

Отзыв официального оппонента

на диссертацию Даньшина Артема Александровича
«Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов»,
представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Актуальность темы диссертационной работы.

В настоящее время квантовая задача многих тел с кулоновским взаимодействием активно исследуется множеством научных групп по всему миру. Эта задача является одной из важнейших задач в ряде научных областей, таких как квантовая химия, физика полупроводников, теория ядра и др. Основная сложность её решения состоит в её размерности и в том, что потенциал задачи является сингулярным и дальнодействующим. Поэтому для её решения разработан ряд приближённых методов, в частности, метод Хартри-Фока, теория функционала плотности, методы конфигурационного взаимодействия, теория возмущений, методы Монте-Карло и др. Однако требуемая точность расчётов, которая позволяет получать не только качественные, но и количественные результаты, в настоящее время достигается только для отдельных классов задач.

Основные проблемы существующих методов квантово-механических расчетов свойств атомов и молекул заключаются в следующем: эти методы не всегда позволяют правильно и с небольшими вычислительными затратами учитывать межэлектронные корреляции; использование детерминантов Слэтера не является удобным для реализации методов Монте-Карло; реализация многосеточных методов решения задач большой размерности, как и методов разложения по базисным функциям, довольно затруднительна. В диссертации на основе метода Монте-Карло численного решения стационарного уравнения Шредингера и авторского алгоритма решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма разработан комплекс программ с распараллеливанием, предназначенный для решения многоэлектронных задач с учетом межэлектронных кулоновских корреляций, в котором эти проблемы минимизированы.

Характеристика содержания диссертационной работы.

Целью диссертационной работы являются разработка детерминистских (сеточных) и стохастических методов и реализация комплексов программ для квантово-механических расчетов свойств многоэлектронных атомов.

Введение содержит общую характеристику работы. Обоснована актуальность решаемых задач, сформулированы цели и задачи работы, указана научная новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость. Описаны методы и методология исследования,

методы обоснования достоверности результатов и их апробации. Сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлен разработанный вариант метода Монте-Карло численного решения стационарного уравнения Шредингера и выполнено преобразование стационарного уравнения Шредингера к виду кинетического уравнения Больцмана в диффузионном приближении. В разделе 1.1 изложены основные положения и алгоритмические особенности метода Монте-Карло решения задачи переноса нейтронов в предположении, что пространственное распределение плотности нейтронного потока описывается диффузионным приближением уравнения переноса, и все нейтроны имеют одинаковую скорость. В результате задача сводится к задаче на собственные значения, которая решается итерационным методом, который известен как стандартный алгоритм нейтронного Монте-Карло. В разделе 1.2 рассматривается стационарное уравнение Шредингера для многоэлектронных систем, которое приводится к виду дифференциального уравнения диффузии нейтронов в размножающей среде. Учёт тождественности частиц, когда решение либо симметрично, либо антисимметрично относительно перестановок двух частиц, требует решения задачи на фундаментальных областях, определению и исследованию которых посвящён раздел 1.3. Разработанный алгоритм решения стационарного уравнения Шредингера методом Монте-Карло реализован в разделе 1.4 в виде программного модуля на языке Fortran 90 с использованием технологии MPI.

Во второй главе предложен и реализован итерационный алгоритм решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма в рамках метода конечных разностей. Автором были реализованы преобразования конечно-разностного оператора, аналогичные тем, которые применяются в задачах переноса нейтронов в физике ядерных реакторов, что позволило значительно ускорить вычисления. Представлен вывод уравнений метода Хартри-Фока и их разностных аналогов. Отдельно рассмотрены как заполненные, так и незаполненные оболочки. Верификация программы была произведена на примере атома водорода с известным аналитическим решением, а для многоэлектронных атомов с результатами, полученными другими авторами.

Программы, представленные в первой и во второй главах, объединены в комплекс программ, предназначенный для решения многоэлектронных задач, в частности, для вычисления энергий ионизации валентных электронов.

В третьей главе с целью создания математической модели учета межэлектронных кулоновских корреляций в методе Хартри-Фока на примере атома гелия исследованы погрешности различных пробных функций, полученных аппроксимацией. Получены приближенные выражения для корреляционных функций ряда легких ядер и вычислены энергии валентных электронов, которые для *s*- и *p*-элементов с хорошей точностью совпадают с экспериментальными данными.

В четвертой главе с помощью разработанного во второй главе алгоритма исследуются возможные взаимные конфигурации электронов на частично-заполненных s , p , d и f оболочках, удовлетворяющие постулату Дирака. Показано, что постулат Дирака является следствием из свойств гамильтониана.

В Заключение сформулированы основные результаты работы.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, их достоверность.

Обоснованность полученных результатов подтверждается строгостью математического аппарата, использованного при разработке вычислительных методов и алгоритмов, верификацией на основе экспериментальных данных.

Достоверность результатов обеспечивается тем, что расчеты по предложенным алгоритмам практически совпали с доступными результатами других исследователей, либо с доступными результатами физического эксперимента.

Практическая значимость исследований.

Созданный комплекс программ ориентирован на исследование спектров и волновых функций многоэлектронных атомов. На его основе можно разрабатывать и верифицировать новые модели учета электронных корреляций. При небольшой модификации он может быть применён для исследования моделей квантовой химии.

Недостатки работы.

По диссертационной работе Данышина А.А. можно сделать следующие замечания:

1. Пояснение, данное на стр. 24, не совсем верно, поскольку потенциалы задачи имеют разрыв при совпадении частиц, и если две частицы симметричны, то решение будет иметь разрыв производной, в отличие от антисимметричных частиц, где решение и его нормальная производная будут непрерывными. Пример, на который ссылается автор, в работе [35] отсутствует.
2. Не понятно, что такое H и как оно изменяется в итерационном процессе (2.2), и зачем задачу (2.1) следует решать повторно.
3. Не понятно, какая энергия представлена в таблицах 7–9. При этом комбинациям магнитных чисел, полученным в разделах 4.2–4.4, соответствует максимальная энергия, тогда как в выводах сказано, что минимальная.
4. Автором не указаны параметры сеток и метода Монте-Карло, с помощью которых были получены основные результаты диссертации.


Данные замечания следует рассматривать как пожелания диссертанту к дальнейшей работе, они никак не влияют на оценку диссертационной работы.

Полученные автором результаты достоверны, основные выводы и заключения обоснованы. Автореферат корректно отражает результаты диссертационного исследования. Основные результаты диссертации достаточно полно изложены в 8 работах, из которых 5 изданы в журналах, рекомендованных ВАК.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа «Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов» полностью соответствует требованиям п.9 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (ред. от 26.09.2022) «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, Даньшин Артем Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук (05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ),
Ведущий научный сотрудник
Лаборатории информационных технологий
Объединенного института ядерных исследований


Гусев Александр Александрович
19.09.23

Подпись Гусева А.А. заверяю:
Ученый секретарь ЛИТ ОИЯИ,
кандидат физико-математических наук
Международная межправительственная организация
Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри, 6
г. Дубна, Московская обл., Россия, 141980
+7 (496) 216-50-59, post@jinr.ru



О.Ю. Дереновская

