

Математическое моделирование физико-химических процессов и механика сплошных сред.

В это направление входят следующие школы и лаборатории:

Научная школа д.ф.-м.н., профессора, академика АН РБ Шагапова В.Ш. «Динамика многофазных сред в атмосфере». Куратор: академик РАН Р.И. Нигматулин (Москва).

Лаборатории:

«Математическое моделирование полимеризационных процессов и численное решение обратных задач химической физики». Научный руководитель - к.ф.-м.н., доцент Гайсин Ф.Р.

«Электрические явления в полимерных материалах». Научные руководители - к.ф.-м.н., доцент Пономарев А.Ф., д.ф.-м.н., проф. Лачинов А.Н.

«Динамика многофазных сред в атмосфере». Научный руководитель - д.ф.-м. н., академик АН РБ Шагапов В.Ш.

«Дифференциальные уравнения, численные методы и оптимизация нелинейных процессов». Научный руководитель - к.ф.-м.н., доцент Чудинов В.В.

Совместная научно-исследовательская лаборатория института органической химии УФИЦ РАН и БФ БашГУ «Математическое моделирование полимеризационных процессов и решение обратных задач химической физики» создана в 1998 году с целью численного решения обратных задач релаксационной спектроскопии и моделирования процессов радикальной и ионно-координационной полимеризации.

Основные задачи

Разработка алгоритмов и программного обеспечения для численного решения обратных задач релаксационной спектроскопии.

Использование моделей дискретных преобразований входных аргументов при решении некорректно поставленных задач химической физики.

Создание математических моделей полимеризационных процессов.

Применение метода Монте-Карло для описания кинетики полимеризации.

Численное решение обратной задачи молекулярно-массового распределения.

Учет диффузионного контроля кинетики полимеризации.

Научно-исследовательская лаборатория «Динамика многофазных сред в атмосфере» создана в рамках Проблемной лаборатории БФ БашГУ при АН РБ для изучения динамики распространения в атмосфере различных выбросов, представляющих многофазные смеси. На базе исследований под руководством академика Шагапова В.Ш. в Республике Башкортостан (РБ) заложено новое научное направление в области экологической механики.

Основные задачи.

Для большинства городов РБ с развитой химической промышленностью

(к таковым относятся большинство городов РБ) являются экологические проблемы, связанные с распространением атмосферных выбросов при различных аварийных ситуациях, а также террористических актах. При этом динамика распространения таких выбросов зависит от сезонных и погодных условий, а также от состава выбрасываемых смесей. Закономерности эволюции таких систем могут быть описаны уравнениями механики сплошных сред, учитывая различные физико-химические процессы для конкретных ситуаций. Эти опасные техногенные явления требуют исследования механизма процесса и разработки специальных моделей переноса примесей в окружающем пространстве. Сотрудники лаборатории работают по развитию методов волновой динамики жидкостей и газов, содержащих двухфазные зоны, гидродинамики атмосферных процессов, связанных с распространением и накоплением различных выбросов, численных методов газовой динамики и их приложений для изучения атмосферных выбросов. Актуальным направлением деятельности является исследование газогидратов.

Научно-исследовательская лаборатория «Дифференциальные уравнения, численные методы и оптимизация нелинейных процессов» создана в рамках Проблемной лаборатории БФ БашГУ при АН РБ для проведения фундаментальных научно-исследовательских работ в области дифференциальных уравнений, численных методов и оптимального управления, применения полученных результатов в различных областях знаний, создания и развития информационной базы исследований.

Основные задачи

Разработка и исследование математических моделей нелинейных процессов нагрева с ограничениями на растягивающие и сжимающие термонапряжения, на максимальную температуру и с учетом прочностных характеристик от температуры, моделей описывающих динамические процессы в биологии, медицине и т.д., в частности процессы описываемые дифференциальными уравнениями типа Навье-Стокса, исследование вопросов управляемости полученных моделей.

Разработка аналитических и численных методов решения нелинейных задач тепломассообмена.

Разработка алгоритмов вычислений методом конечных элементов:

- а) разбиение на конечные элементы;
- б) методы решения больших разреженных систем.

Разработка численных методов решения задач оптимального управления:

- а) задач линейного быстродействия,
- б) задач линейного быстродействия с фазовыми ограничениями,
- в) нелинейных задач оптимально управления.

Разработка прикладных программ для решения задач оптимального нагрева с фазовыми ограничениями (ограничения на термонапряжения, на максимальную температуру, на температурный градиент), для решения задач

регенерации, опухолевых процессов и метастазирования.

Совместная лаборатория «Электрические явления в полимерных материалах» организована Институтом физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН и БФ БашГУ.

Создание совместной лаборатории электрических явлений в полимерных материалах имеет следующие цели: ускоренного развития фундаментальных и прикладных исследований в приоритетных направлениях физики конденсированного состояния вещества и химической физики, повышения эффективности научных исследований, ускорения внедрения результатов исследований в народное хозяйство Республики Башкортостан.

В совместной лаборатории развивается современное научное направление: электрические явления в полимерных материалах, которое находится на стыке физики конденсированного состояния и химической физики. Полимерные низкоразмерные системы имеют особенности в механизмах переноса заряда, которые обусловлены большими коэффициентами электрон-фононного взаимодействия, показателями электрон-ядерной релаксации, что обуславливает большую мобильность их электронных свойств. В частности, таких, как нелинейная электропроводность, низкая энергия электронного сродства, нелинейные оптические свойства и др.

Исследование этих эффектов, выявление их физических закономерностей может способствовать построению физической модели явления, отсутствующей до сих пор даже для традиционного эффекта “переключения”, что имеет большие перспективы для практического использования в устройствах коммутации электрических сигналов, термических датчиках и т.д.

Основные задачи:

Проведение фундаментальных научно-исследовательских работ в области физики конденсированного состояния и химической физики, создание новых материалов с уникальными физико-механическими и электрическими свойствами и исследование связанных с ними новых физических эффектов.

Координация и объединение усилий для поддержки и развития опытно-экспериментальной базы и методологии исследований в области физики конденсированного состояния, разработки и внедрения новых методов исследования электронного состояния твердых тел.

Создание и развитие информационной базы исследований - разработка пакетов прикладных программ, издание учебных и методических пособий, в том числе электронных, монографий и сборников научных статей, базирующихся на результатах исследований и методологических разработках сотрудников совместной лаборатории электрических явлений в полимерных материалах.