

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертационную работу Лавриненко Ярослава Сергеевича
«Исследование неидеальной электрон-ионной плазмы методом динамики
волновых пакетов» на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы

Диссертация Лавриненко Я.С. посвящена развитию и применению метода численного атомистического моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы. Работа объемом в 127 страниц текста состоит из введения; краткого обзора экспериментальных и теоретических работы в области физики неидеальной плазмы; четырех глав, в которых изложена модель плазмы, подходы к ее программной реализации и результаты моделирования дейтериевой и водородной плазмы; заключения; списка литературы, содержащего 137 наименований, в шести из которых соискатель выступает в качестве автора или соавтора. Положения, выносимые соискателем на защиту, раскрыты и обоснованы в четырёх главах из пяти. Далее будут представлены наиболее значимые, на наш взгляд, результаты.

В первой главе диссертации представлен обзор работ по экспериментальному и теоретическому изучению разогретого плотного вещества и неидеальной плазмы. Помимо этого представлено описание четырех методов атомистического моделирования, применяемых для изучения свойств систем заряженных частиц: методы классической и квантовой молекулярной динамики, полуклассический метод молекулярной динамики волновых пакетов (МДВП) и метод Монте-Карло в интегралах по траекториям (PIMC). Особое внимание уделено описанию семейства методов МДВП, являющихся дальнейшим развитием методов классической молекулярно динамики, в которой электрон представляется в виде гауссовского волнового пакета.

Вторая глава диссертации посвящена описанию предлагаемого соискателем метода молекулярной динамики волновых пакетов с включением положений теории функционала плотности (МДВП-ФП). Для повышения точности метода МДВП и расширения области применимости метода соискателем предлагается ввести дополнительную энергию в гамильтониан моделируемой системы, выражающий энергию обменно-корреляционного взаимодействия, рассчитанную из положений теории функционала плотности. В качестве основы предлагаемого метода был выбран вариант МДВП в приближении Хартри из-за высокой вычислительной производительности. Из-за особенностей расчета кулоновского взаимодействия в методе МДВП обменно-корреляционные

функционалы, используемые в методе функционала плотности (МФП), должны содержать поправки, исключающие эффекты компенсации самодействия при их использовании в МДВП.

В качестве граничных условий для предлагаемого метода МДВП-ФП используется отражающий гармонический потенциал на границах ячейки моделирования. Подобный выбор граничных условий мотивирован необходимостью устранения эффекта “расплывания” волновых пакетов (неограниченного уширения слабосвязанных волновых пакетов в неограниченном пространстве). Использование отражающих граничных условий вносит систематическую погрешность в наблюдаемые величины и замедляет их сходимость к предельным значениям. Тем не менее, эта погрешность может быть учтена при вычислении интересующих величин по внутреннему объему моделируемой системы вдали от приграничных областей.

Третья глава содержит техническую информацию, необходимую для программной реализации предлагаемого метода МДВП-ФП. Вычисление обменно-корреляционной энергии выполняется путем численного интегрирования обменно-корреляционного функционала LDA по трехмерной пространственной сетке. Электронная плотность вычисляется из норм волновых пакетов. Для повышения быстродействия метода предлагается использовать сетки с переменным шагом, подстраивающиеся под градиент электронной плотности, который может быть оценен из параметров волновых пакетов. Также существенно повысить скорость вычислений позволяют графические ускорители. Программная реализация метода МДВП-ФП, выполненная соискателем, позволяет использовать для вычислений многопроцессорные и гибридные вычислительные системы.

В четвертой главе представлены результаты применения метода МДВП-ФП для моделирования водородной и дейтериевой плазмы. Предложенный метод позволяет повысить точность представления молекулярных состояний водорода в сравнении с исходным методом МДВП, а также расширить диапазон плотностей моделируемых систем до 10^{25} см^{-3} . Однако представленные значения зависимости энергии водородной плазмы от плотности хоть и согласуются с результатами квантовомеханических расчетов (PIMC), но систематически их завышают. Расчеты ударной адиабаты дейтерия демонстрируют хорошее согласие с экспериментальными данными в области близкой к пределу сжатия. Метод МДВП-ФП позволяет воспроизвести переход от молекулярного состояния D_2 к полностью ионизированной плазме. В дополнение к этому, серия численных экспериментов позволила установить границу применимости метода по температуре $T > 5000 \text{ K}$.

В пятой главе представлены результаты расчета изоэнтропы сжатия дейтерия и температурной электрон-ионной релаксации. Для построения изоэнтропы были использованы два метода: традиционный, связанный с решением уравнения Ферми-Зельдовича, и новый, предложенный соискателем метод медленного сжатия. Полученные результаты демонстрируют согласованность этих двух методов между собой и с экспериментальными данными.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

Актуальность работы обоснована необходимостью теоретического описания большого объема экспериментальных данных по исследованию свойств разогретого плотного вещества и неидеальной плазмы. Из-за преобладания межчастичного взаимодействия в веществе высокой плотности применение существующих моделей идеальной плазмы невозможно, а в связи с наличием дальнедействующего кулоновского взаимодействия построение новых затруднительно. Изучение свойств неидеальной плазмы в свою очередь необходимо, в частности, для построения континуальных (гидродинамических, кинетических) моделей среды с учетом эффектов неидеальности, что может быть необходимым для инженерных приложений и фундаментальных исследований в других областях. Таким образом, создание новых методов численного моделирования неидеальной плазмы в широком диапазоне температур и плотностей является актуальной задачей на сегодняшний день.

Научная новизна представленной работы заключается в создании нового метода численного моделирования МДВП-ФП, как объединение хорошо известных методов функционала теории плотности и молекулярной динамики волновых пакетов. Предложенный метод обладает рядом уникальных особенностей, таких как высокая производительность, возможность моделирования совместной динамики электронов и ионов, повышение точности учета квантовых эффектов по сравнению с классической молекулярной динамики. Дополнительно в работе проведено исследование отражающих граничных условий и их влияния на моделируемую систему. Получены новые данные по ударной адиабате и изоэнтропе сжатия дейтерия.

Диссертация написана ясным, грамотным русским языком, однако присутствует некоторое количество неточностей и опечаток. Как это типично для любой серьезной научно-квалификационной работы, по диссертации Лавриненко Я.С. можно сделать некоторые замечания:

1. Во второй главе диссертационной работы подробно описывается метод ограничения ширины волновых пакетов путем задания отражающих граничных условий. Проводится подробный разбор эффектов, вносимых

граничными условиями, и способов их устранения, но не приводится никаких количественных данных по размеру приграничного слоя, необходимого для получения статистически достоверных результатов, количеству частиц и другим параметрам. Было бы полезным предоставить эти данные и сформулировать критерии их получения.

2. В текущей работе метод МДВП-ФП применялся только для моделирования водородоподобных атомов, но ничего не говорится об элементах с более сложной электронной структурой. Подразумевает ли это, что предложенный метод может быть использован только для моделирования водородной плазмы?

Отмеченные замечания не снижают общее положительное впечатление о работе Лавриненко Я.С. Полагаю, что ответы на заданные вопросы не составят для него проблем и дадут специализированному совету 24.1.193.01 (Д 002.110.02) дополнительные основания для позитивной оценки диссертационной работы. Представленные в диссертации материалы исследований имеют достаточно хороший уровень верификации и апробации. Список публикаций Лавриненко Я.С. по теме работы включает 6 статей, опубликованных в рецензируемых журналах, а также представлены на множестве конференций.

Общее заключение. Предложенная к защите диссертация Лавриненко Я.С. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г., а ее автор Лавриненко Ярослав Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Отзыв составил д.ф.-м.н.,
проф., гл.н.с.



Игнатов А.М.

Подпись д.ф.-м.н., профессора, главного научного сотрудника
теоретического отдела
В.и.о. Ученого секретаря ИОФ РАН,

д.ф.-м.н.



Глушков В.В.

Контактные данные официального оппонента Игнатова Александра Михайловича

Тел. +7(499)503 87 77 (доб. 747)

e-mail: aign@fpl.gpi.ru

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики
им. А.М. Прохорова Российской академии наук» (ИОФ РАН)
119991 ГСП-1, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38.
Тел: +7 (499) 503-8734
Факс: +7 (499) 503-8723
e-mail:office@gpi.ru