

II. ВАЖНЕЙШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В ОБЛАСТИ ЕСТЕСТВЕННЫХ, ОБЩЕСТВЕННЫХ И ГУМАНИТАРНЫХ НАУК

Фундаментальная работа №1

Молодежная лаборатория: «Материалы для Арктики»

- 1. Тема НИР:** Обоснование научных принципов проектирования составов и технологий высокофункциональных бетонов, твердеющих при отрицательных температурах, с комплексом органоминеральных модификаторов, в том числе с использованием отходов промышленности, с заданным комплексом эксплуатационных свойств для УСЛОВИЙ Арктики с учетом необходимости обеспечения безопасности эксплуатации сооружений (промежуточный, II этап)»
- 2. Руководитель НИР:** ст. н. с. доцент, к.т.н. С. В. Лахтарина
- 3. Номер государственной регистрации НИР:** №075-00715-24-04 от 01.01.2025 г.
- 4. Название высшего учебного заведения, научного учреждения:** «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ».
- 5. Срок выполнения:** начало – 17.01.2024, окончание – 31.12.2026.
- 6. Объект исследования** - – бетоны с повышенными физико-механическими и эксплуатационными свойствами, изготовленные с применением промышленных (техногенных) отходов, органо-минеральных модификаторов и химических добавок.
- 7. Работали над диссертациями:** С.В. Лахтарина - над докторской диссертацией, М.Э Вороненко и Н.Н. Лахтарина - над кандидатскими.
- 8. Цель исследования** - – теоретико-экспериментальное обоснование принципов проектирования составов и технологий высокофункциональных бетонов, твердеющих при отрицательных температурах, с комплексом органоминеральных модификаторов, в том числе с использованием отходов промышленности, с заданным комплексом эксплуатационных свойств для условий Арктики с учетом необходимости обеспечения безопасности эксплуатации сооружений.
- 9. Перечень основных заданий.** Задачи исследований второго этапа Государственного задания №№075-00715-24-04 от 01.01.2025 г.:
- исследовать влияния комплексной органоминеральной добавки в составе микрокремнезема МК-85, суперпластификатора на основе поликарбоксилатного полимера MasterGlenium ACE 430 и наногидратированного силиката кальция (раствор кристаллогидратов) Master X-Seed 45 на твердение портландцемента в нормальных условиях: сроки

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ

схватывания, прочность при сжатии в раннем и проектном возрасте;

- исследовать влияния комплексной органоминеральной добавки в составе метаксаолина, суперпластификатора на основе поликарбоксилатного полимера MasterGlenium ACE 430 и наногидратированного силиката кальция (раствор кристаллогидратов) Master X-Seed 45 на твердение портландцемента в нормальных условиях и при пониженной температуре: сроки схватывания, прочность при сжатии в раннем и проектном возрасте, состав продуктов гидратации вяжущего;

- оптимизировать составов самоуплотняющегося фибробетона, на основе композиционного вяжущего, содержащего золу-уноса Зуевской ТЭС;

- выполнить анализ применения сетчатого, фибрового и комбинированного армирования на примере образцов-призм с моделированием конструкций коротких колонн с продольным армированием;

- разработать аналитические выражения для оценки напряженно-деформированного состояния элементов с косвенным сетчатым и фибровым армированием. Выполнить численное моделирование напряженно-деформированного состояния сжатых элементов с использованием метода конечных элементов (МКЭ) в среде ANSYS Workbench 14.5.

10. Реализация заданий работы. Для достижения цели исследования реализованы следующие задачи:

- установлено, что расход добавки микрокремнезема МК-85 в количестве 10 % является оптимальной дозировкой для достижения максимальной прочности цементного камня в раннем возрасте твердения (2 суток) – прирост прочности составляет 14,3 % в сравнении с контрольным составом. Более высокий расход микрокремнезема – 15 и 20 %, не дает существенного эффекта, что связано, во-первых, со снижением активности вяжущего вследствие эффекта «разбавления» и невысокой пуццолановой активности микрокремнезема в ранние сроки твердения; во-вторых – с резким ростом водопотребности цементного теста и необходимостью повышения водовяжущего отношения;

- в случае использования добавки суперпластификатора Master Glenium ACE 430 прочность цементного камня с повышением концентрации микрокремнезема от 10 до 20 % возрастает, достигая максимума 100,2 МПа в сравнении с контрольным составом – 75,4 МПа (прирост прочности 33 %). Это связано с адсорбцией поликарбоксилатного полимера на поверхности частиц минералов портландцементного клинкера, что создает комбинированный электростатический и стерический барьер в дисперсной система и обеспечивает более плотное и равномерное распределения частиц для образования прочных связей;

- установлено, что высокие дозировки добавки кристаллогидратов Master X-Seed 45 (свыше 3 %) резко сокращают конец схватывания цементного теста. При этом также сокращается и начало схватывания, не позволяя сохранить технологические свойства цементного теста для формования;

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ

- показано, что на прочность в раннем возрасте твердения положительное влияние оказывает рост концентрации добавки кристаллогидратов C-S-H, в то время как повышение расхода микрокремнезема снижает показатели прочности. При этом максимальный положительный эффект оказывает сочетание микрокремнезема и Master X-Seed 45. На прочность цементного камня в возрасте 28 суток влияние концентрации кристаллогидратов Master X-Seed 45 ослабевает, а расход микрокремнезема оказывает положительное влияние, что связано с проявлением пуццоланической активности минеральной добавки;

- установлено, что замена в составе комбинированного модификатора микрокремнезема метаксаолином значительно повышает раннюю прочность цементного камня в возрасте двух суток, что дает основание считать добавку метаксаолина более эффективной для повышения ранней прочности цементного камня в сравнении с микрокремнеземом;

- по данным рентгенофазового анализа камня вяжущего с комбинированным модификатором, содержащим метаксаолин, установлено, что основными продуктами гидратации являются портландит СН ($d=0,493; 0,312; 0,263; 0,193$ нм), гидроалюминаты кальция переменного состава – трехкальциевый шестиводный кубический СЗАН6 ($d=0,282; d=0,247$ нм), четырехкальциевый гексагональный девятнадцативодный С4АН19 ($d=0,250; d=0,187$ нм), эттрингит (фаза AFt) ($d=0,469; 0,388; 0,324; 0,256; 0,223; 0,221$ нм). Показатели прочности цементного камня при сжатии во многом коррелируют с результатами рентгенофазового анализа;

- влияние температурного фактора на интенсивность дифракционных линий не имеет явно выраженного характера, что, вероятно, связано с компенсирующим влиянием на процесс твердения комбинированного модификатора;

- установлено, что для обеспечения минимальных значений подвижности, прочности на растяжение при изгибе и при сжатии расход фибры должен составлять не более 500 г/м³ при всех рассмотренных расходах золы-уноса и пластификатора. При повышении содержания фибры свыше 500 г/м³ снижается подвижность смеси. Расход суперпластификатора следует принимать от 0,75 до 1,0 % при содержании золы-уноса от 10 до 30 % взамен части цемента в составе вяжущего;

- применение косвенного сетчатого и дисперсного (фибрового) армирования является одним из эффективных методов повышения несущей способности сильно нагруженных колонн и участков конструкций, работающих в условиях местного смятия;

- дисперсное (фибровое) армирование способствует увеличению прочностных и деформационных характеристик бетона при сжатии и растяжении, а также повышает трещиностойкость и жесткость железобетонных конструкций, что особенно актуально для эксплуатации сильно нагруженных элементов зданий и сооружений;

- косвенное армирование обеспечивает увеличение несущей способности железобетонных колонн, работающих на значительные сжимающие нагрузки, а также повышает прочность участков конструкций, работающих в условиях

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ
местного смятия;

- введение в состав бетона косвенного и дисперсного армирования с коэффициентами $\chi_u = 1$ и $2,5\%$ способствует увеличению приведенной прочности высокопрочного бетона $R_{b,loc}$ и сталефибробетона $R_{sfb,loc}$, в среднем, в $1,15$ и $1,32$ раза по сравнению с неармированным бетоном. При этом величина предельной сжимаемости возрастает в $1,2$ и $1,52$ раза для образцов с косвенным армированием, и в $1,12$ и $1,33$ – для образцов с дисперсным армированием;
- для определения величины приведенной призмочной прочности высокопрочных бетонов классов по прочности до В80 с высокой степенью точности могут быть использованы расчетные зависимости, приведенные в формулах (6.84) и (6.85) СП 360.1325800.2017, а также формула (8.81) СП 63.13330.2018;
- учет фактора физической нелинейности деформирования материалов с применением аналитических зависимостей (1) – (2) обеспечивает достоверную оценку несущей способности и деформационных характеристик сжатых железобетонных элементов, усиленных косвенным сетчатым и дисперсным армированием.

11. Перспективы и рекомендации дальнейших направлений исследования заключаются в исследовании влияния новых видов химических модификаторов на твердение и свойства бетона при воздействии отрицательных температур; исследовании напряженно-деформируемого состояния и поведение бетонов при воздействии отрицательных температур, с целью обеспечения надежности при эксплуатации конструкций из бетона и железобетона.

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ

Фундаментальная работа №2

Кафедра: Физика и прикладная химия.

Название приоритетного направления развития науки и техники:

фундаментальные научные исследования по наиболее важным проблемам развития научно-технического, социально-экономического, общественно-политического, человеческого потенциала для обеспечения конкурентоспособности в мире и устойчивого развития общества и государства.

Тема НИР: «Развитие физико-химических основ кинетики кристаллизации переохлажденных расплавов и растворов».

Руководитель НИР: Фролова Светлана Александровна, кандидат химических наук, доцент, заведующий кафедрой физики и прикладной химии.

Номер государственной регистрации НИР: 0121D000091.

Название высшего учебного заведения, научного учреждения: «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГУ».

Срок выполнения: начало – 09.01.2024 г., окончание – 28.12.2024 г.

Предмет исследования. Закономерности влияния кинетики зародышеобразования и кристаллизации переохлажденных расплавов на структуру и свойства материалов.

Объект исследования. Цветные металлы и сплавы, кристаллогидраты и их смеси, низкомолекулярные органические вещества.

Суть процесса исследования. Суть процесса исследования в том, что в литературе отсутствуют систематические исследования относительно влияния зародышеобразования и кинетики кристаллизации переохлажденных расплавов разных веществ на структуру и свойства материалов, которые зависят от условий кристаллизации и влияния разных факторов. Поэтому эта работа направлена на исследования в этом направлении.

Основные научные результаты. Выполнен план работы по 5 этапу (2025 г.).

Выполнены теоретические и практические исследования по развитию физико-химических основ кинетики зародышеобразования.

Проведены комплекс экспериментов влияния термической предыстории расплава и раствора на вид кристаллизации и величину предкристаллизационного переохлаждения для металлов, сплавов, кристаллогидратов солей натрия, низкомолекулярных органических веществ.

Введены понятия энтальпий зародышеобразования ΔH_{zard} , коагуляции зародышей ΔH_{coag} и изотермической докристаллизации ΔH_{docr} . Для каждого этапа предложены уравнения для расчетов степени зародышеобразования η_1 , образования кристаллической фазы η_2 при коагуляции зародышей и затвердевания оставшейся части расплава η_3 .

Проанализирован термический гистерезис первого рода ТГ-I. При ТГ-I общая

энтальпия при неравновесной кристаллизации состоит из трех составляющих (энтальпий ΔH_1 зародышеобразования, ΔH_2 коагуляции зародышей и ΔH_3 докристаллизации оставшейся части жидкости), которые в сумме дают значение общей энтальпии ΔH_{SL} затвердевания $\Delta H_{SL} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$ (рисунок 3.5). Расчеты для той же воды показывают, что суммарная энтальпия кристаллизации ΔH_{SL} при ТГ-I примерно совпадает как с энтальпией плавления ΔH_{LS} , так и с энтальпией равновесной кристаллизации.

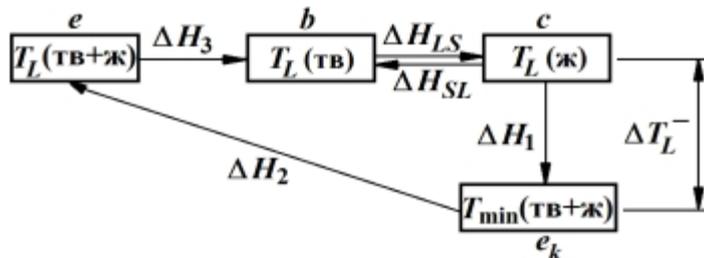


Рисунок 1– Схема изменения энтальпий при формировании ТГ-I

Гистерезис ТГ-I, когда равновесная кристаллизация происходит при постоянной температуре $T_S < T_L$.

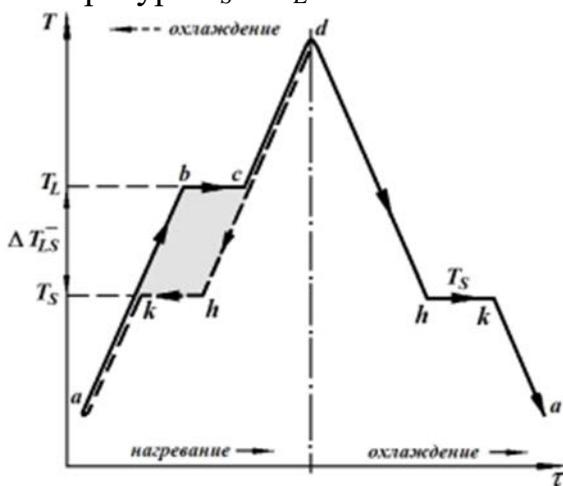


Рисунок 2, а – Схематическая термограмма, характеризующая термический гистерезис второго рода

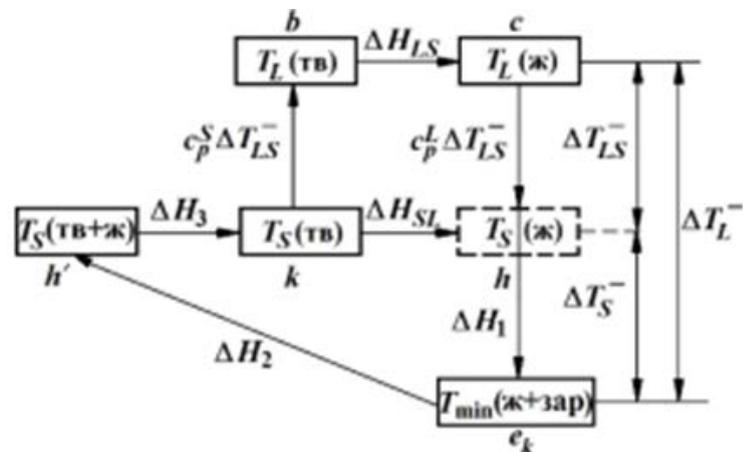


Рисунок 2, б – Схема изменения энтальпий плавления и кристаллизации при ТГ-I, ТГ-II и комбинированном гистерезисе

Гистерезис ТГ-I при неравновесно-взрывной кристаллизации

Установлено, что при образовании зародышей жидкой фазы при плавлении и зародышей кристаллов при кристаллизации, имеет место гистерезисный эффект, связанный с дефектами кристалла. Наличие дефектов в кристалле «облегчает» их плавление, а для образования кристалла с дефектами и их удержания в зародыше требуется дополнительная энергия, что затрудняет и задерживает процесс формирования реальных кристаллов.

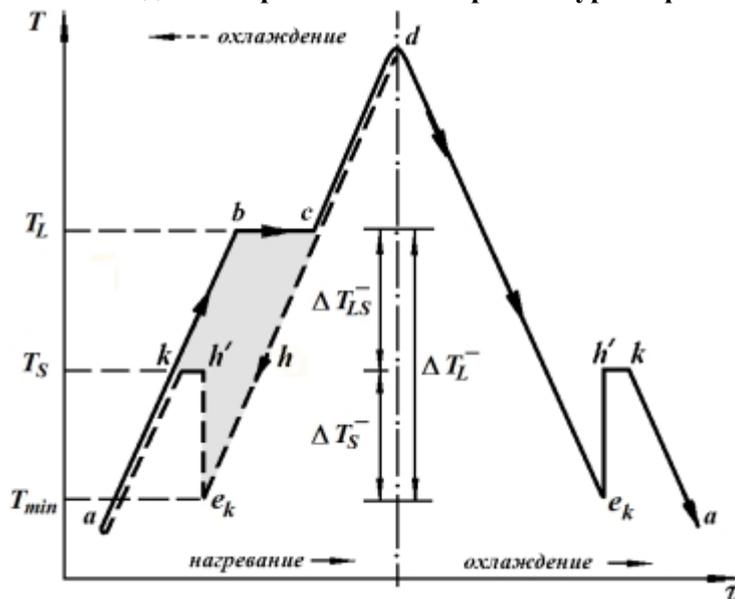


Рисунок 3 - Термограммы, характеризующие комбинированный гистерезис, на основе ТГ-I и ТГ-II

На основании данных кристаллизации сплавов системы Bi-Sb, рассчитанных размеров критических зародышей, работы их образования, построена кривая зависимости степени переохлаждения ΔT^- от концентрации сплавов в системе Bi-Sb, имеющая вид кривой с минимумом для сплава $0,6Bi + 0,4Sb$ (рисунок 4, кривая 1).

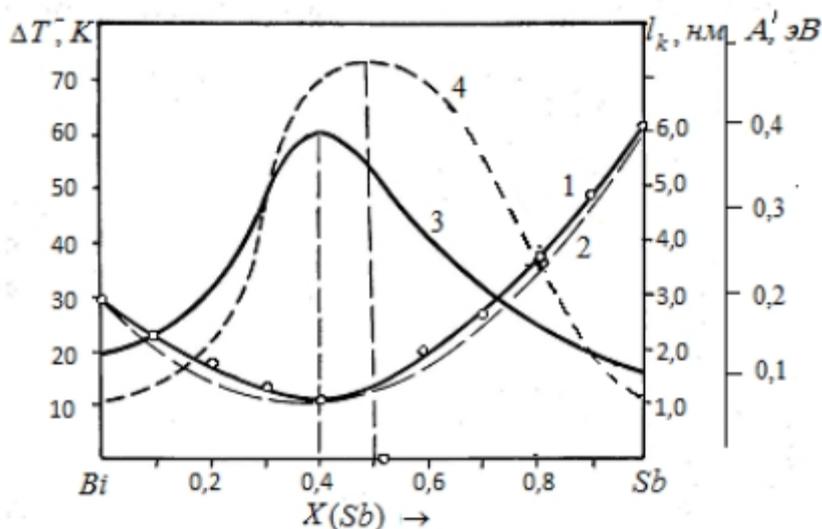


Рисунок 4 – Зависимость степени переохлаждения ΔT^- (экспериментальная – кривая 1, расчетная – кривая 2), критического размера l_k зародыша (кривая 3) и работы A' его образования (кривая 4) от состава сплавов в системе Bi-Sb

Проведены термографические исследования на изомере дифенилбензолов, а именно *m*-терфениле. Исследовано влияние массы образцов, перегрева расплава относительно температуры плавления и времени изотермической выдержки переохлажденного расплава.

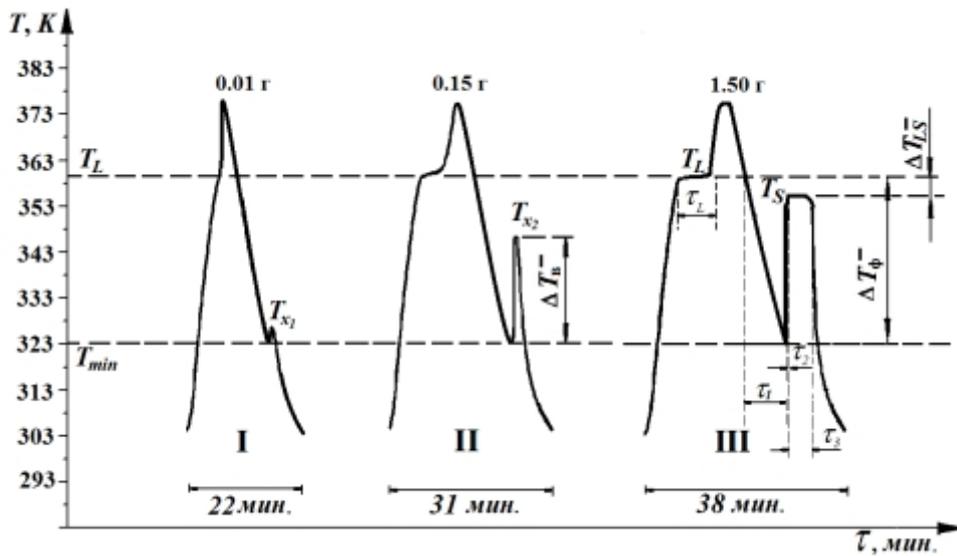


Рисунок 5 – Термограммы нагрева и охлаждения образцов *m*-терфенила массами 0,01 (I); 0,15 (II) и 1,50 (III) г

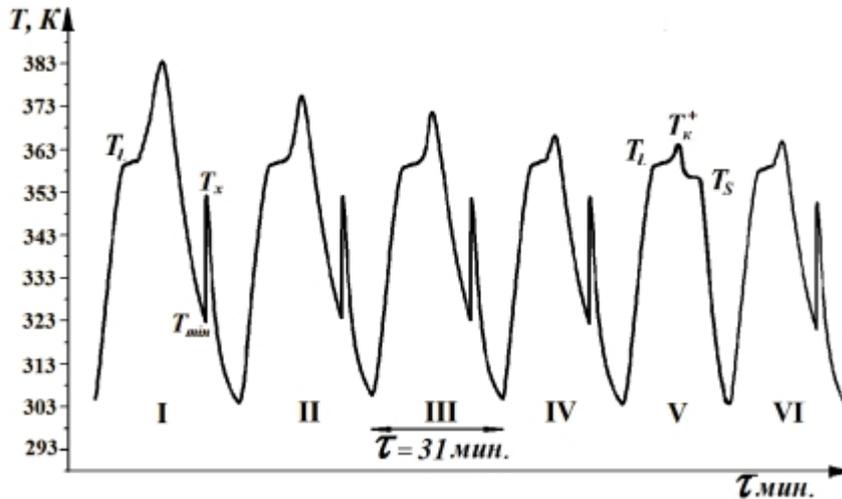


Рисунок 6 – Термограммы плавления и кристаллизации *m*-терфенила массой 0,15 г, характеризующие неравновесно-взрывную кристаллизацию (I, II, III, IV, VI) и квазиравновесную (V)

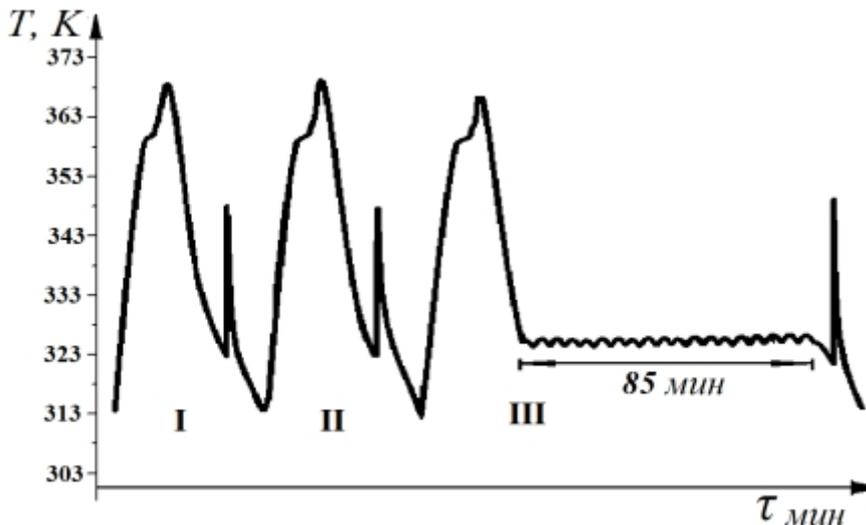


Рисунок 7 – Термограммы *m*-терфенила массой 0,15 г характеризующие вид кривых охлаждения и кристаллизации после изотермической выдержки расплавов в переохлажденном состоянии

Перегрев расплава *m*-терфенила влияет и на структуру образующихся кристаллов. После слабого прогрева расплава ($\Delta T^+ \leq 2,0$ К) и последующего затвердевания кристаллиты имеют мелкозернистую структуру (рисунок 7, *a*), а после значительного прогрева расплава и дальнейшего затвердевания – столбчатые кристаллы с явно выраженной анизотропией роста (рисунок 7, *б*) кристаллы с явно выраженной анизотропией роста (рисунок 7, *б*).

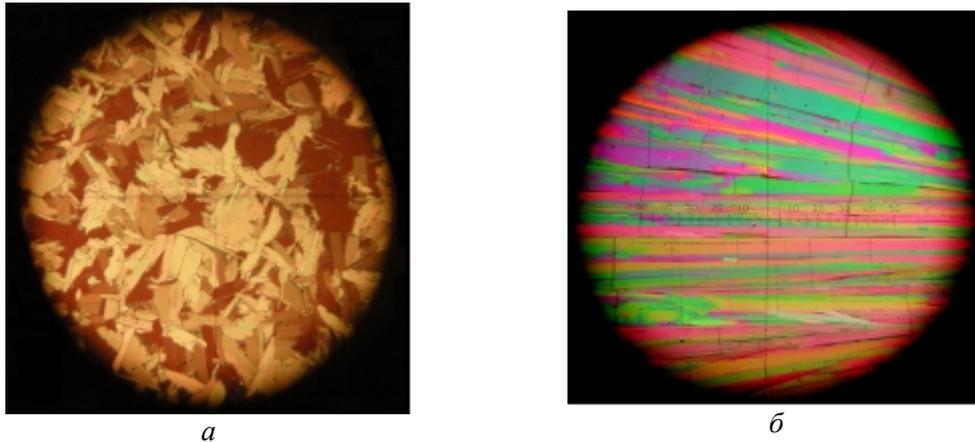


Рисунок 8– Кристаллы *m*-терфенила, полученные при квазиравновесной (расплав перегрет на 2 К выше T_L^T) (*a*) и неравновесной (расплав перегрет на 10 К выше T_L^T) (*б*) кристаллизации. х 200

При исследовании сплавов в системе Ga-In была построена метастабильная диаграмма во всем диапазоне концентраций.

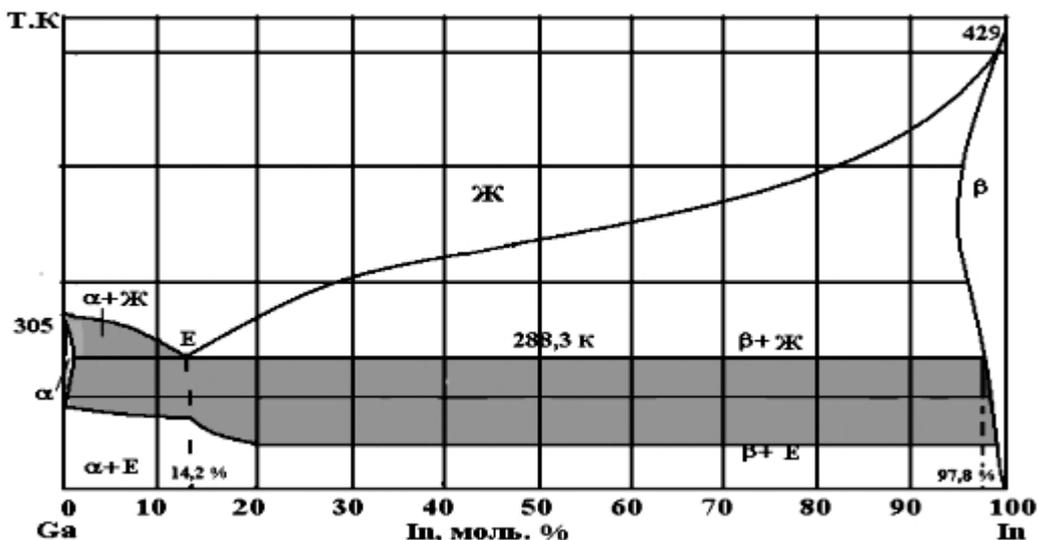


Рисунок 9 – Метастабильная диаграмма состояния системы *Ga-In*

Проанализирован нуклеационный механизм взрывной кристаллизации при коагуляции наноразмерных зародышей кристаллов. Результаты трактуются с точки зрения известной теории цепных реакций взрывного типа.

При образовании зародышей выделяется скрытая теплота кристаллизации, которая может стимулировать появление новых зародышей из соседних группировок малоактивных близких к друг другу молекул или кластеров (рисунок 9, *a*).

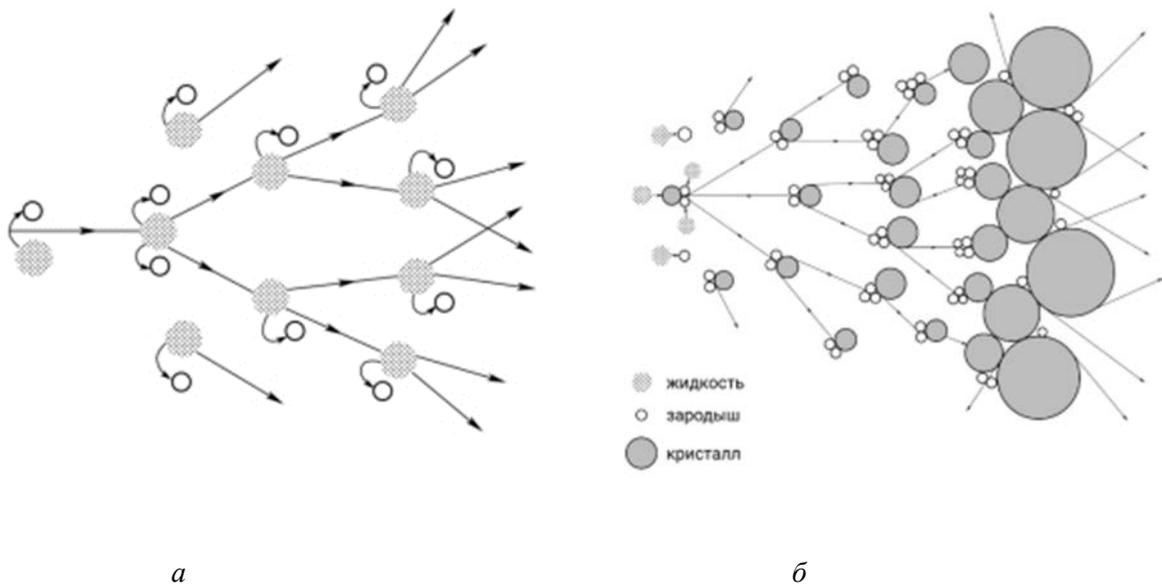


Рисунок 10 – Схема цепной реакции образования зародышей (а) и их коагуляции (б)

При коагуляции зародышей за время τ_2 их число в объеме V_k уменьшается, образуя начальный твердый конгломерат.

Построена диаграмма состояния, дополненная областями сосуществования различных предкристаллизационных структурных единиц (кластеров и зародышей в расплаве) как выше, так и ниже температуры плавления (ликвидуса) позволяет последовательно проследить этапы кластеризации, зародышеобразования и последующих видов кристаллизации от равновесной к неравновесной.

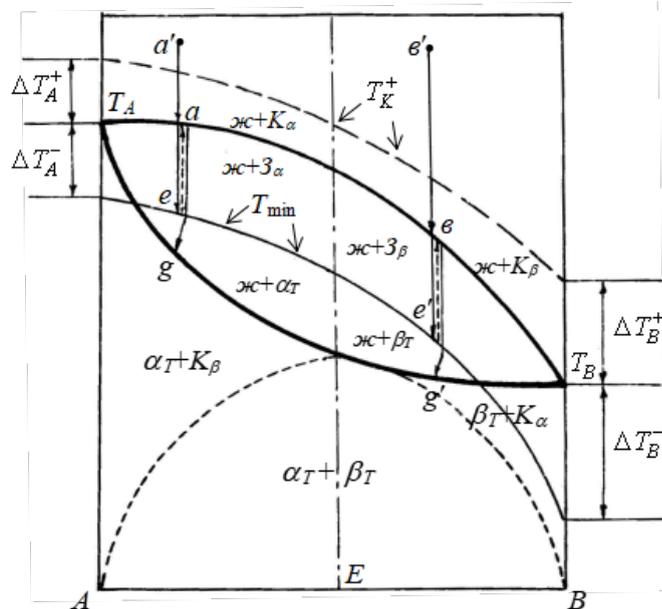


Рисунок 11 – Схема изменения структуры фаз при равновесной и неравновесной кристаллизации сплавов, образующих непрерывный ряд твердых растворов

При исследовании химических компонентов битума установлено, что чем выше содержание масел в битуме, тем меньше его поверхностное натяжение на границе битум-воздух, а при ухудшении смачивания (при этом краевой угол смачивания и повышаются) работа адгезии повышается. Т.е. с позиции обеспечения высоких когезионных и адгезионных показателей битумов целесообразно использовать

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ
битумы с высоким содержанием смол и относительно невысоким содержанием масел.

Поверхностное натяжение смол и асфальтенов ($M_{cp} = 1000 - 5000$) оценивали по формуле, рекомендованной для полимеров:

$$\sigma_c = C_j \left(\frac{\sum \Delta E_i^*}{(\sum \Delta V_i)^{2/3} \cdot m^{1/3}} \right),$$

где m – число атомов в повторяющемся звене молекулы полимера; C_j для неполярных полимеров I группы (углеводороды, простые полиэфиры), принимали $C_{1n} = 0,1277$, для полярных полимеров I группы (сложные полиэфиры), $C_{1n} = 0,0751$, для полимеров с кислотными и спиртовыми группами $C_2 = 0,0476$; если полимер содержит только ароматические ядра (полистирол), то $C_4 = 0,1014$. $\sum \Delta E_i^*$ и $\sum \Delta V_i$ относятся к повторяющемуся звену полимерной цепи.

Результаты расчетов также приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Поверхностное натяжение ГХК битумов на границе с воздухом ($\sigma_{бв}$)

ГХК	Структурная формула	Эмпирическая формула	M_{cp}	С/Н	$\sum_i \Delta E_i^*$, кДж/моль	$\sum_i \Delta V_i$, Å ³	$\sigma_{бв}$, мН/м расчет по формуле	
							(1) мономеры и олигомеры	(3) полимеры
М	I	$C_{24}H_{30}$	270	0,80	67,3	394,4	35,9	42,8
М	IV	$C_{22}H_{24}S$	320	0,91	87,0	415,5	35,0	56,0
М	V	$C_{25}H_{32}S$	364	0,78	70,3	412,2	36,4	42,4
М	III	$C_{24}H_{28}OS$	364	0,86	74,9	406,2	42,4	46,7
М	VI	$C_{26}H_{29}S$	373	0,89	79,6	401,4	41,9	49,4
М	II	$C_{33}H_{32}$	428	1,03	94,5	410,0	49,0	54,9
С	II – II	$C_{66}H_{69}$	855	1,03	189	820,0	49,0	54,9
С	VII	$C_{70}H_{78}S_3O$	1030	0,89	210,7	998,9	-	50,9
С	II-II-II	$C_{99}H_{94}$	1280	1,03	283,5	1230,0	-	54,9
А	(I) _n	$\{-C_{24}H_{28}-\}$	268	0,86	67,3	394,4	-	42,8
А	(II) _n	$\{-C_{33}H_{30}-\}$	426	1,10	94,5	410,0	-	54,9
А	(III) _n	$\{-C_{24}H_{26}OS-\}$	362	0,92	74,9	406,2	-	46,7
А	(VII) _n	$\{-C_{70}H_{76}S_3O-\}_n$	1028	0,92	210,7	998,9	-	50,9

Изучены физико-химические процессы получения асфальто- и асфальтополимерных вяжущих, процессы на поверхности раздела фаз, которые сопровождаются тепловыми эффектами.

Подготовлен заключительный отчет.

Основные научные результаты:

1. Методами ЦТА и ДТА исследована кинетика кристаллизации

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ индивидуальных веществ и их смесей: индивидуальные вещества и сплавы в металлических системах (олово, висмут, галлий, индий, Ga-In, Sn-Bi, InBi, In₂Bi); индивидуальные вещества и смеси в системах кристаллогидратов солей натрия (вода, пятиводный тиосульфат натрия, H₂O–Na₂S₂O₃·5H₂O), низкомолекулярные углеводороды и смесей в системах углеводородов (дифенил, нафталин, дибензил, уксусная кислота, о-терфенил, м-терфенил, нафталин – дифенил-дибензил).

2. Проанализированы этапы неравновесной кристаллизации вещества. Введены понятия энтальпий зародышеобразования, коагуляции зародышей и изотермической докристаллизации. Для каждого этапа предложены уравнения для расчетов степени зародышеобразования, образования кристаллической фазы при коагуляции зародышей и затвердевания оставшейся части расплава.

3. На примере термограмм плавления и кристаллизации висмута рассчитаны кинетические параметры квазиравновесной и неравновесно-взрывной кристаллизаций, существенно отличающихся для разных видов затвердевания при равных условиях эксперимента. Показано, что при неравновесно-взрывной кристаллизации существенную роль играют процессы зародышеобразования и коагуляции, меньшую – процессы изотермической докристаллизации. Таким образом, по термограммам плавкости, используя метод ЦТА, можно определить кинетические параметры кристаллизации, которые, в свою очередь, будут использованы для получения кристаллов с наперед заданными свойствами.

4. Проанализирован гистерезисный эффект второго рода, относящийся к веществам, испытывающим при затвердевании переходы от одной кристаллической модификации к другой (кристаллогидраты пятиводного тиосульфата натрия, десятиводных сульфатов и карбонатов натрия, сплавы кадмий-олово переходящих при плавлении в другую твердую фазу с пониженными температурами кристаллизации), по сравнению с температурами плавления первичной фазы. Установлено, что при образовании зародышей жидкой фазы при плавлении и зародышей кристаллов при кристаллизации, имеет место гистерезисный эффект, связанный с дефектами кристалла. Наличие дефектов в кристалле «облегчает» их плавление, а для образования кристалла с дефектами и их удержания в зародыше требуется дополнительная энергия, что затрудняет и задерживает процесс формирования реальных кристаллов.

5. Предложен и проанализирован механизм взрывной кристаллизации переохлажденных расплавов, основанный на процессе коагуляции зародышей кристаллов. Результаты трактуются с точки зрения известной теории цепных реакций взрывного типа. Расчеты величин константы зародышеобразования и константы коагуляции с использованием соответствующих термограмм для олова и висмута, показали, что время коагуляции зародышей в ~10⁶ раз превышает медленное их образование за инкубационный период.

6. Проведен анализ концентрационной зависимости термодинамических параметров кристаллизации идеальных твердых растворов замещения из

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ
жидких растворов для бинарных систем с неограниченной растворимостью компонентов. Предложены уравнения, характеризующие концентрационные зависимости термодинамических параметров кристаллизации (энтальпии и межфазной поверхностной энергии). На примере бинарной системы Bi-Sb показана U-образная зависимость этих параметров от концентрации компонентов. Предложены формулы для расчетов критических размеров зародышей твердых растворов замещения из жидких растворов и установлена их зависимость от переохлаждений относительно линий ликвидуса и концентраций второго компонента. Установлено, что максимальное значение размера критического зародыша приходится на сплав $0,6\text{Bi} + 0,4\text{Sb}$, а максимальная величина работы образования зародыша на сплав $0,5\text{Bi} + 0,5\text{Sb}$.

7. С учетом конфигурационной и колебательной составляющих энтропии фазового превращения первого рода, связанных с наличием вакансий в кристаллах, получены формулы для расчета удельной теплоты плавления реального зародыша с вакансиями. Установлено уменьшение удельной теплоты плавления в зависимости от роста концентрации вакансий. На основании анализа энергии Гиббса выведены соответствующие выражения для расчета критических размеров зародышей кристаллов с вакансиями и работы образования подобных зародышей. Показана слабая зависимость данных параметров от переохлаждения жидкой фазы. Установлено, что критические размеры зародышей соизмеримы с параметрами решеток кристаллов.

8. Используя альтернативные формулы для расчета размера критического зародыша и работы его образования, проведен сравнительный анализ расчета этих параметров для кристаллизации из расплава и раствора (на примере нафталина). Расчеты показали, что размеры зародышей близки к параметрам кристаллической решетки и слабо зависят от переохлаждений (для расплавов) и пересыщений (для растворов). А работы образования зародышей соответствуют энергиям ван-дер-ваальсовых связей между молекулами нафталина и энергиям кристаллических решеток металлов.

9. На основании исследования процессов плавления и кристаллизации легкоплавких металлов (галлий, висмут, олово) и сплавов ($39 \text{ масс.}\% \text{Pb} + \text{Sn}$ и $96,3 \text{ масс.}\% \text{Ga} + \text{Sn}$) методом циклического термического анализа установлен эффект перехода от квазиравновесной кристаллизации, происходящей практически без переохлаждения, к неравновесно-взрывной из переохлажденного состояния. Показано, что этот эффект связан с термической предысторией жидкой фазы, а именно с температурой предварительного нагрева.

10. Методом циклического термического анализа (ЦТА) на примере м-терфенила проведено исследование влияние термической предыстории на вид кристаллизации на основании его молекулярного и кристаллического строения. По параметрам решеток a , b , c оценивались относительные энергии связей за счет вандерваальсовых сил U вдоль этих направлений: $U_a \approx 0,31 U_b$,

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ
 $U_a \approx 0,57 U_c$, $U_c \approx 0,54 U_b$, где U_a , U_b , U_c – энергии связей вдоль соответствующих осей X, Y, Z. Предполагается, что при плавлении в первую очередь должны разрушаться наиболее слабые связи между молекулами вдоль направлений a и c.

11. При слабом прогреве кристалла чуть выше температуры плавления в расплаве возможно сохранение групп, связанных между собой молекул $C_6H_4(C_6H_5)_2$ -1,3 вдоль определенного направления с сохранением ближнего порядка. При охлаждении подобной, не совсем разрушенной решетки, связи могут легко восстанавливаться, а кристаллизация будет квазиравновесной. При больших прогревах жидкой фазы должны разрушаться все связи между молекулами в кристаллах. При охлаждении такой жидкости с хаотически расположенными молекулами им необходим определенный инкубационный период для налаживания связей и встраивания в упорядоченную структуру.

12. Методом ЦТА исследовано влияние перегрева расплава на величину переохлаждения в тройной диаграмме состояния нафталин-дифенил-добензил. Предложена трактовка наличия предкристаллизационных переохлаждений у двойных сплавов и тройного эвтектического. Возможно, расплав состоит из упорядоченных кластеров чистых компонентов (нафталин, дифенил, добензил), двойных эвтектик и тройной эвтектики, а также межкластерной разупорядоченной зоны с хаотическим расположением атомов трех сортов. По мере изменения концентрации сплава в расплаве меняется объемное соотношение упорядоченной и разупорядоченной зоны. Можно предположить, что чем с большим переохлаждением кристаллизуется расплав относительно температуры ликвидус, тем большую долю занимает разупорядоченная зона.

13. Методом ЦТА исследовано влияние перегрева расплава на величину переохлаждения эвтектического сплава в системе галлий-индий. Установлено, что зависимость переохлаждения от перегрева для галлия и эвтектики имеет монотонно-возрастающий характер с достижением предельного переохлаждения: Ga-14,2 мол.% In 25 К; Ga 34 К. Кристаллизация индия с предельным переохлаждением 2 К всегда была квазиравновесной. Рассчитаны активности и энергии активации компонентов в эвтектике при квазиравновесной и неравновесной кристаллизациях.

14. По величинам переохлаждений соответствующих сплавов построена неравновесная диаграмма состояния системы Ga-In. Определены активности и коэффициенты активности компонентов на момент начала квазиравновесной и неравновесно-взрывной кристаллизаций (только для доэвтектических сплавов). Установлено, что активность галлия во всех сплавах системы Ga-In выше активности индия.

15. Методом ЦТА и ДТА (дифференциальный термический анализ) исследовано влияние перегрева расплава на величину переохлаждения химических соединений In_2Bi и $InBi$ двойной системы In-Bi. Установлено, что соединение In_2Bi всегда кристаллизуется квазиравновесно с переохлаждением

2 К. Для соединения InVi установлено наличие переохлаждения 16 К и критического перегрева, охлаждая после которого меняется характер кристаллизации с квазиравновесной на неравновесно-взрывной. Критический перегрев можно объяснить температурой распада кластеров.

16. Впервые на основании термограмм охлаждения предложен и проанализирован механизм взрывной кристаллизации переохлажденных расплавов, основанный на процессе коагуляции наноразмерных зародышей кристаллов. Результаты трактуются с точки зрения известной теории цепных реакций взрывного типа. Процессы зародышеобразования и массовой кристаллизации можно уподобить цепной реакции с автономными и разветвляющимися «звеньями», в которой исходным «материалом» служат молекулы и кластеры, а продуктами реакции – зародыши и их группировки.

17. Методом ЦТА исследовано влияние перегрева расплава на величину переохлаждения растворов в системе . Рассчитаны и проанализированы значения активностей, коэффициентов активностей и энергии активации в эвтектике при равновесной кристаллизации (КРК) и в области переохлаждения при температуре начала неравновесно-взрывной кристаллизации (НРВК).

18. Изучены теплофизические характеристики низкомолекулярных органических веществ и их смесей, удовлетворяющих основным требованиям, предъявляемым к теплоаккумулирующим системам, с помощью пакета приложения Excel, в котором имеется инструмент «Однофакторный дисперсионный анализ». Установлено, что наименьшую дисперсию имеет дибензил – дисперсия равна 19,7, а расчетное значение $F = 0,71$ меньше табличного значения , следовательно, гипотеза о равенстве средних принимается.

19. Впервые проведен анализ концентрационной зависимости термодинамических параметров кристаллизации твердых растворов замещения из жидких растворов в бинарных системах с неограниченной растворимостью компонентов. В отличие от общепринятого анализа $G(T,x)$ для жидкой (GL) и твердой (GS) фаз показана возможность анализа этой функции для жидко-твердого состояния GLS (T,x) наряду с $GL(T,x)$ и $GS(T,x)$, что позволяет установить условия термодинамической устойчивости системы в жидкокристаллической области.

20. Проанализирована динамика изменения кластеризованной структуры расплава при равновесной и неравновесной кристаллизации для сплавов, образующих непрерывный ряд твердых растворов с учетом стадии зародышеобразования. Дополнена диаграмма состояния областями сосуществования различных предкристаллизационных структурных единиц (кластеров и зародышей в расплаве) как выше, так и ниже температуры плавления (ликвидуса) позволяет последовательно проследивать этапы кластеризации, зародышеобразования и последующих видов кристаллизации от равновесной к неравновесной.

21. При исследовании химических компонентов битума установлено, что чем выше содержание масел в битуме, тем меньше его поверхностное натяжение на границе битум-воздух; а при ухудшении смачивания (при этом краевой угол смачивания и повышаются) работа адгезии повышается. Т.е. с позиции обеспечения высоких когезионных и адгезионных показателей битумов целесообразно использовать битумы с высоким содержанием смол и относительно невысоким содержанием масел.

22. При исследовании золошлаковых материалов для производства строительных материалов разработан способ оценки концентрации центров гидратации на поверхности зерен портландцемента. Выявлено, что концентрация центров гидратации на поверхности на много порядков ниже концентрации соответствующих клинкерных минералов.

23. При исследовании физико-химических процессов получения асфальто- и асфальтополимерных вяжущих установлено, что элвалой является весьма эффективным полимерным модификатором битума, улучшающим процесс его структурирования минеральным порошком уже на начальных стадиях процесса. При смачивании минеральных порошков битумами, модифицированными реакционноспособными модификаторами, возможно протекание химических реакций как в объеме битума, так и на поверхности раздела фаз.

24. При изучении динамических механических свойств эпоксидно-тиоколовых композиционных материалов проведено системное исследование зависимости динамических механических свойств полимерных материалов на основе смесей эпоксидной смолы с полисульфидным каучуком в зависимости от условий совмещения компонентов (проведение предварительной реакции тиоэтерификации или механическое смешение), содержания каучука и режимов отверждения композиции. Показано, что величина максимума тангенса угла механических потерь, связанного с расстеклованием эпоксидной матрицы, уменьшается по мере увеличения в ней содержания каучука. Термообработка способствует улучшению совместимости компонентов в исследованных композитах.

25. При исследовании влияния нанопорошков оксидов циркония (ZrO_2) на деформационно-прочностные, адгезионные, трибологические и теплофизические свойства эпоксидных композитов предположено, что более высокие значения прочностных характеристик, модуля упругости, работы разрушения и стойкости к истиранию при использовании нанопорошков, полученных при температуре прокаливания $500^{\circ}C$ могут быть связаны как с меньшим размером частиц, так и (что более вероятно) с их большей удельной поверхностью, по сравнению с порошками, полученными при $700^{\circ}C$.

26. Проведено системное исследование возможности регулирования адгезионных, деформационно-прочностных и динамических механических свойств клеевых композиций на основе тиоглицидилового эфира дифенилолпропана с помощью порошковых наполнителей. Установлено, что

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ
введение порошкообразных наполнителей позволяет повысить когезионную и адгезионную прочность тиранов без снижения скорости отверждения.

27. Подготовлен промежуточный отчет.

28. Результаты работы опубликованы в 13 научных работах, из них: 1 монография, 10 статей, 2 тезисов докладов, апробированы на 5 международных конференциях.

29. В рамках научно-исследовательской работы принимали участие 3 студента.

Преимущество этой работы над другими имеющимися аналогами заключается в том, что в литературе отсутствуют: систематические экспериментальные исследования кинетики кристаллизации переохлажденных расплавов и влияния внешних действий на параметры кристаллизации элементарных веществ, сплавов, химических соединений, кристаллогидратов, низкомолекулярных веществ и т.п. Из-за отсутствия системных исследований влияния разных факторов на кинетику кристаллизации, литературные данные по этой проблеме содержат много разногласий, которые не дают дальнейшего развития теории кристаллизации из переохлажденного состояния и получении надежных экспериментальных средств влияния на структуру и свойства изделий. Современная теория не способна объяснить явления взрывной кристаллизации, эффекты поэтапного плавления и кристаллизации, наличия устойчивых и значительных переохлаждений, влияния внешних воздействий на зародышеобразование при кристаллизации переохлажденных расплавов и др. Центральный вопрос в теории кристаллизации вещества (механизм формирования зародышей в расплаве) порой остается не выясненным, а существующие представление о зародышеобразовании достаточно дискуссионно. Ввиду определенных трудностей прямого наблюдения за начальной стадией формирования кристалла, экспериментальных опытов по кинетике зародышеобразования, динамики развития зародышей, ее морфологии и текстуры в настоящее время явным образом недостаточно для развития новых теорий кристаллизации.

Практическая ценность

Практическое значение полученных результатов работы заключается в том, что проведенные исследования и выявленные эффекты позволят существенным образом управлять структурой и свойствами разных веществ.

Получен большой теоретический материал по измерению параметров кристаллизации, который интересен для дальнейшего развития теории и практики кристаллизации вещества, о физико-химической природе расплавов, углубление понимания взаимосвязи параметров кристаллизации со структурой и свойствами полученных кристаллов. Результаты работы планируется использовать в научно-исследовательских институтах и производстве.

Ценность результатов для учебно-научной работы

Некоторые результаты работы введены в учебный процесс таких курсов, как «Технология конструкционных материалов», «Материаловедение», «Физико-химическое материаловедение», «Физика» (используются в лекционном курсе, лекционных демонстрациях, лабораторных работах).

Результаты работы докладывались на научных семинарах кафедры, на 5 международных конференциях различного уровня и были опубликованы в научных журналах. Результаты работы за 2025 г. были рассмотрены и утверждены на заседании кафедры ФПХ 28.11.2025 г, протокол № 2.

В выполнении этой работы принимают участие студенты. Вместе со студентами опубликовано 6 научных работ и доложены на 4 международных конференциях.

Перечень разработанной документации и образцов

1. Заключительный отчет по кафедральной научной теме К-2-15-21.
2. Методические указания к лабораторным работам.

Основные выводы

1. Методами ЦТА и ДТА исследована кинетика кристаллизации индивидуальных веществ и их смесей: индивидуальные вещества и сплавы в металлических системах (олово, висмут, галлий, индий, Ga-In, Sn-Bi, InBi, In₂Bi); индивидуальные вещества и смеси в системах кристаллогидратов солей натрия (вода, пентаводный тиосульфат натрия, H₂O–Na₂S₂O₃·5H₂O), низкомолекулярные углеводороды и смесей в системах углеводородов (дифенил, нафталин, дибензил, уксусная кислота, о-терфенил, м-терфенил, нафталин – дифенил-дибензил).
2. Проанализированы этапы неравновесной кристаллизации вещества. Введены понятия энтальпий зародышеобразования, коагуляции зародышей и изотермической докристаллизации. Для каждого этапа предложены уравнения для расчетов степени зародышеобразования, образования кристаллической фазы при коагуляции зародышей и затвердевания оставшейся части расплава.
3. Проанализирован гистерезисный эффект второго рода для веществ с твердофазным превращением. Установлено, что при образовании зародышей жидкой фазы при плавлении и зародышей кристаллов при кристаллизации, имеет место гистерезисный эффект, связанный с дефектами кристалла.
4. Предложен и проанализирован механизм взрывной кристаллизации с точки зрения известной теории цепных реакций взрывного типа. Расчеты показали, что время коагуляции зародышей в ~10⁶ раз превышает медленное их образование за инкубационный период.
5. Проведен анализ термодинамических параметров кристаллизации идеальных твердых растворов замещения и предложены формулы для расчетов критических размеров зародышей.
6. Получены формулы для расчета удельной теплоты плавления реального зародыша с вакансиями. Установлено уменьшение удельной теплоты плавления в

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ
зависимости от роста концентрации вакансий.

7. Впервые предложен и проанализирован механизм взрывной кристаллизации переохлажденных расплавов, основанный на процессе коагуляции наноразмерных зародышей кристаллов. Результаты трактуются с точки зрения известной теории цепных реакций взрывного типа.

8. Проанализирована динамика изменения кластеризованной структуры расплава при равновесной и неравновесной кристаллизации для сплавов, образующих непрерывный ряд твердых растворов с учетом стадии зародышеобразования. Диаграмма состояния дополнена областями сосуществования различных предкристаллизационных структурных единиц (кластеров и зародышей).

9. При исследовании химических компонентов битума установлено, что чем выше содержание масел в битуме, тем меньше его поверхностное натяжение на границе битум-воздух; а при ухудшении смачивания (при этом краевой угол смачивания и повышаются) работа адгезии повышается. Т.е. с позиции обеспечения высоких когезионных и адгезионных показателей битумов целесообразно использовать битумы с высоким содержанием смол и относительно невысоким содержанием масел.

10. При исследовании золошлаковых материалов для производства строительных материалов разработан способ оценки концентрации центров гидратации на поверхности зерен портландцемента. Выявлено, что концентрация центров гидратации на поверхности на много порядков ниже концентрации соответствующих клинкерных минералов.

11. При исследовании физико-химических процессов получения асфальто- и асфальтополимерных вяжущих установлено, что элвалой является весьма эффективным полимерным модификатором битума, улучшающим процесс его структурирования минеральным порошком уже на начальных стадиях процесса. При смачивании минеральных порошков битумами, модифицированными реакционноспособными модификаторами, возможно протекание химических реакций как в объеме битума, так и на поверхности раздела фаз.

12. При изучении динамических механических свойств эпоксидно-тиоколовых композиционных материалов проведено системное исследование зависимости динамических механических свойств полимерных материалов на основе смесей эпоксидной смолы с полисульфидным каучуком в зависимости от условий совмещения компонентов (проведение предварительной реакции тиоэтерификации или механическое смешение), содержания каучука и режимов отверждения композиции. Показано, что величина максимума тангенса угла механических потерь, связанного с расстеклованием эпоксидной матрицы, уменьшается по мере увеличения в ней содержания каучука. Термообработка способствует улучшению совместимости компонентов в исследованных композитах.

13. При исследовании влияния нанопорошков оксидов циркония (ZrO_2) на деформационно-прочностные, адгезионные, трибологические и теплофизические свойства эпоксидных композитов предположено, что более высокие значения

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ
прочностных характеристик, модуля упругости, работы разрушения и стойкости к истиранию при использовании нанопорошков, полученных при температуре прокаливания 500С могут быть связаны как с меньшим размером частиц, так и (что более вероятно) с их большей удельной поверхностью, по сравнению с порошками, полученными при 700С.

14. Проведено системное исследование возможности регулирования адгезионных, деформационно-прочностных и динамических механических свойств клеевых композиций на основе триглицидилового эфира дифенилолпропана с помощью порошковых наполнителей. Установлено, что введение порошкообразных наполнителей позволяет повысить когезионную и адгезионную прочность тиранов без снижения скорости отверждения.

Фундаментальная работа №3

Кафедра: Высшая математика

Название приоритетного направления развития науки и техники: фундаментальные научные исследования по наиболее важным проблемам развития научно-технического, социально-экономического, общественно-политического, человеческого потенциала для обеспечения конкурентоспособности Республики в мире и устойчивого развития общества и государства.

- 1) **Тема НИР:** «Усовершенствование теории и методики обучения и воспитания студентов вузов с применением современных технологий; построение и анализ математических моделей явлений и процессов в механике, физике, строительстве, финансах и страховании».
- 2) **Руководитель НИР:** Г.И.Н.Ковалев, кандидат физико-математических наук, доцент, врио заведующего кафедрой ВМ;
- 3) Т.В. Жмыхова, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры ВМ
- 4) **Номер государственной регистрации НИР:** К-2-03-21.
- 5) **Название высшего учебного заведения, научного учреждения:** Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ.
- 6) **Срок выполнения:** начало – 11.01.2021 г., окончание – 31.12.2025 г.
- 7) **Предмет исследования:** методическая система обучения и воспитания студентов ДОННАСА; детерминированные и стохастические дифференциальные уравнения и их системы.
- 8) **Объект исследования:** процесс обучения и воспитания студентов; абсолютно твёрдые тела и их системы, деформируемые твёрдые тела, экономические процессы.
- 9) **Суть процесса исследования:** уточнение целей и содержания обучения и воспитания, в том числе и дистанционного, отбор наиболее эффективных методов, средств и организационных форм обучения и воспитания студентов; разработка, теоретический и численный анализ математических моделей абсолютно твёрдых тел и их систем, деформируемых твёрдых тел, экономических процессов.
- 10) **Основные научные результаты (научно-методические).**

Научные и научно-методические исследования велись в следующих направлениях:

- разработка математической модели для оценки качества внимания пользователей, учитывающая видимость, взаимодействие и визуальное внимание;
- патриотическое воспитание при обучении математике;
- междисциплинарные связи в высшей школе.

- разработка методов оптимального расположения узлов аппроксимации непрерывных функций, основанных на учете нелинейности пространства и использовании интерполяционных алгебраических кривых
- повышение точности интерполяции и уменьшение средней квадратичной ошибки по сравнению с традиционным выбором узлов Чебышева.

Научная новизна исследования состоит в следующем:

- доказана статистически значимая связь модели для оценки внимания с использованием классических показателей с конверсиями;
- выявлены преимущества математической модели, в которой используются показатели, выявленные путем качественного анализа, соответствующие актуальным «индексам оценки внимания» по сравнению с математической моделью для оценки внимания с использованием классических показателей;
- разработка заданий патриотической направленности при обучении математике в средней школе;
- интеграция художественной литературы и математики в высшей школе как средство формирования познавательного интереса обучающихся.
- предложено использование концепции нелинейности пространства вдоль осей декартовой системы координат для оптимизации расположения узлов аппроксимации;
- использован принципиально новый метод поиска оптимальных узлов аппроксимации, основанный на интерполяционных алгебраических кривых в точечном исчислении. Алгоритм сохраняет возможность свободного выбора узлов интерполяции, что позволяет решать задачу оптимальной локализации узлов посредством минимизации целевой функции;
- обеспечение преимущества посредством разработанного метода по сравнению с существующими классическими методами аппроксимации.

Исследования в указанном выше научно-методическом направлении целесообразно продолжить для анализа применимости модели для динамической оптимизации рекламных кампаний с использованием ML-алгоритмов, а также разработке кросс-платформенных стандартов измерения внимания; для формирования гражданской идентичности и национального самосознания студентов, для формирования комплексного (системного) мышления у студентов; проведение более широкого и глубокого сравнительного анализа с другими современными методами оптимального размещения узлов (например, на основе адаптивных сеток, методов максимальной энтропии) на различных классах тестовых и реальных функций; создание бенчмарков и тестовых задач.

10) Работали над кандидатскими диссертациями: асс. Д.А. Сапронов.

11) В работе принимали участие: аспиранты – нет, студенты – нет.

12) Цель и предмет работы: уточнить цели и содержание обучения и воспитания, в том числе и дистанционного, отобрать наиболее эффективные методы, средства и организационные формы обучения и воспитания студентов ДонНАСА; провести теоретический и численный анализ математических моделей абсолютно и деформируемых твёрдых тел и их систем, экономических процессов.

13) Перечень основных заданий:

- нахождение точного порядка приближения функций классическими методами суммирования рядов и интегралов Фурье;
- поиск условий существования прецессионных движений уравнения класса Кирхгофа-Пуассона движения гиростата с одной неподвижной точкой с одним или двумя носимыми телами в полях сложной структуры;
- изучение основных характеристик деятельности страховых компаний для различных видов страхования;
- построение и исследование стохастических моделей различных экономических процессов и явлений;
- теоретико-методологического обоснование и разработка методической системы обучения, воспитания и всестороннего развития студентов ДОННАСА.

14) Реализация заданий работы. Основные этапы:

- анализ методик обучения и воспитания студентов вузов; математических моделей, явлений и процессов в механике, строительстве, финансах и страховании;
- анализ экспериментальных данных, связанных с обучением и воспитанием студентов вузов; исследование условий существования прецессионных движений систем твердых тел в различных силовых полях; исследование динамики капитала компаний и потребительских фондов;
- проверка гипотез об эффективности использования современных технологий в обучении и воспитании студентов вузов; построение математических моделей в механике, физике, строительстве, финансах и страховании;
- корректировка использования современных технологий в обучении и воспитании студентов вузов; оценка математических моделей явлений и процессов в механике, физике, строительстве, финансах и страховании;
- разработка методики обучения и воспитания студентов вузов с применением современных технологий; анализ применения математических моделей в механике, физике, строительстве, финансах и страховании.

15) Практическая ценность: полученные научные и научно-методические результаты могут быть полезны: проектным и научно-исследовательским организациям, высшим и средним профессиональным учебным заведениям, финансовым и страховым компаниям, а также могут быть использованы преподавателями математических дисциплин кафедры ВМ для разработки спецкурсов для студентов ДОННАСА.

Кафедра: Специализированные информационные технологии и системы

Название приоритетного направления развития науки и техники: фундаментальные научные исследования по наиболее важным проблемам развития научно-технического, социально-экономического, общественно-политического, человеческого потенциала для обеспечения конкурентоспособности Донецкой Народной Республики в мире и устойчивого развития общества и государства.

1. **Тема НИР:** Математическое и компьютерное моделирование многофакторных процессов и явлений.
2. **Руководитель НИР:** Назим Я.В., канд. техн. наук, доцент, заведующий кафедрой «Специализированные информационные технологии и системы».
3. **Номер государственной регистрации НИР:** 0121D000084.
4. **Номер учетной карточки заключительного отчета:** – нет.
5. **Название высшего учебного заведения, научного учреждения:**
Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ.
6. **Срок выполнения:** начало – 11.01.2021, окончание – 31.12.2025.
7. **Предмет исследования.** Математические и компьютерные модели многофакторных процессов и явлений.
8. **Объект исследования.** Математические основы и вычислительные методы моделирования многофакторных процессов и явлений.
9. **Суть процесса исследования.** Кафедральная научно-исследовательская тема посвящена разработке инструментов математического и компьютерного моделирования многофакторных процессов и явлений в различных отраслях науки и техники. Первая часть исследований посвящена развитию геометрической теории многомерной интерполяции в части систематизации геометрических интерполянтов и разработки рекомендаций по их использованию на регулярных и нерегулярных многомерных сетях точек, координаты которых соответствуют исходной экспериментально-статистической или другой информации, с последующей алгоритмизацией результатов исследований для разработки интеллектуальных технологий геометрического моделирования многофакторных процессов с помощью многомерной интерполяции и аппроксимации. Вторая часть исследований посвящена развитию нечетко-множественных методов разработки и исследования математических и компьютерных моделей многофакторных процессов и явлений. Третья часть исследований посвящена разработке вычислительных алгоритмов геометрического моделирования многофакторных

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры – филиал НИУ МГСУ 25 процессов и явлений на основе больших и гипербольших объёмов исходных данных. Четвертая и пятая часть исследований посвящена разработке и апробации нечетко-множественных математических методов исследования моделей термических процессов, а также разработке и алгоритмизации нечетко-множественных методов анализа расчетных моделей электрических и радиоэлектронных устройств.

10. **Основные научные результаты.** Разработаны математические основы и вычислительные методы моделирования многофакторных процессов и явлений с помощью современной компьютерной техники, основанные на создании новых методов многомерной интерполяции и аппроксимации, а также нечетко-множественные методы исследования эффектов параметрической неопределенности в моделях термических деформационных процессов и алгоритмизированные нечетко-множественные методы анализа расчетных моделей электрических и радиоэлектронных устройств.

11. Работали над кандидатскими диссертациями:

Полянский Д.Д. – аспирант 3-го года обучения. Тема диссертации: «Алгоритмизированные численно-аналитические нечетко-множественные методы анализа параметрически неопределенных моделей термомеханики материалов и конструкций». Шифр и наименование научной специальности: 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

12. В работе принимали участие:

- ответственный исполнитель: д.т.н., доцент Сторожев С.В.;
- к.т.н., доценты: Назим Я.В., Малютин Т.П., Бумага А.И., Воронова О.С., Крысько А.А., Чернышева О.А., Номбре С.Б., Моисеенко В.А.;
- к.т.н. Шевчук О.А., Селезнев И.В.;
- ассистенты: Полянский Д.Д., Заричанская Т.С., Полянская С.С., Чиркин А.В., Лобода Е.С. (в т.ч., аспиранты – 4);
- студенты – нет.

13. **Цель и предмет работы.** Разработка математических методов и вычислительных алгоритмов моделирования многофакторных процессов и явлений.

14. Перечень основных заданий.

- разработать критерии сравнения геометрических объектов многомерного аффинного пространства для выбора наилучших результатов геометрического моделирования многофакторных процессов и явлений;
- разработать интеллектуальных технологий геометрического моделирования многофакторных процессов с помощью многомерной интерполяции и аппроксимации;
- разработать вычислительные алгоритмы геометрического моделирования многофакторных процессов и явлений на основе больших и гипербольших объёмов исходных данных;

- разработать нечетко-множественные математические методы исследования моделей термических процессов;
- разработать и алгоритмизировать нечетко-множественные методы анализа расчетных моделей электрических и радиоэлектронных устройств.

15. Реализация заданий работы.

Актуальной научной проблемой остается дальнейшая разработка методов исследования параметрически неопределенных математических моделей с расширенными перспективами применения этих подходов для исследования новых классов моделей термомеханики конструкций и прочностных расчетов компонентов электронных и энергетических устройств. С учетом того, что решение задачи учета некорреляционности исходных параметров в указанных моделях на базе применения методов вероятностно-стохастического анализа во многих случаях на практике осложнено отсутствием статистически корректной информации о подлежащих учету разбросах, а также большим числом подлежащих одновременному учету некорреляционных параметров и необходимостью априорного задания типа вероятностных распределений для экзогенных и эндогенных характеристик расчетных моделей, вариантом подхода к анализу моделей данного типа на основе менее строгих требований к характеру исходной некорреляционной информации, включая использование данных субъективных экспертных заключений, является применение методов теории нечетких множеств на этапе формализации некорреляционных исходных данных и в процессе оперирования с этими данными при получении оценок для разбросов эндогенных параметров исследуемых моделей. Спецификой применения данного подхода являются возможность одновременного учета большого числа некорреляционных параметров, отсутствие необходимости априорного задания идентичных типов нечетко-множественных представлений для экзогенных и эндогенных характеристик расчетных моделей и возможность введения разнотипных индивидуализированных нечетко-множественных представлений для различных неопределенных исходных параметров рассматриваемых моделей, в максимальной мере учитывающих характер имеющейся в наличии некорреляционной исходной информации.

Таким образом, разработка специализированных нечетко-множественных численно-аналитических методов исследования параметрически неопределенных инновационных математических моделей термомеханики конструкций и прочностных характеристик компонентов электрических и радиоэлектронных устройств является современной актуальной научно-технической проблемой, решение которой ориентировано на повышение адекватности проектных прогнозов и получение более достоверных, адекватных, корректных оценок параметров технологических режимов эксплуатации, функциональности, требуемых запасов прочности, надежности, показателей технологического ресурса и материалоемкости для конструктивных элементов машин, сооружений и устройств электронной техники.

Основные задания этапа работы включают:

- разработку численно-аналитического нечетко-множественного метода учета разбросов в значениях исходных геометрических и физических параметров в математических тепловых расчетных моделях стержневых элементов радиаторов и создаваемых с их применением радиаторных конструкций для систем охлаждения радиоэлектронной аппаратуры, который позволяет получать уточненные проектные данные о характеристиках стержневых конструктивных элементов радиаторов, обеспечивающих задаваемые уровни теплоотдачи и температуры перегрева радиоэлектронных устройства;
- разработку теоретического численно-аналитического нечетко-множественного алгоритма анализа влияния разбросов в значениях исходных конструкционных параметров расчетных схем прочности и ресурса надежности для компонентов элементной базы на платах радиоэлектронных устройств при возникновении их резонансных колебаний;
- получение прикладных нечетко-множественных расчетных соотношений для неконтрастных эндогенных параметров времени функционирования вывода в режиме возникновения резонансных колебаний и количества циклов резонансных колебаний до разрушения;
- разработку алгоритмизированных нечетко-множественных методов учета факторов параметрической неопределенности в моделях вибрационных механических воздействий на печатные платы радиоэлектронных устройств и моделях резонансных колебаний плат радиоэлектронных систем с демпфирующими полимерными ребрами;
- разработку нечетко-множественного метода учета параметрической неопределенности в модели деформирования тепловыделяющих сборок ядерных энергетических реакторов при неравномерном нагреве и нейтронном облучении.

16. Основные научные результаты.

В результате выполнения исследований по текущему этапу были получены следующие результаты, имеющие научную и практическую ценность:

1. Разработан численно-аналитический нечетко-множественный метод учета разбросов в значениях исходных геометрических и физических параметров в математических тепловых расчетных моделях стержневых элементов радиаторов и создаваемых с их применением радиаторных конструкций для систем охлаждения радиоэлектронной аппаратуры, позволяющий получать уточненные проектные данные о характеристиках стержневых конструктивных элементов радиаторов, обеспечивающих задаваемые уровни теплоотдачи и температуры перегрева радиоэлектронных устройства.
2. Разработан теоретический численно-аналитический нечетко-множественный алгоритм анализа эффектов влияния разбросов в значениях исходных конструкционных параметров расчетных схем прочности и ресурса надежности для компонентов элементной базы на платах радиоэлектронных устройств при

возникновении их резонансных колебаний.

3. Разработан алгоритмизированный численно-аналитический нечетко-множественный метод прикладных расчетов неконтрастных эндогенных параметров времени функционирования выводов радиоэлементов на платах радиоэлектронных устройств в режиме возникновения резонансных колебаний плат и расчета количества циклов резонансных колебаний до разрушения.

4. Разработан алгоритмизированный нечетко-множественный метод учета факторов параметрической неопределенности в моделях вибрационных механических воздействий на печатные платы радиоэлектронных устройств.

5. Разработан алгоритмизированный нечетко-множественный метод учета факторов параметрической неопределенности в моделях резонансных колебаний плат радиоэлектронных систем с демпфирующими полимерными ребрами;

6. Разработан нечетко-множественный метод учета параметрической неопределенности в модели деформирования тепловыделяющих сборок ядерных энергетических реакторов при неравномерном нагреве и нейтронном облучении.

17. Преимущество этой работы над другими имеющимися аналогами заключается в:

- возможностях получения оценок эндогенных характеристик в исследуемых моделях прочностных характеристик компонентов электрических и радиоэлектронных устройств с применением нечетко-множественных методов на основе исходной информации о разбросах входных параметров, не имеющей строгой корректной статистической природы, в том числе базирующейся на вариативных субъективных экспертных оценках для отдельных базовых характеристик материалов и конструкций;

- возможностях введения в анализируемых моделях большого числом подлежащих одновременному учету неконтрастных параметров;

- отсутствию необходимости априорного задания вида функций принадлежности (аналогов вероятностных распределений) для экзогенных и эндогенных неконтрастных характеристик расчетных моделей.

Реализованные в рамках выполнения работы разработки в области получения дисперсионных соотношений для обобщенных волн Гуляева-Блюстейна в пьезоактивном анизотропном полупространстве с многофакторной приповерхностной неоднородностью, построения базисных решений уравнений распространения электроупругих сдвиговых волн в пьезокерамическом полупространстве с многофакторной приграничной неоднородностью, построения базисных решений уравнений распространения волн сдвига в полубесконечных трансверсально-изотропных функционально-градиентных телах с многофакторной приповерхностной неоднородностью, построения базисных частных решений для системы уравнений распространения продольно-сдвиговых электроупругих волн в полубесконечных телах с многофакторной приповерхностной неоднородностью, построения однородных решений в пространственных задачах теории волнового деформирования и упругих колебаний трансверсально-изотропных

функционально-градиентных плит, исследования моделей возбуждения сдвиговых электроупругих волн в симметрично-неоднородном по толщине функционально-градиентном пьезокерамическом полуслое и распространения поверхностных продольно-сдвиговых электроупругих волн в слое экспоненциально-неоднородной пьезокерамики на пьезоактивном полупространстве с приповерхностной неоднородностью не имеют аналогов, носят приоритетный характер в исследованиях по динамическому волновому деформированию инновационных функционально-градиентных материалов и являются основой для прикладных инженерных расчетных методик расчетов деформативности, прочности и надежности конструкций из новых классов материалов указанного типа.

18. Практическая ценность заключается в возможностях прямого использования разработанных методов и программных приложений для их компьютерной реализации в практике проектных конструкторских расчетов с повышенной точностью прогноза для инновационных элементов конструкций современной приборной, радиоэлектронной и энергетической техники.

19. Ценность результатов для учебно-научной работы. Результаты исследований внедрены в учебный процесс Донбасской национальной академии строительства и архитектуры при проведении лабораторных занятий по дисциплинам «Информационные технологии в строительстве» для подготовки магистров по направлению 08.04.01 «Строительство»; «Информационные технологии в строительстве» для подготовки магистров по направлениям 07.04.01 «Архитектура», 07.04.03 «Дизайн архитектурной среды», 07.04.04 «Градостроительство», 21.04.02 «Землеустройство и кадастры», для подготовки аспирантов по направлению 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

20. Основные выводы. В результате выполнения исследований по текущему этапу были получены следующие результаты, которые имеют научную и практическую ценность:

– осуществлена разработка численно-аналитического нечетко-множественного метода учета разбросов в значениях исходных геометрических и физических параметров в математических тепловых расчетных моделях стержневых элементов радиаторов и создаваемых с их применением радиаторных конструкций для систем охлаждения радиоэлектронной аппаратуры, который позволяет получать уточненные проектные данные о характеристиках стержневых конструктивных элементов радиаторов, обеспечивающих задаваемые уровни теплоотдачи и температуры перегрева радиоэлектронных устройства; в качестве способа исследования рассматриваемой задачи для неопределенных исходных расчетных параметров реализуется переход к нечетко-множественным представлениям, рассматриваемым далее в качестве аргументов в функциональных соотношениях детерминистических вариантов анализируемых моделей, и получение соответствующих выходных параметров в нечетко-множественной форме на основе применения модифицированной уровневой версии эвристического

принципа обобщения;

– осуществлена разработка теоретического численно-аналитического нечетко-множественного алгоритма анализа влияния разбросов в значениях исходных конструктивных параметров расчетных схем прочности и ресурса надежности для компонентов элементной базы на платах радиоэлектронных устройств при возникновении их резонансных колебаний; применен подход, базирующийся на теории нечетких вычислений и предполагающий переход к неконтрастным аргументам с нечетко-множественными описаниями в расчетных соотношениях детерминистических версий рассматриваемых моделей на основе применения модифицированной уровневой формы эвристического принципа обобщения и получены прикладные нечетко-множественные расчетные соотношения для неконтрастных эндогенных параметров времени функционирования вывода в режиме возникновения резонансных колебаний и количества циклов резонансных колебаний до разрушения;

– осуществлена разработка алгоритмизированного нечетко-множественного метода учета факторов параметрической неопределенности в модели вибрационных механических воздействий на печатные платы радиоэлектронных устройств;

– осуществлена разработка алгоритмизированного нечетко-множественного метода учета факторов параметрической неопределенности в модели резонансных колебаний плат радиоэлектронных систем с демпфирующими полимерными ребрами;

– осуществлена разработка нечетко-множественного метода учета параметрической неопределенности в модели деформирования тепловыделяющих сборок ядерных энергетических реакторов при неравномерном нагреве и нейтронном облучении.

Полученные результаты разработки методов учета параметрической неопределенности и реализующих их компьютерных программных приложений перспективны для использования в практике проектных конструкторских расчетов в области анализа инновационных расчетных моделей естественных и технических наук.