

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики  
А.С. Батурин**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Многомасштабное моделирование в гидродинамике
<b>по направлению:</b>	Материаловедение и технологии материалов
<b>профиль подготовки:</b>	Перспективные функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 15 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: С.А. Мурзов, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 24.01.2025

## Аннотация

Предлагаемый план занятий для курса Многомасштабное моделирование 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 подобию вычислительных процедур, так и согласования разных масштабов гидродинамических процессов в МД и SPH.

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

научиться 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.

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

## 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- теоретические основания различных методов: лагранжевые и эйлеровые переменные, бессеточные методы;
- методы частиц: молекулярно-динамическое моделирование для решения уравнений движения и SPH-моделирование для решения системы уравнений механики сплошных сред применимо к задачам высокоскоростных деформаций, ударных волн и детонации;
- распад упругопластического разрыва по Уилкинсу.

уметь:

- реализовывать упомянутые выше методы расчета с использованием языков программирования или существующих пакетов для атомистического и гидродинамического моделирования;
- решать задачу распада упругопластического разрыва в веществе с линейным законом упругости и идеальной моделью пластичности с критерием Мизеса;
- анализировать результаты молекулярно-динамического моделирования с целью получения гидродинамических параметров течения в веществе с точки зрения механики сплошной среды;
- решать задачу об установлении стационарного ударного фронта в подвижной системе координат с использованием освоенных методов моделирования;

владеть:

- практическими навыками использования упомянутых выше методов;
- теоретическим аппаратом, позволяющим при необходимости вносить коррективы в изученные методы под конкретную задачу.

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

##### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Многомасштабное моделирование в гидродинамике	1		1	6
2	Метод сглаженных частиц в гидродинамике (SPH)	1		1	6
3	Молекулярная динамика (МД)	1		1	6
4	Парность взаимодействия контактного SPH	2		2	6
5	Повышение точности в SPH и МД	2		2	6
6	Задачи упругопластическим течением: теория, SPH, МД	2		2	6
7	Практика моделирования ударных волн в SPH	2		2	6
8	Практика моделирования ударных волн в МД	2		2	6
9	Сравнение результатов МД и SPH моделирования	1		1	6
10	Метод подвижного окна наблюдения	1		1	6
Итого часов		15		15	60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

## 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

### 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.

## 5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная мультимедиа проектором, меловой или маркерной доской.

## 6. Перечень рекомендуемой литературы

### Основная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Численное решение многомерных задач газовой динамики / под ред. С.К. Годунова, Наука, 1976.
2. Вычислительные методы в гидродинамике / Олдер Б., Фернбах С., под ред. Ротенберг М. Москва, Мир, 1967.
3. Численное моделирование динамики газов и плазмы методами частиц / М. Ф. Иванов, В. А. Гальбурт, учебное пособие МФТИ, 2000 .
4. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем / Д. Френкель, Б. Смит, пер. с англ. Научный Мир, 2013.

### Дополнительная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Parshikov A.N., Medin S.A. Smoothed particle hydrodynamics using interparticle contact algorithms // J. Comput. Phys. 2002. V. 180. P. 358–382.
2. Computer Simulation of Liquids / Allen M.P. Tildesley D. J., Oxford, Clarendon Press 1999.
3. Optimal estimation, identification and control / под ред. K. Lee, Cambridge, The MIT Press, 1966, pp. 67–72.
4. S. Murzov, S. Dyachkov, V. Zhakhovsky, Adaptive moving window technique for sph simulation of stationary shock waves, Computer Physics Communications 298 (2024).

**7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

Не используются

**8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Не предусмотрены.

**9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- выполнение заданий практических семинаров и самостоятельную обработку полученных результатов;
- активной самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

<b>по направлению:</b>	Материаловедение и технологии материалов
<b>профиль подготовки:</b>	Перспективные функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	<u>1</u>
<b>квалификация:</b>	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет	
<b>Разработчик:</b>	С.А. Мурзов, канд. физ.-мат. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Многомасштабное моделирование в гидродинамике» обучающийся должен:

### знать:

- теоретические основания различных методов: лагранжевые и эйлеровые переменные, бессеточные методы;
- методы частиц: молекулярно-динамическое моделирование для решения уравнений движения и SPH-моделирование для решения системы уравнений механики сплошных сред применимо к задачам высокоскоростных деформаций, ударных волн и детонации;
- распад упругопластического разрыва по Уилкинсу.

### уметь:

- реализовывать упомянутые выше методы расчета с использованием языков программирования или существующих пакетов для атомистического и гидродинамического моделирования;
- решать задачу распада упругопластического разрыва в веществе с линейным законом упругости и идеальной моделью пластичности с критерием Мизеса;
- анализировать результаты молекулярно-динамического моделирования с целью получения гидродинамических параметров течения в веществе с точки зрения механики сплошной среды;
- решать задачу об установлении стационарного ударного фронта в подвижной системе координат с использованием освоенных методов моделирования;

### владеть:

- практическими навыками использования упомянутых выше методов;
- теоретическим аппаратом, позволяющим при необходимости вносить коррективы в изученные методы под конкретную задачу.

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

В начале каждого занятия проводится краткий опрос по теме предыдущего занятия.



#### 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы к дифференцированному зачету:

1. Показать что коэффициент Пуассона в материале моделируемом парным потенциалом всегда равен 0.25.
2. Показать, что потенциал погруженного атома, несмотря на многочастичный вид выражения для потенциальной энергии, при расчете сил для системы атомов сводится к двум последовательным циклам по соседям атомов.
3. Разложить в ряд и показать степень аппроксимации функции  $y=1$  и  $y=x^2$ , если одномерные SPH-частицы размера  $d$  расположены на равных расстояниях  $d$  друг от друга вдоль оси абсцисс.
4. Показать какова точность аппроксимации производной функции из предыдущего вопроса  $dy/dx$  с использованием предложенного ядра сглаживающей функции. Произвести расчет с использованием языка программирования. Как изменится ответ, если расположить SPH-частицы нерегулярно?
5. Получить соотношения между шириной сглаживающей функции ядра и расстоянием между равноудаленно расположенными частицами вдоль одной оси SPH-частицами, при которых данное ядро сглаживающей функции аппроксимирует производную функции  $dy/dx$ .
6. Численно решить задачу распада разрыва по Уилкинсу и сравнить с результатом моделирования методом SPH.
7. Преобразовать решение задачи распада упругопластического разрыва по Уилкинсу в металле предполагая, что скорость движения ударной волны и волны разрежения точно равны скорости звука и получить аналитическое выражение.
8. Рассчитать скорость сходимости упомянутой задачи распада разрыва при использовании оптимально выбранной ширины сглаживающей функции. Сравнить контактный и MUSCL методы с результатом на основе процедуры коррекции градиентов с помощью матрицы нормализации. Опишите, какие визуальные различия профилей для представленных методов?
9. Рассчитать выход ударной волны и приход акустического импульса на свободную поверхность материала. Сравните профили МД и SPH моделирования.
10. Рассчитать выход ударной волны и приход акустического импульса на границу неотражающего граничного условия. Сравните МД и SPH.
11. Задайте расчетную область с постоянной скоростью входа и выхода вещества. Опишите, что будет если скорости входа и выхода будут разные?
12. В вышеописанной расчетной области с равными скоростями входа и выхода выделите небольшую область атомов/SPH-частиц и измените их скорость на фиксированную величину. Вычислите зависимость скорости центра масс выделенной области частиц от времени.
13. В вышеописанной расчетной области с равным скоростями входа и выхода уменьшайте (по модулю) скорость выхода. Исследуйте, как меняется наблюдаемая скорость ударной волны и оцените при какой скорости за фронтом ударная волна будет неподвижной.
14. Используя вычисленную скорость за фронтом ударной волны и из предыдущего вопроса, задайте расчетную область, где Разность между скоростью входа и выхода Фиксирована. Попробуйте разные системы отсчета, постройте зависимость скорости движения ударной волны от скорости системы отсчета.
15. Предложите или реализуйте один из предложенных алгоритмов автоматического поиска такой скорости системы отсчета для предыдущей задачи, чтобы ударная волна оставалась неподвижной.
16. Пусть группа атомов/частиц из вопроса 12 изменяет свою скорость центра масс по некоторому закону  $f(t)$ . Предложите, как необходимо организовать граничные условия и изменение скорости системы отсчета, чтобы эта группа атомов оставалась внутри моделируемой расчетной области?

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов – выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов – выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов – выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов – выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов – выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов – выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла – выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний недостаточно правильные формулировки базовых понятий нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла – выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний допускающему ошибки в формулировках базовых понятий нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла – выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл – выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

## **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

Оценка (дифференцированный зачет) выставляется за выполнение и сдачу всех домашних заданий по указанным вопросам (среднее арифметическое).