**Расчет коэффициентов вязкости смесей органических жидкостей методами молекулярной динамики**

***Дещеня В.И.,1,2 Кондратюк Н.Д.1,2,3***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*1Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия*

*2Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

*3Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

*E-mail: deshchenia.vi@phystech.edu*

Определение вязкости жидкостей необходимо для широкого спектра прикладных задач в нефтегазовой и смазочной промышленностях, а также для исследования процессов стеклования [1, 2]. Экспериментальное определение коэффициента вязкости, однако, требует больших временных и финансовых затрат, особенно в случае исследования температурных зависимостей или влияния давления.

В качестве альтернативного способа получения вязкости может использоваться атомистическое моделирование, позволяющее во многих случаях дать достаточно точную оценку транспортных коэффициентов [3, 4]. Методы их расчета хорошо изучены и отработаны, что гарантирует получение достоверных результатов. Точность при этом определяется моделью межатомного взаимодействия.

Для органических жидкостей существует набор классических потенциалов межатомного взаимодействия, которые точно прогнозируют геометрию молекул, локальную структуру и уравнения состояния. Однако коэффициент вязкости, рассчитанный с помощью них, может значительно отличаться от экспериментальных значений в 1.5-2 раза. Уточнение классических потенциалов для молекулярных систем может быть проведено путем перебора параметров межмолекулярного взаимодействия и построения корреляции параметры - целевое свойство [5]. Такой подход, особенно в случае вязкости, требует значительных вычислительных затрат.

В данной работе проводится уточнение потенциала межатомного взаимодействия для бинарной смеси 1-деканола и н-ундекана. Процедура заключается в масштабировании энергетических коэффициентов взаимодействия Леннард-Джонса для улучшения воспроизведения вязкости чистых жидкостей и последующим расчете смесей. В работе также проводится сравнение с концентрационной зависимостью, полученной с помощью машинно-обучаемой модели для предсказания вязкости бинарных смесей MixProp [6] и экспериментальными данными.

*Расчёты проведены на суперкомпьютерах “Десмос” ОИВТ РАН и “Soft Cluster” МФТИ. Исследование выполнено в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02-2021–1316 от 30.09.2021).*

**Литература**

1. Bair S. The viscosity at the glass transition of a liquid lubricant // Friction. 2019. Vol. 7. P. 86.

2. Bell I.H., Dyre J.C., Ingebrigtsen T.S. Excess-entropy scaling in supercooled binary mixtures //Nat. Commun. 2020. Vol. 11, No. 1. P. 4300.

3. Deshchenya V.I., Kondratyuk N.D., Lankin A.V., Norman G.E. Molecular dynamics study of sucrose aqueous solutions: From solution structure to transport coefficients. // J. Mol. Liq. 2022. Vol. 367. P. 120456.

4. Кондратюк Н.Д., Писарев В.В. Теоретические и вычислительные подходы к предсказанию вязкости жидкостей //Усп. физ. наук. 2023. Vol. 193. P. 437.

5. Befort B.J., et al. Machine learning directed optimization of classical molecular modeling force fields //Journal of Chemical Information and Modeling. 2021. Vol. 61, No. 9. P. 4400.

6. Bilodeau C., et al. Machine learning for predicting the viscosity of binary liquid mixtures //Chemical Engineering Journal. 2023. Vol. 464. P. 142454.