

ОТЧЕТ за 2019-2023 гг.

1. *Наименование Научной школы:* **Физико-химическая механика гетерогенных и многофазных сред**
2. *ФИО руководителей:* Иванов Алексей Олегович, Зубарев Андрей Юрьевич
3. Количество и список членов научной школы, работающих в настоящее время в УрФУ:
 1. Иванов А.О. – д-р физ.-мат. наук, профессор, зам. проректора о науке
 2. УрФУ
 3. Зубарев А.Ю. – д-р физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник ЛММФХМС
 4. Александров Д. В. – д-р физ.-мат. наук, профессор, профессор КТМФ
 5. Башкирцева И.А. – д-р физ.-мат. наук, доцент, профессор КТМФ
 6. Елфимова Е.А. – д-р физ.-мат. наук, доцент, зав. кафедрой КТМФ
 7. Канторович С.С. – д-р физ.-мат. наук, доцент, доцент-исследователь КТМФ
 8. Ряшко Л.Б. – д-р физ.-мат. наук, профессор, профессор КТМФ
 9. Амбаров А.В. – канд. физ.-мат. наук, доцент КТМФ
 10. Булычева С.В. – канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент ДММиКН
 11. Добросердова А.Б. – канд. физ.-мат. наук, доцент КТМФ
 12. Зверев В.С. – канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент КТМФ
 13. Иванов А.А. – канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник ЛМММ
 14. Исакова Л.Ю. – канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент КТМФ
 15. Макаров А.В. – канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент ДММиКН
 16. Маковеева Е.В. – канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник ЛСТНЖО
 17. Малыгин А.П. – канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент ДММКН
 18. Мусихин А.Ю. – канд. физ.-мат. наук, доцент КТМФ
 19. Новак Е.В. – канд. физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник ЛММФХМС
 20. Низовцева И.Г. – канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник ЛММФБС
 21. Пермикин Д.В. – канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент КТМФ
 22. Пьянзина Е.С. – канд. физ.-мат. наук, доцент КТМФ
 23. Соловьева А.Ю. – канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник ЛММФХМС
 24. Стародумов И.О. – канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник ЛММФБС
 25. Титова Е.А. – канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник ЛММ
 26. Торопова Л.В. – канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник ЛММФБС
 27. Устинов В.А. – канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент ДММиКН
 28. Цветков И.Н. – канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник ЛМММ
 29. Чириков Д.В. – канд. физ.-мат. наук, доцент ДММКН
 30. Никишина М.А. – младший научный сотрудник ЛСТНЖО
 31. Субботин И.М. – младший научный сотрудник ЛММФХМС
 32. Беляев А.В. – лаборант-исследователь ЛММФХМС
 33. Беляева Т.Д. – лаборант-исследователь ЛММФХМС
 34. Глебова А.Е. – инженер-исследователь ЛММФБС
 35. Колиниченко А.П. лаборант-исследователь ЛММФХМС
 36. Корозникова И.Е. – инженер-исследователь ЛСТНЖО
 37. Павлецов М.М. – лаборант-исследователь ЛМММ
 38. Радушнов Д.И. – лаборант-исследователь ЛММФХМС
 39. Русанов М.С. – лаборант-исследователь ЛММФХМС

40. Сокольский С.А. – лаборант-исследователь ЛММФХМС

Используемые сокращения подразделений:

КТМФ – кафедра теоретической и математической физики;

ДММиКН – департамент математики, механики и компьютерных наук;

ЛММФХМС – лаборатория математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах;

ЛМММ – лаборатория многомасштабного математического моделирования;

ЛММФБС – лаборатория моделирования многофазных физико-биологических сред;

ЛСТНЖО – лаборатория «Стохастический транспорт наночастиц в живом организме».

4. Результаты деятельности за 2019-2023 гг.

Проводились теоретические исследования в области структурно-фазовых превращений в магнитных жидкостях и магнитополимерных композитах, исследования их магнитных и реофизических свойств, динамического отклика этих систем на внешнее магнитное поле, магнитогипертермического эффекта как прогрессивного метода терапии онкологических заболеваний, а также циркуляционных течений индуцируемых магнитным полем в каналах с магнитной жидкостью как способа интенсификации транспорта тромболитиков в кровеносных сосудах.

Развиты новые разделы нелинейного стохастического анализа и управления для динамических систем со сложными регулярными и хаотическими аттракторами с использованием теории стохастической чувствительности и аппарата доверительных областей. Получила развитие теория фантомных аттракторов в дискретных и непрерывных стохастических системах. Развита теория стохастической чувствительности пространственных негомогенных паттернов диффузионных систем и разработаны конструктивные алгоритмы ее расчета. Разработаны методы анализа механизмов стохастических переходов в системах с транзиентными аттракторами и фрактальными бассейнами. На основе этих общих теоретических результатов исследовались математические модели, отражающие сложные нелинейные процессы в различных областях естествознания: нейронная активность, кальциевые осцилляции, ферментативные реакции, популяционная динамика, опухолево-иммунное взаимодействие, термохимическая кинетика, климатическая динамика. Такой широкий охват разнообразных процессов, относящихся к самым различным уровням естествознания, позволил не только исследовать особенности конкретных систем, но и обнаружить присущие этим системам ключевые общие стохастические явления и вызывающие их закономерности. Среди таких явлений можно отметить стохастическую возбудимость, вызываемую шумом генерацию колебательных режимов смешанных мод, стохастическое подавление осцилляций, генерацию хаоса, фантомные аттракторы.

На основе метода дифференциальных рядов построена нестационарная теория роста сферических зародышей в переохлаждённых чистых и бинарных расплавах, а также в пересыщенных растворах. Найдены законы роста зародышей.

Развита теория нестационарной эволюции полидисперсного ансамбля частиц на промежуточной стадии фазового превращения в метастабильных жидкостях. Определены функция распределения сферических кристаллов по размерам и динамика снятия переохлаждения (пересыщения) метастабильной системы. Выполнен учёт различных кинетик нуклеации и роста частиц, а также одновременного протекания процессов кристаллизации и полимеризации. На основе развитой теории описана кристаллизация

инсулина, а также других неорганических и органических соединений. Развитая теория обобщена на случаи отвода кристаллов из рабочей ёмкости кристаллизатора, притока массы и оттока тепла через его стенки, зависимости температуры фазового перехода от кривизны растущих кристаллов.

Развита теория эволюции ансамбля эллипсоидальных кристаллов в переохлаждённых однокомпонентных и бинарных расплавах, а также в пересыщенных растворах с учётом различных кинетик нуклеации кристаллов и разных законов их роста. Развитая теория сопоставлена с экспериментальными данными.

Развита теория оствальдова созревания кристаллов на заключительной стадии фазового превращения в метастабильных жидкостях при протекании различных механизмов массопереноса. Развитая теория описывает широкий круг экспериментальных данных. Исследован переход метастабильной жидкости от промежуточной стадии фазового превращения к заключительной стадии. Аналитически найдена функция распределения на начальном этапе оствальдова созревания. Найдено распределение кристаллов по размерам на больших временах фазового перехода при протекании оствальдова созревания и коагуляции частиц.

Найдены точные решения уравнений стационарной коагуляции частиц, а также построены приближённые решения для нестационарной коагуляции агрегатов. Построены аналитические решения уравнений одновременного протекания коагуляции и оствальдова созревания кристаллов на заключительной стадии фазового превращения. Найдено решение нестационарного кинетического уравнения коагуляции кристаллов. Построенная теория сопоставлена с экспериментом.

Развита теория отбора устойчивой моды дендритного роста в переохлаждённых расплавах при различной кристаллической симметрии, наличии конвекции и атомной кинетики с учётом двухмерной и трёхмерной геометрии. Выполнено обобщение развитой теории на высокоскоростные процессы кристаллизации, учитывающие гиперболическое уравнение диффузии примеси, а также зависимости наклона ликвидуса и коэффициента распределения примеси от скорости кристаллизации.

Исследована форма вершин дендритных кристаллов. Выведены новые законы для формы дендритов, имеющие предельные переходы к ранее известным ростовым формам. Показано нелинейное влияние небольших добавок примеси и скорости конвективного потока на теорию отбора устойчивого режима дендритного роста - на зависимости диаметра вершин дендритов и скорости их роста от переохлаждения.

Проведены верификации отборного соотношения устойчивой моды дендритного роста с экспериментальными данными в установке электромагнитной левитации кристаллизующихся жидких капель, а также с компьютерными симуляциями роста дендритов методом фазового поля и энтальпийным методом. Разработан метод расчёта времени выхода на стационарный рост дендритных кристаллов.

Развита теория квазистационарной кристаллизации с областью двухфазного состояния вещества для бинарных и трёхкомпонентных соединений при наличии нелинейной фазовой диаграммы. Показано, что учёт непостоянства плотности жидкой фазы существенно изменяют динамические характеристики процесса направленной кристаллизации.

Развита теория одновременного протекания объёмной и направленной кристаллизации при наличии двухфазной области. Найдены распределения температуры и концентрации, а также законы движения границ фазового превращения.

Выведено термодиффузионное уравнение движения фронта кристаллизации для бинарных расплавов – единственное интегродифференциальное уравнение, определяющее динамику границы раздела фаз твёрдое вещество – жидкость. Новое уравнение (граничный интеграл) содержит в себе все ранее известные теории. Теория применена для описания роста неосесимметричных дендритов в форме эллиптических параболоидов. Выполнено обобщение теории граничного интеграла на случай конвекции в жидкой фазе. Выведено и протестировано уравнение годографа для быстрого затвердевания.

Аналитически найдено стационарное решение уравнения коагуляции Смолуховского с инъекцией в виде различных экспоненциально затухающих членов. Последние включают фактор в виде функции степенного закона, который играет решающую роль в формировании устойчивой формы распределения частиц. Получено нестационарное аналитическое решение уравнения коагуляции для экспоненциально затухающего исходного распределения без инъекции. Приближенное нестационарное решение построено путем сшивки начального и конечного (установившегося) распределений. Полученные решения хорошо согласуются с экспериментальными данными для распределений эндоцитированных липопротеинов низкой плотности. Результаты исследований опубликованы в работах.

Создана стохастическая модель для динамики активных белков на поверхности эндосом и процесса окисления, которые управляют слиянием вируса с эндосомой и выходом из эндосомы. Использована хорошо известная модель переключения динамики уровней белков и рассмотрено два случайных процесса: белый гауссовский и пуассоновский шум с нулевым средним. Выведены управляющие уравнения для совместной функции плотности вероятности для эндосомального рН белков. Численно получена предельная плотность, описывающая случайные флуктуации эндосомального рН. Рассчитана вероятность того, что уровень рН внутри эндосомы ниже критического порога, и, таким образом, процент вирусов и рНчувствительных наночастиц, покидающих эндосомы. Результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными о выходе вирусов из эндосом.

Разработана устойчивая модель случайного блуждания для стохастического переноса частиц, включающая самоусиление и состояние покоя с распределенным по Миттаг-Леффлеру временем пребывания. Модель включает систему гиперболических дифференциальных уравнений с нелокальным членом переключения, описываемым производной Римана-Лиувилля. По результатам моделирования методом Монте-Карло, эта модель порождает супердиффузию на промежуточных временах, но возвращается к субдиффузии в асимптотическом пределе для больших времен. Чтобы подтвердить этот результат, мы вывели уравнение для второго момента и обнаружили, что оно является субдиффузионным в пределе больших времен. Также в статье приводится анализ двух более простых моделей, которые демонстрируют доминирование состояния покоя Миттаг-Леффлера, приводящего к субдиффузии. Наблюдение того, что переходная супердиффузия возникает в конечном итоге в субдиффузионной системе, является полезной особенностью для применения в стохастическом биологическом транспорте.

Проведены исследования микроструктуры, фазового состава, распределения компонент и зеренной структуры промышленного силумина особой чистоты. Образцы характеризуются неоднородной скелетообразной структурой, представляющей собой крупные дендриты твердого раствора на основе алюминия, и эвтектическую пластинчатую смесь алюминия и кремния, заполняющую междендритное пространство.

Исследована эволюция микроструктуры эвтектического сплава Sn-Bi, полученного при скоростях охлаждения. Показано, что в эвтектических и доэвтектических сплавах наблюдается безсегментационное затвердевание с начальным составом пересыщенного твёрдого раствора. Показано, что наблюдаемая микроструктура быстро затвердевающих сплавов формируется в процессе распада пересыщенного твёрдого раствора.

Количество свидетельств государственной регистрации программ ЭВМ: 66.

Количество монографий: 3.

Количество учебный пособий: 1.

4.1. *Количество статей в журналах ВАК:* 17.

4.2. *Количество статей в WoS/Scopus:* 464 (из них 167 статей в журналах первого квартиля).

4.3. *Количество проведенных научных конференций/мероприятий:* 6.

4.4. *Количество и объем выигранных научных грантов (тип, название, руководитель):* 41 проект на сумму 406 345 373,00 руб.

4.5. *Количество защит кандидатских и докторских диссертаций членами коллектива:*

- Соловьева Анна Юрьевна, кандидатская диссертация «Структурные и магнитные свойства полидисперсных феррожидкостей: теория и компьютерное моделирование», дата защиты – 15 мая 2019 г. (рук. Е.А. Елфимова)
- Стародумов Илья Олегович, кандидатская диссертация «Математическое моделирование структурно-фазовых превращений модифицированным методом кристаллического фазового поля», дата защиты – 15 мая 2019 г. (рук. Д.В. Александров)
- Канторович Софья Сергеевна, докторская диссертация «Микроструктурные и магнитные свойства феррожидкостей, феррогелей, анизотропных и анизометричных магнитных коллоидов», дата защиты – 28 мая 2019 г. (конс. А.О. Иванов)
- Титова Екатерина Александровна, кандидатская диссертация «Динамика межфазных границ в процессах кристаллизации расплавов: теория и моделирование», дата защиты – 23 октября 2020 г. (рук. Д.В. Александров)
- Торопова Любовь Валерьевна, кандидатская диссертация «Математическое моделирование устойчивой моды дендритного роста при различных условиях кристаллизации», дата защиты – 23 октября 2020 г. (рук. Д.В. Александров)
- Башкирцева Ирина Адольфовна, докторская диссертация «Нелинейные стохастические системы в зонах порядка и хаоса: математическое моделирование, анализ и управление», дата защиты – 18 ноября 2020 г.
- Мусихин Антон Юрьевич, кандидатская диссертация «Реологические свойства жидких и мягких магнитных полимеров», дата защиты – 14 сентября 2021 г. (рук. А.Ю. Зубарев)
- Маковеева Евгения Васильевна, кандидатская диссертация «Математическое моделирование роста кристаллов на промежуточной и заключительной стадиях фазового превращения», дата защиты – 03 декабря 2021 г. (рук. Д.В. Александров)
- Амбаров Александр Васильевич, кандидатская диссертация «Математическое моделирование динамических свойств ансамбля взаимодействующих суперпарамагнитных частиц», дата защиты – 14 декабря 2022 г. (рук. Е.А. Елфимова)