

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

Физико-технический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

Декан

Ю.Н. Рыжих

Рабочая программа дисциплины

Методы компьютерного моделирования структуры и свойств материалов

по направлению подготовки

15.04.03 Прикладная механика

Направленность (профиль) подготовки:

Компьютерный инжиниринг конструкций, биомеханических систем и материалов

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2025

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОПОП

В.А. Скрипняк

Е.С. Марченко

Председатель УМК

В.А. Скрипняк

Томск 2025

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 Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Профессиональный модуль №2 «Механика биокompозитов, получение и моделирование их структуры и свойств».

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

Первый семестр, экзамен

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 4 з.е., 144 часов, из которых:

-лекции: 18 ч.

-лабораторные: 22 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, 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 Хойнберга – 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 iDO (ТГУ) 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

Экзамен в первом семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет содержит два теоретических вопроса из разных разделов курса. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

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 «iDO» - <https://lms.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>

– Хельтзе 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 и 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 OneNote, 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
- LAMMPS <http://lammps.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.

Для проведения лабораторных работ компьютерные классы, 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.