

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

Физико-технический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

Декан ФТФ

Ю.Н. Рыжих

06

2022 г.

Рабочая программа дисциплины

**Методы компьютерного моделирования структуры и свойств материалов**

по направлению подготовки

**15.04.03 Прикладная механика**

Направленность (профиль) подготовки :

**Механика биокompозитов, получение и моделирование их структуры и свойств**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**Магистр**

Год приема

**2022**

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.ДВ.05.01

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОПОП

Е.С. Марченко

Председатель УМК

В.А. Скрипняк

Томск – 2022

## 1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1 – Способен критически анализировать современные проблемы прикладной механики с учетом потребностей промышленности, современных достижений науки и мировых тенденций развития техники и технологий, ставить задачи и разрабатывать программу исследования, выбирать адекватные способы и методы решения теоретических, прикладных и экспериментальных задач, анализировать, интерпретировать, представлять и применять полученные результаты;

– 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);

– ПК-4 – Способен применять физико-математический аппарат, теоретические, расчетные и экспериментальные методы исследований, методы математического и компьютерного моделирования в процессе профессиональной деятельности.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК 1.1 Знать перспективные направления и последние достижения современной науки и техники в области производства объемных материалов, соединений, композитов на их основе и изделий из них.

ИПК 1.2 Знать: современные проблемы прикладной механики, методы планирования научно-исследовательской работы, способы решения научных задач механики, обработки и анализа полученных данных, представления результатов.

ИПК 1.3 Уметь осуществлять сбор, анализ и систематизацию информации по проблеме исследования с учетом потребностей промышленности, современных достижений науки и мировых тенденций развития техники и технологий.

ИПК 1.4 Уметь ставить задачи и разрабатывать программу исследования, выбирать адекватные способы и методы решения теоретических, прикладных и экспериментальных задач.

ИПК 1.5 Уметь анализировать, интерпретировать, оценивать, представлять результаты собственных исследований в профессиональном сообществе и защищать результаты выполненного исследования с обоснованными выводами и рекомендациями.

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.

ИПК 4.1 Знать физико-математический аппарат, теоретические, расчетные и экспериментальные методы исследований, методы математического и компьютерного моделирования, применяемые в процессе профессиональной деятельности.

ИПК 4.2 Уметь применять физико-математический аппарат, теоретические, расчетные и экспериментальные методы исследований, методы математического и компьютерного моделирования в процессе профессиональной деятельности.

ИПК 4.3 Владеть навыками применения физико-математического аппарата, теоретических, расчетных и экспериментальных методов исследования, методов математического и компьютерного моделирования в процессе профессиональной деятельности.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Освоить современные знания по методам компьютерного моделирования структуры и свойств материалов на разных масштабах.

– Сформировать умения использовать эти знания для постановки, анализа и решения научно-технических задач создания материалов, в том числе биомедицинского назначения.

– Сформировать начальные навыки использовать полученные знания и умения в области компьютерного моделирования структуры и свойств материалов на разных масштабных уровнях.

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

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

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

Первый семестр, зачет

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

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 3 з.е., 108 часов, из которых:

-лекции: 10 ч.

-практические занятия: 22 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

## **8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам**

Тема 1. Введение. Разные масштабные уровни и проблемы моделирования на них.

Основные понятия о моделировании. Физическое и математическое моделирование. Аналитическое и компьютерное моделирование. Численное, имитационное и статистическое моделирование. Разные масштабы: нано-, микро-, мезо- и макроуровни. Виды численных методов. Примеры структур наномасштаба: фуллерены, нанотрубки, наноманипулятор, наноподшипник, молекулы, полимеры, белки, вирусы.

Тема 2. Методы и программы для квантово-механических расчетов.

Наномасштаб, атомный уровень. Электронная и атомная структура. Квантово-химические или квантово-механические методы. Основы теории для моделирования квантово-механическими методами. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Метод Хартри – Фока. Теория функционала плотности. Стационарное уравнение Шрёдингера. Теоремы Хозэнберга – Кона. Уравнения Кона – Шэма. Программное обеспечение, которое реализует метод теории функционала плотности. Основы работы с

программами Rasmol (RasWin) и V\_Sim для визуализации атомно-молекулярных структур.

Тема 3. Метод и программы молекулярной динамики.

Масштабы, на которых применяется метод молекулярной динамики. Возможности метода. Первые классические работы по молекулярной динамике. Постановки задачи в рамках классической механики: ньютонов, лагранжев и гамильтонов формализмы. Типы граничных условий. Типы потенциалов: парные и многочастичные потенциалы, метод погруженного атома. Формулы для потенциалов Леннарда-Джонса и Морзе. Три стадии (раздела) при использовании метода. Схемы интегрирования по времени: схема Верле и скоростная модификация Верле, схема с перешагиванием. Метод молекулярной динамики и квантовая теория. Связь с методами на нижнем и верхнем уровне (квантовые методы и метод конечных элементов). Основные программные комплексы, реализующие метод молекулярной динамики. Основы работы с программным комплексом LAMMPS.

Тема 4. Дискретные методы моделирования в механике.

Масштабы, на которых применяются дискретные методы механики. Континуальный и дискретный подходы в механике. Главное отличие дискретных методов механики от метода молекулярной динамики и бессеточных методов механики сплошных сред. Метод дискретных элементов. Объекты моделирования и области использования. Базовые уравнения метода. Описание отношений элементов в паре. Основные проблемы метода. Примеры решения технологических и геомеханических задач. Метод подвижных клеточных автоматов. Основные понятия. Состояние автомата. Функция отклика. Основные уравнения. Примеры применения. Основные программные комплексы, реализующие метод дискретных элементов и метод подвижных клеточных автоматов.

Тема 5. Методы континуальной механики и их применение для задач моделирования на разных масштабных уровнях.

Общий обзор сеточных методов и их классификация. Основные уравнения в дифференциальной и интегральной формулировках. Примеры построения разностной схемы. Объекты моделирования. Масштабы рассмотрения: макро- и мезомасштабы. Чисто механические и мультифизические задачи. Явный и неявный учет структуры материала. Модели для неявного учета структуры: модель среды Коссера и упругопластические модели с внутренним трением и дилатансией. Примеры коммерческих и свободно распространяемых программ, реализующих метод конечных разностей (FLAC, FLAC 3D) и метод конечных элементов ABAQUS, ANSYS, NASTRAN, MARC, COMSOL, COSMOS, Code\_Aster, Tochnog, OOFEM, FreeFEM. Основные тренды развития современных систем компьютерного инжиниринга.

Тема 6. Примеры расчётов по моделированию механического поведения материалов.

Результаты моделирования механического поведения мезообъемов поликристаллических металлических материалов на основе модели среды Коссера и классической упругопластической модели. Особенности поведения материалов с внутренним трением и дилатансией на примере геоматериалов. Моделирование пористых керамических материалов. Примеры моделирования программами ABAQUS и ANSYS.

## **9. Текущий контроль по дисциплине**

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ на практических занятиях, тестов по лекционному материалу, выполнения индивидуальных заданий в форме реферата, выполнения теста в электронной системе обучения moodle и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

## 10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

**Зачет в первом семестре** проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит два теоретических вопроса из разных разделов курса, позволяющих определить сформированность ИПК-1.1-1.5, ИПК-2.1-2.3, ИПК-4.1-4.3. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Примерный перечень теоретических вопросов

1. Разные виды моделирования и место компьютерного численного моделирования.
2. Классификация численных методов в описании структуры и свойств материалов.
3. Связь методов моделирования и способов учета структуры материала на разных масштабах.
4. Основы теории квантово-механических методов: уравнения и приближения.
5. Суть метода функционала электронной плотности.
6. Основные программы, реализующие квантово-механические методы.
7. Постановка задачи в методе молекулярной динамики.
8. Основные уравнения метода молекулярной динамики.
9. Типы потенциалов. Потенциалы Леннарда-Джонса и Морзе.
10. Применение методов молекулярной динамики на разных масштабных уровнях.
11. Основные программы, реализующие метод молекулярной динамики.
12. Основные уравнения дискретных методов моделирования и их отличия от уравнений молекулярной динамики.
13. Метод дискретных элементов.
14. Метод подвижных клеточных автоматов.
15. Программы, реализующие метод дискретных элементов и сферы их применения.
16. Метод сглаженных частиц (SPH) и его место в классификации континуальных и дискретных методов механики.
17. Классификации сеточных методов механики сплошных сред. Две формулировки основных уравнений.
18. Способы неявного учета структуры нижнего структурного уровня.
19. Метод конечных разностей.
20. Метод конечных элементов.
21. Решение задач мезоуровня сеточными методами. Описание структуры явным и неявным способом.
22. Основные коммерческие и свободные программы, реализующие метод конечных элементов.
23. Классификация методов моделирования.
24. Методы моделирования используются на микроуровне.
25. Методы моделирования используются на мезоуровне.
26. Основные приближения методов квантово-механических расчетов.
27. Программы (программные комплексы) использующие методы и подходы квантовой механики.
28. Программы (программные комплексы) использующие метод молекулярной динамики.
29. Программы (программные комплексы) использующие методы континуальной механики.
30. Отличия уравнений движения в методе дискретных элементов и в методе молекулярной динамики.
31. Основные отличия метода дискретных элементов от метода молекулярной динамики.

32. Основные формулировки методов механики сплошных сред.
33. Основные численные сеточные методы механики деформируемого твердого тела.
34. Способы неявного учета структуру материала нижнего масштабного уровня.
35. Основные положения теории функционала плотности.
36. Основы линейных методов расчета электронной структуры.
37. Основные положения метода «Перидинамика».
38. Основные положения метода диссипативной динамики частиц (DPD).
39. Основные положения метода сглаженных частиц (SPH).
40. Основные положения метода граничных элементов.
41. Основные положения метода конечных объемов. Примеры задач:

За успешную сдачу зачета студенту начисляется 30 баллов (по 15 баллов за ответ на каждый вопрос).

За выполнение требований текущего контроля выставляются следующие баллы:

- посещаемость – 20 баллов;
- выполнение контрольных работ и тестов – 20 баллов;
- индивидуальное задание в форме реферата – 20 баллов;
- тест в электронной системе обучения MOODLE – 10 баллов;

Результаты промежуточной аттестации определяются оценками «зачтено» и «не зачтено».

Оценка «зачтено» ставится, если общее количество баллов, набранное студентом, превышает 70.

## 11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=937>

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

в) Методические рекомендации по изучению ЭУК, подготовке к различным видам занятий и аттестации.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Основы компьютерного моделирования наносистем: учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. – СПб.; М.; Краснодар: Лань, 2021. – 384 с. – <https://ez.lib.tsu.ru/login?url=https://e.lanbook.com/book/167744>

– Хельтье Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование. Теория и практика. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. — 318 с.

– Моделирование свойств, электронной структуры ряда углеродных и неуглеродных нанокластеров и их взаимодействия с легкими элементами / А.С. Федоров, П.Б. Сорокин, П.В. Аврамов, С.Г. Овчинников; отв. редактор В. В. Вальков. — Новосибирск: Издательство СО РАН, 2006. — URL: <http://test.kirensky.ru/master/articles/monogr/Book/titul2.html> (дата обращения: 01.09.2021)

– Баркалин В.В., Медведев С.В., Нелаев В.В., Случак П.А., Юркевич С.Н. Иерархическая система моделирования физических процессов и свойств материалов на базе суперкомпьютерной конфигурации СКИФ К-1000 // Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач: Труды Всероссийской научной конференции (22-27 сентября 2008 г., г. Новороссийск). — М.: Изд-во МГУ, 2008. — С. 101–105.

– Tadmor E.B., Miller R.E. Modeling Materials: Continuum, Atomistic and Multiscale Techniques. — Cambridge: Cambridge University Press, 2011. —

<https://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&AuthType=ip,sso&db=edsebk&AN=408821&lang=ru&site=eds-live>.

б) дополнительная литература:

- Рыбалкина М.А. Нанотехнологии для всех. Большое – в малом. – М.: Nanotechnology News Network, 2005. – 444 с.
- Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. – Ижевск: ИКИ, 2012. – 632 с.
- Multiscale modelling and design for engineering application / Tarja Laitinen & Kim Wallin (Eds.) – VTT Technical Research Centre of Finland, 2013 – 122 p.
- Погребняк А.В. Молекулярное моделирование и дизайн биологически активных веществ. — Ростов-на-Дону: Издательство СКНЦ ВШ, 2003. — 232 с.
- Horstemeyer M. Multiscale Modeling: A Review // Practical Aspects of Computational Chemistry: Methods, Concepts and Applications / ed. J. Leszczynski and M.K. Shukla. – Springer Science+Business Media, 2009. – P. 87–135.
- Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой: научное издание. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 304 с.
- Мансури Г.А. Принципы нанотехнологии: исследование конденсированных веществ малых систем на молекулярном уровне / пер. с англ. А. С. Пак. – М.: Научный мир, 2008. – 317.
- Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук. – 2002. – Т. 172. – №3. – С. 336–348.

в) ресурсы сети Интернет:

- открытые онлайн-курсы
- Страницы в Википедии – [http://en.wikipedia.org/wiki/Multiscale\\_modeling](http://en.wikipedia.org/wiki/Multiscale_modeling) и [https://ru.wikipedia.org/wiki/Теория\\_функционала\\_плотности](https://ru.wikipedia.org/wiki/Теория_функционала_плотности)
- Электронная библиотека «EqWorld – Мир математических уравнений» в Институте проблем механики РАН – <http://eqworld.ipmnet.ru/ru/library/mechanics.htm>

### 13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
- RasMol <http://www.rasmol.org>
- V\_Sim [http://inac.cea.fr/L\\_Sim/V\\_Sim/index.en.html](http://inac.cea.fr/L_Sim/V_Sim/index.en.html)
- LAMMPS <http://lammops.sandia.gov>
- TOCHNOG <http://tochnog.sourceforge.net>
- PARAVIEW <http://www.paraview.org/>

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>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

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

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения практических занятий, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, 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.

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

Смолин Игорь Юрьевич, доктор физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры прочности и проектирования ФТФ ТГУ.