

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физико-технический факультет

УТВЕРЖДАЮ:  
Декан  
  
Ю.Н. Рыжих  
« 06 » 20 22 г.



Рабочая программа дисциплины

**Дискретные методы в механике деформируемого твердого тела и физике твердого тела**

по направлению подготовки

**15.04.03 Прикладная механика**

Направленность (профиль) подготовки :

**Вычислительная механика и компьютерный инжиниринг**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**Магистр**

Год приема

**2022**

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.01

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОПОП

  
В.А. Скрипняк

Председатель УМК

  
В.А. Скрипняк

Томск – 2022

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-1 – Способен формулировать цели и задачи исследования, выявлять приоритеты решения задач, выбирать и создавать критерии оценки результатов исследований;

– ОПК-10 – Способен разрабатывать физико-механические, математические и компьютерные модели при решении научно-технических задач в области прикладной механики;

– ПК-2 – Способен самостоятельно выполнять научные исследования в области прикладной механики, решать сложные научно-технические задачи, которые для своего изучения требуют разработки и применения математических и компьютерных моделей, применения программных систем мультидисциплинарного анализа (CAE-систем мирового уровня).

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 1.1 Знать современные проблемы и задачи прикладной механики, приоритетные направления научных и прикладных работ в области прикладной механики, подходы и методы формулировки критериев оценки решения задач в области прикладной механики.

ИОПК 1.2 Уметь формулировать цели и задачи исследования при решении приоритетных задач прикладной механики, выбирать и создавать критерии оценки решений задач прикладной механики.

ИОПК 1.3 Владеть навыками формулировки целей и задач исследования при решении приоритетных задач прикладной механики, выбирать и создавать критерии оценки решений задач прикладной механики.

ИОПК 10.1 Знать современные физико-механические, математические и компьютерные модели при решении актуальных научно-технических задач в области прикладной механики.

ИОПК 10.2 Уметь разрабатывать физико-механические, математические и компьютерные модели при решении научно-технических задач в области прикладной механики.

ИОПК 10.3 Владеть методикой разработки физико-механических, математических и компьютерных моделей при решении научно-технических задач в области прикладной механики.

ИПК 2.1 Знать: математические и компьютерные модели, программные системы мультидисциплинарного анализа (CAE-системы мирового уровня), используемые для решения поставленных научно-технических задач.

ИПК 2.2 Уметь самостоятельно выполнять научные исследования в области прикладной механики, решать сложные научно-технические задачи, которые для своего изучения требуют разработки и применения математических и компьютерных моделей, применения программных систем мультидисциплинарного анализа (CAE-систем мирового уровня).

ИПК 2.3 Владеть навыками самостоятельного выполнения научных исследований в области прикладной механики, решения сложных научно-технических задач.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Освоить аппарат современных методов моделирования в механике и физике твердого тела на основе подхода частиц.

– Научиться применять понятийный аппарат моделирования в механике и физике твердого тела на основе подхода частиц для решения практических задач профессиональной деятельности.

### **3. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, является обязательной для изучения.

### **4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине**

Второй семестр, зачет с оценкой

### **5. Входные требования для освоения дисциплины**

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Вычислительная механика и компьютерный инжиниринг.

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

### **6. Язык реализации**

Русский

### **7. Объем дисциплины**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 з.е., 180 часов, из которых:

-лекции: 10 ч.

-лабораторные: 18 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

### **8. Содержание дисциплины, структурированное по темам**

Тема 1. Основные понятия.

Понятие модели и моделирования. Основные методы численного моделирования, применяемые в физике и механике твёрдого тела. Что такое модель и моделирование. Типы моделей. Компьютерное моделирование. Дискретные и континуальные модели в физике и механике.

Тема 2. Метод молекулярной динамики.

Основные положения метода молекулярной динамики. Уравнения движения. Выбор граничных условий. Специфика задания начальных условий. Потенциалы межатомного взаимодействия. Парное приближение и многочастичные потенциалы. Алгоритмы численного интегрирования. Расчет макроскопических свойств атомных систем. Методы и программы для анализа результатов моделирования. Примеры применения метода молекулярной динамики.

Тема 3. Методы мезочастиц.

Метод мезочастиц А.М. Кривцова. Упругие характеристики для различных упаковок частиц. Метод отдельных элементов П.А. Кундалла. Силы межчастичного взаимодействия в упругих и упругопластических средах. Метод мезочастиц Г.П. Остермайера, особенности описания диссипативных процессов.

Тема 4. Метод клеточных автоматов.

Основные положения и определения метода. Классификация клеточных автоматов. Понятие активной среды. Типы клеточных автоматов, используемых при описании распространения возбуждений в активных средах. Газодинамические клеточные автоматы. ННР и ГНР модели. Проблемы моделирования трёхмерных задач. Моделирование деформируемого твёрдого тела (упругие волны, разрушение).

Тема 5. Метод подвижных клеточных автоматов.

Проблемы развития дискретного подхода в механике. Основные положения метода. Размер и форма подвижных клеточных автоматов. Уравнения движения как уравнения переноса. Функции отклика центрального и тангенциального взаимодействия. Объёмная составляющая взаимодействия. Моделирование разрушения как переключения состояния пар. Совместное использование метода подвижных клеточных автоматов и численных методов континуальной механики.

Тема 6. Бессеточные методы континуальной механики.

Гидродинамика сглаженных частиц. Алгоритм обобщённых частиц. Точечный метод конечных элементов.

## 9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, частичного опроса обучающихся и разбора вызывающих трудность в понимании вопросов с использованием активных и интерактивных форм обучения во время занятий, выполнении индивидуальных заданий (рефератов) и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

## 10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

**Экзамен** проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Первая часть содержит один вопрос, проверяющий ИОПК-1.1, ИОПК-1.2, ИОПК-10.1 и ИПК-2.1. Ответ на вопрос первой части дается в развернутой форме.

Вторая часть содержит практическое задание, проверяющее ИОПК-1.3, ИОПК-10.2, ИОПК-10.3, ИПК-2.2, ИПК-2.3. Ответ на вопрос второй части дается в развернутой форме.

Примерный перечень вопросов

1. Основные положения метода молекулярной динамики. веновская динамика.
2. Граничные условия, используемые при моделировании наносистем.
3. Процедура релаксации. Когда нужно ее использовать?
4. Парное приближение потенциалов межатомного взаимодействия.
5. Алгоритмы численного интегрирования уравнений движения частиц.
6. Основные положения метода клеточных автоматов.
7. Условия изменения состояния в клеточных автоматах.
8. Типы клеточных автоматов, используемые при описании распространения возбуждений в активных средах.
9. Основные положения метода подвижных клеточных автоматов.

Результаты зачета с оценкой определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Формальные критерии итоговой оценки результатов обучения:

- текущий контроль – 5 баллов;
- индивидуальное задание в форме расчетно-графических работ – 25 баллов;
- контрольные работы – 20 баллов;
- экзамен – 50 баллов.

неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	отлично
0 – 59 баллов	60 – 73 баллов	74 – 87 баллов	88 – 100 баллов

## 11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=226>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. – Пер. с англ. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. – 160 с.

– Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. – М: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 304 с.

– Трубецков Д.И. Введение в синергетику. Хаос и структуры.– М: Едиториал УРСС,– 2004.– 235 с.

– Псахье С.Г., Смолин А.Ю., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Коростелев С.Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как направление дискретной вычислительной механики // Чебышевский сборник. 2017. т. 18, № 3(63). С. 439–460. <https://doi.org/10.22405/2226-8383-2017-18-3-439-460>

– Thompson, A.P., Aktulga, H.M., Berger, R., et al. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Comp. Phys. Comm. – 2022. – v. 271. – 10817. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>

– Smolin A.Yu., Smolin I.Yu., Shilko E.V., Stefanov Yu.P., Psakhie S.G. Coupling of Discrete and Continuum Approaches in Modeling the Behavior of Materials / in “Handbook of Mechanics of Materials” S. Schmauder, C.-S. Chen, K. K. Chawla, N. Chawla, W. Chen, Y. Kagawa Eds. Springer Singapore. 2019. [https://doi.org/10.1007/978-981-10-6884-3\\_35](https://doi.org/10.1007/978-981-10-6884-3_35)

– Psakhie S.G., Smolin A.Yu., Shilko E.V., Dimaki A.V. Modeling the Behavior of Complex Media by Jointly Using Discrete and Continuum Approaches / in “Handbook of Mechanics of Materials” S. Schmauder, C.-S. Chen, K. K. Chawla, N. Chawla, W. Chen, Y. Kagawa Eds. Springer Singapore. 2019. [https://doi.org/10.1007/978-981-10-6884-3\\_79](https://doi.org/10.1007/978-981-10-6884-3_79)

б) дополнительная литература:

– Salman N., Wilson M., Neville A. and Smolin A.Y. Implementation of MCA in the framework of LIGGGHTS // V International Conference on Particle-based Methods - Fundamentals and Applications. P. Wriggers, M. Bischoff, E. Oñate, D.R.J. Owen and T. Zohdi (Eds.). 2017. P. 767–777.

– Shilko E.V., Psakhie S.G., Schmauder S., Popov V.L., Astafurov S.V., Smolin A.Yu. Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure // Computational Materials Science. – 2015. – V. 102. – P. 267–285. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.02.026>

– Введение в математическое моделирование. Учебное пособие / В.Н.Ашихмин и др. Под ред. П.В.Трусова.– М.: Интернет Инжиниринг. 2000. – 336 с.

– Математическое моделирование: Проблемы и результаты.— М: Наука, 2003.— 478 с.

– Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: в 2-х частях. Часть 1. Пер. с англ. – М: Мир, 1990. – 349 с.

– Остермайер Г.П. Метод мезоскопических частиц для описания термомеханических и фрикционных процессов // Физическая Мезомеханика. – 1999. – №6. – С. 25-32.

– Поттер Д. Вычислительные методы в физике. – М.: Мир, 1975. – 218 с.

– Остермайер Г.П., Попов В.Л. Многочастичные неравновесные потенциалы взаимодействия в методе частиц // Физическая Мезомеханика. – 1999. – №6. – С. 33-39.

- в) ресурсы сети Интернет:
- открытые онлайн-курсы
  - Электронная библиотека «EqWorld – Мир математических уравнений» в Институте проблем механики РАН (<http://eqworld.ipmnet.ru/ru/library/mechanics.htm>).
  - <https://www.wolframscience.com/>
  - <https://www.itascacg.com/>

### **13. Перечень информационных технологий**

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
- Программы пакета LAMMPS;
  - Программа MCA2D Load Test.
- б) информационные справочные системы:
- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
  - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- Единое окно доступа к образовательным ресурсам – <http://window.edu.ru>

### **14. Материально-техническое обеспечение**

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Для проведения семинарских занятий и выполнения индивидуального расчетного задания требуется компьютерный класс ПЭВМ с микропроцессором не ниже Intel Core i3, объемом ПЗУ не меньше 200 Гб, объемом ОЗУ не меньше 2 Гб.

### **15. Информация о разработчиках**

Автор: Смолин Алексей Юрьевич, д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры механики деформируемого твердого тела ТГУ.

Рецензент: Скрипняк Владимир Альбертович, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой механики деформируемого твердого тела ТГУ.