АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание степени «доктор философии» (PhD)
по специальности «6D070500 – Математическое и компьютерное моделирование»

МАШЕЕВА РАННА УЫТБАЕВНА

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В настоящей диссертационной работе выполнено компьютерное моделирование ансамбля заряженных частиц на основе методов молекулярной и ланжевеновой динамики с учетом влияния внешнего однородного магнитного поля. Для решения этой задачи были построены математические модели пылевой плазмы и процессов в ней, получена численная схема интегрирования уравнений движения, учитывающая влияние внешнего магнитного поля и силы трения, где шаг по времени не зависит от величины магнитного поля.

Актуальность темы

В диссертационной работе проводится компьютерное моделирование на основе методов молекулярной и ланжевеновой динамики. Метод МД является одним из мощных вычислительных методов, основан на численном решении классических уравнений движения частиц в некотором выделенном объеме среды, эффективно применяется для моделирования физических и биологических систем и позволяет рассматривать временную эволюцию системы, состоящую из большого количества частиц.

Последние десятилетия использование методов компьютерного моделирования для исследования поведения и свойств ансамбля заряженных частиц представляет большой интерес в научном мире. Особое внимание уделяется случаю, когда в системе имеется сильная связь, т.е. когда кулоновское взаимодействие частиц превышает их кинетическую энергию. Пылевая плазма представляет собой примечательный вид много частичной сильно связанной (неидеальной) системы, которая часто встречается в астрофизических средах, а также может быть реализована в лабораторных условиях. Пылинками называются частицы конденсированного вещества микронных размеров, образующиеся в плазменных реакторах в результате распыления материала стенок, химических реакций и процессов агломерации, или попадания в плазму извне. Пылинки, имеющие относительно большую поверхностную площадь, попадая в плазму, заряжаются потоками плазменных электронов и ионов до очень больших значений электрического заряда. В земных условиях заряд чаще всего отрицательный из-за большей подвижности электронов. Большой заряд обуславливает сильное электростатическое взаимодействие пылевых частиц между собой и это сильно отражается на свойствах пылевой плазмы, в некоторых случаях приводя к появлению

упорядоченных структур, так называемого плазменного кристалла. Пылевая плазма, образующаяся, в частности, в пристеночной области установок управляемого термоядерного синтеза (УТС) с магнитным удержанием, представляет собой сильно связанную магнитоактивную плазму. Пристеночная пылевая плазма серьезно влияет на протекание процессов в установках УТС. В частности коэффициент диффузии связан с удержанием плазмы в магнитных ловушках, с потерями энергии медленных ионов в плотной плазме, вследствие чего представляет особенный интерес и для установок инерциального термоядерного синтеза, а также установок с нагревом посредством ионных пучков. Также пылевая плазма является полезным инструментом для изучения многих физических процессов, протекающих в многочастичной системе.

Широко обсуждаются перспективы применения пылевой плазмы и плазменного кристалла в нанотехнологиях, компьютерных и других технологиях. Таким образом, пыль и буферная плазма образуют собой весьма интересный объект - пылевую (комплексную) плазму, обладающую уникальными свойствами и поведением, чем и обусловлен выбор такой системы для компьютерного моделирования.

Обзор научной литературы и анализ развития моделей и методов в области математического моделирования показывает, что в последние десятилетия проделан значительный объем работ по исследованию свойств многочастичных систем с помощью методов компьютерного моделирования. Однако, большинство работ не учитывает диссипацию в системе, связанную с наличием фоновой плазмы, либо выполнены для незамагниченной плазмы. В задачи настоящей диссертационной работы входит разработка математических моделей для описания процессов в пылевой магнитоактивной плазме посредством включения силы Лоренца и диссипативного члена в уравнения движения пылинок, создание пакета программ для исследования влияния диссипации и магнитного поля на свойства сильно связанной магнитоактивной плазмы.

Цель работы

Целью данной диссертационной работы является разработка компьютерных программ для моделирования процессов в пылевой магнитоактивной плазме методом молекулярной и ланжевеновой динамики, учитывающих диссипацию (силы трения), использование результатов компьютерного моделирования для исследования и анализа динамических, структурных и транспортных свойств пылевой плазмы.

Объектом исследования является магнитоактивная пылевая плазма.

Предмет исследования – математические модели и численные схемы, необходимые для компьютерного моделирования физических свойств пылевой плазмы, а также результаты самого моделирования.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи:**

– Построить математическую модель для компьютерного моделирования магнитоактивной пылевой плазмы

– Выполнить компьютерное моделирование пылевой магнитоактивной плазмы, позволяющее корректно проводить исследование свойств пылевой плазмы.

– Создать математическую модель для направленных корреляционных функций, адекватно описывающих процессы локализации частиц вдоль и поперек направлению внешнего магнитного поля.

– Построить автоматизированный комплекс компьютерных программ для моделирования и исследования свойств пылевой плазмы.

Положения, выносимые на защиту:

– Построенная математическая модель для компьютерного моделирования магнитоактивной пылевой плазмы позволяет корректно учитывать влияние внешнего магнитного поля и силы трения на динамику пылевых частиц в буферной плазме.

– На основе компьютерного моделирования магнитоактивной пылевой плазмы получены новые данные по ее структурным (парная корреляционная функция) и динамическим (автокорреляционная функция скоростей и диффузия) свойствам.

– Построенная математическая модель для направленных корреляционных функций адекватно описывает процессы локализации частиц вдоль и поперек внешнего магнитного поля.

– Создан автоматизированный комплекс компьютерных программ для моделирования и исследования свойств пылевой плазмы.

Новизна работы.

Научная новизна и оригинальность диссертационной работы заключаются в том, что в ней впервые:

– Получена численная схема интегрирования уравнений движения, учитывающая влияние внешнего магнитного поля и силы трения, где шаг по времени не зависит от величины магнитного поля.

– Выполнено компьютерное моделирование, позволяющее корректно проводить исследование свойств пылевой плазмы.

– Построена математическая модель для направленных корреляционных функций, адекватно описывающих процессы локализации частиц вдоль и поперек направлению внешнего магнитного поля.

– Построен автоматизированный комплекс компьютерных программ для моделирования и исследования свойств пылевой плазмы.

Практическая значимость исследования.

Практическая значимость исследований продиктована, в частности, жизненной необходимостью развития энергетики, использующей практически неограниченный ресурс, безопасный в эксплуатации и достаточно чистый в экологическом плане. В связи с этим в последние десятилетия развиваются

крупные проекты (к примеру, ITER, NIF и др.), связанные с развитием термоядерной энергетики. В ходе работ по созданию термоядерных установок с магнитным удержанием было замечено, что в пристеночной области разрядных камер образуется большое количество пыли, существенным образом влияющей на процессы, протекающие в центральной области. Таким образом, построение математических моделей для моделирования и исследования динамических, транспортных и других свойств пылевой магнитоактивной плазмы имеет большое значение, как в национальном, так и международном масштабе.

Достоверность и обоснованность полученных результатов.

Математическая модель основывается на использовании стандартного метода молекулярной динамики (МД) и ланжвевеновой динамики с учетом диссипации (силы трения), а также специально подобранных уравнений для обработки данных компьютерного эксперимента. Для интегрирования уравнений движения частиц был использован надежный алгоритм Верле, основанный на разложении скорости и координат частиц в ряд Тейлора. Построенная математическая модель включает в себя также уравнения для кейгеновых корреляционных функций, впервые записанных в диссертации отдельно для компонент параллельных и перпендикулярных внешнему магнитному полю. Результаты по диффузии и кейгеновым функциям имеют хорошее согласие с данными физических экспериментов и результатами других авторов.

Достоверность и обоснованность полученных результатов подтверждаются публикациями в журналах дальнего зарубежья с высоким импакт-фактором и в изданиях, рекомендованных Комитетом по контролю в сфере образования и науки МОН РК, и в трудах международных научных конференций ближнего и дальнего зарубежья.

Личный вклад автора заключается в том, что весь объем диссертационной работы, решение задач выполнены автором самостоятельно. Постановка задач, выбор метода исследования и обсуждение результатов проводились совместно с научными руководителями.

Публикации. По материалам диссертационной работы опубликовано 42 печатных работ: 11 в журналах из Перечня ККСОН МОН РК для опубликования основных результатов диссертации на соискание ученой степени PhD и 8 статьи в журналах дальнего зарубежья с импакт-фактором, входящих в международный информационный ресурс Web of Knowledge (Thomson Reuters, США) и Scopus (Elsevier, Нидерланды); 21 работ в материалах Международных научных конференций и 2 авторских свидетельств.

Апробация диссертационной работы. Результаты, полученные в диссертационной работе, докладывались и обсуждались:

–на Международной конференции студентов и молодых ученых «Мир

науки» (2013, 2014, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан);

–на 51-й Международной конференции «Студент и научно-технический прогресс» (2013, Новосибирск, Россия)

–на Международной научной конференции, посвященной 75-летию академика НАН РК Абильдина Мейрхана Мубараковича «Актуальные проблемы современной физики» (2013, Алматы, Казахстан);

–на Международной конференции «The International Conference on Phenomena in Ionized Gases (IIGPIG)» (2015, Iasi, Romania);

–на Международной конференции «International Conference on the Physics of Dusty Plasmas (ICPDP - 7)» (2014, New Delhi, India)

–на Международной конференции «15th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (PNP)» (2015, Almaty, Kazakhstan);

–на Международном симпозиуме «21st International Symposium of Heavy-Ion Inertial Fusion (HIF)» (2016, Astana, Kazakhstan);

–на Международной конференции «XXII Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases (ESCAMPIG)» (2016, Bratislava, Slovakia);

–на Международной конференции «International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems (SCCS)» (2017, Kiel, Germany);

–на Международной конференции «The International Conference on Research and Application of Plasmas (PLASMA)» (2017, Warsaw, Poland);

–на Международной конференции «42nd European Physical Society Conference on Plasma Physics (EPS)» (2018, Prague, Czech Republic);

–на Международной конференции «XV Russian conference (with international participation) on thermophysical properties of substances (RCTP-15)» (2018, Moscow, Russia);

–на Международной научной конференции «Современные достижения физики и фундаментальное физическое образование» (2016, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан);

–на Международной конференции студентов и молодых ученых «Фараби Әлемі» (2015, 2016, 2017, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан);

–на Международной конференции «XXIX IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2017)» (2017, Paris, France);

–на Международной конференции «СДФФФО-9» (2016, Алматы, Казахстан);

–на 10-ой Международной научной конференции «Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент» посвященная 75-летнему юбилею профессора З.Ж Жанабаева (2017, Алматы, Казахстан);

– на научных семинарах кафедры физики плазмы и компьютерной физики, кафедры математического и компьютерного моделирования КазНУ им. аль-Фараби.

–на научных семинарах института информационных и вычислительных технологий КН МОН РК.

Связь темы диссертации с планами научных работ. Диссертационная работа выполнена в соответствии с планами фундаментальной научно-исследовательской работы (НИР) КН МОН РК «Грантовое финансирование научных исследовании» по темам:

– «Элементарные процессы и оптические свойства плазмы сложного состава инерциального термоядерного синтеза» (2015-2017гг., № гос.регистрации 0115РК01037, шифр 3102/ГФ4);

– «Компьютерное моделирование свойств магнитоактивной плазмы сложного состава» (2015-2017 гг., № гос.регистрации 0115РК01042, шифр 3087/ГФ4);

– «Исследование пыле-звуковых солитонов в магнитоактивной плазме сложного состава» (2018-2020 гг., № гос.регистрации 0118РК00609, шифр AP05132665/ГФ);

– Программы целевого финансирования «Исследование фундаментальных проблем физики плазмы и плазмоподобных сред» (2018-2020 гг., шифр BR05236730/ГФ);

– «Разработка и исследование математических моделей, численных методов и комплекса программ комбинаторной оптимизации (на примере задач прямоугольного раскроя)» (2015-2017 гг.);

– «Исследование и разработка моделей и методики представления и организации знаний с применением онтологического подхода и инструментальных средств Smart-технологии, при реализации образовательных программ и процессов» (2018-2020 гг., № гос.регистрации AP05134973);

– «Разработка информационных технологий и систем для стимулирования устойчивого развития личности как одна из основ развития цифрового Казахстана.» (2018-2020 гг., шифр BR05236839/ГФ);

Объем и структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех разделов, заключения и списка использованных источников из 154 наименований, содержит 135 страниц основного компьютерного текста, включая 73 рисунков и 1 таблицы.