

Отзыв официального оппонента

на диссертацию Галмандаха Чулуунбаатара «**Вычислительные схемы решения квантовомеханических задач**», представленную к защите в диссертационном совете ПДС 0200.006 при федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский университет дружбы народов» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Актуальность темы диссертационной работы.

Диссертация Галмандаха Чулуунбаатара посвящена созданию высокоточных вычислительных схем для исследования спектральных задач в квантовой механике нескольких тел. Фактически такие задачи сводятся к решению стационарных уравнений Шрёдингера и Дирака в многомерном конфигурационном пространстве координат частиц, составляющих систему, которые, в свою очередь, редуцируются к системам дифференциальных уравнений. В частности, такие квантово-механические задачи на связанные и метастабильные состояния, а также задачи рассеяния естественным образом возникают в атомной, молекулярной и ядерной физике, а также в физике конденсированного состояния. Среди многих вычислительных методов особое место занимают различные варианты вариационных методов и метода конечных элементов. В обоих подходах этап численных расчетов связан, в конечном счете, с решением алгебраических задач для многомерных матриц, которые, вообще говоря, не являются разреженными, а также с вычислением самих матричных элементов. В первом подходе обычно используется подходящий базис пробных функций, а алгебраическая задача решается методом минимакса. Следует отметить, что программная реализация метода непрерывной минимаксной оптимизации отсутствует в литературе. Во втором подходе используются интерполяционные полиномы, конкретный выбор которых определяет эффективность алгоритма.

Таким образом, разработка новых высокоточных вычислительных схем и их применение к конкретным квантово-механическим расчетам до сих пор является актуальной задачей, что обусловлено бурным развитием современных компьютерных технологий, которые позволяют решать такие классы задач, рассмотрение которых ещё недавно считалось невозможным из-за вычислительной сложности. При этом, как правило, новые схемы, в отличие от ранее известных, позволяют получить решение задачи с требуемой точностью за приемлемое время.

Актуальность темы диссертации не вызывает сомнений.

Цели и задачи диссертационной работы.

Основной целью данной диссертационной работы является создание высокоточных вычислительных схем, алгоритмов и комплексов программ для реализации вариационного метода и метода конечных элементов, адаптированных для решения задач квантовой механики нескольких тел.

К основным задачам, которые необходимо было решить в рамках заявленных подходов, следует, в первую очередь отнести разработку новой вычислительной схемы непрерывной минимаксной оптимизации нелинейных функционалов, которые естественно возникают при редукции спектральных задач квантовой механики к алгебраическим уравнениям, а также алгоритма ее применения для получения результатов с необходимой точностью. В этом же ряду также стоит задача разработки новой вычислительной схемы вариационного метода с непрерывной минимаксной оптимизацией с ограничениями по нелинейным параметрам пробных функций. Во-вторых, в диссертации поставлена и выполнена задача создания новой вычислительной схемы высокого порядка точности для решения краевых задач рассеяния и на метастабильные состояния для системы ОДУ второго порядка методом конечных элементов. Для эффективного применения метода конечных элементов в диссертации разработаны методы, алгоритмы и комплекс программ построения полностью симметричных квадратурных формул высокого порядка на симплексах с тремя, четырьмя, пятью, шестью и семью вершинами. В-третьих, поставлена и решена задача создания алгоритма вычисления двухцентровых тройных интегралов для вычисления матричных элементов в методе непрерывной минимаксной оптимизации. Наконец, задача тестирования алгоритмов и вычислительных схем является неотъемлемой частью всей работы в целом.

Характеристика содержания диссертационной работы.

Диссертация содержит Введение, три главы, Заключение, список литературы из 88 источников и приложение со списком иллюстраций и таблиц численных результатов – всего 107 стр.

Во Введении обосновывается актуальность цели диссертации, степень разработанности темы, а также проведен анализ существующих вычислительных схем, алгоритмов и программных продуктов, относящихся к исследованию краевых задач на собственные значения для квантово-механических расчетов. Проведен краткий обзор научной литературы по изучаемой проблеме, явно формулируется цель и ставятся задачи работы. Кроме того, здесь обоснованы общие подходы – вариационный метод и метод

конечных элементов – к построению высокоточных вычислительных схем и алгоритмов для решения стационарных задач квантовой механики многих тел и изучения спектров вблизи основного состояния.

В первой главе дан обзор существующих алгоритмов и вычислительных схем для решения многомерной непрерывной минимаксной задачи, дан общий анализ наработок последних лет и обоснована необходимость разработки новой высокоточной итерационной вычислительной схемы, основанной на модифицированном методе Ньютона. Основная трудность решения задачи непрерывной минимаксной оптимизации заключается в том, что итерационные методы решения в невыпукло-невогнутой, выпукло-невогнутой и невыпукло-вогнутой областях требуют начального приближения очень близкого к искомому решению. Новая вычислительная итерационная схема ньютоновского типа, разработанная в данной главе диссертации, сочетает метод отрицательного направления кривизны для невыпукло-невогнутого, выпукло-невогнутого и невыпукло-вогнутого случаев с алгоритмами вычисления оптимального шага. Для проверки эффективности вычислительной схемы решена задача для уравнения Дирака для электрона в поле двух кулоновских зарядов тяжелых ионов. В данной задаче использован вариационный метод с непрерывной минимаксной оптимизацией и ограничениями по нелинейным параметрам пробных функций для больших и малых компонент решения. Для вычисления матричных элементов создан оригинальный алгоритм вычисления двухцентровых тройных интегралов с высокой точностью, возникающих в матричных элементах от произведения спинорных орбиталей слейтеровского типа с нецелыми степенями по радиальной переменной, относящихся к двум разным центрам. Алгоритм эффективно использует сочетание аналитических методов редукции на основе преобразования Фурье, а также свойств спинорных сферических гармоник и функций Бесселя, с современными численными методами. Эффективность построенной вычислительной схемы, вплоть до пяти первых значений главного квантового числа, подтверждена точностью расчетов энергии электрона в релятивистском приближении с использованием значительно меньшего числа базисных функций по сравнению с другими работами.

Во второй главе рассматривается метод конечных элементов в применении к системам обыкновенных дифференциальных уравнений на конечном интервале с краевыми условиями Дирихле, Неймана и Робина. Исследуются задачи на собственные значения для связанных и метастабильных состояний с комплексными собственными значениями, а также многоканальная задача рассеяния. Особенностью разработанного алгоритма является дискретизация с использованием интерполяционных полиномов Эрмита с произвольной

кратностью узлов, что сохраняет непрерывность производных искомым решений. Алгоритм реализован в виде комплекса программ KANTBP 5M в системе MAPLE. Для проверки эффективности алгоритма вычислены собственные значения энергии димера бериллия, включающих связанные состояния колебательно-вращательного спектра и метастабильные состояния с комплексными собственными энергиями вращательно-колебательного спектра.

В третьей главе описана реализация (для метода конечных элементов) полностью симметричных квадратурных формул с положительными весами и с узлами, лежащими внутри симплексов с количеством вершин от трех до шести; порядок формул равен, соответственно, значениям от двадцати до десяти. Алгоритм реализован в виде комплекса программ на языке FORTRAN и в системе MAPLE.

В Заключение перечислены основные результаты диссертации.

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

Все приведенные в диссертации оригинальные утверждения сопровождаются подробными доказательствами, которые были своевременно опубликованы в научных журналах, индексируемых в WoS и Scopus. Эти результаты были своевременно и достаточно полно представлены на международных конференциях, в том числе на 21st Workshop on Computer Algebra, May 23–24, 2019, Dubna, ЛИТ ОИЯИ, Дубна, Россия; Maple Conference, November 2–4, 2020, Waterloo, Maple Inc., Canada; LXX International conference NUCLEUS-2020, Nuclear physics and elementary particle physics. Nuclear physics technologies, October 11–17, 2020, Saint Petersburg State University, Russia; Maple Conference, November 2–5, 2021, Waterloo, Maple Inc., Canada; 22nd Workshop on Computer Algebra in memory of Professor Vladimir Gerdt, Dubna, Russia, May 24–25, 2021; International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing, CASC-2022, August 22–26, 2022, Gebze, Turkey.

Теоретическая значимость результатов диссертации состоит в том, что разработаны эффективные вычислительные схемы для решения непрерывной минимаксной задачи и решения краевых квантово-механических задач методом конечных элементов.

Практическая значимость исследований состоит в следующем:

– реализованная общая схема решения непрерывных минимаксных задач обеспечивает обоснованные и надежные оценки собственных значений энергии и собственных функций, необходимые для интерпретации экспериментов с

тяжелыми ионами;

- построенная вычислительная схема решения краевых задач, в частности, многоканальная задача рассеяния с запутанными открытыми каналами уже нашла свое применение для правильной интерпретации поведения измеренных в экспериментах сечений подбарьерного слияния тяжелых ионов;
- полученные оценки спектра связанных и метастабильных состояний димера бериллия полезны для интерпретации и планирования дальнейших экспериментов;
- полученные квадратурные формулы можно использовать при решении многомерных (вплоть до 6-мерных) краевых задач, возникающих при моделировании сложных физических систем.

Недостатки работы. В диссертации имеется ряд недостатков.

1. В описании алгоритма для нахождения локальной точки минимакса на стр. 18 в формуле (1.20) не рассмотрен случай, когда матрица Нуу вырождена.
2. В диссертации не указано, какая именно норма используется в алгоритме для нахождения локальной точки минимакса. Вообще говоря, сходимость метода Ньютона зависит от выбора нормы.
3. В диссертации не обоснован выбор волновой функции двухцентровой задачи (формула (1.55)) в виде аддитивного разделения переменных для двух волновых функций задачи с одним центром.

Заключение. Диссертационное представляет собой законченное и самостоятельное исследование, в котором разработана новая вычислительная схема, основанная на модифицированном методе Ньютона в сочетании с методом отрицательного направления кривизны для решения задач на минимакс, а также представлен новый алгоритм метода конечных элементов с использованием интерполяционных полиномов Эрмита.

Диссертационное исследование соответствует паспорту специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Полученные автором результаты достоверны, основные выводы и заключения обоснованы. Цели и задачи работы, которые были сформулированы во Введении достаточно полно отражены в трех главах диссертации. Автореферат корректно отражает результаты диссертационного исследования. Основные научные результаты диссертации достаточно полно изложены в 6 печатных изданиях, индексируемых WoS и Scopus, а также апробированы в выступлениях на международных научных конференциях и семинарах.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа «Исследование консервативных разностных схем в моделях движения многих тел» полностью соответствует требованиям п. 2.2 разделы II Положения о присуждении ученых степеней в ФГАУ ВО Российский университет дружбы народов, утвержденного Ученым советом РУДН, протокол № 12 от 23 сентября 2019 г., предъявляемых к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а ее автор — Чулуунбаатар Галмандах — степени кандидата физико-математических наук.

Официальный оппонент: доктор физико-математических наук (специальность 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»), ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», доцент, профессор кафедры общей математики и математической физики



Цирулев Александр Николаевич

29 сентября 2023

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет»

170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33

Тел.: (4822) 34-24-52

Электронная почта: tsirulev.an@tversu.ru

Подпись А.Н. Цирулева удостоверяю.

Проректор по научной и инновационной деятельности



А.В. Зиновьев