

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДЯНОГО ПАРА С НЕСКВОЗНЫМИ ПОРАМИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО ТИПА

Никонов Э.Г., Павлуш М.<sup>1</sup>, Поповичова М.<sup>1</sup>

Объединённый институт ядерных исследований, Российская Федерация, 141980,  
г. Дубна Московской области, ул. Жолио-Кюри, 6, +74962164722, [e.nikonov@jinr.ru](mailto:e.nikonov@jinr.ru)

<sup>1</sup>Университет г. Прешов, Словакия, 080 01, г. Прешов, ул. Конштантинова, 16,  
+421904031531, [miron.pavlus@unipo.sk](mailto:miron.pavlus@unipo.sk), [maria.popovicova@unipo.sk](mailto:maria.popovicova@unipo.sk)

Теоретические и экспериментальные исследования взаимодействия водяного пара с пористыми материалами проводятся как на макроуровне [1], так и на микроуровне [2]. На макроуровне исследуются влияние структуры расположения индивидуальных пор на процессы взаимодействия водяного пара с пористым материалом как сплошной средой. На микроуровне исследуется зависимость характеристик взаимодействия водяного пара от геометрии индивидуальной поры.

В данной работе проведено исследование посредством математического моделирования процессов взаимодействия водяного пара с индивидуальной несквозной порой цилиндрического типа. Вычисления производились с использованием модели гибридного типа, сочетающей в себе молекулярно-динамический и макро-диффузионный подходы для описания эволюции водяного пара с индивидуальной порой [3,4]. Исследовались процессы эволюции макроскопических характеристик системы таких, как температура, плотность, давление, к различным состояниям равновесия в зависимости от внешних по отношению к поре условий. Проведено исследование зависимости данных процессов от геометрии поры.

## Литература

1. *Krus M.*, Moisture transport and storage coefficients of porous mineral building materials: Theoretical principals and new test method. – Fraunhofer IRB Verlag, Stuttgart, 1996. – 175 p.
2. *Alim K., Parsa Sh., Weitz D. A., Brenner M. P.*, Local pore size correlations determine flow distributions in porous media. – Phys. Rev. Lett., 119, 144501 (2017).
3. *Nikonov E.G., Pavluš M., Popovičová M.*, 2D microscopic and macroscopic simulation of water and porous material interaction, – arXiv:1709.05878 [physics.flu-dyn]
4. *Nikonov E.G., Pavluš M., Popovičová M.*, Molecular dynamic simulation of water vapor interaction with blind pore of dead-end and saccate type. – arXiv:1708.06216 [physics.flu-dyn]