

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

Компьютерное моделирование в физике и механике 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 (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1 Способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1. Знает основные стратегии исследований в выбранной области физики, критерии эффективности, ограничения применимости.

ИПК-1.2. Умеет выделять и систематизировать основные цели исследований в выбранной области физики, извлекать информацию из различных источников, включая периодическую печать и электронные коммуникации, представлять её в понятном виде и эффективно использовать.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить принципы формулирования компьютерных моделей материалов, включая выбор численного метода и определяющих соотношений модели применительно к конкретному материалу и выбранному пространственному масштабу.

– Научиться применять распространенные коммерческие и свободно распространяемые программные средства для численного изучения поведения материалов на и оценки эффективных свойств.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

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

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, входит в модуль по выбору "Физика конденсированного состояния вещества".

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

Семестр 2, 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 (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 108 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. Классификация пространственных масштабных уровней в конденсированных средах и методы численного моделирования на различных пространственных масштабах.

Понятие моделирования физических процессов и явлений. Основные виды моделирования. Использование теории подобия при построении модели изучаемого объекта или явления. Основные этапы математического моделирования. Базовые подходы к описанию конденсированных сред на различных пространственных масштабах: атомном, наномасштабном, микроскопическом, мезоскопическом и макроскопическом. Концепции континуума и дискретного представления среды. Классификация методов компьютерного моделирования в зависимости от пространственного масштаба и концепции представления материала.

Тема 2. Современные многоуровневые компьютерные модели механического отклика металлических, неметаллических и металлокерамических материалов.

Обобщенные численные модели релаксации напряжений и разрушения, применяемые при моделировании металлических и неметаллических (включая органические) материалов в широком интервале скоростей нагружения. Особенности микроскопических моделей пластичности: модели пластичности монокристаллов, модели когезионных интерфейсов. Критерии локального разрушения квазихрупких и пластичных материалов. Базовые концепции и методики многоуровневого моделирования гетерогенных материалов. Совмещенный континуально-дискретный подход.

Тема 3. Связанные и гибридные компьютерные модели многофазных материалов.

Особенности постановки связанных задач (multiphysics problems). Конкретные реализации связанных моделей для моделирования процессов пластической деформации и трения, сопровождающихся локальным разогревом и теплопереносом. Гибридные модели проницаемых флюидонасыщенных материалов, особенности моделирования на макроскопическом и микроскопическом масштабах. Связанные гидро-термо-механические модели для компьютерного изучения поведения пористых материалов с поровым флюидом при действии интенсивных термических и механических воздействий.

Тема 4. Применение численных методов для изучения деформирования и разрушения материалов с учетом особенностей внутренней структуры и особых свойств границ раздела.

Практические основы проведения численных исследований термомеханического поведения материалов с использованием программных комплексов компьютерного моделирования и проектирования. Занятия проводятся с использованием 3 коммерческих программных комплексов: 1) PFC 2D (программный комплекс для численного решения механических и термомеханических задач классическим методом недеформируемых дискретных элементов); 2) MCA 2D Load Test (программный комплекс, базирующийся на численном методе деформируемых дискретных элементов); 3) CAE Fidesys (отечественный программный комплекс для проведения научных и инженерных расчетов методом конечных элементов; российский конкурент ANSYS и ABAQUS). Освоение работы на каждом программном комплексе завершается проведением исследования поведения квазихрупких материалов (образцов горной породы и керамики) и пластичных материалов (металлокерамические и волокнистые композиты, а также мультиметаллические материалы, получаемые методом электронно-лучевой наплавки из металлических филаментов). По итогам каждого исследования магистрант оформляет отчет (всего – 3 отчета).

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 во втором семестре проводится в смешанной (письменной и устной) форме по билетам. Продолжительность зачета 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 «Moodle» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=24592>

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

в) План практических занятий по дисциплине.

1. Методология построения макро- и мезоскопических компьютерных моделей гетерогенных материалов в программном САМ-САЕ комплексе PFC 2D. Компьютерное моделирование деформации и разрушения квазихрупких материалов при механическом нагружении.

2. Методология построения мезоскопических компьютерных моделей композиционных материалов в программном САМ-САЕ комплексе MCA 2D Load Test. Компьютерное моделирование деформации и разрушения керамических/металлокерамических композитов при механическом или термическом нагружении. Компьютерное моделирование трения и износа на мезомасштабном уровне.

3. Методология построения мезоскопических компьютерных моделей мультиметаллических материалов, получаемых электронно-лучевой наплавкой из металлических филаментов (проволок), в программном комплексе CAE Fidesys. Получение численных оценок анизотропных эффективных свойств мультиметаллических образцов.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Самостоятельная работа студента включает:

– углубленное теоретическое изучение разделов курса при подготовке к лекционным и практическим 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. Александров А.В., Потапов В.Д. Основы теории упругости и пластичности.– М.: Высшая школа, 2002.– 400с.

4. Поттер Д. Вычислительные методы в физике / Пер. с англ. – М.: Изд-во «Мир», 1975. – 392 с.
5. 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.
6. Munjiza A.A., E.E. Knight E.E., Rougier E. Computational mechanics of discontinua. – Wiley, Chichester, 2012, 267 p.
7. Popov V.L., Hess M. Method of dimensionality reduction in contact mechanics and friction. – Springer, Berlin, 2015, 265 p.
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. 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.
11. 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.
12. 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.
13. 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.
14. Smolin A.Yu., Smolin I.Yu., Shilko E.V., Stefanov Yu.P., Psakhie S.G. Coupling of Discrete and Continuum Approaches in Modeling the Behavior of Materials / Chapter in “Handbook of Mechanics of Materials. Macromechanics” S. Schmauder, Y. Kagawa Eds. Springer. 2018. doi: 10.1007/978-981-10-6855-3_35-1

б) дополнительная литература:

1. Satoh A. Introduction to Practice of Molecular Simulation: Molecular Dynamics, Monte Carlo, Brownian Dynamics, Lattice Boltzmann and Dissipative Particle Dynamics. – Elsevier, 2011. – 330 p.
2. Roters F., Eisenlohr P., Bieler T.R., Raabe D. Crystal plasticity finite element methods. – WILEY, 2010, 197 p.
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. Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных элементов для эллиптических уравнений. – Новосибирск: Изд-во Института математики, 2000. – 345 с.
5. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. – М.: Мир ,1986. – 318 с.
6. Jing L., Stephansson O. Fundamentals of discrete element methods for rock engineering, Elsevier, 2007.
7. Munjiza A. The combined finite-discrete element method, Wiley, Chichester, 2004.
8. Monaghan J.J. Smoothed particles hydrodynamics // Reports on Progress in Physics. – 2005. – V.68. – P. 1703-1759.
9. Hoogerbrugge P.J., Koelman J.M.V.A. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics // Europhysics Letters. – 1992. – V.19. – P. 155-160.
10. Espanol P., Warren P. Statistical mechanics of dissipative particle dynamics // Europhysics Letters. – 1995. – V.30. – P. 191-196.

11. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. – М.: Наука, 1990. – 272с.
12. Llorca J., Gonzalez C., Molina-Aldareguia J.M. et al. Multiscale Modeling of Composite Materials: a Roadmap towards Virtual Testing // *Advanced Materials*. – 2011. – V.23. – P. 5130-5147.
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. Механика – от дискретного к сплошному / Под ред. В.М. Фомина. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008. – 344 с.
16. Brackbill J.U. Particle methods // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. – 2005. – V.47. – No.8-9. – P.693-705.
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. 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.
19. 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
20. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. - СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.
21. 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.
22. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А. Численные методы частицы-в-ячейках. – Новосибирск: Издательство «Наука», 2000, 184 с.
23. Y.S. Suh, S.P. Joshi, K.T. Ramesh An enhanced continuum model for size-dependent strengthening and failure of particle-reinforced composites // *Acta Materialia*. – 2009. – V.57. – P. 5848-5861.
24. J.C. Shao, B.L. Xiao, Q.Z. Wang et al. An enhanced FEM model for particle size dependent flow strengthening and interface damage in particle reinforced metal matrix composite // *Composites Science and Technology*. – 2011. – V. 71. – P. 39-45.
25. K. Park, G.H. Paulino Cohesive zone models: a critical review on traction-separation relationships across fracture surfaces // *Applied Mechanics Reviews*. – 2011. – V. 64. – P. 060802-1 – 060802-20.

в) ресурсы сети Интернет:

1. <https://cae-fidesys.com/>
Официальная страница разработчика программного комплекса CAE Fidesys, предназначенного для конечно-элементного моделирования и дизайна структуры материалов и конструкций
2. http://docs.itascacg.com/pfc600/common/docproject/source/manual/program_guide/program_guide.html
Официальная документация программного комплекса PFC 6.0, предназначенного для дискретно-элементного моделирования термомеханического поведения хрупких и квазихрупких материалов
3. <https://www.itascainternational.com/learning/tutorials>
Видеопримеры осуществления построения моделей и моделирования в среде PFC 6.0
4. <http://bourabai.ru/cm/>
Хайдаров К.А. Основы компьютерного моделирования. Электронный курс.

5. 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.
6. <http://www.intuit.ru/studies/courses/643/499/info>
Боев В., Сыпченко С. Электронный курс компьютерного моделирования
7. <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
8. <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.
9. <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.
10. <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 OneNote, 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.);
 - доступные версии программных комплексов CAE Fidesys, PFC 2D, MCA 2D LoadTest.
- б) информационные справочные системы:
- Электронный каталог [Электронный ресурс] / НИ ТГУ, Научная библиотека ТГУ. – Электрон. дан. – Томск, 2008-2016. – URL: <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?theme=system>
 - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс] . – Электрон. дан. – Томск, 2011. – URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
 - ЭБС Издательство «Лань» [Электронный ресурс]:/ – Электрон. дан. – СПб., 2010. – URL: <http://e.lanbook.com/>
 - ЭБС Консультант студента [Электронный ресурс] / ООО «Политехресурс». – М, 2012. – URL: <http://www.studentlibrary.ru/>
 - Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
 - ЭБС Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012. – URL: <http://znanium.com/>
 - ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.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/>
 - ProQuest Ebook Central [Electronic resource] / ProQuest LLC. – Electronic data. – Ann Arbor, MI, USA, [s. n.]. – URL: <https://ebookcentral.proquest.com/lib/tomskuniv-ebooks/home.action>

- 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 практических занятий, 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.