

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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:  
Декан физического факультета  
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

**Методы компьютерного моделирования в физике твердого тела**

по направлению подготовки

**03.04.02 Физика**

Направленность (профиль) подготовки:  
**Фундаментальная и прикладная физика**

Форма обучения  
**Очная**

Квалификация  
**Магистр**

Год приема  
**2023**

СОГЛАСОВАНО:  
Руководитель ОП  
О.Н. Чайковская

Председатель УМК  
О.М. Сюсина

Томск – 2023

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

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК-1 Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий.

ПК-2 Способен анализировать альтернативные варианты стратегий и целей исследований в выбранной области физики, критерии их эффективности и ограничения применимости.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК 1.1 Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования, обобщает научные данные в соответствии с задачами исследования.

ИПК 1.2 Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования для решения научно-инновационных задач.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Получить представления об основных компьютерных методах, используемых для решения различных задач физики твердого тела.

– Приобрести навыки разработки конкретных физических моделей процессов, их компьютерной реализации и анализа результатов моделирования для решения практических задач профессиональной деятельности.

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

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

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**

Второй семестр, зачет с оценкой

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

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Кристаллография, Физика твердого тела, Дефекты в твердых телах, Теория дислокаций, Теоретическая механика. Механика сплошных сред. Знать основы программирования и численных методов решения дифференциальных уравнений.

## **6. Язык реализации**

Русский

## **7. Объем дисциплины**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

-практические занятия: 32 ч.

в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

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

Тема 1. Классификация методов компьютерного моделирования в физике твердого тела.

Краткое содержание темы. Классификация методов компьютерного моделирования в физике твердого тела с точки зрения используемых подходов описания моделируемой среды и характерных масштабов решаемой задачи.

Тема 2. Методы континуального описания моделируемой среды. Метод конечных разностей. Метод конечных элементов.

Краткое содержание темы. Методы континуального описания моделируемой среды. Метод конечных разностей. Конечно-разностная аппроксимация производных. Способы построения сетки. Краевые условия 1, 2 и 3 рода. Решение нелинейных и нестационарных задач. Решение задач с неправильной формой моделируемой области. Метод конечных элементов. Метод взвешенных невязок. Функции формы. Матрица жесткости конечного элемента. Сравнение методов конечных элементов и метода конечных разностей.

Тема 3. Разностные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

Краткое содержание темы. Разностные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Метод Эйлера. Метод Гюна. Метод Рунге-Кутты. Метод Тэйлора.

Тема 4. Численные методы комбинированного подхода.

Краткое содержание темы. Численные методы комбинированного подхода. Понятие Лагранжевой и Эйлеровой сетки. Понятие псевдочастиц. Метод частиц в ячейках или метод Харлоу. Метод гладких частиц. Метод обобщенных частиц.

Тема 5. Методы дискретного описания моделируемой среды.

Краткое содержание темы. Методы дискретного описания моделируемой среды. Классический метод частиц. Основные положения и уравнения движения. Существующие модификации метода. Метод частиц конечного размера. Метод элементной динамики. Метод мезо-частиц. Способы учета скрытых степеней свободы. Метод классических клеточных автоматов. Модификации метода. Метод подвижных клеточных автоматов. Основные положения и уравнения движения. Задание взаимодействия в методе подвижных клеточных автоматов.

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

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ, тестов и рефератов по лекционному материалу, выполнения домашних заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

## **10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации**

Зачет с оценкой во втором семестре проводится в письменной форме по билетам. Продолжительность зачета 1,5 часа. Текущий контроль учитывается при проведении промежуточной аттестаций.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

## **11. Учебно-методическое обеспечение**

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=00000>

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

в) основная и дополнительная учебная литература.

г) практические занятия, предусматривающие решение задач студентами индивидуальных и групповых задач по всем разделам, изучаемого студентами теоретического материала

д) методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Ю.Н.Самогин, С.А.Серков, В.П.Чирков - Метод конечных элементов в динамических расчетах турбомашин. Изд-во Физматлит, 2016 г
2. С.И. Трушин Метод конечных элементов. Теория и задачи. Издательство Ассоциации строительных вузов 2008. 256 с
3. В. Зализняк Основы вычислительной физики. Часть 1. Введение в конечно-разностные методы. 2008, 224с.
4. Механика- от дискретного к сплошному. / А.Н. Андреев и др. Отв ред акад. РАН В.М. Фомин, СО РАН, ИТПМ – Новосибирск, Изд-во СО РАН, 2008, 344с
5. Andrew Adamatzky, Genaro J. Martínez Designing Beauty: The Art of Cellular Automata (Emergence, Complexity and Computation) 1st ed. Springer 2016, 192с.
6. T.Poschel, T.Schwarger. Computational Granular Dynamics. Models and algorithms. Springer 2005. 322с.
7. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем М. Наука 1971.
8. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов — М.: Мир, 1979. — 392 С.

б) дополнительная литература:

1. Годунов С.К., Рябенский В.С. Разностные схемы (введение в теорию) М.: Наука, 1973.
2. Зинкевич О. Метод конечных элементов в технике. М. Мир. 1975.
3. Оден Дж. Конечные элементы в нелинейной механике сплошной среды М. Мир. 1976.
4. Сабоннадьер Ж.-К., Кулон Ж.-Л. Метод конечных элементов и САПР 1989.
5. Cundall P.A. Computer simulations of dense sphere assemblies. Micromechanics of Granular Materials / Ed. by M.Satake and J.T.Jenkins.– Amsterdam: Elsevier Sci. Publ., 1988. – P. 113 – 123.
6. Уилкинс М.Л. Конечно-разностные схемы. М. Мир 1967г.
7. Хокни Р, Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц.- М. Мир 1987.-638с.
8. Wallace D.C. Molecular - dynamic simulations of many-particles systems: New face on old problems. Electronic structure, Dynamics, and quantum structural properties of condensed matter / Ed. by J.T.Devreese, 1985. – P. 521 – 563.
9. Pöschel T., Bucholtz V. Static friction phenomena in granular materials: Columb law vs. Particle Geometry // Phys. Stat. Sol. – 1994. – V.183. – P. 215 – 221.
10. Wolfram S. Cellular automata as models of complexity // Nature. – 4 October 1984.- V.311. – P. 419 – 424.
11. Гулд Х., Тобочник Я., " Компьютерное моделирование в физике М.: Мир, 1990.- Т.1.- 396с.; М.: Мир, 1990.- Т.2.- 396с.
12. Остермайер Г.П., Попов В.Л. Многочастичные неравновесные потенциалы взаимодействия в методе мезочастиц // Физ. мезомеханика. – 1999. – Т.2. – №6. – С. 33 – 39.
13. Остермайер Г.П. Метод мезоскопических частиц для описания термомеханических и фрикционных процессов // Физ. мезомеханика. – 1999.– Т.2. – №6. – С. 25 – 32.
14. Беркович С.Я. Клеточные автоматы как модель реальности: поиски новых представлений физических и информационных процессов. – М.: Изд-во МГУ, 1993. – 112 с.

15. Хеерман Д.В. "Методы компьютерного моделирования в теоретической физике " М.: Наука, 1990. -230с.

в) ресурсы сети Интернет:

<http://www.stroitmeh.ru/lect83.htm>

[http://ad.cctpu.edu.ru/Math\\_method/math/12.htm](http://ad.cctpu.edu.ru/Math_method/math/12.htm)

[http://www.simumath.net/library/book.html?code=Ur\\_Mat\\_Ph\\_method\\_net](http://www.simumath.net/library/book.html?code=Ur_Mat_Ph_method_net)

[http://gendocs.ru/v460/лекции - метод конечных элементов](http://gendocs.ru/v460/лекции_-_метод_конечных_элементов)

<http://www.stroitmeh.ru/lect31.htm>

<http://www.stroitmeh.ru/lect80.htm>

<http://folkprog.net/metod-molekulyarnoj-dinamiki/>

<http://www.ihed.ras.ru/norman/student/morozov/Krivtsov-MD.pdf>

<http://www.ipmnet.ru/files/diss/2014/3/Parshikov-diss.pdf>

[http://www.ipme.ru/ipme/labs/msm/Pub/Krivtsov\\_1998\\_NOMS\\_1.pdf](http://www.ipme.ru/ipme/labs/msm/Pub/Krivtsov_1998_NOMS_1.pdf)

### 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.).

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/>

в) профессиональные базы данных:

– Университетская информационная система РОССИЯ – <https://uisrussia.msu.ru/>

– Единая межведомственная информационно-статистическая система (ЕМИСС) – <https://www.fedstat.ru/>

### 14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

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.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате («Актру»).

## **15. Информация о разработчике**

Дмитриев Андрей Иванович, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики металлов ФФ НИ ТГУ