



Обчислювальні задачі матеріалознавства

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

1. Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>13 Механічна інженерія</i>
Спеціальність	<i>132 Матеріалознавство</i>
Освітня програма	<i>Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)/змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>IV курс, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>4 кредити ECTS/120 год (36 годин лекцій, 18 годин лабораторних робіт, 66 годин СРС)</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік / МКР</i>
Розклад занять	<i>http://rozklad.kpi.ua/Schedules/ViewSchedule.aspx</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор: к.т.н., доц. Степанов Олег Васильович, ostepanoff@iff.kpi.ua; +380 50 330 68 15; Лабораторні (комп'ютерний практикум): к.т.н., доц. Степанов Олег Васильович, ostepanoff@iff.kpi.ua; +380 50 330 68 15;</i>
Розміщення курсу	<i>Googleclassroom, електронний кампус: https://ecampus.kpi.ua/</i>

2. Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Матеріалознавча наука на сучасному етапі розвитку вимушена суттєво збільшити об'єм та різноманіття спеціальних обчислювальних задач, комп'ютерних моделей та симуляцій, метою яких є пояснення механізмів явищ в матеріалах, прогнозування властивостей матеріалів та їх залежності від складу та структури тощо. Питання комп'ютерного моделювання в матеріалознавстві займають важливе місце, оскільки успішне застосування обчислювальних методів та моделей дозволяє суттєво скоротити кількість натурних експериментів, а значить, і вартість досліджень. Комп'ютерне моделювання застосовується на різних розмірних рівнях, з використанням різних моделей наближення та різних розрахункових механізмів. Зокрема, результати застосування комп'ютерного моделювання знаходять відображення в створенні спеціалізованих періодичних видань в Україні – «Математичні моделі та обчислювальний експеримент в матеріалознавстві» – Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України та у світі – «Computational Materials Science» The Pennsylvania State University та інші.

Дана навчальна дисципліна має метою ознайомлення студентів з сучасними тенденціями застосування комп'ютерного моделювання в матеріалознавстві та технологіях одержання та обробки матеріалів, створити для студентів середовище активного застосування математичних та комп'ютерних моделей.

Предметом вивчення дисципліни є обчислювальні задачі, методи, засоби та результати математичного та комп'ютерного моделювання властивостей матеріалів та технологічних процесів одержання та оброблення матеріалів та виробів.

Метою дисципліни є розвиток та розширення у студентів фахових компетентностей:

- *здатності застосовувати відповідні кількісні математичні, фізичні і технічні методи і комп'ютерне програмне забезпечення для вирішення інженерних матеріалознавчих задач*
- *здатності застосовувати сучасні методи математичного та фізичного моделювання, дослідження структури, фізичних, механічних, функціональних та технологічних властивостей матеріалів для вирішення матеріалознавчих проблем*

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати розвиток таких результатів навчання:

- *Уміння використовувати методи фізичного і математичного моделювання для створення нових і удосконалення існуючих матеріалів, технологій їх виготовлення*
- *Уміння обирати і застосовувати придатні типові методи дослідження (аналітичні, розрахункові, моделювання, експериментальні); правильно інтерпретувати результати таких досліджень та робити висновки*

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Дисципліна викладається у сьомому семестрі підготовки за освітньо-професійною програмою бакалаврів. Для успішного засвоєння дисципліни студент повинен оволодіти набором компетентностей та програмних результатів навчання дисциплін:

- *Вища математика;*
- *Інформатика, обчислювальна техніка, програмування та числові методи;*
- *Методи моделювання та оптимізації;*
- *Механічні властивості матеріалів;*
- *Основи теорії процесів консолідації порошкових матеріалів;*
- *Теорія тепло- та масопереносу.*

Результати вивчення дисципліни можуть бути використанні під час вивчення дисциплін:

- *Основи комп'ютерного дизайну матеріалів;*
- *Виконання курсового проєкту та дипломної роботи (проєкту).*

3. Зміст навчальної дисципліни

Розділ 1. *Розрахункові задачі матеріалознавства*

Тема 1. *Вступ. Імітаційне моделювання технологічних процесів*

Розділ 2. *Загальні засади оцінки властивостей структурно неоднорідних матеріалів.*

Тема 2. *Моделі оцінки механічних характеристик композиційних матеріалів.*

Розділ 3. *Застосування методу скінчених елементів для прогнозування ефективних характеристик структурно неоднорідних матеріалів.*

Тема 3. *Оцінка ефективної теплопровідності пористих матеріалів та матеріалів з включеннями.*

Тема 4. *Розрахунок ефективних механічних властивостей пористих матеріалів та матеріалів з каркасною структурою.*

Розділ 4. *Застосування методу кліткових автоматіву задачах матеріалознавства.*

Тема 5. Основи методу кліткових автоматів. Управління станом та методами кліткового автомату.

Розділ 5. Використання спеціалізованої бібліотеки ruMKS для статистичного аналізу мікроструктури .

Тема 6. Програмна Бібліотека ruMKS. Засоби статистичного аналізу мікроструктури.

4. Навчальні матеріали та ресурси

4.1 Базова література

1. Богданова Н. В. Математичне моделювання систем і процесів : конспект лекцій / Н. В. Богданова, О. В. Богданов. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. – 85 с. – Режим доступу: https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/48765/1/MMSP_konspekt.
2. Соловійов В. М. Моделювання складних систем / В. М. Соловійов, О. А. Сердюк, Г. Б. Данильчук. – Черкаси : Брама Україна, 2016. – 204 с.
3. Томашевський В. М. Моделювання систем / В. М. Томашевський. – Київ : Видавнича група ВНУ, 2005. – 352 с.
4. Кузьмов А. В. Вплив неоднорідності розподілу пор за розміром на “зональне уособлення” в процесі спікання / А. В. Кузьмов, М. Б. Штерн, Д. І. Барановський // Математичні моделі і обчислювальний експеримент в матеріалознавстві. – 2019. – № 21. – С. 2–11
5. Боровик В. Г. Порівняння ефективності моделей упаковки фрагментів волокон в односпрямованому конструкційному матеріалі / В. Г. Боровик // Математичні моделі і обчислювальний експеримент в матеріалознавстві. – 2018. – № 20. – С. 39–46.

Базова література доступна в бібліотеці КПІ ім.Ігоря Сікорського або через мережу інтернет.

4.2 Додаткова література

6. Максименко А. Л. Консолідація металоматричних композитів в умовах селективного лазерного плавлення / А. Л. Максименко // Математичні моделі і обчислювальний експеримент в матеріалознавстві. – 2017. – № 19.
7. Кіркова О. Г. Аналіз поведінки пористих тіл під час пружно-пластичного переходу методом обчислювальної мікромеханіки / О. Г. Кіркова, М. Б. Штерн // Математичні моделі і обчислювальний експеримент в матеріалознавстві. – 2018. – № 20. – С. 83–91.
8. Taler, J. Finite Element Method in Steady-State and Transient Heat Conduction / Taler J., Ostoj P. Hetnarski // R.V. (eds) Encyclopedia of Thermal Stresses. Springer, 2014.
9. Розрахунок ефективної тепло- провідності пористого тіла для умов електронно-променевого нагрівання / О. В. Степанов, Ю. М. Романенко, П. І. Лобода [та ін.] // Науковий вісник Херсонської державної морської академії. – 2020. – Том 2.

3. Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни(освітнього компонента)

5.1 Лекції (36 годин)

Заняття 1. Вступ. Мета та програмні цілі дисципліни, рейтингова система оцінювання. Обчислювальні задачі матеріалознавства. Роль комп’ютерної техніки в реалізації обчислювальних задач матеріалознавства.[Мультимедійна презентація].

Заняття 2. Імітаційне моделювання технологічних процесів. Моделювання хаотичних та регулярних засипок порошку [Мультимедійна презентація].

Заняття 3. Імітаційне моделювання технологічних процесів. Моделювання процесів пресування порошків. Моделі створення та зростання контактної поверхні [Мультимедійна презентація].

Заняття 4. Імітаційне моделювання технологічних процесів. Імітаційні та комп'ютерні моделі механізмів спікання порошкових матеріалів.[Мультимедійна презентація].

Заняття 5. Імітаційні комп'ютерні моделі деформаційної обробки матеріалів.[Мультимедійна презентація].

Заняття 6. Імітаційні комп'ютерні моделі еволюції зеренної структури матеріалів.[Мультимедійна презентація]

Заняття 7. Методи розрахунку властивостей наведено-армованих композиційних матеріалів. [Мультимедійна презентація].

Заняття 8. Розрахунок механічних характеристик композиційних матеріалів, армованих дискретними волокнами та окремими частками[Мультимедійна презентація].

Заняття 9. Модульна контрольна робота (2 ак. години).

Заняття 10. Постановка задачі стаціонарної теплопровідності. Реалізація засобами методу скінчених елементів з використанням середовища ANSYS Workbench

Заняття 11. Обґрунтування та приклади застосування методу скінчених елементів для прогнозування питомої теплопровідності пористого матеріалу. Узагальнення на довільний неоднорідний матеріал.

Заняття 12. Загальний вигляд та реалізація методу скінчених елементів до задач структурної механіки.

Заняття 13. Обґрунтування та приклади застосування методу скінчених елементів для обчислення модуля пружності структурно неоднорідного матеріалу.

Заняття 14. Розширення можливостей використання обчислених структурних реакцій неоднорідного тіла методом скінчених елементів.

Заняття 15. Використання методу кліткових автоматів. Особливості постановки задачі. Використання в задачах матеріалознавства

Заняття 16. Спеціалізована бібліотека PyMKS. Засоби статистичного оброблення мікроструктури. [6].

Заняття 17. Спеціалізована бібліотека PyMKS. Засоби статистичного оброблення мікроструктури. (Продовження) [6]

Заняття 18. Залік.

5.2 Лабораторні роботи (18 годин)

Мета лабораторних робіт:

- практично оволодіти прийомами створення та використання комп'ютерних моделей та розрахункових алгоритмів для задач матеріалознавства.

Зміст лабораторних робіт

1. Вступне заняття (2 години)
2. Формування 2D набору сферичних часток за допомогою генератора випадкових чисел (2 години)
3. Розрахунок залежності контактної поверхні від прикладеного навантаження у двочастинковій моделі пресування (4 години)
4. Комп'ютерне графічне моделювання найпростішого механізму дифузії (2 години)
5. Модель поверхневої дифузії при спіканні сферичних часток (4 години)
6. Застосування методу скінчених елементів для моделювання теплопровідності пористого матеріалу (4 години)

7. Підсумкове заняття (2 години)

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студентів (загальна тривалість 66 години) полягає у:

Підготовці та аналізі результатів лабораторних робіт з розрахунку 4 години на 2 години занять (36 годин)

Самостійному опрацюванні лекційного матеріалу (18 годин)

Підготовці до МКР (6 годин)

Підготовці до семестрової атестації – Заліку – 6 годин.

4. Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які ставляться перед студентом:

- *Тему пропущеного лекційного заняття студент повинен опрацювати самостійно шляхом написання конспекту;*
- *Завдання пропущеної лабораторної роботи студент має виконати в час, узгоджений з викладачем з використанням засобів комп'ютерного класу або власної комп'ютерної техніки .*
- *У випадку пропуску заняття, коли виконується МКР, студент одержує для самостійного виконання завдання, рівноцінне пропущеному.*
- *Під час усіх видів аудиторних занять забороняється використання мобільних телефонів у звуковому режимі, дозволяється обмежене використання месенджерів у беззвучному режимі. Під час лабораторних робіт дозволяється застосування персональних комп'ютерів для пошуку інформації, використання власних ресурсів, тощо.*
- *Результати виконаних лабораторних робіт оформлюються у вигляді звітів з застосуванням текстового редактора. Звіт включає текстовий матеріал та необхідні ілюстрації, що підтверджують виконання завдання, може включати посилання на електронну таблицю, у якій виконано розрахунки, завершується висновком.*
- *Заохочувальні бали можуть бути призначені за особливі досягнення – зокрема проведення розрахунків, орієнтованих на власну наукову роботу студента або на виконання курсового проекту.*
- *Політикою дедлайнів передбачається необхідність своєчасного виконання завдань. Конспект пропущеної лекції має бути виконаний і поданий на перевірку не пізніше 3-х тижнів з часу пропущеної лекції. У випадку пропуску лекції через тривалу хворобу – не більше 2-х тижнів після одужання. Звіти з лабораторних робіт виконуються і подаються на перевірку не пізніше 2-х тижнів з моменту завершення. Усі письмові документи мають бути захищені до закінчення теоретичного навчання в семестрі.*
- *Усі учасники освітнього процесу: викладачі і студенти в процесі вивчення дисципліни мають керуватись принципами академічної доброчесності, передбаченими «Кодексом честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут»» <https://kpi.ua/code>.*

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Оцінювання результатів навчання проводиться за рейтинговою системою, складеною відповідно до вимог «Положення про систему оцінювання результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського»

Поточне оцінювання включає оцінку:

- підготовки, виконання, оформлення звітів та захисту лабораторних робіт;
- виконання модульної контрольної роботи

Повне виконання та захист результатів лабораторної роботи оцінюється:

- Робота 1 – 12 балів
- Робота 2 – 15 балів
- Робота 3 – 12 балів
- Робота 4 – 16 балів
- Робота 5 – 15 балів

Всього за цикл лабораторних робіт максимальна сума складає 70 балів.

Неповне виконання завдання, помилки в алгоритмах розрахунку, кінцевих результатах призводить до зниження оцінки від 2 до 6 балів.

Модульна контрольна робота проводиться на лекційному занятті 9, має вигляд тестового завдання і складається з 15 тестових запитань, що відповідають темам розділів 1 та 2.

Максимальна оцінка за модульну контрольну роботу складає 30 балів – 2 бали за кожну правильну відповідь

Календарний контроль проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу. Студенти, які на момент календарного контролю мають суму результатів поточного контролю, яка не менше 50% максимально можливої одержують позитивну оцінку, у іншому випадку – негативну.

Семестровий контроль – залік. Згідно схеми РСО-1 «Положення про систему оцінювання результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського»:

Рейтингова оцінка складається з балів, отриманих студентом за результатами поточного контролю

Рейтингова оцінка доводиться до здобувачів на передостанньому занятті з дисципліни в семестрі, але після захисту усіх звітів з комп'ютерних практикумів та модульної контрольної роботи. Здобувачі, які виконали умови допуску до заліку (не менше 40 балів за лабораторні роботи та не менше 17 балів за модульну контрольну роботу) та мають рейтингову оцінку 60 і більше балів, отримують відповідну до набраного рейтингу оцінку без додаткових випробувань.

Зі здобувачами, які виконали умови допуску до заліку, але мають рейтингову оцінку менше 60 балів, а також з тими здобувачами, хто бажає підвищити свою рейтингову оцінку, на останньому за розкладом занятті з дисципліни в семестрі проводиться семестровий контроль у вигляді залікової контрольної роботи. Залікова контрольна робота проводиться у вигляді тесту, що складається з 25 запитань. Заліковий тест оцінюється максимальною оцінкою 75 балів – 3 бали за кожну правильну відповідь. Семестровий рейтинг обчислюється як сума оцінки за залікову контрольну роботу та суми балів за лабораторні роботи, перерахована за формулою $(25 * R_{\text{лаб}} / 70)$.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

9.1. Особливості навчання за змішаною або дистанційною формою, пов'язані з дотриманням протиепідемічних заходів, заходів пов'язаних з введенням військового або

особливого стану, запровадженими державними або місцевими органами влади та/або адміністрацією університету.

Викладання дисципліни за змішаною або дистанційною формою навчання здійснюється з застосуванням платформи *google.classroom* та середовища *google.meet*.

Лекційні заняття проводяться в *on-line* режимі. Темі лекційних занять, демонстраційний матеріал у вигляді презентацій з текстовими коментарями, контрольні запитання надаються студентам заздалегідь. Лекційний час використовується у співвідношенні 1:1 відносно аудиторної форми. Студентам рекомендується для участі у заняттях в середовищі *google.meet* використовувати персональний комп'ютер чи планшет, з розміром екрану не менше 10". Відеокамери комп'ютерів мають бути увімкнені, мікрофони вимкнені. Студент застосовує мікрофон для відповіді на запитання викладача та для того, щоб задати запитання.

Комп'ютерні практикуми виконуються із застосуванням власних засобів комп'ютерної техніки студентів. *On-line* підключення необхідне на початку заняття для одержання допуску до виконання комп'ютерного практикуму та одержання завдання. Викладач відповідає на запитання студентів одержані як із сеансу *google.meet* (голосом або через чат) так і через інші засоби електронного зв'язку.

Контрольні заходи проводяться у *on-line* режимі.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено: доцент каф. Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії, к.т.н., доцент, Степанов Олег Васильович

Ухвалено: кафедрою Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії (протокол № 21 від 08 липня 2022 р.)

Погоджено: Методичною комісією НН Інституту матеріалознавства та зварювання ім. Є. О. Патона (протокол № 10/22 від 10 липня 2022 р.)