

«Утверждаю»

Зам. директора

Федерального государственного

бюджетного учреждения науки

Институт проблем химической физики

Российской академии наук (ИПХФ РАН),

д-р хим. наук, профессор Э.Р.Бадамшина



*Бадамшина*

*Э.Р.Бадамшина*

2021 г.

## ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу

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

Диссертационная работа Лавриненко Ярослава посвящена исследованию свойств неидеальной электрон-ионной плазмы с использованием компьютерного моделирования при помощи метода динамики волновых пакетов для построения уравнения состояния, изоэнтроп сжатия, ударных адиабат и изучения динамических процессов в сильно неидеальной водородной (дейтериевой) плазме.

**Актуальность** работы связана с интересом к разработке новых методов атомистического моделирования, способных с хорошей точностью учитывать квантовые эффекты в веществе высокой плотности, обладающих высокой производительностью и способностью моделировать неравновесные процессы в том числе для задач физики неидеальной плазмы, которую отличают сильные межчастичные взаимодействия, затрудняющие применение

существующих теоретических моделей. Исследование неидеальной плазмы важно для решения фундаментальных проблем строения вещества, адекватного описания природных процессов и явлений и для осуществления современных и перспективных инженерных приложений.

**Новизна** полученных результатов заключается в создании новой модели неидеальной электрон-ионной плазмы и основанного на этой модели подхода для компьютерного моделирования - метода молекулярной динамики с волновыми пакетами и теории функционала плотности (МДВП-ФП). Оригинальность предложенного метода заключается в том, что для определения полной энергии системы электронов кинетическая энергия и электростатические вклады рассчитываются методом МДВП, а обменно-корреляционная энергия и ее производные рассчитываются путем вычисления функционала электронной плотности, получаемой из параметров волновых пакетов и, в частности, таких как их положение и ширина.

В работе впервые предложен новый способ ограничения ширины волновых пакетов для свободных электронов, основанный на специальном типе граничных условий и связанный с ним подход к расчету термодинамических параметров пространственно ограниченной плазмы.

Предложенный метод обладает рядом уникальных особенностей, таких как высокая скорость вычислений, возможность моделирования неадиабатических процессов и более точный учет квантово-механических эффектов в сравнении с исходным методом МДВП и классическим методом молекулярной динамики.

**Научная и практическая значимость** полученных результатов состоит в следующем:

- Разработана модель неидеальной электрон-ионной плазмы, основанная на представлении электронов в форме гауссовских волновых пакетов с учетом обменно-корреляционного взаимодействия, выраженного через функционал электронной плотности.

- Предложен новый метод компьютерного моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы, основанный на комбинации метода молекулярной динамики с волновыми пакетами и теории функционала плотности.

- Разработан алгоритм расчета обменно-корреляционного взаимодействия на адаптивной пространственной сетке, существенно повышающий скорость проведения моделирования.

- Проведена адаптация алгоритма расчета обменно-корреляционного взаимодействия для использования на гибридных вычислительных системах, содержащих графические ускорители.

- Проведен расчет уравнения состояния водородной плазмы в широком диапазоне температур до 50 кК и концентраций электронов до  $10^{24}$  1/см<sup>3</sup>, расчет ударной адиабаты дейтерия до давлений 350 ГПа и, на основе разработанного алгоритма для моделирования изоэнтропического сжатия с использованием метода МДВП-ФП, рассчитана изоэнтропа сжатия дейтерия до плотностей 15 г/см<sup>3</sup>.

- Показана возможность применения метода МДВП-ФП для определения скорости электрон-ионной релаксации в неидеальной плазме.

Степень достоверности полученных результатов является высокой, что подтверждается, с одной стороны, изложением материалов диссертационной работы в рецензируемых изданиях, индексируемых в системах Web of Science и Scopus, а с другой стороны, непротиворечивостью полученных закономерностей и данных, известных из научной литературы. В работе использованы современные математические методы и методы математического моделирования. Обсуждение опирается на надежно установленные факты и закономерности. Все выводы соответствуют содержанию разделов диссертации.

## **Структура и общее содержание диссертационной работы**

Диссертационная работа Лавриненко Ярослава по содержанию и структуре отвечает научно-квалификационной работе на соискание ученой степени кандидата наук. Работа изложена на 127 страницах машинописного текста, проиллюстрирована xx рисунками и содержит 5 таблиц. Работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, содержащего 138 наименований.

*Во введении* изложены цели и актуальность работы, обоснована научная новизна и значимость проведенных исследований, представлены положения, выносимые соискателем на защиту, кратко изложено содержание глав диссертации.

*Первая глава* представляет собой обзор имеющихся на данный момент работ по экспериментальному и теоретическому исследованию неидеальной плазмы. В главе кратко описаны основные характеристики рассматриваемого в данной работе вещества. Кроме того, глава содержит описание численных методов атомистического моделирования, используемых в настоящее время для изучения неидеальной плазмы. Особое внимание уделено методу молекулярной динамики волновых пакетов (МДВП), использование и модификация которого описаны в последующих главах.

*Во второй главе* представлена оригинальная модель неидеальной плазмы, основанная на модифицированном методе динамики волновых пакетов (МДВП-ФП). Основными целями модификации оригинального метода МДВП является устранение “расплывания” волновых пакетов и повышение точности учета квантовых эффектов без существенной потери вычислительной производительности. В качестве решения первой проблемы предлагается использовать отражающие граничные условия. Этот подход обеспечивает ограничение ширины слабосвязанных волновых пакетов, но требует учета влияния граничных условий на рассчитываемые характеристики плазмы. В диссертации приводится обоснование метода, основанное на отсутствии зависимости результатов от размера моделируемой системы.

Повышение точности моделирования систем при высокой плотности плазмы достигается введением в гамильтониан системы дополнительных членов, описывающих обменно-корреляционную энергию с помощью функционала электронной плотности. Для построения функционала предлагается использовать приближение локальной электронной плотности.

*Третья глава* посвящена описанию численного алгоритма и проверке его эффективности. Наиболее ресурсоемкой частью алгоритма является расчет обменно-корреляционной энергии путем интегрирования по трехмерной пространственной сетке. Для повышения быстродействия метода предлагается построение адаптивных пространственных сеток, использование графических ускорителей и многоядерных вычислительных систем (суперкомпьютеров). Это позволяет существенно повысить быстродействие программной реализации метода и использовать его для моделирования систем из сотен и тысяч частиц.

*В четвертой главе* представлены результаты применения предложенного метода МДВП-ФП для моделирования водородной и дейтериевой плазмы. Объединение МДВП с теорией функционала плотности позволило повысить точность описания молекулярных состояний водорода, а также выполнить моделирование неидеальной плазмы с концентрацией электронов до  $10^{25}$  см<sup>-3</sup>, что находится за пределами применимости методов классической молекулярной динамики и оригинального метода МДВП. Полученная ударная адиабата дейтерия удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными и результатами моделирования другими квантово-механическими методами, за исключением области низких температур, где наблюдается заметное завышение наблюдаемых значений давления в методе МДВП-ФП.

*В пятой главе* представлены результаты расчета изоэнтропы сжатия дейтерия, выполненного методом МДВП-ФП. Для сравнения приводятся результаты расчета изоэнтропы традиционным методом, основанным на решении уравнения Зельдовича, а также методом последовательного изоэнтропического сжатия, что существенно ускоряет процесс

моделирования. Продемонстрировано согласие кривых, получаемых различными методами, а также согласие полученных значений с данными эксперимента.

Помимо этого, на примере расчета электрон-ионной релаксации продемонстрирована возможность использования метода МДВП-ФП для исследования неравновесных состояний и релаксационных процессов, что недоступно в методах квантовой молекулярной динамики, основанных на адиабатическом приближении.

*В заключении* сформулированы основные результаты работы.

К **основным результатам**, полученным автором, и имеющим несомненную научную значимость, следует отнести:

1. Предложена модель неидеальной электрон-ионной плазмы, основанная на представлении электронов в форме гауссовских волновых пакетов и учете обменно-корреляционного взаимодействия, выраженного через функционал электронной плотности. Показано, что использование отражающих граничных условий позволяет решить проблему расплывания волновых пакетов, а влияние этого типа граничных условий на измеряемые характеристики плазмы можно учесть за счет анализа профиля электронной плотности внутри расчетной ячейки.

2. На базе предложенной модели разработан эффективный метод компьютерного моделирования неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества. Показано, что расчет обменно-корреляционного взаимодействия может быть существенно ускорен за счет использования адаптивной пространственной сетки и применения графических ускорителей, а интеграция применяемого алгоритма в пакет LAMMPS позволяет выполнять расчеты на суперкомпьютерных кластерах с ускорением до десятков раз.

3. С помощью метода МДВП-ФП исследованы равновесные свойства неидеальной плазмы водорода и дейтерия. На примере молекулы водорода показано, что учет обменно-корреляционного взаимодействия улучшает точность моделирования многоэлектронных систем. Расчет уравнения

состояния неидеальной плазмы водорода показывает преимущества метода в области высокой концентрации электронов и дает качественное согласие с результатами более трудоемкого квантового метода Монте-Карло.

4. На примере расчетов изоэнтропы сжатия плазмы дейтерия и электрон-ионной релаксации в неизотермической неидеальной плазме водорода продемонстрированы возможности предложенного метода для изучения динамических и неравновесных процессов за пределами адиабатического приближения, что предоставляет новый уникальный инструмент для исследования свойств вещества с высокой плотностью энергии.

#### **Рекомендации по использованию результатов и выводов работы**

Полученные в диссертационной работе новые результаты в области компьютерного моделирования процессов в сильно неидеальной плазме и в веществе с высокой плотностью энергии представляют несомненный интерес для специалистов в данных областях. С полученными результатами целесообразно ознакомить следующие организации: Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, Институт проблем химической физики РАН, НИЦ Курчатовский Институт, Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики и др.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертации докладывались на 17 российских и международных конференциях как у нас в стране, так и за рубежом.

Список публикаций по материалам диссертации представлен 6 статьями в авторитетных рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК и индексируемых системами Web of Science и Scopus.

По диссертационной работе можно сделать следующие **замечания**.

1. Текст диссертации изобилует большим количеством орфографических ошибок и опечаток, особенно в первой половине диссертации, что затрудняет чтение диссертации.

2. В диссертации уделено значительное внимание анализу части экспериментов, в частности, экспериментов по отражению лазерного излучения от ударно-сжатой плазмы, но в дальнейшем изложении эти данные никак не потребовались. Не совсем понятна практическая цель этого анализа.

3. В диссертации проведено сравнение полученных данных по ударному сжатию дейтерия в координатах плотность-давление и указано хорошее совпадение с данными эксперимента Sandia по максимальной степени сжатия дейтерия, в то же время, не прокомментировано, что это максимальное сжатие достигнуто при совершенно других, отличающихся в 4 раза давлениях.

4. Автор почему-то ограничился лишь американскими экспериментальными данными, пренебрегая данными эксперимента, полученными в Сарове в 2001-2005 годах.

5. На наш взгляд, следовало бы дополнительно привести сравнение результатов расчета в координатах плотность-температура, что существенно дополнило бы впечатление о работоспособности предлагаемого метода.

Все перечисленные выше замечания не носят принципиальный характер и не затрагивают основных результатов диссертационной работы. Изложенные в диссертации результаты достаточно хорошо обоснованы и прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях. На основе проведенных исследований опубликовано 6 научных статей в изданиях, рекомендуемых ВАК и индексируемых в Scopus и Web of Science.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

### **Заключение по диссертационной работе**

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая по актуальности поставленных задач,



научной новизне, теоретической и практической значимости, достоверности полученных результатов, степени обоснованности выводов, объему выполненных исследований и уровню публикаций в открытой печати полностью соответствует квалификационным требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Лавриненко заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Диссертация была заслушана и обсуждена на заседании семинара Отдела экстремальных состояний вещества ФГБУН ИПХФ РАН 26 ноября 2021 года (протокол № 10).

Отзыв составил:

Главный научный сотрудник,

Член-корреспондент РАН



В.Б. Минцев

Ученый секретарь ИПХФ РАН

д.х.н.



Б.Л. Психа

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук 142432, Московская область, г. Черноголовка, проспект академика Семенова, 1 +7(495) 993-57-07, +7 (496) 522-44-74, e-mail: director@icp.ac.ru, office@icp.ac.ru.