«6D070500 – Математикалық және компьютерлік моделдеу»
мамандығы бойынша философия докторы (Ph.D) дәрежесін алу үшін
диссертациясына

АҢДАТПА

МАШЕЕВА РАННА УЫТБАЕВНА

Сыртқы магнит өрісінде тозаңды плазманы компьютерлік модельдеу

Диссертациялық жұмыста зарядталған бөлшектердің ансамбліне сыртқы біртекті магнит өрісінің әсерін молекулалық және ланжевендік динамика әдістерінің негізінде компьютерлік модельдеу жасалған. Бұл есепті шешу мақсатында тозаңды плазма мен оның ішінде орын алатын процестердің математикалық моделі құрастырылған, уақыт бойынша қадам магнит өрісінің шамасынан тәуелсіз сыртқы магнит өрісі мен үйкеліс күшінің әсерін ескеретін қозғалыс теңдеуін интегралдаудың сандық схемасы алынған.

Зерттеу тақырыбының өзектілігі.

Диссертациялық жұмыста молекулалық және ланжевендік динамика әдістерінің негізінде компьютерлік модельдеу жүргізілген. Молекулалық динамики әдісі ортаның белгілі бір көлеміндегі бөлшектердің классикалық қозғалыс теңдеуін шешуге негізделген, физикалық және биологиялық жүйелерді модельдеу үшін табысты қолданылады, көп бөлшектер санынан тұратын жүйенің уақыт бойынша өзгерісін қарастыруға мүмкіндік береді.

Соңғы он жылдықта ғылым әлемінде компьютерлік модельдеу әдістерін зарядталған бөлшектер ансамблінің қасиеттерін және қозғалысын зерттеу үлкен қызығушылықты тудыруда. Тозаңды плазма астрофизикалық объектілерде жиі кездеседі, сонымен қатар, лабораториялық шарттарда жүзеге асырылады және көп бөлшекті тығыз байланыстағы жүйенің бір түрі болып табылады. Тозаңды бөлшектер деп қабырғалардың материалдарын тозаңдандыру, химиялық реакция, агломерация процесстердің немесе плазмаға сырттан түсу нәтижесінде түзілетін микрон өлшемді конденсирленген зат бөлшектерін айтады. Беттік ауданы салыстырмалы түрде үлкен тозаңды бөлшектер плазмаға түскенде плазмалық электрондар мен иондардың ағынымен электр зарядының үлкен мәніне дейін зарядталады. Электрондардың жылдамдығы иондармен салыстырғанда үлкен болғандықтан жергілікті шарттарда теріс зарядталады. Заряд үлкен болғандықтан тозаңды бөлшектер арасында өте үлкен электростатикалық әсерлесу күші орын алады және бұл әсерлесу тозаңды пазманың қасиеттеріне әсер етеді, кей жағдайларда бұл плазмалық кристалл деп аталатын реттелген құрылымдардың пайда болуына әкеледі. Магнитті ұсталатын басқармалы термоядролық синтез (БТС) қондырғыларының қабырға жаны аймағында түзілетін тозаңды плазма тығыз байланыстағы магнитті белсенді плазманы сипаттады. Қабырға жаны тозаңды плазма БТС қондырғыларындағы процестердің жүруіне үлкен әсерін тигізеді. Жеке жағдайда, диффузия коэффициенті плазманың магнитті торларда ұсталып тұруымен, тығыз плазмада баяу иондардың энергиясын жоғалтумен

байланысты, осының салдарынан инерциалды термоядролық синтез қондырғылары үшін, сонымен қатар, иондық ағындар көмегімен жылытуы бар қондырғылар үшін де қызықты объект болып табылады. Сонымен қатар, тозаңды плазма көп бөлшекті жүйеде орын алатын физикалық процестерді зерттеуге арналған тиімді құрал болып табылады.

Қазіргі таңда тозаңды плазма және плазмалық кристаллды нанотехнологияда, компьютерлік және басқа технологияларда қолдану перспективалары қарастырылуда. Осылайша, тозаң және буферлік плазма әмбебап қасиеттерге ие қызықты объекті – тозаңды (құрамды) плазманы құрайды, сондықтан компьютерлік модельдеу үшін объект болып таңдалды.

Ғылыми әдебиетті шолу және математикалық модельдеу саласындағы әдістер мен модельдердің дамуын сараптау соңғы онжылдықта компьютерлік модельдеу әдістерінің көмегімен көпбөлшекті жүйелердің қасиеттерін зерттеу бойынша үлкен көлемде жұмыстар жасалғандығын көрсетеді. Алайда, көптеген жұмыстар магнит өрісінің әсерін немесе плазманың бөлшектерінің тозаңды бөлшектерге әсерін зерттемейді. Осы жұмыстың есебіне тозаңды бөлшектердің қозғалыс теңдеуіне диссипативті мүшесін және Лоренц күшін қосу арқылы магнитті белсенді тозаңды плазмадағы процестерді сипаттау үшін математикалық модельдерді құрастыру, магнитті белсенді тығыз байланысқан плазманың қасиеттеріне магнит өрісі мен диссипацияның әсерін зерттеуге арналған программалар пакетін құрастыру кіреді.

Жұмыстың мақсаты

Бұл диссертациялық жұмыстың мақсаты диссипацияны (үйкеліс күші) ескеретін ланжевендік динамика және молекулалық динамика әдістерінің көмегімен магнитті белсенді плазмадағы процестерді модельдеу үшін компьютерлік программаларды құрастыру болып табылады, копьютерлік модельдеу нәтижесін тозаңды плазманың транспорттық, құрылымдық және динамикалық қасиеттеріне анализ жасау үшін қолдану болып табылады.

Зерттеу нысаны - магнитті белсенді тозаңды плазма.

Зерттеу пәні - тозаңды плазманың физикалық қасиеттерін компьютерлік модельдеу үшін қажетті математикалық модельдер мен сандық схемалар.

Қойылған мақсаттарға қол жеткізу үшін келесі есептерді шешу қажет болды:

– Магнитті белсенді тозаңды плазманы компьютерлік модельдеу түшін математикалық моделін құрастыру;

– Тозаңды плазманың қасиеттерін дұрыс зерттеуге мүмкіндік беретін магнитті белсенді тозаңды плазманы компьютерлік модельдеу;

– Сыртқы магнит өрісінің бағыты бойымен және оған көлденең локализацияланатын бөлшектер локализация процесін дұрыс сипаттайтын бағытталған корреляциялық функциялар үшін математикалық моделін құрастыру;

– Тозаңды плазманың қасиеттерін модельдеу және зерттеу үшін

компьютерлік программалардың автоматталған комплексін құрастыру.

Қорғауға шығарылатын мәселелер:

– Магнитті белсенді тозаңды плазманы компьютерлік модельдеу үшін құрастырылған математикалық модель буферлік плазмадағы тозаңды плазманың динамикасына үйкеліс күші мен сыртқы магнит өрісінің әсерін дұрыс ескеруге мүмкіндік береді;

– Магнитті белсенді тозаңды плазманы компьютерлік модельдеу негізінде оның құрылымдық (жұптық корреляциялық функция) және динамикалық (жылдамдықтың автокрреляциялық функциясы және диффузия) қасиеттері бойынша жаңа мәліметтер алынды;

– Бағытталған корреляциялық функциялар үшін құрыстырылған математикалық модель сыртқы магнит өрісінің бағыты бойымен және оған көлденең локализация процесін дұрыс сипаттайды;

– Тозаңды плазманың қасиеттерін модельдеу және зерттеу үшін компьютерлік программалардың автоматталған комплексін құрастырылды.

Диссертациялық жұмыстың нәтижесінің ғылыми жаңалығы.

Диссертациялық жұмыстың жаңалығы мен түпнұсқалығы жұмыста алғаш рет:

– Уақыт бойынша қадам магнит өрісінің шамасынан тәуелсіз сыртқы магнит өрісі мен үйкеліс күшін ескеретін қозғалыс теңдеуін интегралдаудың сандық схемасы алынды;

– Тозаңды плазманың қасиеттерін дұрыс ескеруге мүмкіндік беретін компьютерлік модельдеу жүргізілді;

– Сыртқы магнит өрісінің бағыты бойымен және көлдене орналасқан бөлшектердің локализациясы процесін дұрыс сипаттайтын бағытталған корреляциялық функция үшін математикалық модель құрастырылды;

– Тозаңды плазманың қасиеттерін модельдеу және зерттеу үшін компьютерлік программалардың автоматталған комплексі құрастырылды.

Жұмыстың ғылыми-практикалық маңыздылығы.

Зерттеулердің практикалық маңыздылығы экологиялық тұрғыдан таза және пайдалану кезінде қауіпсіз, шексіз ресурсты қолданатын энергетиканың дамуының қажеттілімен байланысты. Осыған байланысты соңғы онжылдықта термоядролық энергетикамен (мысалы, ITER, NIF және т.б.) байланысты үлкен жобалар дамуда. Магнитті ұсталатын термоядролық қондырғыларды құрастыру жұмыстары кезінде орталық аумағында жүзеге асатын процестерге маңызды түрде әсер ететін тозаңдардың үлкен шамасы разрядты камералардың қабырға жаны аумағында түзілетіндігі байқалды. Осылайша, магнитті белсенді тозаңды плазманың динамикалық, транспорттық және басқа қаситеттерін модельдеу және зерттеу үшін математикалық моделін құрастыру ұлттық және халықаралық масштабта үлкен маңыздылығы бар.

Алынған нәтижелердің нақтылығы мен негізділігі.

Математикалық модель молекулалық және үйкеліс күшінің әсерін ескеретін ланжевендік динамика әдістеріне, және компьютерлік эксперимент мәліметтерін өңдеуге арналған арнайы таңдалған теңдеулерін қолдануға негізделген. Бөлшектердің қозғалыс теңдеуін шешу үшін бөлшектердің жылдамдықтары мен үдеулерін Тейлор қатарына жіктеуге негізделген сенімді Верле алгоритмі қолданылған. Құрылған математикалық модель сонымен қатар, магнит өрісінің бағыты бойымен және көлденең орналасқан компоненттері үшін диссертациялық жұмыста алғаш рет жазылған кейгендік корреляциялық функциясы үшін де теңдеулерден тұрады. Диффузия коэффициенті және кейгендік корреляциялық функция бойынша нәтижелер басқа авторлар мен эксперимент нәтижелерімен салыстырылды.

Алынған нәтижелердің нақтылығы және негізділігі импакт факторлы алыс шетел журналдарында, ҚР БЖҒМ білім және ғылым саласындағы басқарма бойынша комитет ұсынған жариялымдарда және алыс және жақын шетел Халықаралық ғылыми конференциялар еңбектеріндегі басылымдарымен дәлелденеді.

Автордың өзінің тигізген үлесі.

Диссертациялық жұмыстың барлығы көлемі автордың жеке өзімен шешілді. Есепті, зерттеу әдісін таңдау және нәтижеледі талқылау ғылыми жетешілерімен бірге жасалды.

Басылымдар. Диссертациялық жұмыстың материалдары бойынша 42 басылымнан аса жұмыс шығарылды: оның ішінде ҚР БҒМ БҒСБК тізіміндегі журналдарда 11 мақала және Web of Knowledge (Thomson Reuters, США) және Scopus (Elsevier, Нидерланды) халықаралық ақпараттық ресурсқа кіретін импакт-факторлы алыс шетел журналдарында 8 мақала, 21 жұмыс Халықаралық ғылыми конференция материалдарында және 2 авторлық куәлік жарық көрді.

Апробацияланған диссертациялық жұмыстар. Диссертациялық жұмыста алынған нәтижелер бойынша келесі семинарлар мен конференцияларда талқыланды:

–Студенттер мен жас ғалымдардың «Ғылым әлемі» атты халықаралық конференциясында (2013, 2014, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан);

– «Студент және ғылыми - техникалық прогресс» атты 51 халықаралық конференциясында (2013, Новосибирск, Ресей)

–ҚР ҒА академигі Абильдин Мейрхан Мубараковичтың 75 жылдығына арналған «Заманауи физиканың өзекті мәелелері» (2013, Алматы, Қазақстан);

–«The International Conference on Phenomena in Ionized Gases (IIGPIG)» атты халықаралық конференциясында (2015, Iasi, Romania);

–«International Conference on the Physics of Dusty Plasmas (ICPDP - 7)» атты халықаралық конференциясында (2014, New Delhi, India)

–«15th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (PNP)»

атты халықаралық конференциясында (2015, Almaty, Kazakhstan);

–«21st International Symposium of Heavy- Ion Inertial Fusion (HIF)» атты халықаралық симфозиумда (2016, Астана, Қазақстан);

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

–«International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems (SCCS)» атты халықаралық конференциясында (2017, Kiel, Germany);

–«The International Conference on Research and Application of Plasmas (PLASMA)» атты халықаралық конференциясында (2017, Warsaw, Poland);

–«42nd European Physical Society Conference on Plasma Physics (EPS)» атты халықаралық конференциясында (2018, Prague, Czech Republic);

–«XV Russian conference (with international participation) on thermophysical properties of substances (RCTP-15)» атты халықаралық конференциясында (2018, Мәскеу, Ресей);

– «Физиканың заманауи жетістіктері мен іргелі физикалық білім беру» атты халықаралық конференциясында (2016, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан);

– «Фараби Әлемі» атты студенттер мен жас ғалымдар конференциясында (2015, 2016, 2017, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан);

–«XXIX IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2017)» халықаралық конференциясында (2017, Paris, France);

– «СДФФФО-9» халықаралық конференциясында (2016, Алматы, Қазақстан);

– Профессор З.Ж Жанабаевтың 75 жылдығына арналған «Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент» 10-шы Халықаралық ғылыми конференциясында (2017, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан);

– әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, физика-техникалық факультетінің плазма физикасы, нанотехнология және компьютерлік физика, механика-математикалық факультетінің математикалық және компьютерлік моделдеу кафедраларының ғылыми семинарларында.

–ҚР ҒК БЖҒМ ақпараттық және есептеуіш технологиялар институтының ғылыми семинарларында.

Диссертацияның тақырыбының ғылыми жұмыстардың жоспарымен байланысы. Диссертациялық жұмыс келесі тақырыптардағы ҚР БЖҒМ ҒК «Ғылыми зерттеу жұмыстарын гранттық қаржыландыру» іргелі ғылыми - зерттеу жұмыстарының жоспарына сәйкес орындалған:

– «Инерциалды термоядролық синтездің күрделі құрамды плазманың оптикалық қасиеттері және элементар процестері» (2015-2017 жж., мем.регистрация №0115РК01037, шифры 3102/ГФ4);

– «Күрделі құрамды магнитоактивті плазманың қасиеттерін компьютерлік моделдеу» (2015-2017 жж., мем.регистрация №0115РК01042, шифры 3087/ГФ4);

– «Магнитті белсенді күрделі құрамды плазмадағы тозаңды-дыбысты солитондарды зерттеу» (2018-2020 жж., мем.регистрация №0118РК00609, шифры АР05132665/ГФ);

– «Плазма және плазма тектес орталардың физикасының іргелі мәселелерін зерттеу» (2018-2020 жж., шифры BR05236730/ГФ);

– «Комбинаторлық оптимизация программалар комплексінің, сандық әдістерінің және математикалық модельдерін құру және зерттеу» (2015-2017 жж.);

– «Білім беру бағдарламаларын және процестерін жүзеге асыру барысындағы Smart-технологияның онтологиялық және құралдық амалдарын қолдану негізінде білімді ұйымдастыру және ұсыну модельдері мен әдістемелерін құрастыру және зерттеу» (2018-2020 жж., мем.регистрация №АР05134973);

– «Сандық Қазақстанның дамуының бір негізі ретіндегі тұлғаның тұрақты дамуын ынталандыру үшін ақпараттық технологиялар мен жүйелерді құру» (2018-2020 жж., шифры BR05236839/ГФ);

Диссертацияның көлемі мен құрылымы. Диссертациялық жұмыс кіріспеден, төрт бөлімнен, қорытынды және 154 қолданылған әдебиеттер тізімінен, 135 негізгі компьютерлік тексттен, оның ішінде 73 суреттен және 1 кестеден тұрады.