

## Отзыв официального оппонента

на диссертацию Чулуунбаатара Галмандаха  
«Вычислительные схемы решения квантовомеханических задач»,  
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.

Диссертационная работа посвящена разработке численных методов, алгоритмов и комплексов программ для исследования математических моделей молекулярных, атомных и ядерных систем, которые сформулированы в виде краевых задач для систем уравнений в частных производных, которые соответствуют стационарным уравнениям Шрёдингера или Дирака. При этом применение широко известных пакетов программ (например, Comsol Multiphysics) или библиотек программ (например, библиотека программ журнала Computer Physics Communications), реализующих численные методы решения краевых задач недоступно, поскольку они охватывают очень широкий, но не исчерпывающий класс задач.

Одна из задач, выходящих за пределы указанного класса, рассмотренная в диссертации, это непрерывная минимаксная задача, решение которой потребовало разработки новой итерационной схемы, основанной на модифицированном методе Ньютона для решения задачи минимизации в сочетании с методами отрицательного направления кривизны. Разработанные схемы могут быть полезны для решения широкого класса задач ядерной физики и квантовой химии.

Другая задача, это многоканальная задача рассеяния с различным числом асимптотически открытых каналов для системы ОДУ и связанная с ней задача на метастабильные состояния с комплексными собственными значениями энергии, и с краевыми условиями Робина, зависящими от спектрального параметра. Разработанные алгоритмы находят своё применение к исследованию процессов слияния атомных ядер. Полученные с помощью разработанных алгоритмов спектр и собственные функции связанных и метастабильных состояний димера бериллия и может быть полезен для моделирования приповерхностной диффузии димера бериллия в связи с известным многофункциональным применением бериллиевых сплавов в современных технологиях электронной, космической и атомной промышленности.

И, наконец, это краевые задачи для систем уравнений в частных производных размерностью от четырёх до шести, которые возникают при моделировании задач ядерной физики. Для таких задач в настоящее время разрабатываются конечноэлементные схемы, одним из барьеров, при реализации которых, является вычисление интегралов. Полученные в диссертации полностью симметричные квадратурные формулы позволяют убрать этот барьер.

### **Характеристика содержания диссертационной работы.**

В главе 1 разработана эффективная вычислительная схема решения непрерывной минимаксной задачи. Дана постановка задачи, представлены модифицированный метод Ньютона и метод направления отрицательной кривизны, на основе которых создан алгоритм нахождения локальной точки минимакса, реализован в виде комплекса программ. Отдельно рассмотрены невыпукло-невогнутый, выпукло-невогнутый и невыпукло-вогнутый случаи, отличающихся между собой выполнением или невыполнением условий на градиенты и гессианы. Далее, разработанный алгоритм применён к вычислению собственных значений и собственных функций задачи двух кулоновских центров для уравнения Дирака, используя спинорные орбитали слейтеровского типа с нецелыми степенями по радиальной переменной. Разработан алгоритм численного вычисления с высокой точностью двухцентровых интегралов, возникающих при решении данной задачи. Представлены вычисленные значения релятивистской энергии связи электрона основного состояния различных ионов. Показано, что полученные результаты согласуются с известными с высокой точностью, при этом потребовалось меньшее число базисных функций.

В главе 2 представлены вычислительная схема, алгоритмы и программа решения методом конечных элементов краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с однородными краевыми условиями Дирихле, Неймана или Робина. Дана постановка многоканальной задачи рассеяния с различным числом открытых каналов в асимптотических областях и задач на связанные и на метастабильные состояния, представлена конечноэлементная схема. В качестве тестового примера рассмотрены краевые задачи для системы ОДУ с кусочно-постоянными потенциалами, которая может быть решена с произвольной точностью методом сшивки фундаментальных решений. Разработанный подход применён к вычислению связанных и метастабильных состояний и состояний рассеяния димера бериллия с таблично-заданным потенциалом.

В главе 3 разработаны методы, алгоритмы и комплекс программ построения полностью симметричных квадратурных формул на симплексах. Получены системы большого числа нелинейных алгебраических уравнений высокой

степени с выпуклыми ограничениями, даны оценки числа узлов и числа уравнений. Решения этих систем вычислялись методом Левенберга-Марквардта в котором диссертантом сделано ряд модификаций. Для полученных полностью симметричных квадратурных формул представлены оценки погрешностей, которые подтверждены численным экспериментом.

**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 как на тестовых примерах, так и на экспериментальных данных.

**Практическая значимость исследований.**

Разработанная новая итерационная схема решения непрерывной минимаксной задачи, может применяться для решения широкого класса задач физики, экономики, теории игр и др.

Построенные вычислительные схемы решения одномерных многоканальной задачи рассеяния с запутанными каналами и задачи на метастабильные состояния находят свое применение для моделирования подбарьерного слияния тяжелых ионов и приповерхностной диффузии лёгких атомов и димеров.

Программа INQSIM, доступная в библиотеке программ JINRLIB ОИЯИ, предназначенная для преобразования найденных полностью симметричных квадратурных формул из компактного вида в развернутый, может быть использована как подпрограмма, при решении широкого класса задач, в которых требуется вычисление многомерных (вплоть до 6-мерных) интегралов в полиэдральных областях.

**Недостатки работы.**

По диссертационной работе Чулуунбаатара Галмандаха можно сделать следующие замечания:

1. На стр.32 построение приближенного решения плохо обусловленной системы уравнений требует, вообще говоря, применения методов регуляризации.
2. При исследовании краевых задач для системы ОДУ с кусочно-постоянными потенциалами следовало бы привести погрешности не только собственных значений, но и собственных функций.

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 5 работах, опубликованных рецензируемых

изданиях, индексируемых в Scopus и Web of Science и рекомендованных ВАК РФ.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационное исследование Чулуунбаатара Галмандаха на тему «Вычислительные схемы решения квантовомеханических задач» соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, согласно п.2.2 раздела II (кандидатская) Положения о присуждении ученых степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский университет дружбы народов», утвержденного Ученым советом РУДН протокол № 12 от 23.09.2019г., а её автор, Чулуунбаатар Галмандах, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

**Официальный оппонент:**

Ланеев Евгений Борисович,  
доктор физико-математических наук  
(05.13.18 — Математическое  
моделирование, численные методы и  
комплексы программ), профессор,  
профессор Математического института  
имени С.М. Никольского Федерального  
государственного автономного  
образовательного учреждения высшего  
образования «Российский университет  
дружбы народов им. Патриса Лумумбы»

Подпись Ланеева Е. Б. заверяю.

Ученый секретарь  
Ученого совета,  
профессор



Ланеев Е. Б.

3.10.2023

К.П. Курылев

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы», 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, +7 (499) 936-87-87, rudn@rudn.ru