

Міністерство освіти і науки України
Донбаська державна машинобудівна академія (ДДМА)

П. Б. Абхарі

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ
НАНОТЕХНОЛОГІЙ ТА ІНТЕНСИВНОЇ
ПЛАСТИЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ (ПД)**

Частина 1

КОНСПЕКТ ЛЕКЦІЙ

**для здобувачів галузі знань 6 «Механічна інженерія»
денної та заочної форм навчання**

**Краматорськ
ДДМА
2025**

УДК 621.7(075.8)

Абхарі П.Б.

Комп'ютерне моделювання процесів нанотехнологій та інтенсивної пластичної деформації ПД (Частина 1): конспект лекцій для студентів галузі знань 6 «Механічна інженерія» денної та заочної форм навчання / П.Б. Абхарі– Краматорськ: ДДМА, 2025– 43 с.

У цьому конспекті лекцій представлено комплексну систему знань від фундаментальних основ математичного моделювання до практичного застосування спеціалізованих методів (включаючи атомістичне, мезо- та макроскопічне моделювання) та сучасного програмного забезпечення для дослідження, оптимізації та прогнозування процесів інтенсивної пластичної деформації та нанотехнологій, з акцентом на валідацію моделей, аналіз мультимасштабних підходів та перспектив інтеграції штучного інтелекту у контексті розвитку матеріалознавства.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
Розділ 1: Поняття до математичного та комп'ютерного моделювання в задачах приладобудування	7
1.1 Роль та значення комп'ютерного моделювання	7
1.2 Динамічні системи – основа моделей у техніці	8
1.3 Структура математичного моделювання	9
1.4 Моделювання технологічних систем	9
1.5 Методологія моделювання систем і процесів	10
1.6 Етапи процесу математичного моделювання	11
1.7 Вимоги до якісних математичних моделей	11
1.8 Класифікація типів математичного моделювання	12
Висновок до розділу	13
Розділ 2: Методи побудови математичних моделей систем і процесів	14
2.1 Аналітичне моделювання	14
2.2 Імітаційне моделювання	14
2.3 Статистичне моделювання. Метод Монте-Карло	15
2.4 Класифікація та опис моделей	16
Висновок до розділу	18
Розділ 3: Ефективні технології для математичного моделювання систем і процесів	19
3.1 Символьні обчислення та інтегровані середовища	19
3.2 Архітектура систем комп'ютерної математики (СКМ)	19
3.3 Функціональні можливості сучасних СКМ	20
3.4 Огляд провідних систем комп'ютерної математики	21
Висновок до розділу	22
Розділ 4: Спеціалізовані методи моделювання на нано- та мікрорівні	23
4.1 Атомістичне моделювання	23
4.2 Мезоскопічні методи	25

4.3	Мультимасштабне моделювання	26
	Висновок до розділу	27
	Розділ 5: Комп'ютерне моделювання процесів інтенсивної пластичної деформації (ПД)	28
5.1	Мета та завдання моделювання процесів ПД	28
5.2	Метод скінченних елементів (МСЕ) як основний інструмент моделювання ПД	28
5.3	Моделювання еволюції мікроструктури під час ПД	30
5.4	Практичний приклад: Оптимізація РККП за допомогою МСЕ	31
	Висновок до розділу	31
	Розділ 6: Валідація моделей та практичне застосування	33
6.1	Експериментальне підтвердження результатів моделювання (Валідація)	33
6.2	Практичне застосування валідованих моделей	34
	Висновок до розділу	35
	Розділ 7: Сучасні тенденції та висновки	37
7.1	Сучасні тенденції та майбутні напрями	37
7.2	Комп'ютерне моделювання як основа революції в матеріалознавстві	38
	Висновок до розділу	39
	ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ	41
	СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	43

ВСТУП

Сучасний етап розвитку технологій характеризується переходом від емпіричного підходу до створення нових матеріалів до науково-обґрунтованого проектування. Особливе місце в цьому процесі займають інтенсивна пластична деформація (ПД) та нанотехнології, що дозволяють отримувати матеріали з унікальними властивостями шляхом формування ультрадрібнозернистої та нанокристалічної структури. Однак розробка та оптимізація таких технологій потребують глибокого розуміння фізико-механічних процесів, що відбуваються на різних структурних рівнях – від атомарного до макроскопічного.

Комп'ютерне моделювання стало потужним інструментом, що дозволяє проникнути в суть цих явищ, забезпечуючи зв'язок між теоретичними концепціями, експериментальними дослідженнями та практичним застосуванням. Воно відкриває можливості для віртуального проведення експериментів, аналізу альтернативних варіантів технологічних процесів та прогнозування властивостей матеріалів ще на етапі їх проектування.

Даний конспект лекцій системно викладає фундаментальні основи та практичні аспекти комп'ютерного моделювання, зосереджуючись на застосуванні його методів у галузі нанотехнологій та інтенсивної пластичної деформації. У рамках семи розділів послідовно розкривається:

- Теоретичний фундамент математичного та комп'ютерного моделювання
- Методологічні основи побудови моделей різного рівня складності
- Сучасний програмний інструментарій для проведення обчислень
- Спеціалізовані методи для дослідження нано- та мікрорівнів
- Практичне застосування моделювання для технологій ПД
- Методи верифікації та валідації моделей

- Перспективні напрями розвитку комп'ютерного моделювання

Матеріал спрямований на формування у майбутніх інженерів-механіків комплексного уявлення про можливості сучасних методів моделювання та набуття практичних навичок їх застосування для вирішення актуальних задач у галузі матеріалознавства та технологій обробки матеріалів тиском.

Розділ 1: Поняття до математичного та комп'ютерного моделювання в задачах приладобудування

1.1 Роль та значення комп'ютерного моделювання

Комп'ютерне (цифрове) моделювання сьогодні є одним з найпотужніших інструментів для дослідження та проектування складних динамічних систем, до яких належать і сучасні технологічні комплекси, і точні прилади.

Ключові переваги цього методу:

- **Обчислювальний експеримент:** Дозволяє проводити випробування системи ще на етапі її проектування, до створення фізичного прототипу.
- **Економія ресурсів:** Дає змогу вивчати системи, натурні експерименти з якими є надто дорогими, тривалими або небезпечними.
- **Доступність:** Близькість за принципом до фізичного моделювання робить цей метод зрозумілим та доступним для широкого кола інженерів.

Хоча в тексті-оригіналі йшлося про медицину, в контексті **механічної інженерії та приладобудування** акценти зміщуються. Комп'ютерне моделювання стає незамінним, коли:

- Фізичний експеримент може пошкодити дороге обладнання або бути небезпечним для оператора (наприклад, випробування на міцність, визначення критичних режимів роботи).
- Необхідно протестувати тисячі варіантів конструкції для пошуку оптимальної.
- Потрібно дослідити внутрішні процеси, недоступні для прямого спостереження (наприклад, розподіл напружень у матеріалі, теплові поля, потік рідини у складному каналі).

Сучасні інструменти — комп'ютерні графічні середовища (CAD/CAE

системи) та пакети візуального моделювання (наприклад, MATLAB/Simulink, ANSYS, Comsol Multiphysics) — дозволяють інженеру не просто створювати моделі, а й проводити з ними комплексні дослідження, забезпечуючи високу точність та аналіз обчислювальної складності задачі [1, 2].

1.2 Динамічні системи – основа моделей у техніці

Більшість технологічних процесів та приладів характеризуються змінами у часі. Швидкість цих змін — найважливіша характеристика, яка часто визначає основні властивості системи. Оскільки швидкість зміни величини математично описується її похідною за часом, моделі природних і технологічних процесів нерідко містять похідні або інтеграли. Такі системи називають **динамічними**.

Класифікація динамічних моделей за складністю:

1. **Прості динамічні системи:** Описуються системами звичайних диференціальних рівнянь (ЗДР) у формі Коші з гладкими правими частинами, що гарантує існування та єдиність розв'язку.
 - *Приклад у механіці:* тіло, кинуте під кутом до горизонту; рух маятника; розрахунок часу наповнення басейну через труби.
2. **Складніші системи:** Включають системи ЗДР, доповнені нелінійними алгебраїчними рівняннями та допоміжними формулами. Чисельне моделювання таких систем складніше, але вони також піддаються розв'язку за умови однозначної розв'язності нелінійних рівнянь.

Математичний апарат для моделювання:

- **Звичайні диференціальні рівняння (ODE):** Невідома функція залежить від однієї незалежної змінної (зазвичай, часу). Використовуються для моделювання систем з зосередженими параметрами (наприклад, рух твердого тіла, електричні кола).
- **Диференціальні рівняння в частинних похідних (PDE):** Невідома

функція залежить від кількох змінних (наприклад, часу і просторових координат). Це основний апарат для моделювання полів (теплого, напружень, гідродинамічного) у фізиці та механіці.

- **Функціонально-диференціальні рівняння:** Використовуються для моделювання систем із запізненням, що актуально для задач керування та біології.

1.3 Структура математичного моделювання

Математичне моделювання як процес включає три взаємопов'язані частини:

- **Емпірична частина:** Фактичні дані експериментів, спостережень, вимірювань.
- **Теоретична частина:** Концепції та закони, що пояснюють емпіричні закономірності (наприклад, закони Ньютона, термодинаміки, теорія пружності).
- **Математична частина:** Безпосередньо модель — система математичних співвідношень, а також методи обробки даних та проведення експериментів.

Переваги математичного моделювання в інженерії:

- **Безпека:** Дозволяє уникати небезпечних натурних експериментів (випробування на міцність, аналіз аварійних режимів).
- **Економія часу та коштів:** Різке скорочення обсягу дорогих натурних випробувань шляхом попереднього віртуального скринінгу варіантів.
- **Гнучкість дослідження:** Можливість вивчити поведінку системи в умовах, які важко або неможливо відтворити в реальності.

1.4 Моделювання технологічних систем

Технологічна система — це складна динамічна система, що включає обладнання, засоби контролю, інструмент, транспортні пристрої, вироби та персонал, об'єднані для виконання певного технологічного процесу.

Технологічний процес — це частина виробничого процесу, спрямована на зміну стану предмета виробництва (наприклад, механічна обробка, складання, пайка).

Моделювання технологічної системи полягає в імітації операцій над продуктами на елементах виробництва. При цьому моделюються:

- Зміна параметрів продуктів (геометрія, властивості матеріалу).
- Стани елементів системи («зайнятий», «справний», «простає»).
- Передача продуктів між елементами (як передача інформації про їх параметри).

1.5 Методологія моделювання систем і процесів

Моделювання — це метод дослідження, заснований на заміні об'єкта-оригіналу його моделлю (іншим, подібним об'єктом), вивчення якої дає нову інформацію про оригінал.

Модель завжди є спрощенням реальності. Інженер виділяє лише ті властивості та характеристики, які є істотними для конкретного дослідження.

Класифікація моделей:

- **Експериментальні (фізичні):** Матеріальні копії об'єктів.
- **Теоретичні:** Описуються мовою певної науки. Серед них виділяють **математичні моделі**.

Математична модель — це система математичних співвідношень (рівнянь, нерівностей, функцій), що описує досліджуваний процес або систему.

Типи математичних моделей за підходом до побудови:

- **Структурні моделі:** Відтворюють внутрішню будову об'єкта. Поведінка моделі імітує поведінку об'єкта для певної множини вхідних впливів.
- **Функціональні моделі:** Побудовані на основі спостережень за вхідними і вихідними сигналами без аналізу внутрішньої структури («чорна скринька»).

1.6 Етапи процесу математичного моделювання

Процес моделювання можна представити у вигляді наступних етапів:

1. **Аналіз предметної області:** Визначення об'єкта, його середовища, взаємозв'язків та цілей дослідження.
2. **Побудова концептуальної моделі:** Формальний опис об'єкта, виділення ключових властивостей, структурних компонентів та зв'язків.
3. **Математичне формулювання:** Переклад концептуальної моделі на строгу математичну мову (рівняння, функції).
4. **Вибір методу дослідження:** Підбір аналітичних чи чисельних методів для роботи з моделлю.
5. **Комп'ютерна реалізація та чисельний експеримент:** Адаптація моделі для роботи на ЕОМ, проведення серії обчислювальних експериментів. Така модель називається **імітаційною**.
6. **Тестування та валідація моделі:** Перевірка адекватності моделі, тобто її відповідності реальному об'єкту.
 - **Якісна адекватність:** Модель правильно відтворює основні закономірності поведінки (наприклад, стійкість, коливальність).
 - **Кількісна адекватність:** Результати моделювання з достатньою точністю збігаються з експериментальними даними.
7. **Аналіз та інтерпретація результатів:** Переклад отриманих числових результатів у практичні висновки, рекомендації, прогнози щодо поведінки реального об'єкта.

1.7 Вимоги до якісних математичних моделей

- **Адекватність:** Модель має правильно (якісно та/або кількісно) описувати об'єкт за обраними характеристиками.
- **Стійкість (грубість):** Здатність моделі зберігати свої якісні

властивості при невеликих змінах параметрів або при наявності неврахованих збурень.

- **Простота та оптимальність:** Модель має бути якомога простішою для аналізу при забезпеченні необхідного рівня адекватності. Важливим є баланс між складністю моделі та можливістю її ефективного дослідження.
- **Врахування ієрархії змінних:** Змінні слід класифікувати за значимістю та швидкістю зміни (нормальні, повільні, швидкі). Це дозволяє спрощувати модель, замінюючи швидкі змінні їх середніми значеннями, а повільні – параметрами. Аналогічна класифікація можлива за просторовим впливом.

1.8 Класифікація типів математичного моделювання

1. За характером процесів:

- **Детерміноване:** Відсутні випадкові фактори.
- **Стохастичне:** Враховує ймовірнісні події та процеси.

2. За залежністю від часу:

- **Статичне:** Опис стану системи в певний момент часу.
- **Динамічне:** Опис поведінки системи в часі.

3. За типом математичного апарату (для динамічних моделей):

- **Дискретні:** Різницеві рівняння.
- **Неперервні:** Диференціальні рівняння (ODE, PDE).
- **Дискретно-неперервні:** Гібридні моделі.

4. За підходом до дослідження:

- **Аналітичне моделювання:** Основна увага приділяється отриманню загального розв'язку у вигляді формул.
- **Імітаційне моделювання:** Проведення чисельних експериментів на комп'ютері для дослідження поведінки моделі в різних умовах. Це найпоширеніший підхід у сучасному інженерному проектуванні.

Висновок до розділу: Математичне та комп'ютерне моделювання є фундаментальним інструментом інженера-механіка та приладобудівника. Воно дозволяє перейти від фізичних експериментів до віртуальних, що значно прискорює процес проектування, підвищує його якість та зменшує вартість. Розуміння типів моделей, етапів моделювання та вимог до їх якості є необхідною умовою успішної професійної діяльності.

Розділ 2: Методи побудови математичних моделей систем і процесів

2.1 Аналітичне моделювання

Аналітичне моделювання — це підхід, при якому процеси функціонування системи описуються у вигляді явних функціональних співвідношень: алгебраїчних, диференціальних, інтегральних рівнянь або їх систем [2, 3].

Методи дослідження аналітичних моделей:

- **Аналітичний:** Пряме отримання розв'язку у вигляді формули (аналітичного виразу). Це ідеальний, але рідко реалізований на практиці варіант.
- **Числовий:** Застосування чисельних методів (наприклад, Ейлера, Рунге-Кутта) для знаходження наближеного розв'язку в точках дискретної сітки. Використовується, коли отримати аналітичний розв'язок неможливо.
- **Якісний:** Дослідження властивостей розв'язку (таких як стійкість, періодичність, існування граничних циклів) без знаходження його точного вигляду.

Обмеження та сфера застосування: Точні аналітичні розв'язки вдається отримати лише для обмеженого класу задач — як правило, для лінійних рівнянь або простих нелінійних систем низького порядку. Для складніших, реальних інженерних задач (наприклад, розрахунок напружено-деформованого стану деталі складного профілю або моделювання турбулентного потоку) аналітичні рішення або надзвичайно громіздкі, або взагалі неможливі. У таких випадках вдаються до спрощення моделі (що часто погіршує її адекватність) або переходять до чисельних методів.

2.2 Імітаційне моделювання

Імітаційне моделювання — це метод, при якому алгоритм реалізує

модель, що відтворює процес функціонування системи в часі, імітуючи елементарні явища у їх логічній та часовій послідовності.

Ключова відмінність від аналітичного підходу: Імітаційна модель не дає єдиного рівняння або функції для розв'язку. Замість цього вона "відтворює" поведінку системи крок за кроком, дозволяючи спостерігати за її станом у різні моменти часу.

Перевага: Цей метод дозволяє працювати з набагато складнішими системами, включаючи ті, що містять нелінійності, випадкові фактори та складну логіку взаємодії елементів. Основним інструментом для імітаційного моделювання є комп'ютер.

2.3 Статистичне моделювання. Метод Монте-Карло

Статистичне моделювання застосовується для дослідження **стохастичних систем**, тобто систем, поведінка яких містить випадкові фактори. Модель має відтворювати ці випадкові процеси (наприклад, варіації матеріалів, зовнішні навантаження, шуми вимірювань) так, щоб їх імовірнісні характеристики відповідали реальним.

Мета та обробка результатів: Результатом статистичного моделювання є набір реалізацій (вибірок) поведінки системи. Ці дані піддаються статистичній обробці для отримання імовірнісних оцінок:

- **Параметричне оцінювання:** Розрахунок вибіркового середнього, дисперсії та інших параметрів розподілу.
- **Непараметричне оцінювання:** Побудова гістограм, емпіричних функцій розподілу.
- **Перевірка статистичних гіпотез:** Наприклад, чи впливає зміна параметра на середню ефективність системи.

Метод Монте-Карло Це фундаментальний метод статистичного моделювання, заснований на масовому генеруванні реалізацій випадкового процесу, імовірнісні характеристики якого збігаються з розв'язуваною задачею.

Сутть методу:

1. Визначається функціональна залежність між вхідними параметрами та виходом системи.
2. Для вхідних змінних, що мають випадковий характер, задаються їхні закони розподілу.
3. За допомогою генераторів випадкових чисел проводиться велика кількість "експериментів": для кожного "кидка" (реалізації) випадковим чином вибираються значення вхідних параметрів відповідно до їхніх розподілів і обчислюється результат.
4. Отримана вибірка результатів аналізується статистичними методами.

Застосування в інженерії: Метод Монте-Карло незамінний для аналізу надійності складних систем, оцінки ризиків, дослідження процесів з випадковими збуреннями та оптимізації в умовах невизначеності.

2.4 Класифікація та опис моделей

Процес створення математичної моделі включає три концептуальні стадії:

1. **Уявна (ментальна) модель:** Мислений образ об'єкта, що формується у дослідника. На цьому етапі вирішується, якими властивостями об'єкта можна знехтувати, а які є ключовими. Її вербальний опис називається **змістовною моделлю**.
2. **Концептуальна модель:** Формалізований опис структури об'єкта, його елементів, зв'язків між ними та причинно-наслідкових відношень. Виділяють типи:
 - **Логіко-семантичні:** Опис об'єкта термінами конкретної галузі знань (наприклад, "швидкість різання", "подача").
 - **Структурно-функціональні:** Представлення об'єкта як цілісної системи з підсистемами, що взаємодіють за певною структурою.
 - **Причинно-наслідкові:** Моделі, що описують, як вхідні впливи

викликають зміни станів системи.

3. **Формальна модель:** Представлення концептуальної моделі засобами формальної мови – математики, алгоритмів, мов програмування. Це власне, математична модель.

Класифікація моделей за властивостями:

- **За кількістю станів:**
 - **Статичні:** Стан системи не змінюється в часі.
 - **Динамічні:** Стан системи змінюється в часі.
- **За типом множини станів (для динамічних систем):**
 - **З дискретними станами:** Стани можна перенумерувати (наприклад, стан верстата: "увімкнено", "вимкнено", "аварія").
 - **З неперервними станами:** Стан описується безперервними змінними (наприклад, координати, швидкість, температура).
- **За характером переходів між станами:**
 - **Детерміновані:** Наступний стан однозначно визначається поточним станом і часом.
 - **Стохастичні:** Перехід до нового стану відбувається з певною ймовірністю.
- **За типом параметрів (для динамічних систем з неперервними станами):**
 - **Із зосередженими параметрами:** Параметри залежать лише від часу (описуються звичайними диференціальними рівняннями - ODE). Приклад: коливання маятника.
 - **Із розподіленими параметрами:** Параметри залежать від часу та просторових координат (описуються рівняннями в частинних похідних - PDE). Приклад: розподіл температури в деталі під час термообробки.
- **За типом часу (для дискретних систем):**
 - **Синхронні:** Моменти зміни станів фіксовані.
 - **Асинхронні:** Переходи відбуваються у випадкові або

нерегулярні моменти часу.

- **За лінійністю:**

- **Лінійні моделі:** Для них справедливий **принцип суперпозиції**. Реакція системи на суму впливів дорівнює сумі реакцій на кожен вплив окремо. Це значно спрощує аналіз, але такі моделі є лише наближенням для обмеженого класу явищ.
- **Нелінійні моделі:** Принцип суперпозиції не діє. Реакція системи може якісно змінюватися залежно від величини впливу (наприклад, явище резонансу, автоколивання, хаос). **Більшість реальних процесів у механічній інженерії є суттєво нелінійними**, тому їх моделювання вимагає застосування складних чисельних та імітаційних методів.

Висновок до розділу: Вибір методу побудови моделі (аналітичний, імітаційний, статистичний) та її тип (статична/динамічна, лінійна/нелінійна тощо) повністю залежить від специфіки об'єкта дослідження та поставленої задачі. Розуміння цієї класифікації дозволяє інженеру обґрунтовано підійти до процесу моделювання та обрати найефективніший інструментарій для його реалізації.

Розділ 3: Ефективні технології для математичного моделювання систем і процесів

3.1 Символьні обчислення та інтегровані середовища

Символьні обчислення (комп'ютерна алгебра) — це розділ математичного моделювання, де комп'ютер оперує математичними виразами в аналітичній (символьній) формі, а не лише з числами. Ці інструменти є важливою складовою частиною сучасних систем автоматизації інженерної діяльності (САПР) [3, 4].

Ключові напрями САПР:

1. **CAD (Computer-Aided Design):** Системи автоматизованого проектування для створення 2D- та 3D-моделей деталей та вузлів.
2. **CAM (Computer-Aided Manufacturing):** Системи автоматизованої підготовки виробництва для генерації управляючих програм для верстатів з ЧПК.
3. **CAE (Computer-Aided Engineering):** Системи інженерного аналізу, до яких належать засоби математичного моделювання, скінченно-елементного аналізу (FEA), аналізу динаміки рідин (CFD) тощо.

Сьогодні серйозне проектування в машинобудуванні та приладобудуванні неможливе без використання цих систем. Математичні пакети, як складова CAE, стають незамінними для вирішення складних задач, які неможливо розв'язати вручну.

Сучасні середовища (такі як Maple, Mathematica, MATLAB) працюють за принципом **конструювання моделі**: інженер формулює задачу на високому рівні, а система бере на себе всі рутинні операції (перетворення виразів, диференціювання, інтегрування, чисельні розрахунки).

3.2 Архітектура систем комп'ютерної математики (СКМ)

Типова структура сучасної СКМ включає:

- **Обчислювальне ядро:** Містить базові, оптимізовані за швидкістю алгоритми та функції. Саме потужність ядра визначає базові можливості системи.
- **Інтерфейсна оболонка:** Забезпечує інтуїтивну взаємодію користувача з системою, включаючи введення команд, візуалізацію результатів, редагування та управління файлами.
- **Бібліотеки та пакети розширення:** Спеціалізовані модулі, що розширюють функціонал ядра для конкретних галузей (наприклад, механіки, теорії керування, обробки сигналів).
- **Довідкова система:** Інтерактивна енциклопедія, що містить описи функцій, приклади застосування та навчальні матеріали.

3.3 Функціональні можливості сучасних СКМ

Сучасні СКМ пропонують широкий спектр можливостей для інженера-механіка:

Аналітичні (символьні) обчислення:

- Спрощення, факторизація та перетворення складних математичних виразів.
- Диференціювання (в тому числі в частинних похідних) та інтегрування.
- Розв'язування систем алгебраїчних і диференціальних рівнянь в аналітичному вигляді.
- Знаходження границь, розклад у ряди.
- Операції лінійної алгебри (робота з матрицями, векторами, тензорами).
- Інтегральні перетворення (Фур'є, Лапласа).

Чисельні методи:

- Розв'язування складних рівнянь та систем, де аналітичний розв'язок неможливий.
- Апроксимація та інтерполяція даних.

- Статистичний аналіз та оптимізація.
- Обчислення з довільною точністю.

Візуалізація та програмування:

- Побудова якісних 2D та 3D графіків (явних, неявних, параметричних функцій).
- Створення анімацій динамічних процесів.
- Мови програмування високого рівня для автоматизації розрахунків та створення власних алгоритмів.
- Експорт результатів у зручному для документування вигляді.

3.4 Огляд провідних систем комп'ютерної математики

1. Maple Спеціалізація: Потужні символні обчислення.

Особливості:

- Інтуїтивний інтерфейс у вигляді "робочого аркуша" (Worksheet), що поєднує текст, математичні формули, код та графіки.
- Потужне вбудоване середовище процедурного програмування.
- Розширені засоби для аналітичного розв'язування диференціальних рівнянь та перетворень.
- Модуль **MapleSim** для багатодоменого візуального моделювання динамічних систем.
- Підтримка стандарту MathML для інтеграції математики в веб-середовище.

2. Mathematica (Wolfram Language) Спеціалізація: Універсальність, інтеграція даних, символні та чисельні обчислення. Особливості:

- Єдиний мовний підхід (Wolfram Language) — мова програмування високого рівня, орієнтована на знання.
- Інноваційний інтерфейс, що дозволяє формулювати запити природньою мовою.
- Потужні можливості для роботи з великими даними ("data science") та підключення до баз даних.

- Архітектура, де інтерфейс відокремлений від ядра, що забезпечує стабільність під час ресурсомістких обчислень.
- Велика кількість вбудованих ("curated") даних (про матеріали, географічні об'єкти тощо).

3. MATLAB Спеціалізація: Чисельні обчислення, матричні операції, інженерний аналіз та моделювання. **Особливості:**

- Мова, оптимізована для операцій з векторами та матрицями ("думай по-векторно").
- Широко використовується в академічних колах та промисловості.
- **Simulink** — інтуїтивне середовище для візуального моделювання динамічних, багатодомених систем (механічних, електричних, гідравлічних).
- **Toolboxes** — величезна колекція спеціалізованих пакетів розширення для різних галузей (наприклад, Control System Toolbox, Optimization Toolbox, Partial Differential Equation Toolbox).
- Символьні обчислення реалізовані через інтегроване ядро Maple.

Висновок до розділу: Вибір конкретної системи комп'ютерної математики залежить від специфіки задачі. Для глибокого аналітичного перетворення та розв'язування диференціальних рівнянь ідеальним вибором є **Maple**. Для універсальних досліджень, що поєднують математику, роботу з даними та програмування високого рівня, підходить **Mathematica**. Для складних чисельних розрахунків, матричного аналізу, моделювання динамічних систем та інтеграції з системами автоматизованого проектування найефективнішим є **MATLAB/Simulink**. Сучасний інженер повинен вільно орієнтуватися в можливостях цих середовищ для ефективного вирішення професійних задач.

Розділ 4: Спеціалізовані методи моделювання на нано- та мікрорівні

Для глибокого розуміння та прогнозування властивостей матеріалів, отриманих методами інтенсивної пластичної деформації (ІПД) та нанотехнологіями, класичних підходів механіки суцільного середовища вже недостатньо. Необхідно "зазирнути" всередину матеріалу на рівень атомів, дефектів кристалічної ґратки та мікрозерен. Для цього використовуються спеціалізовані методи комп'ютерного моделювання [4, 5].

4.1 Атомістичне моделювання

Ця група методів дозволяє досліджувати поведінку матеріалу на найфундаментальнішому рівні — рівні окремих атомів.

- **Метод Монте-Карло (МК):**

- **Принцип:** Цей метод моделює не динаміку системи, а її **рівноважні стани**. Він ґрунтується на генерації послідовності випадкових конфігурацій атомів (станів системи), які приймаються або відхиляються згідно з критерієм мінімізації енергії (наприклад, критерієм Метрополіса).
- **Застосування в матеріалознавстві:**
 - Моделювання **процесів відпалу** та відновлення структури після деформації.
 - Дослідження **сегрегації атомів** на границях зерен.
 - Моделювання початкових стадій **фазових перетворень**.
 - Розрахунок рівноважних конфігурацій дефектів.

- **Молекулярна динаміка (МД):**

- **Принцип:** Цей метод моделює **реальну динаміку** руху атомів у часі. Рух кожної частинки описується класичними рівняннями Ньютона. Сила, що діє на кожен атом, розраховується як похідна від потенційної енергії взаємодії системи.

- **Застосування в матеріалознавстві:**
 - Моделювання **пластичної деформації** на нанорівні: рух дислокацій, утворення дефектів упаковки, twins (двійників).
 - Дослідження **розповсюдження тріщин**.
 - Моделювання процесів **дифузії** та фазових перетворень у неквазірівноважних умовах.
 - Дослідження механічних властивостей нанорозмірних об'єктів (наностержні, нанопроволоки).
- **Обмеження:**
 - **Масштаб часу:** Типовий часовий масштаб МД-моделювання — нано- до десятків пікосекунд. Це ускладнює безпосереднє моделювання повільних процесів, як-от повзучість.
 - **Масштаб довжини:** Моделювання систем обмежене мільйонами або десятками мільйонів атомів (кубік зі стороною $\sim 10\text{-}50$ нм).
- **Потенціали міжатомної взаємодії:**
 - **Важливість:** Точність МД та МК моделювання критично залежить від якості **міжатомного потенціалу** — функції, що описує енергію взаємодії між атомами в залежності від відстані.
 - **Типи потенціалів:**
 - **Парні потенціали (наприклад, Леннард-Джонса, Морзе):** Прості, але недостатньо точні для металів, оскільки не враховують багаточастинкові ефекти.
 - **Напіваемпіричні потенціали (наприклад, Ема, Терсоффа, MEAM):** Найпоширеніші для металів. Вони враховують електронну густину і дозволяють адекватно описувати механічні властивості, дефекти та поверхневі явища.

4.2 Мезоскопічні методи

Ці методи працюють на проміжному рівні між атомістичним і макроскопічним, оперуючи поняттями дислокацій, зерен та інших мікроструктурних об'єктів.

- **Метод скінченних елементів (МСЕ) у матеріалознавстві:**

- **Принцип:** Класичний МСЕ застосовується не до деталі в цілому, а до її мікроструктури. Модель будується з урахуванням реальної або ідеалізованої зеренної структури.
- **Концепція представничного об'єму елемента (RVE):** Це мінімальний об'єм матеріалу, статистично представляючий його мікроструктуру та властивості в цілому. Моделювання RVE дозволяє визначити ефективні макроскопічні властивості композитів або полікристалів на основі їх мікроструктури.
- **Застосування:**
 - Прогнозування **місцевого плину** та руйнування на рівні окремих зерен.
 - Моделювання впливу **морфології зерен** та їх орієнтації (текстури) на макровластивості.
 - Дослідження концентрації напружень на тріщинах та порожнечах.

- **Метод дискретних елементів (МДЕ):**

- **Принцип:** Система моделюється як сукупність окремих дискретних частинок (елементів), взаємодія між якими описується заданими законами (пружність, тертя, зчеплення).
- **Застосування:**
 - Моделювання поведінки **гранульованих середовищ** (порошки, кераміка).
 - Дослідження процесів **механічного легування**.
 - Моделювання руйнування крихких матеріалів з утворенням великої кількості уламків.

- **Моделі кристалопластичності:**

- **Принцип:** Ці моделі безпосередньо зв'язують макроскопічну пластичну деформацію з рухом дислокацій по певних системах ковзання в кристалах. Деформація розглядається як результат зсуву кристалічних шарів.
- **Застосування:**
 - Прогнозування **анизотропії** механічних властивостей полікристалів.
 - Моделювання формування **деформаційної текстури** під час ПД.
 - Дослідження впливу розміру зерна на міцність (ефект Холла-Петча).

4.3 Мультимасштабне моделювання

Оскільки жоден метод не може охопити всі масштаби одночасно, виникає необхідність у їх комбінуванні.

- **Концепція та необхідність:** Мультимасштабне моделювання — це парадигма, що поєднує методи різних масштабів в єдиній обчислювальній схемі. Наприклад, властивості границі зерна, розраховані методом МД, можуть бути використані як вхідні параметри для моделі кристалопластичності в МСЕ, яка, у свою чергу, прогнозує поведінку макроскопічного зразка.
- **Підходи:**
 - **Послідовне зв'язування (Hierarchical):** Результати моделювання на нижчому рівні (наприклад, розрахунок енергії границі зерна методом МД) усереднюються і служать вхідними параметрами для моделі вищого рівня (наприклад, МСЕ). Це найпоширеніший та найпростіший підхід.
 - **Одночасне зв'язування (Concurrent):** Різні масштаби моделюються паралельно в різних областях системи.

Наприклад, область концентрації напружень біля тріщини моделюється методом МД, а решта матеріалу — методом МСЕ. Це обчислювально-складніший, але потужніший підхід.

Висновок до розділу: Спеціалізовані методи моделювання на нано- та мікрорівні відкривають унікальні можливості для фундаментального розуміння процесів, що відбуваються в матеріалах під час інтенсивної пластичної деформації та інших нанотехнологічних впливів.

- **Атомістичні методи (МК, МД)** дозволяють без експерименту "спостерігати" за рухом окремих атомів, утворенням та рухом дислокацій, що є основою пластичної деформації. Вони дають точні, але обмежені за масштабом результати.
- **Мезоскопічні методи (МСЕ мікроструктури, МДЕ, кристалопластичність)** дозволяють вивчати колективну поведінку дефектів та зерен, прогнозуючи макроскопічний відгук матеріалу на основі його мікроструктури.
- **Мультимасштабне моделювання** є найперспективнішим напрямком, який усуває розрив між масштабами. Воно дозволяє створювати прогнозуючі моделі, де властивості матеріалу "прораховуються" з перших принципів, а не підбираються емпірично.

Таким чином, сучасний дослідник має у своєму розпорядженні потужний інструментарій, що дозволяє не тільки пояснювати спостережувані явища, але й активно проектувати нові матеріали з заданими властивостями, оптимізуючи технологічні процеси, такі як ІПД, віртуально, до їх реалізації в лабораторії.

Розділ 5: Комп'ютерне моделювання процесів інтенсивної пластичної деформації (ІПД)

5.1 Мета та завдання моделювання процесів ІПД

Інтенсивна пластична деформація (ІПД) — це сукупність спеціальних методів обробки металевих матеріалів тиском, що дозволяють отримувати ультрадрібнозернисту (УДЗ) та нанокристалічну структуру за рахунок накопичення високої щільності дефектів кристалічної ґратки (дислокацій, меж зерен). Комп'ютерне моделювання стало незамінним інструментом для розробки та оптимізації цих складних процесів [6, 7].

Основні цілі моделювання ІПД:

- 1. Розуміння механізмів деформації:** Аналіз того, як саме відбувається зміцнення, фрагментація зерен та формування нових меж.
- 2. Прогнозування мікроструктури:** Визначення кінцевого розміру зерна, текстури деформації та розподілу дефектів після одного або декількох циклів ІПД.
- 3. Оптимізація технологічних параметрів:** Вибір оптимальної температури, швидкості деформації, геометрії інструменту та кількості проходів для досягнення цільових властивостей.
- 4. Зниження вартості розробки:** Мінімізація кількості дорогих та трудомістких натурних експериментів.

5.2 Метод скінченних елементів (МСЕ) як основний інструмент моделювання ІПД

МСЕ є найпоширенішим методом для моделювання процесів ІПД на макрорівні, оскільки дозволяє врахувати складну геометрію, контактні умови та нелінійні властивості матеріалів.

Етапи МСЕ-моделювання процесу ІПД (на прикладі рівноканального кутового пресування - РККП):

- 1. Створення геометричної моделі:**

- Побудова 3D-моделей всіх компонентів: матриці (інструменту) з каналами, пуансона та заготовки.
- Врахування реальних геометричних параметрів: кута перетину каналів (Φ), кута зовнішнього радіуса (Ψ).

2. Визначення властивостей матеріалів:

- **Інструмент (матриця, пуансон):** Моделюється як абсолютно жорстке або пружно-деформоване тіло з високою міцністю (наприклад, інструментальна сталь).
- **Заготовка:** Задається модель пластичного течії матеріалу. Найчастіше використовують модель Джонсона-Кука або модель з ізотропним/кінематичним зміцненням, параметри якої отримують з експериментів.
- **Умови контакту та тертя:** Критично важливий параметр. Задаються закони тертя (наприклад, Зібель, Кулон) та коефіцієнт тертя. Невірно задане тертя може призвести до нереалістичного розподілу деформації та зусиль.

3. Завдання граничних умов та сітки:

- На пуансон накладається умова переміщення з певною швидкістю.
- Матриця фіксується.
- Заготовка дискретизується скінченними елементами. Для зон, де очікується інтенсивна деформація, сітка згущується.

4. Проведення розрахунку та аналіз результатів:

Після розрахунку аналізуються ключові поля результатів:

- **Ефективна деформація (Effective Strain):**
 - Показує, наскільки рівномірно деформувалася заготовка.
 - Дозволяє визначити зони "мертвої металургії", де деформація недостатня, та зони максимального зминання.
 - **Мета моделювання:** досягти максимально рівномірного розподілу деформації по перерізу заготовки.
- **Еквівалентні напруження (Equivalent Stress):**

- Визначає величину напружень, необхідних для деформації.
- Дозволяє оцінити необхідне зусилля пресування та ризик руйнування інструменту або заготовки.
- **Швидкість деформації (Strain Rate):**
 - Впливає на механізми деформації та динамічні процеси відновлення (динамічна рекристалізація).
- **Температура:**
 - Моделюється розподіл температури за рахунок деформаційного нагріву. Це важливо для прогнозування мікроструктурних змін.

5.3 Моделювання еволюції мікроструктури під час ПД

МСЕ дає макроскопічні поля, але для прогнозування зміни мікроструктури використовуються додаткові моделі, що інтегруються з результатами МСЕ.

- **Моделі динамічної рекристалізації (DRX):**
 - **Принцип:** Ці моделі прогнозують утворення нових бездефектних зерен в процесі деформації при високих температурах.
 - **Вхідні дані:** Температура, швидкість деформації, ступінь деформації з МСЕ-моделі.
 - **Вихід:** Розподіл розміру нового зерна по об'єму заготовки. Це дозволяє оптимізувати температурно-швидкісні режими ПД для отримання найбільш дрібнозернистої структури.
- **Моделі на основі клітинних автоматів (КА):**
 - **Принцип:** Простір матеріалу розбивається на клітинки (атоми, об'єми), кожна з яких може знаходитися в певному стані (наприклад, належати до певного зерна). Стан клітинки змінюється за простими правилами, залежними від стану сусідніх клітинок.
 - **Застосування в ПД:**

- Моделювання зростання та фрагментації зерен.
- Відтворення реальної морфології зерен після деформації.
- Дослідження впливу початкової структури на кінцеву.

5.4 Практичний приклад: Оптимізація РККП за допомогою МСЕ

Задача: Зменшити нерівномірність деформації та знизити зусилля пресування в процесі РККП.

Хід роботи:

1. Створюється базова МСЕ-модель стандартного інструменту.
2. Проводиться розрахунок. Аналіз показує зони низької деформації в центрі заготовки та екстремально високі зусилля.
3. **Модифікація моделі:** Змінюються геометричні параметри (наприклад, зовнішній радіус Ψ , додається спеціальний виступ у каналі).
4. Проводиться серія віртуальних експериментів з різними модифікаціями.
5. **Результат оптимізації:** Знаходиться конфігурація інструменту, яка забезпечує на 30% більш рівномірний розподіл деформації та знижує пікове зусилля на 15%.

Висновок до розділу: Комп'ютерне моделювання, зокрема метод скінченних елементів, кардинально змінило підхід до розробки та вдосконалення технологій інтенсивної пластичної деформації. Воно перетворило цей процес з мистецтва, що ґрунтувалось на інтуїції та численних дорогих експериментах, на точну інженерну дисципліну.

- **МСЕ дозволяє:** Візуалізувати та кількісно оцінити внутрішні параметри процесу (деформацію, напруження, температуру), які неможливо виміряти експериментально.
- **Інтеграція з мікроструктурними моделями (DRX, KA)** забезпечує перехід від прогнозування макроскопічних полів до прогнозування

кінцевих структурних та експлуатаційних властивостей матеріалу.

- **Можливість віртуальної оптимізації** геометрії інструменту та технологічних режимів дозволяє значно скоротити час і витрати на виведення технології на промисловий рівень.

Таким чином, комп'ютерне моделювання є не просто допоміжним інструментом, а ключовою ланкою в ланцюжку створення нових матеріалів із ультрадрібнозернистою структурою методом ПД, забезпечуючи науково-обґрунтований підхід до їх проектування.

Розділ 6: Валідація моделей та практичне застосування

Створення математичної моделі – це лише перша половина шляху. Без перевірки її відповідності реальності та чіткого розуміння сфери застосування, результати моделювання можуть бути не лише марними, але й призвести до помилкових технологічних рішень. Цей розділ присвячено критичному етапу валідації (верифікації) моделей та їх інтеграції в реальний інженерний процес [8, 9].

6.1 Експериментальне підтвердження результатів моделювання (Валідація)

Валідація – це процес визначення ступеня відповідності моделі реальному об'єкту або процесу. Для моделей ІПД та нанотехнологій вона проводиться на кількох рівнях.

Макрорівень (порівняння з даними механічних випробувань та силовими параметрами):

- **Криві "напруження-деформація":** Найпоширеніший метод. Результати МСЕ-моделювання (ефективне напруження та деформація) порівнюються з експериментально отриманими кривими при різних температурах та швидкостях деформації.
 - **Якісна валідація:** Форма кривої з моделі повинна відповідати експериментальній (наявність пружної ділянки, межі плинності, стадії зміцнення).
 - **Кількісна валідація:** Чисельні значення напружень (наприклад, межа плинності) не повинні розходитися більше ніж на 5-15%.
- **Зусилля деформації:** Для процесів пресування (РККП) або прокатки порівнюються розраховані зусилля на інструменті з тими, що були виміряні в реальному експерименті за допомогою динамометрів.
- **Геометрія деформованого зразка:** Форма та розміри заготовки після

моделювання порівнюються з реальними. Це особливо важливо для перевірки точності умов контакту та тертя.

Мікрорівень (порівняння з мікроструктурними дослідженнями):

- **Електронна мікроскопія назад-розсіяних електронів (EBSD):**
 - **Карти орієнтації зерен:** Дозволяють порівняти прогнозовану модель кристалопластичності деформаційну текстуру з реальною.
 - **Карти розподілу по розміру зерен:** Пряме порівняння розподілу розмірів зерен, отриманого з моделі (наприклад, клітинних автоматів), з експериментальними даними EBSD. Модель повинна правильно відтворювати усереднений розмір зерна та ступінь його фрагментації.
- **Просвітлювальна електронна мікроскопія (ПЕМ):** Використовується для валідації атомістичних моделей. Порівнюються такі параметри:
 - Типи та густина дислокацій.
 - Структура меж зерен.
 - Наявність двійників та інших дефектів, передбачених моделлю МД.

6.2. Практичне застосування валідованих моделей

Після успішної валідації модель стає потужним інструментом для вирішення практичних інженерних завдань.

1. Оптимізація технологічних процесів:

- **Віртуальне прототипування інструменту:** Моделювання дозволяє протестувати десятки варіантів геометрії каналів для РККП, форми валків для прокатки без виготовлення дорогих інструментів. **Результат:** значно знижуються витрати та час на запуск процесу.
- **Вибір режимів обробки:** Моделювання дозволяє визначити

оптимальну температуру, швидкість деформації та кількість проходів для досягнення цільового розміру зерна. Наприклад, модель може показати, що підвищення температури на 50°C призводить до значного зростання зерна через рекристалізацію, що є небажаним.

2. Прогнозування властивостей матеріалів та проектування нових матеріалів:

- **"Матеріал від задуму":** Інтегровані моделі дозволяють прогнозувати, яку мікроструктуру (а отже, і які властивості) отримає сплав з певним хімічним складом після заданого маршруту ПД. Це відкриває шлях до цілеспрямованого створення матеріалів із заздалегідь заданими характеристиками.
- **Оцінка технологічної схильності:** Модель може прогнозувати, чи схильний матеріал до утворення тріщин або інших дефектів при заданих параметрах деформації.

3. Розробка нових матеріалів з покращеними характеристиками:

- **Біомедичні імпланти:** Моделювання допомагає розробити режими ПД для титанових сплавів, що забезпечують оптимальну комбінацію міцності та біосумісності. Наприклад, можна оптимізувати процес для створення пористої структури на поверхні для кращого зростання кісткової тканини.
- **Легкі конструкційні матеріали:** Для аерокосмічної галузі моделювання використовують для створення алюмінієвих та магнієвих сплавів з ультрадрібнозернистою структурою, що поєднують малу густину з високою міцністю.
- **Матеріали для енергетики:** Моделювання допомагає в проектуванні матеріалів з підвищеною радіаційною стійкістю або жароміцністю, де традиційні експерименти надзвичайно дорогі та тривалі.

Висновок до розділу: Валідація є критично важливим і невід'ємним етапом будь-якого серйозного моделювання. **Модель, яка не пройшла**

експериментальну перевірку, не може вважатися інструментом для прийняття технологічних рішень.

Сучасний підхід до моделювання процесів ПД та нанотехнологій – це замкнутий цикл, де моделювання та експеримент тісно переплетені:

1. **Експеримент** дає дані для побудови та валідації моделі.
2. **Валідована модель** дозволяє проводити масові віртуальні експерименти, оптимізуючи параметри.
3. **Результати оптимізації** перевіряються та підтверджуються в ключових експериментах.
4. **Нові експериментальні дані** уточнюють та покращують модель.

Таким чином, саме поєднання потужного комп'ютерного моделювання з ретельною експериментальною валідацією дозволяє перетворити технології ПД з лабораторних досліджень у ефективні, науково обґрунтовані промислові процеси для створення нового покоління матеріалів. Це не просто економія часу і коштів, а фундаментальна зміна парадигми в матеріалознавстві та інженерії.

Розділ 7: Сучасні тенденції та висновки

Галузь комп'ютерного моделювання матеріалів та технологічних процесів, зокрема інтенсивної пластичної деформації (ІПД), розвивається експоненційно. Сьогодні ми спостерігаємо не просто вдосконалення обчислювальних методів, а формування нових парадигм у науці про матеріали [10, 11].

7.1 Сучасні тенденції та майбутні напрями

1. Інтеграція штучного інтелекту та машинного навчання (AI/ML):

Це найбільш революційний напрям, що кардинально змінює підхід до моделювання.

- **Швидкі прогнозуючі моделі:** Замість ресурсомісткого фізичного моделювання, ML-моделі, натреновані на великих наборах даних (як експериментальних, так і отриманих з МСЕ/МД), можуть миттєво передбачати властивості матеріалу на основі його складу та умов обробки. Це відкриває шлях до віртуального скринінгу тисяч композицій матеріалів.
- **Зворотній дизайн матеріалів:** Інженер задає бажані властивості (наприклад, міцність 1000 МПа і пластичність 15%), а AI-алгоритм пропонує хімічний склад та технологічний маршрут (включаючи параметри ІПД) для їх досягнення.
- **Покращення атомістичних моделей:** ML використовують для створення нейромережових потенціалів, які набагато точніші за напіваемпіричні потенціали та швидші за квантово-механічні розрахунки.

2. Розвиток мультимасштабних підходів та створення цифрових двійників:

- **Безшовна інтеграція:** Прагнення до створення цілісних моделей, де

інформація автоматично передається від квантової механіки до макроскопічного МСЕ без втручання людини. Розробляються стандартизовані платформи та інтерфейси для зв'язку різних програмних пакетів.

- **Цифровий двійник (Digital Twin):** Це не просто модель, а динамічна, жива віртуальна копія реального технологічного процесу або виробу. Для ПД це означає створення віртуального преса, який в реальному часі отримує дані з датчиків (температура, зусилля) і коригує модель для точної симуляції поточного стану заготовки та прогнозування її кінцевих властивостей. Це дозволяє перейти від пасивного аналізу до активного управління процесом.

3. Моделювання трибологічних характеристик та поведінки матеріалів в експлуатації:

- Акцент зміщується з моделювання отримання матеріалу на прогнозування його роботи в реальних умовах.
- Моделюється зношування, корозія, втома матеріалів із УДЗ-структурою, створеною методом ПД. Це дозволяє оцінити реальну ефективність та довговічність нового матеріалу ще до stage його випробувань.

4. Моделювання адитивних технологій (3D-друку) та гібридних процесів:

- Комбінація ПД з адитивними технологіями (наприклад, друк заготовки з подальшим її обтисканням для поліпшення властивостей) вимагає складних моделей, що поєднують термічні, деформаційні та фазові перетворення.

7.2 Комп'ютерне моделювання як основа революції в матеріалознавстві

Підведемо підсумки, пройшовши шлях від основ до сучасних тенденцій:

1. **Комп'ютерне моделювання стало "третім стовпом" сучасної науки про матеріали** поряд з теорією та експериментом.** Воно дозволяє не тільки пояснювати спостережувані явища, але й активно і цілеспрямовано проектувати нові матеріали та технології.
2. **Існує потужний ієрархічний інструментарій**, що охоплює всі масштаби:
 - **Атомістичне моделювання (МД, МК)** розкриває фундаментальні механізми деформації та зміцнення.
 - **Мезоскопічне моделювання (МСЕ мікроструктури, кристалопластичність)** зв'язує ці механізми з еволюцією мікроструктури.
 - **Макроскопічне моделювання (МСЕ процесів ПД)** дозволяє оптимізувати технологічні параметри та прогнозувати макроскопічний відгук.
3. **Для технологій ПД моделювання є ключем до індустріалізації.** Воно дозволяє значно скоротити витрати та час на розробку, оптимізуючи геометрію інструменту та режими обробки віртуально, мінімізуючи кількість дорогих натурних експериментів.
4. **Валідація моделей є обов'язковим і критично важливим етапом.** Без перевірки на експериментальних даних будь-яка, навіть найскладніша модель, втрачає практичну цінність і може призвести до помилкових рішень.
5. **Майбутнє за інтелектуальними, самовчними системами.** Інтеграція штучного інтелекту, машинного навчання та концепції цифрових двійників перетворює моделювання з інструменту аналізу на інструмент реального часу для управління та відкриття нових матеріалів.

Висновок до розділу: Сучасний інженер-механік або матеріалознавець, який працює в галузі нанотехнологій та інтенсивної

пластичної деформації, повинен вільно володіти не лише теоретичними основами цих процесів, але й розуміти можливості та обмеження сучасного комп'ютерного моделювання. Це вже не додатковий навик, а **базова компетентність**, необхідна для успішної роботи та внеску в розвиток нових технологій. Моделювання перетворило матеріалознавство з описової науки на прогностичну, де ми можемо не просто вивчати, а й створювати матеріали майбутнього.

ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

1. **Комп'ютерне моделювання стало незамінним інструментом сучасного інженера-механіка та матеріалознавця.** Воно трансформувало підхід до дослідження та розробки нових матеріалів і технологій, перетворивши матеріалознавство з переважно описової на прогностичну науку. Моделювання дозволяє не тільки пояснювати існуючі явища, але й активно проектувати матеріали з заданими властивостями.
2. **Існує потужна ієрархія методів моделювання, що охоплює всі масштаби - від атомарного до макроскопічного.** Кожен рівень має свої задачі та методи:
 - **Атомістичне моделювання** (МД, МК) розкриває фундаментальні механізми деформації
 - **Мезоскопічні методи** (МСЕ мікроструктури, кристалопластичність) зв'язують мікроструктуру з макроскопічними властивостями
 - **Макроскопічне моделювання** (МСЕ процесів) дозволяє оптимізувати технологічні параметри
3. **Для технологій інтенсивної пластичної деформації моделювання є ключовим інструментом індустріалізації.** Воно дозволяє значно скоротити витрати та час на розробку, оптимізуючи геометрію інструменту та режими обробки віртуально, мінімізуючи кількість дорогих натурних експериментів.
4. **Валідація моделей є обов'язковим і критично важливим етапом.** Без експериментальної перевірки будь-яка, навіть найскладніша модель, втрачає практичну цінність. Сучасний підхід - це замкнутий цикл, де моделювання та експеримент тісно переплетені і взаємодоповнюють один одного.

5. **Майбутнє моделювання пов'язане з інтелектуальними, самовчними системами.** Інтеграція штучного інтелекту, машинного навчання та концепції цифрових двійників перетворює моделювання з інструменту аналізу на інструмент реального часу для управління технологічними процесами та відкриття нових матеріалів.
6. **Сучасний інженер повинен вільно орієнтуватися в можливостях різних програмних середовищ** (MATLAB, Mathematica, Maple, спеціалізовані CAE-системи) та розуміти, який інструмент найефективніший для вирішення конкретної задачі.
7. **Комп'ютерне моделювання відкриває нові горизонти для створення матеріалів майбутнього** - від біомедичних імплантатів з покращеною біосумісністю до легких конструкційних матеріалів для аерокосмічної галузі, дозволяючи цілеспрямовано проектувати їх структуру та властивості на всіх рівнях організації матеріалу.

Узагальнюючи, комп'ютерне моделювання процесів нанотехнологій та інтенсивної пластичної деформації перетворилося з допоміжного інструменту в фундаментальну основу сучасного матеріалознавства, що забезпечує науково-обґрунтований підхід до створення нових матеріалів і технологій.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. **Тарасик В.П.** Математичне моделювання технічних систем. – Мн.: ДТУ, 2004. – 274 с.
2. **Страшкевич А.В., Ковальчук О.В.** Математичні моделі та методи аналізу складних систем. – К.: НАУ, 2010. – 200 с.
3. **Назаренко В.О., Рудько В.Ф., Ілляшенко О.К.** Цифрові двійники в машинобудуванні: стан, проблеми, перспективи // Системи обробки інформації. – 2020. – Вип. 1(162). – С. 101-106.
4. **Horstemeyer M.F.** Multiscale Modeling: A Review // Practical Aspects of Computational Chemistry. – 2009. – P. 87–135.
5. **Noskov V.I., Zaichenko O.V.** Computer Simulation of Nanostructured Materials Produced by Severe Plastic Deformation // Materials Science. – 2018. – Vol. 53, No. 5. – P. 1-15.
6. **Estrin Y., Vinogradov A.** Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science // Acta Materialia. – 2013. – Vol. 61. – P. 782–817.
7. **Valiev R.Z., Alexandrov I.V.** Bulk Nanostructured Materials: Fundamentals and Applications. – Wiley, 2013. – 480 p.
8. **Oden J.T. et al.** Predictive Computational Science // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2010. – Vol. 199. – P. 1–31.
9. **Segal V.M.** Equal Channel Angular Extrusion: from macromodels to structure formation // Materials Science and Engineering A. – 1999. – Vol. 271. – P. 322–333.
10. **Agrawal A., Choudhary A.** Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science // APL Materials. – 2016. – Vol. 4. – P. 1-10.
11. **Panchal J.H., Kalidindi S.R., McDowell D.L.** Key computational modeling issues in Integrated Computational Materials Engineering // Computer-Aided Design. – 2013. – Vol. 45. – P. 4–25.