



ЗАПОРІЗЬКА ПОЛІТЕХНІКА
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Інженерно-фізичний факультет
Кафедра фізичного матеріалознавства

СИЛАБУС

обов'язкової навчальної дисципліни
МОДЕЛЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ І ПРОЦЕСІВ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ
Обсяг освітнього компоненту: 4 кредити ЄКТС / 120 годин

Освітня програма «Матеріалознавство та термічна обробка металів»
другого (магістерського) рівня вищої освіти
Спеціальність – G8 «Матеріалознавство»

ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКЛАДАЧА

Ткач Дар'я Володимирівна
завідувач кафедри фізичного матеріалознавства,
кандидат технічних наук, доцент

Контактна інформація:

- e-mail: darynka.odarkivna@gmail.com;
- кафедра фізичного матеріалознавства, ауд. 159а, вул.
Жуковського, 64, м. Запоріжжя, 69063.

Час і місце проведення консультацій:

згідно з поточним графіком консультацій; ауд. 159а, за
потреби – із застосуванням засобів дистанційного зв'язку.

ОПИС КУРСУ

Дисципліна є обов'язковим освітнім компонентом підготовки магістрів за освітньою програмою «Матеріалознавство». Обсяг дисципліни становить 4 кредити ЄКТС (120 годин), з них 32 години лекцій, 16 годин практичних занять і 72 години самостійної роботи. Форма підсумкового контролю – залік.

Дисципліна присвячена фізико-математичним і чисельним засадам моделювання фазового стану, дифузійних процесів, кінетики фазових перетворень, кристалізації, еволюції мікроструктури та теплоперенесення під час термічної обробки матеріалів. Курс побудовано за послідовністю «термодинаміка – кінетика – мікроструктура – технологічний режим». Основна увага приділяється фізичній інтерпретації моделей, аналізу їхніх припущень і меж застосовності та формуванню вміння робити інженерні висновки за результатами розрахунку. Практична частина виконується у Python (Google Colab/Jupyter) переважно на основі підготовлених навчальних скриптів: здобувач змінює параметри моделі, аналізує графіки й карти мікроструктури та оцінює вплив технологічних параметрів на перебіг процесу.

МЕТА, КОМПЕТЕНТНОСТІ ТА РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Мета курсу – сформувати здатність застосовувати сучасні фізико-математичні та чисельні підходи для аналізу й прогнозування фазових, дифузійних, структурних і теплових процесів у матеріалах під час термічної обробки, а також обґрунтовано інтерпретувати



результати комп'ютерного моделювання під час розв'язання матеріалознавчих та інженерно-технологічних задач.

Компетентності та результати навчання, формування яких забезпечує дисципліна:

Загальні компетентності:

- ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- ЗК4. Здатність спілкуватися іноземною мовою.
- ЗК6. Здатність працювати в команді.
- ЗК7. Здатність працювати у міжнародному контексті.
- ЗК8. Прагнення до збереження навколишнього середовища.

Спеціальні (фахові) компетентності:

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

СК2. Здатність планувати та проводити дослідження у сфері матеріалознавства в лабораторних і виробничих умовах із використанням сучасних методів та методик експерименту.

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

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

СК7. Здатність оцінювати техніко-економічну ефективність досліджень, технологічних процесів та інноваційних розробок з урахуванням невизначеності умов і вимог.

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.

СК12. Здатність розробляти та реалізовувати проекти в сфері матеріалознавства та дотичні міждисциплінарні проекти.

Результати навчання:

ПРН 3. Вільно спілкуватися державною та англійською мовами усно і письмово для обговорення професійних проблем і результатів діяльності у сфері матеріалознавства та ширшого кола інженерних питань, презентації результатів досліджень та інноваційних проєктів.

ПРН 9. Застосовувати методи LCA-аналізу, екоаудиту та підходи сталого розвитку під час розроблення нових матеріалів і впровадження нових технологій.

ПРН 10. Навички презентації наукового матеріалу та аргументів для добре інформованої аудиторії.

ПРН 16. Здатність ефективно використовувати на практиці теоретичні концепції менеджменту та ділового адміністрування.

ПРН 19. Розробляти комплексний дизайн нових матеріалів і виробів на їх основі з урахуванням експлуатаційних властивостей та умов використання.



ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ 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.

ПЕРЕЛІК ТЕМ (ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН) ДИСЦИПЛІНИ

Таблиця 1 – Загальний тематичний план аудиторної роботи

Номер тижня	Теми лекцій, год.	Теми практичних робіт, год.
Змістовий модуль 1. Термодинамічні основи та фазові рівноваги в матеріалах		
1	Методологічні основи комп'ютерного моделювання матеріалів і процесів термічної обробки, (2 год.)	
2	Термодинамічні потенціали та критерії фазової стабільності, (2 год.)	Пр. № 1. Розрахунок фазових рівноваг у сплавах методами CALPHAD, (4 год., 2 заняття)
3	Фазові рівноваги та CALPHAD-моделювання багатокомпонентних матеріалів, (2 год.)	
4	Термодинамічна рівновага, метастабільність і нерівноважні фазові стани, (2 год.)	
Змістовий модуль 2. Дифузійні процеси та кінетика фазових перетворень		
5	Дифузійні процеси та їх чисельне моделювання, (2 год.)	
6	Термодинаміка і кінетика зародження нових фаз, (2 год.)	Пр. № 2. Чисельне моделювання дифузії вуглецю під час цементації сталі методом скінченних різниць, (4 год., 2 заняття)
7	Кінетичне моделювання фазових перетворень: рівняння JMAK, TTT- і CCT-діаграми, (2 год.)	
8	Моделювання твердіння сплавів: дендритний ріст і мікроліквація, (2 год.)	
Змістовий модуль 3. Чисельне моделювання формування та еволюції мікроструктури		
9	Клітинно-автоматне моделювання еволюції зеренної структури, (2 год.)	
10	Метод фазового поля в моделюванні структурно-фазових перетворень, (2 год.)	Пр. № 3. Клітинно-автоматне моделювання росту зеренної структури, (4 год., 2 заняття)
11	Моделювання дисперсійного виділення та коагуляції зміцнювальних фаз, (2 год.)	
12	Прогнозування фазово-структурного стану матеріалів за заданих режимів охолодження, (2 год.)	



Номер тижня	Теми лекцій, год.	Теми практичних робіт, год.
Змістовий модуль 4. Інтегроване моделювання процесів термічної обробки		
13	Чисельне моделювання теплоперенесення під час термічної обробки, (2 год.)	
14	Інтегроване обчислювальне матеріалознавство (ICME): взаємозв'язок «процес–структура–властивості», (2 год.)	Пр. № 4. Комп'ютерне моделювання кінетики фазово-структурних перетворень під час охолодження, (4 год., 2 заняття)
15	Методи машинного навчання в задачах прогнозування властивостей матеріалів, (2 год.)	
16	Цифрові двійники процесів термічної обробки та інтеграція моделей, (2 год.)	

САМОСТІЙНА РОБОТА

1–4 тижні – опрацювання матеріалу з термодинамічних потенціалів, фазової рівноваги, діаграм стану та принципів CALPHAD; підготовка до практичної роботи № 1.

5–8 тижні – опрацювання законів Фіка, умов стійкості чисельної схеми, теорії зародження, JMAK та TTT/CCT-діаграм; оформлення практичної роботи № 2.

9–12 тижні – вивчення клітинно-автоматного і фазово-польового підходів, аналіз закономірностей росту зерен і дисперсійних виділень; оформлення практичної роботи № 3.

13–16 тижні – опрацювання основ теплоперенесення, ICME, машинного навчання та цифрових двійників; виконання й оформлення практичної роботи № 4.

Загальний обсяг самостійної роботи – 72 години. Загальний обсяг дисципліни – 120 годин (4 кредити ЄКТС).

РЕКОМЕНДОВАНІ ІНФОРМАЦІЙНІ ТА НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНІ ДЖЕРЕЛА

Для опрацювання курсу використовуються підготовлені викладачем конспекти лекцій, методичні вказівки до практичних робіт та наведені нижче базові джерела.

Навчально-методичні матеріали:

1. Конспекти лекцій з дисципліни «Моделювання матеріалів і процесів термічної обробки» (електронний курс / навчальна платформа університету).

2. Методичні матеріали до практичних робіт № 1–4 з комп'ютерного моделювання фазових рівноваг, дифузії, росту зерен і структурних перетворень.

Літературні та програмні джерела:

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.

ОЦІНЮВАННЯ

Поточний контроль передбачає оцінювання теоретичної підготовки та результатів виконання практичних робіт. Рекомендований розподіл балів: практичні роботи № 1–4 – по



15 балів (разом 60 балів); короткі модульні контрольні заходи – 20 балів; підсумковий інтегрований контроль – 20 балів. Загальна кількість – 100 балів. Під час оцінювання практичної роботи 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 та набір мінімальної кількості балів, установлені чинними нормативними документами університету. Вид підсумкового контролю – залік.

ПОЛІТИКИ 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.

ТЕХНІЧНІ ВИМОГИ ДЛЯ РОБОТИ НА КУРСІ

Для роботи на курсі необхідні персональний комп'ютер або ноутбук з доступом до Інтернету та університетської навчальної платформи. Практичні завдання виконуються у



ЗАПОРІЗЬКА ПОЛІТЕХНІКА
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Google Colab або Jupyter Notebook з використанням Python 3 і бібліотек NumPy, Matplotlib, SciPy; для окремих фазових розрахунків використовується rusalphad. Спеціалізоване платне програмне забезпечення для виконання обов'язкових завдань не потрібне.