

На правах рукописи

Гусев Александр Александрович

**МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ  
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КВАНТОВЫХ  
СИСТЕМ НЕСКОЛЬКИХ ЧАСТИЦ**

Специальность: 05.13.18 – математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Москва – 2019

Работа выполнена на кафедре прикладной информатики и теории вероятностей Российского университета дружбы народов

**Научный консультант:**

Профессор кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН, ведущий научный сотрудник Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединённого института ядерных исследований, доктор физико-математических наук, профессор,  
**Виницкий Сергей Ильич**

**Официальные оппоненты:**

Главный научный сотрудник Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской Академии Наук, доктор физико-математических наук, профессор  
**Абрамов Сергей Александрович**

Профессор кафедры прикладной математики Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» доктор физико-математических наук, профессор,  
**Крянев Александр Витальевич**

Доцент кафедры вычислительной физики ФГБОУ ВО Санкт-Петербургский государственный университет, доктор физико-математических наук, доцент,  
**Яревский Евгений Александрович**

**Ведущая организация:**

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

Защита состоится 07 июня 2019 г. в 15 часов 30 минут на заседании диссертационного совета Д 212.203.28 на базе Российского университета дружбы народов, расположенного по адресу: г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, ауд. 110.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Российского университета дружбы народов по адресу: 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6 (отзывы на автореферат просьба направлять по указанному адресу) или на официальном сайте диссоветов РУДН по адресу: <http://dissovet.rudn.ru/>.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
к.ф.-м.н.



С. А. Васильев

## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** Дальнейшее развитие ядерной, атомной и молекулярной физики и физики полупроводниковых наноструктур не представляется возможным без компьютерного моделирования и достоверного численного анализа широкого класса эллиптических задач для уравнения Шредингера в многомерном координатном пространстве [1–9]. Дело в том, что этому классу принадлежат эллиптические задачи, моделирующие физически интересные конфигурации и процессы, возможные в квантовой системе нескольких частиц. К ним относятся связанные и метастабильные состояния, резонансное рассеяние, туннелирование, а также фотоабсорбция и фотоионизация. Создание универсального и экономичного алгоритмического подхода, позволяющего с высокой точностью выполнять компьютерно-алгебраический и численный анализ всех перечисленных выше состояний и процессов, несомненно является актуальной и значимой с прикладной точки зрения задачей современного математического моделирования.

Решению этой задачи посвящены работы [А1–А36] и суммирующая их настоящая диссертация. Основой предлагаемого в ней подхода является существенное расширение и оптимизация метода конечных элементов (МКЭ) [10], а также естественное объединение этого метода с методом Канторовича [11, 12]. Расширение МКЭ заключается в применении новых схем высокого порядка точности, построенных на симплексах с непрерывными кусочно-полиномиальными базисными функциями нескольких переменных. Оптимизация состоит в построении и применении новых многомерных квадратурных формул интегрирования высокого порядка точности на симплексах для дискретизации и решения многомерных краевых задач, что заметно экономит компьютерные ресурсы.

Ключевым этапом в предлагаемом в диссертации подходе является применение метода Канторовича, который применяется в многих предметных областях, но под разными специальными названиями, например, [6, 13]. Этим методом исходная многомерная эллиптическая задача сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка по одной из независимых переменных. Решение краевой задачи ищется в виде разложения по базисным функциям, которые зависят от независимой переменной системы ОДУ как от параметра. При этом в качестве базисных функций в диссертации используются решения вспомогательной краевой задачи на собственные значения в пространстве меньшей размерности, переменные коэффициенты которой параметрически зависят от независимой переменной системы ОДУ. Построение решений задачи в асимптотической области выполняется с помощью разработанных символьных (компьютерно-алгебраических) алгоритмов и используется для формулировки краевых условий на границе конечной области. Для реше-

ния этих задач в конечной области изменения независимых переменных и системы ОДУ на конечном интервале с краевыми условиями смешанного типа применяется МКЭ высокого порядка точности.

В диссертации разработаны новые вычислительные схемы МКЭ высокого порядка точности, ориентированные на решение эллиптических краевых задач для многомерного уравнения Шредингера и исследование квантовых систем нескольких частиц. Дана реализация этих схем в виде созданных алгоритмов и комплексов программ. Их работоспособность проиллюстрирована анализом эталонных задач с известными решениями и физически приемлемых, или упрощенных математических моделей квантовых систем нескольких частиц ядерного, атомного или молекулярного типа, а также полупроводниковых квантовых точек.

Как показано в диссертации, предложенные в ней расширения, оптимизация и объединение позволяют существенно повысить точность МКЭ и успешно преодолеть многие проблемы и ограничения известных методов решения многомерных краевых эллиптических задач, возникающих в итоге математического моделирования квантовых систем нескольких частиц.

В широко применяемом гиперсферическом адиабатическом методе [6] до сих пор не решена его ключевая проблема: вычисление с высокой точностью не только параметрических собственных значений и квазиугловых базисных функций, но и их производных по параметру и интегралов от произведения квазиугловых базисных функций и (или) их производных по параметру, через которые выражаются переменные коэффициенты системы ОДУ второго порядка с первой производной по гиперрадиальной переменной [14]. Для решения с заданной точностью соответствующих параметрических краевых задач и систем ОДУ с краевыми условиями третьего рода требуется разработка новых алгоритмов и комплексов программ. Первые шаги в этом направлении были предприняты в авторских работах [15–17]. Чтобы не решать эту проблему, обычно, аппроксимируют эффективные потенциалы и первую производную системы ОДУ их средними значениями на каждом шаге сетки при интегрировании задачи тем или иным численным методом. Однако, такая аппроксимация не позволяет получить искомое решение с высокой точностью [18]. Предлагаемый в диссертации подход лишён этого недостатка.

Следующая и не менее важная проблема состоит в построении решений задачи в асимптотической области, которые используются для формулировки краевых условий смешанного типа на границе конечной области [19–21]. Построение таких асимптотических состояний необходимо для применения МКЭ и уменьшения интервала интегрирования системы ОДУ с краевыми условиями третьего рода до оптимального значения, что позволяет не только повысить точность аппроксимации искомого решения на конечном отрезке, но и сэкономить требуемые компьютерные ресурсы. Эти решения имеют различное строение в разных областях конфигурационно-

го пространства и определяются как произведения асимптотических разложений при больших значениях гиперрадиальной переменной параметрических квазиугловых базисных функций и фундаментальных решений системы ОДУ второго порядка. Для построения таких асимптотических разложений требуется разработка новых численных и символьных (компьютерно–алгебраических) методов и алгоритмов [22–25]. Эту трудность удалось преодолеть в рамках развитого в диссертации подхода.

МКЭ давно стал стандартом для решения краевых задач математической физики. Доступны многочисленные программные реализации МКЭ в пространстве размерности, не превышающей трёх. Если квантовомеханическая задача богата симметриями и сводится к задаче для ОДУ или для уравнений в частных производных в пространстве двух или трех измерений, то численный анализ краевых задач для уравнения Шредингера в классе квадратично суммируемых функций возможен с помощью той или иной программной реализации МКЭ, но требует специальной переформулировки краевых задач с условиями первого рода [4, 5]. В предлагаемом в диссертации подходе этого ограничения в реализации МКЭ нет: можно использовать граничные условия смешанного типа (условия Дирихле, Неймана и третьего рода), согласованные с асимптотическими краевыми условиями исходной задачи. Это обстоятельство существенно расширяет область применимости развитого в диссертации метода.

Случай решения уравнений в частных производных в пространстве размерности большей трёх, фактически не охвачен программным обеспечением МКЭ. В вычислительных схемах МКЭ обычно используются кусочно–полиномиальные базисные функции, которые на границах смежных конечных элементов не имеют непрерывных производных по направлениям, составляются сшивкой интерполяционных полиномов Лагранжа (ИПЛ). Однако, когда требуется высокая гладкость между элементами, или когда градиент решения должен быть определен с повышенной точностью, необходимо учитывать значения производных по направлениям аппроксимирующей функции. Такие базисные функции можно построить сшивкой интерполяционных полиномов Эрмита (ИПЭ) только на специальных сетках. Для этого требуется разработка алгоритмов, позволяющих за сравнительно небольшое время сгенерировать в аналитическом виде ИПЭ нескольких переменных высокого порядка и соответствующие квадратурные формулы. Для одномерного случая такой алгоритм разработан в авторской работе [26]. Эти наиболее важные и трудные проблемы МКЭ и его приложений являются предметом интенсивных исследований начиная с 60-х годов прошлого века по настоящее время, например, по конечным элементам [10, 27–35] и по квадратурным формулам [36–42]. В подходе, предложенном в диссертации, сделано несколько важных шагов в алгоритмическом решении этой проблемы.

**Цель диссертационной работы.** Целью диссертационной работы

является разработка эффективных численных и компьютерно–алгебраических методов, построение экономичных вычислительных схем, алгоритмов и создание проблемно–ориентированных комплексов программ для решения эллиптических краевых задач, описывающих квантовые системы нескольких частиц.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. разработка эффективных численных и компьютерно–алгебраических методов, вычислительных схем и алгоритмов построения решений в асимптотической области, необходимых для редукции эллиптических краевых задач в бесконечной области изменения независимых переменных к краевым задачам меньшей размерности в конечной области пространства.
2. построение алгоритмов дискретизации краевых задач в конечной области для эллиптических уравнений и для систем ОДУ второго порядка на основе метода Канторовича и МКЭ высокого порядка точности с интерполяционными полиномами Лагранжа и Эрмита нескольких переменных, многомерных квадратурных формул и создание проблемно–ориентированных комплексов программ для численного решения с заданной точностью эллиптических краевых задач математических моделей квантовых систем нескольких частиц;
3. численный анализ скорости сходимости разложения искомого решения краевых задач по числу базисных функций МКЭ и порядка точности приближенных решений с помощью разработанных алгоритмов и комплексов программ на эталонных моделях, и численных экспериментов на сгущающихся сетках;
4. применение разработанных комплексов программ для анализа динамических характеристик математических моделей квантовых систем нескольких частиц, а именно: а) аксиально симметричных полупроводниковых квантовых точек, б) кулоновского рассеяния электрона в магнитном поле и фотоионизации атома водорода, в) рассеяния двухатомной молекулы на потенциальном барьере или на атоме, г) туннелирования кластера нескольких тождественных квантовых частиц через потенциальные барьеры или ямы.

**Методология и методы исследования.** В качестве общего подхода для анализа многомерных краевых эллиптических задач квантовых систем нескольких частиц используется предложенное объединение МКЭ и метода Канторовича. Для оптимизации и расширения МКЭ использованы интерполяционные полиномы Лагранжа и Эрмита, многомерные квадратурные формулы и асимптотические методы построения решений параметрических уравнений и фундаментальных решений систем ОДУ при больших значениях аргумента.

**Научная новизна** диссертации состоит в следующем.

1. Впервые предложен алгоритмический подход к построению схем МКЭ

высокого порядка точности с интерполяционными полиномами Лагранжа и Эрмита нескольких переменных и квадратурными формулами на симплексах для решения многомерных краевых задач:

- а) построен алгоритм и создана программа в системе Maple и на языке Fortran разбиения  $d$ -мерного гиперкуба на симплексы,
  - б) построен алгоритм и создана программа в системе Maple вычисления в аналитическом виде полиномов Эрмита двух переменных на треугольных конечных элементах,
  - в) предложен и реализован в среде Maple–Fortran новый алгоритм вычисления полностью симметричных гауссовых квадратурных формул для многомерных интегралов по симплексам,
  - г) разработанные схемы МКЭ и алгоритмы протестированы решением эталонных краевых задач для уравнения Гельмгольца в конечной области размерностью от двух до шести.
2. Впервые создан проблемно–ориентированный комплекс алгоритмов и программ в среде Maple–Fortran для решения МКЭ с заданной точностью эллиптических задач математических моделей квантовых систем нескольких частиц:
- а) алгоритмы вычисления асимптотик однопараметрических базисных функций, матриц коэффициентов и фундаментальных решений системы ОДУ второго порядка, применяемые для формирования граничных условий третьего рода в методе Канторовича и редукции многомерной краевой задачи в конечную область.
  - б) программа ROTHEA решения однопараметрических краевых задач на собственные значения для системы ОДУ второго порядка и двумерных эллиптических уравнений в конечной области, и вычисления первых производных по параметру от собственных значений и собственных функций,
  - в) программы KANTBP 2.0 и KANTBP 3.0 решения краевых задач для системы ОДУ второго порядка с краевыми условиями смешанного типа.
3. Впервые с помощью разработанных вычислительных схем, созданных алгоритмов и проблемно–ориентированных комплексов программ, численными экспериментами подтверждены оценки порядка точности вычислительных схем при решении эталонных задач и выполнен анализ:
- а) поведения коэффициента фотоабсорбции в зависимости от энергии межзонных переходов и геометрических параметров аксиально-симметричных полупроводниковых квантовых точек;
  - б) зависимости сечения резонансной фотоионизации атома водорода от магнитного квантового числа атома и напряженности магнитного поля;
  - в) эффектов резонансного прохождения и отражения в процессах рассеяния двухатомной молекулы на потенциальном барьере или на атоме, туннелирования кластера нескольких тождественных квантовых частиц через потенциальные барьеры или ямы.

**Теоретическая значимость.** Разработаны и апробированы вычислительные схемы и символично–численные алгоритмы МКЭ высокого порядка точности с интерполяционными полиномами Лагранжа и Эрмита нескольких переменных и новыми многомерными квадратурными формулами на симплексах. Показано, что эти схемы, использующие объединение метода Канторовича и МКЭ, позволяют численно решать краевые задачи для многомерных эллиптических дифференциальных уравнений, описывающих математические модели квантовых систем нескольких частиц.

**Практическая значимость.** На основе разработанных вычислительных схем и алгоритмов созданы проблемно–ориентированные комплексы программ. Эти комплексы могут найти широкое применение для численного решения краевых задач математических моделей систем нескольких квантовых частиц, волноводных и квантовых систем полупроводниковой, молекулярной, атомной и ядерной физики. Комплексы программ включают в себя программы KANTBP 2.0 и KANTBP 3.0 решения с заданной точностью краевых задач для системы ОДУ второго порядка и программу ROTHEA решения параметрических краевых задач для ОДУ второго порядка и двумерных эллиптических уравнений в конечной области. Эти программы с полным описанием и тестовыми примерами, представляющие интерес для широкого круга пользователей, представлены в библиотеке программ журнала Computer Physics Communications (impact factor 3.936) [A9, A10, A13]. К программам KANTBP 2.0, KANTBP 3.0 и ROTHEA было официально зарегистрировано 318, 85 и 71 обращений пользователей, соответственно (данные на 04.11.2018 г.).

Разработанные вычислительные схемы, алгоритмы и проблемно–ориентированные комплексы программ уже интенсивно используются в Объединённом институте ядерных исследований (ОИЯИ, Дубна, Россия), Российском университете дружбы народов (РУДН, Москва, Россия), Саратовском государственном университете (СГУ, г. Саратов, Россия), Институте ядерной физики (ИЯФ, г. Алматы, Казахстан), Российско–Армянском (Славянском) университете (РАУ, г. Ереван, Армения), Педагогическом университете Хошимина (г. Хошимин, Вьетнам) и университете им. Марии Кюри–Склодовска (UMCS, г. Люблин, Польша).

Все предложенные в диссертации разработки могут быть использованы в ИЯИ БАН (София, Болгария), СПбГУ (Санкт-Петербург), МИФИ (Москва), МФТИ (Москва), ТвГУ (Тверь), Университете Северной Каролины (Северная Каролина, США), университете Темпл (Филадельфия, США), Национальном автономном университете Мексики (Куернавака, Мексика) и других научных и исследовательских центрах. Исследования выполнялись автором в соответствии с научно-тематическими планами научно–исследовательских работ ОИЯИ и РУДН, и в рамках протоколов о выполнении совместной научно–исследовательской работы с СГУ, ИЯФ, РАУ и UMCS.



**На защиту выносятся следующие основные результаты.**

1. Алгоритмический подход, реализованный в виде комплексов программ в среде Maple–Fortran, к построению схем МКЭ высокого порядка точности с интерполяционными полиномами Лагранжа и Эрмита нескольких переменных на симплексах. Этот подход включает:
  - а) алгоритм разбиения  $d$ -мерного куба на симплексы;
  - б) алгоритм вычисления в аналитическом виде интерполяционных полиномов Эрмита двух переменных на треугольных конечных элементах;
  - в) численный и компьютерно–алгебраический алгоритмы для построения полностью симметричных гауссовых квадратурных формул с положительными весами и узлами внутри симплекса.
2. Алгоритмы и схемы МКЭ высокого порядка точности решения однопараметрических двумерных краевых задач на собственные значения для эллиптических уравнений, и их применение к решению эллиптических краевых задач методом Канторовича.
3. Алгоритмы вычисления асимптотик однопараметрических базисных функций, матриц коэффициентов и фундаментальных решений системы ОДУ второго порядка, применяемые для формирования граничных условий третьего рода в методе Канторовича и редукции многомерной краевой задачи в конечную область.
4. Проблемно–ориентированные комплексы алгоритмов и программ для анализа математических моделей систем нескольких квантовых частиц:
  - а) программа ROTHEA решения однопараметрических краевых задач на собственные значения для системы ОДУ второго порядка и двумерных эллиптических уравнений в конечной области и вычисления первых производных по параметру от собственных значений и собственных функций,
  - б) программы KANTBP 2.0 и KANTBP 3.0 решения краевых задач для системы ОДУ второго порядка с краевыми условиями смешанного типа.
5. Оценки порядка точности разработанных вычислительных схем, полученные в вычислительных экспериментах при решении эталонных задач. Этими оценками подтверждено соответствие зависимости погрешностей собственных значений и собственных функций от шага конечно–элементной сетки и числа кусочно–полиномиальных базисных функций с их теоретическими оценками.
6. Расчеты динамических характеристик квантовых систем и резонансных эффектов, впервые проведенные с помощью разработанных математических моделей, численных и компьютерно–алгебраических вычислительных схем, алгоритмов и созданных комплексов программ. Такими характеристиками являются следующие физически интересные величины и функциональные зависимости:
  - а) ярко выраженное резонансное поведение коэффициента фотоабсорбции в зависимости от энергии оптических межзонных переходов и гео-

метрических параметров аксиально-симметричных полупроводниковых квантовых точек;

б) зависимость сечения резонансной фотоионизации атома водорода от магнитного квантового числа атома и напряженности однородного магнитного поля;

в) резонансные зависимости коэффициентов прохождения и отражения, сгенерированные метастабильными состояниями с комплексными собственными значениями энергии, в процессах рассеяния двухатомной молекулы на потенциальном барьере или на атоме; туннелирования кластера нескольких тождественных квантовых частиц через потенциальные барьеры или ямы.

**Достоверность результатов.** Достоверность результатов подтверждена применением корректных математических методов и численными экспериментами на точно решаемых математических моделях квантовых систем, проверкой выполнения известных теоретических оценок погрешностей численных решений, а также сравнением с известными результатами других авторов.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях: International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing (2012, 2013, 2014, 2015, 2016, 2017, 2018); Международное рабочее совещание по компьютерной алгебре (2012, 2014, 2015, 2016, 2018); Лазерная физика и фотоника, Симпозиум: Оптика и биофотоника, Saratov Fall Meeting, Саратов (2013, 2014, 2015, 2016, 2017, 2018), International Conference “Computer Algebra” (2016, 2017), International Conference on Integrable Systems and Quantum symmetries (2013, 2014, 2015, 2016, 2017), Distributed Computer and Communication Networks (2016), 2nd International Symposium on Optics and its Applications (2014), Nuclear Physics Workshop “Marie & Pierre Curie” (2015, 2016, 2018), Mathematical Modeling and Computational Physics (2013, 2015, 2017), 67-е Совещание по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра (2017) и на научных семинарах Лаборатории информационных технологий ОИЯИ (г. Дубна), кафедры прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических и естественных наук РУДН (г. Москва), Компьютерная алгебра на факультете ВМК МГУ и ВЦ РАН (г. Москва).

**Публикации.** Основное содержание диссертации изложено в 36 публикациях [A1–A36] из них 35 в виде статей в журналах, цитируемых в Scopus и Web of Science и рекомендованных ВАК РФ, и 1 статья в трудах международной конференции [A36].

**Личный вклад автора.** Автор диссертации, работая в коллективе соавторов, самостоятельно создал формулировку, выполнил проверку и улучшение математических моделей, а также компьютерное моделирование физических задач, анализ достоверности и указанной точности полученных результатов. Его вклад в разработку всех вычислительных схем,

в создание всех комплексов алгоритмов и программ, в их тестирование, в анализ и обоснование оценок точности вычислительных схем, является определяющим.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и двух приложений, списка основных публикаций из 36 наименований с номерами [A1–A36], списка цитируемой литературы из 117 наименований. Главы разбиты на разделы, разделы – на пункты. Нумерация формул, таблиц и рисунков сквозная в пределах каждой главы. Объем диссертации – 223 страницы, 58 рисунков, 31 таблица.

## Основное содержание диссертации

Во **Введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены основные положения, выносимые на защиту. Кратко изложено содержание диссертации.

В **главе 1** предложены новые вычислительные схемы МКЭ высокого порядка точности решения краевых задач для эллиптического уравнения в частных производных, сохраняющие непрерывность производных приближенного решения в ограниченной области многомерного евклидова пространства. Основные результаты опубликованы в [A1, A2, A3, A4, A5, A36].

В **разделе 1.1** дана постановка краевой задачи и её редукция МКЭ к алгебраической задаче.

Математическая формулировка рассматриваемых физических моделей редуцируется к краевой задаче для эллиптического дифференциального уравнения второго порядка:

$$(D-E)\Psi(x) \equiv \left( -\frac{1}{g_0(x)} \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_i} g_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x_j} + V(x) - E \right) \Psi(x) = 0, \quad (1)$$

где  $E$  – спектральный параметр энергии,  $g_0(x) > 0$ ,  $g_{ji}(x) = g_{ij}(x)$  и  $V(x)$  – функции, непрерывные вместе со своими обобщенными производными до заданного порядка в области,  $x \in \bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$ , с кусочно-полиномиальной границей  $S = \partial\Omega$ , обеспечивают существование нетривиальных решений, подчинённых граничным условиям первого (I), второго (II) или третьего (III) рода [10]

$$(I) : \Psi(x)|_S = 0, \quad (II) : \frac{\partial \Psi(x)}{\partial n_D} \Big|_S = 0, \quad (2)$$

$$(III) : \frac{\partial \Psi(x)}{\partial n_D} \Big|_S + \sigma(s)\Psi(x)|_S = 0, \quad \frac{\partial \Psi(x)}{\partial n_D} = \sum_{i,j=1}^d (\hat{n}, \hat{e}_i) g_{ij}(x) \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x_j}.$$

Здесь  $\sigma(s) = \sigma(s(x))$  – известная функция на границе области  $s(x) \in S$ ,  $\frac{\partial \Psi(x)}{\partial n_D}$  – производная по направлению конормали,  $\hat{n}$  – внешняя нормаль к

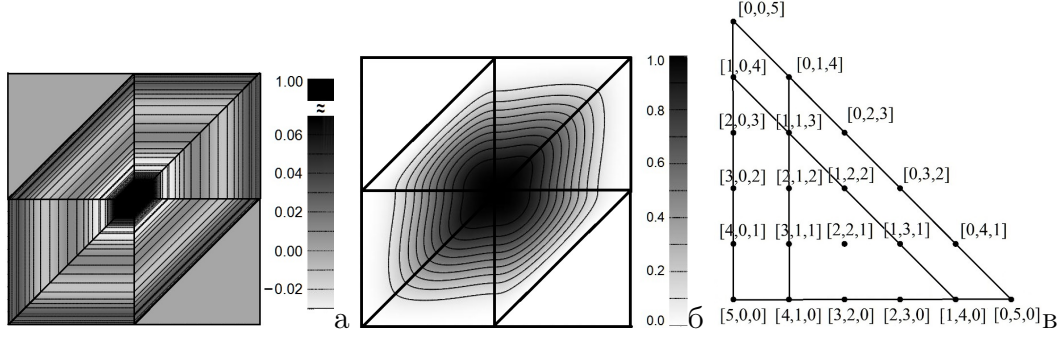


Рис. 1: Кусочно-полиномиальные функции, равные единице в начале координат, полученные сшивкой: (а) ИПЛ пятого порядка и (б) ИПЭ пятого порядка (треугольник Агририса). (в) Нумерация узлов  $A_r$ ,  $r = 1, \dots, (p+1)(p+2)/2$ , наборами чисел  $[n_0, n_1, n_2]$  треугольника для ИПЛ пятого порядка  $p' = p = 5$  при  $d = 2$ . Линии – нули ИПЛ  $\varphi_{14}^5(x') \equiv \varphi_{[2,2,1]}^5(x')$ , равного единице в точке, пронумерованной тройкой чисел  $[n_0, n_1, n_2] = [2, 2, 1]$ .

границе области  $S = \partial\Omega$ ,  $\hat{e}_i$  – единичный вектор вектора  $x = \sum_{i=1}^d \hat{e}_i x_i$ ,  $(\hat{n}, \hat{e}_i)$  – скалярное произведение в  $\mathcal{R}^d$ .

*Вычислительную схему* решения МКЭ краевых задач (1), (2) представим в виде последовательности семи шагов:

*Шаг 1.* Задача (1), (2) сводится к задаче нахождения стационарных точек вариационного функционала [10].

*Шаг 2.* Построение конечноэлементной сетки: область  $\bar{\Omega}$ , заданная в виде многогранника,  $\bar{\Omega} = \Omega_h(x) = \bigcup_{q=1}^Q \Delta_q$ , разбивается на конечные элементы – симплексы  $\Delta_q$  с  $d+1$  вершинами  $\hat{x}_i = (\hat{x}_{i1}, \hat{x}_{i2}, \dots, \hat{x}_{id})$  при  $i=0, \dots, d$ .

*Шаг 3.* Построение базисных функций  $\varphi_r^{p'}(x)$  на конечном элементе  $\Delta_q$ , в качестве которых используются интерполяционные полиномы Лагранжа (ИПЛ) или интерполяционные полиномы Эрмита (ИПЭ) порядка  $p'$ . Процедура построения ИПЛ и ИПЭ представлена в разделе 1.2.

*Шаг 4.* Построение кусочно-полиномиальных функций  $N_{l'}^{p'}(x)$  порядка  $p'$  путём сшивки базисных функций  $\varphi_r^{p'}(x)$  на границах смежных конечных элементов  $\Delta_q$  (см., например, рис. 1а,б).

*Шаг 5.* Разложение приближённого решения  $\Psi_m^h(x)$  к искомому решению  $\Psi_m(x)$  по базису кусочно-полиномиальных функций  $N_{l'}^{p'}(x)$

$$\Psi_m^h(x) = \sum_{l'=1}^N N_{l'}^{p'}(x) \Psi_{l'm}^h \quad (3)$$

и подстановка в вариационный функционал даёт алгебраическую задачу

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B}E^h)\Psi^h = 0. \quad (4)$$

Элементы симметричных матриц жёсткости  $\mathbf{A} = \{a_{l'l'}^{p'}\}_{l'l'=1}^N$  и масс  $\mathbf{B} = \{b_{l'l'}^{p'}\}_{l'l'=1}^N$

даются формулами на соответствующих симплексах  $\Delta_q$ :

$$a_{l'l'}^{p'} = \sum_{ij=1}^d \int_{\Delta_q} g_{ij}(x) \frac{\partial \varphi_l^{p'}(x)}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_{l'}^{p'}(x)}{\partial x_j} dx + \int_{\Delta_q} g_0(x) \varphi_l^{p'}(x) \varphi_{l'}^{p'}(x) V(x) dx \quad (5)$$

$$- \int_{S_q} \varphi_l^{p'}(x) \frac{\partial \varphi_{l'}^{p'}(x)}{\partial n_D} ds, \quad b_{l'l'}^{p'} = \int_{\Delta_q} g_0(x) \varphi_l^{p'}(x) \varphi_{l'}^{p'}(x) dx.$$

*Шаг 6.* Вычисление интегралов (5). Реализация схемы МКЭ порядка  $p'$  требует вычисления интегралов (5) с точностью не ниже порядка  $2p'$ . Для этого в разделе 1.3. разработан алгоритм с помощью которого получены новые полностью симметричные гауссовы квадратурные формулы.

*Шаг 7.* Решение алгебраической задачи (4). Если краевая задача (1), (2) формулируется в виде задачи дискретного спектра, то задача (4) является обобщенной алгебраической задачей на собственные значения с разреженной симметричной матрицей, относительно неизвестных собственных векторов  $\Psi^h \equiv \Psi_m^h$  и собственных значений  $E^h \equiv E_m^h$ , которая решается методом итераций в подпространстве [33] с адаптацией мультифронтальным методом факторизации [43]. Если краевая задача (1), (2) формулируется в виде задачи рассеяния при фиксированном значении спектрального параметра  $E = E^h$ , то задача (4) редуцируется к неоднородной алгебраической задаче с неизвестной матрицей рассеяния  $\mathbf{S}$  (см. разделы 1.4, 2.1 и 2.3), которая решается мультифронтальным методом факторизации [43].

При построении ИПЭ  $\varphi_r^{p'}(x)$  используется экономичная реализация:

- расчёты проводятся в локальных координатах  $x' = (x'_1, \dots, x'_d)$ , связанных аффинным преобразованием  $x' = A_q x$ , в которых координаты вершин симплекса  $\Delta$  следующие:  $\hat{x}'_j = (\hat{x}'_{j1}, \dots, \hat{x}'_{jd})$ ,  $\hat{x}'_{jk} = \delta_{jk}$ ;
- ИПЭ в исходных координатах  $x$  ищутся в виде линейных комбинаций полиномов в локальных (барицентрических) координатах  $x'$ , при этом переход в исходные координаты  $x = A_q^{-1} x'$  выполняется только на этапе численного решения конкретной краевой задачи;
- вычисление интегралов МКЭ (5) выполняется в локальных (барицентрических) координатах.

В разделе 1.2 представлен новый алгоритм вычисления в аналитическом виде интерполяционных полиномов Эрмита (ИПЭ) нескольких переменных порядка  $p'$ , применяемых для построения кусочно-непрерывного базиса  $N_{l'}^{p'}(x)$  МКЭ, обеспечивающего непрерывность не только приближенных решений, но и их производных по направлениям до заданного порядка на границах конечных элементов в зависимости от гладкости переменных коэффициентов уравнения (1).

*Алгоритм* построения ИПЛ следует из известной конструкции [44]. Каждое ребро симплекса  $\Delta_q$  разбиваем на  $p$  равных частей и проводим семейства параллельных гиперплоскостей  $H(i, k)$ , нумеруя каждую целым

Таблица 1: Характеристики базиса ИПЭ  $[p\kappa_{\max}\kappa'_1]$  при  $d=2$ . ИПЭ [131] воспроизводит треугольный эрмитов элемент Аргириса.

$[p\kappa_{\max}\kappa'_1]$	[120]	[131]	[141]	[231]	[152]	[162]	[241]	[173]
$p'$	3	5	7	8	9	11	11	13
$N_{1p'}$	10	21	36	45	55	78	78	105
$K$	1	3	6	9	10	15	9	21
$N(\text{ВП1})=N_{\kappa_{\max}p'}$	9	18	30	36	45	63	60	84
$N(\text{ВП2})=T_1(\kappa'_1)$	0	3	3	6	9	9	6	18
$N(\text{ВП3})=K-T_1(\kappa'_1)$	1	0	3	3	1	6	12	3
$p'=\kappa_{\max}(p+1)-1$ – порядок ИПЭ								
$N(\text{ВП1})=N_{\kappa_{\max}p'}=(p+1)(p+2)\kappa_{\max}(\kappa_{\max}+1)/4$ – число ВП1								
$N_{1p'}=(p'+1)(p'+2)/2$ – число степеней свободы конечного элемента (число ИПЭ)								
$K=p(p+1)\kappa_{\max}(\kappa_{\max}-1)/4$ – число ВП2 и ВП3								
Ограничение на порядок производных $\kappa'_1$ : $3p\kappa'_1(\kappa'_1+1)/2 \leq K$ .								

числом  $k=0, \dots, p$ , начиная от соответствующей грани. Точки пересечения гиперплоскостей  $A_r$  нумеруем наборами целых чисел  $[n_0, \dots, n_d]$ ,  $n_i \geq 0$ ,  $n_0 + \dots + n_d = p$ . В локальных координатах  $x' = (x'_1, \dots, x'_d)$ , ИПЛ  $\varphi_r(x)$  степени  $p$ , равные единице в точке  $A_r$  с координатами  $\xi_r = (\xi_{r1}, \dots, \xi_{rd}) \equiv (n_1/p, \dots, n_d/p)$ , и нулю в остальных точках  $\xi_{r'}$ , т.е.  $\varphi_r(\xi_{r'}) = \delta_{rr'}$  имеют вид (см. рис. 1 в)

$$\varphi_r^p(x') \equiv w_r^p(x') = \left( \prod_{i=1}^d \prod_{n'_i=0}^{n_i-1} \frac{x'_i - n'_i/p}{n_i/p - n'_i/p} \right) \left( \prod_{n'_0=0}^{n_0-1} \frac{1 - x'_1 - \dots - x'_d - n'_0/p}{n_0/p - n'_0/p} \right). \quad (6)$$

Построение ИПЭ в аналитическом виде в локальных координатах  $x'$ , выполняется с помощью *Алгоритма 1.1*, реализованного в системе Maple, при этом переход в исходные координаты  $x$  выполняется только на этапе численного решения задачи на языке Fortran.

*Шаг 1.* Вычисление набора ВП1 (вспомогательных полиномов)  $\tilde{\varphi}_r^{\kappa p}(x') \equiv \tilde{\varphi}_r^{\kappa_1 \kappa_2 \dots \kappa_d p}(x')$ , удовлетворяющих условиям

$$\tilde{\varphi}_r^{\kappa p}(\xi'_r) = \delta_{rr'} \delta_{\kappa_1 0} \dots \delta_{\kappa_d 0}, \quad \left. \frac{\partial^{\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_d} \tilde{\varphi}_r^{\kappa p}(x')}{\partial x'_1{}^{\mu_1} \dots \partial x'_d{}^{\mu_d}} \right|_{x'=\xi'_r} = \delta_{rr'} \delta_{\kappa_1 \mu_1} \dots \delta_{\kappa_d \mu_d}, \quad (7)$$

где  $0 \leq \kappa_1 + \kappa_2 + \dots + \kappa_d \leq \kappa_{\max} - 1$  и  $0 \leq \mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_d \leq \kappa_{\max} - 1$ . В узловых точках  $\xi'_r = (\xi'_{r1}, \dots, \xi'_{rd})$  симплекса  $\Delta$ , в тех же, что для ИПЛ  $p$ -того порядка (6), в отличие от ИПЛ заданы значения не только ВП1, но и их производных до порядка  $\kappa_{\max} - 1$ . ВП1 с учетом (6) даются выражениями

$$\tilde{\varphi}_r^{\kappa p}(x') = (w_r^p(x'))^{\kappa_{\max}} \sum_{\mu \in \Delta_{\kappa}} a_r^{\kappa_1 \dots \kappa_d, \mu_1 \dots \mu_d} (x'_1 - \xi'_{r1})^{\mu_1} \times \dots \times (x'_d - \xi'_{rd})^{\mu_d}, \quad (8)$$

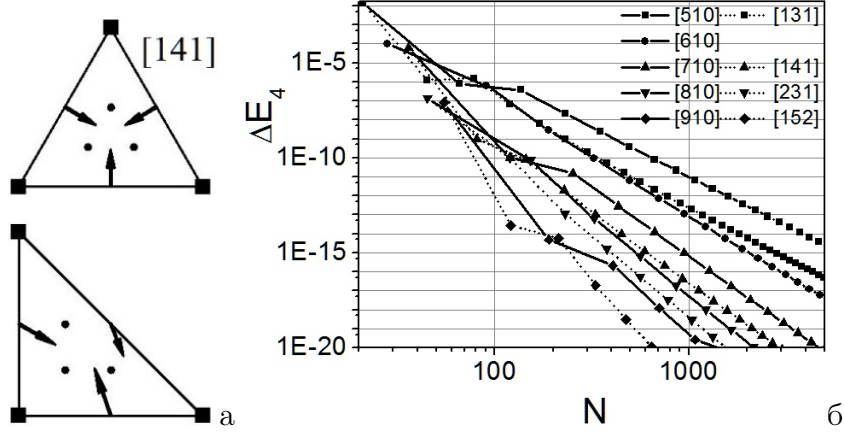


Рис. 2: а. Схематическое изображение условий построения базиса ИПЭ  $[p\kappa_{\max}\kappa'_1]=[141]$  порядка  $p'=7$  на элементах  $\Delta_q$  и  $\Delta$ . Квадраты: точки  $\xi'_r$ , в которых фиксируются значения ИПЭ и их производных до третьего порядка; стрелки: стрелки с началом в точках  $\eta'_s$ , в которых фиксируются значения первой производной по направлению нормали в исходных координатах; кружки: точки  $\zeta'_s$ , в которых фиксируются значения ИПЭ. б. Зависимости погрешности  $\Delta E_4^h = E_4^h - E_4$  от числа  $N$  кусочно-полиномиальных базисных функций МКЭ с различными ИПЛ и ИПЭ из таблицы 1.

где  $\Delta_\kappa = \{\mu_1, \dots, \mu_d | 0 \leq \mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_d \leq \kappa_{\max} - 1\}$ , а коэффициенты  $a_r^{\kappa_1 \dots \kappa_d, \mu_1 \dots \mu_d}$  вычисляются из рекуррентных соотношений, полученных в результате подстановки (8) в условия (7). Степень  $p'$  ИПЭ определяется по формуле  $p' = \kappa_{\max}(p+1) - 1$ .

При  $\kappa_{\max} = 1$  ИПЭ порядка  $p' = p$  совпадают с ИПЛ порядка  $p$ . При  $d > 1$  и  $\kappa_{\max} > 1$ , число  $N_{\kappa_{\max}p'}$  ИПЭ степени  $p'$  и кратности узлов  $\kappa_{\max}$  меньше числа полиномов  $N_{1p'}$ , формирующих базис в пространстве полиномов степени  $p'$ , т.е. на этом шаге ИПЭ определены неоднозначно.

*Шаг 2.* Для однозначного определения полиномиального базиса введём  $K = N_{1p'} - N_{\kappa_{\max}p'}$  линейно-независимых от ВП1 вспомогательных полиномов  $Q_s(x)$  двух типов: ВП2  $Q_s(x)$ ,  $s=1, \dots, T$  и ВП3  $Q_s(x)$ ,  $s=T+1, \dots, K$ , которые удовлетворяют условиям (7) с равными нулю правыми частями и дополнительным условиям:

$$\left. \frac{\partial^k Q(x')}{\partial n_{i(s)}^k} \right|_{x'=\eta'_{s'}} = \delta_{ss'}, \quad Q_s(\zeta'_{s''}) = \delta_{ss''}, \quad s'=1, \dots, T, \quad s''=T+1, \dots, K. \quad (9)$$

Здесь  $\eta'_{s'} = (\eta'_{s'_1}, \dots, \eta'_{s'_d})$  выбранные точки, лежащие на гранях всевозможных размерностей ( $d' = 1, \dots, d-1$ )  $d$ -мерного симплекса  $\Delta$  и не совпадающие с узловыми точками ИПЭ  $\xi'_r$ ,  $\partial^k / \partial n_{i(s)}^k$  определяет (в общем случае смешанные) производные по направлениям нормалей для соответствующей грани  $d$ -мерного симплекса  $\Delta_q$  в точке  $\eta'_{s'}$  в исходной  $x$ , а не в ло-

кальной  $x'$ , системе координат. Дополнительные условия (9) в выбранных точках  $\zeta'_{s'} = (\zeta'_{s'1}, \dots, \zeta'_{s'd}) \in \Delta$  необходимы для однозначного определения полиномиального базиса. Схематическое изображение реализации условий (7)–(9), с помощью которых построены базисные ИПЭ, показано при  $d=2$  на рис. 2а. ВП2 и ВП3 определяются из системы линейных уравнений.

Из критериев, обеспечивающих непрерывность кусочно–полиномиальных функций  $N_{\nu'}^{p'}(x)$  и их производных порядка  $\kappa'_{d'}$  в окрестности грани размерности  $d' = 1, \dots, d-1$ , с помощью приведённого в разделе 1.2.4. комбинаторного алгоритма, подсчитывающего числа полиномов различных размерностей и порядка, определяются число  $T$  условий для ВП2, принадлежность точек  $\eta'_{s'}$  и  $\zeta'_{s'}$  соответствующим граням размерности  $d' = 1, \dots, d-1$  и самому  $d$ -симплексу, и возможные значения  $k$ , в зависимости от размерности грани.

*Шаг 3.* Требуемый набор базисных ИПЭ  $\varphi_l^{p'}(x') = \{P_r^{\kappa p}(x'), Q_s(x')\}$ , составлен из ВП2 и ВП3 и полиномов  $P_r^{\kappa p}(x')$ :

$$P_r^{\kappa p}(x') = \tilde{\varphi}_r^{\kappa p}(x') - \sum_{s=1}^T \frac{\partial^k \tilde{\varphi}_r^{\kappa p}(x')}{\partial n_{i(s)}^k} \Big|_{x'=\eta'_s} Q_s(x') - \sum_{s=T+1}^K \tilde{\varphi}_r^{\kappa p}(\zeta_s) Q_s(x'). \quad (10)$$

ИПЭ в локальных координатах вычисляются в аналитическом виде с помощью Алгоритма 1.1, реализованного в системе Maple. Выражения для ИПЭ до  $p'=9$  порядка при  $d=2$  представлены в Приложении А.

*Шаг 4.* Построение ИПЭ в исходных координатах  $\varphi_l^{p'}(x)$  выполняется пересчётом ИПЭ  $\varphi_l^{p'}(x')$  с помощью преобразования координат  $x = A_q^{-1}x'$ .

Построенные ИПЭ порядка  $p'$  нескольких переменных на  $d$ -мерных симплексах  $\Delta$  определены из условий (7), (9) так, что соответствующие кусочно-полиномиальные функции  $N_{\nu'}^{p'}(x)$  сохраняют непрерывность производных по направлениям до порядка  $\kappa'_{d'}$  на гранях размерностями  $d' = 1, \dots, d-1$ , классифицируем мультииндексом  $[p\kappa_{\max}\kappa'_1 \dots \kappa'_{d-1}]$ . Характеристики полиномиального базиса из ИПЭ на элементе  $\Delta$  при  $d=2$  приведены в таблице 1. Пример кусочно-полиномиальных функций, построенных шивкой ИПЛ [510] и ИПЭ [131] пятого порядка представлен на рис. 1а,б. Из рис. 1б видно, что в случае ИПЭ изолинии являются гладкими кривыми, это и показывает непрерывность производных первого порядка.

Теоретические оценки погрешностей между точным  $E_m, \Psi_m(x) \in \mathcal{H}_2^2(\Omega)$ ,  $\Psi(x) \in \mathcal{H}_2^2(\Omega)$  из пространства Соболева и приближенным  $E_m^h, \Psi_m^h(x) \in \mathcal{H}_2^{\kappa'_{d-1}+1 \geq 1}(\Omega_h)$ ,  $\Psi^h(x) \in \mathcal{H}_2^{\kappa'_{d-1}+1 \geq 1}(\Omega_h)$  решениями следующие [10, 32]:

$$\|E_m - E_m^h\| \leq c_1 h^{2p'}, \|\Psi_m(x) - \Psi_m^h(x)\|_0 \leq c_2 h^{p'+1}, \|\Psi(x) - \Psi^h(x)\|_0 \leq c_3 h^{p'+1}, \quad (11)$$

где  $\|\Psi_m(x)\|_0^2 = \int_{\Omega} g_0(x) dx \overline{\Psi_m(x)} \Psi_m(x)$ ,  $h$  – максимальный размер конечно-го элемента  $\Delta_q$ ,  $p'$  – порядок схемы МКЭ,  $m$  – номер собственного значения,  $c_i$  – положительные коэффициенты, не зависящие от  $h$ .



Таблица 2: Число узлов  $d$ -мерных квадратурных формул порядка от  $p = 4$  до  $p = 8$ . Звёздочкой \* отмечены новые квадратурные формулы.

$d \setminus p$	4	5	6	7	8
3	14	14	24	35	46
4	20	30	56	76*	110*
5	27	37*	102*	137*	257*
6	43	64*	175*	266*	553*

В разделе 1.3 представлен новый символьно-численный алгоритм, реализованный в среде Maple–Fortran, построения полностью симметричных гауссовых квадратурных формул (ПСГКФ) с положительными весами и узлами внутри симплекса (positive inside (PI)-типа). Задача состоит в построении  $d$ -мерной квадратурной формулы порядка  $p$

$$\int_{\Delta} dx V(x) = \frac{1}{d!} \sum_{j=1}^a w_j \sum_{\text{perm}(y_{j0}, \dots, y_{jd})} V(x_{j1}, \dots, x_{jd}), \quad (12)$$

для интегрирования по  $d$ -мерному симплексу  $\Delta$ , где суммирование разбивается на суммирования по орбитам, т.е. по всем перестановкам барицентрических координат  $(y_{j0}, \dots, y_{jd})$ :  $x_j = y_{j0}\hat{x}_0 + \dots + y_{jd}\hat{x}_d$ ,  $y_{j0} + \dots + y_{jd} = 1$ . Подставляя в уравнение (12) вместо  $V(x)$  всевозможные мономы степени, не превосходящей  $p$ , и применяя теорему Виета, получаем систему нелинейных алгебраических уравнений, где неизвестными являются веса  $w_j$ ,  $j = 1, \dots, a$  и  $s_{ji}$ ,  $i = 2, \dots, d+1$ , – значения симметрических комбинаций  $s_j$  барицентрических координат  $y_j$  в узлах  $(y_{j0}, y_{j1}, \dots, y_{jd})$ .

ПСГКФ с положительными весами  $w_j$  такими, что никакие узлы не находятся за пределами симплекса, содержащие набор  $n_p$  узлов, построены Алгоритмом 1.3.1. Построение системы нелинейных алгебраических уравнений выполняется в системе Maple, время выполнения не более 5 минут. Шаг 1 Алгоритма 1.3.1 выполнялся с помощью программы на языке Fortran, реализующей минимизацию квадратичного функционала с условиями ограничения [45]. Расчеты проводились на гетерогенной платформе «HybriLIT» ЦИВК ОИЯИ, и время выполнения зависит от размерности  $d$ , порядка  $p$  квадратурной формулы и минимального числа  $n_p$  искомым узлов. На шаге 2 найденные с 8 значащими цифрами PI-типа приближения узлов и весов уточнялись до 48-х значащих цифр с помощью алгоритма Левенберга–Марквандта, реализованного в виде программы в системе Maple, время выполнения несколько секунд.

Работоспособность алгоритмов подтверждена вычислением ПСГКФ до восьмого порядка на симплексах с размерностью  $d = 3, \dots, 6$ , среди которых квадратуры на тетраэдре совпадают с [37], квадратура восьмого порядка на тетраэдре совпадает с [41], а квадратуры седьмого и восьмого порядков на 4-симплексе и с пятого по восьмой порядок на 5-симплексе и на 6-симплексе являются новыми (см. таблицу 2). Таблицы весов и узлов ПСГКФ приведены в тексте диссертации в Приложении Б и в работе [A5].

В разделе 1.4. эффективность и порядок точности вычислительных схем МКЭ, алгоритмов и программ подтверждена расчетами нижней части спектра эталонных краевых задач на собственные значения для треугольной мембраны, куба и гиперкуба, в зависимости от числа конечных элементов разбиения области и от размерности собственного вектора алгебраической задачи. Порядок точности вычислительных схем МКЭ, алгоритмов и реализующих их комплексов программ подтвержден согласием численных и теоретических оценок погрешности приближённых решений. Также построена схема МКЭ с треугольными лагранжевыми элементами для решения неоднородной краевой задачи, описывающей рассеяние квантовой частицы на аксиально-симметричном потенциале.

В разделе 1.4.1 решена эталонная задача Гельмгольца дискретного спектра (1), (2) при  $d=2$ ,  $g_0(x)=g_{ij}(x)=1$ , и  $V(x)=0$  в области  $\Omega_h(x)=\cup_{q=1}^Q \Delta_q$  в виде равностороннего треугольника со стороной  $4\pi/3$  с граничными условиями второго рода. Собственные значения этой задачи с вырожденным спектром – целые числа  $E_m=0, 1, 1, 3, 4, 4, 7, 7, \dots$ . На рис. 2б показаны погрешности  $\Delta E_m = E_m^h - E_m$  собственного значения  $E_4^h(x)$  в зависимости от длины  $N$  вектора  $\Psi_m^h$  алгебраической задачи на собственные значения (4) для схем МКЭ от пятого до девятого порядка точности, с ИПЛ  $[p\kappa_{\max}\kappa'_1]=[510], \dots, [910]$  и с ИПЭ, [131], [141], [231] и [152] из табл. 1.

Как видно из рис. 2б погрешности собственного значения  $\Delta E_4^h(x)$  схем МКЭ одного порядка  $p'=\kappa_{\max}(p+1)-1$  примерно одинаковые и соответствуют теоретическим оценкам (11), но в схемах МКЭ с ИПЭ, сохраняющих непрерывность первой и второй производных приближённого решения, используются матрицы меньшей размерности, соответствующие длине вектора  $N$  в 1,5–2 раза меньшей, чем для схем с ИПЛ, сохраняющих на границах конечных элементов только непрерывность приближённого решения. Этот факт доказывает большую экономичность схем, построенных из ИПЭ по сравнению с ИПЛ. Вычисления проводились на компьютере 2 x Xeon 3.2 GHz, 4 GB RAM, используя Intel Fortran компилятор с четверной точностью (real\*16, с 32 значащими цифрами). Время счёта рассмотренных примеров не превышает 3 минуты.

В разделе 1.4.2 построена схема МКЭ с треугольными лагранжевыми элементами решения краевой задачи, описывающей рассеяние квантовой частицы на аксиально-симметричном потенциале ( $d=3$ ) с приближёнными краевыми условиями третьего рода, учитывающие вклад порядка  $O((kr)^{-2})$  в решение асимптотической области, которые следуют из асимптотических краевых условий для рассеянной волны [A18]. Работоспособность и экономичность предложенной процедуры и схемы МКЭ подтверждена решением эталонных краевых задач. Результаты численного решения задачи рассеяние квантовой частицы на сферическом потенциальном барьере или яме согласуются с точным решением с точностью  $10^{-6}$  при сравнительно небольших значениях границы  $r_{\max} = 100$  редуцированной

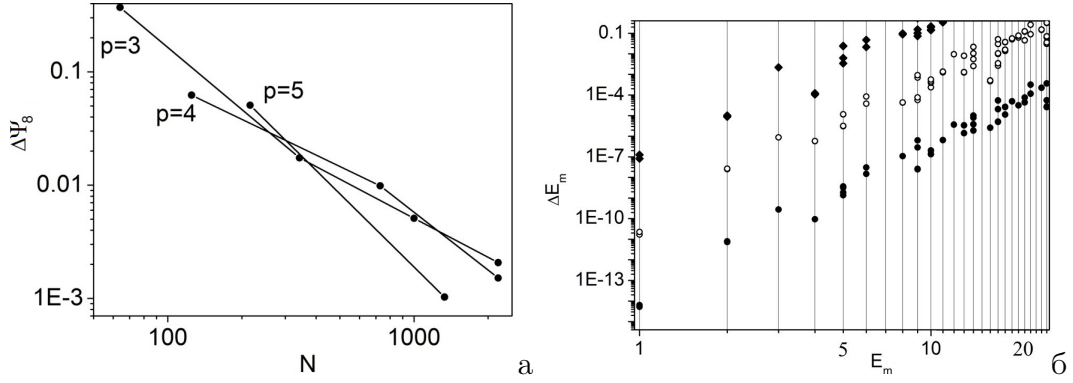


Рис. 3: а. Погрешность  $\Delta\Psi_8^{\max} = \max_{\Omega_x} |\Psi_8^h(x) - \Psi_8(x)|$  для восьмой собственной функции  $\Psi_8^h(x)$  МКЭ с ИПЛ порядков  $p=3, 4, 5$  в зависимости от числа  $N$  кусочно-полиномиальных базисных функций  $N_l^p(x)$ . б. Погрешность  $\Delta E_m = E_m^h - E_m$  МКЭ с ИПЛ шестого порядка  $p=6$  по сравнению с точным собственным значением  $E_m$ . Здесь куб разбит на 6 (квадраты),  $6 \cdot 2^3 = 48$  (светлые кружки) и  $6 \cdot 4^3 = 384$  (чёрные кружки) равных тетраэдров.

области по сравнению с  $r_{\max} = 500$  требуемого для достижения той же точности расчета без применения процедуры, т.е. существенно сокращает требуемые компьютерные ресурсы. Численное решение для задачи рассеяния квантовой частицы на несферическом барьере, имеющего форму полупрозрачного диска конечной толщины или ямы, согласуется с точностью  $10^{-5}$  с расчётами методом конечных разностей [46].

В разделе 1.4.3 представлен новый алгоритм разбиения  $d$ -мерного куба на  $d!$  симплексов, следуя теореме из [47], как часть разработанных комплексов программ решения МКЭ многомерных краевых задач.

В разделе 1.4.3.1 решена эталонная задача для нижней части спектра уравнения Гельмгольца в области в виде куба с граничными условиями второго рода с ИПЛ порядка  $p=3, 4, 5, 6$ . На рис. 3а показана погрешность  $\Delta\Psi_8^{\max}$  для восьмой собственной функции  $\Psi_8^h(x_1, x_2, x_3)$ , вычисленной МКЭ с ИПЛ порядков  $p=3, 4, 5$  в зависимости от числа  $N$  кусочно-полиномиальных базисных функций  $N_l^p(x)$ . На рис. 3б показана погрешность собственных значений трёхмерной краевой задачи для уравнения Гельмгольца при  $d=3$  с граничным условием второго рода с использованием схемы МКЭ с ИПЛ порядка  $p=6$ . Как видно из рис. 3, погрешности собственных функций и собственных значений лежат на параллельных линиях в двойном логарифмическом масштабе, что согласуется с теоретическими оценками погрешности (11) для собственных функций и собственных значений, зависящих от максимального размера конечного элемента. Для куба с ребром  $\pi$ , разделенным на  $6 \cdot 4^3 = 384$  равных тетраэдров, размерность матриц **A** и **B** составляла  $15625 \times 15625$ . Время выполнения расчета на сервере: 2x 8-ядерный Xeon E5-2667 v2 3,3 ГГц, 512

ГБ оперативной памяти, графический процессор Tesla 2075 – 20 минут.

В разделе 1.4.3.2 решена эталонная задача для нижней части спектра уравнения Гельмгольца в области в виде шестимерного гиперкуба с граничными условиями второго рода с ИПЛ третьего порядка. Гиперкуб с ребром длиной  $\pi$  был разделен на  $n=d!=6!=720$  симплексов, на каждом из которых использовались  $N_1(p)=(p+d)!/(d!p!)=84$  ИПЛ третьего порядка. Матрицы **A** и **B** имели размерность  $4096 \times 4096$ . Время выполнения расчета на том же сервере составило порядка 10 минут. Погрешности вычисленных второго, третьего и четвертого вырожденных собственных значений равны 0.0003, 0.05 и 0.15, соответственно. Применение схемы третьего порядка для решения задачи Гельмгольца для гиперкуба меньшей размерности  $d=3, 4, 5$  дало погрешности того же порядка. Выполненные расчеты показали возможность применения построенных алгоритмов, схем МКЭ и реализующих их комплексов программ для решения многомерных краевых задач при сравнительно небольших затратах компьютерного ресурса.

В главе 2 представлены проблемно-ориентированные комплексы алгоритмов и программ МКЭ и метода Канторовича для анализа математических моделей систем нескольких квантовых частиц: РОТНЕА и РОТНЕА 2.0 решения параметрических краевых задач для системы ОДУ второго порядка и двумерных эллиптических уравнений конечной области; KANTBP 2.0, KANTBP 3.0 и KANTBP 4.0 решения краевых задач для системы ОДУ второго порядка. Эффективность алгоритмов и программ продемонстрирована эталонными расчетами связанных, метастабильных состояний и состояний рассеяния для системы ОДУ с вещественными и комплексными потенциалами. Основные результаты опубликованы в [A6, A7, A8, A9, A10, A11, A12, A13, A14, A15, A16, A17].

В разделе 2.1 представлена схема решения многомерных эллиптических краевых задач методом Канторовича.

Понижение размерности краевой задачи (1), (2) реализуется разложением искомого решения  $\Psi(x, z) = \sum_{j=1}^N \Phi_j(x; z)\chi_j(z)$  по зависящим от одной из переменных  $z \in R^1$ , как от параметра, базисным функциям  $\Phi_j(x; z) \in \mathcal{F}_z \sim L_2(\Omega_x)$ ,  $x \in \Omega_x \subset R^{d-1}$  задачи на собственные значения

$$\left( -\frac{1}{g_0(x)} \sum_{i,j=1}^{d-1} \frac{\partial}{\partial x_i} g_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x_j} + U(x; z) - E_i(z) \right) \Phi_i(x; z) = 0, \quad (13)$$

со смешанными граничными условиями первого и второго рода на границе  $\partial\Omega_x$  области  $\Omega_x$ , следующими из условий (2). Здесь  $z \in \Omega_z = [z_{\min}, z_{\max}]$  – параметр, функции  $g_0(x) > 0$ ,  $g_{ij}(x) = g_{ji}(x)$ , и  $\partial_{x_i} g_{ij}(x)$ ,  $U(x; z)$  и производные  $\partial_z^k U(x; z)$  и  $\partial_z^k \Phi_i(x; z)$  по параметру  $z$  до заданного порядка непрерывны и ограничены в области  $x \in \bar{\Omega}_x = \Omega \cup \partial\Omega \subset \mathcal{R}^{d-1}$ . Предполагалось, что (13) имеет только дискретный вещественный спектр: искомый набор собственных значений  $E_1(z) \leq \dots \leq E_i(z) \leq \dots$  и соответствующих собственных

функций  $\Phi_i(x; z)$ , подчинённых условиям нормировки и ортогональности

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \int_{\Omega} g_0(x) \Phi_i(x; z) \Phi_j(x; z) dx = \delta_{ij}, \quad dx = dx_1 \dots dx_{d-1}.$$

В результате проецирования на базисные функции  $\Phi_j(x; z)$  краевая задача (1), (2) сводится к краевой задаче для системы ОДУ второго порядка

$$\left( -\frac{1}{f_B(z)} \mathbf{I} \frac{d}{dz} f_A(z) \frac{d}{dz} + \mathbf{W}(z) + \frac{f_A(z)}{f_B(z)} \mathbf{Q}(z) \frac{d}{dz} + \frac{1}{f_B(z)} \frac{d f_A(z) \mathbf{Q}(z)}{dz} - E \mathbf{I} \right) \mathbf{F}(z) = 0. \quad (14)$$

Здесь  $f_B(z) > 0$  и  $f_A(z) > 0$  – непрерывные и ограниченные функции вместе с производными на интервале  $z \in \Omega_z = \{z^{\min}, z^{\max}\}$ ,  $\mathbf{I}$  – единичная матрица,  $\mathbf{W}(z) = \mathbf{E}(z) + \mathbf{H}(z) + \Delta \mathbf{V}(z)$  – симметричная матрица,  $(\Delta V)_{ij}(z) = (\Delta V)_{ji}(z)$ ,  $H_{ij}(z) = H_{ji}(z)$ ,  $\mathbf{E}(z)$  – диагональная матрица,  $E_{ij}(z) = E_i(z) \delta_{ij}$ , и  $\mathbf{Q}(z)$  – антисимметричная матрица,  $Q_{ij}(z) = -Q_{ji}(z)$ , эффективных потенциалов размерностью  $N \times N$ ,

$$Q_{ij}(z) = - \int_{\Omega} g_0(x) dx \Phi_i(x; z) \frac{d \Phi_j(x; z)}{dz}, \quad H_{ij}(z) = \int_{\Omega} g_0(x) dx \frac{d \Phi_j(x; z)}{dz} \frac{d \Phi_i(x; z)}{dz}, \quad (15)$$

$$(\Delta V)_{ij}(z) = \int_{\Omega} g_0(x) dx \Phi_i(x; z) (V(x; z) - U(x; z)) \Phi_j(x; z).$$

Элементы этих матриц непрерывные или кусочно–непрерывные вещественные функции  $Q_{ij}(z)$  и  $H_{ij}(z)$ , а  $(\Delta V)_{ij}(z)$  вещественные или комплексные функции [48], непрерывные вместе со своими обобщёнными производными до заданного порядка на интервале  $z \in \Omega_z = \{z^{\min}, z^{\max}\}$ , обеспечивающие существование нетривиальных решений  $\mathbf{F}(z)$  (вектор-функции размерности  $N$ ), подчинённых граничным условиям первого (I), второго (II) или третьего (III) рода в граничных точках интервала  $z^{\min}$  и  $z^{\max}$  с вещественной или комплексной матрицей  $\mathbf{G}(z^t) = \mathcal{R}(z^t) - \mathbf{Q}(z^t)$  размерностью  $N \times N$

$$(I) : \quad \mathbf{F}(z^t) = 0, \quad t = \min \text{ и/или } \max, \quad (16)$$

$$(II) : \quad f_A(z) \left( \frac{d}{dz} - \mathbf{Q}(z) \right) \mathbf{F}(z) \Big|_{z=z^t} = 0, \quad t = \min \text{ и/или } \max, \quad (17)$$

$$(III) : \quad \left( \frac{d}{dz} - \mathbf{Q}(z) \right) \mathbf{F}(z) \Big|_{z=z^t} = \mathbf{G}(z^t) \mathbf{F}(z^t), \quad t = \min \text{ и/или } \max. \quad (18)$$

В разделе 2.2 предложены новые вычислительные схемы и алгоритмы МКЭ, реализованные в виде комплексов программ для решения параметрических двумерных эллиптических краевых задач и вычисления производных по параметру от собственных значений и собственных функций и матричных элементов эффективных потенциалов системы ОДУ второго порядка из раздела 2.1 с кратким описанием и примерами решения точно решаемых эталонных задач [A14].

Для вычисления производных  $k$ -того порядка  $\partial_z^k \Phi_i^h(x; z)$  и  $\partial_z^k E_i^h(z)$  по параметру  $z$  от собственных функций  $\Phi_i^h(x; z)$  и собственных значений

$E_i^h(z)$  предложен и реализован новый алгоритм решения неоднородной алгебраической задачи, полученной  $k$ -кратным дифференцированием по параметру  $z$  задачи (13) и алгебраической задачи на собственные значения  $(\mathbf{A}(z) - \mathbf{B}E_i^h(z))\Phi_i^h(z) = 0$ , полученной при её дискретизации МКЭ. Вычислительными экспериментами доказано, что численные значения производных по параметру от собственных функций  $\partial_z^k \Phi_i^h(x; z)$  и собственных значений  $\partial_z^k E_i^h(z)$  задачи (13), а также матричных элементов  $Q_{ij}^h(z)$  и  $H_{ij}^h(z)$  (15) системы ОДУ (14) и их производных  $\partial_z^k Q_{ij}^h(z)$  и  $\partial_z^k H_{ij}^h(z)$  при  $k = 1, \dots, k_{\max}$ ,  $k_{\max} \geq 1$ , вычисляются с погрешностью того же порядка (11), что и собственные функции  $\Phi_i^h(x; z)$  и собственные значения  $E_i^h(z)$ , соответственно.

Алгоритмы реализованы на языке Fortran в виде комплексов программ ROTHEA и ROTHEA 2.0, которые вычисляют с заданной точностью набор  $i = 1, \dots, N$  собственных значений  $E_i(z)$  и собственных функций  $\Phi_i(x_1, x_2; z)$  параметрической задачи (13) в двумерной ( $d - 1 = 2$ ) конечной области  $\Omega_x$ , их первые производные по параметру  $\partial_z E_i(z)$ ,  $\partial_z \Phi_i(x_1, x_2; z)$  и матричные элементы  $Q_{ij}(z)$  и  $H_{ij}(z)$  эффективных потенциалов (15) в системе ОДУ (14). В программе ROTHEA использовано разложение искомого решения по базисным функциям по одной из двух переменных, приводящее к решению МКЭ системы ОДУ второго порядка, а в программе ROTHEA 2.0 для решения двумерной задачи использовалась более экономичная схема МКЭ с треугольными лагранжевыми элементами.

В разделе 2.3 представлены алгоритмы, реализованные в виде комплексов программ KANTBP 2.0, KANTBP 3.0 и KANTBP 4.0 на языке Fortran, для решения с заданной точностью краевых задач (14)–(18) для системы ОДУ второго порядка с кратким описанием и примерами решения точно-решаемых и эталонных задач.

1. Для многоканальной задачи рассеяния на оси  $z \in (-\infty, +\infty)$  при фиксированном значении энергии  $E$  вычисляется искомая матрица решений  $\mathbf{F}(z) \equiv \{\mathbf{F}_v^{(i)}(z)\}_{i=1}^N$ ,  $\mathbf{F}_v^{(i)}(z) = (F_{1v}^{(i)}(z), \dots, F_{Nv}^{(i)}(z))^T \in \mathcal{H}_2^2(\Omega_z)$  (индекс  $v$  принимает значения  $\rightarrow$  или  $\leftarrow$  и обозначает начальное направление падающей волны) краевой задачи для системы  $N$  ОДУ (14) на интервале  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ , удовлетворяющих граничным условиям третьего рода (18) в граничных точках интервала  $z \in \Omega_z = \{z^{\min}, z^{\max}\}$ , с асимптотикой в виде “падающая волна + уходящие волны” в открытых каналах  $i_o = 1, \dots, N_o$ :

$$\mathbf{F}_v(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \begin{cases} \mathbf{X}^{(+)}(z)\mathbf{T}_v, & z \in [z^{\max}, +\infty), \\ \mathbf{X}^{(+)}(z) + \mathbf{X}^{(-)}(z)\mathbf{R}_v, & z \in (-\infty, z^{\min}], \end{cases} & v = \rightarrow, \\ \begin{cases} \mathbf{X}^{(-)}(z) + \mathbf{X}^{(+)}(z)\mathbf{R}_v, & z \in [z^{\max}, +\infty), \\ \mathbf{X}^{(-)}(z)\mathbf{T}_v, & z \in (-\infty, z^{\min}], \end{cases} & v = \leftarrow, \end{cases} \quad (19)$$

где  $X^{(\pm)}(z)$  – ведущие члены асимптотических фундаментальных решений краевой задачи,  $\mathbf{T}_v$  и  $\mathbf{R}_v$ , соответственно, неизвестные прямоугольные и квадратные матрицы амплитуд прохождения и отражения. При этом

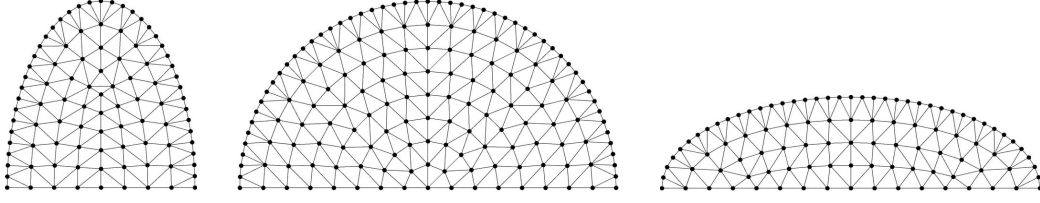


Рис. 4: Треугольная сетка в виде многоугольника с ребрами  $n=52$  для единичной сферы  $R_1=1$  (средняя панель), сплюснутого ( $a=1$ ,  $c=0.5$ , левая панель) и вытянутого ( $a=0.5$ ,  $c=1$ , правая панель) сфероида  $\rho^2/a^2+z^2/c^2=1$ . Ось  $z$  направлена по оси абсцисс, а ось  $\rho$  направлена по оси ординат.

вычисляется искомая матрица рассеяния  $\mathbf{S}$  размерностью  $N_o \times N_o$ :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\rightarrow} & \mathbf{T}_{\leftarrow} \\ \mathbf{T}_{\rightarrow} & \mathbf{R}_{\leftarrow} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}\mathbf{S}^\dagger = \mathbf{S}^\dagger\mathbf{S} = \mathbf{I}, \quad (20)$$

унитарность и симметричность которой для вещественных эффективных потенциалов следует из условия сохранения тока вероятности, т.е. вронскиана с удлинённой производной. Условие сохранения вронскиана используется для проверки точности асимптотических разложений решений.

2. Для задачи на связанные состояния вычисляется набор  $M$  вещественных собственных значений энергии  $E$ :  $\Re E_1 \leq \Re E_2 \leq \dots \leq \Re E_M$  и соответствующий набор собственных функций  $\mathbf{F}(z) \equiv \{\mathbf{F}^{(m)}(z)\}_{m=1}^M$ ,  $\mathbf{F}^{(m)}(z) = (F_1^{(m)}(z), \dots, F_N^{(m)}(z))^T$  в пространстве  $\mathcal{H}_2^2(\Omega_z)$  для системы  $N$  ОДУ (14), удовлетворяющих граничному условию первого, второго, или третьего рода (см. (16)–(18)), в граничных точках интервала  $z \in \{z^{\min}, z^{\max}\}$  и условию нормировки и ортогональности на конечном интервале.

3. Для расчёта метастабильных состояний вычисляется набор  $M$  комплексных собственных значений энергии  $E$ :  $E \equiv E_m = \Re E_m + i\Im E_m$ ,  $\Im E_m < 0$ ,  $\Re E_1 \leq \Re E_2 \leq \dots \leq \Re E_M$  и соответствующий набор собственных функций  $\mathbf{F}(z) \equiv \{\mathbf{F}^{(m)}(z)\}_{m=1}^M$ ,  $\mathbf{F}^{(m)}(z) = (F_1^{(m)}(z), \dots, F_N^{(m)}(z))^T$  в пространстве  $\mathcal{H}_2^2(\Omega_z)$  для системы  $N$  ОДУ (14), подчиненные граничному условию третьего рода (18), в граничных точках интервала  $z \in \{z^{\min}, z^{\max}\}$ , где матрицы  $\mathcal{R}(\xi_0^t)$  зависят от искомого комплексного собственного значения энергии  $E_m$ , и условию нормировки и ортогональности на конечном интервале [2]. В противоположность задаче рассеяния, асимптотические решения для метастабильных состояний содержат только уходящие волны в открытых каналах, которые рассматриваются на достаточно большом, но конечном интервале изменения пространственной переменной. Расчёт комплексных собственных значений и собственных функций метастабильных состояний выполнялся итерационным методом ньютоновского типа.

В главе 3 вычислительные схемы, символично-численные алгоритмы и программы, разработанные в главах 1 и 2, тестируются решени-

Таблица 3: Первые три собственных значения  $\mathcal{E}_t(n_b, l_{\min})$  в единицах  $E_R$  для сплюснутой сфероидальной квантовой точки с полуосями  $a=2.5$ ,  $c=0.5$ , полученные на сгущающихся сетках МКЭ с треугольными ИПЛ 4 порядка с максимальным размером элемента  $l_{\min}$ . Число  $n_b$  определяет длину полигональной границы, аппроксимирующей границу сфероидальной квантовой точки. МК – метод Канторовича с 60 базисными функциями из [A21]. СФ – МКЭ с треугольными ИПЛ 4 порядка в сфероидальных координатах на неравномерной сетке в прямоугольной области  $0 < \xi_0 < c/\sqrt{a^2-c^2}=1/2\sqrt{6}$ ,  $0 \leq \eta \leq 1$ .

$l_{\min}$	0.0625	0.125	0.03125	0.0625	МК	СФ
$n_b$	0.03125	0.03125	0.015625	0.015625		
1	12.76518	12.76516	12.76490	12.76490	12.764809	12.77105
2	20.04147	20.04143	20.04086	20.04085	20.040651	20.04933
3	29.74910	29.74902	29.74780	29.74779	29.747387	29.75713

ем эталонных краевых задач дискретного спектра, описывающих нерелятивистский атом гелия, и спектральные и оптические характеристики электронных и экситонных состояний аксиально-симметричных полупроводниковых квантовых точек, и квадрупольные колебания в коллективной модели атомного ядра. Основные результаты опубликованы в [A15, A18, A19, A20, A21, A22, A23].

В разделе 3.1 представлены и сравниваются между собой нерелятивистские расчёты связанных состояний атома гелия в приближении бесконечной массы ядра. Расчёты проводились редукцией задачи (1), (2) при  $d=3$  с краевыми условиями второго рода методом Канторовича в гиперсферических и в гиперсфероидальных координатах. Решение с заданной точностью параметрической задачи (13), (2) при  $d=2$  и вычисление эффективных потенциалов системы ОДУ (14) выполнялось, с помощью как ROTHEA, так и ROTHEA 2.0, а краевой задачи для системы ОДУ (14) с помощью KANTWR 2.0, на неравномерных сетках. В результате лучшая верхняя оценка энергии основного состояния атома гелия  $E_1 = -2.90372430$  а.е. с 8 значащими цифрами получена с помощью программы ROTHEA 2.0, реализующей более экономичную схему МКЭ с треугольными лагранжевыми элементами в гиперсфероидальных координатах.

В разделе 3.2 дан анализ собственных значений энергии и собственных функций нижней части дискретного спектра и коэффициента фотоабсорбции аксиально-симметричных полупроводниковых квантовых точек [A15, A20, A21, A22]. Представлены новые схемы МКЭ на неструктурированных сетках с треугольными элементами для решения трёхмерных краевых задач, редуцированных к (1), (2) при  $d = 2$  с условиями первого рода на границе, описывающих аксиально-симметричные квантовые точ-



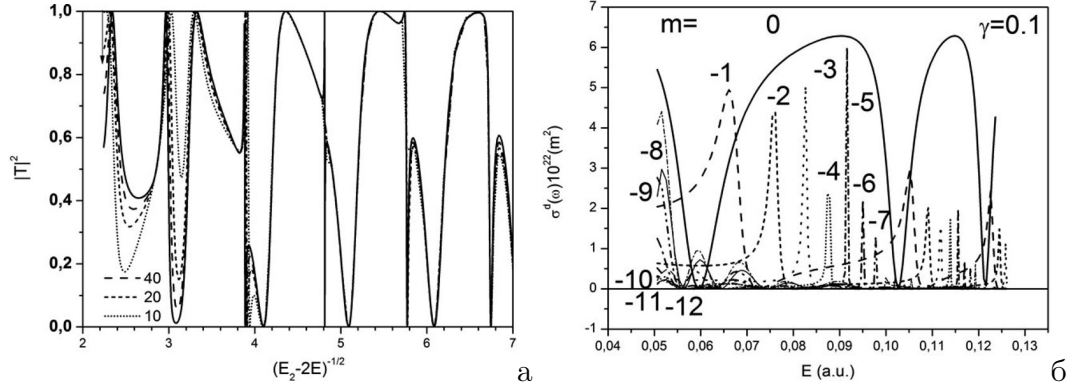


Рис. 5: а. Зависимость коэффициента прохождения  $|T|^2 \equiv |\mathbf{T}_{11}^2|$  от  $(E_2 - 2E)^{-1/2}$  для 10, 20, 40 базисных функций в цилиндрических координатах (пунктирные линии) и для 10 базисных функций в сферических координатах (сплошная линия) при  $m=0$ ; стрелка указывает на энергию первого порога Ландау  $(E_2 - E_1)^{-1/2} = \sqrt{5} \approx 2.236$ . б. Парциальные сечения ударной фотоионизации  $\sigma_m^d(E)$  из нижних состояний атома водорода  $|j=1, k=1, m, \sigma=+1\rangle$  в состояния непрерывного спектра  $|E, m\rangle$  в зависимости от энергии  $E$  (а.е.) вылетевшего электрона при различных значениях магнитного числа  $m=0, -1, \dots, -12$ .

ки. Эталонные расчёты уравнения Гельмгольца при значении магнитного числа  $m = 0$  для сплюснутых и вытянутых сфероидальных квантовых точек были выполнены на конечноэлементных сетках, представленных на рис. 4. Сходимость по числу конечных элементов и базисных функций в цилиндрических координатах, а также сравнение с результатами метода Канторовича в сфероидальных координатах даны в таблице 3. Как видно из таблицы 3, результаты совпадают с пятью значащими цифрами, а максимальный вклад в погрешность в цилиндрических координатах связан с погрешностью аппроксимацией изогнутой границы области отрезками прямых линий – границами треугольных конечных элементов. Эффективность алгоритмов и программного обеспечения показана результатами расчетов энергетических спектров, собственных функций электронных, дырочных и экситонных состояний в конических и сфероидальных непроницаемых квантовых точках. Выявленное различное резонансное поведение коэффициентов фотоабсорбции прямого межзонного поглощения электромагнитного излучения в ансамбле GaAs невзаимодействующих сплюснутых и вытянутых сфероидальных квантовых точек со случайным распределением Лифшица–Слэзова размера малой полуоси допускает их верификацию по экспериментальным данным.

В разделе 3.3 исследованы вибрационный спектр энергии и собственные функции двумерной  $d=2$  задачи (1), (2) с функцией потенциальной энергии нелинейного осциллятора, аппроксимирующей самосогла-

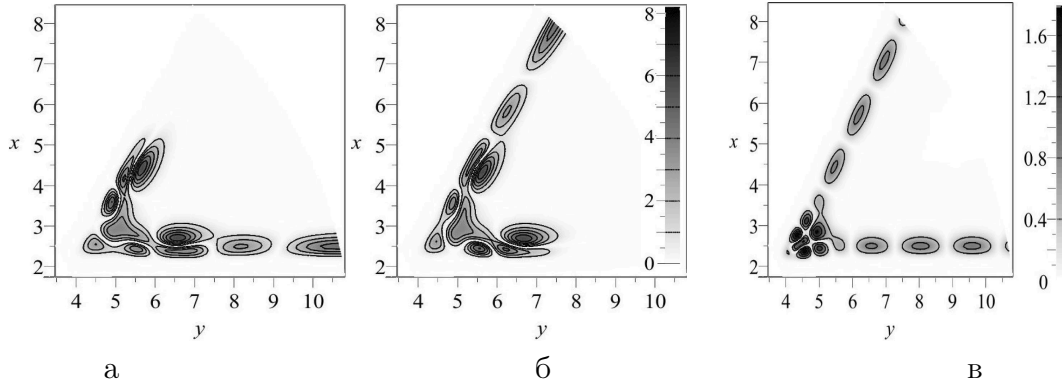


Рис. 6: а,б. Изолинии абсолютной величины волновой функции  $|\Psi^{\gamma,\beta}(\varphi, \rho)|$  в плоскости конфигурационного пространства ( $y = \rho \cos \varphi, x = \rho \sin \varphi$ ) (в  $\text{\AA}$ ), описывающей процесс резонансного упругого рассеяния атома на димере в основном состоянии, коэффициент прохождения  $|\mathbf{T}|_{11}^2 = 10^{-7}$  при энергии столкновения  $E = -1026.6\text{К}$ , отсчитанной от трёхчастичного порога. в. Изолинии  $|\Psi(\varphi, \rho)|$  метастабильного состояния (фешбаховского резонанса) тримера бериллия с комплексной энергией  $E_1^M = -1022.6 - 0.2i$  К.

сованную коллективную модель атомного ядра [7]. Работоспособность алгоритмов и программ, реализующих МКЭ с квадратными и треугольными конечными элементами и метода редукции Канторовича к системе ОДУ (14), подтверждена сравнительным анализом точности расчётов нижней части вырожденного спектра энергии, которые совпадают с абсолютной точностью порядка  $10^{-8} - 10^{-5}$  МэВ.

В главе 4 дан анализ динамических характеристик процессов резонансного рассеяния в квантовых системах нескольких частиц. Работоспособность вычислительных схем, алгоритмов и программного обеспечения, разработанного в главах 1 и 2, подтверждена решением краевых задач, описывающих физически интересные конфигурации и резонансные процессы и эффекты, возможные в квантовой системе нескольких частиц. Основные результаты опубликованы в [A24, A25, A26, A27, A28, A29, A30, A31, A32, A33, A34, A35].

В разделе 4.1 методом Канторовича и МКЭ дан сравнительный анализ результатов решения задачи (1), (2) при  $d = 3$  в цилиндрической и сферической системах координат, описывающей кулоновское рассеяние иона в однородном магнитном поле, и процесса фотоионизации атома водорода. Резонансное поведение коэффициента прохождения  $|\mathbf{T}|_{11}^2$  при значении магнитного квантового числа  $m = 0$  и парциальных сечений фотоионизации  $\sigma_m^d(E)$  атома водорода при значениях  $|m| < 12$  в зависимости от энергии показаны на рис. 5. Такое поведение формируется серией метастабильных состояний, погруженных в непрерывный спектр, за счет связи каналов в интервале значений  $|m| < 12$  при напряжённости магнитного поля  $\gamma = 0.1$ .

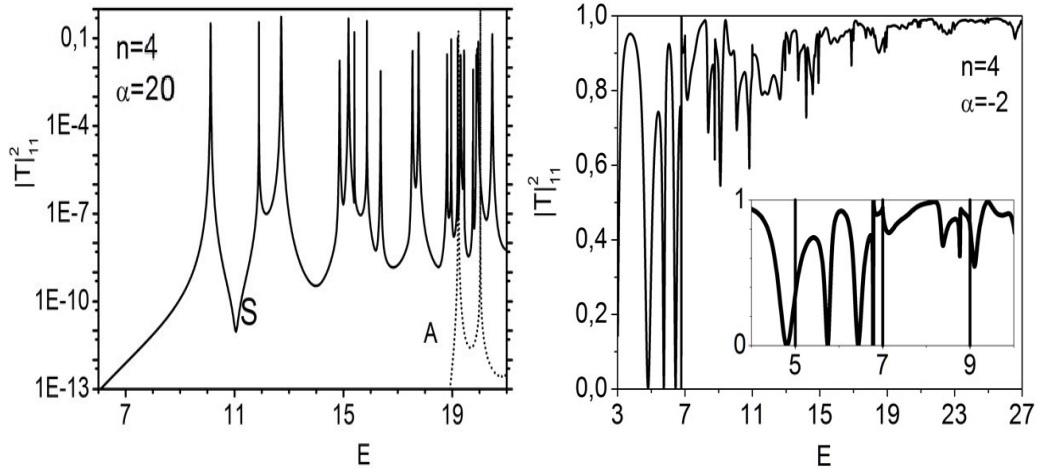


Рис. 7: Резонансные зависимости полной вероятности  $|\mathbf{T}|_{11}^2$  прохождения через потенциальный гауссовый барьер  $\alpha=20$  или потенциальную гауссовую яму  $\alpha=-2$  при  $\sigma=1/10$  от энергии  $E$  (в осц. ед.) кластера из четырёх ( $n=4$ ) тождественных частиц в основном симметричном (сплошные линии) и антисимметричном (пунктирные линии) состоянии.

При значениях магнитного квантового числа  $|m| \gtrsim 12$  связь каналов исчезает, что приводит к резкому уменьшению парциального сечения фотоионизации атома. При значениях параметра  $(\omega_\rho/\omega_{z,i=1})^{4/3} = |m|\gamma^{1/3} \gtrsim 6$ , где  $\omega_\rho = \gamma/2$  и  $\omega_{z,i=1}$  – поперечная и продольная частота трехмерного осциллятора, имеет место адиабатическое разделение поперечной и продольной переменных волновой функции [49]. Это соотношение задает границу интервала значений  $|m| \gtrsim 6\gamma^{-1/3}$  магнитного числа  $m$ , определяющего исчезающее парциальное сечение фотоионизации атома водорода при заданном величине напряжённости магнитного поля  $\gamma = H/H_0$   $H_0 = 2.35 \cdot 10^4$  Тл, необходимого для интерпретации экспериментальных данных при лабораторных значениях магнитного поля  $H = 6.1$  Тл,  $\gamma = 2.59574 \cdot 10^{-5}$  [50].

В разделе 4.2 изучено рассеяние двухатомной молекулы на потенциальном барьере или на атоме [A28, A33]. Построены математические модели тримера идентичных атомов с парными молекулярными взаимодействиями в коллинеарной конфигурации и рассеяния атомного димера на атоме или туннелирования через потенциальный барьер. Эти модели сформулированы как двумерные ( $d=2$ ) краевые задачи (1), (2) в якобиевых и полярных координатах.

Для редукции краевой задачи на конечный интервал в рамках метода Канторовича разработаны новые символьно-численные Алгоритмы 4.2.3, 4.2.4 и 4.2.5 для построения асимптотических состояний задачи рассеяния: вычисления асимптотических разложений при больших значениях радиальной переменной параметрических базисных функций, их производных

Таблица 4: Наборы резонансных значений энергии  $E_l^S$ , соответствующих максимумам коэффициента прохождения  $|\mathbf{T}|_{11}^2$ , собственных значений энергий  $E_m^M$  метастабильных состояний и их аппроксимаций  $E_l^{Dk(n-k)}$  ( $k$  – число частиц, расположенных по одну сторону от барьера) для симметричных  $S$  состояний  $n = 3, 4, 5$  частиц при  $\sigma = 1/10$ ,  $\alpha = 20$  (в осц. ед.).

$n$	$E_l^S$	$ \mathbf{T} _{11}^2$	$E_m^M$	$E_l^{D21}$	
3	8.175	0.775	$8.175 - i5.1(-3)$	8.19	
	8.306	0.737	$8.306 - i5.0(-3)$		
3	11.111	0.495	$11.110 - i5.6(-3)$	11.09	
	11.229	0.476	$11.229 - i5.5(-3)$		
3	12.598	0.013	$12.598 - i6.4(-3)$	12.51	
			$12.599 - i6.3(-3)$		
	$E_l^S$	$ \mathbf{T} _{11}^2$	$E_m^M$	$E_l^{D31}$	$E_l^{D22}$
4	10.121	0.321	$10.119 - i4.0(-3)$	10.03	
			$10.123 - i4.0(-3)$		
4	11.896	0.349	$11.896 - i6.3(-5)$		11.76
4	12.713	0.538	$12.710 - i4.5(-3)$	12.60	
			$12.717$		
	$E_l^S$	$ \mathbf{T} _{11}^2$	$E_m^M$	$E_l^{D41}$	$E_l^{D32}$
5	11.794	1.6(-4)	$11.794 - i1.3(-3)$	11.61	
			$11.794 - i1.3(-3)$		
5	14.166	0.014	$14.166 - i1.1(-3)$	13.94	
			$14.166 - i1.1(-3)$		
5	14.764	0.666	$14.764 - i6.6(-6)$		14.42
			14.774		

по параметру и матричных элементов (15) для кластерных состояний и псевдосостояний, соответствующих дискретному и непрерывному спектру задачи на собственные значения с потенциалом парного взаимодействия по относительной якобиевской координате, а также асимптотических разложений фундаментальных решений системы ОДУ (14).

Для этих моделей были вычислены комплексные собственные значения энергии  $E_m = \Re(E_m) + i\Im(E_m)$  метастабильных состояний. В результате решения задачи рассеяния получены резонансные зависимости от энергии коэффициентов прохождения и отражения. Положения пиков коэффициентов прохождения барьера и их геометрическая полуширина соответствует вещественной  $\Re(E_m)$  и мнимой  $\Gamma_m = -2\Im(E_m)$  части энергии метастабильных состояний. Показано, что при туннелировании атомного димера через барьер имеют место и резонансы формы и резонансы Фешбаха, а при рассеянии димера на атоме имеют место резонансы Фешбаха. На рис. 6 показаны первое из 16 метастабильных состояний тримера бериллия, ответственного за эффект полного отражения при рассеянии атома на димере в основном состоянии, а также волновые функции задачи рассеяния при резонансной энергии  $E$ , для которой достигается первый минимум вероятности неупругого рассеяния.

В разделе 4.3 представлен анализ процессов туннелирования или прохождения кластера на оси, из  $n$  тождественных квантовых частиц, через потенциальные барьеры или ямы [A26, A29, A30, A34, A35]. Представлен метод решения задачи (1), (2), описывающей в осцилляторном представлении квантовое туннелирование или прохождение кластера, состоящего из  $n$  тождественных частиц с координатами  $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{R}^n$  конфигу-

рационального евклидова пространства  $\mathcal{R}^{d=n}$  и парными взаимодействиями  $V(|x_i - x_j|)$  осцилляторного типа, через гауссовы потенциальные барьеры или ямы  $V(x_i) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp(-\frac{x_i^2}{\sigma^2})$ . Предложены новые симметризованные координаты, упрощающие построение базисных функций  $\Phi(\xi_1, \dots, \xi_{n-1})$  симметричных или антисимметричных относительно перестановок тождественных частиц. В результате усреднения по базисным функциям  $\Phi(\xi_1, \dots, \xi_{n-1})$  симметричным (S) или антисимметричным (A) относительно перестановок тождественных частиц,  $n$ -мерная краевая задача сведена к многоканальной задаче рассеяния или к задаче вычисления метастабильных состояний для системы ОДУ (14) по координате центра масс кластера  $\xi_0$ . Работоспособность предложенного подхода подтверждена расчетами и анализом комплексных значений энергии метастабильных состояний составных систем из трёх, четырёх или пяти тождественных частиц на прямой ( $d=n=3, 4, 5$ ), приводящих к эффекту квантовой прозрачности потенциальных барьеров, или эффекту резонансного отражения от потенциальных ям. Результаты расчетов при  $n=4$  представлены на рис. 7, резонансные значения энергии  $E_l^S$ , соответствующие максимальные значения коэффициента прохождения  $|\mathbf{T}|_{11}^2$  кластера в основном симметричном состоянии, и энергии метастабильных состояний  $E_m^M$  при  $n=3, 4, 5$  приведены в таблице 4. Построена новая классификация метастабильных состояний кластера из  $n$  тождественных частиц на оси в пределе бесконечно высокого и узкого барьера.

В **Заключении** сформулированы основные результаты диссертации.

#### Основные публикации по теме диссертации

- A1. *Gusev A. A.* Метод конечных элементов высокого порядка точности решения краевых задач для эллиптического уравнения в частных производных // Вестник РУДН. Серия «Математика, Информатика, Физика». — 2017. — Т. 25. — № 3. — С. 217–233.
- A2. *Gusev A. A., Gerdt V. P., Chuluunbaatar O., Chuluunbaatar G., Vinitzky S. I., Derbov V. L., Gózdź A.*, Symbolic–numerical algorithm for generating interpolation multivariate Hermite polynomials of high–accuracy finite element method // Lecture Notes in Computer Science — 2017. — 10490. — P. 134–150.
- A3. *Gusev A. A., Vinitzky S. I., Chuluunbaatar O., Chuluunbaatar G., Gerdt V. P., Derbov V. L., Gózdź A., Krassovitskiy P. M.* High–Accuracy Finite Element Method: Benchmark Calculations // European Physics Journal – Web of Conferences. — 2018. — Vol. 173. — 03010–1–4.
- A4. *Gusev A. A., Vinitzky S. I., Chuluunbaatar O., Chuluunbaatar G., Gerdt V. P., Derbov V. L., Gózdź A., Krassovitskiy P. M.* Interpolation Hermite Polynomials For Finite Element Method // European Physics Journal – Web of Conferences. — 2018. — Vol. 173. — 03009–1–4.
- A5. *Gusev A. A., Gerdt V. P., Chuluunbaatar O., Chuluunbaatar G., Vinitzky S. I., Derbov V. L., Gózdź A., Krassovitskiy P. M.*

- Symbolic–numerical algorithms for solving elliptic boundary–value problems using multivariate simplex lagrange elements // Lecture Notes in Computer Science. — 2018. — Vol. 11077. — P. 197–213.
- A6. *Виницкий С.И., Гердт В.П., Гусев А.А., Касчиев М.С., Ростовцев В.А., Самойлов В.Н., Тюпикова Т.В., Чулуунбаатар О.* Символьно-численный алгоритм вычисления матричных элементов параметрической задачи на собственные значения // Программирование. — 2007. — Т. 33. — № 2. — С. 63–76.
- A7. *Gusev A. A.* The algorithms of the numerical solution to the parametric two–dimensional boundary–value problem and calculation derivative of solution with respect to the parameter and matrix elements by the finite–element method // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2013. — № 4. — С. 101–121.
- A8. *Gusev A. A.* Algorithm for computing wave functions, reflection and transmission matrices of the multichannel scattering problem in the adiabatic representation using the finite element method // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2014. — № 2.— С. 93–114.
- A9. *Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Vinitzky S. I., Abrashkevich A. G.* KANTBP 2.0: New version of a program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled–channel hyperspherical adiabatic approach // Comput. Phys. Commun. — 2008. — Vol. 179. — P. 685–693; [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH\\_v2\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH_v2_0.html).
- A11. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Gózdź A.* Algorithms for solving the parametric self-adjoint 2d elliptic boundary-value problem using high-accuracy finite element method // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: математика, информатика, физика 2017. — Т. 25 — С. 36–55.
- A10. *Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S. I., Abrashkevich A. G.* POTHEA: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed 2D elliptic partial differential equation // Computer Physics Communications — 2014. — Vol. 185. — № 10. — P. 2636–2654; [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AESX\\_v1\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AESX_v1_0.html).
- A12. *Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S. I., Abrashkevich A. G.* KANTBP 3.0: New version of a program for computing energy levels, reflection and transmission matrices, and corresponding wave functions in the coupled–channel adiabatic approach // Вестник РУДН Сер. Математика. Информатика. Физика — 2014. — № 2. — 342–349.
- A13. *Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S. I., Abrashkevich A. G.* KANTBP 3.0: new version of a program for computing energy levels, reflection and transmission matrices, and corresponding wave

- functions in the coupled-channel adiabatic approach // *Computer Physics Communications*. — 2014. — Т. 185. — Р. 3341–3343; [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH\\_v3\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH_v3_0.html).
- A14. *Gusev A. A., Gerdt V. P., Chuluunbaatar O., Chuluunbaatar G., Vinitzky S. I., Derbov V. L., Gózdź A.* Symbolic-numeric algorithms for solving the parametric self-adjoint 2D elliptic boundary-value problem using high-accuracy finite element method // *Lecture Notes in Computer Science* — 2017. — Vol. 10490. — Р. 151–166.
- A15. Дербов В.Л., Серов В.В., Виницкий С.И., Гусев А.А., Чулуунбаатар О., Казарян Э.М., Саркисян А.А., О решении низкоразмерных краевых задач квантовой механики методом Канторовича - приведение к обыкновенным дифференциальным уравнениям // *Известия Саратовского университета: Серия Физика*. — 2010 — Т. 10 — С. 4–17.
- A16. *Gusev A. A., Hai L. L., Chuluunbaatar O., Ulziibayar V., Vinitzky S. I., Derbov V. L., Gózdź A., Rostovtsev V. A.* Symbolic-numeric solution of boundary-value problems for the Schrodinger equation using the finite element method: scattering problem and resonance states // *Lecture Notes in Computer Science*. — 2015. — Vol. 9301. — Р. 182–197.
- A17. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Hai L.L., Derbov V.L., Gózdź A.* Algorithms and programs for solving boundary-value problems for systems of second-order odes with piecewise constant potentials: multichannel scattering and eigenvalue problems // *Вестник РУДН: Серия Математика. Информатика. Физика*. — 2016. — N 3, Р. 38–52.
- A18. *Chuluunbaatar O., Vinitzky S. I., Gusev A. A., Derbov V. L., Krassovitskiy P. M.* Solution of quantum mechanical problems using finite element method and parametric basis functions // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. — 2018. — Vol. 82. — 6. — Р. 654–660.
- A19. *Vinitzky S. I., Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Derbov V. L., Zotkina, A. S.* On calculations of two-electron atoms in spheroidal coordinates mapping on hypersphere // *Proceedings of SPIE*. — 2016. — Vol. 9917. — Р. 99172Z.
- A20. *Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S. I., Derbov V. L., Hai L. L., Kazaryan E. M., Sarkisyan H. A.* Finite element method for calculating spectral and optical characteristics of axially symmetric quantum dots // *Proceedings of SPIE*. — 2018. — Vol. 10717. — 1071712–1–8.
- A21. *Gusev A. A., Hai L. L., Vinitzky S. I., Chuluunbaatar O., Derbov V. L., Klombotskaya A. S., Dvoyan K. G., Sarkisyan H. A.* Analytical and numerical calculations of spectral and optical characteristics of spheroidal quantum dots // *Ядерная Физика*. — 2013. — Т. 76. — С. 1090–1112.
- A22. *Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S. I., Derbov V. L., Kazaryan E. M., Kostanyan A. A., Sarkisyan H. A.* Adiabatic approach to the

- problem of a quantum well with a hydrogen - like impurity // Ядерная физика. — 2010. — 73. — С. 352–359.
- A23. *Gusev A. A., Vinitsky S. I., Gózdź A., Dobrowolski A.* Parametric basis functions for collective nuclear models // Acta Physica Polonica B (Proceedings Supplement). — 2017. — Vol. 10. — 99–105.
- A24. *Gusev A. A.* Finite Element Method of High–Order Accuracy for Solving Two Dimensional Elliptic Boundary–Value Problems of Two and Three Identical Atoms in a Line // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2018. — № 3. — С. 226–243.
- A25. *Chuluunbaatar O., Gusev A., Gerdt V., Kaschiev M., Rostovtsev V., Samoylov V., Tupikova T. and Vinitsky S.* A Symbolic-numerical algorithm for solving the eigenvalue problem for a hydrogen atom in the magnetic field: cylindrical coordinates, // Lecture Notes in Computer Science. — 2007. — Vol. 4770. — P. 118–133.
- A26. *Гусев А. А., Виницкий С. И., Чулуунбаатар О., Красовицкий П. М.* Резонансное туннелирование пары связанных частиц в адиабатическом представлении // Вестник МГТУ “Станкин” 2013. — № 1(24). — сс. 92–97.
- A27. *Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitsky S. I., Derbov V. L.* Algorithms for solving the boundary–value problems for atomic trimers in collinear configuration using the Kantorovich method // Вестник РУДН: Серия «Математика. Информатика. Физика.» — 2016. — № 4. — P. 56–76.
- A28. *Vinitsky S. I., Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Derbov V. L., Krassovitskiy P. M., Hai L. L.* Three–body scattering model: diatomic homonuclear molecule and atom in collinear configuration // Proceedings of SPIE. — 2017. — Vol. 10337. — 103370j-1-11.
- A29. *Гусев А. А., Виницкий С. И., Чулуунбаатар О., Дербов В. Л., Гүждэс А., Красовицкий П. М.* Метастабильные состояния составной системы при туннелировании через отталкивающие барьеры // Теоретическая и математическая физика. — 2016. — Т. 186. — № 1. — С. 27–50.
- A30. *Gusev A. A., Vinitsky S. I., Chuluunbaatar O., Derbov V. L., Gózdź A., Krassovitskiy P. M.* Transmission of clusters consisting of a few identical particles through barriers and wells // Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement. — 2017. — Vol. 10 . — P. 269–274.
- A31. *Chuluunbaatar O., Vinitsky S. I., Gusev A. A., Derbov V. L., Krassovitskiy P. M.* Quantum transparency of barriers and reflection from wells for clusters of identical particles // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. — 2018. — Vol. 82. — 6. — P. 648–653.
- A32. *Gusev A. A., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Hai L.L., Derbov V. L., Krassovitskiy P. M.* Resonant tunneling of a few-body cluster through repulsive barriers // Ядерная физика. — 2014. — Т. 77. — № 3. — С. 414–438.



- A33. *Gusev A. A., Vinitsky S. I., Chuluunbaatar O., Gózdź A., Derbov V. L., Krassovitskiy P. M.* Adiabatic representation for atomic dimers and trimers in collinear configuration // *Physics of Atomic Nuclei*. — 2018. — Vol. 81. — No. 6. — P. 911-936.
- A34. *Гусев А. А.* Модель туннелирования кластеров через отталкивающие барьеры в представлении симметризованных координат // *Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика»*. — 2014. — № 1. — С. 52–70.
- A35. *Гусев А. А.* Новый метод построения осцилляторных функций квантовой системы тождественных частиц в симметризованных координатах // *Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика»*. — 2013. — № 3. — С. 52–67.
- A36. *Гусев А. А., Виницкий С. И., Чулуунбаатар О., Чулуунбаатар Г., Гердт В.П., Дербов В. Л., Гурджэ А., Красовицкий П. М.* Алгоритм вычисления интерполяционных полиномов Эрмита для метода конечных элементов высокого порядка точности. / *Компьютерная алгебра. Материалы Международной конференции, Москва, 30 октября – 3 ноября 2017 г. Москва: ФГБОУ ВО "РЭУ им. Г. В. Плеханова" 2017 с. 89–95.*

### Список цитируемой литературы

1. Вильдермут К., Тан Я., Единая теория ядра. Мир, Москва (1980).
2. Kukulin V.I., Krasnopol'sky V.M., Horáček J., *Theory of Resonances*. Academia, Praha (1989), pp. 107, 112.
3. Harrison P., *Quantum Well, Wires and Dots*. Wiley, NY (2005).
4. Пузырев Д.А., Яревский Е.А. *Вестник СПбГУ. Физ. хим.* № 2. 123 (2010).
5. Градусов В.А., Яревский Е.А., *Изв. РАН. Сер. физ.* **80**, 998 (2016).
6. Greene С.Н., et al, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 035006 (2017).
7. Dobrowolski A., Mazurek K., Gózdź A., *Phys. Rev. C* **94**, 054322 (2016); *ibid.* **97**, 024321 (2018).
8. Turovtsev V.V., Orlov Y.D., Tsirulev A.N. *Opt. Spectr.* **119**, 191 (2015).
9. Цирулев А.Н. и др., *Вестник ТвГУ. Сер. Прикл. мат.* № 1, 39 (2014).
10. Сьярле Ф., *Метод конечных элементов для эллиптических задач*. М.: Мир 1980.
11. Канторович Л.В., Крылов В.И., *Приближенные методы высшего анализа*. (Москва, Физматгиз, 1962).
12. Власова З.А., *Тр. МИАН СССР*, **53**, 16 (1959).
13. Бреховских Л. М. *Волны в слоистых средах*. М. Наука, 1973.
14. Abrashkevich A.G., et al, *J. Comp. Phys.***163** 328 (2000).
15. Chuluunbaatar O., et al, *Comput. Phys. Commun.* **181**, 1358 (2009).
16. Chuluunbaatar O., et al, *Comput. Phys. Commun.* **177**, 649 (2007).
17. Гусев А.А., и др. <http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m/>

18. Abrashkevich A.G., et al, *Comput. Phys. Commun.* **90**, 311 (1995).
19. Kadomtsev M.V., et al, *Phys. Rev. A* **36**, 4652 (1987).
20. Belov P.A., Yakovlev S.L., *Ядерная физика* **77**, 369 (2014).
21. Пупышев В.В. *ЭЧАЯ* **30**, 1562–1649 (1999); *ТМФ* **155**, 415–438 (2008).
22. Abramov S.A., et al, *Comput. Math. Math. Phys.* **56**, 894 (2016).
23. Abramov S. A. et al, *Lecture Notes in Computer Science.* **3718**, 1 (2005).
24. Крянев А.В., Удумян Д.К. *Ядерная физ. и инж.* **1** 512 (2010).
25. Kryanev A.V., Udumyan D.K. *Int. J. Math. Anal.* **8**, 2221 (2014).
26. Gusev A.A. et al, *Lect. Notes Computer Sci.* **8660**, 138 (2014).
27. Ciarlet P.G, Raviart P.-A., *Arch. Rational Mech. Anal.* **46**, 177 (1972).
28. Argyris J.H. et al, *Proc. Conf. on Matrix Methods in Structural Mechanics (2nd)*, Wright–Patterson Air Force Base, Ohio, 15–17 October 1968.
29. Bell K. *Int. J. Numer. Methods Eng.* **1**, 101 (1969).
30. Zienkiewicz O.C., In: Whiteman J.R. (ed.) *The Mathematics of Finite Elements and Applications*, pp. 1. Academic Press, London (1973).
31. Корнеев В.Г., *Схемы метода конечных элементов высокого порядка точности.* Л.: ЛГУ, 1977.
32. Стренг Г., Фикс Г., *Теория метода конечных элементов.* М.: Мир, 1977.
33. Бате К., Вилсон Е., *Численные методы анализа и метод конечных элементов.* М: Стройиздат (1982).
34. Ramdas Ram-Mohan, L., *Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics*, Oxford Univ. Press, N.Y. (2002).
35. Байдакова Н.В., *Матем. тр.*, **20**, 43 (2017).
36. Мысовских И.П. *Интерполяционные кубатурные формулы.* М.: Наука., 1981.
37. Акишин П.Г., Жидков Е.П., *ОИЯИ* 11–81–395, Дубна (1981).
38. Dunavant, D. A., *Int. J. Num. Meth. Engng* **21**, 1129 (1985).
39. Cools R., *J. Complexity*, **19**, 445 (2003).
40. Stoyanova S.B., *J. Comput. Appl. Math.* **193**, 446 (2006).
41. Zhang, L., Cui, T., Liu, H., *J. Comput. Math.* **27**, 89 (2009).
42. Cui T. et al, *Numer. Math. Theor. Meth. Appl.* **10**, No. 2, 331 (2017).
43. Duff I. S. and Reid J. K., Report RAL-95-001, Rutherford Appleton Laboratory, Oxfordshire 1995; <http://www.hsl.rl.ac.uk>
44. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М., *Численные методы.* Москва, ФМЛ 2001.
45. Gill P.E., Murray W., Wright M.H. *Practical Optimization.* Academic Press (1981).
46. Красовицкий П.М., Пеньков Ф.М., *Изв. РАН Сер. физ.* **81**, 805 (2017).
47. Mead D.G., *Proc. Amer. Math. Soc.* **76**, 302 (1979).
48. Muga, J.G., et al, *Phys. Rept.* **395**, 357 (2004).
49. Gusev A. et al, *Lect. Notes Computer Sci.* **7442**, 155 (2012).
50. Guest J.R., Raithel G., *Phys. Rev. A.* **68**, 052502 (2003).

**Гусев Александр Александрович**

**Метод конечных элементов для исследования  
квантовых систем нескольких частиц**

В диссертации разработан алгоритмический подход к построению вычислительных схем метода конечных элементов высокого порядка точности и метода Канторовича – приведение к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, ориентированных на решение эллиптических краевых задач для многомерного уравнения Шредингера и исследование квантовых систем нескольких частиц. Работоспособность построенных вычислительных схем, созданных численных и символьных (компьютерно–алгебраических) алгоритмов и реализующих их проблемно–ориентированных комплексов программ демонстрируется численным анализом точно–решаемых задач и эталонных задач с известным решением, а также физически интересных конфигураций и резонансных процессов, возможных в квантовой системе нескольких частиц: фотоабсорбции в ансамблях аксиально–симметричных квантовых точек, кулоновского рассеяния электрона в магнитном поле и фотоионизации атома водорода, рассеяния двухатомной молекулы на потенциальном барьере или на атоме, туннелирования кластера нескольких тождественных квантовых частиц через потенциальные барьеры и ямы.

**Gusev Alexander Alexandrovich**

**Finite element method for investigation  
of the quantum systems of several particles**

The thesis developed an algorithmic approach to the construction of schemes of the finite element method of high accuracy and the Kantorovich method – reduction to a system of ordinary differential equations for solving multi-dimensional boundary–value problems for Schrödinger equation and investigation the quantum system of several particles. The operability of the constructed computing schemes, the created numerical and symbolic (computer–algebraic) algorithms and problem–oriented program complexes realizing them is confirmed by a numerical analysis of exact solvable and reference tasks with the known solutions and also physically interesting configurations and resonant processes possible in the quantum systems of several particles: photo-absorbtion in ensembles of the axial–symmetric quantum dotes, a Coulomb scattering of an electron in the homogeneous magnetic field and a photo-ionization of atom of Hydrogen, scattering of a diatomic molecule on atom or a potential barrier, tunneling of an cluster from several identical quantum particles through potential barriers or wells.