

На правах рукописи

Лавриненко Ярослав

**ИССЛЕДОВАНИЕ НЕИДЕАЛЬНОЙ
ЭЛЕКТРОН-ИОННОЙ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ
ДИНАМИКИ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ**

Специальность 01.04.08 – Физика плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель: **Морозов Игорь Владимирович**
кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией теплофизических баз данных ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН

Официальные оппоненты: **Игнатов Александр Михайлович**
доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник теоретического отдела ФГБУН Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»

Решетняк Виктор Витальевич
кандидат технических наук, старший научный сотрудник отдела физики неидеальной плазмы центра теоретической физики и вычислительной математики АО «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук

Защита состоится «_____» _____ 2021 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 002.110.02 при ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, расположенном по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, экспозал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИВТ РАН и на сайте jih.t.ru.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Автореферат разослан «_____» _____ 2021 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 002.110.02,
доктор физико-математических наук

М.М. Васильев

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, 2021

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Неидеальная плазма и разогретое плотное вещество (*warm dense matter*) интенсивно исследуются во всем мире как экспериментально, так и теоретически. Неидеальная плазма — это экстремальное состояние вещества при высоких температурах и давлениях, свойства которого в высокой степени определяются взаимодействием составляющих его частиц (средняя потенциальная энергия межчастичного взаимодействия сравнима или превышает кинетическую энергию теплового движения). Эта особенность неидеальной плазмы обуславливает ряд общих специфических эффектов, таких как изменение характера дебаевского экранирования и усиление роли столкновительных процессов. В то время как для идеальной плазмы существуют достаточно точные теоретические модели, предсказывающие термодинамические и релаксационные свойства, неидеальные системы с кулоновским взаимодействием исследованы сравнительно мало.

Изучение свойств неидеальной плазмы требуется, в частности, для построения континуальных (гидродинамических, кинетических) моделей среды с учетом эффектов неидеальности, чем определяется актуальность настоящей работы для инженерных приложений и фундаментальных исследований в других областях. Термодинамические и релаксационные параметры неидеальной плазмы необходимы, например, для построения моделей инерционного термоядерного синтеза, описания поведения астрофизических объектов (белые карлики, внутреннее строение гигантских планет), диагностики вещества посредством рентгеновского томсоновского рассеяния. Таким образом, создание теоретических методов исследования неидеальной плазмы, в том числе основанных на компьютерном моделировании, представляется актуальной задачей.

Неидеальная плазма образуется при электровзрыве проводников [1], в прикатодной области высоковольтных разрядов [2], на стенках ускорителей под воздействием сильных электромагнитных полей, в твердых телах и металлических кластерах под действием лазерных импульсов или мощных пучков частиц [3, 4], в экспериментах по ударно-волновому сжатию [5–8] и др.

Компьютерное моделирование является необходимым этапом теоретического изучения свойств неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества и может быть использовано для получения уравнения состояния вещества и динамических функций, таких как оптическая отражательная способность, проводимость, динамический структурный фактор, характерные времена релаксационных процессов.

Большое количество результатов для неидеальной плазмы было получено методом классической молекулярной динамики (МД), основанной на численном решении уравнений движения электронов и ионов с заданным потенциалом взаимодействия [9–11]. Наиболее распространенными методами моделирования, позволяющими с большей точностью учитывать квантовые эффекты, доминирующие при высоких плотностях, являются методы квантовой молеку-

лярной динамики (Quantum molecular dynamics, QMD) [12–14], основанные на теории функционала плотности (Density functional theory, DFT) [15], а также метод Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям (Path integral Monte-Carlo, PIMC) [16, 17]. Методы QMD с высокой точностью описывают состояние вещества при низких температурах (ниже 10^4 K), в то время как PIMC используется в основном для высоких температур. Оба этих метода предъявляют высокие требования к вычислительным ресурсам и, соответственно, требуют больших объемов вычислений для получения статистически достоверных данных. При этом QMD и PIMC, в отличие от классической МД, не позволяют моделировать совместную динамику электронов и ионов, что необходимо для точного описания неравновесных процессов.

Численные методы, требующие меньших вычислительных затрат, позволяющие моделировать динамику электронной подсистемы и способные учитывать квантовые эффекты в моделируемом веществе, могут быть альтернативой методам квантовой молекулярной динамики и PIMC. Одной из таких альтернатив может быть метод молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП), предложенный для моделирования неидеальной плазмы в работе [18]. Этот метод является расширением классической молекулярной динамики и предполагает в своей основе получение квантово-механических средних от наблюдаемых величин вдоль траектории некоторой параметризованной волновой функции электронов, зависящей от времени. Ионы при этом считаются классическими частицами. Существуют несколько вариаций метода: без антисимметризации волновой функции (приближение Хартри) и с антисимметризацией волновых пакетов для электронов с одинаковым спином (Unrestricted Hartree–Fock) [19]. Также стоит отметить метод электронного силового поля (Electron Force Field, eFF), основанный на приближенном учете обменного взаимодействия [20].

Вычислительным преимуществом семейства методов МДВП в сравнении с QMD и PIMC является меньшая вычислительная сложность (время моделирования имеет квадратичную зависимость от количества частиц $t \sim N^2$) и возможность описывать электронную динамику. МДВП с антисимметризацией обладает худшей асимптотикой $t \sim N^4$, но позволяет корректно учитывать связанные электроны в атомах и молекулах, в отличие от оригинального метода МДВП, основанного на приближении Хартри.

Актуальность построения новых методов на основе МДВП вызвана необходимостью более точного учета обменно-корреляционного взаимодействия с сохранением быстродействия метода и возможности моделирования неадиабатической динамики электронов и ионов.

Цели и задачи диссертационной работы. Основными целями работы являются: разработка первопринципных методов атомистического моделирования и их применение для изучения свойств неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества; создание гибридного подхода, основанного на методе молекулярной динамики с волновыми пакетами и теории функционала плотности

для повышения точности моделируемых явлений; разработка алгоритма на основе указанного гибридного метода; интеграция разработанного алгоритма в существующие пакеты атомистического моделирования; создание эффективно-параллельного алгоритма для выполнения расчетов на суперкомпьютерных кластерах с графическими ускорителями; расчет равновесных и динамических свойств неидеальной плазмы водорода и дейтерия в широком диапазоне температур и плотностей.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

- разработана модель неидеальной электрон-ионной плазмы, основанная на представлении электронов в форме гауссовских волновых пакетов с учетом обменно-корреляционного взаимодействия, выраженного через функционал электронной плотности;
- исследована проблема неограниченного расплывания волновых пакетов в методе МДВП и предложено её решение, основанное на использовании отражающих граничных условий;
- исследовано влияние типа и параметров границ расчетной ячейки на результаты моделирования, предложены способы определения давления и плотности пространственно-ограниченной плазмы с учетом возможной неоднородности профиля электронной плотности внутри ячейки;
- предложен новый метод компьютерного моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы, основанный на комбинации метода молекулярной динамики с волновыми пакетами и теории функционала плотности (МДВП-ФП);
- разработан алгоритм расчета обменно-корреляционного взаимодействия на адаптивной пространственной сетке, существенно повышающий скорость проведения моделирования;
- выполнена интеграция алгоритма МДВП-ФП в пакет атомистического моделирования LAMMPS, обладающего высокой эффективностью распараллеливания на суперкомпьютерных кластерах;
- проведена адаптация алгоритма расчета обменно-корреляционного взаимодействия для использования на гибридных вычислительных системах, содержащих графические ускорители;
- проведено исследование быстродействия метода МДВП-ФП при расчете на последовательных и параллельных вычислительных системах, определена зависимость времени расчета от числа частиц в системе, эффективность распараллеливания и величины ускорения расчётов при использовании графических ускорителей;

- проведен расчет уравнения состояния и водородной плазмы в диапазоне температур от 10^4 до $5 \cdot 10^4$ К и концентраций электронов от 10^{19} до 10^{24} см^{-3} , результаты сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными и результатами компьютерного моделирования других авторов;
- проведен расчет ударной адиабаты дейтерия при давлениях до 350 ГПа, определена максимальная степень сжатия дейтерия, рассчитаны бинарные корреляционные функции, проведен анализ упорядоченности атомов в различных точках фазового пространства;
- разработан алгоритм для моделирования изоэнтропического сжатия с использованием метода МДВП-ФП, на его основе рассчитана изоэнтропа сжатия дейтерия при плотностях до 15 $\text{г}/\text{см}^3$ и давлениях до $3 \cdot 10^4$ ГПа;
- показана возможность применения метода МДВП-ФП для определения скорости электрон-ионной релаксации в неидеальной плазме.

Научная новизна. Представленная в работе модель неидеальной электрон-ионной плазмы и основанный на ней метод компьютерного моделирования неидеальной плазмы МДВП-ФП являются новыми. Оригинальность разработанного метода заключается в том, что для определения полной энергии системы электронов кинетическая энергия и электростатические вклады в энергию взаимодействия рассчитываются методом МДВП, а обменно-корреляционная энергия и ее производные рассчитываются путем вычисления функционала от электронной плотности, получаемой из текущих координат и ширин волновых пакетов. Для расчета функционала электронной плотности путем интегрирования по пространственной секте применяется оригинальный алгоритм распараллеливания с использованием графических ускорителей. Также в методе МДВП-ФП использован новый способ ограничения ширины волновых пакетов для свободных электронов, основанный на специальном типе граничных условий и связанный с ним метод расчета термодинамических параметров пространственно ограниченной плазмы.

Полученный метод МДВП-ФП обладает рядом уникальных особенностей:

- высокая скорость расчетов (МДВП-ФП позволяет с большей вычислительной эффективностью, чем в традиционных подходах метода функционала плотности, вычислять кинетическую и кулоновскую части энергии взаимодействия и не требует минимизации энергии на каждом шаге по времени);
- возможность моделирования совместной динамики электронов и ионов (в методах QMD такая возможность отсутствует);
- более точный учет квантово-механических эффектов электрон-электронного и электрон-ионного взаимодействия в сравнении с исходным методом МДВП и методом классической МД.

Также в работе представлены новые результаты для уравнения состояния водородной плазмы, изоэнтропы сжатия дейтерия при плотностях до 15 г/см^3 и давлениях до $3 \cdot 10^4 \text{ ГПа}$, ударной адиабаты дейтерия при давлениях до 350 ГПа , позволяющие уточнить интерпретацию имеющихся экспериментальных данных, а также оценить точность разработанного метода моделирования.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для фундаментальных исследований в области физики неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества, интерпретации экспериментальных данных по термодинамическим свойствам неидеальной плазмы водорода и дейтерия в области высоких давлений, создания эффективных методов компьютерного моделирования вещества в условиях облучения твердотельных мишеней интенсивными лазерными импульсами и потоками частиц, ударного сжатия, в астрофизических объектах, прикатодной области высоковольтных разрядов, на стенках ускорителей частиц и в других экстремальных состояниях.

Положения, выносимые на защиту:

1. Модель неидеальной электрон-ионной плазмы, основанная на представлении электронов в форме гауссовских волновых пакетов с учетом обменно-корреляционного взаимодействия, выраженного через функционал электронной плотности. Способ ограничения ширины волновых пакетов за счет применения отражающих граничных условий.
2. Метод компьютерного моделирования неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества на базе динамики волновых пакетов и вычисления функционала электронной плотности (МДВП-ФП). Алгоритм расчета обменно-корреляционного взаимодействия на адаптивной пространственной сетке. Масштабируемость алгоритма МДВП-ФП по числу частиц и эффективность его распараллеливания на графических ускорителях и суперкомпьютерных кластерах.
3. Уравнение состояния неидеальной плазмы водорода в диапазоне температур $10^4 - 5 \cdot 10^4 \text{ К}$ и концентраций электронов $10^{19} - 10^{24} \text{ см}^{-3}$. Расчет ударной адиабаты дейтерия при давлениях до 350 ГПа . Определение максимальной степени сжатия и изменения упорядоченности атомов дейтерия под воздействием высоких давлений.
4. Расчет изоэнтропы сжатия плазмы дейтерия при плотностях до 15 г/см^3 и давлениях до $3 \cdot 10^4 \text{ ГПа}$. Определение скорости электрон-ионной релаксации в неизотермической неидеальной плазме водорода методом МДВП-ФП.

Степень достоверности и апробация результатов. Основные результаты диссертации докладывались на 16-й международной конференции по фи-

зике неидеальной плазмы (PNP16), международной конференции по сильно скореллированным кулоновским системам (SCCS-2017), на 34-й и 36-й международных конференциях “Взаимодействие интенсивных пучков энергии с веществом”, на 33-й и 35-й международных конференциях “Уравнения состояния вещества”, на 63-й, 61-й и 59-й всероссийских научных конференциях МФТИ, на ежегодной научно-координационной сессии “Исследования неидеальной плазмы” в 2020, 2019, 2018 и 2017 годах. Всего работа была представлена в докладах на 17-ти конференциях.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 23-х печатных работах, из них 6 статей в рецензируемых журналах и 17 тезисов докладов.

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 5-ти глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 127 страниц, из них 109 страницы текста, включая 21 рисунок. Библиография включает 138 наименований на 15 страницах.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе проводится обзор литературы по имеющимся экспериментальным методам исследования неидеальной плазмы. Помимо этого, раздел включает описание методов атомистического моделирования, применяемых для теоретического изучения разогретого плотного вещества, таких как классическая молекулярная динамика, динамика волновых пакетов, теория функционала плотности и метод Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям.

Метод классической молекулярной динамики (МД) основывается на решении уравнений движения Ньютона для точечных частиц, представляющих собой молекулы, атомы, электроны и ионы, взаимодействие между которыми определяется потенциалом взаимодействия. В случае неидеальной плазмы в качестве потенциалов используют функции, совпадающие с потенциалом Кулона на больших расстояниях и имеющих конечные значения энергии взаимодействия вблизи нуля. Такой подход в классической МД успешно применяется для исследования свойств неидеальной плазмы в области низких плотностей и больших температур. Недостатками классической МД является низкая точность учета квантово-механических эффектов, ограниченная предположениями, сде-

ланными при конструировании потенциалов взаимодействия.

Дальнейшим развитием классической МД в сторону более высокой точности моделирования межчастичного взаимодействия в плазме является метод молекулярной динамики волновых пакетов (МДВП). В этом методе рассматривается система точечных классических ионов и квантовых электронов, волновая функция которых параметризована модельной функцией. Наиболее частым вариантом параметризации является изотропный Гауссовый волновой пакет переменной ширины, характеризуемый положением центра пакета \vec{r} , его шириной s и сопряженными с ними значениями импульсов \vec{p} и p_s соответственно

$$\varphi(\vec{x}) = \left(\frac{3}{2\pi s^2} \right)^{3/4} \exp \left\{ - \left(\frac{3}{4s^2} - \frac{ip_s}{2\hbar s} \right) (\mathbf{x} - \mathbf{r})^2 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}) \right\}. \quad (1)$$

Эволюция параметров волновых пакетов следует из вариационного принципа и в некоторых случаях она может быть описана уравнениями гамильтоновой динамики для параметров волновых пакетов. Так, в случае конструирования многоэлектронной волновой функции как произведения волновых пакетов в приближении Хартри, уравнения, описывающие эволюцию во времени положения и ширины волнового пакета, а также их сопряженных импульсов, имеют вид

$$\dot{\mathbf{r}}_k = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_k}, \quad \dot{\mathbf{p}}_k = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_k}, \quad \dot{s}_k = \frac{\partial H}{\partial p_{sk}}, \quad \dot{p}_{sk} = -\frac{\partial H}{\partial s_k}. \quad (2)$$

Данный подход позволяет избавиться от необходимости задавать потенциал взаимодействия между частицами и повышает точность описания электронной подсистемы, но такая модель все еще имеет проблемы с описанием связанных состояний атомов и молекул с несколькими электронами, а также состояний с высокой плотностью электронов, когда эффектами вырождения электронного газа нельзя пренебречь. Более сложные приближения (антисимметризованные волновые пакеты — АМДВП, Electron Force Field — eFF) повышают точность описания квантовых явлений в веществе, но требуют большого объема вычислений для получения статистически значимых результатов.

Несмотря на большое разнообразие вариаций молекулярной динамики волновых пакетов, получение численного метода с минимальным количеством приближений и хорошей производительностью все еще остается актуальной задачей, так как существующие варианты являются либо вычислительно сложными (АМДВП), либо требуют ввода эмпирических функционалов (eFF). Более эффективным может быть подход, основанный на объединении метода МДВП в приближении Хартри и теории функционала плотности, разработка которого являлась одной из целей настоящей работы.

В первой главе приведены также описания первопринципных подходов, основанных на теории функционала плотности (DFT) и методе Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям (PIMC). Эти подходы обладают высокой точностью описания квантово-механических явлений, но требуют большого

объема вычислений и не способны моделировать неадиабатическую динамику электронов и ионов.

Во второй главе представлен новый подход к описанию системы электронов в плазме, основанный на динамике волновых пакетов и теории функционала плотности — МДВП-ФП. В работе приведено теоретическое обоснование этого подхода, причем особое внимание уделено граничным условиям, к которым семейство методов динамики волновых пакетов очень чувствительно. В дополнение предложены способы применения метода МДВП-ФП для неравновесного расчета изоэнтропы сжатия и ударной адиабаты вещества.

Использование МДВП в приближении Хартри дает легко решаемые уравнения динамики волновых пакетов, а учет обменных и корреляционных эффектов проводится в рамках теории функционала плотности путем добавления в гамильтониан моделируемой системы H дополнительного члена, выражающего обменно-корреляционную энергию через электронную плотность

$$H_{\text{wpm-dft}} = H + (T_s[n] - \sum_i T_s[n_i]) + (E_{\text{xc}}[n] - \sum_i E_{\text{xc}}[n_i]), \quad (3)$$

где n — суммарная локальная плотность электронов, $n_i = \varphi_i(\vec{r})\varphi_i^*(\vec{r})$ — вклад в электронную плотность от i -го волнового пакета, $T_s[n]$ — функционал, описывающий кинетическую энергию, $E_{\text{xc}}[n]$ — обменно-корреляционный функционал, аналогичный используемым в DFT. В качестве обменно-корреляционного функционала в перелагаемом методе предлагается использовать приближение локальной электронной плотности (LDA) как дающее оптимальный баланс точности и сложности вычислений.

В качестве граничных условий для метода предложены отражающие стенки (рис. 1). В отличие от периодических граничных условий, типично применяемых для классической МД, отражающие граничные условия имеют ряд недостатков, однако позволяют избежать неограниченного уширения волновых пакетов для слабозаимодействующих электронов [21].

Использование отражающего потенциала в качестве граничных условий приводит к возникновению внешнего воздействия на моделируемую систему, которое искажает профили электронной плотности и вводит систематическую погрешность в термодинамические параметры изучаемой системы. Минимизировать возникающие эффекты можно путём увеличения размеров моделируемого вещества или же расчётом интересующих параметров внутри ячейки моделирования, вдали от приграничного слоя. Дополнительно из-за искажения профиля электронной плотности предлагается в процессе расчёта вычислять среднюю электронную плотность только во внутренней области моделируемой ячейки

$$\langle n_e(\mathbf{r}) \rangle_{V/8, t} = \frac{8}{V} \int_{-L_x/4}^{L_x/4} \int_{-L_y/4}^{L_y/4} \int_{-L_z/4}^{L_z/4} \left(\sum_{k=1}^{N_e} \varphi_k(\mathbf{r})\varphi_k^*(\mathbf{r}) \right) d\mathbf{r}. \quad (4)$$

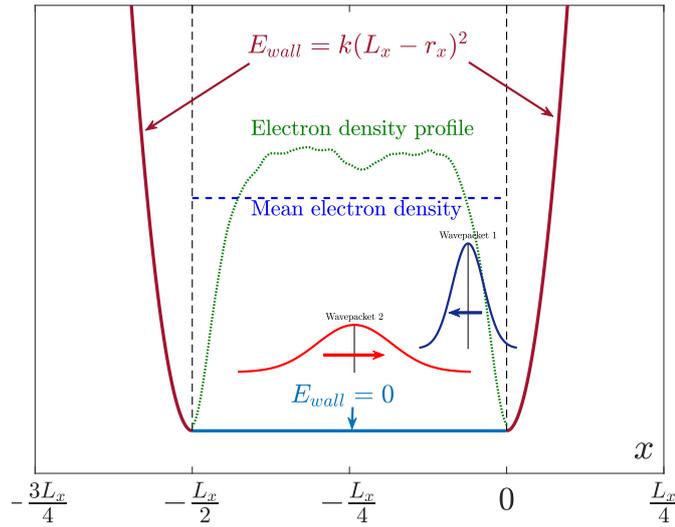


Рис. 1. Ячейка моделирования с ограничивающим потенциалом (темно-красные кривые). Средняя электронная плотность для равномерно распределенных электронов показана синей пунктирной линией, зеленая пунктирная линия — пример профиля электронной плотности, полученного из моделирования. На рисунке также показаны соотношения средней ширины волновых пакетов в центре и на границе ячейки.

Выбранный тип граничных условий позволяет выполнять расчёт некоторых термодинамических параметров, таких как давление, вычисление которого с использованием вириальной теоремы не вполне обосновано из-за наличия внешнего воздействия на систему от граничных условий.

В третьей главе описано построение численного алгоритма на базе разработанного метода МДВП-ФП. Представлено подробное описание алгоритмов расчета обменно-корреляционной энергии с использованием регулярных и адаптивных пространственных сеток. Приведен алгоритм построения адаптивной сетки с изменяемым шагом, опирающийся на параметры волновых пакетов. Описаны основные оптимизационные подходы, применяемые для увеличения быстродействия. В заключение представлены результаты тестов производительности и масштабирования метода, выполнено сравнение характерных времён работы алгоритмов МДВП-ФП и МКВП-ФП (аналог МДВП-ФП с использованием алгоритма Монте-Карло вместо динамики пакетов) с аналогичными расчетами, проведенными с помощью квантовой молекулярной динамики.

Расчет обменно-корреляционного функционала и его производных в методе МДВП-ФП выполняется путем численного интегрирования по трёхмерной пространственной сетке, содержащей значения локальной плотности электронов, полученные из координат и ширин волновых пакетов. Пространственные сетки могут быть с регулярным шагом или же подстраиваемым к градиенту электронной плотности — адаптивные сетки. Последние являются более эффективными, так как минимизируют количество избыточных вычислений. Построение адаптивной сетки выполняется, основываясь на параметрах волновых пакетов и не требует традиционной для данного типа сеток процедуры

разбиения и объединения ячеек регулярной сетки.

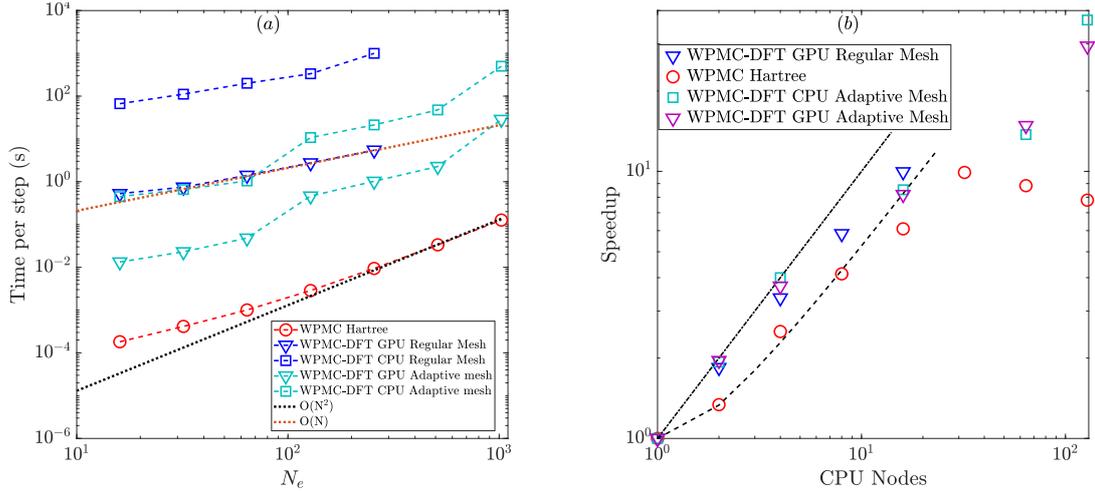


Рис. 2. Время выполнения одного шага алгоритмов МКВП и МКВП-ФП в зависимости от числа частиц (а) и ускорение от количества вычислительных ядер при $N_e = 1024$ (б). Красные кружки соответствуют оригинальному методу МКВП, синие квадраты и треугольники — методу МКВП-ФП с регулярной сеткой, выполняющемуся на ЦП (квадраты) и ГУ (треугольники). Голубые квадраты и треугольники соответствуют методу МКВП-ФП с адаптивной пространственной сектой с использованием ЦП и ГУ для вычислений соответственно. Верхняя и нижняя штриховые линии на рисунке (а) отображают линейную и квадратичную зависимости от числа частиц. Штриховая линия на рисунке (б) — теоретическая зависимость ускорения $R = (p^2(N-1))/(p(2N-1)-N)$ от числа ядер p , штрихпунктирная линия — идеальная кривая эффективности распараллеливания $R = p$.

Использование графических ускорителей (ГУ) и суперкомпьютеров на их базе позволяет существенно увеличить производительность расчетов для многих алгоритмов, основанных на решении уравнений движения системы частиц и обеспечить ускорение вычислений на несколько порядков в сравнении с центральным процессором (ЦП). В случае МКВП-ФП, как показано на рис 2а, совокупное применение адаптивных сеток и ГУ позволило ускорить вычисления на 3–4 порядка. Также рисунок демонстрирует, что время расчета для алгоритма МКВП-ФП растет с увеличением числа частиц не быстрее, чем $O(N_e^2)$.

Методы МДВП-ФП и МКВП-ФП были адаптированы для вычислений как на ГУ, так и на многопроцессорных вычислительных кластерах. При создании параллельной версии в качестве основы использовался пакет МД моделирования LAMMPS. Как видно из рисунка 2б, при использовании 128 вычислительных узлов расчеты ускоряются в 40 раз по сравнению с выполнением программы на одном узле. Ограничением эффективности масштабирования является часть алгоритма, ответственная за расчет кулоновского взаимодействия, которая требует пересылки большого количества данных между процессами.

В четвертой главе представлены результаты моделирования неидеальной водородной и дейтериевой плазмы методом МДВП-ФП и сравнения с методами классической МД, МДВП в приближении Хартри, а также РМС. На

основании этих расчётов определены границы применимости методов МДВП и МДВП-ФП. Помимо этого, в главе дано описание расчетов, посвященных построению ударной адиабаты дейтерия методом МДВП-ФП и их сравнение с экспериментальными данными и другими теоретическими моделями.

Результатом добавления обменно-корреляционной энергии в метод МДВП является улучшение точности описания связанных молекулярных состояний. Так, из-за введения дополнительной энергии метод МДВП-ФП наиболее точно из всего семейства методов МДВП воспроизводит энергию диссоциации молекулы водорода, расчетное значение которой составляет $0.155 E_h$ по сравнению с точным значением $0.166 E_h$ (рис. 3).

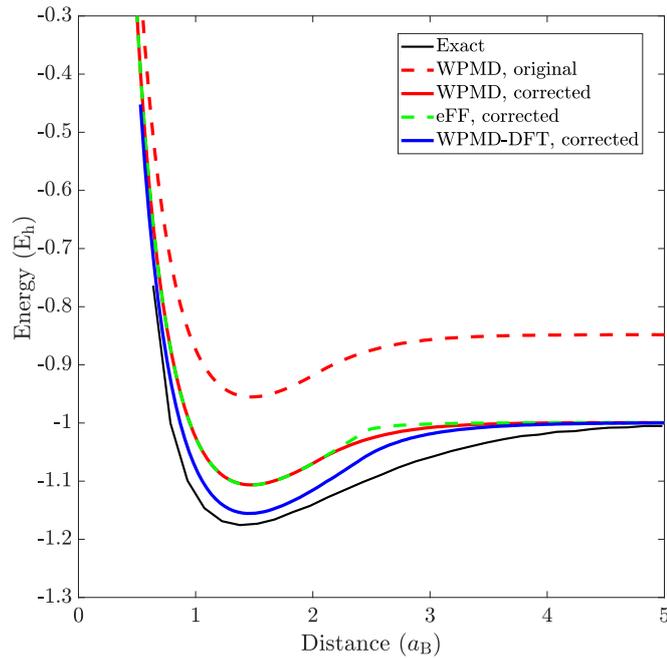


Рис. 3. Энергия связи молекулы H_2 в зависимости от межатомного расстояния, рассчитанная с использованием исходного алгоритма МДВП (пунктирная красная линия), МДВП с коррекцией на энергию изолированного состояния двух атомов H (сплошная красная линия), eFF с коррекцией (пунктирная зеленая линия) и МДВП-ФП с коррекцией (сплошная синяя линия). Точное значение показано черной сплошной линией.

В данной работе метод МДВП-ФП использовался для расчета энергии водородной плазмы в диапазоне температур $T = 10^4 - 5 \cdot 10^4$ К и концентраций электронов $n_e = 10^{20} - 5 \cdot 10^{24}$ см $^{-3}$. На рис. 4а результаты расчетов для $T = 3 \cdot 10^4$ К сопоставлены с расчетами методами классической МД, МДВП без антисимметризации, eFF и РИМС. Как видно из рисунка, учет обменно-корреляционной энергии в методе МДВП-ФП позволил получить хорошее качественное согласие с первопринципными расчетами методом РИМС в области высоких плотностей $n_e = 10^{22} - 10^{23}$ см $^{-3}$, где метод МДВП, как и классическая МД, оказался неприменимым. Разница абсолютных значений энергий в методах МДВП-ФП и РИМС может быть связана с различным способом учета энергии связанных состояний электронов и ионов.

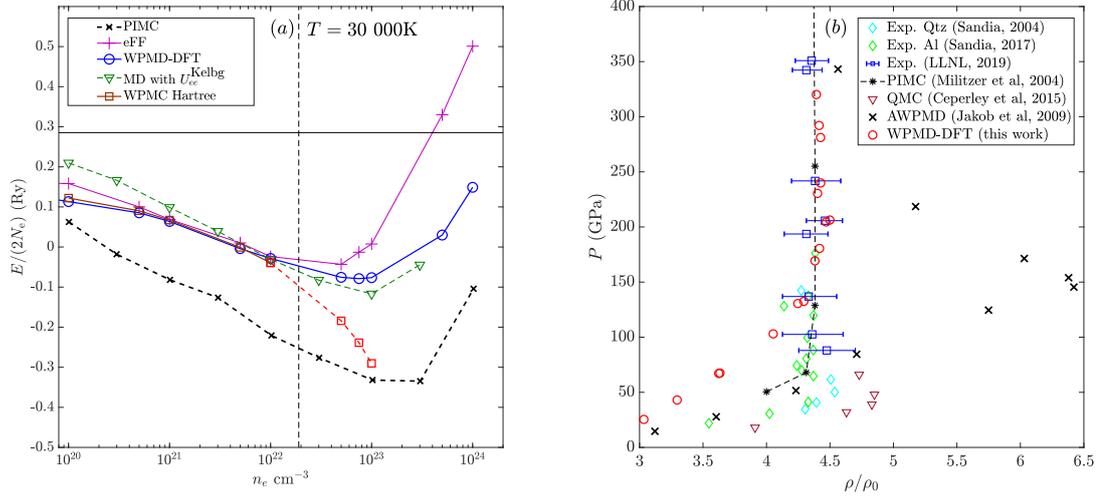


Рис. 4. Внутренняя энергия водородной плазмы на атом (а) и адиабата ударного сжатия (адиабата Гюгонио) дейтерия (b). На рисунке (а) синяя кривая соответствует значениям энергии, полученным в МКВП-ФП, коричневая — МКВП в приближении Хартри, зеленые треугольники — классическая МД с потенциалом Кельба [22], фиолетовые крестики — eFF, черная кривая — PIMC. Вертикальная пунктирная линия соответствует границе вырождения $n_e \lambda_B^3 = 1$. Красная штриховая линия показывает область некорректных результатов для метода МКВП. На рисунке (b) результаты моделирования методом МДВП-ФП представлены красными кружками, расчеты методом АДВП [23] — черные крестики, расчеты методами квантового Моте-Карло [24] и Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям [25] представлены треугольниками и черными звездами соответственно. Экспериментальные данные Сандийской национальной лаборатории [5, 26] отражены в виде ромбов зеленого и бирюзового цвета. Эксперименты по лазерному сжатию вещества [6] представлены синими квадратами.

Ударная адиабата дейтерия, рассчитанная методом МДВП-ФП, в отличие от результатов МДВП с антисимметризацией с хорошей точностью воспроизводит предельную степень сжатия, наблюдаемую в эксперименте, а также описывает переход от молекулярного к атомарному состоянию дейтерия. Причиной завышения давления в области низких температур может быть недостаточная точность параметризации волновой функции электронов и используемого обменно-корреляционного потенциала, что ограничивает применимость МДВП-ФП для низких температур ($T < 5000$ K).

В пятой главе продемонстрировано применение метода МДВП-ФП для исследования динамических и релаксационных процессов: изоэнтропического сжатия и электрон-ионной релаксации в неизотермической плазме.

Для построения изоэнтропы дейтерия был применен оригинальный подход, заключающийся в ступенчатом сжатии вещества с контролируемой скоростью сжатия. Выбор последней основывался на необходимости обеспечения изоэнтропичности процесса и проводился путем исследования сходимости кривой $P(\rho)$ при уменьшении скорости сжатия. В дополнение к динамическому подходу, также был применен традиционный метод Ферми-Зельдовича. Кривые, полученные методом МДВП-ФП (рис. 5) с хорошей точностью согласуются с

данными, полученными в экспериментах по ударному сжатию, хотя значения температур, предсказанных методом МДВП-ФП, являются несколько заниженными в сравнении с другими теоретическими моделями.

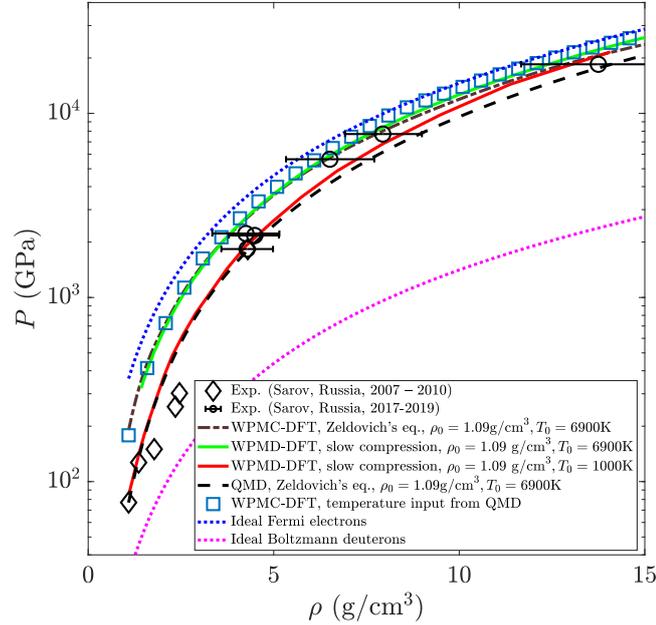


Рис. 5. Изоэнтропы ударно сжатого дейтерия в плоскости $P - \rho$, рассчитанные различными численными методами. Синие квадраты — статические расчеты МДВП-ФП для температур, рассчитанных методом QMD [27], зеленая и красная линии — динамические расчеты МДВП-ФП для различных начальных точек. Коричневая штрихпунктирная кривая — численное решение уравнения Ферми-Зельдовича на сетке термодинамических параметров, определенных с помощью МДВП-ФП ($\rho_0 = 1.09 \text{ г/см}^3$, $T_0 = 6900 \text{ К}$). Черная штриховая линия — расчеты методом QMD [27]. Черные ромбы и кружки соответствуют экспериментальным данным [28, 29, 29–32]. Верхняя и нижняя пунктирные линии показывают давление идеального газа Больцмана и Ферми соответственно.

Описанный динамический подход обеспечивает расчет изоэнтропы, используя лишь одну траекторию системы, поэтому скорость его работы значительно превосходит метод, основанный на расчете термодинамических параметров на сетке $\rho - T$ с последующим численным решением уравнения Ферми-Зельдовича.

Постановка численного эксперимента для моделирования электрон-ионной релаксации соответствовала работе [33]. Характерное время температурной релаксации, полученное методом МДВП-ФП при $n_e = 10^{22} \text{ см}^{-3}$, составило $58 \pm 8 \text{ фс}$ для плазмы с модельным соотношением масс ионов и электронов $m_i/m_e = 20$, и $250 \pm 20 \text{ фс}$ для $m_i/m_e = 100$ (рис. 6). В данном случае методы МДВП и МДВП-ФП показали близкие результаты, что подтверждает возможность применения МДВП-ФП для исследования неравновесных систем и процессов. Напомним, что при более высоких плотностях плазмы метод МДВП оказывается неприменимым, а методы квантовой молекулярной динамики (QMD) и РМС не имеют возможности моделирования неадиабатической динамики электронов и ионов. Таким образом, метод МДВП-ФП остается практически

единственным подходом для моделирования релаксационных и динамических процессов при $n_e > 10^{22} \text{ см}^{-3}$.

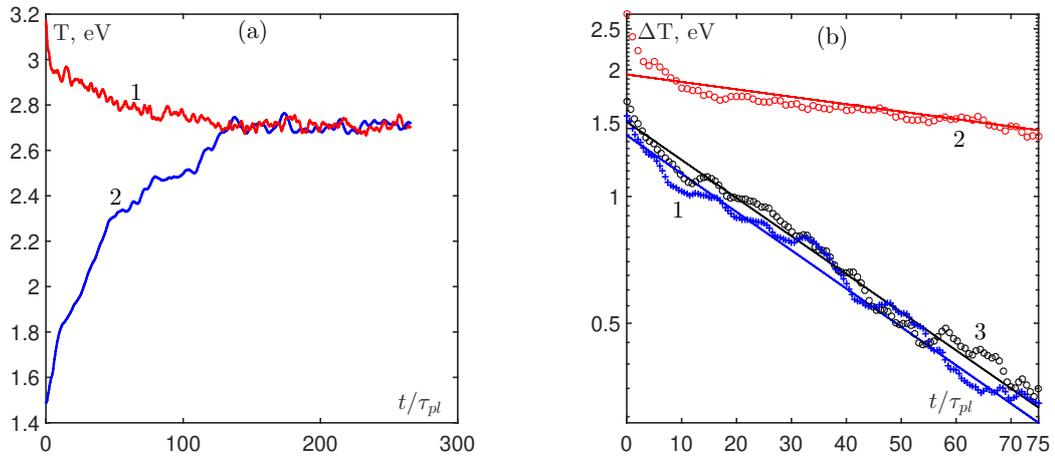


Рис. 6. (а) Зависимость температур электронов (1) и ионов (2) от времени, полученная методом МДВП в приближении Хартри, для концентрации электронов $n_e = 10^{22} \text{ см}^{-3}$ и модельного соотношения масс ионов и электронов $m_i/m_e = 20$. (б) Эволюция разности температур электронов и ионов от времени: МДВП-ФП для $m_i/m_e = 20$ (1) и $m_i/m_e = 100$ (2), МДВП в приближении Хартри для $m_i/m_e = 20$ (3). Сплошные линии — экспоненциальная аппроксимация.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предложена модель неидеальной электрон-ионной плазмы МДВП-ФП, основанная на представлении электронов в форме гауссовских волновых пакетов и учете обменно-корреляционного взаимодействия, выраженного через функционал электронной плотности. Показано, что использование отражающих граничных условий позволяет решить проблему расплывания волновых пакетов, а влияние этого типа граничных условий на измеряемые характеристики плазмы можно учесть за счет анализа профиля электронной плотности внутри расчетной ячейки.
2. На базе модели МДВП-ФП разработан метод компьютерного моделирования неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества. Показано, что расчет обменно-корреляционного взаимодействия может быть ускорен за счет использования адаптивной пространственной сетки, а также применения графических ускорителей (ГУ). Совокупное применение адаптивных сеток и ГУ позволяет сократить время вычислений на 3 – 4 порядка величины, а интеграция алгоритма МДВП-ФП в пакет LAMMPS позволяет выполнять расчеты на суперкомпьютерных кластерах с ускорением до 40 раз на 128 вычислительных узлах. Асимптотика зависимости времени расчета от числа частиц ограничена квадратичной функцией.
3. С помощью метода МДВП-ФП исследованы равновесные свойства неидеальной плазмы водорода и дейтерия. На примере молекулы водорода показано, что учет обменно-корреляционного взаимодействия улучшает точность моделирования многоэлектронных систем. Расчет уравнения состояния неидеальной плазмы водорода показывает преимущества метода в области концентраций электронов $10^{22} - 10^{24} \text{ см}^{-3}$ и дает качественное совпадение с расчетами более высокого уровня. Расчет ударной адиабаты дейтерия демонстрирует хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными.
4. На примере расчетов изоэнтропы сжатия плазмы дейтерия и электрон-ионной релаксации в неизотермической неидеальной плазме водорода продемонстрирована способность метода МДВП-ФП моделировать динамические и неравновесные процессы вне адиабатического приближения. Данная способность, в совокупности с удовлетворительным согласием с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными по равновесным свойствам неидеальной плазмы, делает МДВП-ФП уникальным расчетным методом в области высоких плотностей, где подходы классической молекулярной динамики и метода волновых пакетов без учета обменно-корреляционных эффектов оказываются неприменимыми.

Основные публикации по теме диссертации

1. Lavrinenko Ya. S., Morozov I. V., Valuev I. A. High performance wave packet molecular dynamics with density functional exchange-correlation term for non-ideal plasma simulations // J. Phys.: Conf. Ser. — 2021. — Vol. 1787, no. 1. — P. 012043.
2. Lavrinenko Ya. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Wave packet molecular dynamics–density functional theory method for non-ideal plasma and warm dense matter simulations // Contrib. Plasma Phys. — 2019. — Vol. 59, no. 4-5. — P. e201800179.
3. Lavrinenko Ya. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Thermodynamic properties of the nonideal hydrogen plasmas: Comparison of different simulation techniques // J. Phys. Conf. Ser. / IOP Publishing. — Vol. 946. — 2018. — P. 012097.
4. Relaxation and collective excitations of cluster nano-plasmas / Heidi Reinholz, Gerd Röpke, Ingrid Broda et al. // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2017. — Vol. 51, no. 1. — P. 014001.
5. Lavrinenko Ya. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Reflecting Boundary Conditions for Classical and Quantum Molecular Dynamics Simulations of Nonideal Plasmas // Contrib. Plasma Phys. — 2016. — Vol. 56, no. 5. — P. 448–458.
6. Lavrinenko Ya. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Reflecting boundary conditions for classical molecular dynamics simulations of nonideal plasmas // J. Phys. Conf. Ser. — 2016. — Vol. 774, no. 1. — P. 012148.

Список литературы

1. Measurement of the electric conductivity of tungsten in a continuous liquid-to-gas transition / V. N. Korobenko, A. D. Rakhel, A. I. Savvatimskiy, V. E. Fortov // *Plasma Phys. Rep.* — 2002. — Vol. 28, no. 12. — P. 1008–1016.
2. Jüttner B. Cathode spots of electric arcs // *J. Phys. D.* — 2001. — Vol. 34, no. 17. — P. R103.
3. Plasmon-Enhanced Electron Acceleration in Intense Laser Metal-Cluster Interactions / Th. Fennel, T. Döppner, J. Passig et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Apr. — Vol. 98. — P. 143401.
4. Sitnikov D. S. Time-resolved interference microscopy for studying nonideal plasma formed by high-power femtosecond laser pulses // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2019. — Vol. 1421. — P. 012001.
5. Knudson M. D., Desjarlais M. P. High-precision shock wave measurements of deuterium: Evaluation of exchange-correlation functionals at the molecular-to-atomic transition // *Phys. Rev. Lett.* — 2017. — Vol. 118, no. 3. — P. 035501.
6. Shock compression of liquid deuterium up to 1 TPa / A. Fernandez-Pañella, M. Millot, D. E. Fratanduono et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2019. — Vol. 122, no. 25. — P. 255702.
7. Quasi-Isentropic Compression of a Nonideal Plasma of Deuterium and its Mixture with Helium at Pressures up to 250 GPa / M. A. Mochalov, R. I. Il'kaev, V. E. Fortov et al. // *J. Exp. Theor. Phys.* — 2021. — Vol. 132, no. 6. — P. 985–998.
8. The interaction of laser radiation with strongly coupled plasmas / Yu. B. Zaporozhets, V. B. Mintsev, H. Reinholz, G. Röpke // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2021. — Vol. 1787. — P. 012048.
9. Hansen J. P., McDonald I. R. Microscopic simulation of a strongly coupled hydrogen plasma // *Phys. Rev. A.* — 1981. — Vol. 23. — P. 2041–2059.
10. Pressure fluctuations in nonideal nondegenerate plasma / R. G. Bystryi, Ya. S. Lavrinenko, A. V. Lankin et al. // *High Temp.* — 2014. — Vol. 52, no. 4. — P. 475–482.
11. Molecular dynamics calculation of thermal conductivity and shear viscosity in two-component fully ionized strongly coupled plasma / A. A. Bobrov, S. Y. Bronin, A. B. Klyarfeld et al. // *Phys. Plasmas.* — 2020. — Vol. 27, no. 1. — P. 010701.
12. Holst B., Redmer R., Desjarlais M. P. Thermophysical properties of warm dense hydrogen using quantum molecular dynamics simulations // *Phys. Rev. B.* — 2008. — May. — Vol. 77. — P. 184201.
13. Norman G. E., Saitov I. M., Sartan R. A. Metastable molecular fluid hydrogen at high pressures // *Contrib. Plasma Phys.* — 2019. — Vol. 59, no. 6. — P. e201800173.
14. Minakov D. V., Paramonov M. A., Levashov P. R. Thermophysical properties

- of liquid molybdenum in the near-critical region using quantum molecular dynamics // *Phys. Rev. B.* — 2021. — Vol. 103, no. 18. — P. 184204.
15. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // *Phys. Rev.* — 1965. — Vol. 140, no. 4A. — P. A1133.
 16. Thermodynamics of hot dense H-plasmas: path integral Monte Carlo simulations and analytical approximations / V. S. Filinov, M. Bonitz, W. Ebeling, V. E. Fortov // *Plasma Phys. Control. Fusion.* — 2001. — Vol. 43, no. 6. — P. 743.
 17. Militzer B., Ceperley D. M. Path integral Monte Carlo simulation of the low-density hydrogen plasma // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 63, no. 6. — P. 066404.
 18. Klakow D., Toepffer C., Reinhard P.-G. Semiclassical molecular dynamics for strongly coupled Coulomb systems // *J. Chem. Phys.* — 1994. — Vol. 101. — P. 10766–10774.
 19. Wave packet simulation of dense hydrogen / B. Jakob, P.-G. Reinhard, C. Toepffer, G. Zwicknagel // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Vol. 76. — P. 036406.
 20. Su J. T., Goddard III W. A. Excited Electron Dynamics Modeling of Warm Dense Matter // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 185003.
 21. Morozov I. V., Valuev I. A. Localization constraints in Gaussian wave packet molecular dynamics of nonideal plasmas // *J. Phys. A.* — 2009. — Vol. 42. — P. 214044.
 22. Filinov A. V., Bonitz M., Ebeling W. Improved Kelbg potential for correlated Coulomb systems // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36, no. 22. — P. 5957.
 23. Wave packet simulations for the insulator-metal transition in dense hydrogen / B. Jakob, P.-G. Reinhard, C. Toepffer, G. Zwicknagel // *J. Phys. A.* — 2009. — Vol. 42. — P. 214055.
 24. Molecular-atomic transition along the deuterium Hugoniot curve with coupled electron-ion Monte Carlo simulations / N. M. Tubman, E. Liberatore, C. Pierleoni et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Vol. 115, no. 4. — P. 045301.
 25. Bonev S. A., Militzer B., Galli G. Ab initio simulations of dense liquid deuterium: Comparison with gas-gun shock-wave experiments // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69, no. 1. — P. 014101.
 26. Principal Hugoniot, reverberating wave, and mechanical reshock measurements of liquid deuterium to 400 GPa using plate impact techniques / M. D. Knudson, D. L. Hanson, J. E. Bailey et al. // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69, no. 14. — P. 144209.
 27. Minakov D. V., Paramonov M. A., Levashov Pavel R. Consistent interpretation of experimental data for expanded liquid tungsten near the liquid-gas coexistence curve // *Phys. Rev. B.* — 2018. — Vol. 97, no. 2. — P. 024205.
 28. Измерение сжимаемости дейтериевой плазмы при давлении 1800 ГПа / М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортвов и др. // *Письма в ЖЭТФ.* — 2010. — Т. 92, № 5. — С. 336–340.
 29. Термодинамические параметры гелия при ударно-волновом и квазиизэнтро-

- пическом сжатиях в области давлений до 4800 ГПа и степенях сжатий до 900 / М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др. // ЖЭТФ. — 2017. — Т. 152, № 5. — С. 1113–1130.
30. Квазиизэнтропическая сжимаемость дейтерия в области давлений около 12 ТПа / М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др. // Письма в ЖЭТФ. — 2018. — Т. 107, № 3. — С. 173–179.
31. Dynamics of supernova bounce in laboratory / S. I. Blinnikov, R. I. Ilkaev, M. A. Mochalov et al. // Phys. Rev. E. — 2019. — Vol. 99, no. 3. — P. 033102.
32. Phase transition in a strongly nonideal deuterium plasma generated by quasi-isentropic compression at megabar pressures / V. E. Fortov, R. I. Ilkaev, V. A. Arinin et al. // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Vol. 99, no. 18. — P. 185001.
33. Standard of molecular dynamics modelling and simulation of relaxation / A. Yu. Kuksin, I. V. Morozov, G. E. Norman et al. // Mol. sim. — 2005. — Vol. 31. — P. 1005–1017.

Научное издание

Лавриненко Ярослав

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

на тему:

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕИДЕАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОН-ИОННОЙ ПЛАЗМЫ
МЕТОДОМ ДИНАМИКИ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

Подписано в печать _____. Формат 60 × 90 1/16. Тираж ____ экз.
Заказ _____.