

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

**15.03.03 Прикладная механика**

Направленность (профиль) подготовки:

**Компьютерный инжиниринг конструкций, биомеханических систем и материалов**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**Инженер, инженер-разработчик**

Год приема

**2024**

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОПОП

В.А. Скрипняк

Е.С. Марченко

Председатель УМК

В.А. Скрипняк

Томск – 2024

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

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

БК-1 Способен применять общие и специализированные компьютерные программы при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-2 Способен выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения физико-математический аппарат и современные компьютерные технологии.

ОПК-5 Способен учитывать современные тенденции развития техники и технологий в своей профессиональной деятельности.

ОПК-6 Способен самостоятельно проводить экспериментальные исследования и использовать основные приемы обработки и представления полученных данных, аргументировано защищать результаты выполненной работы.

ПК-4 Способен выполнять подготовку элементов документации, проектов планов и программ проведения отдельных этапов работ.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РОБК-1.1 Знает правила и принципы применения общих и специализированных компьютерных программ для решения задач профессиональной деятельности

РОБК-1.2 Умеет применять современные IT-технологии для сбора, анализа и представления информации; использовать в профессиональной деятельности общие и специализированные компьютерные программы

РООПК-2.1 Знает методику выявления естественнонаучной сущности проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, и методику привлечения физико-математического аппарата и современные компьютерных технологий для их решения

РООПК-2.2 Умеет выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности и привлекать для их решения физико-математический аппарат и современные компьютерные технологии

РООПК-5.1 Знает методику учета современных тенденций развития техники и технологий в своей профессиональной деятельности

РООПК-5.2 Умеет учитывать современные тенденции развития техники и технологий в своей профессиональной деятельности

РООПК-6.1 Знает основные методы и средства проведения экспериментальных исследований, способы обработки и представления данных, системы стандартизации и сертификации

РООПК-6.2 Умеет выбирать способы и средства измерений и проводить экспериментальные исследования

РОПК 4.2 Умеет применять нормативную документацию в соответствующей области знаний, оформлять проекты календарных планов и программ проведения отдельных элементов научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ, оформлять элементы технической документации на основе внедрения результатов научно-исследовательских работ

РОПК-4.1 Знает цели и задачи проводимых исследований и разработок, отечественный и международный опыт в соответствующей области исследований, методы и средства планирования и организации научных исследований и опытно-конструкторских разработок, методы разработки технической документации, нормативную базу для составления информационных обзоров, рецензий, отзывов, заключений на техническую документацию

## **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, является обязательной для изучения.

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

Девятый семестр, зачет с оценкой

### **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: 18 ч.

-практические занятия: 22 ч.

в том числе практическая подготовка: 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 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 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

Зачет с оценкой в девятом семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух вопросов. Продолжительность зачета с оценкой 1 час.

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>

– Хельтье Х.-Д., Зипшль 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 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](http://inac.cea.fr/L_Sim/V_Sim/index.en.html)

– LAMMPS <http://lammmps.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.