



Międzynarodowa Środowiskowa Szkoła Doktorska
przy **Centrum Studiów Polarnych**
w Uniwersytecie Śląskim w Katowicach

ul. Bedzińska 60
41-200 Sosnowiec
tel. +48 32 368 93 80
polarknow@us.edu.pl
www.mssd.us.edu.pl



Nr projektu doktorskiego: IEDS/2023/IM/02

Proponowany temat rozprawy doktorskiej: *Matematyka obliczeniowa mechaniki kwantowej*

Jednostka prowadząca: Instytut Matematyczny Polskiej Akademii Nauk (IM PAN), Warszawa

Wymagania wobec kandydatów:

1. Ukończone studia II-stopnia (magister) na kierunku matematyka lub pokrewnym (np. informatyka, fizyka). Znajomość tematyki badawczej związanej z analizą numeryczną, równaniami różniczkowymi, analizą funkcjonalną, programowaniem.
2. Znajomość zagadnień: aproksymacja, interpolacja, równania różniczkowe zwyczajne, cząstkowe, transformata Fouriera. Umiejętność programowania – w zakresie podstawowym.
3. Znajomość języka angielskiego umożliwiającą komunikację, czytanie prac naukowych oraz ich pisanie.
4. Gotowość na ciągłe i intensywne poszerzanie kompetencji.

Opis zadań:

1. Analiza równań różniczkowych wysoko oscylujących pod kątem efektywnej aproksymacji asymptotycznej i numerycznej zarówno rozwiązań jak i ich niezmienników lub innych własności.
2. Pozyskiwanie, przetwarzanie oraz analiza badań naukowych związanych z tematyką badawczą.
3. Wyjazdy zagraniczne w celu współpracy międzynarodowej do ośrodków: University of Cambridge, UK; Sorbonne Université, Francja; University of Manchester, UK; University of Bath, UK; University of Singapore, Singapore.
4. Prowadzenie badań teoretycznych i programistycznych (np. matlab, python lub julia).
5. Przygotowanie artykułów naukowych oraz prezentacji konferencyjnych.
6. Regularne sprawozdawanie postępów pracy.

Streszczenie:

Znaczenie równań różniczkowych, jako wiodącego narzędzia matematycznego do opisywania zjawisk codziennego życia nie wymaga tłumaczenia. Równania różniczkowe są dominującym instrumentem w formułowaniu modeli matematycznych w nauce i inżynierii.

Po sformułowaniu i przeanalizowaniu zagadnienia różniczkowego zazwyczaj konieczne jest znalezienie jego rozwiązania. Jako że niewiele równań różniczkowych można rozwiązać analitycznie, aproksymacja często jest jedynym rozwiązaniem. Koncentracja na metodach obliczeniowych nie oznacza jednak, że w jakikolwiek sposób porzucamy matematykę. Po dyskretyzacji, równania różniczkowe są nadal



Międzynarodowa Środowiskowa Szkoła Doktorska
przy **Centrum Studiów Polarnych**
w Uniwersytecie Śląskim w Katowicach

ul. Bedzińska 60
41-200 Sosnowiec
tel. +48 32 368 93 80
polarknow@us.edu.pl
www.mssd.us.edu.pl



objektami matematycznymi (prawdopodobnie nawet bardziej skomplikowanymi obiektami matematycznymi!) i muszą być analizowane z pełnym arsenalem narzędzi matematycznych (metody spektralne lub pseudo-spektralne, algebry Liego, rozwinięcia Magnusa, Ferra, Dysona, transformaty Fouriera z systemów ortogonalnych, poszukiwania nowych baz ortogonalnych dedykowanych dla konkretnego zagadnienia, aproksymacja asymptotyczna elementami o różnych częstotliwościach).

Równania różniczkowe o wysoko oscylujących rozwiązaniach są szczególnie trudne do aproksymacji (zarówno analitycznej jak i numerycznej), a ich występowanie w naukach stosowanych jest bardzo częste: mechanika kwantowa, elektronika, fizyka. Jest to dziedzina nauki rozwijająca się bardzo dynamicznie i konkurencyjnie.

Wspólnie z kandydatem wybierzemy szczególny kierunek badań w zależności od preferencji i umiejętności kandydata. Szczególnej uwadze poddamy aproksymację numeryczną zagadnień na całej płaszczyźnie rzeczywistej, a nie jak to robiono do tej pory na skończonych odcinkach wymagających narzucania na problemy sztucznych warunków brzegowych: okresowych lub zerowych. Kolejnym tematem o dużym zapotrzebowaniu jest problem wieloczęstotliwości rozwiązań, gdzie dochodzi do rezonansów niebezpiecznych z punktu widzenia obliczeń. Trudnym tematem numerycznej analizy równań jest aproksymacja zachowania kilku (lub kilku tysięcy!) cząstek w przestrzeni trójwymiarowej – na dzień dzisiejszy wydaje się, że *Kohn-Sham functional density theory* jest jedynym obiecującym (aczkolwiek bardzo trudnym) kierunkiem. W dziedzinie zainteresowań opiekuna merytorycznego leży również teoria sterowania optymalnego, gdzie projektowane jest optymalne działanie laserów (na układ) w celu uzyskania żądanych rozwiązań równań różniczkowych. Analityczne rozwinięcia asymptotyczne rozwiązań równań zagadnień w wysoko oscylującym czynnikiem zewnętrznym są interesującym i wciąż wymagającym uwagi obszarem badań. Metodologie obliczeniowe zachowujące energię całkowitą i/lub masę rozwiązań zagadnień jak Schroedinger, Dirac, Klein-Gordon, Pauli (różnego rodzaju: w polach elektrycznych, elektromagnetycznych, liniowe, nieliniowe) są szeroko badanym, ale wciąż niewyczerpanym obszarem badań.

Inne informacje:

Praca będzie realizowana pod opieką merytoryczną: dr hab. Karoliny Kropielnickiej, prof. IM PAN, e-mail: kkropielnicka@impan.pl, Instytut Matematyczny Polskiej Akademii Nauk, oddział w Sopocie.

Sekretarz Komisji Rekrutacyjnej MŚSD: +48 32 3689 380, e-mail: polarknow@us.edu.pl

Informacje dotyczące rekrutacji do MŚSD: <https://www.mssd.us.edu.pl/rekrutacja-2023-2024-reg/>