УДК 539.6

**МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ПОДШИПНИК ЖИДКОСТНОГО ТРЕНИЯ**

**Корнаев А.В.,**

*Россия, г. Орел, Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева,*

**Бобырь М.В.,**

*Россия, г. Курск, Юго-Западный государственный университет*

*В статье рассмотрены вопросы моделирования микроскопических подшипников скольжения на основе методов молекулярной динамики. Представлена математическая модель и описан алгоритм его программной реализации. Обсуждены результаты вычислительных экспериментов и предложен путь развития темы исследования.*

***Ключевые слова:*** *подшипник скольжения, молекулярная динамика, фуллерены.*

Одним из направлений развития нанотехнологий является создание технических систем, размеры которых соизмеримы с размерами молекул. Современные среды инженерных расчетов позволяют исследовать трибологические процессы на уровне отдельных молекул. В работе [1] представлена модель трения многослойных сферических молекул фуллеренов в малом зазоре между твердыми пластинами. Разработанная модель позволила авторам определить условия перехода между трением скольжения и качение. При этом отмечено резкое увеличение коэффициента трения при этом переходе. В работе [2] рассмотрена модель движения монослоя фуллеренов между двух движущихся поверхностей, также покрытых молекулами фуллеренов. Такая модель воспроизводит условие прилипания, общепринятое в гидродинамической теории смазки [3]. Авторы [2] декларируют явление заклинивания вращающихся молекул, однако полученные результаты сложно распространить на более общий случай гидродинамической смазки. Действие этого явления можно снизить путем введения молекул других материалов, повышением температуры, использования электростатических сил [4-5].

Методы молекулярной динамики и средние персональные компьютеры позволяют выполнять моделирование до нескольких миллионов частиц в течении нескольких микросекунд. Данная работа посвящена математическому и имитационному моделированию молекулярного гидродинамического подшипника, состоящего из молекул фуллеренов $C\_{60}$. В работе используются двухмерные модели молекул.

Математическая модель подшипника основана на действии принципа суперпозиции множества атомов и их взаимодействии, описываемом потенциалом Леннарда-Джонса:

$U\_{i,j}(r\_{i,j})=4ξ\left[\left(\frac{σ}{r\_{i,j}}\right)^{12}-\left(\frac{σ}{r\_{i,j}}\right)^{6}\right]$, (1)

где $r\_{i,j}$ – расстояние между $i$ -м и $j$ -м атомами, $ξ$ – характерная энергия, определяющая глубину потенциальной ямы, $σ$ – характерная длина, определяющая расстояние с нулевой энергией.

Считается также, что движение атомов описывается классическим законом механики, который с учетом (1) примет вид:

$m\_{i}\frac{d\vec{V}\_{i}}{dt}=\sum\_{j=1}^{N}\frac{dU\_{i,j}}{dr\_{i,j}}\frac{\vec{r}\_{i,j}}{\left‖\vec{r}\_{i,j}\right‖}$, (2)

где $m\_{i}$ – масса $i$ -го атома, $\vec{V}\_{i}$ – скорость $i$ -го атома, $N$ – количество взаимодействующих атомов.

Решение (2) как системы обыкновенных дифференциальных уравнений удобно представить в разностной форме, а решение осуществлять методом Рунге-Кутта [7]. Для этого была разработаны алгоритм и программа в среде MATLAB. Программа является имитационной моделью двухмерного движения смазочного материала в зазоре между неподвижной втулкой и вращающейся с постоянной скоростью цапфой, отличающейся тем, что смазочный материал, втулка и цапфа подшипника представляют собой множество молекул фуллереноподобного вещества, движущихся под действием сил тяжести, сил внутримолекулярного и межмолекулярного потенциального взаимодействия.

Схема иерархий модулей программы расчета динамики молекулярного подшипника представлена на рисунке 1. Блок «OFBearing\_micro\_friction.m» является исполняемым модулем, в котором задаются исходные данные для расчета, в том числе размеры подшипника, количество и свойства атомов и молекул, вызываются основные функции и выводятся результаты расчета в графическом и матричном виде. Также в блоке выполняется решение уравнений динамики (2) и выполняется проверка условий некорректной работы программы. Блок «contact\_detecting.m» предназначен для идентификации контакта между атомами в каждый текущий момент времени. Результатами расчета являются матрицы с компонентами сил взаимодействия между атомами, находящимися на расстоянии, меньшем некоторого наперед заданного минимального расстояния взаимодействия. Блок «force.m» предназначен для расчета результирующей несущей способности и силы трения на поверхности молекулярного ротора в молекулярном подшипнике. Блок «initial\_boundary\_condition.m» формирует матрицы координат и скоростей центральных атомов молекул фуллеренов. Блок «initial\_condition\_b.m» формирует начальные условия для атомов – сателлитов, расположенных вокруг центрального атома в молекуле фуллерена. В блоке «inner\_reactions.m» выполняется расчет сил взаимодействия внутри атомов молекул, а также результирующие силы для каждой молекулы, в том числе дающие вклад в результирующую силу трения. Блок «fill\_film.m» выполняется в начальный момент времени и предназначен для заполнения смазочного слоя молекулярного подшипника молекулами смазочного материала, в данном случае молекулами фуллеренов.



***Рисунок 1 – Схема иерархии модулей программы расчета динамики молекулярного подшипника***

Программа была протестирована для случая молекулярного подшипника со следующими характеристиками: радиус цапфы 80 А, масса атома смазки $m\_{a}=12$, а.е.м., масса молекулы смазки $m\_{m}=60⋅m\_{a}$, радиус молекулы смазки $r=3.5$, А, параметры потенциала Леннарда-Джонса $ξ=275/N\_{A}$ Дж, $σ=3.47$, А. В результате серии вычислительных экспериментов по расчету результирующих сил, полей скоростей и траекторий движения ротора были сделаны следующие выводы об исследовании разработанной модели и программы расчета:

- молекулярный подшипник жидкостного трения реализует смазочный эффект, схожий с эффектом жидкостного трения в макроскопических объектах, однако возникает этот эффект за счет сил отталкивания молекул смазки и подшипника, а не за счет внутреннего трения между молекулами;

- собственное вращение молекул смазки не оказывает существенного влияния на результирующие силы.

- основным недостатком разработанной модели является отсутствие учета диссипативных эффектов, которые связаны с вязким трением на макроскопическом уровне.

Дальнейшее развитие темы исследования может быть связано с применением искусственных нейронных сетей для проведения распределенных вычислений молекулярной динамики.

Данная работа была подготовлена в рамках выполнения проекта № 16-19-00186 Российского научного фонда. Авторы выражают благодарность фонду за оказанную поддержку.

Список литературы

1. Mongkolwongrojn, M. Stability analysis of rough journal bearings under TEHL with non-Newtonian lubricants [Text] / M. Mongkolwongrojn, C. Aiumpronsin // Tribology International. – 2010. – Vol. 43. – Pp. 1027-34.

2. Braun, O.M. Nanotribology: microscopic mechanism of friction [Text] / O.M. Braun, A.G. Naumovets // Surface Science Reports. – 2005. – Vol. 60. – p. 79-158.

3. Hori, Y. Hydrodynamic Lubrication [Text] / Y. Hori. – Tokyo: Yokendo Ltd, 2006. – 239 p.

4. Persson, B.N.G. Sliding friction. Surf. Sci. Rep. [Text] / B.N.G. Persson. – Berlin: Springer-Verlag. ‑ 1998. – 83p.

5. Lubrecht, A.A. Granular lubrication; a simple model and trends [Text] / A.A. Lubrecht, Y. Berthier // Lubricants and lubrication – Proceedings of the 21th leeds-Lyon symposium on tribology. UK.: Elsevier. Tribology series. – 1995. – Vol. 30. – P. 53-62.

6. Polyakov, R.N. Peculiarities of reactions control for rotor positioning in an active journal hybrid bearing [Text] / R.N. Polyakov, D.V. Shutin, L.A. Savin, A.Y. Babin // International Journal of Mechanics. – 2016. – №10. – C.62-67.

7. Самарский, А.А. Численные методы математической физики [Текст] / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – М.: Научный мир, 2000. – 316 с.

**Корнаев Алексей Валерьевич**, д-р техн. наук, профессор кафедры мехатроники, механики и робототехники ОГУ имени И.С. Тургенева, e-mail: rusakor@inbox.ru, тел.: +79534781591

**Бобырь Максим Владимирович**, д-р техн. наук, профессор кафедры вычислительной механики ЮЗГУ, e-mail: max\_bobyr@mail.ru

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**MOLECULAR JOURNAL BEARING**

**Kornaev A.V.,**

*Russia, Orel, Orel State University named after I.S. Turgenev***,**

**Bobyr M.V.**

*Russia, Kursk, South-West State University*

*The paper deals with the issues of modeling of microscopic plain bearings based on molecular dynamics methods. A mathematical model is presented and an algorithm for its software implementation is described. The results of computational experiments are discussed and a way to develop the research topic is proposed.*

***Keywords:*** *plain bearing, molecular dynamics, fullerenes.*

Bibliography

1. Mongkolwongrojn, M. Stability analysis of rough journal bearings under TEHL with non-Newtonian lubricants [Text] / M. Mongkolwongrojn, C. Aiumpronsin // Tribology International. – 2010. – Vol. 43. – Pp. 1027-34.

2. Braun, O.M. Nanotribology: microscopic mechanism of friction [Text] / O.M. Braun, A.G. Naumovets // Surface Science Reports. – 2005. – Vol. 60. – p. 79-158.

3. Hori, Y. Hydrodynamic Lubrication [Text] / Y. Hori. – Tokyo: Yokendo Ltd, 2006. – 239 p.

4. Persson, B.N.G. Sliding friction. Surf. Sci. Rep. [Text] / B.N.G. Persson. – Berlin: Springer-Verlag. ‑ 1998. – 83p.

5. Lubrecht, A.A. Granular lubrication; a simple model and trends [Text] / A.A. Lubrecht, Y. Berthier // Lubricants and lubrication – Proceedings of the 21th leeds-Lyon symposium on tribology. UK.: Elsevier. Tribology series. – 1995. – Vol. 30. – P. 53-62.

6. Polyakov, R.N. Peculiarities of reactions control for rotor positioning in an active journal hybrid bearing [Text] / R.N. Polyakov, D.V. Shutin, L.A. Savin, A.Y. Babin // International Journal of Mechanics. – 2016. – №10. – C.62-67.

7. Samarsky A.A. Chislenniye metodi matematicheskoy fiziki [Text] / A.A. Samarsky, A.V. Gulin. – Moskow: Nauchny mir, 2000. – 316 p. (in Russian)

**Kornaev Alexey Valerievich**, Doctor of Engineering, Professor at the Department of Mechatronics, Mechanics and Robotics at Orel State University named after I.S. Turgenev, e-mail: rusakor@inbox.ru, phone No: +79534781591

**Bobyr Maxim Vladimirovich**, Doctor of Engineering, Professor at the Department of Calculation Mechanics at South-West State University, e-mail: max\_bobyr@mail.ru.