**ПОЛИТЕХ**

Санкт-Петербургский  
политехнический университет  
Петра Великого

**Выпускная квалификационная работа бакалавра**  
**Моделирование и исследование парадокса граничного**  
**условия прилипания в процессах гидродинамики**

Выполнил

**Студент гр. 5030103/00201**

**Богомольная Е.В.**

Руководитель

**Доцент ВШТМиМФ, к.ф-м.н.**

**Фролова К.П.**

## Цель работы

Объяснение гидродинамического граничного условия прилипания методами молекулярной динамики

## Задачи работы

- изучение литературы;
- выбор математической модели;
- написание кода программы;
- моделирование и анализ полученных результатов

# Уравнение Навье-Стокса

$$\begin{cases} \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \underline{v} + \underline{f} \\ \nabla \cdot \underline{v} = 0 \end{cases}$$

где  $\underline{v}$  - вектор скорости;

$p$  - давление;

$\rho$  - плотность;

$\nu$  - кинематическая вязкость;

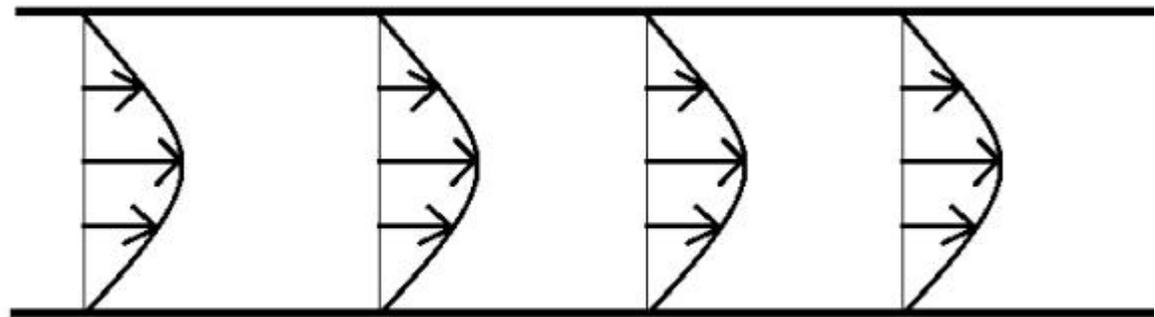
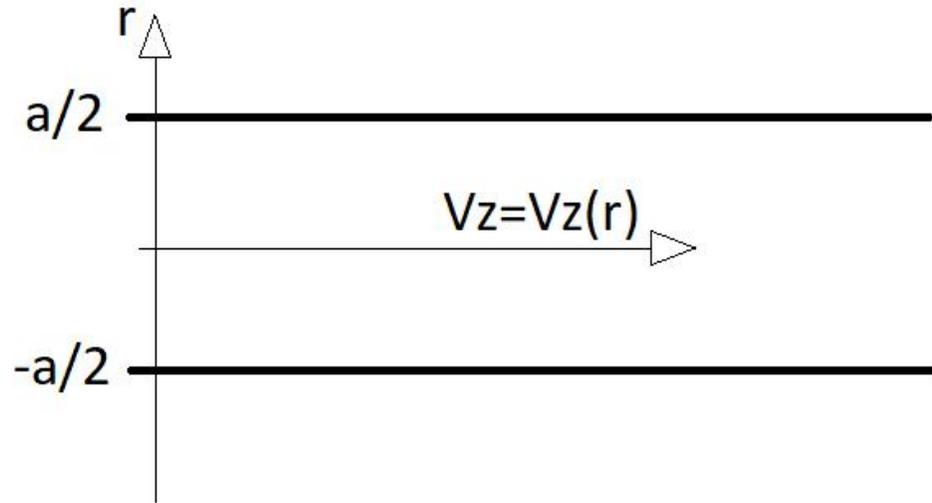
$\underline{f}$  - вектор массовых сил.

# Течение Пуазейля

$$v = 0 \text{ при } r = \frac{a}{2}$$

$$v = 0 \text{ при } r = -\frac{a}{2}$$

$$v = \frac{a^2 \Delta p}{4\mu l} \left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right)$$

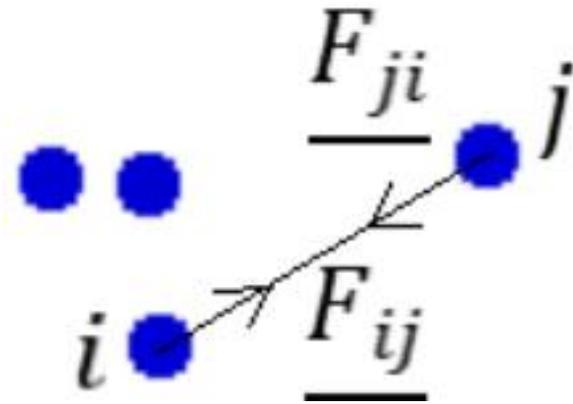


# Молекулярно-динамическая модель

$$i = 1, \dots, N$$

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_{k=1..N} \underline{F_{ik}} + \underline{f}$$

$$\frac{dr_i}{dt} = \underline{v_i}$$



где  $m_i$  - масса  $i$ -й частицы;

$\underline{r_i}$  - радиус-вектор  $i$ -й частицы;

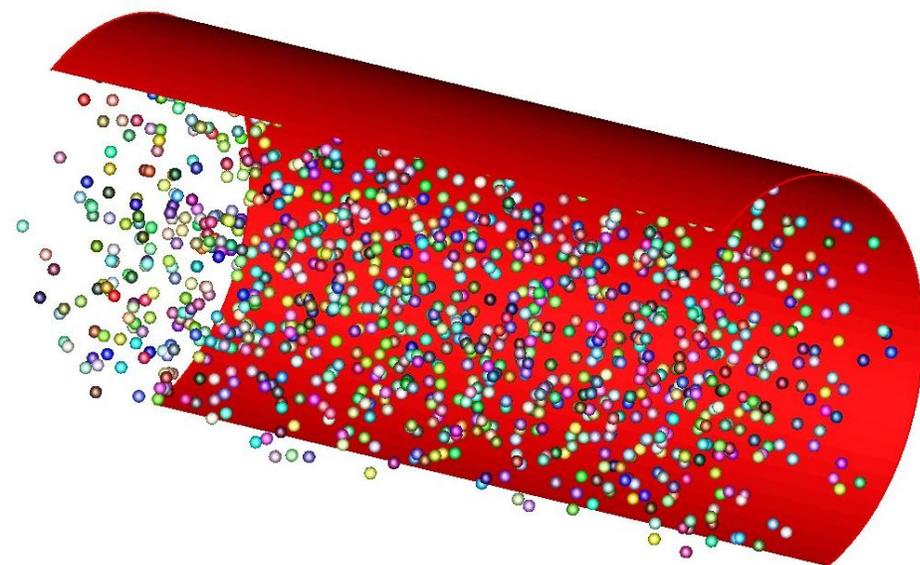
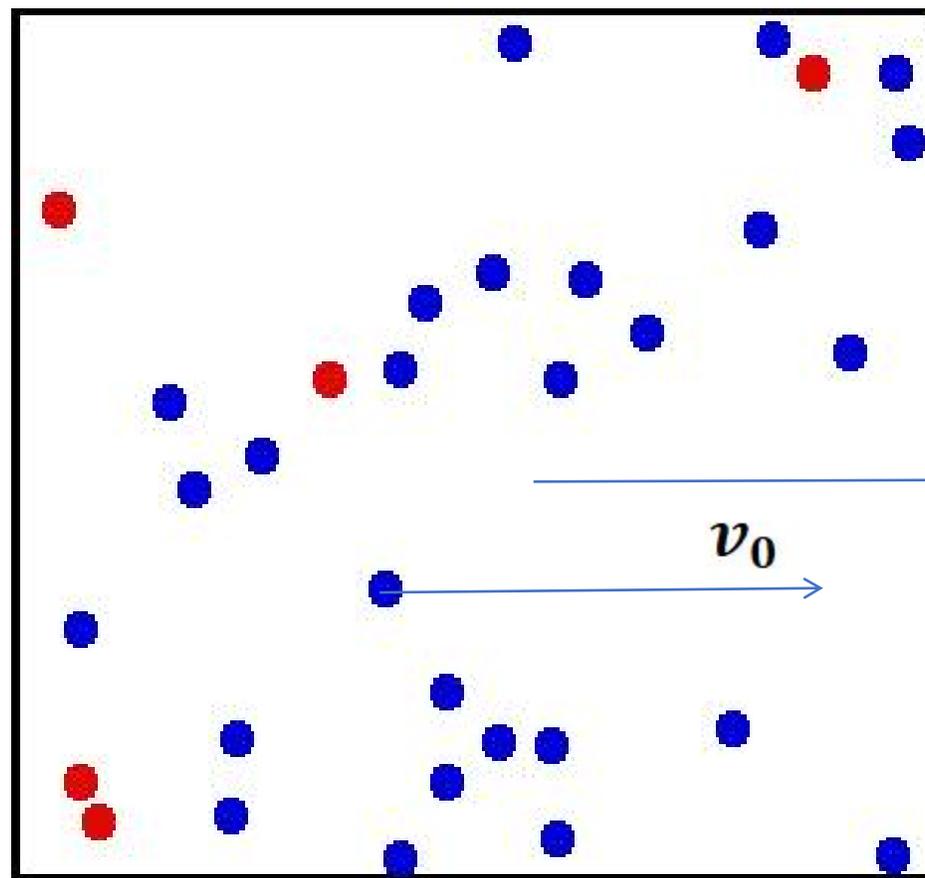
$\underline{F_{ik}}$  - сила, действующая на частицу  $i$  со стороны частицы  $k$ ;

$\underline{f}$  - вектор массовых сил

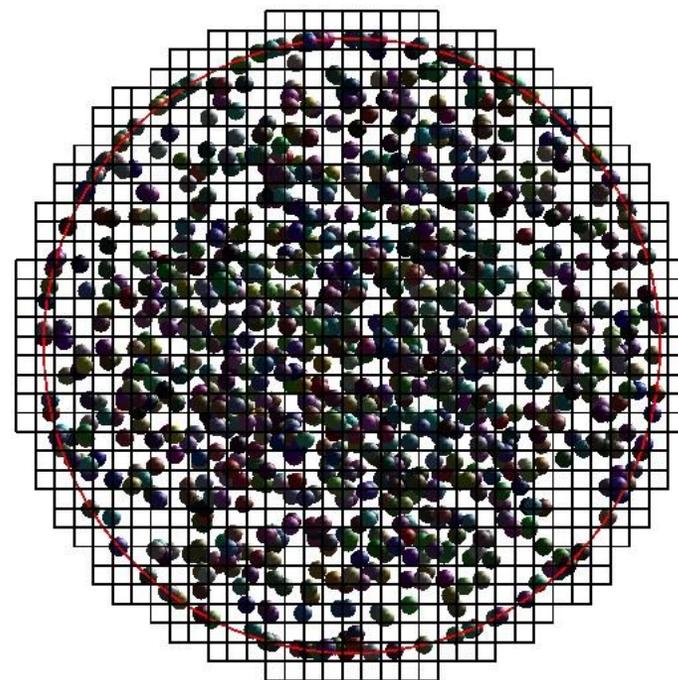
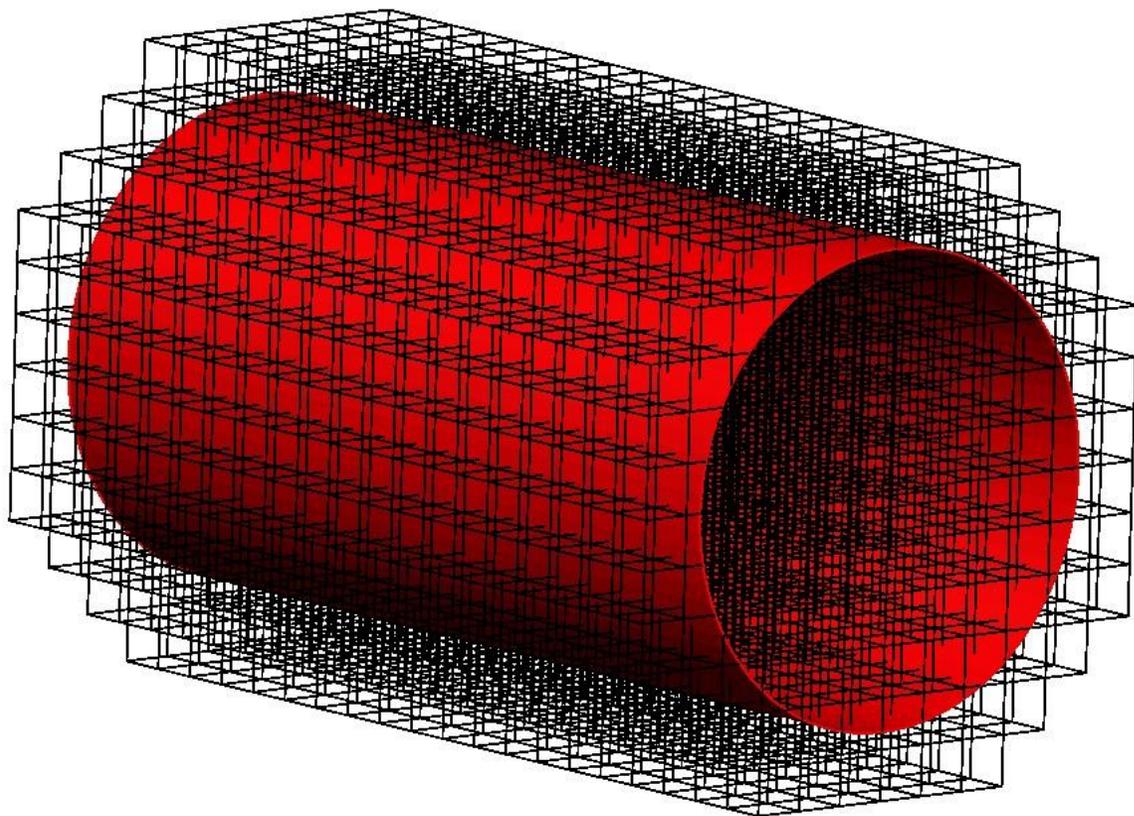
# Моделирование. Подготовительный этап

- задание размера области
- размещение частиц в области без графических наложений
- задание начальных скоростей случайным образом
- задание внешней силы
- подбор граничных условий

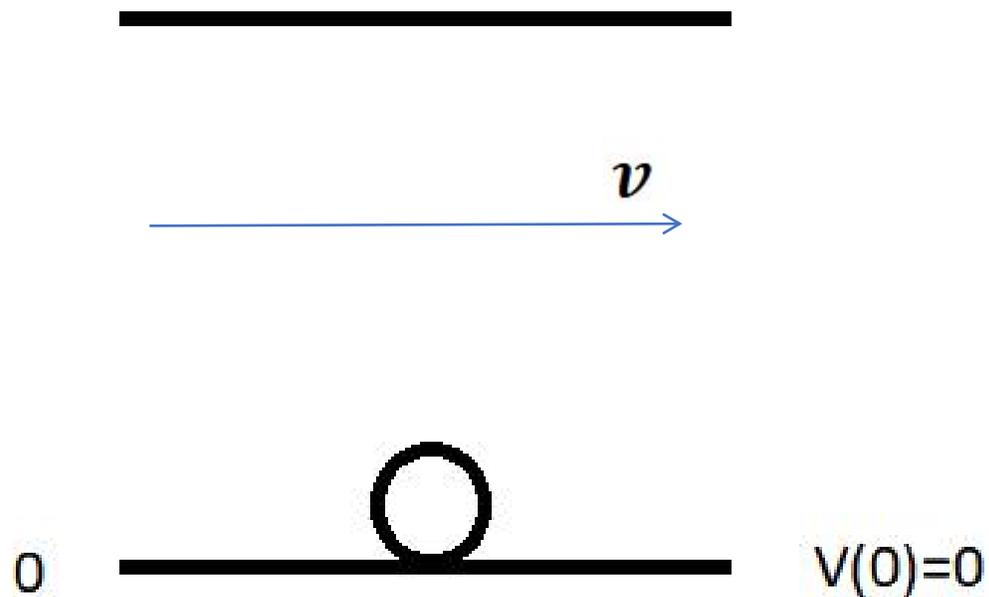
# Моделирование



# Оптимизация вычислительного процесса

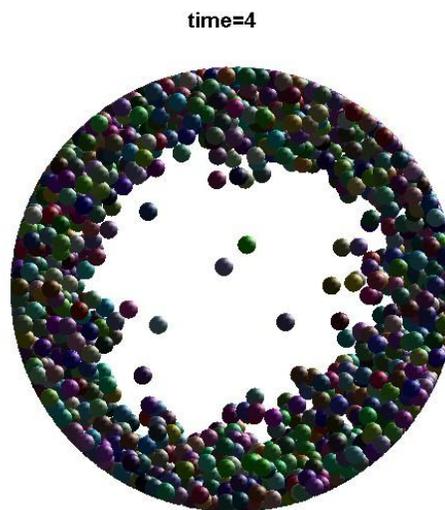
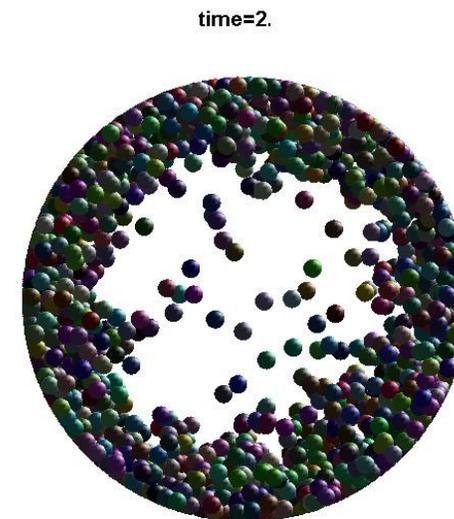
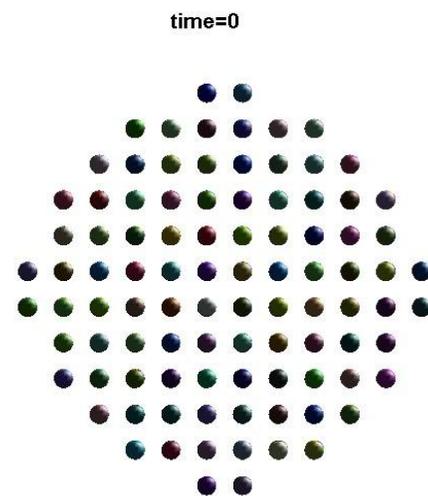


# Граничное условие прилипания

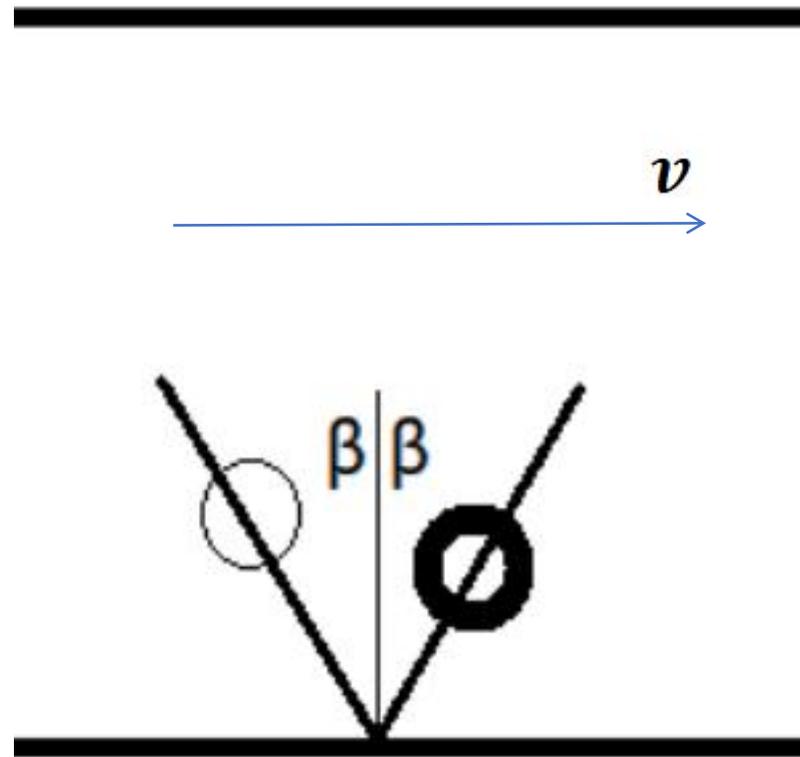


# Граничное условие прилипания: результат

Расположение частиц в  
разрезе цилиндрического  
канала в разные моменты  
времени

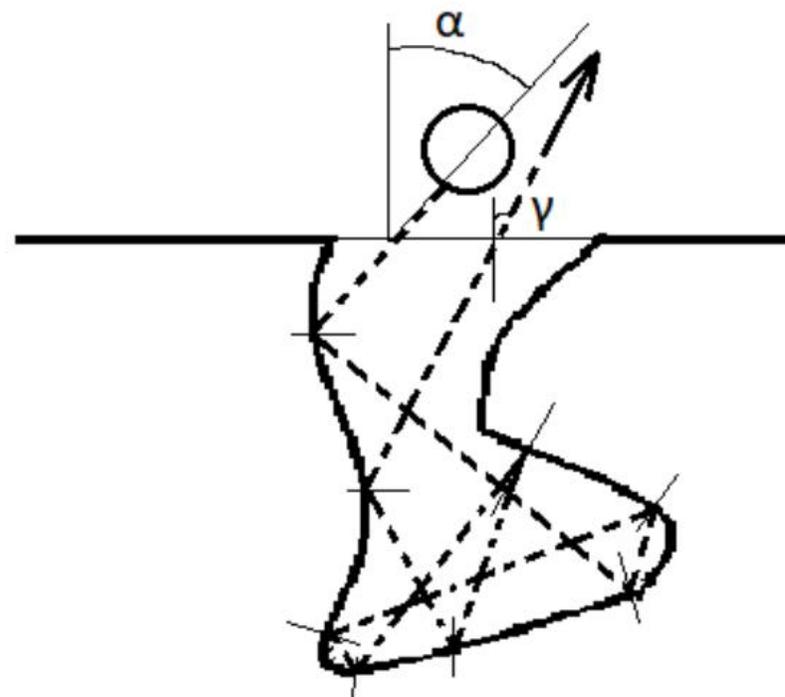
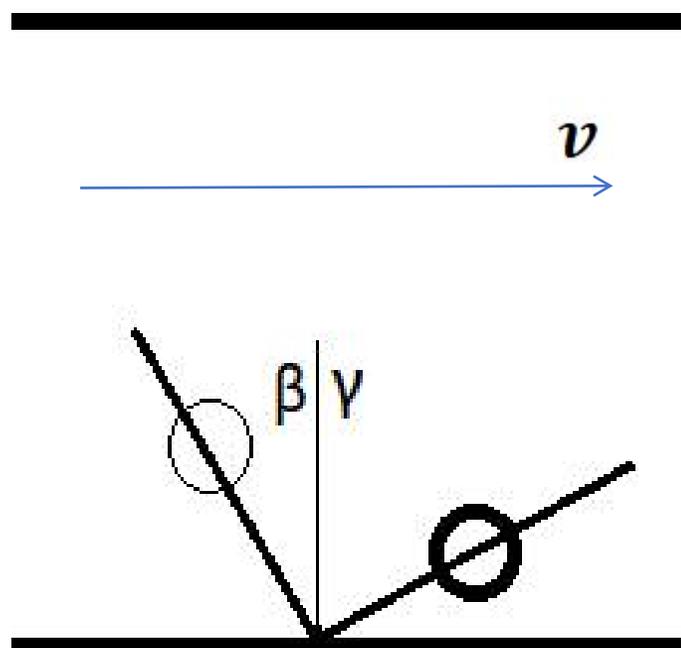


# Граничное условие: простой отскок

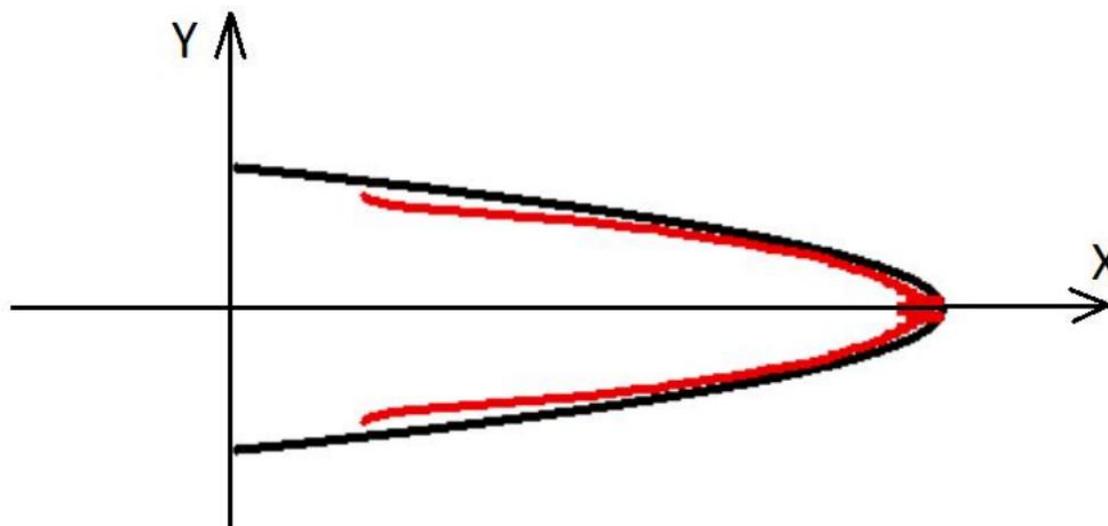
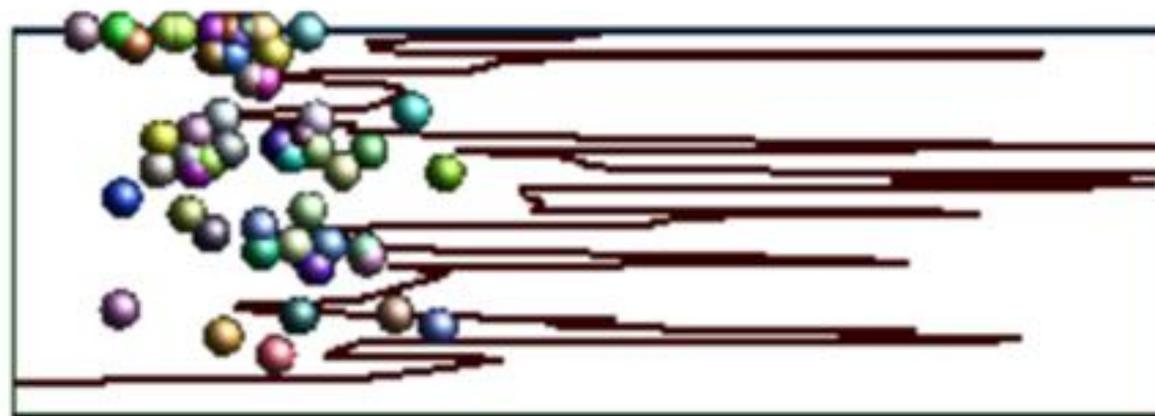


Нет стационарного решения

# Граничное условие «модифицированный отскок» (учет неровностей поверхности стенки)



# «Модифицированный» отскок: результат



Профиль скоростей

# Выводы

- разработана молекулярно-динамическая модель и написан код программы
- рассмотрены различные варианты задания граничных условий
- проведено моделирование
- показано, что граничное условие прилипание формируется за счет шероховатости твердой поверхности и случайного отскока частиц моделируемой среды

Спасибо за внимание!