

**Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский университет «МЭИ»**

Направление подготовки/специальность: 14.03.01 Ядерная энергетика и теплофизика

Наименование образовательной программы: Теплофизика

Уровень образования: высшее образование - бакалавриат

Форма обучения: Очная

**Оценочные материалы
по дисциплине
Численное решение задач теплофизики**

**Москва
2024**

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ РАЗРАБОТАЛ:

Разработчик

	Подписано электронной подписью ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ»	
	Сведения о владельце ЦЭП МЭИ	
	Владелец	Минко К.Б.
	Идентификатор	Recbadeab-MinkoKB-6c41f784

К.Б. Минко

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель
образовательной
программы

	Подписано электронной подписью ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ»	
	Сведения о владельце ЦЭП МЭИ	
	Владелец	Яньков Г.Г.
	Идентификатор	Rbb1f0c84-YankovGG-11a2e4dc

Г.Г. Яньков

Заведующий
выпускающей кафедрой

	Подписано электронной подписью ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ»	
	Сведения о владельце ЦЭП МЭИ	
	Владелец	Герасимов Д.Н.
	Идентификатор	Ra5495398-GerasimovDN-6b58615

Д.Н.
Герасимов

ОБЩАЯ ЧАСТЬ

Оценочные материалы по дисциплине предназначены для оценки: достижения обучающимися запланированных результатов обучения по дисциплине, этапа формирования запланированных компетенций и уровня освоения дисциплины.

Оценочные материалы по дисциплине включают оценочные средства для проведения мероприятий текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Формируемые у обучающегося компетенции:

1. ПК-2 Способен к проведению лабораторного и численного теплофизического эксперимента, к проектированию и конструированию с этой целью соответствующих экспериментальных стендов, к обработке опытных данных

ИД-3 Способен к организации лабораторного эксперимента и обработке полученных экспериментальных данных

ИД-4 Владеет методами математического моделирования теплофизических процессов

и включает:

для текущего контроля успеваемости:

Форма реализации: Проверка задания

1. Вычисление интегралов простейшим методом Монте-Карло (Программирование (код))
2. Использование МКО и МКР для решения уравнения нестационарной обобщенной диффузии (Программирование (код))
3. Моделирование динамики системы многих частиц при постоянной температуре или давлении (Лабораторная работа)
4. Моделирование процессов гидродинамики и теплообмена при обтекания одиночного цилиндра при низких числах Рейнольдса (Лабораторная работа)
5. Моделирование системы методом Монте-Карло в микроканоническом ансамбле (Лабораторная работа)
6. Течение и теплоперенос в каналах (Программирование (код))
7. Численный алгоритм расчета траекторий частиц (Лабораторная работа)

Форма реализации: Смешанная форма

1. Моделирование динамики замкнутой системы многих частиц (Лабораторная работа)
2. Определение эффективной теплопроводности композитного материала (Проверочная работа)
3. Решение одномерных задач теплопроводности (Проверочная работа)

БРС дисциплины

7 семестр

Раздел дисциплины	Веса контрольных мероприятий, %					
	Индекс КМ:	КМ-1	КМ-2	КМ-3	КМ-4	КМ-5
	Срок КМ:	4	8	11	12	15
Численное моделирование с использованием метода Монте-Карло						
Численное моделирование с использованием метода Монте-Карло		+				

Основы численного решения задач тепломассобмена					
Основы численного решения задач тепломассобмена		+			
Особенности численного решения задач тепломассобмена методом контрольного объема					
Особенности численного решения задач тепломассобмена методом контрольного объема		+	+	+	+
Особенности численного решения задач тепломассобмена методом конечных разностей					
Особенности численного решения задач тепломассобмена методом конечных разностей					+
Вес КМ:	5	25	25	20	25

8 семестр

Раздел дисциплины	Веса контрольных мероприятий, %					
	Индекс КМ:	КМ-1	КМ-2	КМ-3	КМ-4	КМ-5
	Срок КМ:	4	7	11	12	13
Современные средства вычислительной гидродинамики						
Современные средства вычислительной гидродинамики	+					
Введение в вычислительные методы молекулярной динамики						
Введение в вычислительные методы молекулярной динамики			+	+	+	
Метод Монте-Карло						
Метод Монте-Карло						+
Вес КМ:	20	20	20	20	20	20

\$Общая часть/Для промежуточной аттестации\$

СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ

I. Оценочные средства для оценки запланированных результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Индекс компетенции	Индикатор	Запланированные результаты обучения по дисциплине	Контрольная точка
ПК-2	ИД-3 _{ПК-2} Способен к организации лабораторного эксперимента и обработке полученных экспериментальных данных	Уметь: обрабатывать результаты расчета процессов гидродинамики и теплообмена составлять математическое описание задач гидродинамики и теплообмена	Моделирование процессов гидродинамики и теплообмена при обтекания одиночного цилиндра при низких числах Рейнольдса (Лабораторная работа)
ПК-2	ИД-4 _{ПК-2} Владеет методами математического моделирования теплофизических процессов	Знать: метод контрольного объема метод молекулярной динамики математическое описание задач теплопроводности Уметь: решать одномерные задачи теплопроводности методом контрольного объема использовать метод Монте-Карло для исследования микроканонического	Вычисление интегралов простейшим методом Монте-Карло (Программирование (код)) Решение одномерных задач теплопроводности (Проверочная работа) Определение эффективной теплопроводности композитного материала (Проверочная работа) Течение и теплоперенос в каналах (Программирование (код)) Численный алгоритм расчета траекторий частиц (Лабораторная работа) Моделирование динамики замкнутой системы многих частиц (Лабораторная работа) Моделирование динамики системы многих частиц при постоянной температуре или давлении (Лабораторная работа) Моделирование системы методом Монте-Карло в микроканоническом ансамбле (Лабораторная работа) Использование МКО и МКР для решения уравнения нестационарной обобщенной диффузии (Программирование (код))

		ансамбля моделировать динамику замкнутой системы многих частиц при постоянной температуре или давлении методом молекулярной динамики решать двумерные задачи теплопроводности методом контрольного объема решать задачи о полностью развитом течении и теплообмене при течении жидкости в каналах методом контрольного объема решать нестационарные уравнения обобщенной диффузии методом контрольного объема использовать численные методы для решения задачи Коши для системы ОДУ моделировать динамику замкнутой системы многих частиц методом молекулярной динамики решать задачи с использованием метода конечных разностей рассчитывать	
--	--	--	--

		определенные интегралы с требуемой точностью методом Монте-Карло	
--	--	--	--

II. Содержание оценочных средств. Шкала и критерии оценивания

7 семестр

КМ-1. Вычисление интегралов простейшим методом Монте-Карло

Формы реализации: Проверка задания

Тип контрольного мероприятия: Программирование (код)

Вес контрольного мероприятия в БРС: 5

Процедура проведения контрольного мероприятия: Студентам выдается набор заданий (6 штук). Каждый пункт предполагает написание кода (с комментариями и пояснениями). Отчет по проделанной работе сдается на проверку. Результат проверки является оценкой за задание.

Краткое содержание задания:

Ознакомиться с описанием численных методов интегрирования. Выполнить задания №1-№6.

Контрольные вопросы/задания:

Уметь: рассчитывать определенные интегралы с требуемой точностью методом Монте-Карло	Задание №1 1. Напишите программу, реализующую каждый из описанных "классических" алгоритмов. 2. Используя каждый из описанных методов, численно оцените определенные интегралы от функций для n от 2, 4, 8, 64, 128 и 1024: $f(x) = 2x + 3x^2 + 4x^3, \quad 0 \leq x \leq 1$ $f(x) = \cos(x), \quad 0 \leq x \leq \pi/2$ $f(x) = e^{-x}, \quad 0 \leq x \leq 1$ $f(x) = (1 + x^2)^{-1}, \quad 0 \leq x \leq 1$ 3. Оцените зависимость погрешности от n в каждом случае. Задание №3 1. Составьте программу, которая реализует метод "проб и ошибок" (формула (11)). Найдите оценку F_n интеграла от функции $f(x) = 4\sqrt{1-x^2}$ в зависимости от числа испытаний n. Положите $a = 0$, $b = 1$, $H = 1$ и проведите выборку функции $\sqrt{1-x^2}$. Умножьте оценку на 4. Вычислите разность между F_n и точным результатом, равным π. Данная разность является мерой погрешности метода Монте-Карло. Постройте график зависимости погрешности от n в логарифмическом масштабе. Какой будет приближительная функциональная зависимость погрешности от n при больших значениях n? 2. Оцените интеграл от $f(x)$, используя метод Монте-Карло выборочного среднего (12), и вычислите погрешность как функцию от числа испытаний n для значений n до 10000. Определите приближительную функциональную зависимость погрешности от n для больших значений n. Сколько необходимо провести испытаний, что получить F_n с точностью до двух десятичных знаков? Задание №6 Написать универсальную программу для вычисления интеграла от заданной функции по единичному кубу в n-мерном пространстве с заданной погрешностью.
---	--

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "отлично" выставляется если задание выполнено в полном объеме или выполнено преимущественно верно

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "хорошо" выставляется если большинство вопросов раскрыто, выбрано верное направление для решения задач

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "удовлетворительно" выставляется если задание преимущественно выполнено

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "неудовлетворительно" выставляется если задание выполнено неверно или преимущественно не выполнено

КМ-2. Решение одномерных задач теплопроводности

Формы реализации: Смешанная форма

Тип контрольного мероприятия: Проверочная работа

Вес контрольного мероприятия в БРС: 25

Процедура проведения контрольного мероприятия: Студенты выполняют практическое задание. Сдают его на проверку. Далее проводится письменная защита.

Краткое содержание задания:

Практическое задание состоит из двух пунктов (вопросы на умение). Выполнение пунктов предполагает модификацию существующей программы для решения поставленных задач.

Письменная защита состоит из вопросов на понимание теоретического материала, лежащего в основе практического задания.

Контрольные вопросы/задания:

Знать: математическое описание задач теплопроводности	1. Напишите обобщенное уравнение одномерной диффузии в интегральном виде. Объясните физический смысл всех входящих в данное уравнение слагаемых. 2. Почему интегральная форма законов сохранения является более общей, чем дифференциальная? 3. Выведите соотношения для аппроксимации диффузионного потока на грани внутреннего КО. 4. Ряд простых полностью развитых течений описывается уравнениями типа теплопроводности. Например, полностью развитое течение между параллельными пластинами. Каким значениям параметров обобщенного уравнения диффузии соответствует представленное уравнение?
Уметь: решать одномерные задачи теплопроводности методом контрольного объема	1. Задание 1. Модифицировать приведенную программу для случая, когда на границах расчетной области заданы граничные условия третьего рода. Сравнить полученное значение с аналитическим решением для данного случая. Варианты задания и свойства материалов представлены в раздаточном материале. 2. Задание 2. Модифицировать приведенную программу для решения задачи о распределении тепла в кольцевом ребре постоянной толщины. Сравнить полученное поле температур и количество отводимого тепла с точными решениями. Оптимизировать длину ребра. Варианты задания и свойства материалов представлены в раздаточном материале.

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "отлично" выставляется если задание выполнено в полном объеме или выполнено преимущественно верно

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "хорошо" выставляется если большинство вопросов раскрыто. выбрано верное направление для решения задач

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "удовлетворительно" выставляется если задание преимущественно выполнено

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "неудовлетворительно" выставляется если задание выполнено неверно или преимущественно не выполнено

КМ-3. Определение эффективной теплопроводности композитного материала

Формы реализации: Смешанная форма

Тип контрольного мероприятия: Проверочная работа

Вес контрольного мероприятия в БРС: 25

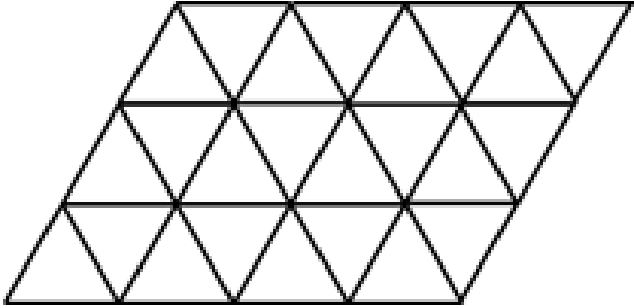
Процедура проведения контрольного мероприятия: Студенты выполняют практическое задание. Сдают его на проверку. Далее проводится письменная защита.

Краткое содержание задания:

Практическое задание состоит из пяти пунктов (вопросы на умение). Выполнение пунктов предполагает модификацию существующей программы для решения поставленной задачи и проведения ряда расчетов.

Письменная защита состоит из вопросов на понимание теоретического материала, лежащего в основе практического задания.

Контрольные вопросы/задания:

Знать: метод контрольного объема	1. При выводе дискретного аналога было решено использовать следующие выражения для аппроксимации диффузионного потока на грани контрольного объема (обозначения из лекций): $J_{nb} = d_{nb}(\Phi_P - \Phi_{nb}), d_{nb} = \frac{\Gamma_P}{(\Delta x_P + \Delta x_{nb})}$ Будет ли дискретный аналог обладать свойством консервативности? 2. Что такое периодические граничные условия? Объясните особенности их программной реализации. 3. Для расчета распределения температуры в двумерном теле используется сетка, представленная на рисунке. Выведите дискретный аналог для данной задачи. Считать, что длины сторон треугольных КО одинаковы, а все необходимые параметры задачи известны. Качественно опишите вид получившейся СЛАУ. 
Уметь: решать двумерные задачи теплопроводности методом контрольного объема	4. Объясните понятие "консервативности" схемы. 1. Предложить математическое описание задачи о стационарном распределении температурного поля в композитном материале заданной структуры с

	граничными условиями 3-го рода на обеих поверхностях стенки (как на рис. 2). Выбрать расчетную область, описать граничные условия. 2. Произвести обезразмеривание предложенного математического описания задачи. 3. Расширить программу из предыдущей задачи на двухмерный случай. 4. Осознанно выбирая параметры схемы дискретизации, провести варианты расчеты для заданных в раздаточном материале значений параметров задачи. 5. Проанализировать влияние варьируемых в задании параметров на эффективный коэффициент теплопроводности. Дать объяснения.
--	---

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "отлично" выставляется если задание выполнено в полном объеме или выполнено преимущественно верно

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "хорошо" выставляется если большинство вопросов раскрыто. выбрано верное направление для решения задач

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "удовлетворительно" выставляется если задание преимущественно выполнено

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "неудовлетворительно" выставляется если задание выполнено неверно или преимущественно не выполнено

КМ-4. Течение и теплоперенос в каналах

Формы реализации: Проверка задания

Тип контрольного мероприятия: Программирование (код)

Вес контрольного мероприятия в БРС: 20

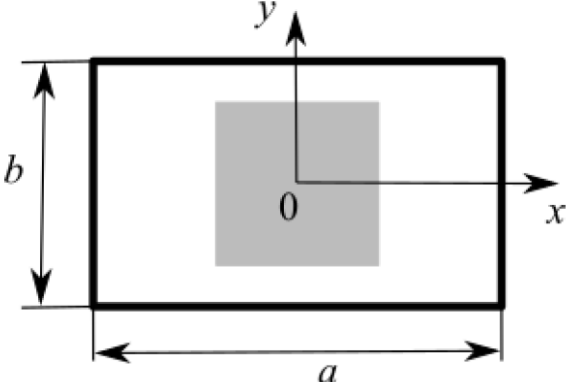
Процедура проведения контрольного мероприятия: Студенты выполняют практическое задание. Отчет по проделанной работе сдается на проверку. Результат проверки является оценкой за задание.

Краткое содержание задания:

Практическое задание состоит из трех пунктов (вопросы на умение). Выполнение пунктов предполагает модификацию существующей программы для решения поставленной задачи и проведения ряда расчетов.

Контрольные вопросы/задания:

Уметь: решать задачи о полностью развитом течении и теплообмене при течении жидкости в каналах методом контрольного объема	1. Пункт 1. Составьте математическое описание задачи о полностью развитом течении в прямоугольном канале. Модифицируйте программу для решения поставленной задачи. Подбирая перепад давления, найдите зависимость гидравлического сопротивления от числа Рейнольдса. Сравните полученные результаты с известными
--	---

	литературными данными. 2.Пункт 2. На рисунке представлен канал, внутри которого находится твердая вставка, жидкость течет в зазоре между стенками вставки и внешней стенкой. Размеры вставки задайте на свое усмотрение. Для данного канала выполните задание из пункта 1.  3.Пункт 3. Составьте математическое описание задачи о стабилизированном теплообмене. Модифицируйте программу для расчета задачи о стабилизированном теплообмене в прямоугольном канале. Напишите программу расчета распределения безразмерной температуры стенки по периметру канала. Сравните полученные результаты с известными литературными данными.
--	---

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка ставится за выполнения Пунктов 1-3 без ошибок.

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка ставится за выполнения Пунктов 1-2 без ошибок или пунктов 1-3 с незначительными ошибками.

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка ставится за выполнения Пункта 1 без ошибок или пунктов 1-3 с ошибками.

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Пункт 1 выполнен с существенными ошибками.

КМ-5. Использование МКО и МКР для решения уравнения нестационарной обобщенной диффузии

Формы реализации: Проверка задания

Тип контрольного мероприятия: Программирование (код)

Вес контрольного мероприятия в БРС: 25

Процедура проведения контрольного мероприятия: Студентам выдается набор заданий, состоящее из двух частей. Каждый пункт предполагает написание кода (с комментариями и пояснениями). Отчет по проделанной работе сдается на проверку. Результат проверки является оценкой за задание.

Краткое содержание задания:

Практическое задание состоит из двух частей (вопросы на умение). Выполнение пунктов предполагает модификацию существующей программы для решения поставленной задачи и проведения ряда расчетов.

Контрольные вопросы/задания:

Уметь: решать задачи с использованием метода конечных разностей	1. Часть 2. Решение задачи о кратковременном нагреве многослойной пластины. Влияние консервативности схем дискретизации на результаты решения. Задания: 1. В соответствии с индивидуальными заданиями для бригад дополнить математическое описание задачи начальными и граничными условиями, условиями сопряжения разных материалов. 2. Предложить обоснованную схему разбиения расчетной области на отдельные контрольные объемы. 3. Произвести адаптацию имеющейся программы к условиям поставленной задачи. 4. Провести расчеты для консервативной и неконсервативной схем дискретизации, меняя шаг по времени и число КО, размещаемых в одном слое каждого материала. Использовать полностью неявную схему дискретизации. Для реализации неконсервативной схемы использовать при аппроксимации потока на грани значение теплопроводности в центре данного контрольного объема. 5. Проанализировать полученные результаты 6. Объяснить полученные расхождения в расчетах по консервативной и неконсервативной схемам. 7. Вывести дискретный аналог, используя МКР.
Уметь: решать нестационарные уравнения обобщенной диффузии методом контрольного объема	1. Часть 1. Решение задачи о стационарном теплообмене на начальном термическом участке при стабилизированном течении жидкости в плоском канале. Задания: 1. Написать программу для решения уравнения нестационарной обобщенной диффузии. 2. В соответствии с индивидуальными заданиями произвести обезразмеривание математического описания задачи. 3. С учетом специфики индивидуального задания, вывести соотношения, необходимые для расчета локального числа Нуссельта по результатам численного решения поставленной задачи. 4. Учитывая, что результаты численных расчетов в дальнейшем будут сопоставляться с результатами аналитического расчета, подготовить и отладить обработку полученного численного решения. 5. Пользуясь правилом положительности

	коэффициентов дискретного аналога уравнения переноса, получить достаточные условия устойчивости явной схемы дискретизации. 6. Для явной схемы дискретизации и числа внутренних КО, равных 5, 10 и 20, подбирая значения шага в продольном направлении канала (не забывайте, что в задаче нестационарной диффузии, аналогичной рассматриваемой, роль продольной координаты играет время), «нащупать» границу потери устойчивости алгоритма. Сравнить с оценкой по правилу положительности коэффициентов. 7. Произвести расчеты распределения числа Нуссельта по длине канала для явной, Кранка—Николсона и полностью неявной схем дискретизации. Количество внутренних КО следует при этом задать равным 20, а шаг изменения продольной координаты — вблизи границы потери устойчивости явной схемы (в области ее устойчивости). Построить графики зависимости $Nu(x)$ для указанных схем дискретизации, провести сопоставление полученных результатов между собой и с данными аналитического расчета. Объяснить расхождения. 8. Вывести дискретный аналог, используя МКР.
--	--

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Выполнены Часть 1 и Часть 2.

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Выполнены Часть 1 и Часть 2. Часть 2 содержит незначительные ошибки.

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Выполнены Часть 1. Допускаются незначительные ошибки.

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Задания части 1 выполнены с существенными ошибками.

8 семестр

КМ-1. Моделирование процессов гидродинамики и теплообмена при обтекания одиночного цилиндра при низких числах Рейнольдса

Формы реализации: Проверка задания

Тип контрольного мероприятия: Лабораторная работа

Вес контрольного мероприятия в БРС: 20

Процедура проведения контрольного мероприятия: Студенты выполняют задание. Отчет по проделанной работе сдается на проверку. Результат проверки является оценкой за задание.

Краткое содержание задания:

Выполнить моделирование течения теплоносителя вокруг нагретого цилиндра. Получить интегральные характеристики процесса. Сравнить с доступными литературными данными. Подготовить отчет по проделанной работе.

Контрольные вопросы/задания:

Уметь: обрабатывать результаты расчета процессов гидродинамики и теплообмена	1.Выполнить моделирования течения теплоносителя вокруг нагретого цилиндра. 2.Провести обработку полученных результатов. 3.Выполнить сравнение полученных данных с имеющимися литературными данными.
Уметь: составлять математическое описание задач гидродинамики и теплообмена	1.Составить математическое описание процесса.

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "отлично" выставляется если задание выполнено в полном объеме или выполнено преимущественно верно

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "хорошо" выставляется если большинство вопросов раскрыто. выбрано верное направление для решения задач

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "удовлетворительно" выставляется если задание преимущественно выполнено

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "неудовлетворительно" выставляется если задание выполнено неверно или преимущественно не выполнено

КМ-2. Численный алгоритм расчета траекторий частиц

Формы реализации: Проверка задания

Тип контрольного мероприятия: Лабораторная работа

Вес контрольного мероприятия в БРС: 20

Процедура проведения контрольного мероприятия: Студенты выполняют задание. Отчет по проделанной работе сдается на проверку. Результат проверки является оценкой за задание.

Краткое содержание задания:

Выдается задание состоящее из двух частей. Часть 1 предполагает написание программы и проведение серии расчетов для определения движения частицы в поле силы тяжести с учетом сопротивления воздуха. Часть 2 предполагает написание программы и проведения серии расчетов для моделирования системы, состоящей из двух взаимодействующих частиц.

Контрольные вопросы/задания:

Уметь: использовать численные методы для решения задачи Коши для системы ОДУ	1.Часть 1. Задача о движении одной частицы в заданном силовом поле. 1. Напишите программу, реализующую метод Эйлера для приближенного решения задачи Коши для системы двух ОДУ первого порядка. 2. Используйте написанную Вами программу для
--	--

определения временной зависимости скорости и координаты свободно падающего тела вблизи поверхности земли.

3. Проведите расчеты. Сравните полученные Вами результаты с точными зависимостями

Проанализируйте влияние шага по времени на отклонение результатов численного решения от точной зависимости, т.е. определите значение глобальной погрешности.

4. Измените написанную Вами программу и реализуйте две модификации метода Эйлера: метод Эйлера-Кромера и метод Кранка-Николсона.

5. Проанализируйте результаты, полученные при помощи каждого из методов. Есть ли какие-нибудь соображения, позволяющие отдать предпочтение одному из алгоритмов?

6. Смоделируйте падение данного шарика без учета сопротивления воздуха. Анализируя полученные результаты, сделайте вывод о причине их рассогласования. Модифицируйте программу так, чтобы силы сопротивления учитывались двумя эмпирическими зависимостями: зависимостью, в которой сила сопротивления пропорциональна скорости, и зависимостью, в которой действующая сила пропорциональна квадрату скорости.

7. Для каждой зависимости определите установившуюся скорость, при которой вычисленные значения функции лучше всего согласуются с экспериментальными данными, приведенными в раздаточном материале. Нанесите оба набора вычисленных значений и экспериментальные данные на один график и визуально определите, какая кривая дает в целом лучшее согласие с экспериментом. Чем отличаются расчетные кривые для различных видов зависимости сил от скорости шарика?

8. Сопротивление сферы при движении относительно воздуха со скоростью может быть описано соотношением:

$$F_{\text{сопр}}(\mathbf{u}_{\text{отн}}) = -\frac{1}{2} \rho_g A_{\text{сф}} C_D |\mathbf{u}_{\text{отн}}| \mathbf{u}_{\text{отн}}, \quad A_{\text{сф}} = \frac{\pi d_{\text{ш}}^2}{4}$$
$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}) + \frac{0,42}{1 + 4,25 \cdot 10^4 \text{Re}^{-1,15}}, \quad \text{Re} = \frac{u_{\text{отн}} d_{\text{ш}}}{\nu}$$

Здесь ρ_g – плотность газовой фазы (кг/м^3), $\mathbf{u}_{\text{отн}}$ – вектор относительной скорости (м/с), C_D – коэффициент сопротивления частицы, ν – кинематическая вязкость воздуха ($\text{м}^2/\text{с}$).

Запрограммируйте указанные соотношения. Сопоставьте результаты с предыдущими результатами.

9. Модифицируйте написанную Вами программу так, чтобы вычислять двумерную траекторию шара с учетом сопротивления воздуха и возможностью вывода зависимости y от x . В качестве проверки своей программы пренебрегите сначала сопротивлением воздуха, чтобы сравнить полученные результаты с известными. Задав начальную скорость равную 30 м/с, высоту равную 0 м, массу равную 10 кг и меняя угол θ , найдите угол,

	при котором дальность полета максимальна Чему равно максимальное расстояние полета шара? 2. Часть 2. Задача о взаимодействии двух частиц. 1. Модифицируйте программу, написанную Вами при выполнении первой части для решения задачи о движении планеты вокруг Солнца. В программе должны быть реализованы метод Эйлера, метод Эйлера-Кромера метод “средней” точки. 2. Проверьте правильность программы, рассматривая круговые орбиты. 3. Добавьте расчет полной энергии системы (достаточно вычислять отношение E/m и относительное изменение энергии по сравнению с энергией в начальный момент времени). 4. Выберите значение шага по времени таким образом, чтобы полная энергия сохранялась с хорошей точностью. Воспроизводятся ли траектории в течение многих периодов? 5. Выполните расчёты для различных радиусов орбит. Для каждой орбиты проверьте правильность третьего закона Кеплера: для всех планет, вращающихся вокруг Солнца, отношение квадрата периода обращения к кубу большой полуоси эллипса (или радиуса для круговой орбиты) одинаково. 6. Сравните устойчивость реализованных Вами методов к увеличению шага по времени. Проанализируйте зависимость погрешности расчета энергии системы от шага интегрирования. 7. Модернизируйте программу, реализовав в ней один из методов высокого порядка точности, описанных в лекции. 8. Модифицируйте программу так, чтобы она решала уравнения для системы двух звезд, непосредственно решая уравнения для каждой звезды. Считайте массы звезд равными. Подберите остальные параметры, так чтобы получились замкнутые траектории.
--	---

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "отлично" выставляется если задание выполнено в полном объеме или выполнено преимущественно верно

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "хорошо" выставляется если большинство вопросов раскрыто. выбрано верное направление для решения задач

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "удовлетворительно" выставляется если задание преимущественно выполнено

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "неудовлетворительно" выставляется если задание выполнено неверно или преимущественно не выполнено

КМ-3. Моделирование динамики замкнутой системы многих частиц

Формы реализации: Смешанная форма

Тип контрольного мероприятия: Лабораторная работа

Вес контрольного мероприятия в БРС: 20

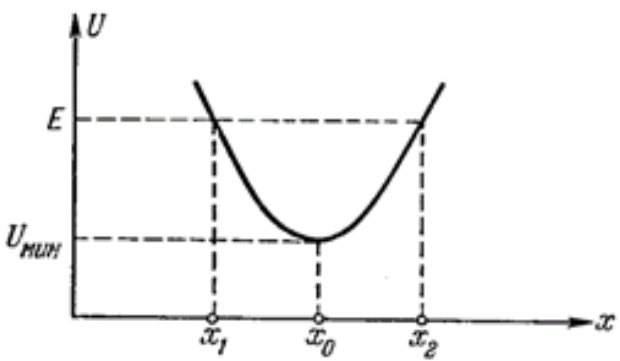
Процедура проведения контрольного мероприятия: Студенты выполняют задание. Отчет по проделанной работе сдается на проверку. Далее проводится письменная защита.

Краткое содержание задания:

Задание (вопросы на умение), состоящее из двух частей, предполагает модификации программы и проведение серии расчетов для динамики замкнутой системы многих частиц.

Защита состоит из ответов на ряд вопросов (вопросы на знания).

Контрольные вопросы/задания:

Знать: метод молекулярной динамики	1. Что такое “периодические граничные условия”? 2. Использование периодических граничных условий приводит к тому, что расчетная область, содержащая частицы, окружена бесконечным числом “копий”. Обычно вклад “дальних” частиц не учитывают. Из каких соображений выбирают расстояние для учета или не учета взаимодействия частиц? Какое расстояние выбрано в предложенной Вам программе? 3. Использование периодических граничных условий приводит к тому, что расчетная область, содержащая частицы, окружена бесконечным числом “копий”. Обычно вклад “дальних” частиц не учитывают. Из каких соображений выбирают расстояние для учета или не учета взаимодействия частиц? Какое расстояние выбрано в предложенной Вам программе? 4. Имеется график потенциальной энергии частицы, совершающей одномерное движение. Какой знак имеют силы, действующие на частицу, в точках x_1 и x_2? 
Уметь: моделировать динамику замкнутой системы многих частиц методом молекулярной динамики	1. Часть 1. Динамика многих частиц (одномерная постановка). 1. Ознакомиться с текстом программы, прилагаемой к настоящей работе. Описать алгоритм, реализованный в каждой подпрограмме. Указать главную цель каждой подпрограммы и используемые расчётные соотношения. 2. Рассмотреть задачу о взаимодействии двух частиц,

	расположенных на некотором расстоянии друг от друга. Начальные скорости частиц принять равными нулю. Считать, что потенциал взаимодействия частиц – потенциал Леннарда-Джонса. 3. На лекциях говорилось, что любая функция потенциальной энергии вблизи положения равновесия (минимума) может быть аппроксимирована потенциальной энергией гармонического осциллятора. Сравнивая результаты численного моделирования с результатами, предсказанными теорией, определить диапазон расстояний между частицами, для которого потенциал Леннарда-Джонса может быть заменен потенциалом гармонического осциллятора. 4. Определить константу гармонического осциллятора. 5. Смоделировать одномерную систему из N частиц. 6. Добавьте в программу расчет параметров T. Так как моделируется микроканоническое распределение, то температура испытывает флуктуации. 7. Проанализируйте влияние интервала осреднения на вид функции распределения частиц по модулю скорости. Сравните полученную Вами зависимость с распределением Максвелла для одномерного случая. При этом в качестве характерной температуры стоит брать осредненную температуру системы. 2. Часть 2. Динамика многих частиц (двумерная постановка). 1. Выполните обезразмеривание уравнений из раздаточного материала. 2. Модифицируйте программу из первой части для расчета двухмерного случая. Стоит отметить, что в программу намерено внесена небольшая ошибка, в результате которой программа абсолютно корректна для одномерного случая, но при переходе к двумерному случаю дает неверные результаты. Следует обнаружить данную ошибку и привести программу в надлежащий вид. 3. Выполните моделирование системы для значений входных параметров, представленных в раздаточном материале. 4. Добавьте в программу расчет параметров (P, T). Проанализируйте влияние интервала осреднения на вид функции распределения частиц по модулю скорости.
--	---

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "отлично" выставляется если задание выполнено в полном объеме или выполнено преимущественно верно

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "хорошо" выставляется если большинство вопросов раскрыто. выбрано верное направление для решения задач

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "удовлетворительно" выставляется если задание преимущественно выполнено

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "неудовлетворительно" выставляется если задание выполнено неверно или преимущественно не выполнено

КМ-4. Моделирование динамики системы многих частиц при постоянной температуре или давлении

Формы реализации: Проверка задания

Тип контрольного мероприятия: Лабораторная работа

Вес контрольного мероприятия в БРС: 20

Процедура проведения контрольного мероприятия: Студенты выполняют задание. Отчет по проделанной работе сдается на проверку. Результат проверки является оценкой за задание.

Краткое содержание задания:

В работе нужно модифицировать программу из предыдущей лабораторной работы для моделирования системы многих частиц при постоянной температуре или давлении.

Контрольные вопросы/задания:

Уметь: моделировать динамику замкнутой системы многих частиц при постоянной температуре или давлении методом молекулярной динамики	1.1. Модифицировать программу из предыдущей лабораторной работы для моделирования системы многих частиц при постоянной температуре или давлении. 2.2. Изучите распределение скоростей частиц в газообразной фазе. Напишите функцию для расчета средних моментов скоростей. 3.3. Исследуйте, как быстро система приходит в состояние равновесия. 4.4. Напишите функции для расчета средней энергии системы и среднеквадратичного отклонения энергии системы. Убедитесь, что средняя энергия системы сохраняется после прихода системы к равновесию.
--	--

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "отлично" выставляется если задание выполнено в полном объеме или выполнено преимущественно верно

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "хорошо" выставляется если большинство вопросов раскрыто. выбрано верное направление для решения задач

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "удовлетворительно" выставляется если задание преимущественно выполнено

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "неудовлетворительно" выставляется если задание выполнено неверно или преимущественно не выполнено

КМ-5. Моделирование системы методом Монте-Карло в микроканоническом ансамбле

Формы реализации: Проверка задания

Тип контрольного мероприятия: Лабораторная работа

Вес контрольного мероприятия в БРС: 20

Процедура проведения контрольного мероприятия: Студенты выполняют задание. Отчет по проделанной работе сдается на проверку. Результат проверки является оценкой за задание.

Краткое содержание задания:

В работе нужно используя предоставленную программу выполнить моделирование системы методом Монте-Карло в микроканоническом ансамбле

Контрольные вопросы/задания:

Уметь: использовать метод Монте-Карло для исследования микроканонического ансамбля	1.Выпишите математическую модель (выражения для энергии соответствующего ансамбля) для моделирования методом Монте-Карло. 2.Выполните обезразмеривание уравнений и начальных параметров. 3.Выполните программу. Найдите средние значения кинетической и потенциальной энергий. 4.Проанализируйте распределение частиц по скоростям. 5.Вычислите среднюю энергию демона и среднюю энергию системы на частицу. 6.Определить температуру. Используя это соотношение, получите температуру. Связана ли полученная температура со средней энергией демона?
--	---

Описание шкалы оценивания:

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "отлично" выставляется если задание выполнено в полном объеме или выполнено преимущественно верно

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "хорошо" выставляется если большинство вопросов раскрыто. выбрано верное направление для решения задач

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "удовлетворительно" выставляется если задание преимущественно выполнено

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Оценка "неудовлетворительно" выставляется если задание выполнено неверно или преимущественно не выполнено

СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7 семестр

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Пример билета

Вопросы:

1. Математическое моделирование процессов тепломассообмена. Законы сохранения в обобщенной форме. Сопоставление интегральной и дифференциальной форм законов сохранения. Обобщенное уравнение переноса. Условия однозначности решения задач тепломассообмена.
2. Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Дискретный аналог двумерной стационарной задачи обобщенной теплопроводности для внутренних контрольных объемов.

Задача:

Имеется пластина с теплопроводностью $50 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, толщиной 6 см и равномерным тепловыделением 50 кВт/м^3 . Левая стенка омывается жидкостью температурой 10 С с коэффициентом теплоотдачи от жидкости к стенке $100 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, а правая - омывается жидкостью температурой 60 С с коэффициентом теплоотдачи от жидкости к стенке $100 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$. Найти распределение температуры внутри пластины. Решить задачу, используя сетку из трех контрольных объемов, площадь поверхности каждого КО – 1 м^2 .

Процедура проведения

Студентам выдаются билет из двух вопросов и задачи. На ответ на вопросы и решение задачи отводится 1,5 часа. Студентам выдается весь необходимый раздаточный материал.

1. Перечень компетенций/индикаторов и контрольных вопросов проверки результатов освоения дисциплины

1. Компетенция/Индикатор: ИД-4ПК-2 Владеет методами математического моделирования теплофизических процессов

Вопросы, задания

1. Математическое моделирование процессов тепломассообмена. Законы сохранения в обобщенной форме. Сопоставление интегральной и дифференциальной форм законов сохранения. Обобщенное уравнение переноса. Условия однозначности решения задач тепломассообмена.
2. Дискретизация задач тепломассообмена. Цель дискретизации. Основные этапы дискретизации исходной задачи. Сетки, шаблоны, схемы дискретизации.
3. Метод конечно-разностной аппроксимации. Постановка задачи. Конечно-разностная аппроксимация производных. Конечно-разностная аппроксимация уравнения переноса. Дискретизация граничных условий. Дискретный аналог одномерной стационарной задачи обобщенной теплопроводности.
4. Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Дискретный аналог одномерной стационарной задачи обобщенной теплопроводности для внутренних контрольных объемов.
5. Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Дискретизация граничных условий. Дискретный аналог для граничных контрольных объемов.

- 6.Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Учет нелинейности уравнения обобщенной диффузии. Линеаризация источникового члена.
- 7.Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Дискретный аналог двухмерной стационарной задачи обобщенной теплопроводности для внутренних контрольных объемов.
- 8.Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Аппроксимация нестационарного слагаемого в обобщенном уравнении диффузии. Параметр неявности.
- 9.Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Дискретный аналог одномерной нестационарной диффузии при постоянных свойствах исследуемой системы. Явная схема.
- 10.Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Дискретный аналог одномерной нестационарной диффузии при постоянных свойствах исследуемой системы. Неявная схема.
- 11.Метод контрольного объема (МКО). Получение дискретных аналогов методом контрольного объема. Дискретный аналог одномерной нестационарной диффузии при постоянных свойствах исследуемой системы. Полуявная схема.
- 12.Особенности решения задач, описываемых уравнениями переноса, в пространственно-неоднородных системах, в системах с переменными физическими свойствами. Свойство консервативности схем дискретизации задач, описываемых уравнением переноса. Определение эффективных обобщенных коэффициентов диффузии на гранях контрольных объемов в условиях сильной пространственной неоднородности свойств рассматриваемой системы.
- 13.Основные правила построения дискретных аналогов. Устойчивость схем дискретизации задачи, описываемой обобщенным уравнением переноса. Происхождение и роль правила положительности коэффициентов дискретного аналога обобщенного уравнения переноса.
- 14.Граничное условие, выраженное уравнением Ньютона-Рихмана (ГУ 3 рода), можно рассматривать как наиболее общее условие, из которого можно получить два других типа граничных условий (1 и 2 рода) как предельные случаи этого общего условия. Объясните, как этого можно достичь.
- 15.Особенности дискретизации конвективно-диффузионных задач. Аппроксимация плотности конвективно-диффузионного потока на грани контрольного объема. Схема «против потока».
- 16.Особенности дискретизации конвективно-диффузионных задач. Аппроксимация плотности конвективно-диффузионного потока на грани контрольного объема. Схема «центрально-разностная».
- 17.Особенности дискретизации конвективно-диффузионных задач. Аппроксимация плотности конвективно-диффузионного потока на грани контрольного объема. Схема «экспоненциальная».
- 18.Решение задачи о стационарном теплообмене на начальном термическом участке при стабилизированном течении жидкости в плоском канале. Постановка задачи. Методы решения.
- 19.Решение задачи о кратковременном нагреве многослойной пластины. Постановка задачи. Методы решения.
- 20.Определение эффективной теплопроводности композитного материала. Постановка задачи. Методы решения.
- 21.Решение задачи о стабилизированном теплообмене в прямоугольном канале при граничных условиях второго рода. Постановка задачи. Методы решения.
- 22.Вычисление интегралов простейшим методом Монте-Карло. Анализ погрешности метода Монте-Карло.

Материалы для проверки остаточных знаний

В обобщенное дифференциальное уравнение входят четыре слагаемых: нестационарное, конвективное, диффузионное и источниковое. Какое слагаемое отлично от нуля для стационарной задачи теплопроводности без внутренних источников?

1.

Ответы:

1. Нестационарное слагаемое.
2. Конвективное слагаемое.
3. Диффузионное слагаемое.
4. Источниковое слагаемое.

Верный ответ: 3. Диффузионное слагаемое.

Уравнения сохранения массы, импульса и энергии можно записать:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \Phi dV = - \oint_A \mathbf{J} \cdot d\mathbf{A} + \int_V S_\Phi dV$$

где плотность потока неизвестной величины определяется как

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_c + \mathbf{J}_d = \underbrace{\rho \mathbf{u} \Phi}_{\mathbf{J}_c} - \underbrace{\Gamma \nabla \Phi}_{\mathbf{J}_d}$$

Какому уравнению соответствуют следующие значения параметров:

2. $\Phi = 1, \Gamma = 0, S_\Phi = 0$

Ответы:

1. Уравнение сохранения импульса.
2. Уравнение неразрывности.
3. Уравнение сохранения энергии.

Верный ответ: 2. Уравнение неразрывности.

Часто источник является нелинейной функцией Φ . Для учета данной зависимости обычно выделяют линейную часть источника

$$S_\Phi = C_\Phi (V_\Phi - \Phi).$$

Здесь C_Φ и V_Φ – некоторые входные параметры, в дальнейшем называемые “коэффициентом” и “значением” источника.

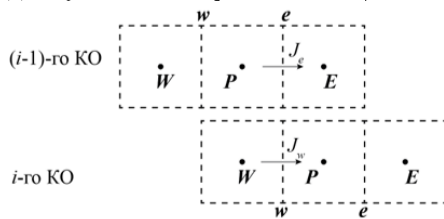
3. Как при помощи входных параметров задать требуемое значение неизвестной величины в центре контрольного объема?

Ответы:

1. V_Φ – заданное значение, C_Φ некоторое очень большое число.
2. V_Φ – заданное значение, C_Φ некоторое очень маленькое число.

Верный ответ: 1.

Для двух соседних контрольных объемов



4. В методе контрольных объемов выражения для J_e и J_w _____.

Ответы:

1. Могут отличаться в зависимости от распределения свойств.
2. Всегда должны совпадать.
3. Могут отличаться в зависимости от геометрических характеристик.

Верный ответ: 2. Всегда должны совпадать.

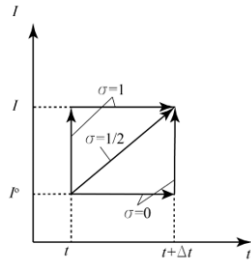
5. Какая схема для нахождения неизвестной величины на грани контрольного объема в задачах конвективно-диффузионного переноса является более устойчивой?

Ответы:

1. Схема с разностями против потока.
2. Центральная-разностная схема.

Верный ответ: 1. Схема с разностями против потока.

Для аппроксимации нестационарного слагаемого в обобщенном уравнении диффузии могут быть использованы следующие профили изменения неизвестной величины на шаге по времени

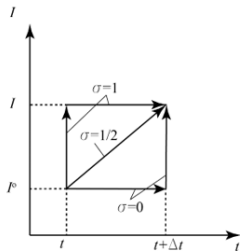


6. Какой профиль соответствует явной схеме?

Ответы:

1. $\sigma = 1$
2. $\sigma = 0$
3. $\sigma = 1/2$

Для аппроксимации нестационарного слагаемого в обобщенном уравнении диффузии могут быть использованы следующие профили изменения неизвестной величины на шаге по времени



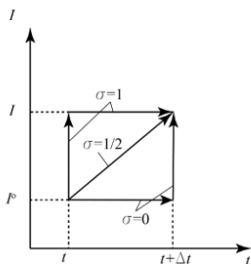
7. Какой профиль соответствует полностью неявной схеме?

Ответы:

1. $\sigma = 1$
2. $\sigma = 0$
3. $\sigma = 1/2$

Верный ответ: 1. $\sigma = 1$

Для аппроксимации нестационарного слагаемого в обобщенном уравнении диффузии могут быть использованы следующие профили изменения неизвестной величины на шаге по времени



8. Какой профиль соответствует схеме Кранка-Николсона?

Ответы:

1. $\sigma = 1$
2. $\sigma = 0$
3. $\sigma = 1/2$

Верный ответ: 3. $\sigma = 1/2$

9. Какая схема при определенном сочетании шага по времени и по пространству может стать неустойчивой?

Ответы:

1. Явная схема.
2. Неявная схема.

Верный ответ: 1. Явная схема.

10. В конечно-разностном методе используется схема второго порядка точности. При уменьшении шага по пространству в два раза. Во сколько раз уменьшается погрешность аппроксимации?

Ответы:

1. в 2 раза
2. в 4 раза
3. в 8 раз

Верный ответ: 2. в 4 раза

II. Описание шкалы оценивания

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Работа выполнена в рамках "продвинутого" уровня. Ответы даны верно, четко сформулированные особенности практических решений

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Работа выполнена в рамках "базового" уровня. Большинство ответов даны верно. В части материала есть незначительные недостатки

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Работа выполнена в рамках "порогового" уровня. Основная часть задания выполнена верно. на вопросы углубленного уровня

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Работа не выполнена или выполнена преимущественно неправильно

III. Правила выставления итоговой оценки по курсу

8 семестр

Форма промежуточной аттестации: Зачет с оценкой

Пример билета

1. Архитектура современных CFD-кодов: препроцессор, генератор сетки, решатель (солвер), постпроцессор.
2. Классическая молекулярная динамика. Потенциал межмолекулярного взаимодействия.

Процедура проведения

Студентам выдаются билет из двух вопросов. На ответ на вопросы отводится 1,0 час. Студентам выдается весь необходимый раздаточный материал.

1. Перечень компетенций/индикаторов и контрольных вопросов проверки результатов освоения дисциплины

1. Компетенция/Индикатор: ИД-3_{ПК-2} Способен к организации лабораторного эксперимента и обработке полученных экспериментальных данных

Вопросы, задания

1. Архитектура современных CFD-кодов: препроцессор, генератор сетки, решатель (солвер), постпроцессор.
2. Составление математического описания для задачи обтекания однофазной жидкостью одиночного горизонтального цилиндра.
3. Процедура обработки полей давления, скорости и температуры для получения интегральных характеристик для задачи обтекания одиночного нагретого горизонтального цилиндра.

Материалы для проверки остаточных знаний

1. Однофазный изотермический поток обтекает горизонтальный одиночный цилиндр. В качестве масштаба скорости выбрана скорость потока на бесконечности, а в качестве линейного масштаба - диаметр цилиндра. Какое число подобия входит в безразмерные уравнения сохранения массы и импульса?

Ответы:

1. Число Нуссельта.
2. Число Рейнольдса.
3. Число Грасгофа.

Верный ответ: 2. Число Рейнольдса.

2. Дополните утверждение: для определения точки отрыва потока от поверхности обтекаемого горизонтального одиночного цилиндра следует

_____.

Ответы:

1. найти максимум давления на поверхности цилиндра.
2. определить точку, в которой касательные напряжения на поверхности цилиндра меняют знак.
3. определить точку, в которой скорость потока на поверхности цилиндра станет нулевой.

Верный ответ: 2. определить точку, в которой касательные напряжения на поверхности цилиндра меняют знак.

2. Компетенция/Индикатор: ИД-4_{ПК-2} Владеет методами математического моделирования теплофизических процессов

Вопросы, задания

1. Классическая молекулярная динамика. Потенциал межмолекулярного взаимодействия.
2. Уравнения движения. Граничные и начальные условия
3. Вычисление средних значений. Расчет макроскопических величин. Простые свойства переноса.
4. Моделирование динамики замкнутой системы многих частиц.
5. Моделирование динамики системы многих частиц при постоянной температуре или давлении.
6. Моделирование микроканонического ансамбля методом Монте-Карло.
7. Модель Изинга.
8. Моделирование канонического ансамбля методом Монте-Карло.
9. Алгоритм Метрополиса.
10. Моделирование классических жидкостей.

Материалы для проверки остаточных знаний

1. Какого глобальный порядок точности имеет метод Эйлера для решения ОДУ?

Ответы:

1. Первый порядок точности.
2. Второй порядок точности.

Верный ответ: 1. Первый порядок точности.

2. Дополните утверждение: глобальный и локальный порядок точности численного метода для решения ОДУ _____.

Ответы:

1. Совпадают.
2. Отличаются. Глобальный порядок точности ниже из-за накопления погрешности в процессе интегрирования.

Верный ответ: 2. Отличаются. Глобальный порядок точности ниже из-за накопления погрешности в процессе интегрирования.

3. Точность сохранения полной энергии системы при численном интегрировании полностью определяется порядком точности используемого численного метода.

Ответы:

1. Утверждение верное.
2. Утверждение ошибочно. Некоторые методы несмотря на более низкий порядок точности сохраняют общую энергию системы лучше.

Верный ответ: 2. Утверждение ошибочно. Некоторые методы несмотря на более низкий порядок точности сохраняют общую энергию системы лучше.

Один из наиболее популярных парных потенциалов – потенциал

Леннарда-Джонса

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right).$$

4. Какой смысл имеет параметр σ ?

Ответы:

1. Характерный линейный масштаб взаимодействия.
2. Характерная энергия взаимодействия.

Верный ответ: 1. Характерный линейный масштаб взаимодействия.

Один из наиболее популярных парных потенциалов – потенциал

Леннарда-Джонса

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right).$$

5. Какой смысл имеет параметр ϵ ?

Ответы:

1. Характерный линейный масштаб взаимодействия.
2. Характерная глубина потенциальной ямы.

Верный ответ: 2. Характерная глубина потенциальной ямы.

Один из наиболее популярных парных потенциалов – потенциал

Леннарда-Джонса

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right).$$

6. Слагаемое со степенью 12 моделирует _____ частиц.

Ответы:

1. Отталкивание.
2. Притяжение.

Верный ответ: 1. Отталкивание.

7. При учете все более дальнего взаимодействия между частицами может возникнуть проблема суммирования слагаемых, отличающихся на порядки. Как бы Вы выполнили данное суммирование?

Ответы:

1. Произвести суммирование в порядке уменьшения слагаемых.
2. Произвести суммирование в порядке увеличения слагаемых.

Верный ответ: 2. Произвести суммирование в порядке увеличения слагаемых.

Одной из характерных черт метода молекулярной динамики является то, что полная энергия определяется начальными условиями, а температура - величина производная, определяемая только после достижения системой теплового равновесия. В результате трудно изучать системы, находящиеся при конкретной температуре. Обычно для достижения требуемой температуры T в качестве начального условия берут равновесную конфигурацию при температуре T_0 , по возможности наименее отличающуюся от T . Определяют масштабный фактор f из соотношения $T = f T_0$. Как, используя масштабный фактор, следует преобразовать скорости, т. е. чему равно C в преобразовании $v \rightarrow Cv$? Для достижения T может потребоваться и не одно перемасштабирование скоростей.

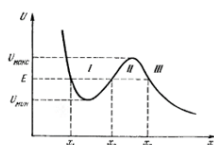
8.

Ответы:

1. $C = f^{1/d}$, где d – размерность задачи.
2. $C = f d$, где d – размерность задачи.
3. $C = 1/f$, где d – размерность задачи.

Верный ответ: 1. $C = f^{1/d}$, где d – размерность задачи.

В каких областях возможно движение частицы? E – полная энергия частицы.



9.

Ответы:

1. I и II
2. II и III
3. I и III

Верный ответ: 3. I и III

10. Имеется система из 64 частиц в области 10 на 10. Какое значение имеет безразмерная плотность?

Ответы:

1. 0,64
2. 0,0064
3. 0,064

Верный ответ: 1. 0,64

II. Описание шкалы оценивания

Оценка: 5

Описание характеристики выполнения знания: Работа выполнена в рамках "продвинутого" уровня. Ответы даны верно, четко сформулированные особенности практических решений

Оценка: 4

Описание характеристики выполнения знания: Работа выполнена в рамках "базового" уровня. Большинство ответов даны верно. В части материала есть незначительные недостатки

Оценка: 3

Описание характеристики выполнения знания: Работа выполнена в рамках "порогового" уровня. Основная часть задания выполнена верно. на вопросы углубленного уровня

Оценка: 2

Описание характеристики выполнения знания: Работа не выполнена или выполнена преимущественно неправильно

III. Правила выставления итоговой оценки по курсу

В приложение к диплому выносится оценка за Экзамен (Часть 1).