

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

Диссертация Лавриненко Ярослава посвящена разработке метода компьютерного моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы. Неидеальная плазма относится к «экстремальным» состояниям, возникающим при интенсивных энергетических воздействиях на вещество в лабораторных условиях или в астрофизических объектах. В отличие от идеальной (газовой) плазмы при моделировании плотных плазменных сред из-за сильной роли столкновительных процессов не всегда оказываются применимы сеточные методы, основанные на решении уравнений для сплошной среды. В этом случае широкое применение находят атомистические методы, которые могут служить начальным этапом исследования, описывающим микроскопические процессы в плазме. Результаты этого этапа затем уже могут использоваться в моделях большего масштаба.

Метод моделирования, предложенный в работе Я. Лавриненко, основан на комбинации молекулярной динамики и теории функционала плотности. При решении уравнения движения ионы считаются классическими частицами, а электроны – гауссовскими волновыми пакетами, что позволяет достаточно точно описать связанные состояния (атомы и молекулы), а также близкие столкновения частиц. Для учета многочастичных квантовых эффектов применяется расчет функционала электронной плотности. Расчет уравнений движения частиц выполняется с помощью разностной схемы 2-го порядка, а вычисление дополнительной обменно-корреляционной энергии связан с интегрированием по трехмерной пространственной сетке.

Численная реализация представленного метода имеет немало проблем, связанных, например, с граничными условиями или точностью вычисления функционала электронной плотности на сетке. Обсуждению этих проблем в работе уделено достаточно много внимания, в результате чего автор предлагает решения, которые выглядят достаточно обоснованными и убедительными. В частности, предлагается метод расчета термодинамических свойств плазмы по внутренней области, удаленной от границ расчетной ячейки, а также использование адаптивных пространственных сеток для повышения точности расчета обменно-корреляционного взаимодействия.

Отдельно следует отметить использование автором современных методов параллельного программирования и адаптацию расчетной программы для вычислений на гибридных суперкомпьютерных кластерах, включающих графические ускорители. Проведенные автором оценки показывают, что полученный алгоритм имеет хорошую эффективность распараллеливания при использовании до 100 процессорных ядер, а применение графических ускорителей повышает скорость расчета в 10-100 раз.

Сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными и другими теоретическими работами для плазмы водорода и дейтерия убедительно демонстрирует эффективность и высокую точность разработанного метода.

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.

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.

Профессор кафедры вычислительной физики МФТИ,
член-корреспондент РАН, доктор физ.-мат. наук

И.Б. Петров

Подпись И.Б. Петрова заверяю.

Ученый секретарь Ученого совета МФТИ
к.ф.-м.н., доцент



Е.Г. Евсеев

Данные лица, представившего отзыв на автореферат.

30.11.21

Петров Игорь Борисович, член-корреспондент РАН, доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры вычислительной физики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», адрес: 141701, Российская Федерация, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9, телефон: (495) 408-73-81, e-mail: petrov@mipt.ru.