

**Отзыв научного руководителя  
на магистерскую диссертацию Тимошенко Владимира Андреевича  
«Метод представления дискретных переменных  
для решения квантовой задачи нескольких частиц»**

Различные задачи теории нескольких квантовых частиц являются востребованными и одновременно сложными задачами квантовой механики. Решение этих задач для небольшого количества частиц возможно найти, исходя из первых принципов, что позволяет изучить взаимодействия между частицами и/или приближенные методы, используемые для исследования более сложных квантовых систем. Исследование таких задач на кафедре вычислительной физики проводилось с самого её основания, и до сих пор составляет одно из основных направлений научной работы кафедры. Исследование реалистических (немодельных) систем неизбежно приводит к необходимости формирования и решения больших систем линейных уравнений. Поскольку, как правило, матричные элементы потенциалов не могут быть найдены аналитически, их вычисление при использовании методов типа Галеркина занимает существенное время и требует больших вычислительных ресурсов. Таким образом, разработка методов и подходов, позволяющих снизить трудоемкость этих вычислений, оказываются очень востребованными. В данной работе исследована возможность и эффективность использования метода представления дискретных переменных для вычисления интегралов (матричных элементов) в рамках метода конечных элементов для вычисления дискретного спектра систем нескольких частиц.

Работа состоит из введения, двух глав, заключения и трех приложений. В первой главе, «Метод представления дискретных переменных», описывается метод DVR для выбора базисных полиномиальных функций и вычисления матричных элементов операторов. Явно вычислены матричные элементы операторов кинетической энергии в одномерном и трехмерном случаях, для полиномов Лежандра, Лагерра и Чебышева. Во второй главе, «Результаты», приведены результаты работы программ, основанных на формулах первой главы, при исследовании нескольких систем: димеров гелия и неона, атома водорода, тримеров гелия и неона, а также системы Li-He<sub>2</sub>. Многие из рассмотренных систем имеют очень диффузную волновую функцию и требуют высокой точности аппроксимации, что естественно приводит к большим временам вычислений матричных элементов. Проанализировано ускорение, достигаемое при переходе от стандартных методов интегрирования к методам типа DVR. Приложения содержат описание потенциала подсистемы Li-He и исходные коды (на языке C и fortran90) написанных подпрограмм и программ.

В представленной работе автор продемонстрировал владение современными алгоритмами для исследования квантовой задачи нескольких тел, умение реализовывать эти алгоритмы на языках программирования C и fortran90, и исследовать их эффективность. Работа велась магистрантом инициативно и самостоятельно, её результаты представляют несомненный интерес и будут использоваться в научной работе на кафедре вычислительной физики.

Проверка работы на наличие заимствований с помощью встроенных в систему BlackBoard средств показала значение 24%, что является обычным значением для текста с включенными листингами программ. Выявленные заимствования, помимо нескольких общеупотребительных слов, представлены в основном заимствованиями операторов языков программирования в приложениях.

Считаю, что работа Тимошенко В.А. выполнена на высоком профессиональном уровне, а автор несомненно заслуживает присвоения академической степени магистра физики по направлению «Физика».

Кандидат физ.-мат. наук, доцент  
кафедры вычислительной физики  
физического факультета СПбГУ



Е.А. Яревский  
02.06.2017