

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Луцкого Константина Игоревича «Широкодиапазонная модель термодинамики газовой и жидкой плазмы», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертационная работа Луцкого Константина Игоревича «Широкодиапазонная модель термодинамики газовой и жидкой плазмы», посвящена созданию базы данных термодинамических свойств вещества в широком диапазоне плотностей (10^{-6} - 10^5 г/см³) и температур (от температуры плавления до > 2 кэВ).

В основе диссертации лежит построение согласованного широкодиапазонного уравнения состояния плазмы. В области газовой плазмы решаются уравнения Саха. Сделано существенное улучшение учета взаимодействия зарядов. Это позволило обобщить уравнения Саха на нулевую температуру, тем самым разумно описать холодное сильно разреженное вещество. В области плотной плазмы для расчета вклада электронов используется модель Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками (ТФП). Предлагается новый эффективный способ решения уравнений модели ТФП. Делаются модельные улучшения для расчета вклада ядер. Для получения единого широкодиапазонного уравнения состояния предложен новый оригинальный метод склейки моделей, сохраняющий строгую термодинамическую согласованность. Это достигается склейкой термодинамического потенциала – свободной энергии и получением остальных термодинамических функций дифференцированием свободной энергии. Предложены экономичные аппроксимации полученного уравнения состояния, обеспечивающие точность не хуже 1%. Составлен пакет программ, позволяющий для широкого набора веществ ($Z < 103$) проводить расчет термодинамических таблиц и их аппроксимаций, а также главных ударных адиабат.

Полученные результаты являются актуальными и востребованными, так как позволяют рассчитывать термодинамические свойства произвольных веществ в широком диапазоне температур и плотностей оперативно и точно за разумное время. Точность определения термодинамических функций, возможно, является ключевой проблемой. Так, например, известно, что на установке NIF, созданной для непрямого сжатия термоядерных мишеней, несмотря на то, что расчеты предсказывают достижение положительного термоядерного выхода, до сих пор не реализованы условия breakeven (т.е. когда полученная в результате термоядерного взрыва энергия равна или превышает вложенную энергию). Одно из существующих предположений заключается в том, что возможная

причина не достижения breakeven связана с неточным знанием физических величин, заложенных в физико-математическую модель расчетов сжатия термоядерной мишени, в частности УРС в плазме.

Практическое значение данной работы связано с возможностью использования приготовленных таблиц или аналитических аппроксимаций термодинамических величин. Это особенно важно в серийных расчетах, моделирующих физические процессы, в которых вещество проходит широкий набор плазменных параметров.

Научная новизна работы заключается, прежде всего, в области математического моделирования. В модели газовой плазмы предложено новое краевое условие на границе атомной ячейки. Это расширило область применимости модели в сторону высоких плотностей и низких температур. В модели жидкой (плотной) плазмы предложена модификация модели осциллирующих ядер, повышающая физическую точность модели. Впервые предложен способ сшивания разных моделей в единое широкодиапазонное уравнение состояния, обеспечивающее строгую термодинамическую согласованность. Построен новый специализированный алгоритм для решения уравнений модели Томаса-Ферми с обменной и квантовой поправками. Разработаны специализированные алгоритмы вычислений специальных функций Ферми-Дирака полуцелого индекса с высокой точностью. В результате создан программный комплекс, включающий программы расчета широкодиапазонного уравнения состояния.

Таким образом диссертация является новым, практически значимым и актуальным исследованием. Диссертация имеет объем 148 стр., состоит из введения, 5-ти глав, заключения, списка иллюстраций, списка таблиц и списка литературы – 111 ссылок.

Во введении (Глава 1) приведен обзор работ по теме диссертации описана область исследования и детально описана проблема построения широкодиапазонного согласованного уравнения состояния, сформулирована цель работы.

Глава 2 посвящена моделированию газовой плазмы. Вводится новое условия на границе атомной ячейки, меняющие значение поправки на взаимодействие заряженных частиц. Показано, что это расширяет область применимости уравнений Саха в сторону низких температур. Обосновывается выбор усреднения заряда ионного остова.

Глава 3 посвящена разработке численного метода расчета уравнений модели Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками, описывающей жидкую плазму. Предлагаются новые прецизионные формулы для некоторых специальных функций. Сам расчет ведётся на сгущающихся сетках с уточнение по методу Ричардсона.

Глава 4 посвящена построению широкодиапазонного уравнения состояния плазмы на основе двух ранее изложенных моделей. Строится единая строго

термодинамически согласованная модель. По ней проводится расчет главных ударных адиабат четырёх металлов. Показано хорошее совпадение с экспериментом.

Глава 5 посвящена аппроксимации рассчитанных физических таблиц. Развивается так называемый метод двойного периода. Рассматриваются вопросы обусловленности и обобщения метода для функций двух переменных. Полученные обобщения используются для аппроксимации температурных томас-фермиевских функций, а также их нулевых изотерм.

В Главе 6 приведены описание и часть исходного кода пакета прикладных программ, который был создан в процессе разработки и отладки численных методов, представленных в диссертации. Комплекс включает в себя набор численных методов для решения уравнений моделей диссертации, а также необходимые вспомогательные подпрограммы. Показано как результаты диссертационной работы Луцкого К. И. встраиваются в базу данных ТЕФИС.

В заключении четко сформулированы 5 основных результатов диссертации, которые объективно отражают содержание и результаты диссертации.

Следует отметить, что диссертация хорошо структурирована, её содержание полностью соответствует специальности 05.13.18 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»: главы 2-4 посвящены построению новых моделей, в главах 2 и 5 разрабатываются новые численные методы, а глава 6 – посвящена разработке комплекса прикладных программ и его программной интеграцией с существующей базой данных.

В представленной работе следует отметить следующие результаты:

- Впервые предложен способ сшивания разнородных моделей в единое строго согласованное широкодиапазонное уравнение состояния. Помимо этого модель газовой плазмы обобщена на случай низких температур, что позволяет описать большую часть фазовой диаграммы всего двумя сшитыми моделями.

- Создан пакет программ, который можно применять для оперативного получения термодинамических свойств веществ. Эти программы могут входить в состав других прикладных программных комплексов, использующихся для широкого спектра задач физики.

Отметим некоторые недостатки работы:

Представляется более оправданным вместо термина «жидкая плазма» использовать термин «плотная плазма».

В ряде рисунков выбрана неудобная шкала для представления результатов (рис.4.3-рис.4.6).

В диссертации проведена оценка выполнения термодинамического соотношения $\partial E/\partial V = T(\partial P/\partial T) - P$ в библиотеке SESAME на основе доступных авторам данных ($T \sim 0.3-100 \text{ эВ}$; $\rho \sim 10-1000 \text{ г/см}^3$). Показано нарушение термодинамической согласованности моделей типа Саха и типа Томаса-Ферми, составляющее от 10% до более чем 100%, а также продемонстрировано

нарушение термодинамической согласованности моделей (в данном случае указанного соотношения) на границе склейки различных моделей типа ТФ более чем на 3-10% в зависимости от диапазона температур плотностей. При этом не проведено сравнение термодинамических величин P , E , ρ , рассчитанных автором, и приведенных в таблице SESAME.

В диссертации рассчитаны ударные адиабаты Cu , Fe , Al , Pb и проведено сравнение с результатами ударно-волновых экспериментов. Но помимо этого хотелось бы увидеть желательное сравнение результатов расчета термодинамических функций с расчетами других авторов, таких как Киржниц Д.А., Шпатаковская Г.В., Каннель Г.И.

Имеются замечания по тексту и изложению. В частности, на рис.4.2 (в автореферате рис.5) ошибочно указана шкала температур: следует писать lgT, K , и ряд других менее существенных замечаний.

Перечисленные недостатки не изменяют общую положительную оценку диссертационной работы Луцкого Константина Игоревича «Широкодиапазонная модель термодинамики газовой и жидкой плазмы». Исследования, представленные в диссертации, относятся к актуальным вопросам математического моделирования, численных методов и связанных с ними комплексов программ. Диссертация выполнена на высоком научном уровне, содержит новые значимые результаты. Содержание диссертации соответствует специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Диссертация Луцкого Константина Игоревича соответствует требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор Луцкий Константин Игоревич заслуживает присуждения искомой степени

Старший научный сотрудник сектора
Теории лазерной плазмы ОКРФ ФИАН
Кандидат физико-математических наук

Вергунова

Г.А.Вергунова

28 декабря 2015 года

Подпись Г.А.Вергуновой удостоверяю

