

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

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

Для исследования свойств веществ, в том числе при высоких давлениях, в настоящее время активно используются методы многомасштабного компьютерного моделирования. В рамках этого подхода на различных пространственных масштабах используются различные вычислительные модели, дополняющие друг друга. Атомистические модели, описывающие микроскопические свойства объектов, используются для задания параметров в моделях более высокого уровня, а мезо- и макроскопическое моделирование, в свою очередь, применяются для верификации атомистических методов.

Метод моделирования неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества (warm dense matter), предложенный в диссертации Лавриненко Ярослава, относится к семейству атомистических методов и занимает место между классической молекулярной динамикой, использующей псевдопотенциалы с фиксированными параметрами, и квантовой молекулярной динамикой, основанной на теории функционала электронной плотности (DFT-MD). Предложенные в диссертации решения позволяют с одной стороны существенно увеличить точность описания квантовых состояний по сравнению с методом классической молекулярной динамикой, а с другой стороны отказаться от адиабатического приближения, используемого в DFT-MD. Это делает предлагаемый метод в достаточной степени уникальным и позволяет рассчитывать на его успешное применение при решении ряда задач неидеальной плазмы, в первую очередь связанных с моделированием динамических и релаксационных процессов.

Результаты, описанные в диссертации, это, фактически, первый шаг к решению указанных выше задач. В работе подробно описывается построение численной модели, оптимизация и адаптация ее для современных суперкомпьютерных кластеров, в том числе гибридных вычислительных систем на основе графических ускорителей. В работе также приведена верификация метода на примере расчета свойств отдельных атомов и молекул, уравнения состояния водорода, а также ударной адиабаты и изэнтропы дейтерия. Эти расчеты убедительно показывают широкие возможности метода. Например, при расчете изэнтропы дейтерия, автору удалось отказаться от вычислительно сложного алгоритма, основанного на расчете сеточных значений энергии и давления с последующим решением уравнения Зельдовича, и выполнить непосредственный расчет изэнтропы путем постепенного сжатия расчетной ячейки с контролем обратимости процесса. В конце работы описаны также предварительные расчеты скорости электрон-ионной релаксации, недоступные в методе DFT-MD, использующем адиабатическое приближение.

На данном этапе автором показана возможность использования разработанного им метода для простейших атомов и молекул, что является важным результатом,

однако применение этого метода для более тяжелых атомов представляется еще более перспективным и позволит решить ряд задач связанных с определением свойств веществ при ударном сжатии и разгрузке газовых и твердотельных мишеней, быстром нагреве их лазерным излучением или потоками частиц.

Автореферат достаточно полно отражает содержание глав диссертации, содержит сведения об актуальности, новизне и практической значимости работы. Текст автореферата написан хорошим научным языком, содержит необходимые иллюстрации. Апробация работы проведена на профильных российских и международных конференциях, результаты диссертации опубликованы в виде 6-ти статей в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК.

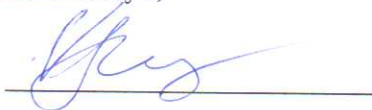
По содержанию автореферата можно сделать следующие замечания:

1. Было бы полезным подчеркнуть, что используемый вид гауссовой функции, описывающей волновой пакет, выдвинутый ранее Клаковым и Тёппфером, сохраняет симплектичность эрмитовой норм-матрицы и не приводит к появлению дополнительных множителей в уравнениях гамильтоновой динамики для канонических переменных, введенных для описания динамики волнового пакета. Это в положительную сторону отличает предложенный автором метод от ранее выдвинутого метода электронного силового поля (eFF), где уравнения движения для ширины и импульса гауссова пакета имеют дополнительный множитель, возникающий из-за нарушения условия симплектичности норм-матрицы.
2. При сравнении с методом eFF для ударной адиабаты Гюгонио для дейтериевой плазмы было бы полезным добавить результаты работы J. T. Su, W. A. Goddard III, Phys. Rev. Lett. 99, 185003 (2007), которая сделана разработчиками метода eFF и к тому же содержит сравнение со старой версией метода динамики волновых пакетов.
3. Согласно работе одного из наиболее известных разработчиков метода динамики волновых пакетов К. Тёппфера (G. Zwicknagel, C. Toepffer, P.-G. Reinhard, Phys. Reports, 309, 117 (1999)) ещё одним возможным применением метода является описание потерь энергии заряженными частицами в плазме. Рассмотрение такой задачи могло бы повысить практическую ценность представленной автором работы. Кроме того, учитывая прогресс и в самом методе, достигнутый автором, и рост вычислительных возможностей за 20 лет, такой шаг мог бы привести к новым научным результатам, недоступным к получению другими методами.

Перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей значимости диссертационной работы. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., ред.01.10.2018г., а ее автор Лавриненко Ярослав заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Ведущий научный сотрудник подразделения № 171 Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА»),
кандидат физико-математических наук,

Мигдал Кирилл Петрович



Адрес: 127473, г. Москва, Сущевская ул., д. 22

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА»)

Телефон: (963) 614-85-88, e-mail: kir-migdal@yandex.ru

Подпись Мигдала К.П. заверяю,

Ученый секретарь НТС ФГУП «ВНИИА»,

кандидат технических наук



Феоктистова Л.В.

«06» 12. 2021 г.