

РЕЦЕНЗИЯ

върху дисертационен труд за придобиване на образователна и научна степен „доктор“

Автор на дисертационния труд: **Росица Андреева Павлова**

Тема на дисертационния труд: **Компютърно моделиране на капацитивни разряди**

Професионално направление: **4.6 Информатика и компютърни науки**

Рецензент: **Станимир Тодоров Колев, д-р, доцент в СУ „Св. Кл. Охридски“**

Дисертационният труд съдържа общо 147 страници, разделени в увод, литературен обзор и три глави, представящи изследванията на докторанта. Цитирани са 114 литературни източника и са включени 94 фигури и 3 таблици. Най-общо, работата комбинира компютърни методи за изследване на физиката на различни процеси, но най-вече поведението на високочестотен капацитивен разряд при ниско налягане.

Актуалност

Макар че капацитивните разряди са познати отдавна, използват се широко и са изследвани в дълбочина от много изследователски групи през последни 30-40 години, изследванията в тази дисертация показват, че все още има определени конфигурации и режими на тези разряди, които не са изследвани и в същото време биха представлявали интерес за определени приложения. В този смисъл, **темата на изследванията продължава да бъде актуална** и работата обогатява познанията за тях.

Познаване на проблема

В литературният обзор с обем от 52 страници е разгледана с разбиране, най-важната информация в литературата, касаеща изследванията, включени в дисертацията. В глава 1.1 е представен използваният в дисертацията метод на частица в клетка (Particle in cell PIC) и методът на Монте Карло (Monte Carlo Collisions MCC) за кинетично моделиране на плазма. Макар че основните техни характеристики са споменати, тази част би могла да бъде разширена. PIC методът е описан сравнително скромно и смятам, че повече подробности трябваше да се представят. Например, не са дадени подробности какво се случва ако не са изпълнени условията споменати на страница 4, какви други модификации на PIC методът съществуват в литературата и защо избраният класически вариант на използваният подход е бил предпочетен, какво уравнение всъщност решава PIC методът, защо той е за предпочитане пред това да се симулира електростатичното взаимодействие на частиците всяка със всяка, каква форма на разпределението на заряда на частиците в пространството се възприема при избраният метод (форма на частиците) и съответно как математически това се отразява

на схемите за притегляне на заряда към възлите на мрежата и съответно на полето към позициите на частиците. Повече подробности за горепосочените въпроси не са непременно задължителни и не представляват критичен пропуск, но биха направили работата по-пълноценна като се има предвид, че PIC методът е в основата на съществена част от дисертацията. По отношение на MCC методът, би било добре да се добави какво приближение е наложено, за да се изведе изразът за вероятността на удар на страница 5 горе. Останалата част от литературния обзор е като цяло изчерпателна и според мен не изисква разширение, което ми позволява да обобща, че ***литературния обзор в достатъчна степен представя разглежданата област, макар че има някои пропуски, най-вече по отношение на PIC методът.***

Методика на изследването и достоверност на получените резултати

Изследванията в дисертацията комбинират компютърни методи и анализ на сложен физичен проблем. Числените модели и симулации представляват изключително ценен инструмент за анализ на такива системи, чието експериментално изследване е сериозно предизвикателство и трудно би могло да даде толкова подробна информация за процесите в плазмата. Използването на числените симулации и за учебни цели комбинирани с добра визуализация, както е направено в последната глава на дисертацията, е друго тяхно полезно приложение и дава възможност обучаваните да реализират различни виртуални експерименти.

В част 2.1 е представен разработения MCC модел за изследване на функцията на разпределение. Направено е надлежно валидиране на модела чрез пресмятане на случаи, за които има аналитично решение. В 2.2 е представен разработеният PIC/MCC модел, който е използван за получаване на резултатите в глава 3. В 2.3 е представен подходът за преобразуване на модела в паралелен. Това е осъществено на базата на OpenMP, което, по мое лично мнение, е най-подходящият начин за разглеждания PIC/MCC, тъй като позволява бързо преобразуване на програмния код за компютри със споделена памет. Направено е и изследване за ефективността на паралелизирането на кода, като са осъществени тестове при различен брой ядра. За съжаление тук не е представена подробна информация за условията на експеримента, а именно какъв модел процесор на Intel е използван и дали процесорът е настроен на фиксирана честота. По голямата част от съвременните процесори на Intel имат Turbo boost frequency, т.е. когато се използва само една нишка, те повишават честотата си. Поради тази причина, ако това не е направено, резултатите в 2.3.3 не са съвсем коректни и вероятно ефективността на паралелния код е по-добра от полученото. Освен това липсва и анализ за причините за текущото представяне на кода при различен брой ядра. Не е дадена и информация за големината на масивите и на типа на използваните променливи в масивите за съхранение на скорости и позиции на частици, което пък има отношение към това доколко трансфера на данни е между RAM паметта и процесора или се осъществява основно между ядрата и кеша на процесора.

В глава 3 са представени резултатите от компютърното моделиране, с помощта на разработената програма. Направено е задълбочено изследване на разряда при различни условия и най-вече при наличие на значителни загуби на страничните стени, т.е. със съществена стойност на отношението на междуелектродното разстояние и диаметъра (напречен размер). Получените резултати са анализирани и обяснени в пълнота. Те представят поведение на разряда, което доколкото ми е известно, не е изследвано досега и ***може да представлява интерес за широк кръг аудитория, свързана с капацитивни разряди при ниско налягане.***

В глава 4 е представена разработената програма предназначена за виртуални експерименти за нуждите на обучение осъществяващи симулация на трептения в електрически вериги с нелинейни елементи, както и резонансни явления в тях. Програмата е базирана на Matlab, който позволява компилирането на Matlab код в самостоятелна изпълнима програма, както е направено в дисертацията. Реализирани са няколко задачи, които обучаващите се да изпълнят. Като цяло работа изглежда много добре реализирана и съм убеден, че ще е полезна за обучаващите се.

Най-общо, ***представените основни изследвания и резултати в дисертацията са добре обосновани и реализирани и с голяма вероятност са достоверни. Разработените програми за моделиране са подходящи за целите, за които са предназначени.***

Приноси

Приносите в дисертацията са формулирани в 5 точки и като цяло считам, че съответстват на постигнатото в дисертацията. Личният принос на дисертанта не е изцяло очевиден от материалите, но на базата на представените публикации и дисертация, считам че ***личният принос към разработките и изследванията, в голяма степен съответства на очакванията и изискванията за присъждане на образователната и научна степен „доктор“.***

Публикации по дисертационния труд

Изследванията са публикувани в 1 статия в международно списание с импакт фактор (Q2), 2 доклада на международни конференции с SJR и 2 доклада в български сборници. ***Това напълно удовлетворява националните изисквания в направление 4.6*** (както и в 4.1).

Оформление

Като цяло дисертацията е технически оформена добре, като са забелязани много малък брой правописни грешки. По отношение на оформлението на фигурите също нямам съществени забележки.

Автореферат

Авторефератът адекватно представя изследванията в дисертацията и основните приноси.

Забележки

На страница 1, задача 3 всъщност е принос, а не задача.

Въпроси

1. На страница 5 (горе) е представена формулата за вероятността на удар. При какви допускания и как е получена тя? Тези допускания отразяват ли се по някакъв начин на свързването на PIC и MCC модулите и най-вече на стъпката във времето, през която те се редуват?

2. При дизайна на програмата за PIC/MCC модела, следвана ли е някаква стратегия за максимално бърз достъп на данните от паметта към процесора и ефективно използване на кеш паметта на процесора, т.е. повече cache hits?

3. Каква е формата на супер частиците в PIC модела и по конкретно какво е разпределението на техния заряд в пространството. Как това се отразява на схемите за притегляне на заряда към възлите на мрежата и съответно на полето към позициите на частиците.

Заклучение

В заключение, представената дисертация е добре подготвена и съдържа оригинални изследвания, публикувани в реномирани международни списания и български издания. Поради това, **оценявам положително представеният дисертационен труд** „Компютърно моделиране на капацитивни разряди“. При убедително представяне на работата на защита, с увереност ще предложа на научното жури да присъди на Росица Павлова образователната и научна степен „доктор“.

29.03.2020 г.

Рецензент:

/ доц. д-р Ст. Колев/

Reviewer's Report

on dissertation for educational and scientific degree
"DOCTOR"

Author of the thesis: **Rositsa Andreeva Pavlova**

Thesis title: **Computer Modelling of Capacitive Discharges**

Field: 4. Natural sciences, mathematics and informatics

Professional specialty: **4.6 Informatics and computer sciences**

Reviewer: **Stanimir Todorov Kolev, PhD, associate professor at Faculty of Physics, Sofia University**

The dissertation contains 147 pages in total, divided into an introduction, a literature overview and three chapters presenting the studies. 114 sources are cited and 94 figures and 3 tables are included. In general, the work combines computational methods to study the physics of different processes, but most of all the behavior of high-frequency capacitive discharge at low pressure.

Research relevance

Although capacitive discharges have been known for a long time and have been widely used studied in depth by many research groups over the last 30-40 years, the studies in this dissertation show that there are still certain configurations and regimes of these discharges that have not been investigated and at the same time would be of interest for certain applications. In this sense, ***the topic of research remains relevant and the work enriches the knowledge about them.***

Knowledge of the field

The 52-page literature review includes the most important information in the scientific literature about the research included in the dissertation. Chapter 1.1 introduces the Particle in cell (PIC) and Monte Carlo Collisions MCC methods for kinetic modeling of plasma. Although their main features have been mentioned, this part could be extended. The PIC method is described modestly and I think more details should have been provided. For example, no details are given on what happens if the conditions mentioned on page 4 are not met, what other modifications to the PIC method exist in the literature, and why the classic version of the method was chosen, what is the equation which is actually solved by the PIC method, why the PIC is preferable in spite of the simulation of the electrostatic interactions of the particles with each other, what form of particle charge distribution in space is considered by the chosen method (what is the particle shape) and respectively mathematically how it affects the weighting schemes of the charge to the grid nodes and respectively of the field values at the grid nodes to the positions of the particles. More details on the above issues are not necessarily mandatory and do not constitute a critical

omission, but would make the work more complete, given the fact that the PIC method is a substantial part of the thesis. With regard to the MCC method, it would be good to add what approximation was imposed to express the probability of a collision on page 5. The rest of the literature review is comprehensive enough and does not require an extension in my opinion, which allows me to summarize that ***the literature review sufficiently represents the considered research field, although there are some minor omissions, mainly related to the PIC method.***

Research methodology and reliability of the obtained results

The research in the dissertation combines computational methods and analysis of a complex physical problem. Numerical models and simulations are an extremely valuable tool for the analysis of such systems, whose experimental studies are a serious challenge and could hardly provide such detailed information about plasma processes. The use of numerical simulations for teaching purposes combined with good visualization, as done in the last chapter of the thesis, is another useful application and enables students to carry out various virtual experiments.

In Section 2.1, the MCC model for the study of the electron energy distribution function is presented. A proper validation of the model is made by calculating cases for which there is an analytical solution. Section 2.2 presents the developed PIC/MCC model, which was used to obtain the results in Chapter 3. In section 2.3, the approach for converting the model to parallel is presented. This is done on the basis of OpenMP, which in my opinion is the most appropriate way for the PIC/MCC under consideration as it allows for fast conversion of the code for shared memory computers. A study was also made on the effectiveness of the parallel calculations code with respect to the serial and tests were performed on different number of CPU cores. Unfortunately, no detailed information about the experimental conditions is provided here, namely what model of Intel processor was used and whether the processor was set to a fixed frequency. Most of the modern Intel processors have Turbo boost frequency, i.e. when only one thread is used, they increase in frequency. For this reason, if this is not done, the results in 2.3.3 are not precise and probably the performance of the parallel code is better than the obtained. In addition, there is no analysis of the reasons for the current code performance at different number of CPU cores. No information was provided on the exact array size and the type of variables used in the arrays for storing velocities and particle positions, which in turn is related to the extent to which data transfer is between the RAM and the processor or mainly between CPU cores and the CPU cache.

Chapter 3 presents the results of computer modelling using the developed program. An in-depth study of the discharge was made under different conditions and, in particular, in the presence of significant losses on the side walls, i.e. with a significant value of the ratio of the interelectrode distance to the diameter (transverse size). The results obtained are analyzed and properly explained. They present a discharge behavior that, to my knowledge, has not

been studied so far and ***may be of interest to a wide audience, which work is related to low pressure capacitive discharges.***

Chapter 4 presents the developed program designed for virtual experiments for educational purposes and allowing the simulation of oscillations in circuits with nonlinear elements, as well as resonance phenomena in them. The program is based on Matlab, which allows the compilation of Matlab code into a standalone executable program, as done in the thesis. There are several tasks that trainees can complete. Overall the work seems very well done and I am convinced it will be useful for the students.

In general, ***the major part of the presented research and results in the dissertation are well grounded and implemented and are likely to be reliable. The modelling programs developed are appropriate for the problems, considered in the dissertation.***

Contributions

The contributions in the dissertation are formulated in 5 points and I generally consider them to be appropriate and consistent with the achievement of the dissertation. The personal contribution is not entirely obvious from the materials, but on the basis of the publications and the dissertation presented, I believe that ***the personal contribution to the research and development is largely in line with the expectations and requirements for a doctoral degree.***

Dissertation publications

The research was published in one article in an international journal with impact factor (IF 2.31, Q2), two papers at international conferences with SJR and two papers in Bulgarian article collections. This ***fully meets the national requirements for professional specialty 4.6*** (as well as for 4.1).

Layout

In general, the dissertation is well-prepared, with very few spelling errors being noticed. As for the layout of the figures, I also have no any significant remarks.

Summary

The summary represents appropriately the research in the dissertation and the main contributions.

Remarks

On page 1, task 3 is actually a contribution, not a task.

Questions

1. The formula for the probability of collision is given on page 5. Under what assumptions and how is it obtained? Do these assumptions in any way affect the interconnection of PIC and MCC modules, and in particular the time step according to which they alternate?
2. When designing the program for the PIC/MCC model, was there any strategy to maximize the speed of access of the data from the memory to the processor and for efficient use of the processor cache, i.e. more cache hits?
3. What is the shape of the super particles in the PIC model and in particular what is the distribution of their charge in space. How does this affect the weighting schemes of the charge to the grid nodes and of the field to the particle positions?

Conclusion

In conclusion, the dissertation presented is well prepared and contains original research published in renowned journals. Therefore, ***I give positive evaluation of the presented dissertation entitled "Computer Modelling of Capacitive Discharges"***. If the work is presented and defended convincingly at the public defense, I will definitely propose to the scientific jury to award Rositsa Pavlova the educational and scientific degree "Doctor".

29.03.2020 r.
Sofia

Report author:
/assoc. prof. Dr. Stanimir Kolev/