

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
Механико-математический факультет  
Кафедра инженерной механики и прикладной математики

**УТВЕРЖДАЮ**  
Заведующий кафедрой  
\_\_\_\_\_/Ганиев Р.Ф./  
«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Наименование дисциплины (модуля):**

**Методы атомистического моделирования  
в механике деформируемого твердого тела, жидкости и газа**

---

*наименование дисциплины (модуля)*

**Уровень высшего образования:**

***Специалитет, подготовка кадров в аспирантуре***

**Направление подготовки (специальность):**

***Фундаментальные математика и механика***

---

*(код и название направления/специальности)*

**Направленность (профиль) ОПОП:**

**Механика деформируемого твердого тела, механика жидкости, газа и плазмы**

---

*(если дисциплина (модуль) относится к вариативной части программы)*

**Форма обучения:**

**очная**

---

*(очная, очно-заочная)*

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
на заседании кафедры инженерной механики и прикладной математики  
(протокол № \_\_\_\_\_, «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ года)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности *«Фундаментальные математика и механика»* (программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки; программы специалитета; программы магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г

Год (годы) приема на обучение \_\_\_\_\_

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО (*относится к базовой или вариативной части ОПОП ВО, или является факультативом*).

2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия (если есть):

*Освоение следующих дисциплин:*

*Дифференциальные уравнения*

*Уравнения с частными производными*

*Основы механики сплошной среды*

3. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.

Компетенции выпускников (коды)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с компетенциями
<b>ОПК-1</b> Готовность использовать фундаментальные знания в области механики сплошной среды в будущей профессиональной деятельности	<b>Знать:</b> <i>Основные положения, основные модели и методы атомистического моделирования.</i> <b>Уметь:</b> <i>Использовать методы атомистического моделирования для решения задач механики деформируемых твердых тел, газа и жидкости.</i>
<b>ПК-2</b> способность к самостоятельному анализу физических аспектов в классических постановках задач механики	<b>Знать:</b> <i>Знать основы методов атомистического моделирования</i> <b>Уметь</b> <i>Правильно выбирать модели и постановки задач для рассматриваемых явлений.</i>

4. Формат обучения **очный**

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 з.е., в том числе 36 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, 36 академических часов на самостоятельную работу обучающихся.

6. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы			Самостоятельная работа обучающегося, часы <i>(виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)</i>
		Занятия лекционного типа*	Занятия семинарского типа*	Всего	
Тема 1. Введение. Континуальная механика. Мотивация к исследованию свойств среды на атомно-молекулярном уровне. Обзор задач, которые удастся решить с помощью молекулярно-динамических методов.	4	2	0	2	2
Тема 2. Атомная структура газа, жидкости и твердого тела. Радиальная функция распределения атомов. Классификация кристаллических решеток твердых тел. Решетки Бравэ. Индексы Миллера. Дефекты кристаллической решетки.	4	2	0	2	2
Тема 3. Межатомные потенциалы. Парные и многочастичные потенциалы. Потенциалы погруженного атома (EAM, ADP, MEAM). Энергия системы атомов. Методы оптимизации энергии	4	4	0	4	2

системы. Энергия связи атомов. Энергия образования дефектов кристаллической решетки.					
Тема 4. Метод молекулярной динамики. Интегрирование уравнений Ньютона. Неустойчивость системы уравнений Ньютона. Явный метод Leap-Frog. Неявные схемы интегрирования. Вычисление осредненных параметров среды. Энергия, температура, скорость импульс и момент импульса. Тензор напряжений. Вириальное напряжение.	4	2	0	2	2
Тема 5. Метод молекулярной динамики при постоянной температуре и давлении. Каноническое распределение Гиббса. Термостаты и баростаты Андерсена, Ланжевена, Берендсена и Ноза-Хувера.	4	2	0	2	2
Коллоквиум по темам 1–6	2				2
Тема 6. Особенности реализации метода молекулярной динамики. Ускорение расчетов. Разбиение области на подобласти. Списки соседей для атомов. Граничные условия. Периодические граничные условия. Параллельная реализация метода молекулярной динамики.	4	2	0	2	4
Тема 7. Практические занятия: использование пакета LAMMPS. Установка программы. Создание расчетной области. Заполнение расчетной области атомами. Оптимизация энергии системы. Задание начальных условий и граничных условий. Выбор межатомных потенциалов. Интегрирование уравнений движения атомов, использование термостатов и баростатов. Запуск расчета на локальной машине. Визуализация результатов в OVITO. Альтернативные способы создания конфигурации атомов.	6	0	2	2	4

Тема 8. Модули упругости кристаллических твердых тел. Симметрия тензора модулей упругости. Расчет модулей упругости объемных материалов методами молекулярной динамики и статики. Упругие свойства поликристаллов. Механические свойства наноматериалов.	6	2	2	4	2
Тема 9. Моделирование ударно-волнового нагружения материалов. Адиабата Гюгонио. Упругая и пластическая волна сжатия в конденсированных средах. Релаксация напряжений за фронтом ударной волны.	6	2	2	4	2
Тема 10. Моделирование динамики дефектов кристаллической решетки. Движение дислокации. Зависимость скорость дислокации от напряжения. Взаимодействие дислокаций с примесями. Напряжение Пайерлса.	6	0	2	2	4
Тема 11. Определение вязкости и теплопроводности материалов и жидкостей, коэффициентов диффузии компонент газов. Равновесная и неравновесные постановки задач. Формулы Грина-Кубо. Примеры расчетов.	8	2	2	4	4
Промежуточная аттестация: экзамен и защита результатов самостоятельной работы	4				4
<b>Итого</b>	<b>72</b>			<b>36</b>	<b>36</b>

*\*Внимание! В таблице должно быть зафиксировано проведение текущего контроля успеваемости, который может быть реализован, например, в рамках занятий семинарского типа.*

*\*\* Часы, отводимые на проведение промежуточной аттестации, выделяются из часов самостоятельной работы обучающегося*

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

1. Коллоквиум по темам 1–6:

- 1.1. Сформулировать основные положения методов молекулярной динамики и статики,
- 1.2. Перечислить основные типы межатомных потенциалов и дать описание их свойств и применимости.
- 1.3. Дать описание основных моделей термостатов, использующихся для поддержания температуры в системе
- 1.4. Дать описание основных моделей баростатов, использующихся для поддержания напряжения в системе
- 1.5. Записать формулы осредненных параметров среды: энергии, температуры, скорости и напряжения.

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

1. Список билетов к экзамену:

1. Атомная структура вещества. Атомы и молекулы. Радиальная функция распределения атомов. Кристаллическая структура твердых тел. Классификация решеток. Решетки Бравэ. Индексы Миллера.
2. Энергия системы взаимодействующих атомов. Алгоритмы нахождения минимума потенциальной энергии системы атомов. Вычисление энергии связи молекулы, энергии когезии кристаллической решетки и теплоты образования дефектов кристаллической решетки материалов.
3. Метод молекулярной динамики. Численные схемы интегрирования уравнений Ньютона. Неустойчивость системы уравнений Ньютона. Граничные и начальные условия.
4. Парные и многочастичные межатомные потенциалы. Свойства парных потенциалов Морзе и Леннарда-Джонса. Вычисление силы, действующей между атомами.
5. Потенциалы погруженного атома EAM, ADP и MEAM. Функция погруженного атома и электронная плотность. Применимость потенциалов.
6. Особенности реализации метода молекулярной динамики: разбиение области на ячейки, списки соседей.
7. Вычисление осредненных параметров среды. Энергия, температура, скорость импульс и момент импульса. Тензор напряжений. Вириальное напряжение
8. Модули упругости кристаллических твердых тел. Определение компонент тензора модулей упругости с помощью методов молекулярной статики и динамики. Упругие свойства поликристалла.
9. Пластическая деформация металлов. Кривая напряжения-деформация. Предел упругости. Моделирование высокоскоростной деформации материалов методом молекулярной динамики.

10. Дислокации и пластичность металлов. Определение зависимости скорости дислокаций от напряжения методом молекулярной динамики. Деформационное упрочнение и легирование сплавов. Связь между движением дислокаций и пластической деформацией.
11. Ударно-волновое нагружение материалов. Упругий предвестник и пластическая волна. Откольная прочность. Адиабата Гюгонио. Моделирование ударного нагружения материалов методом молекулярной динамики.
12. Определение коэффициента вязкости и теплопроводности сред методами молекулярной динамики. Равновесный и неравновесный метод расчета. Формулы Грина-Кубо.

2. Защита результатов самостоятельной работы.

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ результатов обучения (РО) по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка	2	3	4	5
РО и соответствующие виды оценочных средств				
<b>Знания</b> (виды оценочных средств: устные и письменные опросы и контрольные работы, тесты, и т.п.)	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
<b>Умения</b> (виды оценочных средств: практические контрольные задания, написание и защита рефератов)	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности принципиального характера)	Успешное и систематическое умение



на заданную тему и т.п.)				
<b>Навыки (владения, опыт деятельности)</b> (виды оценочных средств: выполнение и защита курсовой работы, отчет по практике, отчет по НИР и т.п.)	Отсутствие навыков (владений, опыта)	Наличие отдельных навыков (наличие фрагментарного опыта)	В целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме	Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и дополнительной литературы:

Основная:

1. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмам к приложениям. 2013г. 578с.
2. Рапапорт Д. К. Искусство молекулярной динамики. М. ; Ижевск : Ин-т компьютер. исслед., 2012. — 630 с
3. А.М. Кривцов. [Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой](#). - М.: Физматлит, 2007. – 304 с.
4. М. Р. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, Oxford, 1989.
5. W. Cai. [Stanford Lectures ME346](#).
6. Shuichi Nose, A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble, *Molecular Physics* **52** 255-268 1984
7. Hans C. Andersen, Molecular dynamics simulations at constant pressures and/or temperature", *J. Chem. Phys* **72** 2384-2393 1980
8. Zimmerman J. A. et al. Calculation of stress in atomistic simulation //Modelling and simulation in materials science and engineering. – 2004. – Т. 12. – №. 4. – С. S319.
9. A.Y.Kuksin, I.V.Morozov, G.E.Norman, V.V.Stegailov, I.A.Valuev. [Standards for Molecular Dynamics Modeling and Simulation of Relaxation](#) // *Molecular Simulation* **31**, 1005-1017 (2005)

- Перечень лицензионного программного обеспечения (при необходимости):

Не требуется.

- Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

Не требуется.

- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости):  
LAMMPS ([lammmps.sandia.gov](http://lammmps.sandia.gov)) – molecular-dynamics software package  
OVITO ([ovito.org](http://ovito.org)) – визуализация атомных конфигураций  
ATOMSK (<https://atomsk.univ-lille.fr>) – создание атомных конфигураций  
Электронная библиотека попечительского совета механико-математического факультета МГУ (<http://lib.mexmat.ru>)  
Библиотека кафедры инженерной механики и прикладной математики (<http://enmech.ru/education/library/>)
- Описание материально-технического обеспечения:
  - Аудитория
  - Доска
  - Мел
  - Экран
  - Проектор

9. Язык преподавания:

Русский

10. Преподаватель (преподаватели):

к.ф.-м.н. Брюханов Илья Александрович

11. Автор (авторы) программы:

к.ф.-м.н. Брюханов Илья Александрович, к.ф.-м.н. Якунчиков Артем Николаевич