



Модели процессов, сопровождающих кристаллизацию переохлажденных капель

^{1,2} И.А. Амелюшкин, ORCID: 0000-0002-4281-3531 <Amelyushkin_Ivan@mail.ru>

³ М.А. Кудров, ORCID: 0000-0003-2056-1932 <MKudrov@mail.ru>

³ А.О. Морозов, ORCID: 0000-0003-4620-9662 <MorozovAO@phystech.edu>

^{1,3} А.Л. Стасенко, ORCID: 0000-0001-9608-3186 <Stasenko@serpantin.ru>

^{1,3} А.С. Щеглов, ORCID: 0000-0002-0669-3392 <Shcheglov@phystech.edu>

¹ Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского, 140180, Россия, г. Жуковский, ул. Жуковского, д. 1

² Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 119991, Россия, Москва, Ленинские горы, д. 1

³ Московский физико-технический институт, 141701, Россия, Долгопрудный, Институтский пер., д. 9

Аннотация. Разработан метод расчета взаимодействия переохлажденных капель с твердым телом, покрытие которого имеет рельеф и обладает различной степенью гидрофобности. Сформулированы основные критерии соответствия результатов молекулярного моделирования физической реальности. Получены численные оценки параметров рельефа гидрофобной поверхности твердого тела в зависимости от безразмерных динамических параметров удара переохлажденных капель. На основании проведенных ранее экспериментальных исследований, теоретических оценок, аналитических и экспериментальных данных других исследователей в настоящей работе развиты математические модели особенностей кристаллизации переохлажденной метастабильной жидкости. Получены оценки параметров процессов, сопровождающих движение фронта кристаллизации в переохлажденных метастабильных каплях воды в приложении к проблеме обледенения летательных аппаратов.

Ключевые слова: метастабильные капли; молекулярное моделирование; фронт кристаллизации; поток энергии на межфазной границе

Для цитирования: Амелюшкин И.А., Кудров М.А., Морозов А.О., Стасенко А.Л., Щеглов А.С. Модели процессов, сопровождающих кристаллизацию переохлажденных капель. Труды ИСП РАН, том 32, вып. 4, 2020 г., стр. 235–244. DOI: 10.15514/ISPRAS-2020-32(4)-17

Благодарности: работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-29-13016)

Models of processes accompanying crystallization of supercooled droplets

^{1,2} I.A. Amelyushkin, ORCID: 0000-0002-4281-3531 <Amelyushkin_Ivan@mail.ru>

³ M.A. Kudrov, ORCID: 0000-0003-2056-1932 <MKudrov@mail.ru>

³ A.O. Morozov, ORCID: 0000-0003-4620-9662 <MorozovAO@phystech.edu>

^{1,3} A.L. Stasenko, ORCID: 0000-0001-9608-3186 <Stasenko@serpantin.ru>

^{1,3} A.S. Shcheglov, ORCID: 0000-0002-0669-3392 <Shcheglov@phystech.edu>

¹ Central Aerohydrodynamic Institute, 1, Zhukovskogo st., Zhukovsky, 140180, Russia

² Lomonosov Moscow State University, GSP-1, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia

³ Moscow Institute of Physics and Technology, 9, Insitutsky per., Dolgoprudny, 141701, Russia

Abstract. The creation of high-performance methods for calculating the interaction of aerosol flows with a solid is of great practical interest in the problems of preventing surfaces from icing, predicting climatic phenomena, metallurgy and astronomical processes. One of the methods of icing diminishing is the use of hydrophobic coatings, which, as a rule, work effectively with insignificant ratios of inertial forces to the forces of surface tension of a liquid near the relief of the streamlined body. However, when the surface density of the kinetic energy of the supercooled drop exceeds a certain critical value, the ice-phobic properties lead to negative effects due to the penetration of the supercooled liquid into the depressions and solidification in them. A method is developed for calculating the interaction of supercooled drops with a relief solids, which have various degrees of hydrophobicity. Basic criteria for corresponding the results of molecular modeling to physical reality are formulated. The need to develop algorithms for numerical simulation is due to the fact that significant computational resources are required even for calculating small droplets which are several tens of nanometers in size. Numerical estimates of the parameters of the relief of a hydrophobic surface of a solid are obtained depending on the dimensionless dynamic parameters of the impact of supercooled drops. Moving interface – the crystallization front in supercooled metastable liquid droplets has specific properties. On the basis of previously carried out experimental studies, theoretical estimates, analytical and experimental data of other researchers, in present work mathematical models of the crystallization features of a supercooled metastable liquid are developed. Estimates of the parameters of the processes accompanying the movement of the crystallization front in supercooled metastable water droplets are obtained with application to the problem of icing of aircraft.

Keywords: metastable droplets; molecular modeling; crystallization front; energy flow at the interface boundary

For citation: Amelyushkin I.A., Kudrov M.A., Morozov A.O., Stasenko A.L., Shcheglov A.S. Models of processes accompanying crystallization of supercooled metastable droplets. Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS, vol. 32, issue 4, 2020. pp. 235–244 (in Russian). DOI: 10.15514/ISPRAS-2020-32(4)-17

Acknowledgements. The work is supported by Russian Foundation of Fundamental Research (project No 19-29-13016).

1. Введение. Описание актуальности темы и краткий обзор опыта предшественников

Создание высокопроизводительных методов расчета взаимодействия аэрозольных течений с твердым телом представляет большой практический интерес в задачах противодействия обледенению, предсказания климатических явлений, металлургии и астрономических процессах. Один из методов препятствия обледенению представляет собой использование гидрофобных покрытий, которые, как правило, эффективно работают при незначительных отношениях сил инерции к силам поверхностного натяжения жидкости вблизи рельефа обтекаемого тела. Однако, при превышении поверхностной плотности кинетической энергии

переохлажденной капли некоторого критического значения, льдофобные свойства приводят к отрицательным эффектам ввиду проникновения переохлажденной жидкости в углубления и застывания в них. Для расчета режимов взаимодействия капель с гидрофобными поверхностями ранее [1, 2] применялся метод молекулярной динамики, который позволяет рассчитывать поведение молекулярных кластеров (объединений) и наночастиц размером до нескольких десятков нанометров. Под наночастицами понимают частицы размером от 1 до 100 нанометров. В то же время под термином молекулярные кластеры принимают молекулярные объединения от 2 до 1000 молекул. Таким образом, существует диапазон размеров капель и соответствующих им чисел молекул, при котором термины наночастицы и молекулярные кластеры в равной степени применимы для описания молекулярной системы. Кристаллизация растворенных в переохлажденной воде кристаллов описывается уравнением Кана-Хиллиарда [3] $\partial n_c / \partial t = \nabla \cdot M(n_c) \nabla [f(n_c) - \varepsilon^2 \Delta n_c]$ (здесь n_c – концентрация кристаллов, ε – коэффициент градиента энергии, $M = M(n_c)$ – коэффициент подвижности, $f(n_c)$ – гомогенная свободная энергия) и уравнением Гинсбурга-Ландау; при исследовании процессов кристаллизации используется теория неустойчивости Муллинс-Сикерки [4]. Данные об особенностях кристаллизации переохлажденной воды получены в предшествующих исследованиях [5–8]. Стремление понять внутреннюю структуру воды возрастает тем более, чем больше накапливается фактов о ее разнообразных проявлениях [9–12]. В настоящей работе развит предложенный ранее метод моделирования взаимодействия микро- и макроскопических капель с твердым телом методами молекулярного моделирования [1, 2], эффективных используют при исследовании нанобъектов.

2. Метод моделирования гидрофобных свойств

Необходимость развития алгоритмов численного моделирования вызвана тем, что даже для расчета молекулярных соединений размером в несколько десятков нанометров требуются значительные вычислительные затраты. По аналогии с описанием эволюции формы капли в безграничном несущем потоке, для случая столкновения с твердым телом можно также ввести следующие характерные времена и безразмерные критерии: τ_D – время прохождения расстояния порядка диаметра $D=2R$ капли со скоростью ее соударения, τ_σ – период колебаний формы капли, τ_μ – время их вязкого затухания. Из определений чисел Вебера и Лапласа и характерных времен можно получить следующие соотношения: добротность колебаний формы $Q \sim \tau_\mu / \tau_\sigma \sim Lp^{-2}$, $We \sim (\tau_\sigma / \tau_D)^2$, $We / Lp \sim (\tau_\mu / \tau_D)^2$. В частности, из последнего соотношения видно, что значение $We / Lp \sim 1$ осуществляется, когда движение жидкости в деформируемой капле должно затухнуть за время прохождения размера со скоростью столкновения. Другой физический аспект проблемы связан с существованием нестабильных конфигураций молекулярных кластеров.

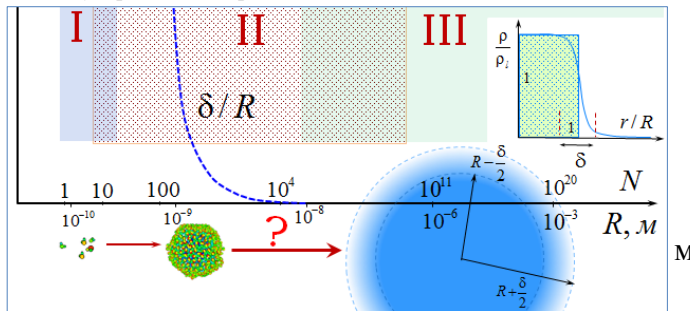


Рис. 1. Особенности моделирования микро- и макро капель молекулярно-динамическими методами
Fig. 1. Features of modeling micro and macro drops by molecular dynamics methods

На рис. 1 схематически изображена суть проблемы, отмеченная вопросительным знаком. По горизонтальной оси отложены размеры рассматриваемых «капель» воды – от отдельной молекулы до миллиметрового масштаба. Подобно тому, как трудно определить, с какого числа зерен можно говорить об их «куче» (апория Зенона), так и трудно сказать, с какого количества молекул начинается капля. Некоторой подсказкой здесь может служить характерная толщина $\delta = (a_{vw} < r_m^2 > / \sigma_l) (\rho_l - \rho_{sv}(T))^2 \cong 5$ нм поверхностного слоя, в пределах которого действуют поверхностные силы (здесь a_{vw} , r_m , ρ_l , ρ_{sv} – параметр уравнения состояния газа Ван-дер-Ваальса, средний радиус молекулы, плотность жидкости и плотность насыщенных паров при температуре T , соответственно) поверхностного слоя макрокапли [13] (справа внизу на рис. 1), который заменяет привычную ступеньку радиального распределения плотности капли в паре той же жидкости. Кроме того, на рис. 1 изображены области наночастиц, в которых эффективные методы молекулярной динамики, основанные на «первых принципах» и макроскопической гидродинамике. Результаты исследований эволюции наночастиц в первой из них почти недоступны для экспериментальной проверки; во второй – накоплен большой опытный материал по исследованию быстро протекающих процессов столкновения макрокапли с поверхностью твердого тела, сухой или покрытой пленкой жидкости.

На рис. 2 приведен пример гидрофобной поверхности, оценка расстояния между углублениями в зависимости от числа Вебера и пример численного моделирования методом молекулярной динамики удара капли о гидрофобное тело.

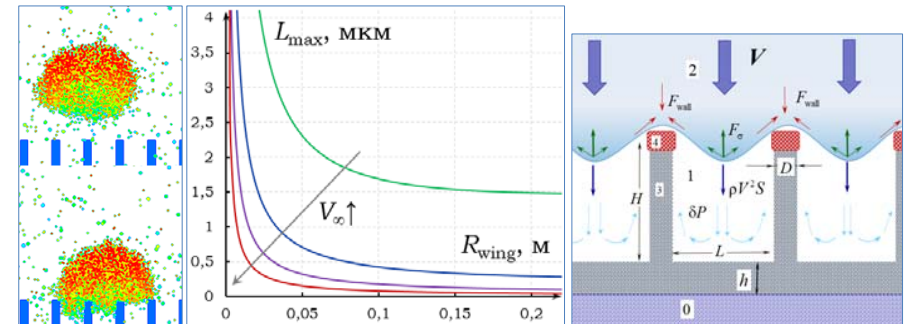


Рис. 2. Слева – пример удара капли о гидрофобное рельефное тело; в центре – оценка максимального расстояния между выступами гидрофобного тела при котором капли размером 20 мкм не будут проникать в углубления гидрофобного тела; справа – структура гидрофобного покрытия и схема взаимодействия с ним жидкости: 0 – материал конструкции обтекаемого тела, 1 – газ (воздух), 2 – жидкость, 3 – покрытие из гидрофобного материала, 4 – гидрофильные «шляпки»; в центре – оценка зависимости максимального значения расстояния между выступами рельефа гидрофобного тела L_{max} от радиуса кривизны обтекаемого тела R_{wing} и скорости потока V_∞ . Кривые соответствуют значениям скорости 10, 25, 50 и 100 м/с.

Fig. 2. Left – an example of a drop hitting a hydrophobic relief body; in the center – an estimate of the maximum distance between the protrusions of the hydrophobic body at which 20 μm droplets will not penetrate into the depressions of the hydrophobic body; on the right – the structure of the hydrophobic coating and the scheme of liquid interaction with it: 0 – material of the structure of the streamlined body, 1 – gas (air), 2 – liquid, 3 – coating made of hydrophobic material, 4 – hydrophilic «caps»; in the center – an estimate of the dependence of the maximum value of the distance between the ridges of the relief of the hydrophobic body L_{max} on the radius of curvature of the streamlined body R_{wing} and the flight speed V_∞ . Curves correspond to speeds of 10, 25, 50 and 100 m/s

В настоящей работе описаны условия соответствия результатов молекулярного моделирования малых частиц более крупным микро- и макроскопическим объектам: 1. число молекул в частице много больше 10. 2. Характерный размер частицы значительно превышает толщину поверхностного слоя δ . 3. При выполнении первых двух условий необходимо

равенство основных критериев подобия (числа Вебера $We = D\rho_1 V^2/\sigma_l$ и капиллярности $Ca = \mu V/\sigma_l$ при значительной роли вязких сил); результаты, полученные для наночастиц, справедливы для микро- и макрочастиц. Здесь σ_l – коэффициент поверхностного натяжения, μ – коэффициент динамической вязкости жидкости, V – скорость удара капли. 4. Взаимодействие молекул предполагается парным, потенциал взаимодействия симметричный, его параметры подобраны для учета гидродинамических, термодинамических и упругих свойств жидкости. 5. При фазовых переходах изменение свойств материала приводит к изменению свойств потенциала взаимодействия молекул, между которыми образуются водородные и другие связи. Параметры потенциала подбираются на основании сравнения результатов расчета с данными экспериментальных исследований. Заметим, что отношение числа Вебера к числу Лапласа $LP = \sigma_l \rho D/2\mu^2$ не зависит от диаметра частицы, $We/Lp = \mu_l V/\sigma_l$. В качестве второго безразмерного параметра подобия в настоящей работе принято отношение диаметра частицы к размеру h рельефа шероховатости D/h .

Для эффективной работы гидрофобного покрытия необходимо, чтобы элементы деформируемой при ударе капли не проникали в углубления или поры гидрофобного покрытия. Для этого необходимо превышение давления сил поверхностного натяжения над характерным значением скоростного напора жидкости в капле: $\sigma/(L/2) > \rho V^2$, если расстояние между углублениями существенно меньше диаметра капли: $L \ll R_d$. Таким образом можно предъявить следующее необходимое условие работы гидрофобного покрытия: $L < 2\sigma/\rho V^2 \ll R_d$. Скорость удара капель о поверхность обтекаемого тела как правило значительно меньше скорости набегающего потока в силу ограниченности значений числа Стокса $Stk = \frac{\tau_{rel}}{R/V_\infty} = \frac{2\rho V_\infty R_d^2}{9\mu R}$. Здесь V_∞ – скорость потока, обтекающего тело с характерным размером R , μ – коэффициент динамической вязкости газа. Скорость V удара переохлажденных капель связана со скоростью обтекающего потока V_∞ соотношением $V/V_\infty \cong 1 - \exp(-1/Stk)$. Имеем $L_{max}/2D = ([1 - \exp(-Stk^{-1})]We_\infty)^{-1}$. Так, например, при радиусе капель 20 микрон (типичный размер капель при обледенении [14]), скорости обтекания $V_\infty = 100$ м/с и радиусе передней кромки крыла $R_{wing} = 0.1$ м, имеем $Stk \cong 5 \cdot 10^{-3}$, $We_\infty = D\rho_l V_\infty/\sigma_l \cong 55$, получим $L_{max} \cong 0.72$ мкм. На рис. 2 показана зависимость максимального значения расстояния между неровностями рельефа поверхности от радиуса передней кромки крыла

3. Особенности кристаллизации переохлажденной метастабильной жидкости, математические модели и численные оценки характерных физических величин

Десятки лет назад была подмечена общность процессов, сопровождающихся преодолением барьера между двумя состояниями вещества, например, при химических реакциях, термоядерных превращениях, электрических и оптических разрядах, образовании твердых растворов, кристаллизации метастабильной жидкости, спекании порошков металлов. Перемещающаяся поверхность раздела фаз или реагирующих компонентов обладает специфическими свойствами [15–17]. Скорость распространения фронта химической реакции или фазовых превращений для всех перечисленных процессов зависит от значения энергетического барьера L_b [Дж/кг], значения которого для случая кристаллизации воды определены в предшествующих работах (напр., [1]). Скорость перемещения фронта кристаллизации в переохлажденной жидкости (температурные зависимости которой получены в [7]), описывается следующим (достаточно общим для упомянутых выше процессов) соотношением: $u^2 = \chi(T/T_f)^m \text{Zexp}(-L_b/RT)((T_f - T)/T_f)^{m+1}$. Здесь $\chi = \lambda/\rho_l C_p$ – температуропроводность вещества перед фронтом (λ – коэффициент теплопроводности, C – удельная теплоемкость), индекс b означает *barrier* – барьер при

фазовом переходе. В качестве характерной температуры принято значение температуры фазового перехода (для воды $T_f = 273$ К). Второй, третий и четвертый сомножители в выражении соответствуют формуле Аррениуса; R – удельная газовая постоянная. Последний сомножитель учитывает, что при $T = T_f$, имеем $u = 0$; показатель степени m в случае химической реакции представляет ее порядок. Отметим, что в условиях больших ускорений (например, при ударной встряске) физико-механические характеристики жидкости и твердого тела могут существенно отличаться от справочных значений, полученных в квазистатических измерениях. Фазовые переходы приводят к появлению потока энергии на межфазной границе [15–17].

На основании полученных ранее результатов [1, 5–7] в настоящей работе получены количественные оценки энергетического вклада основных физических механизмов в суммарную плотность потока энергии на межфазной границе при движении фронта кристаллизации. Оценим характерную длину волны излучения, которое сопровождает кристаллизацию: приравняем энергию фазового перехода, приходящуюся на одну молекулу, к энергии излучения: $Lm_{H_2O} = L\mu_{H_2O}/N_A = 2\pi\hbar c/\lambda^*$, откуда $\lambda^* = 2\pi\hbar N_A c/\mu_{H_2O} L \cong 20$ мкм ($\hbar$ – постоянная Планка, c – скорость света, μ_{H_2O} – молярная масса воды).

После механического воздействия (направленного удара) часть молекул приобретает кинетическую энергию, достаточную для преодоления потенциального барьера между локальным и глобальным минимумами энергии межмолекулярного взаимодействия. При попадании молекулы в глобальный минимум энергии взаимодействия, потенциальная энергия молекул переходит в кинетическую энергию, которая передается соседним молекулам, выводя их из локального минимума энергии межмолекулярного взаимодействия. Плотность потока энергии на межфазной границе q при кристаллизации переохлажденной воды можно найти из уравнения баланса энергии:

$$q\Delta S\Delta t = C\Delta m(T_f - T) - L\Delta m\alpha_m = (C(T_f - T) - L\alpha_m)\rho\Delta S u\Delta t, \quad (1)$$

$$\text{откуда } q = \rho u(C(T_f - T) - L\alpha_m).$$

Здесь Δm – элемент массы, ΔS – элемент площади, Δt – малый промежуток времени, C – удельная теплоемкость воды.

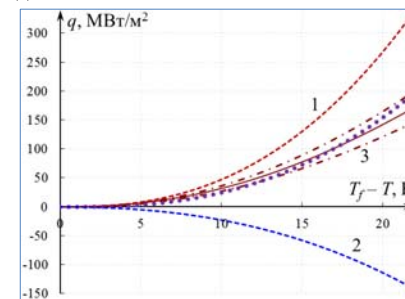


Рис. 3. Оценка зависимости энергии фазового перехода на фронте кристаллизации. 1 – первое слагаемое в правой части выражения (3), 2 – второе слагаемое в правой части выражения (3), 3 – сплошная линия – оценка плотности потока энергии на межфазной границе по формуле (1), штрих-пунктирные линии показывают отклонение от среднего значения (3); кружками обозначена кривая зависимости плотности потока энергии на межфазной границе по формуле (3) при толщине межфазной границы $\Delta X = 2.5$ мкм

Fig. 3. Estimation of the dependence of the phase transition energy at the crystallization front. 1 - the first term on the right side of expression (3), 2 - the second term on the right side of expression (3), 3 - solid line - estimate of the energy flux density at the interface according to formula (1), dash-dotted lines show deviation from the mean values (3); the circles indicate the curve of the dependence of the energy flux density at the interface according to formula (3) with the thickness of the interface $\Delta X = 2.5$ μm

Другой подход к оценке потока излучения при фазовом переходе дает следующее выражение типа граничного условия Стефана [18]:

$$\left(\oint_S q dS_n \right) / \oint_S dS + \lambda_l \partial T_l / \partial n - \lambda_s \partial T_s / \partial n = L_{ls} \rho_l \alpha_m u. \quad (2)$$

Здесь $\lambda_s / \lambda_l = (1 + \alpha_m \rho_l / \rho_s)^m$ – отношение коэффициентов теплопроводности водно-кристаллической смеси и воды. Индексы l и s означают *liquid* и *solid* соответственно. Первое слагаемое в выражении (2) представляет собой поток энергии на межфазной границе при движении фронта кристаллизации. Если рассматривать задачу о распространении фронта кристаллизации в одномерном приближении, то выражение (2) примет следующий вид:

$$q(T) \cong L_{ls} \rho_l \alpha_m u - \lambda_l [(1 + \alpha_m \rho_l / \rho_s)^m - 1] (T_f - T) / \delta. \quad (3)$$

Здесь $\delta_c \cong \Delta X = a_s - a_l = \sqrt[3]{\mu_m / N_A} (\sqrt[3]{2 / \rho_s} - \sqrt[3]{2 / \rho_l}) \cong 0.92 \text{ \AA}$; $n = 4$;

$\tau \cong \Delta X / u(T) \cong 1.3 \text{ нс}$ – характерное время поворота молекулы при фазовом переходе. На рис. 3 показаны оценки температурных зависимостей потока энергии на межфазной границе при кристаллизации переохлажденной метастабильной жидкости.

4. Заключение

Развит численный алгоритм, позволяющий проводить расчеты взаимодействия капель с твердым телом в диапазоне размеров от 10^{-9} до 10^{-3} м. Получены оценки максимальных значений характерных размеров рельефа гидрофобного покрытия твердого тела в зависимости от радиуса передней кромки обтекаемого тела, который определяет скорость удара капель о поверхность тела при заданной скорости обтекающего потока. На основании измеренных ранее параметров физических процессов, сопровождающих кристаллизацию переохлажденной метастабильной жидкости, получены численные оценки плотности потока энергии на межфазной границе – фронте кристаллизации переохлажденных метастабильных капель.

Список литературы / References

- [1]. 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*, vol. 9, no. 4, 2018, pp. 711-720.
- [2]. Amelyushkin I.A., Stasenko A.L. Simulation of gas-dispersed flow particles' interaction with a solid body. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 1560, 2020, article no. (012064).
- [3]. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *Journal of Chemical Physics*, vol. 28, issue 2, 1958, pp. 258-267.
- [4]. Li S., Lowengrub J.S., Leo P.H., Cristini V. Nonlinear stability analysis of self-similar crystal growth: control of the Mullins-Sekerka instability. *Journal of Crystal Growth*, vol. 277, issues 1-4, 2005, pp. 578-592.
- [5]. Аверков В.А., Желтов М.А., Скворцов В.В., Шибков А.А. Морфологическая неустойчивость межфазной границы лед-вода. Труды Второго международного симпозиума «Плавление и кристаллизация металлов и оксидов, 2009, стр. 179-182 / Averkov V.A., Zheltov M.A., Skvortsov V.V., Shibkov A.A. Morphological instability of the ice-water interface. In *Proc. of the Second International Meeting on Melting and Crystallization of Metals and Oxides*, 2009, pp. 179-182 (in Russian).
- [6]. Amelyushkin I.A. Mathematical models of two-phase flows' interaction with a solid body. *Journal of Journal of Physics: Conference Series*, vol. 1129, 2018, article no. 012003.
- [7]. Amelyushkin I.A., Stasenko A.L., Zhanov V.A. Experimental investigation, mathematical and numerical simulation of aircraft icing phenomena. In *Proc. from the 31th Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences*, 2018, paper no. ICAS2018_0741.
- [8]. Aboud D.G.K., Kietzig A.M. On the oblique impact dynamics of drops on superhydrophobic surfaces. Part II: Restitution coefficient and contact time. *Langmuir*, vol. 34, issue 2018, pp. 9889-9896.
- [9]. Jung S., Tiwari M.K., Doan N.V., Poulikakos D. Mechanism of supercooled droplet freezing on surfaces.

Nature Communications, vol. 3, 2012, article no. 615.

- [10]. Хргиан А.Х. Физика атмосферы. Физматлит. 1958 г., 476 стр. / Khrgian A.Kh. Physics of the atmosphere. Fizmatlit, 1958, 476 p. (in Russian).
- [11]. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. Наука. 1972 г., 312 стр. / Skripov V.P. Metastable liquids. Nauka, 1972, 312 p. (in Russian).
- [12]. Вигасин А.А., Юхневич Г.В. Использование данных спектроскопии в структурных моделях жидкой воды. Теплофизические свойства веществ и материалов, вып. 21, 1984 г., стр.13-31 / Vigin A.A., Yukhnovich G.V. Using spectroscopic data in structural models of liquid water. Thermophysical properties of substances and materials, issue. 21, 1984, pp. 13-31 (in Russian).
- [13]. Радченко И.В. Молекулярная физика. Наука, 1965 г., 480 стр. / Radchenko I.V. Molecular physics. Nauka, 1965, 480 p. (in Russian).
- [14]. Авиационные правила. Часть 25. Нормы летной годности самолетов транспортной категории (утверждено Постановлением 28-й сессии Совета по авиации и использованию воздушного пространства от 11.12.2008). Приложение С. URL: <https://legalacts.ru/doc/aviatsionnye-pravila-chast-25-normy-letnoi-godnosti-samoletov-transportnoi>, 01.09.2020 / Aviation regulations. Part 25. Standards of airworthiness of aircraft of the transport category (approved by the Resolution of the 28th session of the Council for Aviation and Airspace Use, dated 11.12.2008) Appendix C (in Russian).
- [15]. Gimelshein N., Lyons R., Reuster J., Gimelshein S. Numerical prediction of UV radiation from two-phase plumes at high altitudes. *AIAA journal*, vol. 46, no. 7, 2008, pp. 1764-1772.
- [16]. Татарченко В.А. Инфракрасное характеристическое излучение фазовых переходов первого рода и его связь с оптикой атмосферы. Оптика атмосферы и океана, том 23, no. 3, 2010 г., стр. 169-175 / Tatarchenko V.A. Infrared characteristic radiation of first-order phase transitions and its relationship with atmospheric optics. *Optics of Atmosphere and Ocean*, vol. 23, no. 3, 2010, pp. 169-175 (in Russian).
- [17]. Шавлов А.В. Электрический потенциал на фронте кристаллизации воды и растворов. Роль протонов и ориентационных дефектов. Журнал физической химии, том 79, no. 9, 2005 г., стр. 1626-1630 / Shavlov A.V. Electric Potential at the Front of Crystallization of Water and Solutions: The Role of Protons and Orientational Defects. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, vol. 79, no. 9, 2005, pp. 1438-1442.
- [18]. Stefan J. Über die Theory der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung in Polarmeere. *Annalen der Physik*, vol. 278, issue 2, pp.269-286 (in German).

Information about authors / Информация об авторах

Иван Алексеевич АМЕЛЮШКИН – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ЦАГИ, преподаватель кафедры молекулярных процессов и экстремальных состояний вещества физического факультета МГУ. Научные интересы: динамика многофазных сред, высокопроизводительные вычисления, обратные задачи и их приложения, молекулярное моделирование и многомасштабный анализ.

Ivan Alekseevich AMELYUSHKIN – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher at TsAGI, Lecturer at the Department of Molecular Processes and Extreme States of Matter at the Physics Faculty of Moscow State University. Research interests: dynamics of multiphase environments, high performance computing, inverse problems and their applications, molecular modeling and multiscale analysis.

Максим Александрович КУДРОВ – кандидат технических наук, доцент, ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией информационных технологий и прикладной математики. Научные интересы: разработка комплекса программ для компьютерного моделирования физических процессов.

Maksim Aleksandrovich KUDROV – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Leading Researcher, Head of the Laboratory of Information Technologies and Applied Mathematics. Research interests: development of software for computer modeling of physical processes.

Алексей Олегович МОРОЗОВ – младший научный сотрудник. Научные интересы: компьютерное моделирование физических процессов, численные методы в задачах аэрогидродинамики,

Alexey Olegovich MOROZOV – Junior Researcher. Research interests: computer modeling of physical processes, numerical methods in problems of aerohydrodynamics,

Альберт Леонидович СТАСЕНКО – доктор технических наук, профессор МФТИ, главный научный сотрудник ЦАГИ. Научные интересы: физическая механика многофазных потоков, математическое моделирование физических явлений, компьютерное моделирование.

Albert Leonidovich STASENKO - Doctor of Technical Sciences, Professor of the Moscow Institute of Physics and Technology, Chief Researcher at TsAGI. Research interests: physical mechanics of multiphase flows, mathematical modeling of physical phenomena, computer modeling.

Андрей Сергеевич ЩЕГЛОВ – инженер ЦАГИ, аспирант МФТИ. Научные интересы: численные методы, динамика полета, вихревые методы расчета аэродинамических характеристик летательных аппаратов.

Andrey Sergeevich SHCHEGLOV –engineer at TsAGI, post-graduate student at MIPT. Research interests: numerical methods, flight dynamics, vortex methods for calculating the aerodynamic characteristics of aircraft.