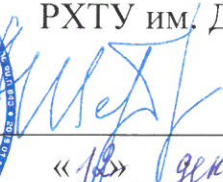


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Российский химико-технологический университет имени
Д.И. Менделеева»

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по науке
РХТУ им. Д.И. Менделеева



 А.А. Щербина
«18» декабря 20 22 г.

ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА
ПО НАУЧНОЙ СПЕЦИАЛЬНОСТИ

2.3.7. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АВТОМАТИЗАЦИЯ
ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Москва 2022 г

Программа составлена:

д.т.н., проф., заведующей кафедрой информационных компьютерных технологий (ИКТ) Кольцовой Э.М.

к.т.н., доц. кафедры информационных компьютерных технологий (ИКТ) Василенко В.А.

СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ

1. Компьютерное моделирование сложных физико-химических систем с явлениями турбулентности, тепло- и массопереноса.

1.1. Математическое моделирование турбулентных течений, явлений тепло- и массопереноса с решением уравнений математических моделей гидродинамики, тепло- и массопереноса. Три современных подхода: DNS, RANS, LES. DNS – подразумевает прямое численное моделирование, подход RANS – построение математических моделей на основе осреднения по времени, подход LES означает моделирование крупных вихрей (возникающих в турбулентных течениях) на основе осреднения по пространству.

1.2. Подход на основе осреднения по времени RANS: две модели описания турбулентных течений: k - ε – модель для описания развитой турбулентности, k - w – модель для описания течений с неравномерной турбулентностью.

1.3. Решение уравнений математических моделей гидродинамики, тепло- и массопереноса. Два подхода: первый подход, основанный на методах разностных схем; второй подход, основанный на методе конечных объемов.

1.4. Метод разностных схем для аппроксимации уравнений. Устойчивость разностных схем. Метод прогонки для решения уравнений эллиптического типа. Метод установления (на основе использования метода прогонки) для решения уравнений параболического. Метод дробных шагов для решения многомерных уравнений.

1.5. Метод конечных объемов для приведения уравнений гидродинамики, тепло- и массопереноса к дивергентной форме и их аппроксимация. Запись в общем виде и преобразование уравнений гидродинамики, тепло- и массопереноса для равномерной прямоугольной сетки. Сравнение применения метода конечных объемов и разностных схем

для решения уравнений гидродинамики, тепло- и массопереноса для равномерной прямоугольной сетки.

2. Инженерные расчеты в пакете Solidworks

2.1. Создание трехмерных объектов в пакете Solidworks.

Способы создания трехмерных объектов и деталей сложных пространственных форм. Применение инструментов анализа и диагностики геометрии. Способы создания сборочных единиц.

2.2. Решение задач механики в SolidWorks Simulation.

Проведение расчетов конструкций на прочность, усталость, устойчивость, термоупругость. Анализ и оптимизация полученных результатов.

Построение диаграммы свинчивания резьбовых соединений труб. Расчет контактных напряжений, крутящего момента. Исследование отклика соединения на изменение крутящего момента.

Прочностной расчет сосудов давления. Расчет нагрузок, напряжений и деформаций.

2.3. Решение задач теплопередачи, аэро- и гидродинамики в пакете SolidWorks Flow Simulation.

Решение задач гидродинамики: расчет ламинарных и турбулентных течений; расчет одно- и многокомпонентного течения жидкости или газа без химического взаимодействия и разделения фаз в трубопроводах. Совместный расчет течения жидкости или газа и теплопередачи внутри твердых тел и текучей среды без наличия границы раздела газ-жидкость. Расчет течения в пористых средах с учетом теплопроводности среды и теплоотдачи в нее. Расчет траекторий и температур твердых частиц или капель в потоке.

Определение гидравлических потерь, определение коэффициентов сопротивления объектов.

Расчет конвективного теплообмена; свободной, вынужденной или смешанной конвекции. Определение коэффициентов теплообмена.

3. Большие данные (Big Data).

Понятия и области применения Big Data (Большие Данные), Machine Learning (Машинное обучение), Artificial Intelligence (Искусственный Интеллект, ИИ), Deep Learning (глубокое обучение), Data Mining, Text Mining. Место Больших Данных в современных информационных и интеллектуальных системах. Основные характеристики Больших Данных - разнообразие, высокая скорость поступления и большой объем. Требования к системам обработки БД - надёжность и отказоустойчивость (как от аппаратных проблем, так и от человеческого фактора); малые задержки чтения и записи данных; масштабируемость; обобщение; расширяемость; поддержка произвольного доступа; минимальное сопровождение;

отлаживаемость. Недостатки инкрементных архитектур. Лямбда-архитектура.

4. Системы параллельной обработки больших данных.

Системы параллельной обработки (MapReduce). Эластичные облака (IaaS). Системы пакетных вычислений (Hadoop – HDFS + MapReduce). Каркасы сериализации (Apache Thrift). NoSQL (MongoDB, Cassandra). Системы обмена сообщениями и диспетчера очередей (Apache Kafka). Системы вычислений в реальном времени (Apache Storm). Существующие на рынке сервисы и платформы: Yandex DataSphere, Microsoft Azure, AWS. Интеграция Big Data и Machine Learning.

5. Квантовохимическое моделирование в Orga.

Основы теории функционала электронной плотности. Базисные наборы и обменно-корреляционный функционал. Понятия оптимизации и релаксации геометрии. Работа с молекулярной геометрией в Avogadro. Базы данных геометрии веществ. Моделирование в Orga: задание настроек расчета, расчет полной энергии молекулы, оптимизация геометрии, расчет частот колебаний и спектров. Удаленная работа по протоколу ssh, постановка расчетов. Получение результатов с удаленного компьютера и их визуализация.

6. Основы моделирования гидрогазодинамических задач в ANSYS FLUENT.

Вычислительная гидрогазодинамика, классы решаемых задач и решаемые уравнения. Построение двумерной и трехмерной геометрии в ANSYS Design Modeler. Построение простой сетки в ANSYS Meshing. Построение трехмерных сеток на многозонной геометрии с заданием ограничений на размер элементов и число разбиений в ANSYS Meshing. Схема проведения расчетов трехмерных задач в ANSYS FLUENT. Создание видео в ANSYS CFD Post. Оптимизация параметров реактора в ANSYS Workbench (сквозное проектирование).

Вопросы для кандидатского экзамена по научной специальности

2.3.7. Компьютерное моделирование и автоматизация проектирования

1. Уравнения сохранения массы, импульса, энергии сплошных сред.
2. DNS, RANS - подход для осреднения уравнений, k - ϵ , – модель турбулентности.
3. Приведение двумерных уравнений Навье-Стокса к уравнениям, описывающим функцию тока и вихрь.
4. Критерии подобия Re , Pr , Pe и их физический смысл.

5. Аппроксимация дифференциальных операторов. Аппроксимация дифференциальных уравнений в частных производных разностными схемами. Порядок аппроксимации разностных схем.

6. Спектральный анализ устойчивости неявной разностной схемы, аппроксимирующей уравнение.

7. Исследование устойчивости явной разностной схемы, аппроксимирующей уравнение. Метод решения явной разностной схемы, аппроксимирующей уравнение.

8. Метод прогонки – метод решения неявной разностной схемы.

9. Явная разностная схема для решения уравнения в частных производных 1-го порядка, метод решения. Неявная разностная схема для решения уравнений в частных производных 1-го порядка.

10. Явная разностная схема для решения двумерных (по пространству) уравнений параболического типа. Метод решения.

11. Схема расщепления, метод дробных шагов для решения двумерных (по пространству) уравнений параболического типа.

12. Приведение уравнений теплопроводности, диффузии, Навье-Стокса к форме, удобной для использования метода конечных объемов.

13. Построение неравномерной сетки в методе конечных объемов и представление уравнения теплопроводности на сетке с применением метода конечных объемов.

14. Построение схемы с использованием метода конечных объемов (на равномерной сетке) для уравнения теплопроводности. Доказательство идентичности на равномерной сетке явной разностной схемы и схемы, построенной с использованием метода конечных объемов, для уравнения теплопроводности.

15. Метод конечных объемов для решения уравнений Навье-Стокса.

16. Провести моделирование движения газа (воздух) в коллекторе, при давлении 1 атм, температуре 20 С. Объемный расход на входе 0,5 м³/с. На выходе: статическое давление 1 атм. Построить эпюры: скорости и давления газа в сечении, траектории потока, графики для потока и давления вдоль основного коллектора.

17. Провести моделирование процесса теплообмена в радиаторе. Цель моделирования: получить значения максимальной температуры твердого тела. Построить эпюры: распределения температуры на поверхности. Провести оптимизацию, изменив сетку между пластинами радиатора.

18. Провести моделирование потока жидкости. Глобальная Цель моделирования: получить значения максимальной скорости потока. Построить эпюры скорости и давления.

19. Провести исследование теплопроводности в твердых телах. Цель моделирования: получить значения максимальной температуры для

нагревательных элементов. Получить эпюры распределения температуры, скорости потока воздуха.

20. Провести моделирование процесса обтекания цилиндра водой. Получить эпюры распределения давления и скорости потока.

21. Понятие “Большие данные”/Big Data, отличительные признаки больших данных.

22. Требования к системам для обработки больших данных. Недостатки инкрементных архитектур.

23. Лямбда-архитектура. Область применения, достоинства, недостатки.

24. Распределённые файловые системы для хранения больших файлов (на примере HDFS). Предпосылки создания, особенности, достоинства, недостатки. Область применения.

25. Место технологий Big Data среди Machine Learning, Artificial Intelligence, Data Mining.

26. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию фурфурола (фурфураль, furfural). Провести оптимизацию в Orca геометрической структуры молекулы с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP и базисного набора def2-SVP.

27. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию парабензохинона (p-Benzoquinone). Провести оптимизацию в Orca геометрической структуры молекулы с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP и базисного набора def2-SVP.

28. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию анилина. Провести оптимизацию в Orca геометрической структуры молекулы с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP и базисного набора def2-SVP.

29. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию бензилового спирта. Провести оптимизацию в Orca геометрической структуры молекулы с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP и базисного набора def2-SVP.

30. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию пропиленгликоля. Провести оптимизацию в Orca.

31. Построить прямоугольный параллелепипед 30x30x250 мм, задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях 30x30. Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение воздуха (стандартные свойства из Fluent) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet 0,15 м/с. Задать 300 итераций расчета. Отобразить контурную картину скорости течения в модели.

32. Построить прямоугольный параллелепипед 20x20x250 мм, задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях 20x20.

Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение воздуха (стандартные свойства из Fluent) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet 0,1 м/с. Задать критерий сходимости по уравнению неразрывности $1e-04$ и достичь этого значения в расчете. Отобразить контурную картину скорости течения в модели.

33. Построить прямоугольный параллелепипед 25x25x300 мм, задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях 25x25. Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение газа с плотностью 1,977 кг/м³ и динамической вязкостью 8,5e-05 Па·с (CO₂) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet 0,14 м/с. Отобразить контурную картину скорости течения в модели.

34. Построить прямоугольный параллелепипед 30x30x200 мм, задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях 30x30. Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение воды (стандартные свойства из Fluent) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet 0,02 м/с. Задать 400 итераций расчета. Отобразить векторную картину скорости течения в модели.

35. Построить прямоугольный параллелепипед 20x20x250 мм, задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях 20x20. Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение аргона (стандартные свойства из Fluent) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet 0,16 м/с. Задать критерий сходимости по всем уравнениям $1e-04$ и достичь этого значения в расчете. Отобразить векторную картину скорости течения в модели.

Рекомендуемая литература

1. Кольцова, Э. М., Митричев, И. И. Многомасштабное компьютерное моделирование: учебное пособие / Э.М. Кольцова, И.И. Митричев. – Москва: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. – 260 с.

2. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учебное пособие для академического бакалавриата / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 403 с. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/441786>

3. Алямовский, А. А. SOLIDWORKS Simulation и FloEFD. Практика, методология, идеология / А. А. Алямовский. — Москва: ДМК Пресс, 2018. — 658 с. — ISBN 978-5-97060-646-9. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/131715>

4. Платонова, О. В. Компьютерное твердотельное параметрически - управляемое моделирование в САПР SolidWorks. Базовый курс : учебное пособие / О. В. Платонова, Р. В. Руденский, Е. С. Новиков. — Москва : РТУ МИРЭА, 2020. — 71 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/163913>

5. Ахметов, Н.С. Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических процессов. [Электронный ресурс] – Электрон. дан. – СПб.: Лань, 2014. – 752 с. – URL: <http://e.lanbook.com/book/50684>.