ОТЗЫВ

члена диссертационного совета <u>Руднева Владимира Александровича</u> на диссертацию Тимошенко Владимира Андреевича на тему «Метод представления дискретных переменных для решения квантовой задачи нескольких частиц», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Диссертация Тимошенко Владимира Андреевича посвящена применению представления дискретных переменных к решению квантовой задачи нескольких частиц. В работе представлен обзор подходов к постановке задачи и методов её решения, изложен метод дискретных переменных, разработаны новые варианты метода, разработанный метод применен к моделированию некоторых важных для современной экспериментальной физики квантовых систем нескольких тел.

Научная и практическая ценность. Научная и практическая ценность работы определяется реализованным в ней подходом к представлению матричных элементов гамильтониана в системах сложной конфигурации, позволяющим вычислять численно матричные элементы операторов несколько быстрее по сравнению с прямым численным интегрированием в рамках метода конечных элементов.

Обоснованность полученных результатов. Представленные результаты в основном обоснованны.

Личный вклад. Личный вклад автора в представленную работу является определяющим.

Несмотря на существенность представленных результатов, представленная диссертационная работа вызывает и существенные нарекания.

Бросается в глаза небрежность оформления работы, обилие опечаток, даже фактическое отсутствие заявленного иллюстративного материала (рисунок 3.2 отсутствует). Характер опечаток, подчас, таков, что не позволяет судить о понимании автором представляемого материала.

В качестве примера таких грубых опечаток и ошибок изложения можно привести формулы (2.1.3), (2.4.4), (2.4.17), (2.5.1). Так, формула (2.1.3) совершенно не отвечает контексту, в котором она введена. Остаётся неясной связь между разложением по глобальному базису функций и этой формулой, которая должна это разложение пояснять. Формула (2.4.4) не следует из формулы (2.4.3) через замену переменной, но также подразумевает переопределение функций. Смысл такой замены также не раскрывается в последующем тексте. Формула (2.4.17) остаётся не только не вполне понятной в представленном контексте, но и содержит очевидную ошибку: левая и правая части последовательности равенств зависят от индекса j, тогда как центральная формула в цепочке от этого индекса не зависит. Формула (2.5.1) для гамильтониана системы трёх тел с нулевым моментом ошибочна: она не согласуется с координатами Якоби, введёнными формулами (1.2.1) и (1.2.2).

Изложение, подчас, не только недостаточно детально, но и не полно. В первой главе среди используемых подходов к решению квантовой задачи нескольких тел упущено изложение

гиперсферического адиабатического представления, тогда как более частные и редко используемые в представленном виде подходы, такие как метод Хартри, упомянуты. В целом, первая глава не демонстрирует единой логики изложения — ни исторической, ни физической, ни математической. Во второй главе вводится понятие «глобального базиса функций», однако не представлено конструктивное описание такого базиса, используемого в работе. Изложение проведено слишком абстрактно. Напротив, результаты, касающиеся построения представления дискретных переменных на основе различных систем ортогональных полиномов, очевидно, допускают более общее, абстрактное описание. Вместо такого описания автор прибегает к многократному повторению похожих выкладок, что несколько увеличивает объём представленной работы, но снижает её уровень.

Трудно не отметить многочисленные концептуальные и фактические ошибки в изложении. Вот некоторые из таких ошибок. На странице 6 автор отмечает: «решение задачи двух тел было получено в 1930-х годах, а основные методы и подходы, требуемые для исследования трех частиц, были разработаны в 1970-х». Это утверждение не верно. Первые прямые расчёты для квантовой трёхчастичной системы опубликованы Эгилом Хиллераасом в 1928 году, представление Хиллерааса было улучшено В.А. Фоком в 1954 году. Основные методы и подходы для решения задачи трёхчастичного рассеяния разработаны, прежде всего, Л.Д. Фаддеевым в начале 1960-х годов. В следующем абзаце видим: «При попытке решения задачи трех и более тел ученые сталкиваются со значительными аналитическими и вычислительными трудностями, в отличие от задачи двух тел, которая считается решенной». Утверждение о том, что задача двух тел не представляет трудностей выглядит наивным: существуют двухчастичные системы — с нецентральным взаимодействием, например – для которых решение двухчастичных задач тоже может представлять заметные трудности. Странным представляется и утверждение автора о физической неоднозначности решения уравнения Шрёдингера, взятого автором за основу его численных расчётов.

В описании резонансных состояний (стр. 25) автор делает абсурдное утверждение: «Резонансные состояния аналогичны связанным состояниям, но имеют ограниченное время жизни, как правило, превышающее характерные времена процессов, протекающих в рассматриваемой системе». Такое утверждение подразумевает, что время жизни резонанса не задаёт временной шкалы, характерной для системы. На стр. 31 читаем: « Для решения СЛАУ использовался метод Галёркина, основанный на разложении решения по полученному базису и решения полученной СЛАУ для коэффициентов разложения.» Таким образом, даже в рамках логики автора, метод решения системы линейных алгебраических уравнений основывается на решении системы линейных алгебраических уравнений, но не на методе Галёркина, к которому решение такой системы прямого отношения не имеет. На стр. 33: «Конструкции, приведенные в данном разделе, входят в гамильтониан и позволяют упростить его». Упомянутые автором конструкции в гамильтониан не входят.

На странице 49 автор делает утверждение, что из двух модельных потенциалов взаимодействия между атомами гелия — HFD-B и LM2M2 — более точным является LM2M2. Такое утверждение представляется безосновательным. На сегодняшний день существуют модельные потенциалы, учитывающие, в частности, релятивистские

эффекты, и с этой точки зрения их можно было бы счесть более точными. Упоминая экспериментальные результаты, автор говорит, что эти результаты равны некоторым величинам. В научном тексте такая вольность недопустима: экспериментальные результаты — как и результаты вычислительных экспериментов — позволяют лишь утверждать, что получена оценка, но никогда не равенство. Эта языковая неточность, возможно, отражает качество суждений автора.

Представляя результаты численных расчётов автор не даёт полной информации. Так, в заголовке таблицы 3.1 не указаны величины, приведённые в таблице. Когда автор говорит о времени работы программы, остаётся неясным, идёт ли речь о полном времени вычислений, либо лишь о времени заполнения матрицы? В разделе, касающемся исследования тримеров, не дана информация ни о методике построения базиса, ни о его полном размере. Создаётся ложное впечатление, что результаты получены на базисах из нескольких десятков элементов. Автор не предоставляет всей информации, необходимой для воспроизведения его результатов. Это касается не только отсутствия информации о всех параметрах расчёта, но и о важных параметрах модели. В частности, в моей работе 2011 года (Vladimir Roudnev and Michael Cavagnero, Benchmark helium dimer and trimer calculations with a public few-body code, 2012, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 45 025101) показано, что точное значение постоянной Больцмана оказывается важным для точных расчётов слабосвязанных трёхатомных систем. Автор не только не приводит используемого им значения, но и не приводит сравнения с наиболее точными образцовыми вычислениями, ограничиваясь менее точными результатами.

На фоне отмеченных недостатков, многочисленные стилистические ошибки (как, например, бессмысленное утверждение «Запись уравнений Фаддеева является прямым методом решение задачи на собственные значения», стр. 17), не представляются уже столь существенными.

В то же время, представленный материал позволяет утверждать, что изложенная и реализованная автором техника позволяет улучшить производительность вычислительных программ, для которых она автором развивалась, и, таким образом, решает поставленные задачи.

Несмотря на отмеченные серьёзные упущения, диссертация Тимошенко Владимира Андреевича на тему: «Метод представления дискретных переменных для решения квантовой задачи нескольких частиц» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Тимошенко Владимир Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физикоматематических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета

Д. ф.-м. н.,

доцент, кафедра вычислительной физики физического факультета СПбГУ

Владимир Александрович Руднев

Дата

O4.03.2023