

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о работе Лавриненко Ярослава по кандидатской

диссертации “Исследование неидеальной электрон-ионной плазмы методом динамики волновых пакетов”, представленной к защите на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

1.3.9 – физика плазмы

Диссертация Лавриненко Ярослава на тему: «Исследование неидеальной электрон-ионной плазмы методом динамики волновых пакетов» посвящена разработке и применению нового метода компьютерного моделирования для исследования неидеальной электрон-ионной плазмы в равновесном и неравновесном состояниях.

Неидеальная плазма и разогретое плотное вещество интенсивно исследуется во всем мире как экспериментально, так и теоретически. Разогретое плотное вещество (warm dense matter) – это экстремальное состояние вещества при высоких температурах и давлениях, для которого существующие теоретические модели твердого тела, жидкости, идеального газа и плазмы оказываются не применимыми. Основным препятствием для применения этих моделей является неидеальность среды, т.е. существенная роль взаимодействий частиц (средняя потенциальная энергия межчастичного взаимодействия сравнима или превышает кинетическую энергию теплового движения). Поскольку вещество в данных условиях, как правило, является частично или полностью ионизованным, необходимо явно учитывать взаимодействие между заряженными электронами и ионами, что представляет особую сложность для создания теоретических моделей. Кроме того, вне зависимости от способа создания состояние разогретого плотного вещества оно, как правило, является неравновесным, поэтому особое значение имеет исследование релаксационных процессов. Создание реалистичных методов компьютерного моделирования данных процессов является актуальной задачей.

В процессе работы над диссертацией автором предложен метод компьютерного моделирования принадлежит к классу атомистических методов и включает в себя алгоритмы двух известных ранее подходов: метода молекулярной динамики с волновыми пакетами и теории функционала плотности. Однако, в представленном виде алгоритм является новым и обладает рядом уникальных особенностей, таких как высокая скорость расчетов, возможность моделирования совместной динамики электронов и ионов, более точный учет квантово-механических эффектов электрон-электронного и электрон-ионного

взаимодействия (обменно-корреляционного взаимодействия) по сравнению с существующими методами. Полученные с помощью разработанного метода результаты для плазмы водорода и дейтерия также являются новыми.

Основными результатами исследования являются:

а) Разработан новый метод компьютерного моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы и плотного разогретого вещества, основанный на комбинации динамики волновых пакетов и теории функционала плотности (МДВП-ФП), включая алгоритмы для оптимизации и распараллеливания вычислений на гибридных многопроцессорных кластерах. Проведен анализ использования различного типа граничных условий. Выполнены исследования скорости работы алгоритма и эффективности его распараллеливания.

б) С помощью полученного метода проведен расчет термодинамических свойств и уравнения состояния неидеальной плазмы водорода и дейтерия в широком диапазоне концентраций электронов и температур плазмы, включая сравнение с экспериментальными результатами по изоэнтропе разгрузки и ударной адиабате дейтерия.

За время работы аспирантом было выполнено 17 докладов на всероссийских и международных конференциях, опубликованы 6 статей в рецензируемых научных изданиях по материалам проделанной работы.

При выполнении данной диссертации автор проявил себя самостоятельным исследователем в области вычислительной физики и физики плазмы, продемонстрировал высокий уровень владения современными компьютерными технологиями и средствами программирования. Аспирант на протяжении трех лет является ассистентом кафедры информатики и вычислительной математики и проводит семинары по алгоритмам и структурам данных для студентов первого курса МФТИ.

Лавриненко Ярослав - квалифицированный научный сотрудник и бесспорно достоин присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Заведующий лаборатории №1.6 ОИВТ РАН

к.ф.-м.н., доцент

И.В. Морозов

Учёный секретарь ОИВТ РАН

д.ф.-м.н.



Р.Х. Амиров