

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.237.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР ИНСТИТУТ
ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН»
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 12 октября 2023 № 10

О присуждении **Даньшину Артему Александровичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов» по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» принята к защите 22.06.2023 (протокол заседания №10/пз) диссертационным советом 24.1.237.01, созданным на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук» (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН), 125047, Москва, Миусская пл., д. 4. Диссертационный совет утвержден приказом Минобрнауки России №105/нк от 11 апреля 2012 года.

Соискатель **Даньшин Артем Александрович**, 24 февраля 1995 года рождения, в 2019 году окончил с отличием Физический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» с присвоением квалификации магистр по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» по программе физика атомного ядра и квантовая теория столкновений.

С 2019 г. по 2023 г. соискатель освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в очной 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.

В настоящее время соискатель работает в должности младшего научного сотрудника в Курчатовском комплексе перспективной атомной энергетики НИЦ «Курчатовский институт».

Диссертация выполнена в НИЦ «Курчатовский институт» в период обучения в аспирантуре.

Научный руководитель — Ковалишин Алексей Анатольевич, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, заместитель директора по ядерным технологиям НИЦ «Курчатовский институт».

Официальные оппоненты:

Гусев Александр Александрович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова Международной межправительственной организации Объединенный институт ядерных исследований,

Чаусов Денис Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией фотоники и органической электроники Центра биофотоники Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» (ИОФ РАН) дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук в своем **положительном** отзыве, подписанном **Шафаревичем Андреем Игоревичем**, доктором физико-математических наук, членом-корреспондентом РАН, ведущим научным сотрудником лаборатории механики природных катастроф ИПМех РАН, а также

Миненковым Дмитрием Сергеевичем, кандидатом физико-математических наук, старшим научным сотрудником лаборатории механики природных катастроф ИПМех РАН, и утвержденным **Якушем Сергеем Евгеньевичем**, доктором физико-математических наук, членом-корреспондентом РАН, директором ИПМех РАН, указала, что работа выполнена на очень высоком научном уровне и содержит решение сложной и актуальной задачи, связанной с разработкой численных методов расчета электронной структуры. 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. Диссертация 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».

Соискатель имеет 8 опубликованных работ по теме диссертации, в том числе 5 статей в 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.

В работе [1] вклад автора заключался в разработке метода, написании и отладке программного модуля, проведении расчетов для верификации созданного метода решения многочастичного стационарного уравнения Шредингера в интегральной форме для простейших систем со знакопеременной волновой функцией. Работа [2] является персональной работой соискателя, в которой результаты работы [1] получили дальнейшее развитие. В работе [3] автор при помощи разработанного программного комплекса исследовал, какие возможные взаимные конфигурации электронов на частично заполненных атомных оболочках удовлетворяют постулату Дирака быть собственной функцией оператора квадрата полного орбитального момента системы. Общий вид электронных корреляций получен автором из стохастического решения в работе [4]. В работе [5] вклад автора заключается в разработке способа преобразования спектра конечно-разностного оператора уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, а также разработке алгоритма решения этих уравнений на его основе. Программная реализация выполнена автором полностью.

Научные статьи отражают основные результаты диссертационной работы. Все сведения об опубликованных соискателем работах в тексте диссертации достоверны.

На диссертацию поступили отзывы ведущей организации и оппонентов, а также 2 отзыва на автореферат. Все отзывы положительные. Отзывы содержат ряд замечаний.

В отзыве ведущей организации ИПМех РАН:

1. 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.

В отзыве официального оппонента, д.ф.-м.н. Гусева А.А.:

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.

В отзыве официального оппонента, д.ф.-м.н. Чаусова Д.Н.:

1. В работе рассматриваются только взаимодействия кулоновского типа, а спин-орбитальные взаимодействия не рассматриваются. Лучше, чтобы

это ограничение было указано явно. Релятивистские поправки вносят заметный вклад в полную энергию тяжелых элементов, поэтому в будущем стоит уделить внимание этому вопросу.

2. Во второй и третьей главе при описании результатов вычислений по созданному программному комплексу не указано, при каком шаге и количестве узлов расчетной сетки они были получены. Также во второй главе, в отличие от первой, не слишком подробно описана постановка граничных условий для решаемых уравнений.
3. Неясно, в сравнении с чем приведена величина ошибки расчета на Рисунке 3.9. Также стоит отметить, что слишком мелкий шрифт подписей на графиках затрудняет восприятие их содержания.

В отзыве на автореферат от д.ф.-м.н. Трушечкина Антона Сергеевича, ведущего научного сотрудника Отдела математической физики МИАН им. В.А. Стеклова:

1. Из формулировки первого результата, выносимого на защиту, непонятно, в чем его новизна. Говорится о разработке варианта метода Монте-Карло. Хотя в тексте автореферата и приводятся некоторые сведения, но все же лучше было подчеркнуть, в чем основная отличительная черта этого варианта, которая выделяет его из других вариантов хорошо известного метода Монте-Карло, т.е. что, собственно, создает этому результату новизну.

Отзыв на автореферат от **Хохлова Николая Игоревича**, д.ф.-м.н., доцента, заведующего кафедрой информатики и вычислительной математики МФТИ замечаний не содержит.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью и высоким уровнем компетентности по всем основным вопросам, рассмотренным в диссертации, включая численное решение уравнения Шредингера, разработку и анализ новых вычислительных алгоритмов, реализацию их в виде программного комплекса, применение методов и средств математического моделирования

для решения сложных научно-практических задач, что подтверждается списком публикаций официальных оппонентов и сотрудников ведущей организации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. **Разработан** вариант метода Монте-Карло численного решения интегрального стационарного уравнения Шредингера, и соответствующий этому методу параллельный алгоритм, который реализован в форме программного модуля. Созданный программный модуль **верифицирован** на известных решениях модельных задач и экспериментальных данных для s -электронных систем. **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** асимптотически точный в смысле шага расчетной сетки метод и соответствующий алгоритм решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма без использования базисных наборов. Созданный алгоритм **реализован** в форме программного модуля и **верифицирован** на доступных значениях энергий элементов таблицы Менделеева.
3. **Разработана** математическая модель учета межэлектронных кулоновских корреляций в методе Хартри-Фока. Программные модули **объединены** в программный комплекс, предназначенный для решения многоэлектронных задач с учетом корреляций на основании созданной модели. **Вычислены** корреляционные поправки к энергиям ионизации для элементов таблицы Менделеева.

Теоретическая значимость исследования заключается в создании новых математических моделей, методов и алгоритмов моделирования

многоэлектронных систем, а также их реализации в программном комплексе. 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.

Практическое значение результатов исследования проявляется в том, что представленные в работе результаты при их дальнейшем развитии способны значительно улучшить существующие методы квантово-химических расчетов и расширить их область применимости для предсказания свойств веществ. 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. 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 применен для исследования моделей квантовой химии.

Оценка достоверности результатов исследования выявила качественное и количественное согласие полученных результатов с доступными результатами других научных коллективов, аналитическими решениями, а также экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя. Изложенные в диссертации результаты получены лично автором. Автор принимал участие, как в постановке задач, так и в создании моделей, методов, проведении численных экспериментов и интерпретации результатов. Программная реализация выполнена автором полностью.

В ходе защиты диссертации вопросы соискателю задали члены диссертационного совета: Змитренко Н.В., Шпатаковская Г.В., Козлов А.Н., Четверушкин Б.Н. Соискатель подробно ответил на заданные ему вопросы, согласился с рядом замечаний в письменных отзывах, дал содержательные комментарии в необходимых случаях.

Во время дискуссии в поддержку диссертации выступили: заведующий лабораторией моделирования перспективных материалов ККПАЭ НИЦ «Курчатовский институт», д.ф.-м.н. Хромов К.Ю.; член совета, д.ф.-м.н. Орлов Ю.Н.; председатель совета, академик РАН, д.ф.-м.н. Четверушкин Б.Н.

На заседании 12 октября 2023 года диссертационный совет принял решение за разработку стохастического метода решения стационарного уравнения Шредингера, сеточного метода решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, а также за модель учета кулоновских корреляций в методе Хартри-Фока, имеющие большое значение для развития численных методов расчета электронной структуры, присудить Даньшину Артему Александровичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета 24.1.237.01

академик РАН, д.ф.-м.н., профессор

Четверушкин Борис Николаевич



Ученый секретарь

диссертационного совета 24.1.237.01

к.ф.-м.н.

Корнилина Марина Андреевна

12 октября 2023 года