

Программа дисциплины

Практикум по вычислительной теплофизике

Программу составили:

В.В. Писарев, канд. ф.-м. наук

С.А.Захаров, канд. ф.-м. наук

Цель дисциплины

Выработка у студентов навыков программной реализации численных методов для решения физических задач.

Задачи дисциплины

- знакомство с задачами теплофизики, для решения которых требуются вычислительные методы и подходы
- рассмотрение некоторых вычислительных методов, актуальных для решения задач вычислительной теплофизики
- знакомство с особенностями и парадигмами языка программирования Julia, ценными для научных и технических вычислений
- приобретение практических навыков реализации вычислительных методов на языке программирования высокого уровня
- приобретение навыков анализа свойств численных алгоритмов

Содержание дисциплины

1. Введение. Обзор некоторых задач теплофизики, не имеющих аналитического решения. Язык программирования Julia: обзор основных возможностей, сходства и отличия с Matlab, Python+NumPy.

2. Интерполяция

Кусочно-линейная и полиномиальная интерполяция. Интерполяция табличных данных.

3. Решение нелинейных уравнений.

Метод бисекции. Метод секущих и его вариации: regula falsi, метод Риддерса, метод Брента. Метод Ньютона. Скорость сходимости. Применение численных методов для расчета кривой фазового равновесия – кривая испарения жидкости ван-дер-Ваальса. Поиск корней многочленов методом Ньютона.

4. Численное интегрирование.

Квадратурные формулы Ньютона-Котеса. Квадратурные формулы Гаусса. Численное интегрирование с контролем точности: метод Ромберга (интегрирование с равномерной сеткой), расширения Кронрода для формул Гаусса.

5. Численное решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Методы Рунге-Кутты, таблица Бутчера. Схема Верле для задач гамильтоновой динамики. Методы Адамса. Расчет динамики химических реакций методами Рунге-Кутты. Реализация динамики частиц со схемой Верле.

6. Уравнения в частных производных. Схемы для уравнения Пуассона, уравнения теплопроводности в 1D и 2D. Гиперболические уравнения и системы. Обсуждение вывода формул в представлении метода конечных разностей, конечных объемов, конечных элементов. Явные и неявные схемы. Свойства численных схем: аппроксимация, устойчивость, сходимость, монотонность, консервативность. Аппроксимация граничных условий.

7. Решение линейных систем: разложения матриц, метод прогонки, релаксационные методы, метод сопряженных градиентов.

Решение нелинейных систем: метод Ньютона, метод сопряженных градиентов.

Применение солверов линейных систем для неявных схем решения уравнений Пуассона и теплопроводности.

8. Численная оптимизация: поиск экстремума функции одной переменной, минимизация вдоль направления, метод Ньютона и квазиньютоновские методы. Приложение к задачам химического равновесия, фазового равновесия в многокомпонентной системе, уравнениям в частных производных.