

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу
Даньшина Артема Александровича
«Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза
стохастических и детерминистских подходов»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Даньшин А.А. в 2019 г. окончил физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова по специальности «физика атомного ядра и квантовой теории столкновений» с отличием. Был принят на работу в НИЦ «Курчатовский институт» в 2016 г., после чего сразу включился в научно-исследовательскую деятельность и под моим руководством выполнил и успешно защитил бакалаврскую и магистерскую диссертационные работы. В 2019 г. Даньшин А.А. успешно сдал экзамены и поступил в аспирантуру НИЦ «Курчатовский институт» по специальности 05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертационная работа Даньшина А.А. — это продолжение его исследований в рамках выполнения бакалаврской и магистерской диссертаций. Ему было необходимо выполнить разработку методического и программного инструмента, основанного прежде всего на стохастических методах моделирования состояния квантово-механических систем. С этой задачей автор успешно справился, но при этом не остановился на методе Монте-Карло, а, благодаря эрудиции и широкому взгляду, самостоятельно освоил и стал совершенствовать детерминистские методы, что в конечном итоге позволило моделировать состояния квантово-механических систем за приемлемое время с повышенной точностью. В рамках данной работы Даньшин А.А. проанализировал большой объем литературных данных и выявил основные факторы, влияющие на точность и быстродействие решения квантово-механических задач, что позволило ему создать представленные в диссертационном исследовании модели, методы, алгоритмы и программный комплекс.

За время подготовки диссертации автор продемонстрировал высокую скорость освоения нового, принимал активное участие в постановке задач, обработке и анализе полученных результатов, а также в написании текстов научных статей и оформлении полученных результатов. Автор участвовал в разработке оригинального метода квантового Монте-Карло, лично разработал алгоритм решения уравнения Шредингера методом квантового Монте-Карло, лично разработал алгоритм безнаборного метода решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, модель учета межэлектронных корреляций. Самостоятельно программно реализовал все разработанные алгоритмы и провел все необходимые расчеты, включая статистическую обработку и сравнительный анализ полученных результатов.

Результаты данной диссертационной работы опубликованы в ведущих международных и российских научных изданиях, индексируемых в Web of Science, Scopus и рекомендованных ВАК, а также представлены на отечественных и международных научных конференциях.

Особенно хочу отметить такие качества Данышина А.А., как научная зрелость, трудолюбие, высокая квалификация в области физики, математики и информационных технологий. Эти качества позволяют соискателю самостоятельно и успешно выполнять задачи на всех этапах научно-технической работы, включая постановку задач, выбор методики исследований, проведение аналитических выкладок, написание компьютерных программ и выполнение численных расчетов, анализ результатов и подготовку публикаций в ведущих отечественных и международных научных изданиях. Дополнительно стоит отметить, что Данышин А.А. — ответственный и надежный член команды, который, когда требовалось, квалифицированно выполнял расчеты, не связанные с темой диссертации.

Диссертационная работа А.А. Данышина выполнена на высоком научном уровне, отражает современное состояние дел по тематике проводимых исследований, отвечает требованиям Положения о присуждении учёных степеней, предъявляемым на соискание учёной степени кандидата физико-

математических наук. Считаю, что Даньшин А.А. несомненно заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Научный руководитель
член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук,
заместитель директора по ядерным технологиям
Федерального государственного бюджетного
учреждения «Национальный исследовательский
центр «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт»)
тел. +7 (499) 196-96-23, email: kovalishin_aa@nrcki.ru
НИЦ «Курчатовский институт»
123182 Россия, Москва, пл. академика Курчатова, д.1

15.05.2023

Ковалишин А.А.

Подпись Ковалишина А.А. заверяю
Главный ученый секретарь НИЦ «Курчатовский институт»,
кандидат физико-математических наук



Борисов К.Е.