

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича



ЗАТВЕРДЖЕНО:

Директор ІПМ НАН України

Академік НАН України

Ю.М. Солонін
Солонін Ю.М.

СХВАЛЕНО:

Вченою радою ІПМ НАН України

Протокол № 4 від 28.09.2021р.

СИЛАБУС

з навчальної дисципліни

« МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНОГО

МОДЕЛЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ ТА ПРОЦЕСІВ »

складається в межах ОПН підготовки доктора філософії

третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти

для здобувачів за спеціальностями

102 Хімія, 132 Матеріалознавство,

105 Прикладна фізика та наноматеріали

1. Загальна характеристика курсу

Назва дисципліни	Методи комп'ютерного моделювання матеріалів та процесів
Адреса викладання дисципліни	вул. Кржижановського, 3, Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України, Київ, 03142, Україна
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 «Природничі науки» - 102 «Хімія», 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» 13 «Механічна інженерія» - 132 «Матеріалознавство»
Викладачі дисципліни	д. т. н., член-кор. НАН України, ст. наук. сп. Штерн Михайло Борисович, канд. фіз.-мат. наук, ст. наук. сп. Картузов Валерій Васильович
Контактна інформація викладачів	e-mail: Михайло Штерн <mbsh07@ukr.net> Валерій Картузов <vvk@ipms.kiev.ua>
Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються	В дні лекцій за попередньою домовленістю
Інформація про дисципліну	Дисципліна спрямована на оволодіння теоретичними основами моделювання базових фізико-хімічних процесів одержання нових перспективних матеріалів та їх поведінки екстремальних умовах експлуатації. Розглянуто методи побудови математичних моделей, що базуються на знаннях та даних, методи аналізу математичних моделей та їх ідентифікації, методи комп'ютерної реалізації моделей та організації проведення обчислювального експерименту.
Коротка анотація дисципліни	Дисципліна «Методи комп'ютерного моделювання матеріалів та процесів» є дисципліною за вільним вибором аспірантів зі спеціальності 102 Хімія, 132 Матеріалознавство, 105 Прикладна фізика та наноматеріали для освітньої програми підготовки доктора філософії, яка викладається в Інституті проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України в 2-3 семестрі в обсязі 2 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Мета та цілі дисципліни	Метою і завданням навчальної дисципліни є: здатність розробляти математичні моделі і алгоритми для вирішення наукових та практичних задач; набуття необхідних компетентностей для проведення математичного і комп'ютерного моделювання проблемних питань матеріалознавства, зокрема: побудови, проведення обчислювального експерименту; аналізу та обробки даних натурного та обчислювального експерименту; прийняття оптимальних рішень і проектування нових матеріалів.
Вимоги навчальної дисципліни	Курс є дисципліною за вільним вибором аспірантів. Обсяг курсу – 2 кредити ECTS, 20 год аудиторних занять, з них 16 год лекційних занять, та 4 год практичної роботи (очна форма навчання). Вивчення наукової дисципліни вимагає обов'язкового відвідування аудиторних занять, активну участь в обговоренні питань, якісне і своєчасне виконання завдань самостійної роботи, а також участь у всіх видах контролю.

Підсумкова форма контролю знань	Залік
Очікувані результати навчання	<p><i>Після завершення цього курсу аспірант буде:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Знати та розуміти сучасні методи математичного і комп'ютерного моделювання у конкретних задачах матеріалознавства. 2. Знати та розуміти сучасні методи дослідження математичних моделей та алгоритмів їх реалізації. 3. Знати, розуміти і вміти використовувати спеціальні математичні методи і програмні засоби їх комп'ютерної реалізації для вирішення проблемних питань матеріалознавства.
Ключові слова	Математична модель, алгебраїчні, диференціальні, інтегральні рівняння, чисельні методи, обчислювальний експеримент
Пререквізити	Для вивчення курсу аспіранти потребують базових знань зі спеціальних дисциплін (глибинні знання зі спеціальності) та знань з дисциплін, що розвивають загальнонаукові компетентності, які вивчають на першому та другому році навчання в аспірантурі.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентація, лекції, дискусія, практичні заняття
Необхідне обладнання	Мультимедійне обладнання, ноутбуки, робочі комп'ютерні станції, обчислювальний кластер грід-мережі.

2. План викладання дисципліни

Тема, план	Кількість годин
------------	-----------------

	усього	у тому числі	
		аудиторні	Само- стійна робота
<p>Тема 1. Вступ до методів моделювання властивостей та процесів отримання матеріалів із підвищеними експлуатаційними характеристиками.</p> <p><i>Математичне підґрунтя комп'ютерного моделювання у матеріалознавстві. Векторна алгебра. Гіпотеза континууму. Елементи теорії поля. Тензори напружень та швидкостей деформацій.</i></p>	7	2	5
<p>Тема 2. Теорія визначальних співвідношень у фізиці континууму.</p> <p><i>Про загальну структуру співвідношень між силовими та кінематичними змінними. Елементи реології та термодинаміки. Принципи Онзагера і Циглера. Уявлення про макроскопічні потенціали. Про математичні моделі тепло- і масо переносу та їх узгодження із фазовими та хімічними перетвореннями.</i></p>	7	2	5
<p>Тема 3. Моделі пластичності пористих, порошкових та пошкоджених матеріалів.</p> <p><i>Потенціали пластичності та поверхні навантаження для матеріалів порошкового походження. Теорії пресування виробів із порошків. Зв'язок між тиском та густиною. Критерії стійкості Дракера та Пригожина Розвиток дефектів під час обробки тисненням пористих напівфабрикатів, його прогнозування та методи запобігання. Ауксетики та високопористі матеріали, особливості їх динамічної реакції.</i></p>	7	2	5
<p>Тема 4. Теорії спікання та гарячої обробки тисненням порошкових матеріалів.</p> <p><i>Лінійна та нелінійна течії порошкових матеріалів. Реологічна модель спікання В. В. Скорохода. Еволюція твердої фази під час термо - деформаційної обробки пористих матеріалів. Теорія об'ємно – в'язкої течії М. С. Ковальченка.</i></p>	9	4	5
<p>Тема 5. Техніка побудови математичних моделей.</p> <p><i>Змістовні моделі і визначаючі співвідношення. Подібність і відмінність. Спрощення рівнянь і методи усереднення.</i></p>	7	2	5
<p>Тема 6. Техніка дослідження математичних моделей.</p> <p><i>Аналіз робочих гіпотез. Роль прикидок і вибір ступеня точності. Зовнішня і внутрішня правдоподібність. Прокляття розмірності і геометрія області, на якій вирішуються задачі.</i></p>	7	2	5
<p>Тема 7. Методи побудови та дослідження розв'язання задач.</p> <p><i>Асимптотичний розклад; метод малого параметра, автотельні рішення, узагальнені рішення. З'ясування точності розв'язування і розповсюдженість похибок. Особливості процесу розв'язання змістовних задач.</i></p>	9	4	5
<p>Тема 8. Методи самоконтролю і аналіз типових помилок в моделюванні.</p>	7	2	5

Техніка прикидок. Контроль розмірностей. Про верифікацію моделей. Помилки в виборі метода дослідження.			
--	--	--	--

3. Контроль знань

В основі методів контролю знань використовуються поточне індивідуальне опитування та залік. Залік проводиться на другому році навчання.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за навчальну діяльність	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90-100	-A, A, +A	відмінно
82-89	-B, B, +B	добре
74-81	-C, C, +C	задовільно
64-73	-D, D, +D	
60-63	E	незадовільно з можливістю повторного складання іспиту
35-59	FX	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни
0-34	F	

4. Список базової літератури

1. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения. «Мир», М. 1972.
2. Арфкен Г. Математические методы в физике. Атомиздат, М. 1970.
3. Бабушка И., Витасек Э., Прагер М. /Численные процессы решения дифференциальных уравнений. «Мир», М. 1969.
4. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельком Г.М. Численные методы, М.: Наука, 1987.
5. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред: 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Физматлит, 1994.
6. Вигнер Е. Непостижимая эффективность математики в естественных науках. «Усп. физич. наук», 1968.
7. Дьяченко В.Ф. Основные понятия вычислительной математики. «Наука», М. 1972.
8. Дюво Г., Лионс Ж.-Л. Неравенства в механике и физике. – М.: Наука, 1980.
9. Зельдович Я.Б., Мышкин А.Д. Элементы прикладной математики. «Наука», М. 1972.
10. Зельдович Я.Б., Мышкин А.Д. Элементы математической физики. Среда из невзаимодействующих частиц. «Наука», М., 1973.
11. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. М.: Л.:Физматгиз, 1962.
12. Кларк Т. Компьютерная химия. – М.: Мир. – 1990.
13. Князева Е.Н., Курдюмов С.П. Основания синергетики: режимы с обострением, самоорганизация, темпомиры. Изд-во «Алетейя», СПб., 2002.
14. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. Определения, теоремы, формулы. «Наука», М., 1972.
15. Краснощеков П.С., Петров А.А. Принципы построения моделей. – М.: Изд-во МГУ, 1983.
16. Лацнош К. Практические методы прикладного анализа. «Наука», М., 1961.

17. Математическое моделирование/ Под ред. Дж.Эндрюса, Р. Мак-Лоуна. – М.: Мир, 1979.
18. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. Изд-во Наука, 1973.
19. Митропольский Ю.А. Метод усреднения в нелинейной механике. «Наукова думка», К., 1971.
20. Мышкис А.Д. Элементы теории математических моделей. Изд.4-е, М.: Книжный дом «Либроком», 2009.
21. Покропивный В.В., Роговой Ю.И., Огородников В.В., Лисенко А.А. Атомистическое моделирование материалов. – Киев, Ин-т проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАН Украины, 2008.
22. Рихтмайер Р., Мортон К. Разные методы решения краевых задач. – М.: Мир, 1972.
23. Розенброк Х., Стори С., Вычислительные методы для инженеров – химиков. «Мир», М., 1968.
24. Седов Л.И. Методы подобия и размерности в механике. – 9-е изд. – М.: Наука, 1981.
25. Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики. Н.Н.Анучина, Бабенко К.И., Годунов С.К., Дмитриев Н.А., Дмитриева Л.В., Дьяченко В.Ф., Забродин А.В., Локуциевский О.В., Малиновская Е.В, Подливаев И.Ф., Прокопов Г.П., Софронов И.Д., Федоренко Р.П. Под редакцией К.И. Бабенко. М.: Наука, Главная редакция физ.-мат литературы, 1979.
26. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. Изд-во «Наука», М., 1966.
27. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я., Тимонов А.А. Математические задачи компьютерной томографии. – М.: Наука, 1987.
28. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. Изд-во «Мир», М., 1975.
29. Хемминг Р.В. Численные методы для научных работников и инженеров. Наука, М.: 1968
30. Хорафас Д.Н. Системы и моделирование. «Мир», М.: 1967.
31. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику: учебное пособие: Для вузов. – М.: Изд-во Мос. физ-техн. ин-та, 1994.
32. Эндрюс Дж., Мак-Лоун Р. Математическое моделирование. Изд-во Мир, М., 1979.
33. П. Жермен. Курс механики сплошных сред. – М.: Мир, 1984. – 380 с.
34. В.В. Скороход. Реологические основы теории спекания. – Киев, Наук. Думка, 1972. – 151 с.
35. Ковальченко М.С. Теоретические основы *горячей обработки пористых* материалов *давлением*. — Киев: Наукова думка, 1980. — 240 с.
36. Штерн М. Б., Механічні та комп'ютерні моделі консолідації гранульованих середовищ, Київ – Луцьк: РВВ ЛНТУ, 2010 . – 232с.
37. М.Б. Штерн и др., Феноменологические теории прессования порошков, К., Наукова думка, 1982, 140с.