

## АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### «Математическое моделирование в материаловедении»

Дисциплина «Математическое моделирование в материаловедении» является частью программы магистратуры «Материаловедение и технологии функциональных металлических, керамических, композиционных материалов» по направлению «22.04.01 Материаловедение и технологии материалов».

### **Цели и задачи дисциплины**

Получение магистрантами знаний в области математического моделирования в материаловедении. В процессе освоения данной дисциплины студент углубляет и демонстрирует следующие общекультурные и профессиональные компетенции подготовки: – способностью самостоятельно развивать базовые знания теоретических и прикладных наук при моделировании, теоретическом и экспериментальном исследовании материалов и процессов в профессиональной деятельности (ОПК-5); – способностью использовать методы моделирования и оптимизации, стандартизации и сертификации для оценки и прогнозирования свойств материалов и эффективности технологических процессов (ПК-4)..

### **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.				
«Основные понятия математического моделирования»	1	0	2	8
Моделирования и симулирование. 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.				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
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.				
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-Ваальсских кристаллов с потенциалом Леннарда-Джонса. Сведение макроскопических модулей упругости к атомным свойствам - общий случай. Учет кинетической энергии атомов.				
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.				
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.				
ИТОГО по 2-му семестру	6	0	18	82
ИТОГО по дисциплине	6	0	18	82