

Сведения
о ведущей организации

Полное наименование организации	Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук"
Сокращенное наименование	ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
Организационно-правовая форма	Федеральное государственное учреждение
Тип организации	Научная организация
Ведомственная принадлежность	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Почтовый адрес	125047, г. Москва, площадь Миусская, 4
Адрес сайта	http://www.keldysh.ru
Адрес электронной почты	office@keldysh.ru
Телефон	+7 499 978-13-14

СПИСОК

основных публикаций организации по теме диссертации соискателя в рецензируемых научных изданиях

№	Название публикации	Тип	Соавторы	Выходные данные	Перечень ВАК
1	Superfast calculation method of the composition and thermodynamics of a multicomponent plasma	Научная статья	Белов А. А., Димаков В. С., Козлитин И. А.	Mathematical Models and Computer Simulations. 2021. Vol. 13. No. 4. P. 692–697. DOI: 10.1134/S2070048221040062.	Web of science
2	Верификация моделей микрополя по спектрам плотной лазерной плазмы	Научная статья	Белов А. А., Калиткин Н. Н.	Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2021. Т. 85. № 1. С. 52–58. DOI: 10.31857/S0367676521010063.	Да
3	Асимптотические решения кинетических уравнений Власова–Пуассона–Ландау	Научная статья	Бобылев А. В., Потапенко И. Ф.	Современная математика. Фундаментальные направления. 2025. Т. 71. № 1. С. 55–70. DOI: 10.22363/2413-	Да

				3639-2025-71-1-55-70.	
4	Релятивистский кулоновский взрыв сферической микроишени	Научная статья	Ковалев В. Ф., Быченков В. Ю.	Квантовая электроника. 2023. Т. 53. № 3. С. 210–216.	Да
5	Расчёт термодинамических и структурных характеристик жидких углеводородов методом Монте-Карло	Научная статья	Теплухин А. В.	Журнал структурной химии. 2021. Т. 62. № 1. С. 73–85. DOI: 10.26902/JSC_id66713.	Да
6	Квазиклассическая аппроксимация данных по потенциалам ионизации многозарядных ионов сверхтяжёлых элементов	Научная статья	Шпатаковская Г. В.	Физика плазмы. 2023. Т. 49. № 10. С. 1016–1023. DOI: 10.31857/S0367292123600747.	Да
7	Аналитическое решение смешанных задач для уравнений одномерной ионизации в случае постоянных скоростей атомов и ионов	Научная статья	Гавриков М. Б., Таюрский А. А.	Дифференциальные уравнения. 2023. Т. 59. № 10. С. 1335–1356. DOI: 10.31857/S0374064123100035.	Да
8	О формуле обращения линейного квантования и уравнении эволюции функции Вигнера	Научная статья	Борисов Л. А., Орлов Ю. Н.	Труды Математического института имени В. А. Стеклова. 2021. Т. 313. С. 23–32. DOI: 10.4213/tm4195.	Да
9	Обобщённые когерентные состояния и случайные операторы сдвига	Научная статья	Кальметьев Р. Ш., Орлов Ю. Н., Сакбаев В. Ж.	Труды Математического института имени В. А. Стеклова. 2024. Т. 324. С. 124–131. DOI: 10.4213/tm4385.	Да
10	Диффузия квантовых состояний, порождённая классическим случайным блужданием	Научная статья	Орлов Ю. Н., Сакбаев В. Ж.	Современная математика. Фундаментальные направления. 2025. Т. 71. №	Да

				2. С. 275–286. DOI: 10.22363/2413-3639-2025-71-2-275-286.	
11	Моделирование стохастического управления в задачах случайного блуждания	Научная статья	Кальметьев Р. Ш., Орлов Ю. Н., Сакбаев В. Ж.	Математическое моделирование. 2025. Т. 37. № 3. С. 113–126. DOI: 10.20948/mm-2025-03-08.	Да
12	Формулы Фейнмана–Каца для решений нестационарно возмущённых эволюционных уравнений	Научная статья	Орлов Ю. Н., Сакбаев В. Ж.	Журнал вычислительной математики и математической физики. 2025. Т. 65. № 1. С. 69–87. DOI: 10.31857/S0044466925010077.	Да
13	Ionization balance of non-LTE plasmas from an average-atom collisional-radiative model	Научная статья	Ovechkin A. A., Loboda P. A., Korolev A. S., Kolchugin S. V., Vichev I. Yu., Solomyannaya A. D., Kim D. A., Grushin A. S.	Matter and Radiation at Extremes. 2022. Vol. 7. No. 6. Art. 064401. DOI: 10.1063/5.0098814.	Web of science
14	Численное моделирование разлёта плазменной струи в лабораторном эксперименте	Научная статья	Савенко Н. О., Урвачев Е. М., Лосева Т. В., Грушин А. С., Поклад Ю. В., Гасилов В. А.	Физика плазмы. 2025. Т. 51. № 6. С. 624–634. DOI: 10.31857/S0367292125060057.	Да
15	Non-conservation of linear momentum in widely used hierarchical methods in gravitational gas dynamics	Научная статья	Potashov M. S., Yudin A. V.	Numerical Methods and Programming. 2024. Vol. 25. No. 4. P. 396–412. DOI: 10.26089/NumMet.v25r430.	Да

Ученый секретарь
к.ф.-м.н.

Давыдов Александр Александрович





ЖДАЮ
Директор ИИИ РАН
И.Б. Яковлевский
2026 г.
М.П.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного учреждения
Федеральный исследовательский центр «Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша Российской академии наук»
на диссертационную работу Демьянова Георгия Сергеевича
«Эффективный учет дальнего действия в моделировании классических и
квантовых кулоновских систем с помощью усредненного по углам
потенциала Эвальда» на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы

Актуальность работы. Диссертация Георгия Сергеевича Демьянова посвящена решению важной фундаментальной и прикладной задачи — разработке эффективных методов моделирования классических и квантовых кулоновских систем с корректным учетом дальнедействующего взаимодействия на основе усредненного по углам потенциала Эвальда, а также применению этих методов к расчету термодинамических и структурных свойств однокомпонентной и невырожденной водородной плазмы.

Исследование кулоновских систем имеет принципиальное значение для физики плазмы, статистической физики, астрофизики и вычислительного материаловедения. Именно кулоновское взаимодействие в значительной степени определяет свойства вещества на микроскопическом уровне, однако его дальнедействующий характер, условная сходимость при периодических граничных условиях и необходимость согласованного учета квантовых эффектов делают численное моделирование таких систем исключительно сложной задачей. От точности соответствующих методов зависят качество широкодиапазонных уравнений состояния, корректность интерпретации экспериментальных данных и надежность расчетов, используемых при описании плотной плазмы, астрофизических объектов и неидеальных двухкомпонентных систем. В этой связи создание вычислительно

эффективных и в то же время физически обоснованных подходов к моделированию кулоновских систем представляется безусловно актуальным.

В диссертации используются современные методы численного эксперимента и квантово-статистического описания: метод Монте-Карло, в том числе в представлении интегралов по траекториям, молекулярная динамика, формализм матрицы плотности и псевдопотенциалов взаимодействия. Существенным достоинством работы является то, что предложенные подходы не ограничиваются чисто формальным выводом, а доведены до программной реализации и последующего применения к расчету энергии, давления, радиальных функций распределения, степени ионизации и состава плазмы.

Научная новизна диссертационной работы определяется тем, что в ней последовательно разработан и реализован новый подход к учету дальнего действия в классических и квантовых кулоновских системах на основе усреднения потенциала Эвальда по углам. Автором получены аналитические выражения для усредненного по углам потенциала Эвальда и соответствующих вкладов в энергию и давление одно- и двухкомпонентных систем, впервые исследовано влияние дальнего действия на сходимость энергии однокомпонентной плазмы по числу частиц, получено новое уравнение состояния ОКП в широком диапазоне параметра неидеальности. Существенно, что в работе также впервые получены высокотемпературная кулоновская матрица плотности и псевдопотенциал Кельбга с учетом дальнего действия, а также предложен способ стабилизации моделирования невырожденной водородной плазмы при низких температурах, устраняющий нефизическую кластеризацию и приближенно учитывающий принцип Паули.

Теоретическая и практическая значимость работы. Полученные в диссертации результаты имеют как методологическую, так и прикладную ценность. Предложенная автором схема учета дальнедействующих взаимодействий на основе усредненного по углам потенциала Эвальда позволяет резко повысить вычислительную эффективность моделирования по сравнению со стандартным суммированием Эвальда. Это открывает возможность расчета термодинамических свойств систем с существенно большим числом частиц и, как следствие, более надежного выхода к термодинамическому пределу.

Результаты, полученные в диссертации, представляют существенную значимость для развития физики неидеальной плазмы, статистической физики кулоновских систем и математических методов их численного моделирования. Разработанный автором подход к эффективному учету дальнедействующего взаимодействия на основе усредненного по углам

потенциала Эвальда расширяет вычислительные возможности моделирования классических и квантовых кулоновских систем, позволяя проводить расчеты с высокой точностью в более широком диапазоне параметров. Полученные в работе уравнение состояния однокомпонентной плазмы, результаты для невырожденной водородной плазмы, а также реализованные алгоритмы расчета энергии, давления, структурных функций и степени ионизации могут быть использованы при построении и уточнении широкодиапазонных моделей плазмы, интерпретации расчетных и экспериментальных данных и разработке специализированных вычислительных комплексов для исследования неидеальных двухкомпонентных систем.

Диссертационная работа изложена на 199 страницах машинописного текста и включает предисловие, список сокращений и обозначений, введение, пять глав, заключение, одно приложение и список литературы, содержащий 218 наименований. Работа содержит 35 рисунков и 18 таблиц.

Во введении обосновывается актуальность темы диссертационной работы, формулируются ее цели, научная новизна и практическая значимость, перечислены положения, выносимые на защиту. Указано, что все представленные в диссертации результаты, их интерпретация, выводы и заключение сформулированы автором лично, а содержание диссертации и положения, выносимые на защиту, отражают личный вклад автора в опубликованные работы по теме диссертации.

Первая глава посвящена термодинамическим свойствам классических кулоновских систем при периодических граничных условиях. В ней рассматриваются вопросы условной сходимости потенциальной энергии, подробно анализируется метод Эвальда, выводится усредненный по углам потенциал Эвальда для одно- и двухкомпонентных систем, а также обсуждаются термодинамические функции классической плазмы. Существенным результатом главы является установление связи между зависимостью потенциала от объема ячейки и дополнительным вкладом в давление, необходимым для термодинамической согласованности.

Во второй главе изложено представление термодинамических свойств невырожденной водородной плазмы в терминах матрицы плотности с учетом дальнего действия. Автор рассматривает высокотемпературное решение Кельбга, строит соответствующий псевдопотенциал взаимодействия с учетом усредненного по углам потенциала Эвальда, обсуждает представление термодинамики через интегралы по траекториям и анализирует учет

принципа Паули для электронов с одинаковой проекцией спина. Важным элементом главы является предложенная модификация межчастичных сил, позволяющая предотвратить образование нефизических кластеров в квазиклассическом моделировании.

В третьей главе содержится описание численных методов, используемых в диссертации. В ней последовательно изложены особенности моделирования методом Монте–Карло и молекулярной динамики, в том числе в представлении интегралов по траекториям, обсуждаются вопросы суммирования взаимодействий в классическом и квантовом случаях, анализируются способы оценки статистической погрешности и поиска термодинамического предела. Кроме того, в главе дан алгоритм расчета состава и степени ионизации водородной плазмы, что является необходимой основой для интерпретации результатов последующей главы.

В четвертой главе приведены результаты моделирования однокомпонентной плазмы методом Монте–Карло в широком диапазоне параметра неидеальности. Выполнена верификация процедуры расчета с использованием постоянных Маделунга, исследованы радиальные функции распределения, подробно проанализирована сходимость по числу частиц при различных потенциалах взаимодействия и показано преимущество учета дальнего действия в области умеренной и сильной неидеальности. Особо следует отметить получение термодинамического предела энергии ОКП на основе расчетов с числом частиц вплоть до миллиона и построение нового уравнения состояния флюида ОКП. В главе также рассмотрены вопросы вычислительной производительности и обсуждены некоторые аномальные результаты моделирования.

В пятой главе рассмотрены результаты моделирования невырожденной водородной плазмы. В первой части главы исследована область слабого взаимодействия методом Монте–Карло, включая представление интегралов по траекториям, и проанализирована вероятность образования связанных состояний. Далее приводятся результаты молекулярно-динамического моделирования, выполнена верификация метода на основе сопоставления с точными расчетами, исследованы радиальные функции распределения, степень ионизации и состав плазмы в зависимости от параметра неидеальности. Получены значения энергии и давления в термодинамическом пределе, построено табличное уравнение состояния невырожденной водородной плазмы. В Приложении А приведено описание разработанной автором программы KelbgLIP, предназначенной для расчета

матрицы плотности, псевдопотенциала Кельбга, а также действия и энергии с учетом дальнего действия.

Выводы, приведенные автором в *заключении* диссертации, кратко излагают основные результаты, полученные автором в диссертационной работе, и находятся в соответствии с научными положениями.

Замечания по диссертационной работе.

Диссертационное исследование имеет следующие недостатки:

1. При очень сильной теоретической части 1 и 2-ой глав их связь с расчётами 3-5 глав неясна.
2. В разделе 1.2. рассматривается усредненный по углам потенциал Эвальда (стр. 47). Добавив усреднение по радиусу, можно прийти к методу Чезаре – потенциал станет вести себя лучше, а от громоздкого суммирования по Эвальду можно будет вовсе отказаться. Судя по всему, задача решается значительно проще.
3. В разделе 2.1.1. рассматривается псевдопотенциал Кельбга в общем виде (стр. 82 – 83). Судя по выкладкам в приложении [162] для первого порядка обнуление возникнет еще раньше. Уравнение (2.15) точное, но дальше оно используется только в первом порядке, как бы обнуляя метод Кельбга. Важно объяснить, почему нельзя в исходном уравнении использовать то же приближение, и почему метод Кельбга эффективен?
4. В разделе 2.2. (стр. 93) указывается, что в случае водородной плазмы в работе 2004 года [166] был предложен улучшенный псевдопотенциал Кельбга.

Интересно, существуют ли альтернативы потенциалу Кельбга? По крайней мере, этот вопрос стоило бы обсудить.

5. В разделе 3.1 высказывается следующее (стр. 104): «Вообще говоря, средние в уравнениях (3.1) – (3.2) не обязаны быть равны. Однако в данной работе будет предполагаться их равенство; это предположение есть эргодическая гипотеза. Таким образом, выбор способа усреднения определяется лишь удобством выбора метода моделирования и поведением каждой системы в конкретном случае».

Насколько эргодическая гипотеза неверна зависит от свойств системы. Имеется «теорема Больцмана-Рисса»: временные средние совпадают с экстремалами Больцмана: из нее следует, что временные средние

определяются линейными законами сохранения для соответствующего уравнения Лиувилля (см. В. В. Веденяпин, С. З. Аджиев, «Энтропия по Больцману и Пуанкаре», УМН, 69:6(420) (2014), 45–80). Т.е. в (3.2) временные средние определяются по Больцману и Пуанкаре для функции распределения. Тогда появляется шанс совпадения (3.1) и (3.2), если нет законов сохранения.

6. В разделе 4.1. (стр. 126 – 128) приводится расчет постоянных Маделунга. Следовало бы уделить внимание раскрытию физического смысла постоянной Маделунга. Что это за величина? Какую характеристику системы она описывает? В таблицах 4.1 – 4.2 приводится точное значение – что это значит?
7. В разделе 5.2.2. (стр. 161) вводится обозначение «точный псевдопотенциал, полученный из матрицы плотности». Однако встаёт вопрос: существует ли в принципе точный псевдопотенциал? В реальности число степеней свободы в системе настолько велико, что описать его одним лишь псевдопотенциалом сложно. Важным здесь может оказаться расширение числа учитываемых степеней свободы, хотя бы за счёт введения функции распределения. Стационарные решения уравнений Власова для кулоновского потенциала образуют весьма богатое множество, и именно в этом направлении видится возможность обобщения метода Дебая-Хюккеля.
8. В работе не рассматривается возможность использования аппарата кинетической теории, и в частности уравнений типа Власова-Пуассона, применительно к кулоновским системам, хотя такой подход видится достаточно перспективным.

Отмеченные недостатки не являются принципиальными и не снижают значимости полученных результатов. Все поставленные в диссертационной работе цели достигнуты и соответствуют положениям, выносимым на защиту.

Диссертационная работа Демьянова Георгия Сергеевича «*Эффективный учет дальнего действия в моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда*» представляет собой законченное научное исследование на **актуальную** тему, и содержит **новые** важные результаты, которые **могут применяться для решения различных теоретических и прикладных задач физики плазмы** в следующих организациях: ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ФТИ им. А.Ф. Иоффе, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», АО «ГНЦ РФ – ФЭИ»,

РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН.

Достоверность результатов продемонстрирована путем их сравнения с экспериментальными данными и теоретическими оценками. Материалы диссертации **опубликованы** в 9 (девяти) статьях в научных журналах, рекомендованных ВАК для опубликования материалов диссертационных исследований и индексируемых базой данных «Web of Science». Материалы диссертации **докладывались** на 11 (одиннадцати) всероссийских и международных конференциях, начиная с 2022 года.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

Диссертация Демьянова Г.С. была обсуждена и одобрена на семинаре «Математическая физика» им. М.В. Масленникова под председательством д.ф.-м.н. Веденяпина В.В. 26 марта 2026 г. в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Результаты представляются достоверными и научно обоснованными, обладают научной новизной, теоретической и практической значимостью. Диссертация 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. (ред. 07.06.2021 г.), а её автор, Демьянов Георгий Сергеевич, заслуживает присвоения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – «Физика плазмы».

Отзыв составили:

ведущий научный сотрудник
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, д.ф.-м.н. Веденяпин Виктор Валентинович

ведущий научный сотрудник
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, д.ф.-м.н. Сакбаев Всеволод Жанович

научный сотрудник
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, к.ф.-м.н. Вичев Илья Юрьевич

Подписи Веденяпина В.В., Сакбаева В.Ж. и Вичева И.Ю. заверяю.

Ученый секретарь
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, к.ф.-м.н. Давыдов Александр Александрович

Полное наименование организации: Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук"

Адрес организации: 125047, Москва, Миусская пл., д.4

Тел.: +7 499 978-13-14

Факс: +7 499 972-07-37

E-mail: office@keldysh.ru

Адрес официального сайта в сети «Интернет»: <https://keldysh.ru/>