



VILNIUS TECH Daugiafizikinių Skaičiavimų Kompetencijos Centras

Misija

VILNIUS TECH Daugiafizikinių Skaičiavimų Kompetencijos Centras (toliau Centras) plėtoja pažangius daugiaveikės fizikos tyrimus ir inovacijas, teikdamas modernias skaitmeninio modeliavimo kompetencijas akademinėi bendruomenei ir pramonei. Skatiname bendradarbiavimą, perkeliame mokslą į praktinį poveikį ir rengiame naujos kartos mokslininkus bei inžinierius spręsti sudėtingus realaus pasaulio iššūkius.

Vadovybė

Vadovas: prof. em. Bernhard Peters, vyriausiasis mokslo darbuotojas
Konsultantas: prof. em. Rimantas Kačianauskas

Kompetencijos

Centras, veikiantis VILNIUS TECH, yra nacionalinis pažangaus skaitmeninio modeliavimo ir simuliacinių technologijų centras. Remiantis stipriomis inžinerijos, taikomosios matematikos ir didelės našos kompiuterinių skaičiavimų ir modeliavimų tradicijomis, centras jungia ekspertines žinias apie diskretinių objektų ir kontinuumo modeliavimo integraciją, daugiamačio mastelio modeliavimą ir didelės raiškos simuliacijas, būtinas sudėtingoms fiziniams sistemoms tirti.

Centras taiko pažangias daugiafizikines platformas, tokias kaip XDEM ir COMSOL Multiphysics, skirtas modeliuoti tarpusavyje sąveikaujančius dalelių, skysčių, konstrukcijų ir laukų procesus. Tyrimų spektras apima fundamentinius mokslinius tyrimus, pramoninių problemų sprendimą ir aukštojo mokslo studijų stiprinimą, sudarant sąlygas tiksliai prognozuoti, optimizuoti bei kurti virtualius realių sistemų prototipus.

Pagrindinės daugiafizikinės kompetencijos

Centras palaiko platų daugiafizikinių tyrimų spektrą, apimantį:

- Sujungtas dalelių–skysčių–konstrukcijų simuliacijas sudėtingoms granulių ir disperguotų sistemų analizėms.
- CFD (angl. Computational Fluid Dynamics: Skaitinė skysčių dinamika), FEM (angl. Finite Element Method: Baigtinių elementų metodas) ir DEM (angl. Discrete Element Method: Diskrečiųjų element metodas) integraciją leidžiančią kurti visiškai validuotus daugiafizikinius modelius.
- Reaktyvių dalelių sistemas, apimančias šilumos, masės pernašą ir chemines reakcijas.
- Termomechaninių sąveikų tyrimus porėtose ir granuliuotose terpėse.
- Daugiafazius srautus ir dalelių pernašą pramonės bei energetikos sistemose.

- Elektroterminės ir elektrocheminės sąveikas medžiagose ir įrenginiuose.
- Bioprocesų ir aplinkos modeliavimą, apimančią biologinių ir fizinių reiškinių sujungimą.
- Didelės apimties, didelio tikslumo simuliacijas procesų optimizavimui ir projektavimui.
- Skaitmeninius dvynius ir virtualų realių sistemų prototipavimą.
- Daugiamačio mastelio modelius, jungiančius mikromastelio dalelių elgseną su makromastelio sistemų dinamika.

Poveikis

Tyrimams – centras sudaro sąlygas vykdyti aukšto lygio tarpdisciplininius tyrimus, išplečiančius tradicinių simuliacijų ribas ir skatinančius tarptautinį bendradarbiavimą.

Pramonei – suteikia prognozuojamuosius modeliavimo įrankius, mažinančius eksperimentinės plėtros trukmę, kaštus ir rizikas energetikos, medžiagų, gamybos bei aplinkos apsaugos technologijose.

Švietimui – rengia naujos kartos mokslininkus ir inžinierius, gebančius taikyti pažangius daugiafizikinius metodus realiems uždaviniams spręsti.

Ši veikla pozicionuoja centrą kaip svarbų mokslinės pažangos, technologinės inovacijos ir tvarios plėtros lyderį VILNIUS TECH ekosistemoje.

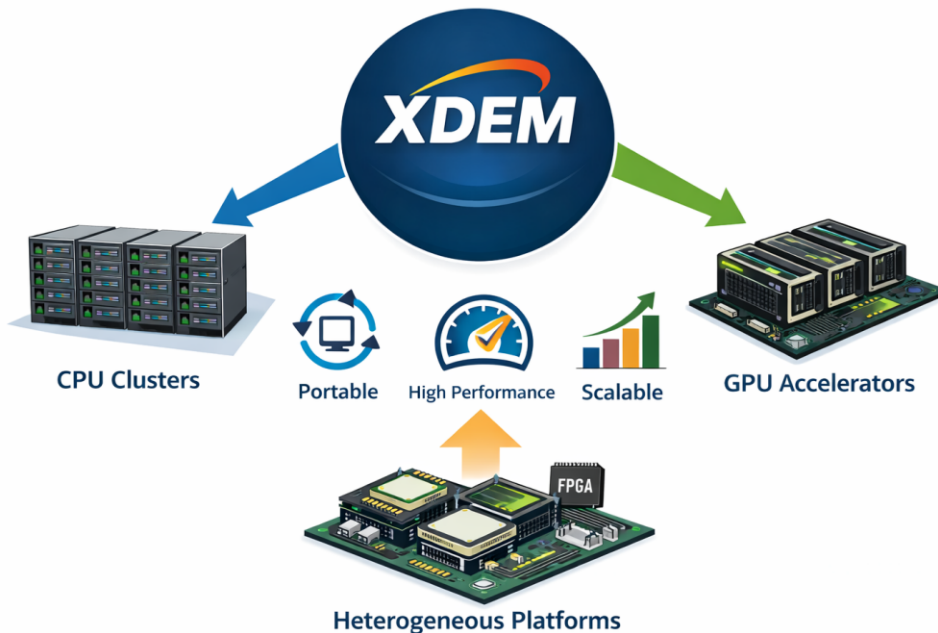
XDEM: Peržengiant egzaskalės ribas

Kai fizika apima milijonus branduolių, mastelis nustoja būti ribojantis veiksnys

Centras plėtoja kompiuterių architektūrai nepriklausomus XDEM programinius sprendimus, leidžiančius vykdyti didelio našumo simuliacijas tiek naudojant CPU, tiek GPU, neprarandant tikslumo ar modeliavimo stabilumo. Toks požiūris užtikrina, kad pažangūs daugiafizikiniai modeliai išliktų pritaikomi ateities kompiuterinėms architektūroms ir galėtų visapusiškai išnaudoti sparčiai tobulėjančias skaičiavimo platformas.

XDEM, kurio algoritmai sukurti pagal architektūrinio perkeliavimo principus, gali būti efektyviai vykdomi tiek tradiciniuose CPU klasteriuose, tiek GPU akceleratorių sistemose, tiek naujos kartos heterogeninėse platformose. Tai leidžia išvengti brangių programinio kodo perrašymo etapų, spartina inovacijas ir didina investicinę grąžą tiek akademinėje, tiek pramonės aplinkoje.

Rezultatas – tvirtas ir lankstus simuliacijų karkasas, leidžiantis spręsti pramoninio masto problemas: nuo dalelių lygmens reaktyvių srautų iki visiškai sujungtų daugiafizikinių sistemų. Šie sprendimai sudaro pagrindą tvariam programinės įrangos ekosistemų vystymui ir rengia naują kartą skaitinius tyrimus atliekančių mokslininkų, galinčių susitelkti į fiziką, o ne į kompiuterinių platformų ribotumus.



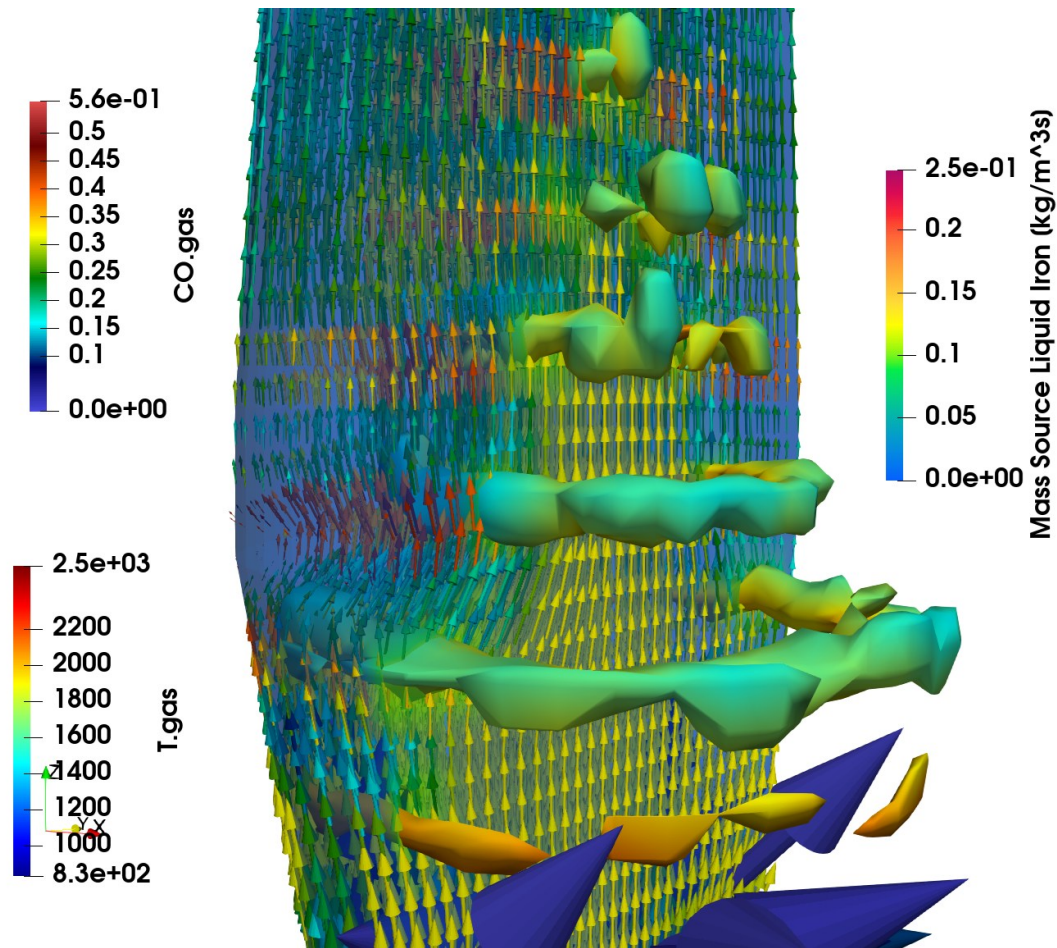
Kontaktai: Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt), Prof Dr Arnas Kačeniauskas (arnas.kaceniauskas@vilniustech.lt)

Aukštakrosnių skaitmeninis dvynys

Centras sukūrė aukštos raiškos aukštakrosnių skaitmeninį dvynį, paremtą XDEM metodologija, taip išplėsdamas galimybes modeliuoti pramoninio masto daugiafizikinius reiškinius. Šis dvynys tiksliai atkuria sudėtingą granuliuotų medžiagų, reaktyvių dujų srautų, šilumos pernašos ir cheminių transformacijų sąveiką, kuri lemia krosnies efektyvumą.

Modelyje derinamas diskretinių elementų metodas, skysčių dinamika ir termocheminiai procesai, todėl galima nagrinėti tokius reiškinius kaip dujų pasiskirstymas, reakcijų kinetika ir energijos naudojimo efektyvumas. Skaitmeninis dvynys leidžia atlikti virtualius eksperimentus realiomis darbo sąlygomis, įskaitant optimizavimo scenarijus, emisijų mažinimą ir saugos gerinimą.

Be tiesioginės pramoninės naudos, šis dvynys taip pat veikia kaip pažangus mokslinių tyrimų ir studijų įrankis, parodantis, kaip tokia skaitinė analizė gali transformuoti tradicinius inžinerinius procesus.

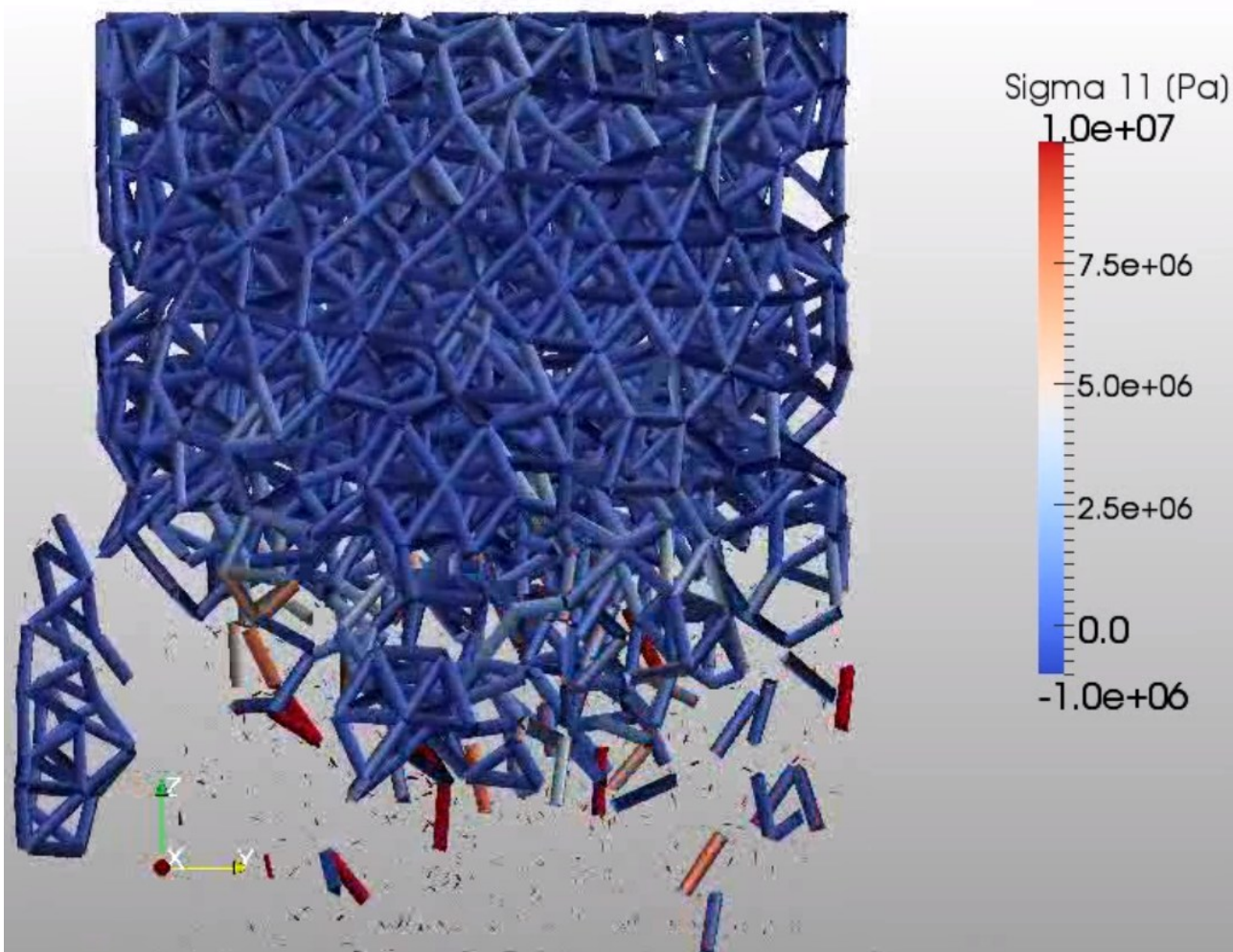


Kontaktai: Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

Grunto mechaninių savybių analizė

Centras vykdo pažangią granuliuotų medžiagų – triašių grunto mėginių – analizę, skirtą geotechnikos ir infrastruktūros inžinerijos poreikiams. Ši veikla orientuota į pagrindinių grunto savybių įvertinimą: šlyties stiprį, standį, deformacinį atsaką bei elgseną. Gruntas modeliuojamas kaip granuliuota medžiaga, todėl galima tiksliau atkurti realias apkrovų perdavimo sąlygas ir įvertinti pagrindo laikomąją gebą, deformacijas bei stabilumą.

Gauti rezultatai yra itin svarbūs projektuojant pamatus, pylimus, šlaitus ir atramines konstrukcijas, nes suteikia galimybę sumažinti projektavimo neapibrėžtis, rizikas ir padidinti sprendinių saugumą. Atliekama analizė taip pat aktuali statybos, transporto ir kitų infrastruktūros sektorių įmonėms, nes padeda pagrįsti sprendimus remiantis realistiškais, eksperimentais patikrintais duomenimis.



Kontaktai: Assoc Prof Dr Ona Lukoševičienė (ona.lukoseviciene@vilniustech.lt), Assoc Prof Dr Urtė Radvilaitė (urte.radvilaite@vilniustech.lt), Assoc Prof Dr Sergejus Borodinas (sergejus.borodinas@vilniustech.lt), Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

Ciklono separacijos efektyvumas

Centras tiria ciklonų separatorius, siekdamas padidinti jų efektyvumą ir sumažinti energijos sąnaudas. Ciklonų veikimas pagrįstas sukurių srautais ir dalelių judėjimu, ir būtent šių reiškinių sąveika lemia dalelių atskyrimo efektyvumą.

Centro atliekami tyrimai apima: dujų srautų modeliavimą, turbulencijos struktūrų analizę, dalelių trajektorijų prognozes bei jų atskyrimo priklausomybę nuo ciklono geometrijos ir eksploatacinių sąlygų. Ši informacija leidžia optimizuoti ciklonų konstrukcinius parametrus, sumažinti slėgio nuostolius, pagerinti dalelių pašalinimo kokybę ir padidinti jų patikimumą.

Tokie tyrimai yra itin aktualūs pramonėje – nuo energetikos ir gamybos iki aplinkosauginių technologijų – nes efektyvesni ciklonai mažina emisijas ir eksploatacinius kaštus.



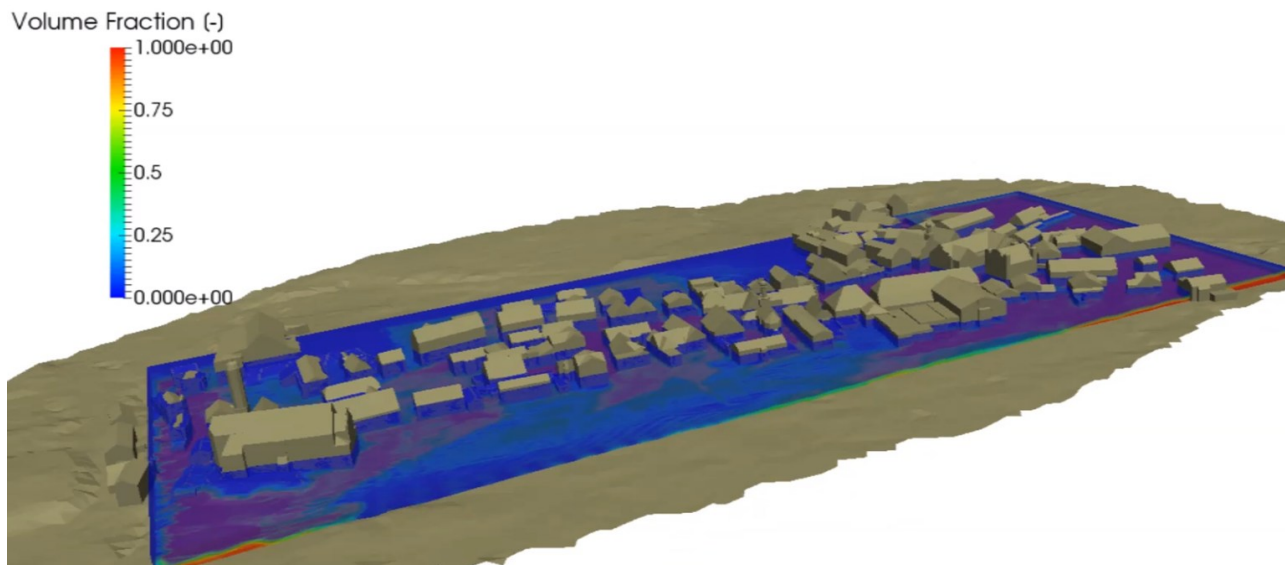
Kontaktai: Dr Aleksandras Chlebnikovas (aleksandras.chlebnikovas@vilniustech.lt), Tautvydas Juknevičius (tautvydas.juknevicius@vilniustech.lt), Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

BIM ir geofizinės topologijos integravimas į daugiafizinę analizę

Centras įgyvendina projektą, kuriuo siekiama sujungti skaitmeninio statinių informacinio modeliavimo (BIM) duomenis su geofizikiniais, geotechniniais ir topologiniais duomenų rinkiniais. Šis integruotas metodas leidžia tiksliau atkurti statinių sąveiką su gruntu, aplinkos procesais ir fizikinėmis apkrovomis, todėl suteikiama galimybė kurti duomenimis grįstus, realistiškus modeliavimo scenarijus.

Integruodamas BIM su pažangiais daugiafiziniais modeliais – apimančiais konstrukcijų mechaniką, geotechnines sąveikas, šilumos sklaidą ir skysčių tekėjimą – centras sudaro sąlygas visapusiškai vertinti pastatų ir infrastruktūros objektų elgseną per visą jų gyvavimo ciklą. Tai pagerina sprendimų pagrįstumą nuo ankstyvojo projektavimo iki eksploatacijos, priežiūros ir renovacijos.

Projekto rezultatai prisideda prie atsparesnių, tvaresnių ir efektyvesnių infrastruktūros sistemų kūrimo bei pagerina tarpdisciplininį suderinamumą tarp projektuotojų, inžinierių ir tyrėjų.



Kontaktai: Assoc Prof Dr Daiva Makutėnienė (daiva.makuteniene@vilniustech.lt), Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

Vienas stogas – daug galimybių: urbanistinių stogų daugiafizinė optimizacija

Centras analizuoja vieną aktualiausių šiuolaikinių miestų iššūkių – kaip optimaliai išnaudoti pastatų stogus konkurencingoms aplinkosauginėms funkcijoms. Miestų stogai gali būti naudojami fotovoltinėms (PV) sistemoms energijai gaminti arba žaliajai infrastruktūrai (žaliems stogams), kurie gerina oro kokybę, mažina šiltnamio efektą, padeda reguliuoti lietaus vandenį ir didina biologinę įvairovę.

Papildomas sudėtingumas kyla dėl to, kad šios dvi funkcijos dažniausiai konkuruoja – įrengus PV modulius, želdinimui vietos beveik nelieka. Todėl centras taiko pažangius daugiafizikinius modelius ir optimizavimo metodus, integruodamas:

- saulės radiacijos modelius,
- pastatų energinių srautų skaičiavimus,
- oro srautų ir taršos sklaidos analizę,
- konstrukcinius ir apkrovų ribojimus,
- miesto aplinkosauginius rodiklius.

Ši analizė leidžia nustatyti, kada fotovoltiniai sprendimai yra klimato požiūriu efektyviausi, kada žalieji stogai duoda didžiausią ekologinę naudą, ir kokie mišrūs ar teritoriniai sprendiniai gali subalansuoti miesto poreikius. Tokiu būdu centras prisideda prie modernių, duomenimis grįstų, klimato kaitai atsparių miestų plėtros.



Kontaktai: Assoc Prof Dr Daiva Makutėnienė (daiva.makuteniene@vilniustech.lt), Prof Dr Jonas Gradauskas (jonas.gradauskas@vilniustech.lt), Prof. Vladimir Simic (vsima@sf.bg.ac.rs), Prof em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

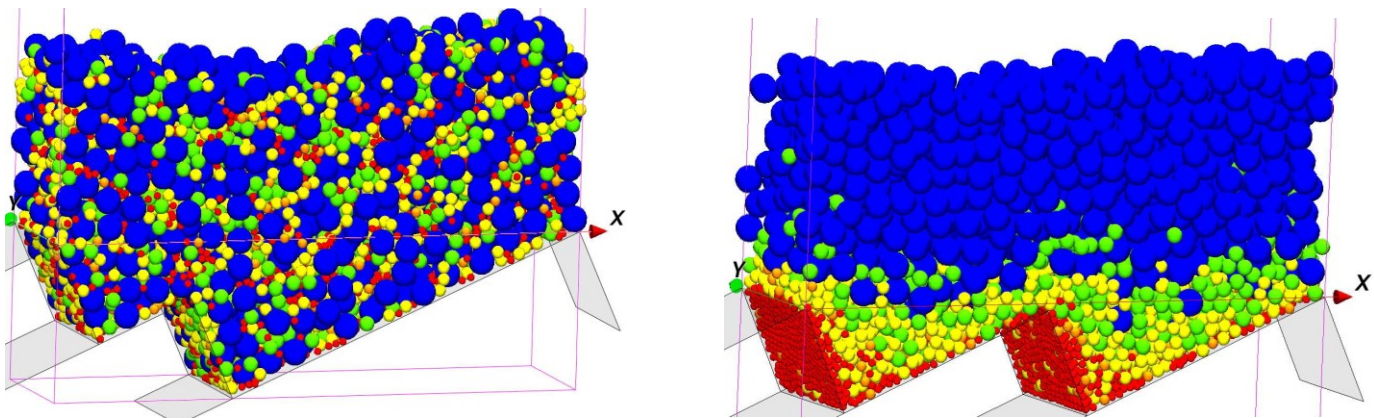
Medžiagų segregacija judančiose grotelinėse sistemose

Bendradarbiaudamas su Lietuvos energetikos institutu, Centras tiria medžiagų segregaciją judančiose (forward-acting) grotelinėse sistemose – tai svarbus reiškinys šiuolaikinėse šilumos ir energijos gamybos sistemose.

Segregacija atsiranda, kai medžiagos skirtingo dydžio ar tankio dalelės judant grotelinėse sistemose pasiskirsto nevienodai, o tai lemia degimo nevienodumą, energijos nuostolius, didesnes emisijas ir mažesnę proceso stabilumą. DEM pagrįstas modeliavimas leidžia atkurti dalelių elgseną realiomis sąlygomis ir tirti, kaip įtaką daro:

- dalelių granulometrija,
- tankio skirtumai,
- grotelinių sistemų judėjimo greitis ir amplitudė,
- kuro savybės,
- eksploataciniai režimai.

Tyrimų rezultatai leidžia kurti efektyvesnius grotelinių sistemų dizainus, gerinti kuro lankstumą ir prognozuoti proceso stabilumą, padidinant energijos gamybos efektyvumą ir sumažinant poveikį aplinkai.



Kontaktai: Dr Algis Džiugys (algis.dziugys@mail.lei.lt) Prof. Em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

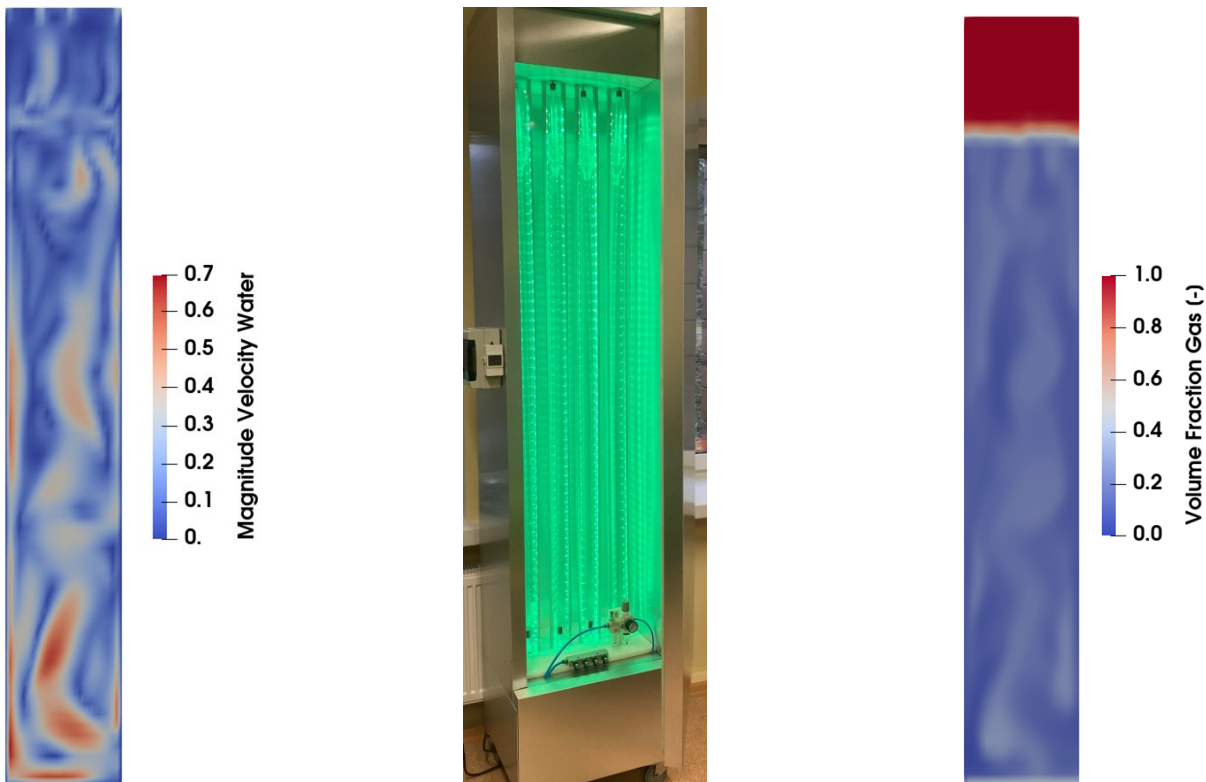
Biometano išvalymas fotobioreaktoriuje

Centras vykdo pažangius tyrimus, skirtus biometano išvalymo procesams fotobioreaktoriuose. Tikslas – padidinti žaliavinio biodujų kokybę didinant metano koncentraciją bei mažinant anglies dioksido ir kitų priemaišų kiekį, taikant biologinius, šviesos energija pagrįstus procesus.

Fotobioreaktoriuose pasitelkiamos mikroorganizmų sistemos, kurios, naudodamos šviesos energiją, vykdo CO₂ fiksaciją ir kitus dujų srauto valymo procesus. Modeliuodamas šiuos reiškinius centras analizuoja:

- vandens ir dujų srautų sąveiką,
- masės pernašą,
- mikrobiologinius procesus,
- šviesos sklaidimo ir intensyvumo įtaką,
- reaktoriaus geometrijos ir hidrodinamikos poveikį.

Šis darbas prisideda prie tvarios energetikos plėtros, nes fotobioreaktorių technologijos gali sumažinti emisijas, padidinti biodujų energetinę vertę ir sudaryti sąlygas žiedinei bioekonomikai.



Kontaktai: Assoc Prof Dr Alvydas Zagorskis (alvydas.zagorskis@vilniustech.lt), Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

Bioreaktoriai biodujų generavimui

Centras taip pat analizuoja bioreaktorius, kurių veikimas pagrįstas fermentacijos procesais. Biodujų generavimas yra sudėtingas daugiafizinis reiškinys, kurį lemia: masės ir šilumos pernaša, mikroorganizmų aktyvumas, srautų dinamika ir termocheminės reakcijos.

Integruodamas daugiafizinčius modelius, centras tiria:

- proceso stabilumą,
- metano išėigos kitimą priklausomai nuo sąlygų,
- energijos nuostolius,
- reaktoriaus geometrijos optimizavimą,
- šilumos ir masės mainų efektyvumą.

Toks modeliavimas leidžia didinti bioreaktorių patikimumą, mažinti energijos sąnaudas, pagerinti biodujų kokybę ir prisidėti prie biodegalų technologijų plėtros.



Kontaktai: Assoc Prof Dr Alvydas Zagorskis (alvydas.zagorskis@vilniustech.lt), Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

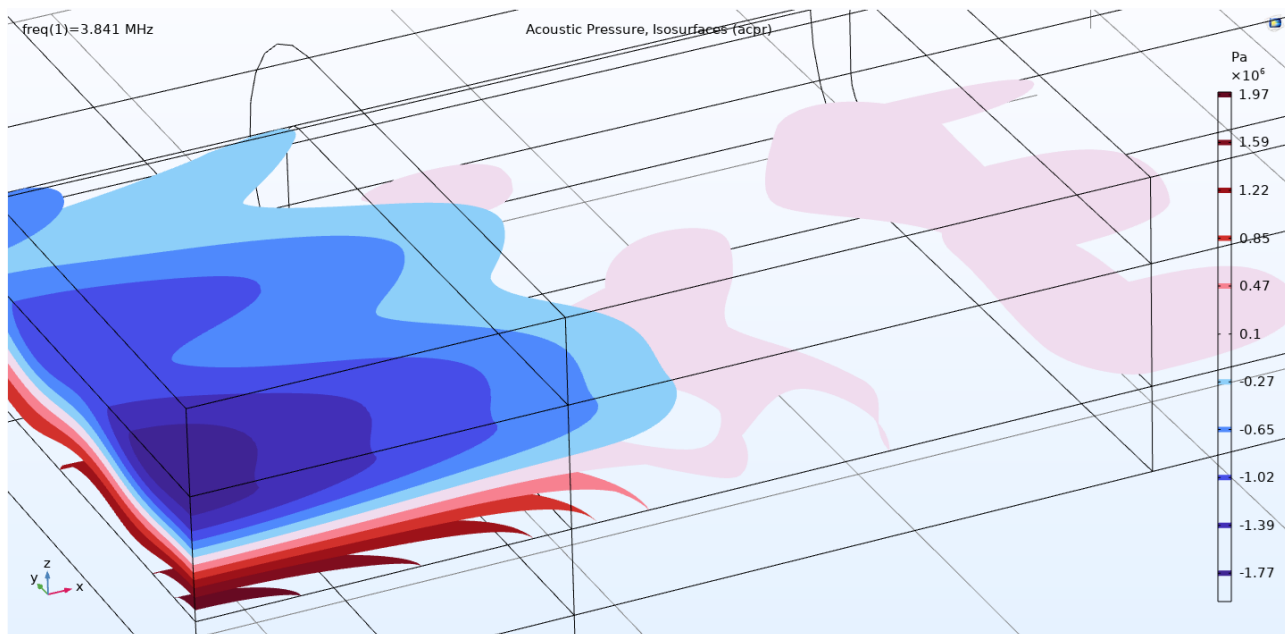
Akustinė dalelių aglomeracija

Centras tiria akustinės aglomeracijos procesus – reiškinius, kai garso bangos naudojamos smulkioms dalelėms sujungti į didesnius aglomeratus, taip pagerinant jų pašalinimą iš dujų srautų.

Akustinės bangos sukuria slėgio laukus, kurie verčia daleles judėti, susidurti ir jungtis. Centro atliekami tyrimai ir simuliacijos nagrinėja:

- akustinio lauko intensyvumą ir dažnį,
- dalelių dispersiją, tankį ir dydžio pasiskirstymą,
- garso ir srauto sąveikas,
- aglomeracijos efektyvumo priklausomybę nuo procesų parametrų.

Šios technologijos gali būti taikomos pramoninėse dujų valymo sistemose, energetikoje, procesų inžinerijoje ir aplinkosauginiuose sprendimuose, siekiant sumažinti smulkiųjų dalelių emisijas ir pagerinti oro kokybę.



Kontaktai: Dr Aleksandras Chlebnikovas (aleksandras.chlebnikovas@vilniustech.lt), Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

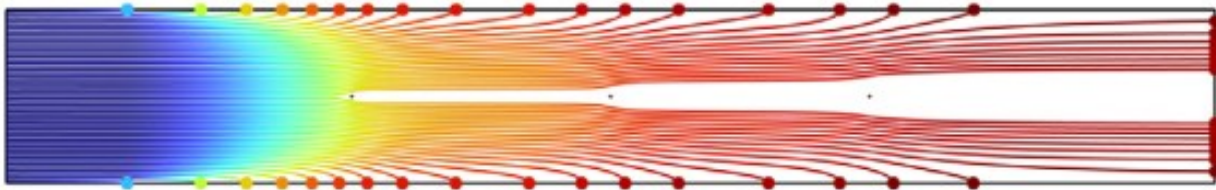
Dalelių nusodinimas elektriniame lauke

Centras vykdo pažangius tyrimus, skirtus dalelių nusodinimo elektriniuose laukuose procesams analizuoti. Šis reiškinys yra esminis kuriant efektyvius elektrostatiškus filtrus, naudojamus pramoninėse dujų valymo sistemose, energetikoje ir aplinkosaugos inžinerijoje.

Nusodinimo procesas grindžiamas tuo, kad elektrinis laukas veikia įkrautas arba poliarizuotas daleles, priversdamas jas judėti link kolektorių paviršių, kur jos nusėda. Centro atliekamos simuliacijos analizuoja:

- elektrinio lauko stiprio įtaką dalelių judėjimui,
- dalelių dydžio, tankio ir elektrinių savybių reikšmę,
- dujų srauto ir turbulencijos įtaką nusodinimo efektyvumui,
- dalelių trajektorijas mikromasteliu,
- sistemos našumo priklausomybę nuo geometrinių parametrų.

Šios išvalgos leidžia optimizuoti elektrostatiškus filtrų konstrukciją, sumažinti kietųjų dalelių emisijas ir padidinti pramoninių procesų tvarumą.



Kontaktai: Dr Aleksandras Chlebnikovas (aleksandras.chlebnikovas@vilniustech.lt), Tautvydas Juknevičius (tautvydas.juknevicius@vilniustech.lt), Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)

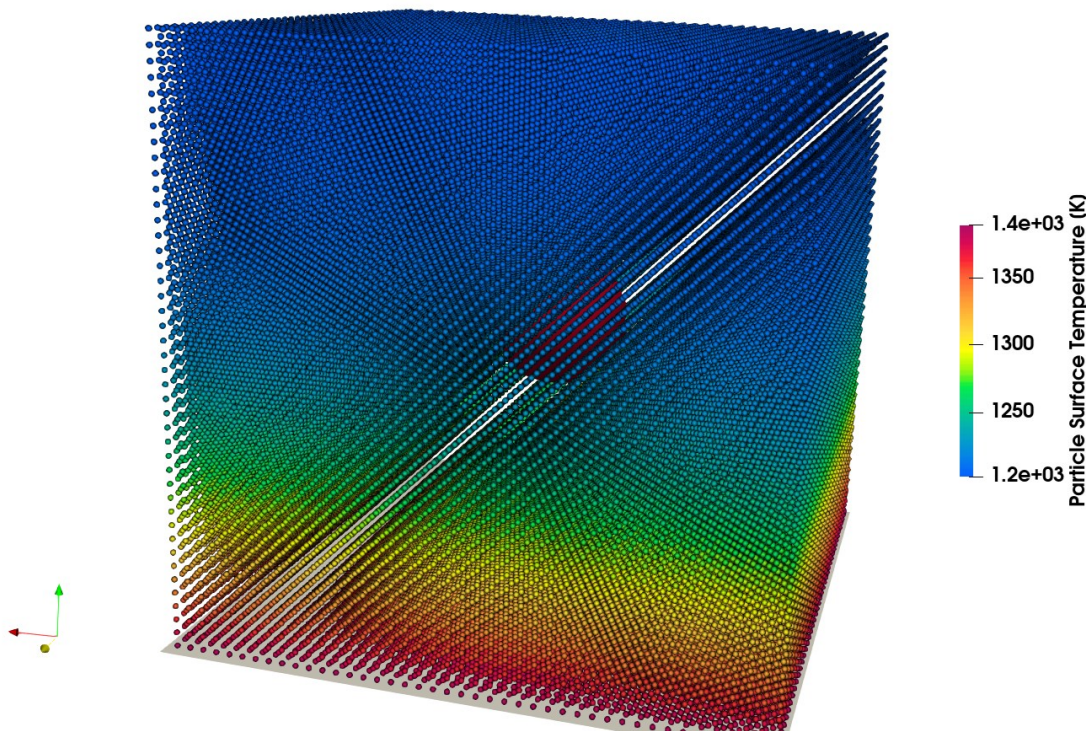
Ugniai atsparių medžiagų šiluminės izoliacijos savybės

Projektas skirtas šilumos pernašos tyrimams granuluotose medžiagose, taikant išplėstinį diskretinių elementų metodą (XDEM) duagiafizinėje modeliavimo aplinkoje. Granuluotos medžiagos plačiai naudojamos energijos, chemijos ir termoinžinerijos srityse, kur tiksli šilumos pernašos prognozė yra būtina, tačiau eksperimentiniu būdu dažnai sudėtinga realizuoti.

XDEM metodas leidžia modeliuoti atskiras daleles ir jų sąveiką, įtraukiant:

- šiluminę kondukciją tarp dalelių,
- konvekcinius mainus porėtoje terpėje,
- spindulinę šilumos pernašą tarp paviršių,
- lokalių temperatūrų gradientus,
- kontaktinę šilumos varžą .

Tyrimas leidžia atskleisti šilumos sklidimo mechanizmus skirtingos topologijos granulių blokuose, taip pat tirti, kaip skirtingi medžiagų parametrai veikia šiluminę izoliaciją. Gauti rezultatai yra reikšmingi kuriant termoakumuliacines sistemas ir kitas daugiafizinines taikymo sritis.



Kontaktai: Darius Mačiūnas (darius.maciunas@vilniustech.lt), Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt), Prof Dr Habil Rimantas Kačianauskas (rimantas.kacianauskas@vilniustech.lt)

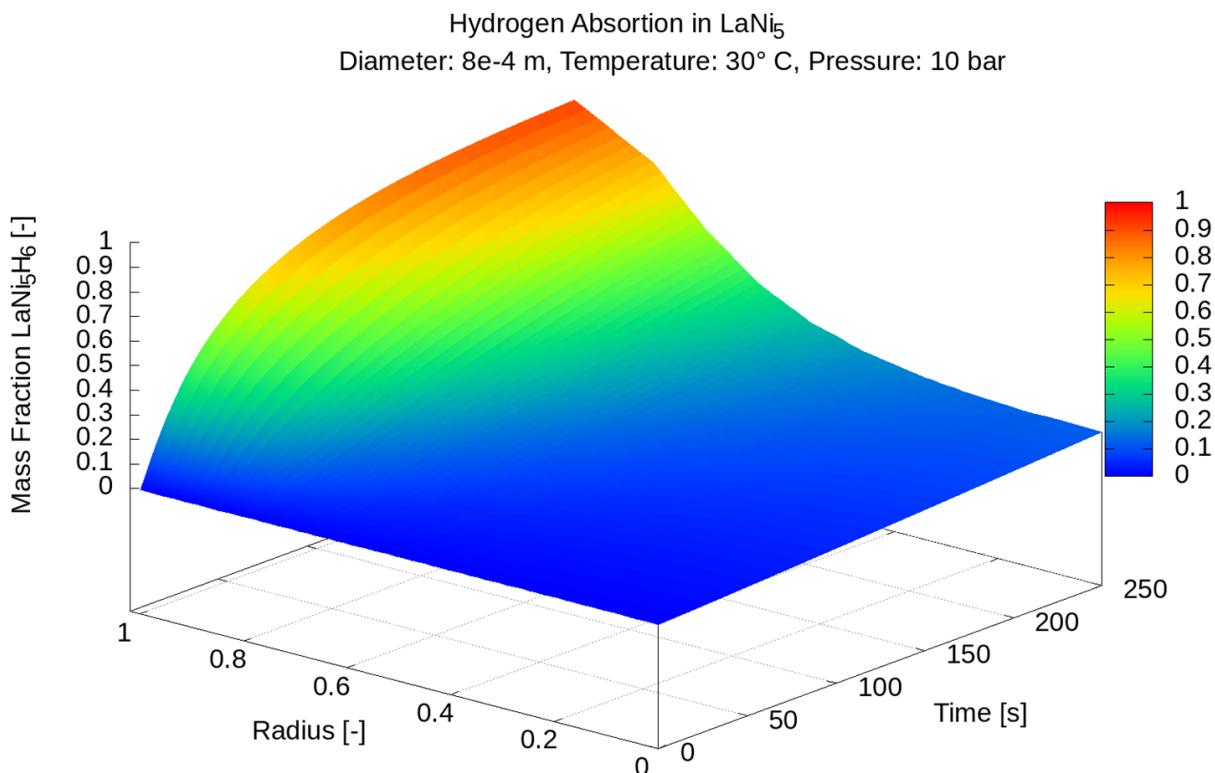
Vandenilio saugojimas

Centras vykdo aukšto tikslumo tyrimus, skirtus metalo hidridinėms sistemoms grįstomis vandenilio saugojimo technologijoms analizuoti. Tokios sistemos pasižymi sudėtinga daugiafizikine prigimtimi, nes jose glaudžiai susiję šilumos pernašos, masės pernašos ir termocheminiai procesai.

Vandenilio absorbcija metalo hidridinėse sistemose yra intensyviai egzoterminė reakcija, kurios našumą lemia:

- šilumos išskyrimas ir jos pašalinimo efektyvumas,
- vandenilio skvarba į metalo granules,
- faziniai virsmai,
- vidiniai temperatūrų ir slėgio gradientai,
- dalelių geometrinės ir medžiaginės savybės.

XDEM pagrindu sukurti modeliai leidžia modeliuoti šiuos reiškinius dalelių masteliu, tiksliai prognozuoti absorbcijos kinetiką, temperatūrų pasiskirstymą ir saugyklų našumą realiomis eksploatacinėmis sąlygomis. Tai padeda kurti saugesnes, efektyvesnes ir lengviau valdomas vandenilio saugojimo sistemas, kurios yra esminė žaliosios energetikos ekosistemos dalis.



Kontaktai: Prof. em. Bernhard Peters (bernhard-josef.peters@vilniustech.lt)