

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ
им. А.Ю. ИШЛИНСКОГО
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИПМех РАН)**

пр. Вернадского, д.101, к.1, г. Москва, 119526
Тел. (495) 434-00-17 Факс 8-499-739-95-31
ОКПО 02699323, ОГРН 1037739426735
ИНН/КПП 7729138338/772901001

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИПМех РАН
член-корреспондент РАН,
д.ф.-м.н. Якуш С.Е.



13.09.2023 № 11504/01-2171.1-474

На № _____

« _____ 2023 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации о научно-практической ценности диссертации Данышина
Артема Александровича

«Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе
синтеза стохастических и детерминистских подходов», представленной на
соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Актуальность избранной темы. Связь работы с планами соответствующих отраслей науки и народного хозяйства. В настоящее время квантово-механические расчеты играют ключевую роль в огромном количестве фундаментальных и прикладных исследований. Точное решение уравнения Шредингера (волновая функция системы) содержит полную информацию о строении химических соединений, природе химических связей, о механизмах химических реакций и взаимодействиях в сложных молекулярных ансамблях, включая биологические системы, а также об электронных свойствах твердых тел. Все это позволяет предсказывать потенциальные свойства веществ на всех (микро, мезо и макро) уровнях. Однако, в силу ряда особенностей данного уравнения, нахождение решения представляет собой трудоемкую вычислительную задачу.

Проблема существующих программных инструментов расчета электронной структуры заключается в том, что численные методы и математические модели, которыми они оперируют, не позволяют в рамках приемлемого расчетного времени получить с необходимой точностью требуемый для практических целей результат. Реализация сеточных методов в пространствах больших размерностей крайне затруднительна. Как правило, на практике применяется разложение волновой функции в ряд по произведениям трехмерных орбитальных функций, но для

сложных систем число членов разложения слишком велико. С другой стороны, интегральные методы, такие как метод Монте-Карло, не позволяют интегрировать всю область определения знакопеременных волновых функций; в приложениях используются узлы приближенных волновых функций, полученные другими методами, что вносит неконтролируемую погрешность в вычисления.

Поэтому крайне актуальным являются как разработка новых методов решения многоэлектронных задач, так и совершенствование уже существующих с вычислительной точки зрения. Разработке и исследованию таких методов посвящена данная диссертационная работа.

Общая характеристика диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 111 страниц, включая 32 рисунка. Список литературы содержит 80 наименований.

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируются цель, задачи, научная новизна, теоретическая и практическая значимость представляемой работы.

Первая глава посвящена численному решению стационарного уравнения Шредингера в интегральной форме. С помощью замены переменных данное уравнение приводится к виду уравнения диффузии нейтронов в размножающей среде. На основе метода Монте-Карло решения задачи переноса нейтронов строится итерационный метод решения интегрального уравнения Шредингера. Предлагается способ решения проблемы знака для ряда s -электронных систем. Приводится доказательство теоремы об экстремальном свойстве узловой поверхности, обобщающее известные доказательства для основных состояний в том числе на случай возбужденных состояний. Обсуждается реализация разработанного алгоритма в форме программного модуля.

Во второй главе представлен конечно-разностный метод и соответствующий алгоритм решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, вычислительная сложность которого сопоставима со сложностью алгоритмов на основе метода базисных наборов. По аналогии с задачей переноса нейтронов в физике ядерных реакторов выполнено преобразование спектра конечно-разностного оператора. Приведен вывод разностных аналогов уравнений метода Хартри-Фока как для заполненных, так и для частично заполненных оболочек. Отдельно рассмотрены случаи центрально-симметричных систем (одномерная сетка) и общий случай (трехмерная сетка). Созданный алгоритм реализован в форме программного модуля, приведены результаты верификации на решениях модельных задач и результатах вычислений других исследователей.

В третьей главе анализируется близкое к точному решение уравнения Шредингера для легких атомов, полученное разработанным в первой главе вариантом метода Монте-Карло, с целью создания модели учета межэлектронных кулоновских корреляций в методе Хартри-Фока. Делается вывод о том, что подавляющая часть корреляционной ошибки метода Хартри-Фока содержится в первых двух членах разложения двухчастичной функции плотности по полиномам Лежандра. Установлен общий вид кулоновских корреляций. Программные модули, представленные в первых двух главах, объединены в программный комплекс, с помощью которого вычислены корреляционные поправки к энергиям ионизации для элементов таблицы Менделеева.

В четвертой главе с помощью программного модуля, представленного во второй главе, исследуются взаимные конфигурации электронов на частично заполненных оболочках. В результате численного эксперимента получено, что экстремум функционала энергии достигается на тех волновых функциях, которые удовлетворяют постулату Дирака быть собственной функцией оператора квадрата полного орбитального момента атома.

В заключении формулируются основные результаты диссертационной работы.

Научная новизна. Результаты диссертации, выносимые на защиту, являются новыми. Разработан и реализован в форме программного модуля вариант метода Монте-Карло решения стационарного уравнения Шредингера. Пользуясь свойством непрерывности волновой функции, доказана теорема об экстремальном свойстве узловой поверхности, обобщающая известные доказательства для основных состояний на случай возбужденных состояний. На основе данной теоремы и вычислений по созданной программе получены уравнения узловых поверхностей для некоторых s -электронных систем. Выполнено преобразование спектра конечно-разностного оператора уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, на основе которого разработан и реализован в форме программного модуля алгоритм решения данных уравнений, по быстродействию не уступающий алгоритмам на основе метода базисных наборов. Разработана математическая модель учета межэлектронных кулоновских корреляций в методе Хартри-Фока, которая позволила уменьшить ошибку вычислений, при этом не теряя в быстродействии.

Теоретическая и практическая значимость полученных автором диссертации результатов. Результаты данной работы могут быть использованы как платформа для создания и верификации квантово-химических моделей и расчетного инструмента свойств многоэлектронных систем (молекулы, твердое тело) на их основе. Разработанные автором методы и модели являются универсальными и востребованными для всего квантово-химического сообщества:

они могут также внедряться другими научными группами для улучшения их собственных расчетных инструментов.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и заключений. Достоверность применяемых в работе математических методов не вызывает сомнений. Разработанный программный комплекс прошел верификацию на известных решениях модельных задач, экспериментальных данных, результатах расчетов других исследователей. В ходе работы над диссертацией соискатель активно участвовал в международных и отечественных конференциях и семинарах, представлял результаты в ведущих рецензируемых научных изданиях.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на семи международных и российских конференциях и семинарах. По теме диссертации опубликовано 8 работ, из которых 5 в изданиях, рекомендованных ВАК. Материал диссертации полно представлен в опубликованных работах.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

Оценка содержания работы. Диссертационная работа Даньшина Артема Александровича выполнена на очень высоком научном уровне и содержит решение сложной и актуальной задачи, связанной с разработкой численных методов расчета электронной структуры.

В ходе ознакомления с текстом диссертации возникли следующие вопросы и замечания: несмотря на то, что предложенный метод улучшает оценку энергии валентных электронов для большинства элементов, для некоторых элементов ошибка все еще остается существенной. Хорошо было бы в дальнейшем этот вопрос исследовать и адаптировать метод также для оставшихся элементов.

Указанный недостаток не снижает общей высокой оценки диссертационной работы и носит скорее характер пожелания к дальнейшей работе.

Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней. Диссертация «Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов» является законченным научным исследованием и полностью соответствует паспорту научной специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и требованиям п.9 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 «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».

Отзыв обсужден на расширенном заседании лаборатории механики природных катастроф ИПМех РАН, протокол № 1 от 06.09.2023 г.

Отзыв подготовили:

Член-корреспондент РАН,
доктор физ.-мат. наук,
ведущий научный сотрудник
лаборатории механики
природных катастроф
ИПМех РАН



Шафаревич Андрей Игоревич

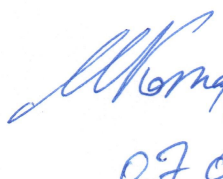
Кандидат физ.-мат. наук,
старший научный сотрудник
лаборатории механики
природных катастроф
ИПМех РАН



Миненков Дмитрий Сергеевич

Подписи Шафаревича А.И. и Миненкова Д.С. удостоверяю:

Ученый секретарь ИПМех РАН,
кандидат физ.-мат. наук



Котов М.А.

Полное наименование организации: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук

Адрес: 119526, Москва, пр-т Вернадского, д. 101, корп. 1

Телефон: +74954340017

Сайт организации: <https://ipmnet.ru/>

Электронная почта: ipm@ipmnet.ru