

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

Основы компьютерного моделирования в физике твердого тела

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки :
Фундаментальная физика

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

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:

ОПК-3 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности.

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

ПК-3 Способен разрабатывать алгоритмы и программы, применять методы компьютерного моделирования для решения задач профессиональной деятельности.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 3.2 Соблюдает основные требования информационной безопасности при решении задач профессиональной деятельности.

ИПК 1.2 Владеет практическими навыками использования современных методов исследования в выбранной области

ИПК 3.1 Знает основы программирования, владеет навыками создания компьютерных моделей физических явлений и процессов

ИПК 3.2 Использует общее и специализированное программное обеспечение для теоретических расчетов и анализа экспериментальных данных

2. Задачи освоения дисциплины

– Сформировать представления об основных подходах к представлению структуры и описанию материалов на различных масштабах и о вытекающих из них методах компьютерного (численного) моделирования, применяемых для изучения поведения твердых тел на различных масштабах.

– Сформировать представления об общих принципах и особенностях реализации математических моделей твердых тел (включая пространственную дискретизацию, аппроксимацию и интегрирование) в рамках различных численных методов, а также о базовых механических и теплофизических моделях материалов различной природы.

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

Семестр 7, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

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

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Механика, Молекулярная физика, Практикум по вычислительной физике, Технологии вычислительной физики, Классическая механика, Практикум по численным методам, Актуальные проблемы физики металлов, Теория твердого тела, Теория дислокаций, Физическое металловедение, Языки программирования высокого уровня.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

-лекции: 26 ч.

-практические занятия: 6 ч.

в том числе практическая подготовка: 6 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Базовые подходы к описанию конденсированных сред на различных пространственных масштабах.

Понятие моделирования физических процессов и явлений. Основные виды моделирования. Использование теории подобия при построении модели изучаемого объекта или явления. Наиболее известные критерии подобия. Основные этапы математического моделирования. Базовые подходы к описанию конденсированных сред на различных пространственных масштабах: атомном, наномасштабном, микроскопическом, мезоскопическом и макроскопическом. Основные группы методов компьютерного моделирования на различных масштабах.

Тема 2. Методы компьютерного моделирования атомного масштаба.

Основные положения, особенности, различия и ограничения методов молекулярной динамики и Монте-Карло. Основы диссипативного метода частиц, его отличия от традиционного метода молекулярной динамики. Особенности описания взаимодействия частиц, составляющих каркас сложных молекул. Примеры применения методов молекулярной динамики и укрупненной молекулярной динамики для современных исследований процессов и явлений в конденсированных средах. Особенности изучения интерфейсных явлений на границах раздела “hard matter - soft matter” (в том числе применительно к проблемам селективной фильтрации флюидов) и структурно-фазовых состояний “soft matter” в нанопорах контрастных материалов при различных Р-Т условиях.

Тема 3. Методы компьютерного моделирования «надатомного» масштаба, базирующиеся на термодинамическом описании конденсированных сред.

Понятие о методе конечных разностей как об эффективном континуальном методе решения краевых задач различной физической природы. Принципы метода конечных разностей. Некоторые алгоритмы решения нестационарных задач (на примере уравнений теплопроводности и динамики твердого тела). Основы метода конечных элементов в приложении к задачам физики твердого тела и механики деформируемого твердого тела. Основы формализма клеточных автоматов (КА) как инструмента компьютерного моделирования структурно-фазовых превращений в конденсированных средах. Обобщенная математическая формулировка метода дискретных элементов, объединяющая численные методы континуального подхода и подход к представлению материала как ансамбля взаимодействующих частиц. Основные приближения и подходы к описанию фрагмента материала дискретным элементом. Основные группы методов дискретных элементов, применяемых для компьютерного моделирования деформации и разрушения, теплофизических и фильтрационных процессов в многофазных твердых средах. Гибридные дискретноэлементные-конечноэлементные и автоматизированные дискретноэлементные алгоритмы.

Тема 4. Математические основы современных макромасштабных моделей и критериев пластичности и прочности материалов на металлической, керамической и полимерной основе.

Математический формализм макроскопических моделей пластичности (в рамках теории малых упругопластических деформаций и теории пластического течения),

широко применяемых в рамках современных численных методов при компьютерном моделировании неупругого поведения материалов. Основные критерии и модели пластичности, используемые для металлов и сплавов, керамик и горных пород, полимерных материалов. Математический формализм базовых макроскопических моделей и критериев прочности хрупких, квазихрупких и пластичных материалов. Особенности реализации моделей пластичности и прочности в рамках наиболее широко распространенных в научной и инженерной практике методов компьютерного моделирования.

Тема 5. Краткий обзор алгоритмов численного интегрирования дифференциальных уравнений и систем алгебраических уравнений.

Интегрирование ОДУ первого порядка. Метод Эйлера: *три класса ОДУ*, величина предельного шага, устойчивость схемы. Другие распространенные методы численного интегрирования ОДУ первого порядка. Основные методы интегрирования ОДУ второго порядка: метод Эйлера (базовый и модифицированный), методы Верле, предиктор-корректорные методы, алгоритм Рунге-Кутты, алгоритм Нордсика-Гира. Понятие и особенности адаптивной схемы интегрирования. Итерационные методы для решения систем линейных уравнений. Метод простых итераций. Метод Зейделя.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится в форме проведения контрольных работ по результатам пройденного материала и фиксируется в форме контрольной точки. Контрольные точки проводятся два раза в течение семестра. 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 в седьмом семестре проводится в смешанной (письменной и устной) форме по экзаменационным билетам.

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=25859>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

в) План семинарских занятий по дисциплине.

1. Основные группы методов компьютерного моделирования, отражающие базовые подходы к описанию конденсированных сред на различных пространственных масштабах.

2. Физические основы, математические формулировки и особенности численной реализации макроскопических моделей прочности и пластичности твердофазных материалов различной природы.

3. Явные и неявные формулировки численных методов конечных и дискретных элементов. Принципы пространственного совмещения доменов, моделируемых этими методами.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Самостоятельная работа студента включает:

- углубленное теоретическое изучение разделов курса при подготовке к лекционным и семинарским занятиям;
- подготовку к обсуждению материала, в том числе самостоятельный поиск необходимых источников информации, включая научно-образовательные ресурсы сети Интернет;
- подготовку к зачету.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Колдаев В.Д., Гагарина Л.Г. Численные методы и программирование. – М.: Форум, 2017, 336 с.
2. Заводинский В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013, 174 с.
3. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. / Пер. с англ. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. – 160 с.
4. Munjiza A.A., E.E. Knight E.E., Rougier E. Computational mechanics of discontinua. – Wiley, Chichester, 2012, 267 p.
5. Satoh A. Introduction to Practice of Molecular Simulation: Molecular Dynamics, Monte Carlo, Brownian Dynamics, Lattice Boltzmann and Dissipative Particle Dynamics. – Elsevier, 2011. – 330 p.
6. Александров А.В., Потапов В.Д. Основы теории упругости и пластичности.– М.: Высшая школа, 2002.– 400с.
7. Поттер Д. Вычислительные методы в физике / Пер. с англ. – М.: Изд-во «Мир», 1975. – 392 с.
8. Mustoe G.G.W. A generalized formulation of the discrete element method // Engineering Computations. – 1992. – V.9. – P. 181-190.
9. Potyondy D.O., Cundall P.A. A bonded-particle model for rock // International Journal of Rock Mechanics and Mining Science. – 2004. – V. 41. – P. 1329–1364.
10. Jing L., Stephansson O. Fundamentals of discrete element methods for rock engineering, Elsevier, 2007.
11. Shilko E.V., Smolin A.Yu., Dimaki A.V., Eremina G.M. Particle-based approach for simulation of nonlinear material behavior in contact zones // Multiscale biomechanics and tribology of inorganic and organic systems / Eds. G.-P. Ostermeyer, V.L. Popov, E.V. Shilko, O.S. Vasiljeva; Berlin: Springer, 2021. – P. 67–89.
12. Псахье С.Г., Шилько Е.В., Смолин А.Ю., Димаки А.В., Дмитриев А.И., Коноваленко Иг.С., Астафуров С.В., Завшек С. Развитие подхода к моделированию деформирования и разрушения иерархически организованных гетерогенных, в том числе контрастных, сред // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т14. – №3. – С. 27-54
13. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. – М.: Наука, 1990. – 272с.
14. Павлов П.А., Паршин Л.К., Мельников Б.Е., Шерстнев В.А. Сопротивление материалов. 4-е издание. – СПб.: Издательство «Лань», 2017. – 556 с.

б) дополнительная литература:

1. Hoogerbrugge P.J., Koelman J.M.V.A. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics // Europhysics Letters. – 1992. – V.19. – P. 155-160.
2. Espanol P., Warren P. Statistical mechanics of dissipative particle dynamics // Europhysics Letters. – 1995. – V.30. – P. 191-196.
3. Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных элементов для эллиптических уравнений. – Новосибирск: Изд-во Института математики, 2000. – 345 с.
4. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А. Численные методы частицы-в-ячейках. – Новосибирск: Издательство «Наука», 2000, 184 с.
5. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. – М.: Мир ,1986. –

318 с.

6. Хокни Р, Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. / Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 638с.
7. Yamada, T., and Matsuzaki, R. Effects of slit width on water permeation through graphene membranes by molecular dynamics simulations. *Scientific Reports*, 2017, vol. 8, pp. 339-1-339-9.
8. Liu, W., Luo, X., Bao, Y., Liu, Y. P., Ning, G. H., Abdelwahab, I., ... and Liu, B. A two-dimensional conjugated aromatic polymer via C–C coupling reaction. *Nature chemistry*, 2017, vol. 9, no. 6, p. 563.
9. Цуканов А.А., Шилько Е.В., Гутманас Э. Псахье С.Г. Избирательная фильтрация жидкостей в материалах с целевидными нанопорами // Физическая Мезомеханика. – Т.21. – №5. – С. 16-22.
10. Bićanić N. Discrete element methods. In: E. Stein, R. Borst, T.J.R. Hughes (Eds.), *Encyclopedia of computational mechanics. Volume 1: Fundamentals*, Wiley, Chichester, 2004, pp. 311-337.
11. Munjiza A. *The combined finite-discrete element method*, Wiley, Chichester, 2004.
12. Monaghan J.J. Smoothed particles hydrodynamics // *Reports on Progress in Physics*. – 2005. – V.68. – P. 1703-1759.
13. Боровков А.И., Бурдаков С.Ф., Клявин О.И. и др. Компьютерный инжиниринг: учебное пособие, СПб: Издательство политехнического университета, 2012, 93 с.
14. Вержбицкий В.М. Основы численных методов: Учебник для вузов. М.: Высш. шк., 2002. 840 с.
15. Brackbill J.U. Particle methods // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. – 2005. – V.47. – No.8-9. – P.693-705.
16. Fishman G.S. *Monte Carlo: concepts, algorithms, and applications*. – Springer, 1996, 698 p.
17. Rojek J., Onate A. Multiscale analysis using a coupled discrete/finite element method // *Interaction and Multiscale Mechanics*. – 2007. – V.1. – P. 1-31.
18. Cundall P.A., Strack O.D.L. A discrete numerical model for granular assemblies // *Geotechnique*. – 1979. – V.29. – P. 47-59.
19. Chikazawa Y., Koshizuka S., Oka Y. A particle method for elastic and visco-plastic structures and fluid-structure interactions // *Computational Mechanics*. – 2001. – V.27. – No.2. – P. 97-106.
20. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. - СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.
21. Беланков А. Б., Столбов В. Ю. Применение клеточных автоматов для моделирования микроструктуры материала при кристаллизации // *Сибирский журнал индустриальной математики*. – 2005. – Т.8. – №2. – С. 12-19.
22. Vandman O.L. Comparative study of cellular-automata diffusion models // *Lecture Notes in Computer Science*. – 1999. – V.1662. – P. 395-409.
23. Димаки А.В., Шилько Е.В., Псахье С.Г. О моделировании распространения экзотермической реакции в гетерогенных средах // *Физика горения и взрыва*. – 2005. – Т.41. – №2. – С. 38-44.
24. Димаки А.В., Каминский П.П., Зуев Л.Б., С.Г. Псахье С.Г. Компьютерное моделирование термической обработки металлических изделий токами высокой частоты на основе метода классических клеточных автоматов. // *Физическая мезомеханика*. – 2004. – Т. 7. Спец. выпуск. Ч.2. – С. 281-284.
25. Попов В.Л., Псахье С.Г. Теоретические основы моделирования упругопластических сред методом подвижных клеточных автоматов. I. Однородные среды // *Физическая мезомеханика*. – 2001. – Т.4. – №1. – С. 17-28.
26. Psakhie S.G., Shilko E.V., Grigoriev A.S., Astafurov S.V., Dimaki A.V., Smolin A.Yu. A mathematical model of particle–particle interaction for discrete element based modeling of deformation and fracture of heterogeneous elastic–plastic materials // *Engineering Fracture*

- Mechanics. – 2014. – V. 130. – P. 96-115.
27. 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.
 28. Psakhie S.G., Dimaki A.V., Shilko E.V., Astafurov S.V. A coupled discrete element-finite difference approach for modeling mechanical response of fluid-saturated porous materials // International Journal for Numerical Methods in Engineering. – 2016. . – V.106. – P. 623-643.

в) ресурсы сети Интернет:

1. <http://bourabai.ru/cm/>
Хайдаров К.А. Основы компьютерного моделирования. Электронный курс.
2. http://www.it.cas.cz/files/u1784/Num_methods_in_CM_cor_2012_01_23.pdf
Okrouhlik M. Numerical method in computational mechanics. Учебное пособие.
3. <http://www.intuit.ru/studies/courses/643/499/info>
Боев В., Сыпченко С. Электронный курс компьютерного моделирования
4. <http://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-021j-introduction-to-modeling-and-simulation-spring-2012/>
Buehler M., Grossman J. Introduction to modeling and simulation. Серия видеолекций профессоров Массачусетского технологического института
5. <http://ocw.mit.edu/courses/mathematics/18-085-computational-science-and-engineering-i-fall-2008/>
Strang G. Computational Science and Engineering I. Серия видеолекций профессора Массачусетского технологического института. Часть I.
6. <http://ocw.mit.edu/courses/mathematics/18-086-mathematical-methods-for-engineers-ii-spring-2006/>
Strang G. Mathematical methods for engineers II. Серия видеолекций профессора Массачусетского технологического института. Часть II.
7. <http://ocw.mit.edu/resources/res-2-002-finite-element-procedures-for-solids-and-structures-spring-2010/>
Bathe K.-J. Finite element procedures for solids and structures. Серия видеолекций профессора Массачусетского технологического института.

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); системы компьютерной вёрстки LaTeX; системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica, Waterloo Maple;

– публично доступные облачные технологии (GoogleDocs, 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 (*при наличии*):
- Университетская информационная система РОССИЯ – <https://uisrussia.msu.ru/>
 - Единая межведомственная информационно-статистическая система (ЕМИСС) – <https://www.fedstat.ru/>
 - ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
 - SpringerLink [Electronic resource] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Electronic data. – Cham, Switzerland, [s. n.]. – URL: <http://link.springer.com/>
 - Sci-Hub [Electronic resource] / Science Hub. – URL: <https://sci-hub.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 типа, практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате, оснащенные системой «Актру».

Все виды материально-информационной базы Научной библиотеки ТГУ.

Мультимедийное оборудование физического факультета ТГУ.

Программное обеспечение курсов, предшествующих изучению представленной дисциплины.

15. Информация о разработчиках

Шилько Евгений Викторович, доктор физико-математических наук, кафедра физики металлов физического факультета ТГУ, профессор.