Форма 3

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Національний університет «Запорізька політехніка»

Кафедра фізичного матеріалознавства



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

В. о. декана ІФФ Євген ПАРАХНЄВИЧ

«___» 06 2026 року

ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ОК 08 Моделювання матеріалів і процесів термічної обробки

освітня програма (спеціалізація) Матеріалознавство та термічна обробка металів
(назва освітньої програми (спеціалізації))

спеціальність G8 Матеріалознавство
(код і найменування спеціальності)

галузь знань G Інженерія, виробництво та будівництво
(код і найменування галузі)

ступінь вищої освіти магістр
(назва ступеня вищої освіти)

2026 рік

програма з дисципліни «Моделювання матеріалів і процесів термічної обробки»

спеціальності G8 «Матеріалознавство»,

освітня програма «Матеріалознавство та термічна обробка металів».

Розробник: ТКАЧ Дар'я Володимирівна, завідувач кафедри фізичного матеріалознавства, кандидат технічних наук, доцент.

Програма погоджена:

Завідувач кафедри ФМ — Дар'я ТКАЧ

на якій виконується освітній компонент — _____ 2026

Гарант освітньої програми — Наталя СОЛІДОР
(ім'я прізвище)
_____ 2026

Схвалено науково-методичною комісією інженерно-фізичного факультету
(найменування факультету)

Протокол від «28» червня 2026 року № 9

Голова науково-методичної комісії — Євген ПАРАХНЄВИЧ
(ім'я прізвище)
_____ 2026

1. Опис навчальної дисципліни

Загальна характеристика

Обов’язковий освітній компонент	
Рівень вищої освіти	Другий (магістерський) рівень
Ступінь вищої освіти	Магістр
Галузь знань	G Інженерія, виробництво та будівництво
Спеціальність	G8 Матеріалознавство
Обмеження щодо форм навчання	Без обмежень

Найменування показників	**Характеристика навчальної дисципліни**	
	денна форма навчання	**заочна форма навчання**
Кількість кредитів	4	
Модулів	2	2
Змістових модулів	4	4
Семестр	2	2
Загальна кількість годин	120	
з них аудиторних:	48	12
лекції практичні	32 16	8 4
з них самостійної роботи:	72	108
Занять на тиждень	3	–
Індивідуальні завдання	–	
Форма контролю	залік	
Курсова робота (проєкт) (загальний обсяг)	–	

2. Мета навчальної дисципліни

Метою вивчення дисципліни є формування у здобувачів здатності застосовувати сучасні фізико-математичні та чисельні підходи для аналізу й прогнозування фазових, дифузійних, структурних і теплових процесів у матеріалах під час термічної обробки, обґрунтовано інтерпретувати результати комп'ютерного моделювання та використовувати їх для розв'язання матеріалознавчих й інженерно-технологічних задач.

3. Завдання вивчення дисципліни

Основними завданнями навчальної дисципліни є: засвоєння термодинамічних і кінетичних засад моделювання фазових перетворень; набуття навичок аналізу фазових рівноваг і діаграм стану методами CALPHAD; опанування базових чисельних методів моделювання дифузії, зародження, росту фаз, твердіння та еволюції зеренної структури; формування навичок використання Python для навчальних розрахунків і візуалізації; розвиток здатності оцінювати припущення, точність і межі застосовності моделей та встановлювати взаємозв'язок «процес – структура – властивості».

4. Пререквізити і постреквізити навчальної дисципліни

Для успішного опанування дисципліни здобувач повинен мати базові знання з матеріалознавства, фізики металів, термодинаміки, діаграм стану та основ термічної обробки. Бажаними є початкові навички роботи з електронними таблицями та комп'ютерними програмами. Попередній досвід програмування не є обов'язковим: необхідні конструкції Python опановуються під час виконання практичних робіт.

Постреквізити: набуті знання й уміння використовуються під час виконання дослідницьких і розрахункових завдань професійного спрямування, підготовки кваліфікаційної роботи магістра та аналізу технологічних процесів формування структури і властивостей матеріалів.

5. Характеристика навчальної дисципліни

Загальні компетентності:

ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

Спеціальні (фахові) компетентності:

СК1. Здатність виявляти та ставити проблеми в сфері матеріалознавства, приймати ефективні рішення для їх вирішення.

СК5. Здатність до критичного аналізу та прогнозування характеристик нових та існуючих матеріалів, параметрів процесів їх отримання, оброблення і використання у виробах.

СК6. Здатність розуміти та використовувати математичні й числові методи моделювання властивостей, явищ та процесів.

СК8. Здатність зрозуміло і недвозначно доносити власні знання, висновки та аргументацію з питань матеріалознавства і дотичних проблем до фахівців і нефахівців, зокрема до осіб, які навчаються.

Результати навчання:

РН1. Розуміти та застосовувати принципи системного аналізу, причинно-наслідкових зв'язків між значущими факторами та науковими і технічними рішеннями в контексті існуючих теорій.

РН2. Виявляти, формулювати і вирішувати матеріалознавчі проблеми і задачі.

РН4. Застосовувати цифрові технології, спеціалізоване програмне забезпечення та методи комп'ютерного моделювання для аналізу матеріалів, прогнозування їхніх властивостей і дослідження технологічних процесів термічної обробки.

РН10. Навички презентації наукового матеріалу та аргументів для добре інформованої аудиторії.

РН15. Обґрунтовувати вибір матеріалів і технологій термічної та хіміко-термічної обробки, прогнозувати зміни їхнього структурно-фазового стану й властивостей з урахуванням умов експлуатації деталей машин, двигунів та енергетичного обладнання.

РН18. Збирати необхідну інформацію, використовуючи науково-технічну літературу, бази даних та інші джерела, аналізувати й оцінювати її.

4. Зміст навчальної дисципліни

МОДУЛЬ 1

Змістовий модуль 1. Термодинамічні основи та фазові рівноваги в матеріалах

Тема 1. Методологічні основи комп'ютерного моделювання матеріалів і процесів термічної обробки. Поняття моделі, об'єкта моделювання, вхідних і вихідних параметрів. Масштаби моделювання. Верифікація та валідація. Місце чисельного експерименту в сучасному матеріалознавстві.

Тема 2. Термодинамічні потенціали та критерії фазової стабільності. Вільна енергія Гіббса, ентальпія й ентропія. Стабільні та метастабільні стани. Залежності G(T), термодинамічна рушійна сила фазових перетворень.

Тема 3. Фазові рівноваги та CALPHAD-моделювання багатокомпонентних матеріалів. Інтерпретація діаграм стану Fe–C та Al–Cu. Правило важеля. Принцип мінімізації вільної енергії, термодинамічні бази даних, загальна логіка CALPHAD і навчальні розрахунки у pycalphad.

Тема 4. Термодинамічна рівновага, метастабільність і нерівноважні фазові стани. Причини відхилення реальної структури від рівноважних прогнозів. Вплив швидкості охолодження, кінетичних бар'єрів і дифузійних обмежень.

Змістовий модуль 2. Дифузійні процеси та кінетика фазових перетворень

Тема 5. Дифузійні процеси та їх чисельне моделювання. Фізичний зміст законів Фіка, коефіцієнт дифузії та температурна залежність. Дискретизація одновимірної задачі. Явна скінченно-різницева схема FTCS та умова її стійкості.

Тема 6. Термодинаміка і кінетика зародження нових фаз. Гомогенне і гетерогенне зародження. Критичний радіус зародка, енергетичний бар'єр, вплив переохолодження та міжфазної енергії на швидкість нуклеації.

Тема 7. Кінетичне моделювання фазових перетворень: рівняння JMAK, TTT- і CCT-діаграми. Сигмоїдальна кінетика, показник Аврамі, визначення частки перетвореної фази. Інтерпретація діаграм «час–температура–перетворення» і безперервного охолодження.

Тема 8. Моделювання твердіння сплавів: дендритний ріст і мікроліквація. Стійкість фронту кристалізації, конституційне переохолодження, первинні та вторинні дендритні осі, SDAS. Коефіцієнт розподілу та модель Шейля–Гуллівера.

МОДУЛЬ 2

Змістовий модуль 3. Чисельне моделювання формування та еволюції мікроструктури

Тема 9. Клітинно-автоматне моделювання еволюції зеренної структури. Дискретна решітка, множина станів, типи сусідства, правила переходу та граничні умови. Застосування клітинних автоматів до росту зерен і рекристалізації.

Тема 10. Метод фазового поля в моделюванні структурно-фазових перетворень. Концепція дифузної межі та параметра порядку. Фізичний зміст рівнянь Аллена–Кана і Кана–Хілліарда. Приклади моделювання дендритного росту та фазових перетворень.

Тема 11. Моделювання дисперсійного виділення та коагуляції зміцнювальних фаз. Зародження і ріст частинок під час старіння. Зв'язок дисперсності виділень із властивостями. Оствальдове дозрівання та якісна оцінка еволюції розподілу частинок.

Тема 12. Прогнозування фазово-структурного стану матеріалів за заданих режимів охолодження. Використання TTT/CCT-діаграм для аналізу безперервного охолодження. Критична швидкість охолодження, мартенситне перетворення та прогноз кінцевої структури.

Змістовий модуль 4. Інтегроване моделювання процесів термічної обробки

Тема 13. Числове моделювання теплоперенесення під час термічної обробки. Закон Фур'є, температурні градієнти, граничні умови теплообміну. Порівняння охолодження у воді, оливі та на повітрі. Передумови виникнення термічних напружень.

Тема 14. Інтегроване обчислювальне матеріалознавство (ICME): взаємозв’язок «процес–структура–властивості». Узгодження термодинамічних, кінетичних, структурних і теплових моделей. Передавання даних між окремими етапами технологічного процесу.

Тема 15. Методи машинного навчання в задачах прогнозування властивостей матеріалів. Вхідні ознаки, вибірка, навчання і тестування моделі. Приклади прогнозування властивостей за хімічним складом і параметрами технологічної обробки.

Тема 16. Цифрові двійники процесів термічної обробки та інтеграція моделей. Побудова ланцюжка «склад – технологічний режим – фазові перетворення – мікроструктура – властивості». Аналіз похибок та обмежень моделі, інженерна інтерпретація результатів.

5. Орієнтовний розподіл навчального часу

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	Денна форма						Заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		лк	пр	лаб	інд	с.р.		лк	пр	лаб	інд	с.р.
1	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*	*7*	*8*	*9*	*10*	*11*	*12*	*13*
МОДУЛЬ 1												
Змістовий модуль 1.1. Термодинамічні основи та фазові рівноваги в матеріалах												
Тема 1. Методологічні основи комп'ютерного моделювання матеріалів і процесів термічної обробки	6	2	–	–	–	4	8	1	–	–	–	7
Тема 2. Термодинамічні потенціали та критерії фазової стабільності	11	2	4	–	–	5	7	–	–	–	–	7
Тема 3. Фазові рівноваги та CALPHAD-моделювання багатокомпонентних матеріалів	7	2	–	–	–	5	9	1	1	–	–	7
Тема 4. Термодинамічна рівновага, метастабільність і нерівноважні фазові стани	6	2	–	–	–	4	7	–	–	–	–	7
Разом за змістовим модулем	30	8	4	–	–	18	31	2	1	–	–	28
Змістовий модуль 1.2. Дифузійні процеси та кінетика фазових перетворень												
Тема 5. Дифузійні процеси та їх чисельне моделювання	6	2	–	–	–	4	7	–	–	–	–	7
Тема 6. Термодинаміка і кінетика зародження нових фаз	11	2	4	–	–	5	8	1	–	–	–	7

Тема 7. Кінетичне моделювання фазових перетворень: JMAK, TTT- і CCT-діаграми	7	2	–	–	–	5	8	–	1	–	–	7
Тема 8. Моделювання твердіння сплавів: дендритний ріст і мікроліквація	6	2	–	–	–	4	8	1	–	–	–	7
Разом за змістовим модулем	30	8	4	–	–	18	31	2	1	–	–	28
МОДУЛЬ 2												
Змістовий модуль 2.1. Чисельне моделювання формування та еволюції мікроструктури												
Тема 9. Клітинно-автоматне моделювання еволюції зеренної структури	6	2	–	–	–	4	6	–	–	–	–	6
Тема 10. Метод фазового поля в моделюванні структурно-фазових перетворень	11	2	4	–	–	5	7	1	–	–	–	6
Тема 11. Моделювання дисперсійного виділення та коагуляції зміцнювальних фаз	7	2	–	–	–	5	7	–	1	–	–	6
Тема 12. Прогнозування фазово-структурного стану матеріалів за заданих режимів охолодження	6	2	–	–	–	4	7	1	–	–	–	6
Разом за змістовим модулем	30	8	4	–	–	18	27	2	1			24
Змістовий модуль 2.2. Інтегроване моделювання процесів термічної обробки												
Тема 13. Числове моделювання теплоперенесення під час термічної обробки	6	2	–	–	–	4	7	–	–	–	–	7

Тема 14. Інтегроване обчислювальне матеріалознавство (ICME): взаємозв’язок «процес–структура–властивості»	11	2	4	–	–	5	8	1	–	–	–	7
Тема 15. Методи машинного навчання в задачах прогнозування властивостей матеріалів	7	2	–	–	–	5	8	–	1	–	–	7
Тема 16. Цифрові двійники процесів термічної обробки та інтеграція моделей	6	2	–	–	–	4	8	1	–	–	–	7
Разом за змістовим модулем	30	8	4	–	–	18	31	2	1	–	–	28
Усього годин	**120**	**32**	**16**	**–**	**–**	**72**	**120**	**8**	**4**	**–**	**–**	**108**

6. Види навчальних занять та їх орієнтовний зміст

№ з/п	Тема	Вид занять	Орієнтовний зміст
1	Розрахунок фазових рівноваг у сплавах методами CALPHAD	практичні	Робота з підготовленим Python/pycalphad-ноутбуком: задання складу і температури, розрахунок фазового стану, побудова та інтерпретація фазової діаграми або залежності фазового складу від температури. Аналіз впливу хімічного складу на температури фазових перетворень.
2	Чисельне моделювання дифузії вуглецю під час цементації сталі методом скінченних різниць	практичні	Побудова 1D моделі дифузії за другим законом Фіка. Реалізація явної схеми FTCS, перевірка умови стійкості, побудова профілів концентрації C(x,t), порівняння з аналітичним erfc-розв’язком та визначення часу формування заданої глибини цементованого шару.
3	Клітинно-автоматне моделювання росту зеренної структури	практичні	Запуск і модифікація підготовленої клітинно-автоматної моделі. Дослідження впливу кількості зародків, типу сусідства та кількості часових кроків на морфологію і характерний розмір зерна. Порівняння результатів для різних наборів параметрів.
4	Комп’ютерне моделювання кінетики фазово-структурних перетворень під час охолодження	практичні	Аналіз заданих кривих охолодження спільно з TTT/CCT-даними. Порівняння режимів охолодження, оцінювання ймовірного фазово-структурного стану та формулювання інженерного висновку щодо вибору режиму термічної обробки.

*Публічна презентація та обговорення результатів комп’ютерного моделювання матеріалознавчого процесу. Представлення постановки задачі, моделі, вхідних параметрів, отриманих результатів, меж застосовності та інженерних висновків; відповіді на запитання аудиторії та захист запропонованого рішення.

7. Форми та методи контролю

Контроль результатів навчання здійснюється шляхом усного опитування, коротких тестових і письмових завдань, перевірки розрахунків та графічних результатів, захисту практичних робіт, модульного тестування, а також методів самоконтролю і самооцінки. Під час захисту практичних робіт здобувач повинен пояснити фізичний зміст моделі, призначення основних параметрів, причини отриманих залежностей і межі застосовності результату. Підсумковий контроль – залік.

8. Критерії оцінювання результатів навчання

Поточний контроль передбачає оцінювання теоретичної підготовки та результатів виконання практичних робіт. Рекомендований розподіл балів: практичні роботи № 1–4 – по 10 балів (разом 40 балів); короткі модульні контрольні заходи – 20 балів; індивідуальне розрахунково-аналітичне завдання – 15 балів; презентація та захист – 5 балів; підсумковий інтегрований контроль – 20 балів. Загальна кількість – 100 балів. Під час оцінювання індивідуального завдання враховуються: коректність постановки й запуску моделі; правильність отриманих результатів і графіків; розуміння фізичного змісту параметрів; здатність пояснити вплив зміни параметрів на результат; обґрунтованість інженерного висновку. Обсяг програмного коду сам по собі не є критерієм оцінювання. Умови допуску до підсумкового контролю: виконання і захист обов’язкових практичних робіт, індивідуального завдання та набір мінімальної кількості балів, установленої чинними нормативними документами університету.

Захист індивідуального розрахунково-аналітичного завдання здійснюється у формі усної презентації перед навчальною групою або фаховою аудиторією. Під час оцінювання враховуються: коректність постановки матеріалознавчої задачі; обґрунтованість вибору моделі та параметрів; правильність інтерпретації результатів; логічність і доказовість висновків; чіткість, структурованість і науково-технічна коректність усного повідомлення; здатність аргументовано відповідати на запитання та пояснювати обмеження моделі.

9. Політика курсу

Організація навчання та комунікація. Основні навчальні матеріали, завдання для самостійної роботи, критерії їх оцінювання та терміни виконання розміщуються в системі Moodle. Консультації проводяться відповідно до графіка консультацій викладача, а за необхідності — із застосуванням засобів дистанційного зв’язку.

Відвідування занять. Відвідування навчальних занять є важливою складовою опанування дисципліни. У разі пропуску заняття здобувач самостійно опрацьовує відповідний навчальний матеріал та за потреби може отримати консультацію викладача. Оцінювання здійснюється на підставі

досягнення визначених результатів навчання та виконання передбачених програмою контрольних завдань.

Дедлайни та повторне виконання робіт. Терміни виконання навчальних завдань повідомляються здобувачам заздалегідь та зазначаються в Moodle. За наявності обґрунтованих обставин термін виконання може бути змінений за погодженням із викладачем. Роботи, за які отримано результат нижчий від мінімально встановленого рівня, можуть бути доопрацьовані та повторно подані відповідно до встановленого порядку.

Академічна доброчесність. Здобувачі зобов'язані дотримуватися Закону України «Про академічну доброчесність», Кодексу академічної доброчесності та інших нормативних документів НУ «Запорізька політехніка». Не допускаються академічний плагіат, фабрикація або фальсифікація даних, списування, виконання оцінюваної роботи іншою особою, недоброчесне використання результатів, згенерованих штучним інтелектом, та інші порушення академічної доброчесності.

Використання генеративного штучного інтелекту. Використання технологій генеративного штучного інтелекту здійснюється відповідно до Декларації про принципи використання генеративного штучного інтелекту в НУ «Запорізька політехніка». Допустимий рівень використання ШІ визначається умовами конкретного навчального завдання. У разі його використання здобувач повинен дотримуватися встановлених вимог щодо зазначення такого використання та самостійно перевіряти достовірність використаної інформації.

Оскарження результатів оцінювання. Здобувач має право отримати від викладача пояснення щодо результатів оцінювання та оскаржити результати контрольного заходу відповідно до нормативних документів НУ «Запорізька політехніка».

Академічна взаємодія. Учасники освітнього процесу дотримуються принципів взаємної поваги, академічної етики, недискримінації та толерантності. Цифрові пристрої можуть використовуватися під час занять у навчальних цілях за умови, що це не перешкоджає освітньому процесу.

10. Методичне забезпечення

1. Конспекти лекцій з дисципліни «Моделювання матеріалів і процесів термічної обробки» (електронний курс Moodle).
2. Методичні матеріали до практичних робіт № 1–4 та підготовлені навчальні Python-ноутбуки для Google Colab/Jupyter.
3. Демонстраційні набори даних, фазові діаграми, TTT/CCT-діаграми та приклади карт мікроструктури для навчального моделювання.

11. Перелік навчальної, наукової та довідкової літератури

1. Porter D. A., Easterling K. E., Sherif M. Y. Phase Transformations in Metals and Alloys. CRC Press.
2. Gaskell D. R., Laughlin D. E. Introduction to the Thermodynamics of Materials. CRC Press.

3. Callister W. D., Rethwisch D. G. Materials Science and Engineering: An Introduction. Wiley.

4. Документація pycalphad, NumPy, SciPy та Matplotlib – для виконання навчальних розрахунків і візуалізації.

12. Рекомендовані інформаційні джерела

1. Стандарт вищої освіти за спеціальністю 132 «Матеріалознавство»: https://mon.gov.ua/static-objects/mon/sites/1/vishcha-osvita/zatverdzeni%20standarty/12/26/132-Materialozn-bakalavr-1.pdf

2. Документація pycalphad – https://pycalphad.org/

3. Документація NumPy – https://numpy.org/doc/

4. Документація SciPy – https://docs.scipy.org/

5. Документація Matplotlib – https://matplotlib.org/stable/

6. Електронний курс дисципліни у системі Moodle НУ «Запорізька політехніка».