

Review report on the proposal of the Project

"Methods of computational physics for the study of complex systems"

within the JINR theme "Methods, algorithms and software for modeling physical systems, mathematical processing and analysis of experimental data"

Project aims the development of methods for mathematical modeling of complex physical systems described by multi-parameter systems of dynamic nonlinear, multidimensional equations characterized by a complexity of solutions, the presence of critical regimes, bifurcations, and phase transitions.

One should note that mathematical modeling is an integral part of modern scientific research and requires high level qualification for (a) adequate mathematical formulation of problems within the framework of the studied models; (b) development of new approaches based on the combined use of various methods to effectively take into account the features of the studied physical processes; (c) development of algorithms and software packages based on modern programming technologies, including for high-performance massive calculations in a wide range of parameters of simulated systems.

The project participants have the necessary knowledges and high scientific level, they are known for their work in the field of developing modeling methods and conducting research on complex physical systems and processes. This gives grounds to count on the success of the project.

The research tasks of the project are formulated within the main directions of the JINR research program and are grouped into five subject areas, each of which has its own characteristics in terms of mathematical formulations of problems and applied methods of numerical research:

1. Investigation of nuclear-physical and quantum-mechanical systems that are described by Schrödinger equations and require high accuracy of numerical solutions.
2. The study of multifactor processes with external influences in materials and condensed media based on the combined application of molecular dynamics, dynamics of continuous media and wave equations.
3. The problems of calculating physical fields and optimizing the operating modes of experimental installations under the condition of complex multidimensional geometry.
4. Studies of dense nuclear matter based on various versions of the equation of state require correct consideration of such factors as the gravity, the live time of the phenomena, the influence of temperature effects, etc.
5. The study of the states and dynamics of quantum systems of various types based on the combined use of hybrid methods of quantum programming with methods of computational mathematics.

All the tasks in the project are extremely relevant, the research is aimed at obtaining results that are of scientific significance not only in the academic sense, but also in terms of possible practical applications in high technologies.

I believe that the project is important from the viewpoint of IT support for theoretical and experimental research at JINR in terms of the development and use of mathematical modeling methods. The project looks necessary for the successful implementation of the JINR scientific program and deserves unconditional support with a high priority.



Polyakov S.V.
Doctor of Physics and Mathematics Sciences,
Leading Researcher,
Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow

Signature of S.V. Polyakov I certify
Scientific Secretary
Candidate of Physical and Mathematical Sciences



A.A. Davydov

Отзыв на проект

«Методы вычислительной физики для исследования сложных систем»

в рамках темы ОИЯИ «Методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обработки и анализа экспериментальных данных»

Проект направлен на разработку методов математического моделирования сложных физических систем, описываемых многопараметрическими системами динамических нелинейных, многомерных уравнений, характеризующихся сложностью решений, наличием критических режимов, бифуркаций и фазовых переходов.

Следует отметить, что математическое моделирование является неотъемлемой частью современных научных исследований и предполагает (а) адекватную математическую постановку задач в рамках изучаемых моделей; (б) разработку новых подходов, основанных на комбинированном использовании различных методов, позволяющих эффективно учитывать особенности изучаемых физических процессов; (в) разработку алгоритмов и пакетов программ на основе современных технологий программирования, в том числе для высокопроизводительных массовых расчетов в широком диапазоне параметров моделируемых систем.

Участники проекта обладают необходимыми знаниями и высокой научной квалификацией, они известны своими работами в области разработки методов моделирования и проведения исследований сложных физических систем и процессов. Это дает основания рассчитывать на успех проекта.

Исследовательские задачи проекта сформулированы в рамках основных направлений исследовательской программы ОИЯИ и сгруппированы в пять предметных областей, каждая из которых имеет свои особенности с точки зрения математических постановок задач и применяемых методов численного исследования.

1. Исследование ядерно-физических и квантово-механических систем, описываемых уравнениями Шредингера и требующих высокой точности численных решений.
2. Изучение многофакторных процессов с внешними воздействиями в материалах и конденсированных средах на основе комплексного применения подходов, основанных на молекулярной динамике, динамике сплошных сред и волновых уравнениях.
3. Задачи расчета физических полей и оптимизации режимов работы экспериментальных установок в условиях сложной многомерной геометрии моделируемых систем.
4. Исследования плотной ядерной материи на основе различных вариантов уравнения состояния, требующие корректного учета таких факторов, как гравитация, время жизни изучаемого явления, влияние температурных воздействий и др.

5. Изучение состояний и динамики квантовых систем различного типа, основанное на совместном использовании гибридных методов квантового программирования с методами вычислительной математики.

Все поставленные в проекте задачи крайне актуальны, исследования направлены на получение результатов, имеющих научную значимость не только в академическом смысле, но и с точки зрения возможного практического применения в высоких технологиях.

Считаю, что проект важен с точки зрения ИТ-поддержки теоретических и экспериментальных исследований в ОИЯИ в части развития и использования методов математического моделирования. Проект представляется необходимым для успешной реализации научной программы ОИЯИ и заслуживает безоговорочной поддержки с высоким приоритетом.

Поляков С.В.

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник,

Институт прикладной математики им. В.М. Келдыша РАН, Москва

Подпись С.В. Полякова удостоверяю,

Ученый секретарь

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН,

кандидат физико-математических наук



А.А. Давыдов