

## **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»

### **Актуальность темы выполненной работы**

Диссертационная работа К.И.Луцкого посвящена построению термодинамической модели, позволяющей количественно описывать свойства вещества в экстремальном состоянии (сверхвысокие давления и огромные плотности). Задача такого описания крайне актуальна как для исследования природных процессов (например, космического масштаба), так и для изучения воздействия взрывов большой мощности, создающих ударные волны большого давления. В частности, характеристики вещества, находящегося в экстремальном состоянии (термодинамические функции давления  $P$ , энергии  $E$ , энтропии  $S$  и другие), входят в коэффициенты уравнений, которые используются для численного моделирования подобных процессов. Экспериментальное получение этих характеристик очень дорого, поэтому создание надежной базы данных термодинамических свойств вещества является современной до конца не решенной задачей. Соответственно, исследования, направленные на определение и уточнение термодинамических свойств вещества в экстремальном состоянии, активно ведутся в различных научных институтах России и мира.

В этом контексте, получение экстремальных характеристик вещества из «первых принципов», проведенное в работе, представляется чрезвычайно интересным и актуальным.



## Общая методология и методика исследования

В основе диссертации лежит построение согласованного широкодиапазонного уравнения состояния плазмы. Отдельно рассматриваются модели жидкой и газовой плазмы.

В области газовой плазмы выбрана модель, основанная на уравнениях Саха. В модель внесены коррективы, позволяющие существенно улучшить учет взаимодействия зарядов. Это позволило обобщить уравнения Саха на нулевую температуру, и тем самым распространить модель на холодное сильно разреженное вещество.

В области жидкой плазмы для расчета вклада электронов используется модель Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками (ТФП). Здесь центральное место работы занимает новый эффективный способ решения уравнений этой модели. Вместо применения традиционного для этой задачи метода стрельбы, на последовательности вложенных сеток решается соответствующая краевая задача. Это позволяет, во-первых, сделать счет более устойчивым, (так как исходная задача Коши является жесткой), а во-вторых, эффективно контролировать точность при помощи оценки по Ричардсону. Скорость вычислений при этом также существенно возрастает.

Для получения единого широкодиапазонного приближения предложен новый оригинальный метод склейки моделей, сохраняющий строгую термодинамическую согласованность. Идея метода заключается в корректной склейке термодинамического потенциала (свободной энергии), с последующим получением из нее остальных термодинамических функций. Кроме того, предложены методы интерполяции рассчитанных результатов на основании метода двойного базиса Фурье, показана высокая эффективность такой интерполяции.

Наконец, автором представлен пакет программ, позволяющий для широкого набора веществ ( $Z < 103$ ) проводить расчет термодинамических таблиц и их аппроксимаций, а также главных ударных адиабат.

## Степень обоснованности и достоверности

Основные результаты диссертационной работы связаны с физическим улучшением моделей, разработкой численных методов и составлением программного комплекса.



Физическая достоверность моделей подтверждается сравнением с экспериментальными данными по ударному сжатию металлов. Помимо этого, в области жидкой плазмы используются модели, хорошо зарекомендовавшие себя ранее. В области газовой плазмы используются справочные данные высокой надежности о потенциалах ионизации.

Математическая достоверность подтверждается фундаментальными теоремами о сходимости расчетов на сгущающихся сетках. Для построенных аппроксимаций доказаны теоремы о сходимости полученных разложений.

Положения, выносимые на защиту, прошли апробацию на научных конференциях, семинарах институтов РАН, опубликованы в 9 печатных работах в ведущих математических журналах, входящих в перечень ВАК.

### **Научная новизна полученных результатов**

#### **В области численных методов**

1. Построен новый специализированный алгоритм для решения уравнений модели Томаса-Ферми с обменной и квантовой поправками. С его помощью значительно повышается устойчивость и скорость счета, используются расчеты на сгущающихся сетках с уточнением по Ричардсону.
2. Разработаны специализированные алгоритмы вычислений специальных функций Ферми-Дирака полуцелого индекса и вспомогательной интегральной функции Ферми-Дирака. Таким образом, достигаемая точность (не хуже 14 верных знаков) перекрывает потребности практики.
3. Развита общематематический метод аппроксимации гладких непериодических функций рядами Фурье. Исследована его обусловленность и определены оптимальные параметры метода, произведено обобщение на двумерный случай, произведено обобщение на случай неравномерных сеток.

#### **В области математического моделирования**

1. В модели газовой плазмы предложено новое краевое условие на границе атомной ячейки. Это расширило область применимости модели в сторону высоких плотностей и низких температур.
2. В модели жидкой плазмы предложена модификация модели осциллирующих ядер, повышающая физическую точность модели.



3. Впервые предложен способ сшивки разных моделей в единое широкодиапазонное уравнение состояния, обеспечивающее строгую термодинамическую согласованность

**Создан программный комплекс**, включающий в себя новые программы:

- 1) расчета уравнений Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками для моделирования вклада электронов в термодинамику жидкой плазмы.
- 2) расчета модифицированной модели осциллирующих ядер для моделирования ядерной компоненты жидкой плазмы.
- 3) расчета широкодиапазонного уравнения состояния.
- 4) расчета главных ударных адиабат.
- 5) вычисления специальных функций Ферми-Дирака.
- 6) аппроксимаций одно- и двумерных гладких неперiodических функций.

**Таким образом, научная новизна** в диссертации имеет место в области численных методов, в области математического моделирования, а также в области создания комплекса программ.

#### **Значимость результатов для науки и практики**

Пакет программ, разработанный в диссертации, можно применять для оперативного получения термодинамических свойств веществ. Эти программы могут входить в состав других прикладных программных комплексов, использующихся для широкого спектра задач физики.

Способ сшивки разнородных моделей в единое строго согласованное широкодиапазонное уравнение состояния, впервые предложенный в диссертации, может быть использован для дальнейших работ по исследованию вещества в экстремальных состояниях, важных как для сугубо научных, так и для практических приложений.

Разработанные численные методы аппроксимации и их программная реализация представляют самостоятельный интерес.



## Внутреннее единство работы и ее структура

Работа гармонично выстроена, что, безусловно, является ее сильной стороной. Также необходимо отметить, что в ней представлены все аспекты рассматриваемой проблемы, от уточнений конкретных моделей до деталей численной реализации.

Во введении (первая глава) описана область исследования и детально описана проблема построения широкодиапазонного согласованного уравнения состояния. Представлен подробный обзор существующих теорий, имеющих отношение к моделям, используемым (или не используемым) для решения поставленной задачи. Сформулирована цель работы.

Вторая глава посвящена моделированию газовой плазмы. В ней вводится новое условия на границе атомной ячейки, меняющие значение поправки на взаимодействие заряженных частиц, показывается, что это условие расширяет область применимости уравнений Саха в сторону низких температур. Обосновывается выбор усреднения заряда ионного остова.

Третья глава 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. Описывается методика расчета, проводимого на сгущающихся сетках с уточнением по методу Ричардсона.

Четвертая глава посвящена построению широкодиапазонного уравнения состояния плазмы на основе двух ранее изложенных моделей. Строится единая термодинамически согласованная модель. По ней проводится расчет главных ударных адиабат четырех металлов. Показано хорошее совпадение с экспериментальными данными.

Пятая глава 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 функций Томаса-Ферми, а также их нулевых изотерм.

В шестой главе приведено 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** сформулированы основные результаты диссертации.

Следует отметить, что диссертационная хорошо структурирована, а 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.

### **Замечания по диссертационной работе**

Приведенные ниже замечания носят рекомендательный характер, не меняют значимости и никак не влияют на положительную оценку качества работы Луцкого К. И, выполненной на высоком научном уровне.

1) Рис. 1.2 («поскутное одеяло», где различным буквам «а», «b» и т.д. соответствуют различные приближения) не содержит никаких комментариев по поводу используемых обозначений. Рисунок дублируется в автореферате, где расшифровываются только две из букв, а именно, «с» и «d».

2) Функции Ферми-Дирака (ФД) в диссертации и автореферате обозначаются  $I_a(x)$ . Это обозначение формально совпадает с общепринятым обозначением функций Бесселя мнимого аргумента, и, на мой взгляд, этого совпадения стоило бы избегать. Но вдобавок к этому, в автореферате после формул (2a)-(2c), в которых участвуют функции ФД, не поясняется, что означает  $I_a(x)$ , что создает еще и дополнительную путаницу.

3) Представляется, что сводка сведений о функции ФД приведена достаточно небрежно. Во-первых, в работе присутствует термин «асимптотически сходящийся ряд», который, как мне кажется, некорректен: по сути, речь идет об асимптотическом разложении для функции ФД, которое сходящимся не является. Во-вторых, в формуле (3.31) не указано,



при каких значениях параметра справедлива «асимптотичность». В-третьих, для ряда (3.32) указывается, что «существуют оценки погрешности и оптимального числа членов...», но не дается ни оценок, ни соответствующей ссылки. В-четвертых, без каких-либо комментариев приводится формула (3.33), при этом правая часть этой формулы зависит от  $n$ , а левая нет. Далее это же выражение участвует в вычислении функции ФД в формуле (3.39), но та же неточность сохраняется. Наконец, в-пятых, в формуле (3.44), видимо, пропущен индекс  $n$  в экспоненте и множитель минус единица в степени  $n$ .

4) Задача (3.60a)-(3.60b) является переопределенной: это уравнение второго порядка с тремя граничными условиями. Как справедливо пишет автор, эта задача является задачей на собственные значения относительно параметра  $\mu$ . Вместе с тем системы (3.64a)-(3.64b) и (3.66a)-(3.66b), которые получаются из (3.60a)-(3.60b), уже не являются переопределенными. В то же время далее приводится численный метод для решения, все-таки переопределенной задачи.

5) На странице 70 говорится, что вопрос о выборе нулевого приближения на самой грубой из сеток «естественно решается», при этом не дано никаких указаний на то, как это делается.

6) Теорема 2 (страница 95) содержит нетривиальную (и, на мой взгляд, неочевидную) оценку приближения для непериодической функции (5.9). При этом ее обоснование сводится к общей ссылке на книгу В.Л.Гончарова (более 300 страниц). Читатель вправе поинтересоваться, из каких конкретно формул этой книги следует оценка (5.9).

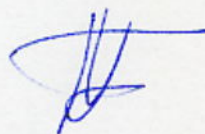
7) Заключение диссертации формально повторяет основные выводы, выносимые на защиту. Вместе с тем, как мне кажется, здесь было бы уместно не только подвести итоги работы, но и наметить некоторые нерешенные задачи, а также перспективы дальнейших исследований.



## Заключение

Диссертация Луцкого К. И. «Широкодиапазонная модель термодинамики газовой и жидкой плазмы» является законченным научным исследованием. Она посвящена актуальным вопросам математического моделирования, численных методов и связанных с ними комплексов программ, выполнена на высоком научном уровне. Научная новизна основных результатов значительная. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Рецензируемая диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям. Ее автор, *Луцкий Константин Игоревич*, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент,  
доктор физ.-мат. наук,  
профессор кафедры ВМ-1  
Национального исследовательского  
университета «МИЭТ»



Г. Л. Алфимов

124498, г. Москва, г. Зеленоград, площадь Шокина, дом 1;  
тел +7(916) 947 10 01  
e-mail: [galfimov@yahoo.com](mailto:galfimov@yahoo.com)

*Подпись Г. Л. Алфимова удостоверяю*

Ученый секретарь НИУ «МИЭТ»  
кандидат техн. наук, профессор



Н. М. Ларионов