

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра комп'ютерної фізики

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Завідувач кафедри

_____ проф. Костянтин НЄМЧЕНКО

“ _____ ” _____ 2020р.

Завдання для підсумкового контролю знань
та їх критерії оцінювання
МОДЕЛЮВАННЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

рівень вищої освіти	другий (магістерський)
галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітня програма	«Прикладна фізика енергетичних систем»
вид дисципліни	вибіркова
навчально – науковий інститут	комп'ютерної фізики та енергетики

2020 / 2021 навчальний рік

Розробники завдань:

доктор фізико-математичних наук, професор

_____ Костянтин НЄМЧЕНКО

1. Банк завдань для підсумкового контролю знань

1. Обчислювальний експеримент (комп'ютерне моделювання) – використання комп'ютера для представлення динамічних відповідей однієї системи поведінкою іншої системи, змодельованої за нею. Моделювання використовує математичний опис або модель реальної системи у вигляді комп'ютерної програми. Ця модель складається з рівнянь, які дублюють функціональні зв'язки всередині реальної системи. Після запуску програми отримана математична динаміка формує аналог поведінки реальної системи, результати якої представлені у вигляді даних. Моделювання також може мати форму комп'ютерно-графічного зображення, яке представляє динамічні процеси в анімованій послідовності.

Питання 1. Що таке обчислювальний експеримент (ОЕ)

Питання 2. Як відображається результат в ОЕ.

Питання 3. Який опис використовує моделювання

2. Комп'ютерне моделювання використовується для вивчення динамічної поведінки об'єктів або систем у відповідь на умови, які неможливо легко або безпечно застосувати в реальному житті. Наприклад, ядерний вибух може бути описаний математичною моделлю, яка включає такі змінні, як тепло, швидкість і радіоактивні викиди. Потім можуть бути використані додаткові математичні рівняння, щоб пристосувати модель до змін певних змінних, таких як кількість розщеплюваного матеріалу, який виробляв вибух. Симуляції особливо корисні для того, щоб дозволити спостерігачам виміряти і передбачити, як на роботу цілої системи може вплинути зміна окремих компонентів у цій системі.

Питання 4. Де (коли) використовується ОЕ?

Питання 5. Наведіть власний приклад використання ОЕ? Надайте обґрунтування.

Питання 6. Яка можлива економічна вигода від використання ОЕ?

Простіше моделювання, що проводиться персональними комп'ютерами, складається в основному з бізнес-моделей і геометричних моделей. Перша включає в себе електронні таблиці, фінансові та статистичні програми, які використовуються у бізнес-аналізі та плануванні. Геометричні моделі використовуються для численних застосувань, які вимагають простого математичного моделювання об'єктів, таких як будівлі, промислові частини, і молекулярні структури хімічних речовин. Більш просунуті симуляції, такі як ті, що імітують погодні умови або поведінку макроекономічних систем, зазвичай виконуються на потужних робочих станціях або на ЕОМ. У машинобудуванні комп'ютерні моделі новостворених конструкцій піддаються моделюванню тестів для визначення їхніх реакцій на напругу та інші фізичні змінні. Моделювання річкових систем можна маніпулювати, щоб визначити потенційний вплив гребель та зрошувальних мереж перед будь-яким фактичним будівництвом. Інші приклади комп'ютерного моделювання включають оцінку конкурентних реакцій компаній на певному ринку та відтворення руху та польоту космічних апаратів.

Питання 7. Наведіть приклади та обґрунтуйте використання ОЕ в фізичних застосуваннях в енергетиці.

Питання 8. Наведіть приклади та обґрунтуйте використання ОЕ в фізичних застосуваннях в медичній фізиці.

Питання 9. В чому різниця між ОЕ і моделюванням.

ОЕ в порівнянні з моделлю

Комп'ютерною моделлю є алгоритми і рівняння, що використовуються для відображення поведінки системи, яка моделюється. На відміну від цього, ОЕ є фактичним запуском програми, яка містить ці рівняння або алгоритми. ОЕ, отже, є процесом запуску моделі.

Таким чином, не можна було б «побудувати симуляцію»; замість цього можна було б "побудувати модель", а потім або "запустити модель" або еквівалентно "запустити КС".

Підготовка даних

Зовнішні вимоги до даних для ОЕ та моделей широко варіюються. Для деяких вхідних даних може бути лише кілька цифр (наприклад, моделювання сигналу електричної енергії змінного струму на дроті), тоді як інші можуть вимагати терабайт інформації (наприклад, моделі погоди та клімату).

Джерела вхідних даних також дуже відрізняються:

1. Датчики та інші фізичні пристрої, підключені до моделі;
2. Поверхні, що використовуються для направлення ходу моделювання певним чином;
3. Поточні або історичні дані, введені вручну;
4. Значення, отримані як побічний продукт від інших процесів;
5. Значення виводяться для цілей іншими ОЕ, моделями або процесами.

Нарешті, час, коли дані доступні, змінюється:

- "інваріантні" дані часто вбудовуються в код моделі, або тому, що значення є дійсно інваріантним (наприклад, значенням π), або тому, що розробники вважають значення інваріантним для всіх випадків, що представляють інтерес;
- дані можна вводити в симуляцію, коли він запускається, наприклад, зчитуючи один або більше файлів, або зчитуючи дані з препроцесора;
- дані можуть бути надані під час моделювання, наприклад, мережею датчиків.

Системи, які приймають дані з зовнішніх джерел, повинні бути дуже «обережними» у знанні того, що вони отримують. Хоча комп'ютери легко читають у значеннях з текстових або бінарних файлів, що набагато важче знати, яка точність (порівняно з роздільною здатністю і точністю вимірювання) є значеннями. Часто вони виражаються як "смуги помилок", мінімальне і максимальне відхилення від діапазону значень, в межах яких лежить справжнє значення (очікується). Оскільки математична обчислювальна техніка не є досконалою, помилки округлення і обрізання помножують цю помилку, тому корисно виконати "аналіз помилок", щоб підтвердити, що значення виходу моделювання все ще будуть корисними.

Навіть невеликі помилки у вихідних даних можуть накопичуватися в істотну помилку пізніше в симуляції. Хоча весь комп'ютерний аналіз підлягає обмеженню "GIGO" (сміття зайшло – сміття вийшло), це особливо стосується цифрового моделювання. Дійсно, спостереження цієї невід'ємної кумулятивної помилки в цифрових системах було головним каталізатором розвитку теорії хаосу.

Питання 10. Основні джерела даних для ОЕ.

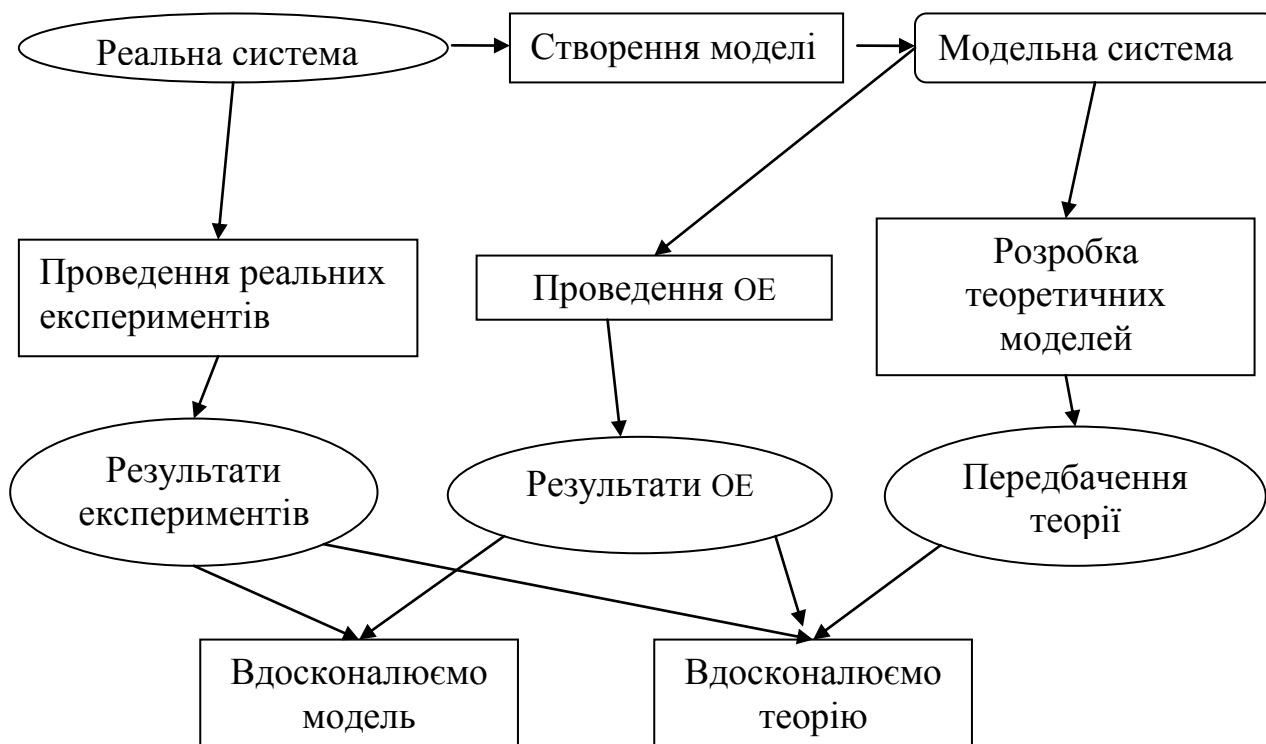
Питання 11. Основні проблеми підготовки даних для ОЕ.

Питання 12. Кваліфікація даних за поведінкою в часі.

Питання 13. Основні проблеми роботи з даними.

Питання 14. Проблема накопичування помилки в ОЕ.

Процес побудови комп'ютерної моделі, а також взаємодія експерименту, моделювання та теорії.



Питання 15. Наведіть основні завдання, проблеми та наведіть приклади певного зв'язку в процесі побудови комп'ютерної моделі, а також взаємодія експерименту, моделювання та теорії, зокрема зв'язок об'єктів «Створення моделі»

Питання 16. Наведіть основні завдання, проблеми та наведіть приклади певного зв'язку в процесі побудови комп'ютерної моделі, а також взаємодія експерименту, моделювання та теорії, зокрема зв'язок об'єктів «Проведення реальних експериментів»

Питання 17. Наведіть основні завдання, проблеми та наведіть приклади певного зв'язку в процесі побудови комп'ютерної моделі, а також взаємодія експерименту, моделювання та теорії, зокрема зв'язок об'єктів «Проведення ОЕ»

Питання 18. Наведіть основні завдання, проблеми та наведіть приклади певного зв'язку в процесі побудови комп'ютерної моделі, а також взаємодія експерименту, моделювання та теорії, зокрема зв'язок об'єктів «Розробка теоретичних моделей»

Питання 19. Наведіть основні завдання, проблеми та наведіть приклади певного зв'язку в процесі побудови комп'ютерної моделі, а також взаємодія експерименту, моделювання та теорії, зокрема зв'язок об'єктів «Вдосконалюємо модель»

Типи ОЕ

Питання 20. Дайте визначення і наведіть головну різницю типів ОЕ за атрибутами.

Стохастичний або детермінований

Питання 21. Дайте визначення і наведіть головну різницю типів ОЕ за атрибутами.

Стационарний або динамічний

Питання 22. Дайте визначення і наведіть головну різницю типів ОЕ за атрибутами.

Безперервний або дискретний

Питання 23. Дайте визначення і наведіть головну різницю типів ОЕ за атрибутами.

Локальні або розподілені.

Комп'ютерні моделі можна класифікувати за кількома незалежними **парами** атрибутів, у тому числі:

Стохастичний або детермінований (і як окремий випадок детермінованого - хаотичного)

Стаціонарний або динамічний

Безперервний або дискретний

Симуляція динамічної системи, напр. електричні системи, гідравлічні системи або багатокомпонентні механічні системи (описані в першу чергу за допомогою DAE: s) або динамічне моделювання польових задач, напр. CFD моделювання FEM (описано PDE: s).

Місцеві або розподілені.

Іншим способом класифікації моделей є перегляд основних структур даних. Для моделювання з кроком у часі існує два основних класи:

Симуляції, які зберігають свої дані в регулярних сітках і вимагають лише доступу до сусідніх сусідів, називаються кодами трафарету. Багато додатків CFD належать до цієї категорії.

Якщо основний графік не є регулярною сіткою, модель може належати до методу безсистемного методу.

Рівняння визначають взаємозв'язки між елементами модельованої системи і намагаються знайти стан, в якому система знаходиться в рівновазі. Такі моделі часто використовуються у моделюванні фізичних систем, як простіший випадок моделювання до спроби динамічного моделювання.

Динамічні моделі моделювання змінюються в системі у відповідь на (зазвичай змінюються) вхідні сигнали.

Стохастичні моделі використовують генератори випадкових чисел для моделювання випадкових або випадкових подій;

Моделювання дискретних подій (DES) управляє подіями в часі. Більшість комп'ютерних, логіко-тестових і дерев моделювання відмов такого типу. У цьому типі моделювання симулятор зберігає чергу подій, відсортованих за імітованим часом, вони повинні відбуватися. Симулятор читає чергу і запускає нові події, коли обробляється кожна подія. Не важливо виконувати моделювання в режимі реального часу. Часто важливіше мати доступ до даних, отриманих в результаті моделювання, і виявляти логічні дефекти в дизайні або послідовності подій.

Безперервне динамічне моделювання виконує чисельне рішення диференціально-алгебраїчних рівнянь або диференціальних рівнянь (часткових або звичайних). Періодично програма моделювання вирішує всі рівняння і використовує числа для зміни стану і виходу моделювання. Додатки включають імітатори польоту, ігри для моделювання конструкцій та управління, моделювання хімічних процесів і моделювання електричних ланцюгів. Спочатку ці типи моделювання були фактично реалізовані на аналогових комп'ютерах, де диференціальні рівняння могли бути представлені безпосередньо різними електричними компонентами, такими як оп-ампер. До кінця 1980-х років, проте, більшість "аналогових" симуляцій виконувалося на звичайних цифрових комп'ютерах, які імітують поведінку аналогового комп'ютера.

Спеціальний тип дискретного моделювання, який не спирається на модель з базовим рівнянням, але, тим не менш, формально може бути представлений, є імітацією на основі агентів. У моделюванні на основі агентів окремі сутності (такі як молекули, клітини, дерева

або споживачі) в моделі представлені безпосередньо (а не їх щільністю або концентрацією) і мають внутрішній стан і набір поведінок або правил, які визначають, як Стан агента оновлюється з одного кроку в інший.

Розподілені моделі працюють на мережі взаємопов'язаних комп'ютерів, можливо, через Інтернет. Симуляції, рознесені на декількох хост-комп'ютерах, як це, часто називають "розподіленими симуляціями". Існує декілька стандартів для розподіленого моделювання, включаючи протокол моделювання сукупного рівня (ALSP), розподілене інтерактивне моделювання (DIS), архітектуру високого рівня (моделювання) (HLA) і архітектуру включення тестування і навчання (TENA).

Питання 24. Чому в КС велике значення має візуалізація результатів?

Візуалізація

Раніше вихідні дані комп'ютерного моделювання іноді були представлені в таблиці або в матриці, що показує, як на дані впливали численні зміни параметрів моделювання. Використання матричного формату було пов'язане з традиційним використанням матричної концепції в математичних моделях. Тим не менш, психологи та інші відзначили, що люди можуть швидко сприймати тенденції, розглядаючи графіки або навіть рухомі зображення або картини, що генеруються з даних, які відображаються анімацією зображень генерованих комп'ютером (CGI). Незважаючи на те, що спостерігачі не завжди зможуть читати цифри або формулювати математичні формули, спостерігаючи за графіком погоди, вони могли б передбачити події (і "побачити, що дощ вказував їм шлях") набагато швидше, ніж сканування таблиць координат дощових хмар. Такі інтенсивні графічні дисплеї, які виходять за межі світу чисел і формул, іноді також призводять до виходу, на якому відсутня координатна сітка або пропущені часові мітки, як якщо б занадто далеко від дисплеїв числових даних. Сьогодні, моделі прогнозування погоди, як правило, врівноважують погляди на переміщення дощових / снігових хмар на карту, яка використовує числові координати і числові часові мітки подій.

Аналогічно, комп'ютерне моделювання CGI-сканувань САТ може імітувати, як пухлина може зменшуватися або змінюватися протягом тривалого періоду медичного лікування, представляючи проходження часу як вид обертання видимої людської голови, коли змінюється пухлина.

Інші програми CGI комп'ютерного моделювання розробляються для графічного відображення великих об'ємів даних в русі, оскільки зміни відбуваються під час моделювання.

Комп'ютерне моделювання в науці

Загальні приклади типів комп'ютерного моделювання в науці, які виводяться з основного математичного опису:

чисельна КС диференціальних рівнянь, які не можуть бути вирішені аналітично, теорії, що включають такі безперервні системи, як явища у фізичній космології, динаміка рідини (наприклад, кліматичні моделі, моделі шуму на дорожньому шляху, моделі дисперсії повітряних доріг), механіка континууму та хімічна кінетика.

стохастична КС, як правило, використовується для дискретних систем, де події відбуваються ймовірно і які не можуть бути описані безпосередньо з диференціальними рівняннями (це дискретне моделювання у вищевказаному сенсі). Явища цієї категорії включають генетичні дрейфи, біохімічні або генні регуляторні мережі з невеликою кількістю молекул. (див. також: метод Монте-Карло).

багаточастинна КС реакції наноматеріалів на множинні масштаби до прикладеної сили з метою моделювання їх термopружних і термодинамічних властивостей. Методики, що використовуються для таких моделювань, - молекулярна динаміка, молекулярна механіка, метод Монте-Карло, багато масштабна функція Гріна.

Питання 25. Наведіть загальні типи ОЕ в науці.

Питання 26. Наведіть конкретні приклади застосування ОЕ.

Нижче наведено конкретні приклади ОЕ:

Статистична КС, засноване на агломерації великої кількості вхідних профілів, таких як прогнозування рівноважної температури приймаючих вод, що дозволяє вводити гаму метеорологічних даних для конкретної мови. Ця методика розроблена для прогнозування теплового забруднення.

Моделювання на основі агентів ефективно використовувалося в екології, де його часто називають "індивідуальним моделюванням" і використовують у ситуаціях, коли індивідуальну мінливість агентів не можна нехтувати, наприклад, динаміку популяції лосося і форелі (більшість суто математичних моделей припускають: вся форель поводить себе однаково).

Часова динамічна модель. У гідрології існує кілька таких транспортних моделей гідрології, як моделі SWMM і DSSAM, розроблені агентством охорони навколишнього середовища США для прогнозування якості річкової води.

КС також використовувалося для формального моделювання теорій пізнання і продуктивності людини, наприклад, АСТ-R.

КС з використанням молекулярного моделювання для виявлення лікарських засобів.

КС для моделювання вірусної інфекції в клітинах ссавців.

Для КС поведінки потоку повітря, води та інших рідин використовуються обчислювальні імітаційні методики рідинної динаміки. Використовуються одно-, дво- і тривимірні моделі. Одновимірна модель могла б імітувати вплив гідравлічного удару в трубі. Двовимірна модель може бути використана для імітації сил опору на поперечному перерізі крила літака. Тривимірне моделювання може оцінити потреби опалення та охолодження великої будівлі.

Розуміння статистичної термодинамічної молекулярної теорії є фундаментальним для оцінки молекулярних рішень. Розробка теореми розподілу потенціалу (PDT) дозволяє спростити цю складну тему до презентацій молекулярної теорії.

Прикладні пакети для ОЕ для фізики та техніки

Розроблено графічні середовища для моделювання. Особливу увагу було приділено обробці подій (ситуації, в яких імітаційні рівняння не є дійсними і повинні бути змінені). Відкритий проект «Open Source Physics» розпочав розробку багаторазових бібліотек для моделювання в Java, а також Easy Java Simulations - повне графічне середовище, що генерує код на основі цих бібліотек.

Питання 27. Практичне завдання. Проведіть ОЕ маятника математичного і фізичного.

Загальна схема нарахування балів

1. Загальна оцінка за лабораторну частину курсу складається з оцінок за 4 лабораторних робіт: **36 балів.**
2. Поточний контроль під час роботи на лекціях – **12 балів.**
3. Контроль самостійної роботи під час роботи на лекціях та на лабораторних роботах – **12 балів.**
4. Екзамен – **40 балів**

5. Критерії оцінювання підсумкового контролю

Студент демонструє здатність самостійно здійснювати основні види навчальної діяльності. Знання студента є глибокими, міцними, узагальненими; студент вміє застосовувати знання творчо, його навчальна діяльність позначена вмінням самостійно оцінювати різноманітні життєві ситуації, явища, факти – **3 бали.**

Студент знає істотні ознаки понять, явищ, закономірностей, зв'язків між ними, а також самостійно застосовує знання в стандартних ситуаціях, володіє розумовими операціями, вміє робити висновки, виправляти допущені помилки. Відповідь повна, правильна, логічна, обґрунтована – **2 бали.**

Відповідь студента при відтворенні навчального матеріалу елементарна, зумовлюється початковими уявленнями про предмет вивчення. Студент відтворює основний навчальний матеріал, здатний виконувати завдання за зразком, володіє елементарними вміннями навчальної діяльності – **1 бал.**

Відсутність відповіді студента – 0 балів.

Повний бал нормується множенням на 1/2, щоб в максимумі мати 12 балів.