

Программа дисциплины

Многомасштабное моделирование в гидродинамике

Программу составил:

С.А. Мурзов, к-т физ.-мат. наук

Аннотация

Предлагаемый план занятий для курса "Многомасштабные методы в гидродинамике" включает в себя как теоретические, так и практические аспекты суперкомпьютерного моделирования, охватывая широкий спектр методов и их применения. В ходе курса студенты будут изучать новые концепции и приобретать навыки вычислительного моделирования, что крайне важно для современных исследований и инженерной практики. Разработка высокопроизводительных вычислительных систем и алгоритмов позволяет моделировать и анализировать увеличивающиеся объемы данных, что открывает возможности для фундаментальных исследований.

В результате освоения курса произойдет ознакомление обучающихся с различными вариантами бессеточного метода сглаженных частиц (SPH) и его связь с молекулярно-динамическим (МД) моделированием, как с точки зрения подобия вычислительных процедур, так и согласования разных масштабов гидродинамических процессов в МД и SPH.

Цель дисциплины

По результатам курса обучающиеся должны уметь самостоятельно выбирать и реализовывать метод SPH для решения задач механики сплошной среды. Анализировать результаты МД расчетов с точки зрения гидродинамического течения, проводить сопоставление расчетов произведенных методом SPH и МД.

Задачи дисциплины

Ознакомление обучающихся с бессеточными методами расчета механики сплошной среды в сравнении с молекулярно-динамическими методами. Обозначение областей применения, преимуществ/недостатков разных вариантов математической формулировки методов, влияния их на вычислительные затраты.

Содержание дисциплины

1. Многомасштабное моделирование в гидродинамике

Основы суперкомпьютерного моделирования для методов частиц в атомистическом и гидродинамическом моделировании: уравнения движения и система уравнений механики сплошной среды. Лагранжевы и эйлеровы переменные в гидродинамике. Методы частиц: молекулярная динамика, бессеточные методы в гидродинамике. Примеры применения в задачах детонации, ударных волн и лазерного воздействия.

2. Метод сглаженных частиц в гидродинамике (SPH)

Краткая история и математические основания метода сглаженных частиц. Формулировка аппроксимации уравнений движения на основе метода сглаженных частиц. Понятие ядра сглаживающей функции. Аппроксимация и сходимость метода. Примеры для закрепления материала и сравнение с аппроксимацией методом конечных разностей.

3. Молекулярная динамика (МД)

Основы МД моделирования и перенос результатов в модели механики сплошной среды. Моделирование гидродинамических течений в МД. Анализ молекулярно-динамических расчетов с целью получения локальных термодинамических и параметров движения вещества с точки зрения сплошной среды.

4. Парность взаимодействия контактного SPH

Контактный метод сглаженных частиц (CSPH) и реализация соответствующей программы на известном студенту языке программирования, либо участие в совместной разработке соответствующей части учебного python-пакета. Длина сглаживающей функции и радиус обрезание короткодействующего потенциала. Парное взаимодействие SPH-частиц в методе CSPH. Полностью лагранжево описание SPH: сравнение схемы с использованием тензора деформации/скорости деформации.

Упомянутый python-пакет реализует функционал считывания, проведения расчета ударной волны в упругопластической среде и вывод результатов в виде профилей для моделирования задач механики сплошной среды методом CSPH на языке python. Студент имеет возможность поучаствовать в решении задач разработки такой программы путем собственноручного написания отдельного вычислительного модуля.

5. Повышение точности в SPH и МД

Схема повышенного порядка точности типа MUSCL для аппроксимации значений физических величин на контакте SPH-частиц. Матрица коррекции градиентов. Границы применимости методов повышенной точности, преимущества/недостатки. Реализация методов в программе и сравнение с классическим контактным методом частиц.

Моделирование металлов в молекулярной-динамике, проблема парных потенциалов, пример потенциала погруженного атома, сравнение численных затрат для парного потенциала и потенциала погруженного атома с рассмотренными методами SPH.

6. Задачи упругопластическим течением: теория, SPH, МД

Решение задачи распада разрыва по Уилкинсу: плоская ударная волна и волна разрежения в упругопластической среде с линейным законом упругости и моделью пластичности с постоянным пределом текучести по Мизесу. Девиаторные и объемные напряжения, тензор деформаций. SPH-аппроксимация уравнений упругопластического течения среды. Извлечение напряжений фон Мизеса из МД моделирования.

7. Практика моделирования ударных волн в SPH

Выбор одного из материалов и расчет ударной адиабаты с использованием. Граничные условия входа и выхода SPH-частиц в область расчета. Сверхзвуковые и дозвуковые течения и постановка неотражающих граничных условий входа и выхода.

8. Практика моделирования ударных волн в МД

Расчет ударной адиабаты в МД для выбранного материала. Граничные условия входа и выхода атомов в подвижной системе отсчета. Особенности постановки граничных условий в случае дозвуковых и сверхзвуковых течений, неотражающие граничные условия.

9. Сравнение результатов МД и SPH моделирования. Перенос макроскопических параметров из результатов МД расчетов: поле давления, температуры, плотности, скорости течения среды. Понятие кинетической и потенциальной энергии, вириал,

давление системы атомов. Построение профилей и проверка согласованности с гидродинамическим моделированием.

10. Метод подвижного окна наблюдения

Постановка задачи управления для достижения системой заданного состояния. Постановка задач оценки и использование наборов оценок для уточнения состояния системы. Метод подвижного окна наблюдения на основе модификации граничного условия и воздействия на систему в сравнении с методом адаптивного окна наблюдения, оценивающим состояние системы и модифицирующим систему отсчета.