

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ларкина Александра Сергеевича «Численное моделирование термодинамических свойств кулоновских систем частиц в вигнеровской формулировке квантовой механики» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы

I have read the avtoreferat on this thesis and I am familiar with the publications of A.S. Larkin. The thesis contains a number of important scientific results. Most importantly,

I.) a path integral representation of the Wigner distribution in the canonical ensemble has been obtained,

II.) numerical methods and systematic approximations (one momentum, linear and harmonic approximations) have been developed to compute the Wigner function for interacting two-component quantum plasmas,

III) extensive results for the momentum distribution of nonideal quantum plasmas, including dense hydrogen and electron-hole plasmas, have been obtained and analytical fit formulas have been proposed.

IV) it is demonstrated that the present path integral Monte Carlo (PIMC) method allow to reach the strongly degenerate limit of an ideal Fermi gas, thus, going far beyond previous direct PIMC methods in coordinate representation (except PB-PIMC, see below).

To summarize: a new PIMC approach in the Wigner representation has been developed that is very valuable for the simulation of nonideal quantum systems in thermodynamic equilibrium. If it is combined with other methods it can help to reduce the fermion sign problem (FSP) of PIMC simulations. I consider the present work as an important first step of research. At the same time, I list a few problems of the present avtoreferat:

- on p. 3 it is stated that previous PIMC methods in coordinate space are not able to obtain expectation values of operators that depend on momentum. This is not correct. Coordinate space methods are able to compute the density matrix which via Fourier transform yields the Wigner function.

- on p. 4 it is stated that one of the tasks of the thesis was to «overcome the FSP» in the computation of the Wigner function. However, this is not demonstrated. There is even not a single figure where results for the average sign are presented.

- there exists another PIMC method in coordinate (PB-PIMC) space that also allows to treat strongly correlated quantum plasmas and has no sign problem for temperatures above half of the Fermi temperature. This should have been mentioned and comparisons with existing accurate PB-PIMC results would have been desirable.

- the avotreferat contains a number of numerical results. Unfortunately, there is no information on the accuracy — neither on the systematic error of the developed approximations, nor on the statistical errors. It is also not clear how many beads have been used and how the results scale

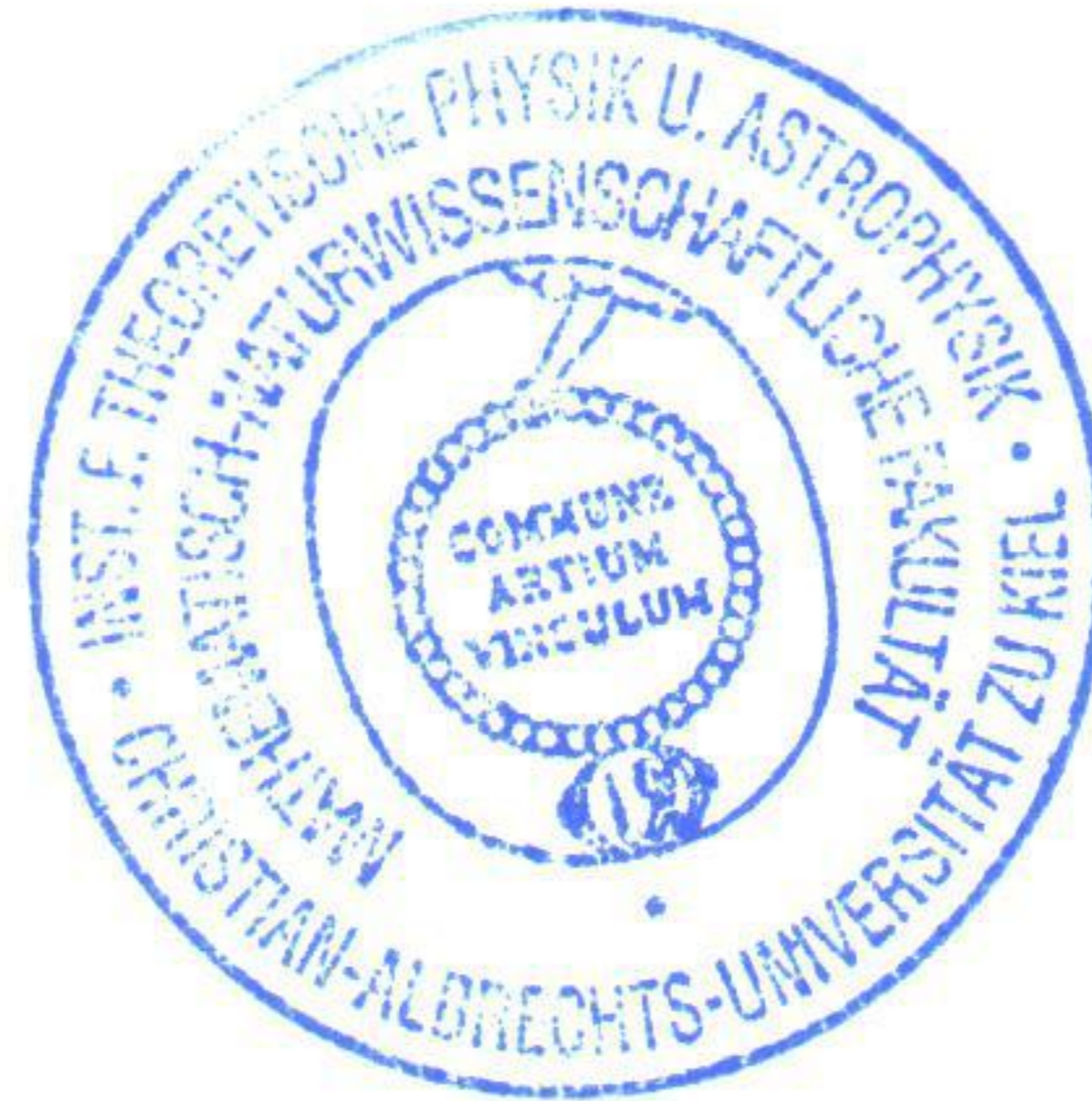
with the beads number. To demonstrate the accuracy and reliability of the new method, benchmark calculations and comparisons with existing other simulation results, for example for model systems, would have been desirable.

Все перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей значимости диссертационной работы; диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., а ее автор Ларкин Александр Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 - физика плазмы.

Подписи:

Отзыв составил

Prof. Dr. Michael Bonitz
Head of the chair Statistical Physics,
Institute for Theoretical Physics and Astrophysics
Kiel University,
Leibnizstraße 15, 24098 Kiel, Germany
+49(0)431-880-4122, bonitz@physik.uni-kiel.de



confirmed by Prof. Dr. Sebastian Wolf
Director of the Institute for Theoretical Physics and Astrophysics
Kiel University,
Leibnizstraße 15, 24098 Kiel, Germany
+49(0)431-880-4107, wolf@astrophysik.uni-kiel.de

Я прочитал автореферат на данную диссертацию, также я знаком с публикациями А.С. Ларкина. Этот автореферат содержит несколько важных научных результатов. Самые важные из них:

I) было получено представление функции Вигнера канонического ансамбля в виде интеграла по траекториям;

II) были разработаны численные методы и систематические аппроксимации (одноимпульсный подход, линейное и гармоническое приближения) для вычисления функции Вигнера неидеальной двухкомпонентной квантовой плазмы;

III) Показано, что настоящие методы Монте Карло (PIMC) позволяют рассматривать идеальный Ферми газ с сильным вырождением, что является большим шагом вперёд по сравнению с прямыми методами PIMC в координатном представлении (кроме PB-PIMC, см. ниже).

Подводя итог: разработанный новый PIMC подход в Вигнеровском представлении представляет большой интерес для моделирования неидеальных квантовых систем, находящихся в термодинамическом равновесии. Комбинация его с другими методами, возможно, позволит уменьшить фермионную проблему знака (FSP) в моделировании PIMC. Я считаю настоящую работу важным первым шагом в данном направлении исследований. В то же время, я нашёл следующие недостатки в автореферате:

- на стр. 3 утверждается, что существующие методы PIMC в координатном пространстве не позволяют рассчитывать средние величины операторов, зависящих от импульса. Это неверно. Методы в координатном пространстве позволяют вычислить матрицу плотности, которая через преобразование Фурье приводит к функции Вигнера.

- на стр. 4 утверждается, что одной из целей данной диссертационной работы было «преодоление фермионной проблемы знака» при расчёте функции Вигнера. Однако, это не показано. В автореферате нет ни одного графика, на котором было бы показано среднее значение знака.

- существует другой метод PIMC в координатном пространстве (PB-PIMC), который также позволяет моделировать сильно неидеальную квантовую плазму и не имеет проблемы знака для температур вплоть до половины температуры Ферми. Это следовало бы упомянуть, а также желательно сопоставить результаты с существующими точными результатами PB-PIMC.

- автореферат содержит значительное количество численных результатов. К сожалению, не приводится никакой информации о точности — ни систематических ошибок разработанных аппроксимаций, ни статистических ошибок. Также неясно, сколько «бусин» [число промежуточных координат, аппроксимирующих траекторию — прим. Переводчика] было использовано в расчётах и как результаты изменяются при изменении числа «бусин». Для демонстрации точности и надёжности новых методов, желательно провести тестовые расчёты и сравнить результаты с существующими результатами других методов, например, для некоторых модельных систем.