

## ***Разработка и внедрение в практику расчетов компьютерной программы многомерного интегрирования***

**Краткое содержание:** Существенно модифицированы некоторые фортрановские программы, написанные на основе т.н. метода адаптивного подразбиения. Применяются при расчетах матричных элементов ряда квантовых процессов рассеяния на суперкомпьютерах МГУ.

### **Руководитель и контактная информация:**

Попов Юрий Владимирович, зав. лабораторией ММКПР ОФАЯ, канд. физ.-мат. наук, доцент, (495) 9395047, [popov@srd.sinp.msu.ru](mailto:popov@srd.sinp.msu.ru)

**Соавторы:** Чулуунбаатар Очбадрах (ОИЯИ, Дубна), Галстян А.Г. (физический факультет МГУ, студент бго курса)

**Всего участников исследования (чел.):** 10

### **Содержание (резюме на русском языке):**

Некоторые открытые (<http://crantastic.org/packages/adapt>) и коммерческие (<http://www.stat.duke.edu/courses/Spring02/sta376/eg/lc/dcuhre.f>, <http://www.nag.com/>) фортрановские программы, написанные на основе т.н. метода адаптивного подразбиения (adaptive subdivision method), были нами существенно модифицированы, что позволяет обрабатывать большой объем информации в оперативной памяти, использовать комплексные числа и проводить параллельные вычисления. Эти программы позволяют проводить расчеты некоторых многомерных интегралов с гладкими функциями, избегая стандартного метода последовательного интегрирования, который приводит зачастую к огромным численным ошибкам (см. например, [doi:10.1088/0953-4075/46/2/028001](https://doi.org/10.1088/0953-4075/46/2/028001)). Программы в частности применялись для расчетов матричных элементов ряда квантовых процессов рассеяния на суперкомпьютерах МГУ ([doi:10.1103/PhysRevA.87.032715](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.032715), [doi: 10.1103/PhysRevA.88.042710](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.88.042710), [arXiv:1311.5660v1](https://arxiv.org/abs/1311.5660v1) [physics.atom-ph] (направлена в Phys.Rev. A)).

**Ключевые слова:** фортрановские программы, метод адаптивного подразбиения, многомерное интегрирование, квантовая теория рассеяния.

### **Область знаний:**

ГРНТИ: 29.29.31 – столкновение атомов и молекул с частицами; 28.17.23 – моделирование физических процессов. SCOPUS: physics and astronomy

### **Тема (темы) по темплану научных работ:**

5.3. Теория систем нескольких тел и взаимодействие ядер с электронным окружением;  
4.2. Взаимодействие ионов с веществом