

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

«Математическое моделирование в материаловедении»

Дисциплина «Математическое моделирование в материаловедении» является частью программы магистратуры «Экспериментальная механика» по направлению «22.04.01 Материаловедение и технологии материалов».

Цели и задачи дисциплины

Получение магистрантами знаний в области математического моделирования в материаловедении. Задачи: - изучение основных понятий и определений в области математического моделирования в материаловедении, основных моделей механики трещин, фазовых переходов и стохастических процессов в материалах; - формирование умения выбора адекватных моделей поведения материалов и процессов; - формирование навыков практического применения моделей, использования специальных математических инструментов современных моделей материалов..

Изучаемые объекты дисциплины

- современное состояние исследований в области математического моделирования в материаловедении; - дифференциальные уравнения в частных производных для процессов диффузии, теплопереноса, основные уравнения теории фазовых переходов; - современные математические инструменты моделирования материальных процессов..

Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		2
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	26	26
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:		
- лекции (Л)	6	6
- лабораторные работы (ЛР)		
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	18	18
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
- контрольная работа		
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	82	82
2. Промежуточная аттестация		
Экзамен		
Дифференцированный зачет		
Зачет	9	9
Курсовой проект (КП)		
Курсовая работа (КР)		
Общая трудоемкость дисциплины	108	108

Краткое содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
2-й семестр				
Моделирование свойств полимерных связующих.	1	0	4	16
Структура и свойства полимеров. Температурно-временная аналогия. Оценка параметров температурно-временной аналогии.. Прогнозирование деформационных свойств полимеров на основе температурно-временной аналогии.				
Элементы метода молекулярной динамики	1	0	2	12
Молекулярные уравнения упругих свойств твердых тел. Вычисление упругой энергии кристаллов в приближении ближайших соседей. Вычисление объемного модуля упругости Ван-дер-Ваальсльвских кристаллов с потенциалом Леннарда-Джонса. Сведение макроскопических модулей упругости к атомным свойствам - общий случай. Учет кинетической энергии атомов.				
Фазовые превращения в материалах.	1	0	4	16
Фазовые превращения в материалах. Понятие фазового перехода и его термодинамические признаки. Элементы термодинамики. Термодинамические потенциалы. Равновесие фаз. Уравнение Клаузиса-Клапейрона. Вычисление энтальпии фазового перехода в модели Дебая.				
Фракталы, самоподобие и размерность.	1	0	2	16
Математические и природные фракталы. Самоподобие и размерность. Броуновское движение, показатель Херста, показатель шероховатости поверхности. Основные экспериментальные факты и трудности фрактального описания . Связь вязкости разрушения с фрактальными характеристиками. Физические источники фрактальности поверхностей разрушения.				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Основные понятия математического моделирования	1	0	2	8
Моделирование и моделирование. Детерминированные и стохастические модели. Основные типы моделей, применяемые в материаловедении: (компьютерные, атомистические, континуальные, Монте-Карло и другие). Примеры известных моделей. Метод Монте-Карло и его применение к вычислению интегралов и решению уравнений.				
Фононная модель Дебая твердого тела	1	0	4	14
Основные уравнение. Квантование упругих колебаний в твердых телах. Температура Дебая. Уравнение Кристоффеля для упругих волн. Решение уравнения Кристоффеля. Упругая и тепловая энергия твердого тела в модели Дебая.				
ИТОГО по 2-му семестру	6	0	18	82
ИТОГО по дисциплине	6	0	18	82