

УТВЕРЖДАЮ:

Директор ИИМ им. М.В. Келдыша РАН
член-корреспондент РАН

А.И. Аптекарев

2022 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук".

Диссертация «Моделирование плазмы в столкновительно-излучательном равновесии» выполнена в отделе №6 «Вычислительная физика и кинетические уравнения», сектор №1 «Вычислительная физика», Федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук".

В период подготовки диссертации соискатель Вичев Илья Юрьевич работал в федеральном государственном учреждении "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук", младшим научным сотрудником в отделе №6.

В 2007 г. окончил государственное образовательное учреждение высшего образования «Московский инженерно-физический институт (государственный университет)» по специальности «Прикладная математика и физика». В 2010 г. закончил очную аспирантуру ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по направлению подготовки 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Научный руководитель доктор технических наук, главный научный сотрудник Валько Виктор Васильевич работает в федеральном государственном казенном учреждении «12 Центральный научно-исследовательский институт» Министерства обороны Российской Федерации, ведущим научным сотрудником.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Тема диссертации является актуальной поскольку работа посвящена развитию моделей и алгоритмов для расчёта радиационных и термодинамических свойств плазмы с произвольным полем излучения в приближении столкновительно-излучательного равновесия. Умение рассчитывать свойства веществ в области неравновесной плазмы является важной составляющей решения практических задач радиационной газовой динамики и физики плазмы.

Целью диссертационной работы является усовершенствование моделей и приближений, используемых при моделировании радиационных и термодинамических свойств плазмы в условиях столкновительно-излучательного равновесия, которые позволяют достичь лучшего согласия результатов расчётов с экспериментальными данными, получаемыми на современных установках, а также с результатами моделирования по независимым программам.

В диссертации решались следующие задачи:

1. Дополнить модель столкновительно-излучательного равновесия, добавив в неё учёт плотностных эффектов по моделям снижения потенциалов ионизации Стюарта-Пьятта и Экера-Кролла, а также возможность учёта относительно малой доли горячих электронов с температурой намного больше, чем температура плазмы.
2. Получить решения уравнения переноса излучения в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии – плоской, цилиндрической и сферической, согласованные с системой кинетических уравнений в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия.
3. Построить алгоритмы для расчёта оптических и термодинамических характеристик плазмы с произвольным полем излучения в рамках модели столкновительно-излучательного равновесия, а также разработать алгоритм согласования с кинетикой решений уравнения переноса излучения в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии (плоской, цилиндрической и сферической).
4. Разработать комплекс вычислительных программ с учётом возможности проведения расчётов на современных ЭВМ с параллельной архитектурой и встроить их в пакет программ THERMOS для расширения его функциональных возможностей.
5. Произвести верификацию разработанных программ на задачах, имеющих аналитические решения, а также путём сравнения с результатами расчётов, полученными по независимым программам, и с экспериментальными данными.
6. Определить область применимости усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия.

Основные результаты диссертации:

1. Сформулирована усовершенствованная модель столкновительно-излучательного равновесия для расчёта термодинамических и радиационных свойств плазмы с произвольным полем излучения и возможностью учёта эффектов плотности по моделям снижения потенциалов ионизации Стюарта-Пьятта и Экера-Кролла, и учёта относительно малой доли горячих электронов с температурой много больше, чем температура плазмы. На основе построенной модели разработана программа THERMOS_CRE.
2. Получены согласованные решения уравнения переноса излучения с системой кинетических уравнений в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия для одномерных модельных систем различного типа симметрии – плоской, цилиндрической, сферической. На основе полученных решений разработан программный модуль THERMOS_Layer, позволяющий рассчитывать свойства плазмы с учётом эффектов непрозрачности при конечных размерах. Расчёт возможен не только в последовательном, но и в параллельном режиме. Вычисление радиационных характеристик плазмы на подслоях производится посредством запуска отдельных MPI-процессов, при этом плотность энергии излучения и поток рассчитываются на мастер-процессоре. С помощью итерационного процесса проводится поиск согласованного решения, а итерации продолжаются до тех пор, пока не будет достигнута сходимость по величине радиационных потерь.
3. Разработаны алгоритмы для расчёта оптических и термодинамических характеристик веществ в рамках усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия с произвольным полем излучения, а также алгоритм согласования с кинетикой решений уравнения переноса излучения в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии.
4. Проведено исследование моделей и верификация разработанных программ THERMOS_CRE и THERMOS_Layer путём сравнительного анализа полученных результатов с экспериментальными данными, с аналитическими решениями и с результатами других программ, участвующих в международных семинарах по сравнению

неравновесных кодов. Проведённая верификация подтвердила высокое качественное и количественное совпадение результатов.

Программы THERMOS_CRE и THERMOS_Layer вошли в состав вычислительного комплекса программ THERMOS, разрабатываемого в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Результаты проведённых исследований показали, что усовершенствованная модель столкновительно-излучательного равновесия и программы, разработанные на её основе, позволяют с хорошей точностью моделировать радиационные свойства плазмы не только в условиях локального термодинамического равновесия, но и произвольного поля излучения. При этом область применимости лежит в диапазоне от 10^{-9} до 10^4 г/см³ для плотности вещества и в диапазоне от 10^{-3} до 10 кэВ для электронной температуры.

Все результаты диссертационной работы получены лично соискателем.

Научная новизна работы заключается в разработке и программной реализации алгоритма расчёта радиационных и термодинамических свойств плазмы в рамках усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия в стационарном приближении, в которой учтены эффекты плотности, наличие горячих электронов, а также в получении согласованных решений кинетической системы совместно с уравнением переноса излучения в одномерных геометриях.

Теоретическая ценность заключается в разработанных алгоритмах для расчёта оптических и термодинамических характеристик плазмы с произвольным полем излучения в рамках модели столкновительно-излучательного равновесия, найденных решениях уравнения переноса излучения в одномерной геометрии совместно с системой кинетических уравнений, а также их реализации в виде отдельных программных модулей с возможностью запуска на современных ЭВМ с параллельной архитектурой. В настоящее время внедрение алгоритмов совместного решения в одномерные коды радиационной газовой динамики представляет большой интерес и является отдельной исследовательской задачей.

Практическую значимость представляют сформулированная усовершенствованная модель и разработанные на её основе программные модули, которые служат инструментом для создания таблиц радиационных и термодинамических свойств любых веществ в широком диапазоне температур и плотностей. Такие таблицы используются в сложных программах радиационной газовой динамики для проведения производственных расчётов и описания экспериментальных данных, получаемых на современных высокоэнергетических установках.

Достоверность результатов обеспечивается за счёт всесторонней верификации разработанных программ путём проведения сравнительного анализа результатов расчётов с экспериментальными данными, аналитическими решениями, а также с результатами расчётов других научных групп. Полученное согласие результатов служит подтверждением надёжности программ и достоверности получаемых с их помощью результатов, учитывая область применимости используемых моделей и приближений.

Материалы диссертации полно представлены в 20 печатных работах: 12 из них – статьи в рецензируемых изданиях, индексируемых в международных базах данных Scopus и/или Web of Science, 13 из них в рекомендованных изданиях из списка ВАК, 1 монография. На разработанные в ходе работы программы THERMOS_CRE и THERMOS_Layer получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Вичев И.Ю., Новиков В.Г., Соломянная А.Д. Моделирование спектров излучения плазмы вольфрама // Матем. моделирование. 2008. Т. 20, № 7. С. 93–106. Math. Models Comput. Simul., 1:4 (2009), 470–481. (ВАК, Scopus 2-s2.0-84888130924, Science Index 11568900 / 23965476)
2. Болховитинов Е.А., Волков Г.С., Вичев И.Ю. и др. Исследования спектров излучения быстрых Z-пинчей, образующихся при сжатии многопроволочных сборок на установке Ангара-5-1 // Физика плазмы. 2012. Т. 38, № 10. С. 894–902. Plasma Phys. Rep., 38:10 (2012), 824–832. (ВАК, Scopus 2-s2.0-84867719532, WOS:000310023300005, Science Index 17928403 / 20497010)
3. Болдарев А.С., Болховитинов Е.А., Вичев И.Ю. и др. Методы и результаты исследований спектров излучения мегаамперных Z-пинчей на установке Ангара-5-1 // Физика плазмы. 2015. Т. 41, № 2. С. 195–199. Plasma Phys. Rep., 41:2 (2015), 178–181. (ВАК, Scopus 2-s2.0-84923006522, WOS:000349986000006, Science Index 23335200 / 24008529)
4. Ольховская О.Г., Гасилов В.А., Баско М.М., Сасоров П.В., Новиков В.Г., Вичев И.Ю., Галигузова И.И. О расчётах выходной мощности и спектра рентгеновского излучения Z-пинчей на основе многопроволочных сборок // Матем. моделирование. 2016. Т. 28, № 1. С. 3–22. Math. Models Comput. Simul., 8:4 (2016), 422–437. (ВАК, Scopus 2-s2.0-84978488461, Science Index 25707600 / 27059057)
5. Абраменко Д.Б., Анциферов П.С., Астахов Д.И., Виноходов А.Ю., Вичев И.Ю. и др. Плазменные источники экстремального ультрафиолетового излучения для литографии и сопутствующих технологических процессов (к 50-летию Института спектроскопии РАН) // Усп. физ. наук. 2019. Т. 189, № 3. С. 323–334. Phys. Usp., 62:3 (2019), 304–314. (ВАК, Scopus 2-s2.0-85070730766, WOS:000469214700010, Science Index 37038658 / 41614925)
6. Romanov I.V., Tsygvintsev I.P., Kologrivov A.A., Paperny V.L., Vichev I.Yu., Grushin A.S. Study of the possibility for increasing the emission of soft x-rays from the plasma of a low-energy vacuum discharge triggered by a laser // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2019. Vol. 61, no. 9. P. 095011. (Scopus 2-s2.0-85072060570, WOS:000481694800001, Science Index 41635806)
7. Vichev I.Yu., Solomyannaya A.D., Grushin A.S., Kim D.A. On certain aspects of the THERMOS toolkit for modeling experiments // High Energy Density Physics. 2019. P. 100713. (Scopus 2-s2.0-85072294434, WOS:000507476300015, Science Index 41626510)
8. Вергунова Г.А., Гуськов С.Ю., Вичев И.Ю. и др. Особенности генерации лазерно-индуцированного рентгеновского излучения и его воздействия на вещество применительно к задачам лазерного термоядерного синтеза // ЖЭТФ. 2022. Т. 161, № 6. С. 887–896. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 134:6 (2022), 754–761. (ВАК, Scopus 2-s2.0-85134487275, WOS:000828120100012, Science Index 48612403)
9. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю. Сравнение и анализ спектров плазмы железа (по материалам семинара NLTE9) // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 123. С. 20. (ВАК, Science Index 27535914)
10. Вичев И.Ю., Грушин А.С., Цыгвинцев И.П. и др. О нахождении параметров плазмы по интегральному спектру // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 2. С. 20. (ВАК, Science Index 28289434)
11. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Ким Д.А. Метод вычисления ионного уширения в неравновесной плазме // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 121. С. 20. (ВАК, Science Index 30730885)
12. Вичев И.Ю., Ким Д.А., Соломянная А.Д., Грушин А.С. THERMOS: Согласованное решение уравнения переноса излучения с поуровневой кинетикой в простейших геометриях // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 56. С. 30. (ВАК, Science Index 43175543)

13. Грушин А.С., Вичев И.Ю., Ким Д.А., Соломянная А.Д. Методы приближённого учёта неравновесности поля излучения при моделировании свойств плазмы // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 10. С. 22. (ВАК, Science Index 48121536)
14. Вичев И.Ю. Столкновительно-излучательная модель неравновесной плазмы с произвольным полем излучения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 18. С. 31. (ВАК, Science Index 48214007)
15. Вичев И.Ю. Моделирование сильно фотоионизованной плазмы кремния // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 45. С. 15. (ВАК, Science Index 49286658)
16. Novikov V.G., Vichev I.Y., Solomyannaya A.D. Calculation of tungsten emission spectra for mega ampere Z-pinch // Proceedins of 16th IEEE International Pulsed Power Conference. New Mexico, Albuquerque: 2007. P. 1785–1788. (Scopus 2-s2.0-70350625019, WOS:000253619300405, Science Index 15292318)
17. Zaytsev V.I., Novikov V.G., Volkov G.S., Grabovskii E.V., Aleksandrov V.V., Oleinik G.M., Vichev I.Yu., Solomyannaya A.D. Study of the X-ray spectrum of the heavy-ion Z-pinch // 35th EPS Conference on Plasma Physics. Vol. 32D. Hersonissos: 2008. (Scopus 2-s2.0-84873050539, Science Index 20544024)
18. Gasilov V.A., Olkhovskaya O.G., Boldarev A.S., Bagdasarov G.A., Dorofeeva E.Yu., Sasorov P.V., Basko M.M., Novikov V.G., Vichev, I.Yu. 3D MHD simulation of wire-array Z-pinch implosion under the action of high current pulse // 2014 International Conference on Computer Technologies in Physical and Engineering Applications (ICCTPEA). 2014. P. 52–53. (Scopus 2-s2.0-84908672288, WOS:000366571300028, Science Index 22430206)
19. Olkhovskaya O.G., Basko M.M., Sasorov P.V. et al. Radiative power and x-ray spectrum numerical estimations for wire array Z-pinch // Journal of Physics: Conference Series. 2015. Vol. 653, no. 1. P. 012148. (Scopus 2-s2.0-84959020788, WOS:000368507600148, Science Index 26890708)
20. Вичев И.Ю., Грушин А.С., Новиков В.Г., Соломянная А.Д. KIAM_DB: база атомных данных для расчётов спектральных свойств плазмы. ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. С. 96. URL: <http://keldysh.ru/e-biblio/vichev>. (монография)

На разработанные программы получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ:

1. Новиков В.Г., Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Грушин А.С. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ “THERMOS: Библиотека функций для расчета радиационных и термодинамических свойств различных веществ и смесей в широкой области температур и плотностей” №2013614395 от 03.07.2013. Правообладатель: ФГБУН ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.
2. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Грушин А.С., Ким Д.А. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ “Программный модуль THERMOS_CRE для расчёта радиационных и термодинамических свойств веществ в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия с произвольным полем излучения” №2022610462 от 12.01.2022. Правообладатель: ФГУ “ФИЦ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН”. (Science Index 47784625)
3. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Грушин А.С., Ким Д.А. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ “Программный модуль THERMOS_Layer для расчёта свойств плазмы с учётом эффектов непрозрачности при конечных размерах” №2022610808 от 17.01.2022. Правообладатель: ФГУ “ФИЦ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН”. (Science Index 47785068)

Личный вклад соискателя в работах заключался в том, что он самостоятельно усовершенствовал модель столкновительно-излучательного равновесия и разработал алгоритмы для расчёта термодинамических и радиационных свойств плазмы с произвольным полем излучения и поиска согласованных решений уравнения переноса излучения в одномерной геометрии совместно с системой кинетических уравнений. На их основе лично соискателем произведена разработка кодов THERMOS_CRE и THERMOS_Layer, которые вошли в состав функционального ядра вычислительного комплекса программ THERMOS, и выполнена верификация путём сравнительного анализа результатов расчётов с экспериментальными данными, аналитическими решениями и результатами расчётов других научных групп. Разработанные программы использовались для расчёта таблиц радиационных и термодинамических свойств веществ, которые применялись в кодах радиационной газовой динамики для полномасштабного моделирования экспериментов.

Основные результаты диссертации докладывались на следующих научных конференциях и семинарах:

1. Международный семинар “Супервычисления и математическое моделирование” (Саров, 2006, 2008).
2. 16th IEEE International Pulsed Power Conference (Альбукерке, США, 2007).
3. International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2008, 2020).
4. Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС (Звенигород, Москва, 2008 – 2009, 2011, 2014, 2019 – 2020).
5. International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2009, 2019, 2021).
6. 5-th International Workshop on Plasma Spectroscopy (Франция, 2012).
7. “Диагностика низкотемпературной плазмы” (Москва, 2012).
8. IX Topical Workshop “New Horizons of EUV Lithography” (Анталья, Турция, 2013).
9. “Разностные схемы и их приложения”, посвященная 90-летию профессора В.С. Рябенского (Москва, 2013).
10. Семинар в рамках Летней суперкомпьютерной академии “Крупномасштабное моделирование, высокопроизводительные вычисления и обработка данных большого объема на суперкомпьютерах” (Москва, 2013).
11. International Workshop on Extreme Ultraviolet and Soft X-Ray Sources (Дублин, Ирландия, 2013 – 2014).
12. 2014 International Conference on Computer Technologies in Physical and Engineering Applications (ICCTPEA) (Санкт-Петербург, 2014).
13. The 9th NLTE Code Comparison Workshop (Париж, Франция, 2015).
14. The 10th NLTE Code Comparison Workshop (Сан-Диего, США, 2017).
15. The International Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter (Гамбург, Германия, 2018).
16. Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics (Москва, 2018).
17. 5th SLSP Workshop (Врджик, Сербия, 2019).
18. The 11th NLTE Code Comparison Workshop (Лас-Пальмас-деГран-Канария, Испания, 2019).
19. Source Workshop (Held online, 2020 – 2021).
20. Забабахинские научные чтения 2021 (Снежинск, 2021).
21. XXXVII Fortov International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2022).

Содержание диссертации соответствует специальности 1.2.2. - математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертация «Моделирование плазмы в столкновительно-излучательном равновесии» Вичева Ильи Юрьевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Заключение принято на расширенном заседании семинара отдела №15 «Математическое моделирование» ИПМ им. М.В. Келдыша РАН под руководством член-корр. РАН, д. ф.-м. н., зав. отделом №15 В.Ф. Тишкина и д. ф.-м. н., г.н.с. А.А. Кулешова.

Присутствовало на заседании 27 чел.

Выступили с положительной оценкой диссертации: Змитренко Н.В., Гасилов В.А..

Результаты голосования: "за" - 27 чел., "против" - 0 чел., "воздержалось" - 0 чел., протокол № 2 от " 26 " апреля 2022 г.

Член-корр. РАН,
д. ф.-м. н., зав. отделом №15


_____ В.Ф. Тишкин

д. ф.-м. н., г.н.с. отдела №15


_____ А.А. Кулешов