

УТВЕРЖДАЮ:

Первый заместитель директора
по науке
НИЦ «Курчатовский институт»
Ю. А. ДЬЯКОВА



« 7 » апреля 2023 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения
«Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
(НИЦ «Курчатовский институт») по материалам диссертации Даньшина А.А. на
соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Диссертация Даньшина Артема Александровича «Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов» выполнена в Курчатовском комплексе перспективной атомной энергетики НИЦ «Курчатовский институт».

В период подготовки диссертации соискатель Даньшин Артем Александрович обучался на очном отделении аспирантуры Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», а также работал в Курчатовском комплексе перспективной атомной энергетики НИЦ «Курчатовский институт» в должности младшего научного сотрудника. В настоящее время работает в НИЦ «Курчатовский институт» в должности младшего научного сотрудника.

В 2019 г. Даньшин А.А. окончил физический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова с отличием по

направлению 03.04.02 «Физика» по программе физика атомного ядра и квантовая теория столкновений.

С 01.10.2019 г. Даньшин А.А. обучается по очной форме обучения в аспирантуре НИЦ «Курчатовский институт» по направлению подготовки 27.06.01 Управление в технических системах, по научной специальности 05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Во время обучения Даньшин А.А. сдал следующие кандидатские экзамены: иностранный язык (английский), оценка — отлично; история и философия науки (физико-математические науки), оценка — хорошо; специальная дисциплина (05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), оценка — отлично.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2023 г. Федеральным государственным бюджетным учреждением «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт»).

Научный руководитель — Ковалишин Алексей Анатольевич, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук по специальности 05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, работает в НИЦ «Курчатовский институт» в должности заместителя директора по ядерным технологиям.

Доклад Даньшина А.А. по диссертационной работе «Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов» был заслушан и обсужден на заседании Ученого совета ККПАЭ НИЦ «Курчатовский институт» (протокол № 6 от «21» февраля 2023 г.).

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

В работе Даньшина А.А. разработан и реализован программный комплекс параллельных квантово-механических расчетов свойств атомов и молекул, который включает в себя оригинальные детерминистские (сеточные) и стохастические методы, которые применяются для решения стационарного

уравнения Шредингера так, чтобы они взаимно дополняли друг друга, давая инструменту новое качество.

Актуальность темы исследования

Квантово-химические расчеты играют ключевую роль в огромном количестве фундаментальных и прикладных исследований. При этом основной проблемой существующих методов квантово-механических расчетов свойств атомов и молекул является то, что эти методы не всегда позволяют правильно учитывать межэлектронные корреляции. Попытки учесть электронные корреляции более полно приводят к большим вычислительным затратам, что ограничивает возможный круг вычисляемых свойств. Поэтому актуальными являются как задача разработки принципиально новых методов учета электронных корреляций, так и разработка новых подходов к решению уравнений уже существующих методов с вычислительной точки зрения.

При выполнении диссертационной работы были решены следующие задачи:

1. Разработать, программно реализовать и верифицировать стохастический метод решения стационарного уравнения Шредингера методом Монте-Карло.
2. Разработать, программно реализовать и верифицировать детерминистский метод решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма на сетке без использования базисных наборов.
3. Разработать, программно реализовать и верифицировать математическую модель учета межэлектронных корреляций в методе Хартри-Фока, где корреляции получены из стохастического расчета.

Научная новизна:

1. Разработан и реализован в форме программного модуля метод и параллельный алгоритм решения стационарного уравнения Шредингера методом Монте-Карло для s -электронных систем. Пользуясь свойством непрерывности волновой функции, доказана теорема об экстремальном свойстве фундаментальной области, обобщающая известные доказательства для основных

состояний в том числе на случай возбужденных состояний. На основе данной теоремы и вычислений по созданной программе численно получены неявные уравнения узловых поверхностей для s -электронных систем.

2. Разработан способ предварительного преобразования спектра оператора уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, позволяющий перейти от решения полной проблемы собственных значений к частичной, причем собственные функции оказываются упорядоченными удобным для расчета образом. На основе данного способа разработан и реализован в форме программного модуля алгоритм решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма на сетке, вычислительная сложность которого сопоставима со сложностью алгоритмов, реализующих метод базисных наборов.

3. Разработана математическая модель учета межэлектронных корреляций в методе Хартри-Фока, на основе которой вычислены корреляционные поправки к энергиям ионизации для элементов таблицы Менделеева.

Теоретическая и практическая значимость

В работе созданы новые математические модели, методы и алгоритмы моделирования многоэлектронных систем, в том числе с использованием суперкомпьютерных вычислений. Достоинством по сравнению с существующими аналогами является оптимальное сочетание быстродействия и точности новых подходов. Созданный и реализованный детерминистский метод решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма на сетке по быстродействию соответствует существующим аналогам за счет предварительного преобразования спектра конечно-разностного оператора, но при этом не использует базисных наборов. Данное преобразование позволило сразу находить решение для основного состояния системы, что привело к значительному ускорению за счет отказа от методов диагонализации. На основе математического аппарата, ранее разработанного и верифицированного для решения задач нейтронной физики, разработан и реализован стохастический метод решения стационарного уравнения Шредингера, с помощью которого численно получены неявные уравнения

узловых поверхностей s -электронных систем. Далее из стохастического решения получены корреляционные поправки для уточнения детерминистских методов, что позволило повысить точность расчета по сравнению с существующими аналогами, при этом не теряя в быстродействии.

Достоверность полученных результатов

Достоверность полученных результатов подтверждается строгостью математического аппарата, использованного при разработке вычислительных методов и алгоритмов, тщательной верификацией на основе экспериментальных данных и результатов других исследователей, наличием публикаций, обсуждением полученных результатов на различных конференциях и семинарах.

При выполнении диссертационной работы автор лично:

- получил изложенные в диссертации результаты;
- принимал участие в постановке задач;
- принимал участие в создании моделей и методов;
- полностью выполнил численную реализацию;
- самостоятельно проводил численные эксперименты;
- принимал участие в анализе и интерпретации полученных результатов;
- самостоятельно занимался написанием текстов научных статей по теме диссертационной работы.

Основные публикации по теме диссертации

Материалы диссертации полно представлены в работах, опубликованных соискателем: в 5 статьях в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК, а также в 3 сборниках трудов международных и всероссийских конференций.

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК:

1. Danshin A.A., Gurevich M.I., Ilyin V.A., Kovalishin A.A., Velikhov V.E. "The Extension of the Monte Carlo Method for Neutron Transfer Problems

Calculating to the Problems of Quantum Mechanics”, Lobachevskii Journal of Mathematics. — 2018. — Vol. 39. — p. 513–523.

2. Danshin A.A. “The Development of a Parallel Algorithm and Program for Solving the Stationary Many-Body Schrodinger Equation by the Monte Carlo Method on the Example of S States of Atomic Systems”, Procedia Computer Science. — 2018. — Vol. 136. — p. 154–163.

3. Danshin A.A., Gurevich M.I., Kovalishin A.A. “On the rules for filling electron shells and the properties of the atomic”, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2021. — Vol. 54. — p. 135001.

4. Danshin A.A., Kovalishin A.A. “High-Performance Computing in Solving the Electron Correlation Problem”, Lecture Notes in Computer Science. — 2022. — Vol. 13708. — p. 140–151.

5. Даньшин А.А., Ковалишин А.А. “Способ преобразования спектра оператора в уравнениях Хартри-Фока и Кона-Шэма”, Доклады Российской академии наук. Математика, информатика, процессы управления. — 2023. — Т. 509. — с. 23–27.

Материалы конференций:

6. Даньшин А.А. “Разработка вычислительных алгоритмов и программ для решения стационарного уравнения Шредингера методом Монте-Карло”. Юбилейная XV Курчатовская междисциплинарная молодежная научная школа. НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Сборник тезисов, 2017. — с. 185.

7. Даньшин А.А. “Алгоритм решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма без использования базисных наборов”. Секция «Вычислительная математика и кибернетика» XXIX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов». Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2022» [Электронный ресурс], 2022.

8. Даньшин А.А., Кузаков К.А. “Частичное решение проблемы знака в квантовом Монте-Карло”. Ломоносовские чтения 2022. Секция Физики.

Физический факультет МГУ, Москва, Сборник тезисов докладов, 2022. — с. 136–138.

Диссертационная работа Даньшина А.А. «Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов» является законченным цельным исследованием, выполненным по актуальной тематике на высоком научном уровне, и соответствует паспорту специальности 1.2.2. — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Представленная к защите работа отвечает требованиям Положения о присуждении учёных степеней (утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов» Даньшина А.А. рекомендуется к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Заключение принято на заседании Ученого совета Курчатовского комплекса перспективной атомной энергетики (ККПАЭ) НИЦ «Курчатовский институт».

Присутствовало на заседании 14 человек, из них 6 докторов наук и 5 кандидатов наук.

Выступили с положительной оценкой диссертации: Хромов К.Ю. (доктор физико-математических наук, начальник лаборатории моделирования перспективных материалов Курчатовского комплекса перспективной атомной энергетики НИЦ «Курчатовский институт»), Давиденко В.Д. (доктор физико-математических наук, руководитель отделения физики и моделирования энергетики Курчатовского комплекса перспективной атомной энергетики НИЦ «Курчатовский институт»).

энергетики Курчатовского комплекса перспективной атомной энергетики НИЦ «Курчатовский институт»).

Результаты голосования: «за» – 14 человек, «против» – 0 человек, воздержалось – 0 человек, протокол № 6 от «21» февраля 2023 г.

Заместитель председателя
Ученого совета ККПАЭ
НИЦ «Курчатовский институт»,
доктор физико-математических наук

А.Л. Шимкевич

Ученый секретарь ККПАЭ
НИЦ «Курчатовский институт»,
кандидат технических наук

В.Ю. Бландинский

Подписи Шимкевича А.Л. и Бландинского В.Ю. заверяю

Главный ученый секретарь
НИЦ «Курчатовский институт»,
кандидат физико-математических наук

К.Е. Борисов