Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Российская академия наук

Воронежский государственный технический университет

Федеральный исследовательский центр проблем
химической физики и медицинской химии РАН

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ**

**XXV Международный семинар**

**(Воронеж, 24-25 ноября 2023 г.)**

**ПРОГРАММА**

Воронеж 2023

**ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

И.Л. Батаронов (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *председатель*

Г.Е. Шунин (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*

В.В. Пешков (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *ответственный секретарь*

С.А. Кострюков (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *ученый секретарь*

В.Ф. Селиванов (ВГТУ, г. Воронеж, Россия)

О.А. Дорохова (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *секретарь*

**ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ**

К.В. Боженко (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия), *председатель*

А.С. Сигов (МИРЭА, г. Москва, Россия), *сопредседатель*

С.Д. Кургалин (ВГУ, г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*

В.Н. Нечаев (ВУНЦ ВВС ВВА, г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*

Е.Г. Андреева (ОмГТУ, г. Омск, Россия)

В.Н. Глазнев (ВГУ, г. Воронеж, Россия)

В.В. Гречихин (ЮРГПУ(НПИ), г. Новочеркасск, Россия)

Е.Г. Григорьев (ИСМАН, г. Черноголовка, Россия)

Дж. Зеббар (Университетский Центр г. Тиссемсильта, Алжир)

А.С. Зюбин (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия)

Т.С. Зюбина (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия)

С.Ю. Князев (ДГТУ, г. Ростов-на-Дону, Россия)

С.И. Курганский (ВГУ, г. Воронеж, Россия)

А.В. Пашковский (НТИ (филиал) СКФУ, г. Невинномысск, Россия)

Ю.Г. Смирнов, (УГТУ, г. Ухта, Россия)

Ю.М. Чувильский (МГУ, г. Москва, Россия)

В.А. Шунина (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *ученый секретарь*

**Адрес Оргкомитета**

394026, Воронеж, Московский проспект, 14,
Воронежский государственный технический университет (ВГТУ),
кафедра высшей математики и физико-математического моделирования
Тел.: (473) 246-42-22

e-mail: **vmfmm.kaf@cchegeu.ru
 vmfmm@mail.ru**

URL: [**https://fmms.cchgeu.ru/**](https://fmms.cchgeu.ru/)

ПЛАН РАБОТЫ СЕМИНАРА

Ввиду неблагоприятной эпидемиологической обстановки семинар проводится в заочной форме.

Присланные доклады будут выставлены на сайте семинара [**https://fmms.cchgeu.ru/**](https://fmms.cchgeu.ru/) с 24.11.23 по 31.12.23.

Возможно обсуждение докладов в режиме видеозвонков Mail.ru или иным способом по договоренности, электронные адреса авторов можно найти в тексте доклада.

В рамках семинара с 24.11.2023 по 31.12.2023 будет проводиться конкурс аспирантских и студенческих докладов, представленных на семинаре.

**Секция 1**

**Моделирование физических процессов
в конденсированных средах**

Председатели: Батаронов И. Л., Нечаев В. Н.

1. Иванов Н.А., Крючков С.В., Кухарь Е.И. Флоке-спектр дираковского кристалла в поле линейно поляризованной кноидальной волны (ВолгГТУ, ВГСПУ, Волгоград)
2. Нечаев В.Н., Шуба А.В., Неудахин Е.Ю., Гаврилов К.Н. Об энергии межфазной границы в ферроиках (ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
3. Нечаев В.Н., Шуба А.В., Кузнецов М.В., Евстратов А.А. Влияние размерных эффектов на ширину температурного гистерезиса в сегнетоэлектриках (ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
4. Крючков С.В., Кухарь Е.И., Тарасов В.В. Эффект увлечения носителей заряда кноидальной волной в полупроводниковой сверхрешетке (ВолгГТУ, ВГСПУ, Волгоград)
5. Абрамов В.С. Особенности электронных и дырочных состояний активных нанообъектов в новых материалах с фрактальной структурой (ДонФТИ, Донецк)
6. Конобеева Н.Н., Бумагин В.В. Влияние пространственной неоднородности плотности углеродных нанотрубок в полимерной матрице на распространение световых пуль (ВолГУ, Волгоград)
7. Белибихин С.В., Конобеева Н.Н. Электромагнитные импульсы в среде с анизотропными свойствами и многофотонное поглощение (ВолГУ, Волгоград)
8. Батаронов И.Л., Надеина Т.А. Макроскопические характеристики дислокационного скопления (ВГТУ, Воронеж)
9. Дорохова О.А., Батаронов И.Л., Ююкин Н.А. О температурном скачке на термоэлектрическом элементе в ламинарном потоке (ВГТУ, Воронеж)
10. Дорохова О.А. Моделирование теплообмена с термоэлектрическим элементом в турбулентном потоке в рамках k-w моделей (ВГТУ, Воронеж)
11. Батаронов И.Л., Бородкин С.В., Иванов А.В., Ряжских В.И. Моделирование теплопереноса в сверхкритическом потоке методом характеристик (ВГТУ, ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
12. Селиванов Г.В., Батаронов И.Л., Булков А.Б., Селиванов В.Ф. Моделирование процесса восстановления пластичности поверхностного слоя титана в условиях автовакуумного отжига (ВГТУ, Воронеж)
13. Селиванов Г.В., Батаронов И.Л., Булков А.Б., Селиванов В.Ф. Моделирование процесса формирования газонасыщенного слоя в контактном зазоре при диффузионной сварке титана в зависимости от условий нагрева (ВГТУ, Воронеж)

Секция 2

Моделирование систем многих частиц

Председатели: Боженко К.В., Кургалин С.Д.

1. Баранов Н.И., Багрий Е.И., Сафир Р.Е., Чередниченко А.Г., Боженко К.В., Максимов А.Л. Квантово-химическое иссле­дование получения алкил- и алкениладамантанов методом ионного алкилирования олефинами (ИНХС РАН, РУДН, Москва)
2. Боженко К.В., Утенышев А.Н., Куличенко М.Б. Квантово-химическое изучение молекулярных электридов в виде дефектных элементарных ячеек щелочноземельных оксидов (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка; Utah State University, Logan, Utah)
3. Пугачев А.Д., Ткачев В.В., Шилов Г.В.,Ожогин И.В., Козленко А.С., Дмитриев В.С., Алдошин С.М. Оценка межатомных взаимодействий в кристаллах спиропиранов (ЮФУ, Ростов-на-Дону; ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка)
4. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Писарев Р.В., Писарева А.В., Добровольский Ю.А. Строение и стабильность гидратированных и сульфатированных комплексов оловянной кислоты: квантово-химическое моделирование (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка)
5. Зюбина Т.С., Зюбин А.С., Истакова О.И., Талагаева Н.В., Воротынцев М.А., Конев Д.В. C-C-сопряжение полимерных цепей в тонких пленках окисленного полипиррола, допированного анионами BF4- и PF6-. Квантово-химическое моделирование (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка; ИФХЭ РАН, Москва)
6. Кулаковская С.И., Зюбина Т.С, Зюбин А.С., Куликов А.В., Добровольский Ю.А. Квантово химическое исследование электрокаталитических систем: 2,5-ди-Me-пиразин-ди-N-оксид - третичный бутиловый спирт - углеродные нанотрубки (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка)
7. Виляев Л.О., Завьялов Д.В., Поликарпова А.Г. Моделирование PPS методом классической молекулярной динамики с помощью силового поля ANI2x (ВолгГТУ, Волгоград)
8. Уфлянд И.Е., Жинжило В.А., Утенышев А.Н., Боженко К.В., Ткачев В.В. Моделирование химических процессов в условиях гидро- и сольвотермальных синтезов (ЮФУ, Ростов-на-Дону; ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка)
9. Завьялов Д.В., Каретникова Д.О., Конченков В.И., Шеин Д.В. Вычисление потенциала межатомного взаимодействия в фосфорене с использованием сверточной нейронной сети SchNet (ВолгГТУ, ВГСПУ, Волгоград)
10. Стебенькова Н.А., Стебеньков А.М. ИК-спектр каркасных алициклических углеводородных наноструктур с локальными внутриобъемными дефектами замещения (ВолГУ, ВолгГМУ, Волгоград)
11. Щенухина А.С., Русакова Н.П. Квантово-химическое моделирование замещённых 2-оксопиррола и 2-оксопирро­линила (ТвГУ, Тверь)
12. Кофейникова А.М., Ворончихина Л.И. Четвертичные соли N-метилморфолиния (ТвГУ, Тверь)
13. Тимошенко Ю.К., Деста О.Г. Алгоритм и параллельный компьютерный код для расчета плотности колебательных состояний металлических нанокристаллов в рамках модели Саттона-Чена (ВГУ, Воронеж; колледж Май-Нефхи, Асмара, Эритрея)
14. Манякин М.Д., Курганский С.И. Моделирование электронного строения и спектров рентгеновского поглощения нанопленок диоксида олова (ВГУ, Воронеж)
15. Гараев В.М., Завьялов Д.В. Вычисления физических характеристик молекулярных орбиталей с использованием GAMESS (ВолгГТУ, Волгоград)
16. Борщ Н.А., Переславцева Н.С., Максимова Е.И., Курганский С.И. Компьютерный эксперимент по моделированию атомной структуры и электронных свойств многослойных эндокластеров на основе сурьмы (ВГТУ, ВГУ, Воронеж)
17. Борщ Н.А., Переславцева Н.С., Максимова Е.И., Курганский С.И. Анализ современных DFT-функционалов для задач по поиску стабильных структур эндокластеров на основе элементов IV группы (ВГТУ, ВГУ, Воронеж)

**Секция 3**

**Моделирование технических и геофизических систем**

Председатели: Глазнев В.Н., Шунин Г.Е.

1. Береславский Э.Н. О фильтрации в некоторых задачах подземной гидродинамики (СПбГУ ГА, Санкт-Петербург)
2. Боева А.В., Клинских А.Ф. Осцилляции запутанности для многокубитовых систем (ВГУ, Воронеж)
3. Стариков В.С., Глазнев В.Н. Моделирование стационарного магнитного поля внутри прямошовной стальной трубы (ВГУ, АО ППТР «ПЁТР», Воронеж)
4. Иванов В.Р., Бакирова Р.Б., Рябков Е.Д. Моделирование процесса разложения органических соединений плазмой тлеющего разряда в среде водных растворов электролита (РТУ МИРЭА, Москва)
5. Шунин Г.Е., Кудряш А.А., Кострюков С.А., Пешков В.В., Шунина В.А. Компьютерное моделирование мезоскопических сверхпроводящих левитационных систем (ВГТУ, Воронеж)
6. Камалова Н.С., Лисицын В.И., Матвеев Н.Н., Евсикова Н.Ю. Моделирование динамики изменения скорости движения растворов солей по заболони стволов деревьев (ВГЛТУ им. Г.Ф. Морозова, Воронеж)
7. Смирнов Ю.Г., Ивенина И.В. Нечетко-множественное моделирование процесса электролизной подготовки рабочего раствора с наночастицами магнетита (УГТУ, Ухта)
8. Сушко Т.И., Ильинский С.В., Пашнева Т.В. Определение дефектных мест системы питания отливки посредством компьютерного моделирования (ВУНЦ ВВС «ВВА», ВГТУ, Воронеж)
9. Сушко Т.И., Кожемякин А.Е., Пашнева Т.В. Оптимизация системы питания отливки путем компьютерного моделирования (ВУНЦ ВВС «ВВА», ВГТУ, Воронеж)
10. Бирюков М.И., Шалимов Ю.Н., Хвостов А.А., Соболева Е.А. Предиктивная модель эволюции деформаций в зоне электродуговой сварки (ООО НПП "Измерон-В", ВГТУ, Воронеж)
11. Хвостов А.А., Иванов А.В., Журавлев А.А., Григорьев А.А. Автоматизированный расчет вязкости смесей азота и кислорода на линии насыщения (ВГТУ, ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
12. Хвостов А.А., Ряжских В.И., Иванов А.В., Журавлев А.А. Оценка диссипативных тепловыделений при течении термовязкой жидкости в кольцевом зазоре ротационного вискозиметра (ВГТУ, ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
13. Сушко Т.И., Кожемякин А.Е., Пашнева Т.В. Моделирование движения БПЛА малого радиуса действия в свободном пространстве (ВУНЦ ВВС «ВВА», ВГТУ, Воронеж)

**Секция 4**

**Математическое, программное и методическое
обеспечение систем компьютерного моделирования**

Председатели: Кострюков С.А., Пешков В.В.

1. Абдурагимов Г.Э. О существовании положительного решения краевой задачи для одного нелинейного функционально-дифференциального уравнения второго порядка с интегральным граничным условием (ДГУ, Махачкала)
2. Бирюкова И.П. Программно-информационный комплекс для моделирования электромагнитных волн в различных средах (ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
3. Глазнев В.Н., Семенов В.Е., Стариков В.С. Имитационное моделирование магнитной съемки с легкими БПЛА при решении задач инженерной геофизики (ВГУ, АО ППТР «ПЁТР», Воронеж)
4. Корыпаева Ю.В., Кузнецова Л.Д. Моделирование с помощью метода анализа иерархий в задаче оценивания конкурсных или проектных работ курсантов военных вузов (ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
5. Корыпаева Ю.В., Кузнецова Л.Д. Моделирование с помощью метода анализа иерархий в задаче назначения командира в группе курсантов военного вуза (ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
6. Полев В.А., Лимонов Н.А. О выборе оптимального пути контроля работоспособности сложной системы (ВУНЦ ВВС «ВВА», Воронеж)
7. Рочева М.Г., Фомин Д.А. Оптимизация технологических процессов методами сетевого планирования и управления (УГТУ, Ухта)
8. Сырых А.С., Усков Д.Г. Разрешимость линейных уравнений в банаховом пространстве и спектральный радиус вектора (ВГТУ, Воронеж)
9. Ускова Н.Б., Шелковой А.Н. Дифференциальные операторы с возмущением оператором ранга один (ВГТУ, Воронеж)
10. Шеин Д.В., Завьялов Д.В., Конченков В.И. Метод эффективного набора данных для обучения нейронных сетей в задаче восстановления межатомного потенциала (ВолгГТУ, Волгоград)
11. Борзунов С.В., Романов А.В., Кургалин С.Д., Петрищев К.О. Решение ресурсоемких задач с помощью библиотек высокопроизводительных вычислений языка Python (ВГУ, Воронеж)
12. Кургалин С.Д., Борзунов С.В. Разработка учебно-методического комплекса по квантовым вычислениям (ВГУ, Воронеж)