Государственная корпорация по атомной энергии
"Росатом"
Федеральное государственное унитарное предприятие
РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
ФГУП "РФЯЦ – ВНИИЭФ"
607188, Нижегородская обл. г.Саров, пр. Мира, д.37
Телетайп 151535 "Мимоза" Факс 83130 29494
E-mail staff@vniief.ru

05.11.2015 № 195-96/159173
На № _____ от _____

УТВЕРЖДАЮ
Директор РФЯЦ-ВНИИЭФ
_____ В.Е. Костюков
_____ 2015

ОТЗЫВ

Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики на диссертацию Луцкого Константина Игоревича «Широкодиапазонная модель термодинамики газовой и жидкой плазмы», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Актуальность работы. Численное моделирование течений сплошных сред, построение моделей взаимодействия лазерного излучения и пучков частиц с плазмой, решение многих других задач прикладной физики и техники невозможно без использования уравнений состояния (**УРС**) плазмы. Поэтому весьма актуальными задачами являются построение более точных моделей, создание эффективных алгоритмов и программных комплексов расчёта и аппроксимации опорных таблиц термодинамических функций (**ТДФ**) уравнений состояния. Решению этих задач и посвящена данная диссертация.

Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения.

Во **введении** (**глава 1**) сформулирована цель работы – создать единый УРС газообразной и жидкой плазмы. Обоснована актуальность диссертации, новизна, значимость и достоверность результатов. Дан обзор публикаций по теме работы, кратко описано содержание диссертации.

2025/2369

Глава 2 содержит описание построения УРС газообразной плазмы в приближении ионизационного равновесия (обобщённая модель Саха). При малых плотностях газовой фазы плазму можно считать идеальным газом. При увеличении плотности надо вводить поправки для учёта взаимодействия заряженных частиц. В диссертации рассмотрены три известные модели учёта поправок – классическая модель Дебая, модель однородного электронного газа (**ОЭГ**) и модель простых гармонических осцилляторов (**SHO**) библиотеки SESAME (ЛАНЛ США). В этих моделях суммарный потенциал *U(r)* ионного остова и потенциал свободных электронов на границе сферической ячейки *R* равен нулю. Но тогда потенциал ионного остова заряда z на границе равен $U_{core}(R) = z / R$. Поскольку потенциал определяется с точностью до константы, К.И. Луцкий предложил естественную модель, в которой считается, что на границе ячейки потенциалы ионного остова и свободных электронов по отдельности равны нулю. Тогда потенциал остова $U_{core}(R) = z / r - z / R$. Из условия электронейтральности следует обычное условие, что производная потенциала на границе ячейки равна нулю. Модель в диссертации названа «модель заземлённой сферы с краевым условием трёх нулей». В приближении ОЭГ в этой модели поправка к энергии на взаимодействие равна $\Delta E = -0.4z^2 / R$, что примерно в 2.5 раза меньше, чем общепринятое значение. В приближении неоднородного электронного газа в диссертации получено более точное выражение для потенциала через гиперболические функции. В пределе больших плотностей с его помощью получается вышеуказанная поправка к энергии. Выражение сильно отличается от получающегося в модели SHO.

Оценить качество любой модели можно сравнением с данными, сосчитанными в других моделях, и (или) сравнением с экспериментом. К.И. Луцкий сосчитал степень ионизации атомов меди в модели Саха с заземлённой сферой (при температуре равной нулю в зависимости от плотности) в приближении ОЭГ с зарядом Хольцмарка. Выполнено сравнение со степенью ионизации в модели Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками (модель **ТФП** Д.А. Киржница). Оказалось, что данные по ионизации электронов с верхних оболочек атомов меди по обеим моделям практически совпадают. Для нижних оболочек (высокие плотности) кривая ТФП пересекает график ступенчатой ионизации по Саха в середине ступенек. Это является приемлемой апробацией достоверности модели газообразной плазмы, которую предложил К.И. Луцкий.

Глава 3 посвящена описанию построения УРС жидкой плазмы. Когда ионные остовы занимают почти весь свободный объём, плазму считают жидкой и описывают в сферически симметричном ячеечном приближении. В диссертации для электронов в ячейке принята модель ТФП. Вклад колебаний ядер в среде свободных электронов взят в модели осциллирующих ядер Н.Н. Калиткина, но с усовершенствованием – осцилляции определяются функцией плотности холодных электронов. Модификация модели не нарушила её термодинамическую согласованность. Уравнениями модели ТФП является система двух нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Для решения системы К.И. Луцкий построил высокоточную консервативную разностную схему, расчёты по ней проведены методом дополненного вектора.

В диссертации численные процедуры и алгоритмы расчёта опорных таблиц ТДФ подробно описаны, мы здесь обратим внимание лишь на следующее обстоятельство. Физическая точность модели ТФП невысокая. Но математическая точность расчётов должна быть существенно больше. Причина в том, что поправки к ТДФ в некоторых случаях имеют знаки, противоположные знакам самих функций. При их сложении может происходить потеря точности. В диссертации на всех этапах численные схемы и алгоритмы расчётов значений ТДФ построены и реализованы К.И. Луцким с высочайшей относительной точностью 10^{-14}. Алгоритмы устойчивы, существенно менее трудоёмкие и, главное, более точны, чем применявшиеся ранее другими авторами. Попутно К.И. Луцкий решил сложную задачу построения аппроксимаций функций Ферми-Дирака полуцелых индексов их производных и интегралов с той же относительной точностью 10^{-14}.

В **главе 4** описано построение широкодиапазонного термодинамически согласованного единого УРС газообразной и жидкой плазмы. Оказалось, что нижняя граница уточнённой модели ионизационного равновесия и верхняя граница модели жидкой плазмы почти совпадают. Это позволило склеить таблицы свободной энергии моделей с помощью интерполяционной формулы (смотри формулу (4.1) на стр. 74 диссертации). Аргументом формулы является отношение объёма занятого остовами ионов к полному объёму. Расчёт термодинамических функций УРС (давление, энергия) выполняется с помощью классических формул термодинамики по таблице термодинамического потенциала - свободной энергии. Поэтому значения этих ТДФ получаются термодинамически согласованными.

Следует отметить, что в УРС из библиотеки SESAME (ЛАНЛ США) склейка ТДФ, сосчитанных в нескольких разных моделях, выполнена формально. Область определения каждой отдельной модели – прямоугольник (чего на практике, конечно, не бывает). Изотермы и изохоры ТДФ на границах прямоугольников плавно «сопрягаются графически». В отделении 08 ИТМФ ВНИИЭФ при построении сплайн-УРС по данным модели Плазма-4 (программа ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) сопряжение с данными ТФПК выполняется с помощью сглаживающих гиперболических сплайнов третьего порядка отдельно для давления и для энергии. В этих двух способах построение УРС выполняется с нарушением термодинамической согласованности. В отделении 08 ИТМФ ВНИИЭФ разработан также термодинамически согласованный способ склейки УРС с использованием термодинамического потенциала в виде взвешенной суммы потенциалов сшиваемых УРС (ВАНТ Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2009. Вып. 1, С. 44-54). Параметр, определяющий вклад потенциалов каждого УРС, задаётся формально, а в диссертации он выбран физически обоснованно. Склейка моделей, реализованная в диссертации, более правильная и является хорошим методическим и практическим достижением диссертанта.

К.И. Луцкий предложил простой и надёжный алгоритм расчёта ударных адиабат Гюгонио. Им выполнено сравнение с экспериментом на главных ударных адиабатах алюминия, меди, железа и свинца в скоростных переменных. Для данных, полученных при выполнении подземных ядерных взрывов, наблюдается хорошее совпадение измерений. Для адиабат, полученных по данным строго теоретической модели, такое совпадение является очень хорошим и подтверждает её высокое качество. При относительно низких давлениях имеются данные, полученные с использованием химических взрывчаток. Расчётные данные для них заметно отклоняются. Отметим, что в отделении 08 ИТМФ по данным в более ранних моделях Плазма-4 и ТФПК, построены сплайн-УРС примерно пятнадцати веществ. При их построении использованы холодные кривые, поправленные по данным измерений. Для этих сплайн-УРС на главных ударных адиабатах имеется очень хорошее совпадение по всей совокупности измерений. Представляется, что, если построить УРС этих веществ с данными тепловых вкладов в модели К.И. Луцкого, будет наблюдаться столь же хорошее, если не лучшее, совпадение с измерениями.

Глава 5 посвящена описанию построения аппроксимации таблиц в модели жидкой плазмы суммой двух отрезков тригонометрических рядов Фурье длиной N и M (оригинальный метод «двойного периода», предложенный Н.Н. Калиткиным). Первый отрезок содержит только чётные гармоники синуса и косинуса, а второй только нечётные. К.И. Луцкий в первых четырёх параграфах главы развивает и обосновывает метод двойного периода. Как показано в диссертации, добавление некоторого количества слагаемых нечётных гармоник второй суммы существенно повышает точность аппроксимации суммой по чётным гармоникам. Доказана сходимость метода, показано, что матрица системы уравнений для определения коэффициентов разложения Фурье хорошо обусловлена. Построен двумерный вариант метода двойного периода.

В модели газообразной плазмы учитывается оболочечная структура атомов и ионов. Поэтому опорные таблицы ТДФ приходится вычислять для каждого элемента таблицы Менделеева. Этих таблиц, естественно, нет в диссертации. В модели жидкой плазмы в приближении ТФП имеется автомодельность по атомному номеру элементов. Поэтому необходимые таблицы ТДФ сосчитаны только для водорода. Эти таблицы аппроксимированы методом двойного периода. Найдены оптимальные значения параметров N и M, при которых в нормах C и L_2 обеспечивается необходимая точность аппроксимации тепловых и холодных вкладов в ТДФ. Расчётно определено, что погрешность значений холодных вкладов не более 0.05%. Погрешность значений тепловых вкладов в норме L_2 не более 0.1%, а в C-норме 1% – 1.5%. Точность на практике вполне достаточная.

В последнем разделе главы получено, что при аппроксимации холодных вкладов полиномами Чебышева приходится использовать полиномы 21 степени, чтобы получить точность примерно вдвое большую, чем даёт метод двойного периода. Поэтому использовать метод двойного периода предпочтительнее.

Глава 6 посвящена описанию программного комплекса ТЕФИС, с помощью которого в диссертации выполнено моделирование теплофизических свойств плазмы, сосчитаны и аппроксимированы опорные таблицы жидкой плазмы в модели ТФП.

В **заключении** чётко сформулированы основные результаты диссертации.

Диссертация написана ясным языком, очень хорошо оформлена. Не имеет особого смысла фиксировать внимание на незначительном количестве опечаток и

стилистических шероховатостей. Отметим только следующие обстоятельства. В диссертации тщательно исследована эффективность аппроксимации ТДФ методом двойного периода. Полезно было бы привести оценки времени счёта. Метод нечётного продолжения в диссертации для аппроксимации ТДФ фактически не используется. Поэтому раздел 5.5, по-видимому, можно было бы опустить, ограничившись ссылками на статьи автора, которые опубликованы в общедоступных журналах. Нет ни обсуждения, ни ссылок на литературные источники данных в базе данных потенциалов ионизации комплекса ТЕФИС. Тем более, что на странице 124 диссертации сказано, что данные есть для 105 элементов таблицы Менделеева, а на стр. 126 – «для всех $Z \leq 103$».

Указанные замечания являются второстепенными и не снижают общий весьма высокий уровень диссертации и значимость её результатов.

Диссертант показал свою высокую квалификацию как физик математик и программист. Основные результаты получены диссертантом лично и опубликованы в 11 работах, 9 из которых в журналах из списка ВАК РФ. Автореферат полно и правильно отражает содержание диссертации.

Диссертация удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям и соответствует специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Константин Игоревич Луцкий заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Отзыв рассмотрен и утверждён на заседании отдела 0820 ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ. Протокол №2 от 29 октября 2015 г.

Отзыв составил:

доктор физико-математических наук

начальник отделения 08 ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ, Р.М. Шагалиев