

АННОТИРОВАННЫЙ ОТЧЕТ

по годовому этапу научно-исследовательской работы № 2951 в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности по Заданию № 2014/107 за 2015 год

- 1. Тема:** Структурообразование серных композитных материалов: феноменологические и квантовомеханические модели
- 2. Номер государственной регистрации:** 114050840004
- 3. Руководитель:** Королев Евгений Валерьевич
- 4. Организация-исполнитель:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Московский государственный строительный университет»
- 5. Телефон руководителя:** 84991880400
- 6. Электронная почта руководителя:** grishinaan@mgsu.ru
- 7. Интернет-адрес (URL):** www.mgsu.ru
- 8. Сроки проведения:**
 - начало: 01.01.2015
 - окончание: 31.12.2015
- 9. Наименование годового этапа:** Квантовохимическое моделирование ансамблей атомов серы. Устойчивость ансамблей.
- 10. Плановое финансирование (рублей):**
 - проведения годового этапа: 3 017 200,00 руб.
- 11. Фактическое финансирование (рублей):**
 - проведения годового этапа: 3 017 200,00 руб.
- 12. Коды темы по ГРНТИ:** 31.01.77 31.15.03 29.19.24
- 13. Приоритетное направление:** Индустрия наносистем и материалов
- 14. Критическая технология:** Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий.
- 15. Полученные научные и (или) научно технические результаты:** 1. С использованием метода частиц выполнено феноменологическое моделирование процессов, протекающих в серной композиции. На основе анализа серной композиции как дисперсной системы с протекающими одновременно процессами коагуляции диспергирования получены модели диспергирования в форме обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. С использованием приближенных аналитических методов найдены частные решения уравнений диспергирования, исследовано поведение частных решений в зависимости от уровней управляющих рецептурно-технологических переменных (вязкость и поверхностное натяжение расплава серы, краевой угол смачивания). Полученные результаты в части кинетики межчастичного расстояния для лиофильных систем согласуются с положением о преобладающем характере процесса диспергирования. На основе анализа предельных выражений для кинетики кинетики межчастичного расстояния выявлено, что для лиофильных дисперсных систем образование агрегатов частиц наполнителя термодинамически невыгодно. Выполнена экспериментальная

проверка полученных приближенных аналитических зависимостей. Показано соответствие эмпирических и теоретических зависимостей. 2. Рассмотрены ключевые вопросы программной реализации алгоритмов метода частиц. Результаты анализа свидетельствуют, что ограничение множества целевых вычислительных платформ, позволяя ускорить процесс разработки, в дальнейшем приводит к смене архитектуры прикладного программного обеспечения и необходимости полного рефакторинга исходного кода. Разработанное авторами настоящего отчета прикладное программное обеспечение имеет модульную архитектуру и функционирует как на платформах Windows (NT 4.0 и выше), так и на наиболее распространенных POSIX-платформах (Linux, FreeBSD, Solaris). 3. Для квантово-химического исследования молекулярных кристаллов серы предложено использовать метод ортогональных плоских волн, позволяющий выполнять численный анализ электронной структуры конденсированных сред для периодических граничных условий. Предложено выражение для вероятности перехода между состояниями в эвристике метода имитации отжига. На основе анализа информационных источников сделано заключение о целесообразности использования предобусловленного метода сопряженных градиентов в сочетании с алгоритмами явной оптимизации для исследования ассоциатов, образованных атомами серы. Выявлено, что для получения всех компонент результата действия гамильтониана на волновую функцию в пространстве обратных длин достаточно выполнения трех преобразований Фурье, которые могут быть реализованы программно с использованием библиотеки динамической компоновки, использующей для ускорения вычислений ресурсы графических процессоров. Выполнен анализ возможностей коммерческих и открытых прикладных программных инструментов решения задач квантовой химии. Обозначена общая схема использования инструмента GAMESS. 4. Предложена архитектура распределенной функциональной аппаратно-программной платформы решения задач квантовой химии, на практике позволяющей перераспределить совокупные затраты ресурсов таким образом, который не только сокращает время решения повседневных задач, но и способствует интеллектуальному развитию пользователей, а также согласуется с подходом, который был обозначен в Распоряжении Правительства РФ от 17.12.2010 г. Для реализации платформы использованы только базовые средства POSIX-окружения, что не только повышает портируемость реализации, но и переводит требования к администрирующему персоналу из разряда моторных навыков в интеллектуальную сферу. Разработанная платформа эксплуатируется в тестовом режиме на высокопроизводительном вычислительном оборудовании НИУ МГСУ, оборудовании двух структурных подразделений НИУ МГСУ и одной удаленной серверной ферме. 5. Для пятнадцати пространственных конфигураций атомных кластеров и молекулярных кристаллов серы, основанных на результатах исследований с 1935 по 1995 гг., выполнено численное квантово-химическое исследование электронной структуры, колебательных мод и внутренних напряжений. С использованием теоретико-групповых методов найдены абсорбционные ИК-моды и моды комбинационного рассеяния, полученные результаты согласуются с экспериментальными зависимостями комбинационного сдвига. Численные квантово-химические расчеты с периодическими граничными условиями позволили найти тензоры главных напряжений. Выявлено, что для стабильных конфигураций молекулярных кристаллов серы значения механических напряжений в кристалле находятся на интервале (3,8;4,7) ГПа. Для стабильной конфигурации молекулярного кристалла серы выполнена визуализация электронной плотности. 6. Результаты экспериментальных исследований, выполненных на отчетном этапе, вошли в состав научно-квалификационной работы – диссертации на соискание ученой степени к.т.н. 05.23.05 «Сероасфальтобетон, модифицированный комплексной добавкой на основе технической серы и нейтрализаторов эмиссии токсичных газов». Диссертация успешно защищена 02.10.2015 на заседании диссертационного совета Д212.184.01.

16. Полученная научная и (или) научно-техническая продукция: При выполнении отчетного этапа работ получены результаты интеллектуальной деятельности – программы для ЭВМ «Синтаксический анализатор программы обработки изображений» (свидетельство №2015619456, приоритет 10.07.2015), «Модуль анализа структуры изображений методом иерархической декомпозиции» (свидетельство №2015619457, приоритет 10.07.2015), «Модули пакетной консолидации и анализа установочной информации» (свидетельство №2015619494, приоритет

2015619494). РИД имеет перспективы использования при решении задач разработки композиционных материалов на различных связующих. Разработанная и реализованная при выполнении отчетного этапа настоящей НИР и второго этапа НИР «Теоретико-экспериментальный подход к решению задач динамики строительных конструкций» (№ гос. рег. 114101440009) функциональная аппаратно-программная платформа – распределенная гетерогенная вычислительная среда моделирования – не имеет аналогов и может быть использована как в задачах eScience, так и в образовательной деятельности. Результаты информационного поиска и теоретико-экспериментальных исследований использованы при подготовке учебных пособий «Оптимизация и моделирование в материаловедении» и «Основы научных исследований» для студентов магистратуры очной формы обучения направления подготовки 08.04.01 Строительство.

17. Ключевые слова и словосочетания, характеризующие результаты (продукцию): молекулярный кристалл, электронная структура, теория функционала плотности, атомный кластер, структурообразование, композит

18. Наличие аналога для сопоставления результатов (продукции): В части реализации аналогами разработанного программного обеспечения являются синтаксические анализаторы алгоритмических языков общего назначения, в части функциональности – синтаксический анализатор программного обеспечения GIMP. В части прикладного окружения аналогами разработанной функциональной аппаратно-программной платформы являются nanoHub (<http://nanohub.org/>), unihub – Технологическая платформа программы «Университетский кластер» (<https://unihub.ru>), nanoModel.ru – Виртуальный лабораторный практикум «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях» (<https://nanomodel.ru/>); в части отдельных задач – МИТП CLAVIRE (Бухановский А.В., Васильев В.Н., Виноградов В.Н., Смирнов Д.Ю., Сухоруков С.А., Яппаров Т.Г. CLAVIRE: перспективная технология облачных вычислений второго поколения // Известия вузов. Приборостроение. 2011. № 10(54). С. 7-13); в целом комплекс характеристик разработанной функциональной аппаратно-программной реализован впервые.

19. Преимущества полученных результатов (продукции) по сравнению с результатами аналогичных отечественных или зарубежных НИР:

- а) по новизне: отдельные результаты не новы
- б) по широте применения: в рамках организации или предприятия
- в) в области получения новых знаний: в области получения новых знаний (для фундаментального научного исследования)

20. Степень готовности полученных результатов к практическому использованию (для прикладного научного исследования и экспериментальной разработки): выполнен прототип (установки, методики, системы, программы и т.д.)

21. Предполагаемое использование результатов и продукции: Полученные на отчетном этапе результаты моделирования структурообразования на уровне микроструктуры, анализа электронной структуры и колебательных мод атомных кластеров и молекулярных кристаллов будут использованы при формулировке основных положений теории структурообразования композитных материалов с серной матрицей. Разработанная функциональная аппаратно-программная платформа реализована и эксплуатируется при решении строительных задач численного анализа на высокопроизводительном вычислительном оборудовании НИУ МГСУ, оборудовании двух структурных подразделений НИУ МГСУ и одной удаленной серверной ферме. Разработанное программное обеспечение используется для обработки результатов эмпирических исследований, выполняемых сотрудниками научно-образовательного центра «Наноматериалы и нанотехнологии» НИУ МГСУ. Разработанные учебные пособия используются в учебном процессе по дисциплинам, закрепленным за научно-образовательным центром «Наноматериалы и нанотехнологии».

22. Форма представления результатов: 1. Научно-технический отчет по 2 этапу НИР «Структурообразование серных композитных материалов: феноменологические и

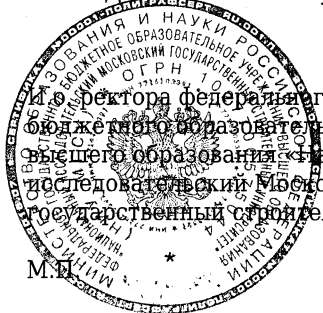
квантовомеханические модели». 2. Учебные пособия «Оптимизация и моделирование в материаловедении» и «Основы научных исследований» для студентов магистратуры очной формы обучения направления подготовки 08.04.01 Строительство. 3. Три статьи в изданиях, индексируемых системами WoS и Scopus. 4. Две статьи в сборниках трудов международных конференций. 5. Свидетельства о регистрации программ ЭВМ RU 2015619456, 2015619457, 2015619494. 6. В ходе выполнения работ по этапу исполнителем защищена диссертация на соискание ученой степени к.т.н. 05.23.05 «Сероасфальтобетон, модифицированный комплексной добавкой на основе технической серы и нейтрализаторов эмиссии токсичных газов».

23. Использование результатов в учебном процессе: использование в преподавании существующих дисциплин

24. Предполагаемое развитие исследований: В соответствии с календарным планом полученный теоретико-эмпирический материал, включающий аналитический обзор и результаты моделирования электронной структуры изолированных молекул, атомных кластеров и молекулярных кристаллов серы, будет использован при формулировке основных положений теории структурообразования композитных материалов с серной матрицей. По завершению периода тестовой эксплуатации функциональной аппаратно-программной платформы решения задач eScience в открытом доступе на ресурсах ГР ЦКП НИУ МГСУ и НОЦ НТ НИУ МГСУ будет размещена как общая информация о платформе, так и подробные руководства по ее разворачиванию и эксплуатации. Результаты исследований будут использованы при подготовке научно-квалификационных работ «Иерархическое моделирование строительных композитов в гетерогенной вычислительной среде» и «Бессеточные методы численного анализа задач строительной аэроупругости в гетерогенной вычислительной среде».

25. Количество сотрудников, принимавших участие в выполнении работы и указанных в научно-технических отчетах в качестве исполнителей приведено в приложении №1

26. Библиографический список публикаций, отражающих результаты научно-исследовательской работы приведен в приложении №2



Исполнитель: директор федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Московский государственный строительный университет»

М.П.


(подпись)

Е.В. Королев

Руководитель проекта


(подпись)

Е. В. Королев