

## АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### «Дискретные математические модели»

Дисциплина «Дискретные математические модели» является частью программы магистратуры «Хемобиодинамика и биоинформатика» по направлению «01.04.02 Прикладная математика и информатика».

#### **Цели и задачи дисциплины**

Цель дисциплины: формирование комплекса знаний, умений и навыков в области построения дискретных математических моделей, их анализа и применения к исследованию физико-механических процессов на нано-, микро- и макро- уровнях, происходящих в конденсированных средах в результате внешних термомеханических воздействий. Задачи дисциплины: - изучение принципов построения дискретных математических моделей для проведения научного исследования физико-механических процессов на различных уровнях организации материи — от наночастиц до макроскопических объемов конденсированных сред; - формирование умения выделять структурные элементы на рассматриваемом уровне организации материи, описывать законы их физического взаимодействия и эволюции на языке математики, обосновывать необходимость выбора дискретного или континуального подхода для описания исследуемых физико-механических процессов; - формирование умения переходить от концептуальной формулировки дискретной математической модели к ее математической постановке и применять методы вычислительной математики для получения решений научно-исследовательских и прикладных задач в области физики и механики с помощью построенных дискретных математических моделей; - формирование навыков применения методов математического моделирования и вычислительной математики при компьютерной реализации дискретных математических моделей, навыков работы с пакетами прикладного программного обеспечения, а также навыков анализа получаемых результатов и их применения для решения научно-исследовательских и прикладных задач..

#### **Изучаемые объекты дисциплины**

- тела с кристаллическим строением от наночастиц до макроуровня; - дислокации и пластическое течение в металлах; - процессы диффузии в жидкостях и пористых телах; - ударные волны в жидкостях и газах..

### Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		3	
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	36	36	
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:			
- лекции (Л)			
- лабораторные работы (ЛР)			
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	34	34	
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2	
- контрольная работа			
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	72	72	
2. Промежуточная аттестация			
Экзамен			
Дифференцированный зачет			
Зачет	9	9	
Курсовой проект (КП)			
Курсовая работа (КР)			
Общая трудоемкость дисциплины	108	108	

### Краткое содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
3-й семестр				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Дискретные математические модели в физике и механике конденсированных сред	0	0	22	60
<p>Тема 1. Об истории дискретного математического моделирования в физике и механике.</p> <p>История формирования дискретно-атомистического подхода к определению физико-механических свойств конденсированных сред от Коши до наших дней. Методы молекулярной динамики и статики. Сведения о видах взаимодействия атомов и о потенциалах, описывающих различные виды связей. Примеры применения дискретно-атомистического подхода к определению числа независимых упругих модулей кристаллических тел. Спор о числе упругих модулей: подход Коши, подход Грина.</p> <p>Тема 2. Статический подход к исследованию физико-механических свойств материалов с кристаллическим строением при низких температурах.</p> <p>Построение дискретных геометрических моделей кристаллических решеток металлов (ГЦК, ОЦК, ГПУ) и углеродных материалов (графен, графит). Вычисление полной потенциальной энергии кристаллических решеток при низких температурах, определение отсчетной естественной (ненапряженной и недеформированной) конфигурации различных кристаллических решеток. Зависимость равновесного межатомного расстояния от размера образца.</p> <p>Тема 3. Переходные процессы в одномерной бесконечной цепочке атомов.</p> <p>Периодические граничные условия.</p> <p>Построение одномерного периодического потенциала взаимодействия атомов. Численное исследование бесконечной одномерной решетки атомов в динамическом подходе.</p> <p>Определение естественного состояния, возмущение естественного состояния, переход в новое равновесное состояние. Вычисление потенциальной, кинетической и полной энергии, их эволюция с течением времени.</p> <p>Вычисление равновесного межатомного расстояния в динамической системе взаимодействующих атомов. Вычисление меры температуры</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>цепочки атомов, зависимость равновесного межатомного расстояния от меры температуры в одномерном случае.</p> <p>Тема 4. Двухкомпонентная одномерная бесконечная цепочка атомов. Вычисление упругих модулей двухкомпонентной цепочки атомов. Правило смещения Бергло-Лоренца. Зависимость упругих модулей от фазового состава и дисперсности фаз. Вычисление градиентных упругих свойств.</p> <p>Тема 5. Определение числа независимых упругих модулей для различных кристаллических решеток. Группа симметрии тензора линейно-упругих свойств. Влияние класса симметрии структуры материала на число независимых ненулевых компонент тензора линейно-упругих свойств. Разработка программы в пакете символьных вычислений для определения числа независимых упругих модулей для материалов с ГЦК, ОЦК, ГПУ решетками, графита и двумерного материала с решеткой графена. Выражение компонент тензора линейно-упругих свойств через производные от удельной потенциальной энергии деформирования линейно-упругих твердых тел.</p> <p>Тема 6. Вычисление упругих модулей для конечных тел с кристаллическим строением при низкой температуре в статическом подходе. Получение «быстрых сумм» для расчета упругих модулей в статическом подходе. Вычисление упругих модулей в зависимости от размеров образца. Упругие свойства наночастиц. Идентификация параметров потенциалов межатомного взаимодействия. Предельный переход от наноуровня к физико-механическим свойствам микро- и макроскопических объемов.</p> <p>Тема 7. Метод контроля температуры в статическом подходе. Сведения из молекулярно-кинетической теории и термодинамики твердых тел. Построение возмущенных конфигураций атомов при заданной амплитуде возмущений и равномерном распределении направлений смещений в пространстве. Проблема</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>построения равномерного распределения на единичной сфере. Функция распределения величины смещения, соответствующая представлению атома как гармонического осциллятора при заданной амплитуде тепловых колебаний. Минимизация потенциальной энергии в каждой реализации возмущенных конфигураций при заданной амплитуде смещений. Моделирование процесса нагрева кристаллического тела. Вычисление физико-механических свойств в каждой возмущенной конфигурации атомов. Осреднение свойств по реализациям. Связь амплитуды возмущений положений атомов с температурой решетки, мера температуры. Зависимость равновесного межатомного расстояния, удельной потенциальной энергии, упругих свойств от меры температуры для различных кристаллических решеток. Получение точек структурных и фазовых превращений кристаллических тел.</p>				
Имитационный подход в дискретном моделировании	0	0	12	12
<p>Тема 8. Метод клеточных автоматов в дискретном математическом моделировании физико-механических процессов. Сведения о клеточных автоматах, история метода, виды окрестностей. Окрестность Марголуса для моделирования физико-механических процессов. Правила клеточного автомата для моделирования процессов диффузии, течения вязких жидкостей, распространения ударных волн в жидкостях и газах. Реализация подхода клеточных автоматов для перечисленных процессов в вычислительной среде на компьютере.</p> <p>Тема 9. Метод клеточных автоматов в моделировании процессов диффузии</p> <p>Вычислительный эксперимент по описанию диффузии в двухкомпонентной среде. Сопоставление решений, полученных дискретным методом клеточных автоматов и численным методом решения классического дифференциального уравнения диффузии.</p> <p>Дискретное математическое моделирование процесса диффузии в пористой среде. Учет движения среды. Анализ полученных результатов. Практическое применение</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>результатов для оценки зон распространения загрязнений от промышленных объектов.</p> <p>Тема 10. Метод клеточных автоматов в моделировании процесса движения дислокаций и образования дислокационных структур в металлах.</p> <p>Правила клеточного автомата для движения дислокаций в системе сколь-жения. Реализация вычислительного эксперимента. Анализ получаемых конфигураций дислокаций.</p> <p>Применение результатов для описания законов упрочнения по системам скольжения и типов дислокационных субструктур.</p>				
ИТОГО по 3-му семестру	0	0	34	72
ИТОГО по дисциплине	0	0	34	72