

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича

ЗАТВЕРДЖЕНО:

В.о. директора ІПМ НАН України

Чл.-кор. НАН України



СХВАЛЕНО

Вченою радою ІПМ НАН України

Протокол № 6 від 24 жовтня 2023 р

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 спеціальністю

10 «Природничі науки» – 102 «Хімія»

1. Загальна характеристика курсу

Назва дисципліни	Методи комп'ютерного моделювання матеріалів та процесів
Адреса викладання дисципліни	вул. Омеляна Пріцака (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»
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 у 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» для освітньої програми підготовки доктора філософії, яка викладається в Інституті проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України в 2 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	<i>Після завершення цього курсу аспірант буде:</i>

навчання	<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 грид-мережі.

2. План викладання дисципліни

Тема, план	Кількість годин		
	усього	у тому числі	
		аудиторні	Само- стійна робота
Тема 1. Вступ до методів моделювання властивостей та процесів отримання матеріалів із підвищеними експлуатаційними характеристиками. <i>Математичне підґрунтя комп'ютерного моделювання у матеріалознавстві. Векторна алгебра. Гіпотеза континууму. Елементи теорії поля. Тензори напружень та швидкостей деформацій.</i>	7	2	5
Тема 2. Теорія визначальних співвідношень у фізиці континууму. <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>	7	2	5
Тема 3. Моделі пластичності пористих, порошкових та пошкоджених матеріалів.	7	2	5

<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>			
Тема 4. Теорії спікання та гарячої обробки тисненням порошкових матеріалів. <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>	9	4	5
Тема 5. Техніка побудови математичних моделей. <i>Змістовні моделі і визначаючі співвідношення. Подібність і відмінність. Спрощення рівнянь і методи усереднення.</i>	7	2	5
Тема 6. Техніка дослідження математичних моделей. <i>Аналіз робочих гіпотез. Роль прикидок і вибір ступеня точності. Зовнішня і внутрішня правдоподібність. Прокляття розмірності і геометрія області, на якій вирішуються задачі.</i>	7	2	5
Тема 7. Методи побудови та дослідження розв'язання задач. <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>	9	4	5
Тема 8. Методи самоконтролю і аналіз типових помилок в моделюванні. <i>Техніка прикидок. Контроль розмірностей. Про верифікацію моделей. Помилки в виборі метода дослідження.</i>	7	2	5

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

Оцінка ECTS	Сума балів за навчальну діяльність	Оцінка за національною шкалою
A	90–100	Відмінно
B	82–89	Добре
C	74–81	
D	64–73	Задовільно
E	60–63	Достатньо
F _x	35–59	Незадовільно з можливістю повторного складання

F	1–34	Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням курсу
---	------	---

4. Список базової літератури

1. *J. H. Ahlberg, E.N. Nilson, J. L. Walsh* The Theory of Splines and Their Applications. - Academic Press, New York, 1967.
2. *George B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris*, Mathematical Methods for Physicists (Seventh Edition), Academic Press, 2012. <https://doi.org/10.1016/C2009-0-30629-7>
3. *Babuska, I., Vitasek, E., Prager, M.* Numerical processes in differential equations. Wiley, New York, 1966.
4. *Duvaut, G. and Lions, J.L.* (1976) Inequalities in Mechanics and Physics. Springer-Verlag, Berlin, New York. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-66165-5>
5. *T. Clark* A Handbook of Computational Chemistry – Wiley, New York, 1985.
6. *Christensen R. M.* Mechanics of Composite Materials. – New York: Wiley-Interscience, 1979. – 348 p. <https://doi.org/10.1002/pol.1980.130181009>
7. *Jones R. M.* Mechanics of Composite Materials. – Boca Raton: CRC Press, 2018. – 538 p. <https://doi.org/10.1201/9781498711067>.
8. *H. H. Rosenbrock, C. Store*, Computational techniques for chemical engineers. Pergamon, 1966. <https://doi.org/10.1016/C2013-0-01841-5>
9. *Mase G. E.* Theory and Problems of Continuum Mechanics, Schaum's Outline Series. – McGraw-Hill, 1970. – 222 p.
10. *Fish, J.*, ed. Multiscale Methods. Bridging the Scales in Science and Engineering. Oxford University Press, 2009, 624 pp.
11. *Bakhvalov, N.S. and Panassenko, G.P.* Upscaling: Averaging Processes in Periodic Media. Kluwer Academic Publishers, 1989.
12. *Kesten H.* Percolation Theory for Mathematicians. — Boston: Birkhauser, 1982.
13. *German RM.* Powder Metallurgy Science. 2nd ed. Princeton N.J: Metal Powder Industries Federation; 1994.
14. *R. Hill* The mathematical theory of plasticity. Oxford university press, 1998, 355 pp.
15. *Штерн М. Б.*, Механічні та комп'ютерні моделі консолідації гранульованих середовищ, Київ – Луцьк: РВВ ЛНТУ, 2010 . – 232с.