На правах рукописи

Кальметьев Рустем Шайнурович

Метод итераций Фейнмана-Чернова аппроксимации полугрупп

Специальность 1.1.6. — «Вычислительная математика»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2023

Работа выполнена в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Научный руководитель: **Орлов Юрий Николаевич**
доктор физико-математических наук,
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН,
заведующий отделом №6 «Вычислительная физика и кинетические уравнения»

Официальные оппоненты: **Трушечкин Антон Сергеевич,**
доктор физико-математических наук,
Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук,
ведущий научный сотрудник отдела математической физики

Лобода Артем Александрович,
кандидат физико-математических наук,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
доцент кафедры математического анализа

Ведущая организация: **Казанский (Приволжский) федеральный университет**

Защита состоится 29 февраля 2024 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета 24.1.237.01 на базе ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, расположенного по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН.

Автореферат разослан «____».____________.20____.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.237.01,
кандидат физико-математических наук Корнилина М.А.

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Данная диссертация посвящена разработке методов аппроксимации эволюционных полугрупп и вычислительных алгоритмов решений эволюционных дифференциальных уравнений с помощью итераций Фейнмана-Чернова для случайных операторнозначных функций.

В настоящее время методы вычислительной математики широко применяются в различных научных областях и приложениях, и особенно актуальными являются задачи связанные с большими размерностями данных. Для достаточно больших размерностей численное решение уравнений в частных производных при помощи сеточных алгоритмов, таких как конечно-разностные алгоритмы или метод конечных элементов, становится практически невозможным. Стандартным подходом для задач большой размерности является построение статистических оценок методом Монте-Карло. Также в последние годы получили развитие идеи применения глубоких нейронных сетей для аппроксимации решений. При этом обучение таких сетей тоже требует достаточно больших обучающих выборок, которые, как правило, строятся опять же методами Монте-Карло. Итерации Фейнмана-Чернова в свою очередь в некоторых случаях могут использоваться для вычислительно более эффективного построения аппроксимаций решений эволюционных уравнений.

Вопросами аппроксимации эволюционных полугрупп занимается множество научных коллективов, при этом подавляющее большинство работ по черновским аппроксимациям полугрупп имеют теоретический характер. В связи с этим, особенный интерес представляют вопросы разработки новых численных методов и моделей, основанных на использовании итераций Фейнмана-Чернова, и их применения в приложениях классической и квантовой механики, экономики, биологии и других областях науки.

Целью данного диссертационного исследования является разработка численных методов построения аппроксимаций решений эволюционных уравнений с помощью усреднения итераций Фейнмана-Чернова для случайных операторнозначных функций.

В работе решаются следующие **задачи**:

– разработка и обоснование сходимости алгоритма численной аппроксимации решений задач Коши для эволюционных уравнений с помощью итераций Фейнмана-Чернова, и в частности разработка эффективного метода аппроксимации решений многомерных уравнений Колмогорова, порождаемых случайными аффинными преобразованиями аргумента;

– создание и реализация численного метода моделирования необратимой эволюции квантовых систем на основе усреднения итераций Фейнмана-Чернова;

– создание и реализация алгоритма численной аппроксимации операторов сдвига для произвольных коммутационных соотношений.

Научная новизна. Для последовательности усреднений итераций Фейнмана-Чернова случайных операторнозначных функций, порождаемых аффинными преобразованиями аргумента, сформулированы и доказаны достаточные условия сходимости к предельной сильно непрерывной полугруппе. Разработан алгоритм численной аппроксимации решений задач Коши для эволюционных уравнений с помощью итераций Фейнмана-Чернова. Разработан численный метод моделирования необратимой эволюции квантовых систем. Для случая неклассических коммутационных соотношений найдено однопараметрическое семейство операторов рождения и уничтожения, для которых операторнозначная функция сдвига является унитарной и удовлетворяет полугрупповому свойству на прямых, проходящих через начало координат.

Теоретическая ценность и практическая значимость результатов исследования состоят в разработке доказательного способа построения сходящейся последовательности аппроксимаций решений эволюционных уравнений с помощью итераций Фейнмана-Чернова.

Методы. В диссертации использован аппарат теории конечнократных аппроксимаций по формулам Фейнмана-Чернова, и в целом методы вычислительной математики, бесконечномерного анализа и теории операторов, линейной алгебры, теории вероятностей и теории случайных процессов.

Обоснованность и достоверность результатов исследования подтверждаются использованием строгих математических доказательств и рассуждений и апробированных в научной практике методов численного анализа. Верификация разработанного программного комплекса проводилась в том числе с помощью сравнительного анализа результатов расчетов с аналитическими решениями и результатами расчетов с помощью альтернативных численных методов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Сформулированы и доказаны достаточные условия сходимости последовательности усреднений итераций Фейнмана-Чернова для случайных аффинных преобразований аргумента к предельной сильно непрерывной полугруппе, разрешающей задачу Коши для соответствующего уравнения Фоккера-Планка.
2. Разработан алгоритм численной аппроксимации решений многомерных уравнений Колмогорова, порождаемых случайными аффинными преобразованиями аргумента.
3. Найдено однопараметрическое семейство операторов рождения и уничтожения, для которых операторнозначная функция сдвига является унитарной и удовлетворяет полугрупповому свойству на прямых, проходящих через начало координат.
4. Разработан и реализован в виде программного комплекса численный метод моделирования необратимой эволюции квантовых систем.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались на следующих научных семинарах и конференциях:

1. XX Всероссийская молодежная школа-конференция «Лобачевские чтения-2021» (1-4 декабря 2021, Казань);
2. XXI Всероссийская молодежная школа-конференция «Лобачевские чтения-2022»(28 ноября – 1 декабря 2022, Казань);
3. Международная конференция «Теория функций, теория операторов и квантовая теория информации» (18-22 октября 2022, Уфа);
4. International Online Conference One-Parameter Semigroups of Operators (OPSO 2023) (27 February – 3 March 2023);
5. Научный семинар лаборатории БД и ИС ИПМ им. Келдыша РАН (многократно, 2019-2023, Москва);
6. Международная конференция «Теория функций, теория операторов и квантовая теория информации» (1-3 июня 2023, Уфа);
7. Научный семинар «Математическое моделирование» 15 отдела ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (22 июня 2023, Москва);
8. Международная конференция «Математическая физика, динамические системы и бесконечномерный анализ» (5–13 июля 2023, Долгопрудный);

9. Научный семинар «МИАН Квантовая математическая физика» (18 октября 2023, Москва).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 8 печатных изданиях [1–8], 6 из которых изданы в рекомендованных журналах из перечня ВАК [1–6], 4 — в журналах, входящих в базы данных WoS и SCOPUS [1–4], 2 — в тезисах докладов [7; 8].

Личный вклад автора. Все результаты, выносимые на защиту, получены соискателем лично. Автор диссертации, работая в коллективе соавторов Ю.Н. Орлова и В.Ж. Сакбаева, самостоятельно сформулировал и доказал достаточные условия сходимости последовательности усреднений итераций Фейнмана-Чернова для случайных аффинных преобразований аргумента к предельной полугруппе, доказал унитарность и выполнение полугруппового свойства для конкретного семейства лестничных операторов, разработал численные алгоритмы и провел серию вычислительных экспериментов. Математическая постановка задач принадлежит научному руководителю.

В работе [1] автором получены представления когерентных состояний для двух частных случаев коммутационных соотношений и построено преобразование к стандартной скобке Пуассона. В работе [2] автором доказаны достаточные условия сходимости последовательности усреднений итераций Фейнмана-Чернова для случайных аффинных преобразований аргумента к предельной сильно непрерывной полугруппе, разрешающей задачу Коши для соответствующего уравнения переноса. Также автором проведено численное моделирование последовательностей итераций Фейнмана-Чернова для случайных аффинных преобразований. В работе [3] автором доказаны достаточные условия сходимости последовательности усреднений итераций Фейнмана-Чернова для случайных аффинных преобразований аргумента к предельной сильно непрерывной полугруппе, разрешающей задачу Коши для соответствующего уравнения Фоккера-Планка. В работе [4] автором разработан алгоритм моделирования необратимой эволюции квантовых систем.

Структура и объем диссертации. Диссертация «Метод итераций Фейнмана-Чернова аппроксимации полугрупп» состоит из введения, четырех глав и заключения. Результаты исследования изложены на 96 страницах и содержат 20 рисунков и 1 таблицу. Библиографический список состоит из 110 наименований.

Благодарности. Автор выражает благодарность научному руководителю Ю.Н. Орлову за постановку задач, ценные советы и полезные обсуждения. Также автор глубоко признателен В.Ж. Сакбаеву за замечания, рекомендации и всестороннюю поддержку.

Содержание работы

Во **введении** приводится обзор литературы по изучаемой проблеме и обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы; формулируются цель и задачи работы, научная новизна и положения, выносимые на защиту; кратко излагается содержание диссертационной работы.

В **первой главе** рассматривается задача усреднения последовательностей итераций Фейнмана-Чернова, представляющих собой композиции независимых случайных операторнозначных функций увеличивающейся кратности, и изучаются предельные свойства таких композиций. Для определенного класса операторнозначных функций, порождаемых аффинными преобразованиями аргумента, получены достаточные условия для сходимости математического ожидания последовательности итераций Фейнмана-Чернова к полугруппе, разрешающей задачу Коши для соответствующего уравнения Фоккера-Планка.

В *разделе 1.1* содержатся необходимые предварительные сведения, включающие теорему Чернова[1], используемые определения случайного оператора и математического ожидания от случайного оператора, а также дается общая постановка рассматриваемых задач.

Пусть X – банахово пространство, $B(X)$ – алгебра линейных ограниченных операторов в X. Введем обозначение $\mathbb{R}_+ = [0, +\infty)$. Пусть $C_s(\mathbb{R}_+, B(X))$ – топологическое векторное пространство сильно непрерывных операторнозначных функций $U(t) : \mathbb{R}_+ \to B(X)$ с топологией τ_s, порождаемой семейством полунорм

$$\Phi_{T,v}(U) = \sup_{t\in[0,T]} \|U(t)v\|_X, \quad \forall T > 0, \forall v \in X. \tag{1}$$

[1] Chernoff P. Note on product formulas for operator semigroups // J. Funct. Anal. — 1968. — Vol. 2, no. 2. — Pp. 238–242.

Отметим, что если U, $\{U_n\}_{n=0}^{\infty} \in C_s(\mathbb{R}_+,B(X))$, то

$$U_n \xrightarrow{\tau_s} U \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{n\to\infty} \sup_{t\in[0,T]} \|U_n(t)v - U(t)v\|_X = 0, \ \ \forall T>0, \forall v \in X. \qquad (2)$$

Будем говорить, что сильно непрерывная операторнозначная функция $F(t): \mathbb{R}_+ \to B(X)$ эквивалентна по Чернову сильно непрерывной полугруппе $U(t): \mathbb{R}_+ \to B(X)$, если $F^n\left(\frac{t}{n}\right) \xrightarrow{\tau_s} U(t)$. В приведенных выше обозначениях теорема Чернова, которая используется в доказательстве основного результата данной главы, формулируется следующим образом:

Теорема (Чернов, 1968). *Пусть операторнозначная функция $F(t) \in C_s(\mathbb{R}_+,B(X))$ удовлетворяет условиям:*

1. *$F(0)$ является тождественным оператором,*
2. *$\|F(t)\|_{B(\mathcal{H})} \le e^{\alpha t}, t \ge 0$ при некотором $\alpha > 0$,*
3. *оператор F_0' замыкаем и его замыкание является генератором сильно непрерывной полугруппы $U(t)$.*

Тогда функция $F(t)$ эквивалентна по Чернову полугруппе $U(t)$.

Пусть $\mathcal{H}$ – сепарабельное гильбертово пространство со скалярным произведением $(\cdot,\cdot)$, а тройка $(\Omega,\mathcal{A},\mu)$ – некоторое вероятностное пространство.

Отображение $\hat{A}: \Omega \to B(\mathcal{H})$ будем называть случайным оператором в $\mathcal{H}$, если функции $(\hat{A}u,v): \Omega \to \mathbb{C}$ являются $(\Omega,\mathcal{A})$-измеримыми (т.е. являются случайными величинами) при всех $u,v \in \mathcal{H}$.

Математическим ожиданием (или усреднением) случайного оператора $\hat{A}$ будем называть оператор $\mathbb{E}\hat{A} \in B(\mathcal{H})$ такой, что

$$(\mathbb{E}\hat{A}u,v) = \mathbb{E}(\hat{A}u,v), \ \ \forall u,v \in \mathcal{H}. \qquad (3)$$

Отображение $\hat{F}: \Omega \to C_s(\mathbb{R}_+,B(\mathcal{H}))$ со значениями $F_\omega(t) \in C_s(\mathbb{R}_+,B(\mathcal{H})), \omega \in \Omega$, называется случайной операторнозначной функцией, если $F_{(\cdot)}(t)$ является случайным оператором при всех $t \in \mathbb{R}_+$.

Для последовательности независимых одинаково распределенных случайных операторнозначных функций $\{\hat{F}_k(t)\}, k \in \mathbb{N}$ и произвольного неотрицательного t определены последовательности итераций Фейнмана-Чернова:

$$\hat{F}_n\left(\frac{t}{n}\right)\circ\ldots\circ\hat{F}_1\left(\frac{t}{n}\right), n\in\mathbb{N}. \tag{4}$$

При выполнении достаточных условий последовательность усреднений будет сходится к некоторой предельной сильно непрерывной полугруппе операторов $U(t)$:

$$\mathbb{E}\left(\hat{F}_n\left(\frac{t}{n}\right)\circ\ldots\circ\hat{F}_1\left(\frac{t}{n}\right)\right)\xrightarrow{\tau_s} U(t) \;\text{ при }\; n\to\infty. \tag{5}$$

Во *разделе 1.2* в контексте усреднений итераций Фейнмана-Чернова рассматривается семейство случайных операторнозначных функций, порождаемых аффинными преобразованиями аргумента, доказываются вспомогательные леммы.

Более конкретно, рассматривается случайная операторнозначная функция $F(t):\mathbb{R}_+\to\mathrm{Aff}(\mathbb{R}^d)$ следующего вида

$$F(t)\vec{x}=e^{A\sqrt{t}+Bt+R(t^{\frac{3}{2}})}\vec{x}+\vec{h}\sqrt{t}+\vec{g}t+\vec{r}(t^{\frac{3}{2}}),\quad t\in\mathbb{R}_+,\quad \vec{x}\in\mathbb{R}^d, \tag{6}$$

где при $i,j\in 1\ldots d$ компоненты $\{A^i{}_j\}$,$\{B^i{}_j\}$,$\{h^i\}$,$\{g^i\}$ являются вещественными случайными величинами, а $\{R^i{}_j(s)\}$ и $\{r^i(s)\}$ – случайные непрерывно дифференцируемые функции, обращающиеся в ноль в точке $s=0$. При этом все случайные величины предполагаются совместно распределенными на вероятностном пространстве $(\Omega,\mathcal{A},\mu)$ и имеющими конечные вторые моменты.

Случайная операторнозначная функция $F(t)$ (6) порождает случайную операторнозначную функцию $\hat{U}_F(t)$, $t\geq 0$, со значениями в пространстве линейных ограниченных операторов, действующих в $\mathcal{H}=L_2(\mathbb{R}^n)$ таким образом, что при каждом фиксированном $\omega\in\Omega$ выполняется равенство

$$\hat{U}_F(t,\omega)u(x)=u(F(t,\omega)x),\ \forall u\in\mathcal{H}. \tag{7}$$

Пусть выполняются следующие условия:

A1. операторы A,B и $R'(t)$ при каждом $t\in[0,T]$ принимают значения в шаре радиуса $\rho_0<+\infty$ пространства $B(\mathbb{R}^d)$ с вероятностью 1;

A2. распределение случайного вектора $(\{A^i{}_j\})$ дискретно и симметрично;

A3. $\mathbb{E}h^i = 0$;

A4. оператор A диагонализируем с вероятностью 1;

A5. $\operatorname{tr} A = 0$ с вероятностью 1.

A6. ковариационная матрица случайного вектора $(\{A^i{}_j\},\{B^i{}_j\},\{h^i\},\{g^i\})$ является положительно определенной;

Лемма 1. Пусть задана случайная операторнозначная функция F вида (6), для которой выполнены условия A1 и A2. Тогда для некоторого положительного α справедлива оценка

$$\|\mathbb{E}\hat{U}_F(t)\|_{B(\mathcal{H})} \leq e^{\alpha t}. \tag{8}$$

Лемма 2. Пусть задана случайная операторнозначная функция F вида (6), для которой выполнены условия A1-A6. Тогда замыкание оператора $(\mathbb{E}\hat{U}_F)'_0$, является генератором сильно непрерывной полугруппы в пространстве $\mathcal{H}$.

В *разделе 1.3* формулируется и доказывается являющаяся основным результатом данной главы теорема о сходимости последовательности усреднений итераций Фейнмана-Чернова к соответствующей усредняющей по Чернову полугруппе.

Усредняющей по Чернову полугруппой для случайной операторнозначной функции $\hat{U}_F$, порождаемой функцией F вида (6), будем называть полугруппу $\hat{W}_F$, генератором которой является замыкание оператора $(\mathbb{E}\hat{U}_F)'_0$. Полугруппа $\hat{W}_F$ порождается решениями задачи Коши для уравнения Колмогорова

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \hat{H}u, \qquad u|_{t=0} = u_0 \tag{9}$$

для произвольного $u_0 \in \mathcal{H}$, и где оператор $\hat{H}$ на области определения $(\mathbb{E}\hat{U}_F)'_0$ задается дифференциальным выражением

$$\hat{H} = \mathbb{E}(B^i{}_j x^j + \frac{1}{2}A^i{}_k A^k{}_j x^j + g^i)\partial_i + \frac{1}{2}\mathbb{E}\left(A^i{}_k A^j{}_l x^k x^l + 2A^i{}_k h^j x^k + h^i h^j\right)\partial_i\partial_j. \tag{10}$$

Теорема 1. Пусть задана случайная операторнозначная функция F вида (6), для которой выполнены условия A1-A6. Тогда последовательность усреднений итераций Фейнмана-Чернова сходится в топологии $C_s(\mathbb{R}_+,B(\mathcal{H}))$ к соответствующей усредняющей по Чернову полугруппе:

$$\mathbb{E}\hat{U}_{F_n(\frac{t}{n})\circ\ldots\circ F_1(\frac{t}{n})} \xrightarrow{\tau_s} \hat{W}_F(t). \qquad (11)$$

В *разделе 1.4* изучаются композиции независимых случайных операторнозначных функций со значениями в пространстве ограниченных операторов, действующих в $L_2(\mathbb{R})$, при этом рассматриваемые операторнозначные функции порождаются решениями случайных линейных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами на вещественной прямой. Также в этом разделе доказывается возможность построения сильно состоятельной статистической оценки для усредняющей полугруппы на основе конечной выборки для случайной операторнозначной функции.

Во **второй главе** предлагается новый алгоритм численной аппроксимации решений многомерного уравнения Колмогорова, основанный на усреднении итераций Фейнмана-Чернова для случайных операторнозначных функций. Предлагаемый алгоритм имеет меньшую вычислительную сложность по сравнению со стандартным Монте-Карло алгоритмом, использующим формулу Фейнмана-Каца, в случае когда значения усредняемых случайных операторнозначных функции принадлежат представлению какой-либо конечномерной группы Ли.

В *разделе 2.1* приводится общая постановка задачи и стандартный Монте-Карло алгоритмом, использующим формулу Фейнмана-Каца[2].

Пусть $\mathbb{R}^d$ – евклидово пространство конечной размерности d, $L_2(\mathbb{R}^d)$ – пространство квадратично интегрируемых функций. Рассмотрим задачу Коши

$$\partial_t u = Lu, \qquad t \in (0,T] \qquad (12)$$

$$u|_{t=0} = u_0, \qquad (13)$$

где $u_0 \in L_2(\mathbb{R}^d) \cap C^2(\mathbb{R}^d)$ – некоторое начальное условие, а

$$L = \mu^i(x)\partial_i + \frac{1}{2}D^{ij}(x)\partial_i\partial_j \qquad (14)$$

[2]Graham C., Talay D. Stochastic Simulation and Monte Carlo Methods. — Heidelberg: Springer Berlin, 2013. — 260 pp.

– дифференциальный оператор, задаваемый коэффициентами сноса $\mu : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ и диффузии $D = \sigma\sigma^T : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d\times d}$.

Рассмотрим также соответствующее стохастическое дифференциальное уравнение в форме Ито

$$dX = \mu dt + \sigma dW, \tag{15}$$

где W – стандартный винеровский процесс.

При выполнении достаточных условий задача Коши (12)-(13) имеет для произвольного $u_0 \in L_2(\mathbb{R}^d) \cap C^2(\mathbb{R}^d)$ единственное сильное решение $u(x,t) \in C^{2,1}(\mathbb{R}^d \times [0,T])$, а уравнение (15) с начальным условием $X(0) = x_0 \in \mathbb{R}^d$ имеет сильно единственное решение $X(t)$. При этом формула Фейнмана-Каца связывает эти два решения следующим образом

$$u(x,t) = \mathbb{E}(u_0(X(t))|X(0) = x). \tag{16}$$

Формула Фейнмана-Каца (16) позволяет получить численную оценку значения $u(x,t)$ для уравнения (12), применив метод Эйлера-Маруямы для моделирования случайного процесса $X(t)$ и метод Монте-Карло для статистической оценки математического ожидания. Соответствующий алгоритм (MCFK) является бессеточным и характеризуется вычислительной сложностью $O(NN_{iter}N_t)$, где N – число точек, в которых строится оценка, N_{iter} – число итераций метода Монте-Карло, а N_t – число шагов по времени в методе Эйлера-Маруямы.

В *разделе 2.2* численная аппроксимация решений задачи Коши (12)-(13) рассматривается с точки зрения теории сильно непрерывных полугрупп и описывается Монте-Карло алгоритм (MCFCh), основанный на применении итераций Фейнмана-Чернова для операторнозначных функций.

Если дифференциальный оператор L (14) является генератором сильно непрерывной полугруппы $e^{Lt} : \mathbb{R}_+ \to L_2(\mathbb{R}^d)$, тогда для произвольного начального условия $u_0 \in L_2(\mathbb{R}^d)$ слабое решение задачи Коши (12)-(13) представляется в виде:

$$u(x,t) = e^{Lt}u_0(x), \quad t \in [0,T]. \tag{17}$$

Пусть $\{F_k(t)\}, k \in \mathbb{N}$ – последовательность независимых одинаково распределенных случайных сильно непрерывных операторнозначных функций $\Omega \to C_s(\mathbb{R}_+,B(X))$, определенных на вероятностном пространстве $(\Omega,\mathcal{A},\mu)$. Пусть также средние $\mathbb{E}F_k(t) : \mathbb{R}_+ \to B(X)$ эквивалентны по Чернову полугруппе e^{Lt}. Тогда в силу теоремы Чернова конечная композиция операторов

$$\prod_{i=1}^{N} \mathbb{E}F_i\left(\frac{t}{N}\right) = \mathbb{E}\left(\prod_{i=1}^{N} F_i\left(\frac{t}{N}\right)\right) \tag{18}$$

при достаточно большом N может быть использована в качестве аппроксимации оператора e^{Lt}. Аппроксимация решения задачи Коши (12)-(13) $u(x,t)$ может быть получена с помощью метода Монте-Карло для оценки математического ожидания $\mathbb{E}\left(\prod_{i=1}^{N} F_i\left(\frac{t}{N}\right)\right) u_0$.

Предлагаемый алгоритм также является бессеточным. В общем случае вычислительная сложность метода также является $O(NN_{iter}N_t)$, где N – число точек, в которых строится оценка, N_{iter} – число итераций метода Монте-Карло, а N_t – число итераций Фейнмана-Чернова. Но в случае когда значения операторнозначных функции принадлежат представлению какой-либо конечномерной группы Ли вычислительная сложность может быть понижена до $O(N_{iter}(N_t + N))$, что является значительным преимуществом.

В *разделе 2.3* рассматривается усреднение по Чернову аффинных преобразований аргумента функций и соответствующие порождаемые уравнения Колмогорова. Для таких уравнений задача Коши (12)-(13) может быть численно решена алгоритмом MCFCh с вычислительной сложностью $O(N_{iter}(N_t + N))$.

В *разделе 2.4* приведены некоторые численные результаты, иллюстрирующие свойства рассматриваемых алгоритмов.

На рисунке 1 показаны зависимости времени выполнения алгоритмов MCFK и MCFCh для тестовой задачи при различных значениях числа Монте-Карло итераций и числа точек, в которых строится оценка. Полученные зависимости согласуются с теоретическими оценками сложности, в частности для алгоритма MCFK хорошо видно, что линии уровня являются гиперболами. При всех значениях параметров полученное среднее время выполнения алгоритма MCFK значительно больше, чем среднее время выполнения алгоритма MCFCh при сравнимых величинах ошибок.

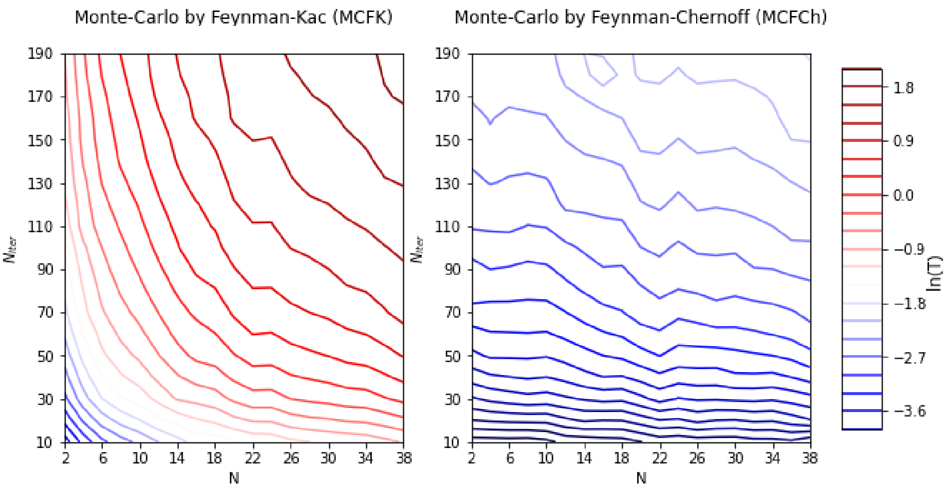

Рис. 1 — Времена выполнения алгоритмов MCFK и MCFCh в зависимости от числа Монте-Карло итераций и числа точек, в которых строится оценка.

В **третьей главе** исследуются усреднения итераций Фейнмана-Чернова случайных операторнозначных функций эволюции для квантовых систем. Рассматривается эволюция квантового осциллятора, которая задается композициями случайных аффинных преобразований фазового пространства, и диффузионный предел таких композиций в смысле итераций Фейнмана-Чернова. Приводится уравнение Фоккера-Планка для эволюции функции квазивероятностного распределения, определяющего оператор плотности смешанного состояния, и численно исследуется проблема декогеренции квантовых состояний в интерференционных экспериментах.

В *разделе 3.1* рассматриваются усреднения итераций Фейнмана-Чернова $e^{-i\hat{H}_n\frac{t}{n}}\circ\ldots\circ e^{-i\hat{H}_1\frac{t}{n}}$ операторнозначных функций эволюции для квантовой системы со случайным гамильтонианом вида

$$\hat{H}(t) = g(t)\hat{a}^+\hat{a} + f(t)\hat{a}^+ + \overline{f(t)}\hat{a} + h(t), \tag{19}$$

где $g(t)$ и $h(t)$ – вещественнозначные функции времени, $f(t)$ – комплекснозначная функция времени, $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ – операторы рождения и уничтожения. Эволюция векторов гильбертова пространства $\mathcal{H}$, отвечающих когерентным состояниям, при этом полностью описывается операторнозначной функцией со значениями в группе аффинных преобразований $\mathbb{R}^3$.

В *разделе 3.2* описано представление оператора эволюции для гамильтонианов вида (19) с помощью формулы Зассенхауса в виде композиции операторов, порождаемых аффинными преобразованиями накрытия фазового пространства.

В *разделе 3.3* рассматривается эволюция смешанного состояния для последовательности случайных гамильтонианов вида (19) и приводится в явном виде генератор предельной полугруппы.

В *разделе 3.4* проводится численное моделирование необратимой эволюции квантового состояния с учетом накопления общей фазы для схемы интерферометра Маха-Цендера с добавленным шумом.

В **четвертой главе** рассматривается задача приближения операторов сдвига для когерентных состояний с помощью итераций Чернова.

В *разделе 4.1* вводятся понятия и обсуждаются некоторые свойства когерентных состояний и операторов сдвига.

В *разделе 4.2* рассматривается усреднение случайных операторов сдвига с помощью итераций Фейнмана-Чернова.

В *разделе 4.3* рассматриваются случаи неканонических коммутационных соотношений, вводятся понятия двойственных по сдвигу лестничных операторов и приводится пример параметрического семейства неканонических коммутационных соотношений, при которых можно построить унитарные операторы сдвига, удовлетворяющие полугрупповому свойству на прямых в пространстве когерентных состояний, проходящих через начало координат.

Теорема 2. *Пусть для некоторого $\alpha \geq 0$ лестничные операторы задаются соотношениями*

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{\frac{n}{(1-\alpha)+\alpha n}}|n-1\rangle,\ \hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{1+\alpha n}}|n+1\rangle, \tag{20}$$

тогда двойственные по сдвигу лестничные операторы имеют вид:

$$\hat{b}|n\rangle = \sqrt{n((1-\alpha)+\alpha n)}|n-1\rangle,\ \hat{b}^{+}|n\rangle = \sqrt{(n+1)(1+\alpha n)}|n+1\rangle, \tag{21}$$

и оператор сдвига

$$\hat{D}_a(z) = e^{\left(z\hat{b}^{+}-\bar{z}\hat{b}\right)}, \forall z \in \mathbb{C}, \tag{22}$$

генерирует когерентное состояние $|\frac{-1+\sqrt{1+4\alpha|z|^2}}{2\alpha|z|^2}z\rangle_a$ *оператора уничтожения* $\hat{a}$*, является унитарным и удовлетворяет полугрупповому свойству на прямых, проходящих через начало координат.*

В *разделе 4.4* приведен алгоритм аппроксимации операторов сдвига с помощью итераций Чернова в случае произвольных коммутационных соотношений, а также результаты численного эксперимента по сравнению вычислительной эффективности предлагаемого алгоритма с другими известными методами вычисления операторов сдвига на усеченном гильбертовом пространстве.

Задача разбивается на два случая:

(i) Если лестничные операторы имеют вид (20), то операторы сдвига $\hat{D}_a(zt) = e^{\left(z\hat{b}^+ - \overline{z}\hat{b}\right)t}$ являются унитарным, удовлетворяет полугрупповому свойству по t, а их генераторы $\left(z\hat{b}^+ - \overline{z}\hat{b}\right)$ являются антиэрмитовыми и трехдиагональными. Заметим, что сюда входит случай канонических коммутационных соотношений.

(ii) Для общего же случая коммутационных соотношений будем строить аппроксимации неунитарных операторов сдвига $\exp\left(zt\hat{b}^+\right)$ или $\exp\left(z\hat{b}^+ - \overline{z}\hat{a}\right)t$. В этом случае операторы сдвига также удовлетворяют свойству $\hat{D}_a(z) = \hat{D}_a(zt) \circ \hat{D}_a(z(1-t))$ при $t \in (0,1)$, а генераторы являются трехдиагональными, но уже не антиэрмитовы.

В данном разделе описывается алгоритм аппроксимации оператора сдвига с помощью итераций Чернова (**Chernoff**). Алгоритм имеет линейную сложность по количеству измерений в усеченном гильбертовом пространстве и по числу используемых итераций Чернова. Заметим, что на вход алгоритму **Chernoff** может подаваться вектор произвольной размерности, в отличии от других алгоритмов, где приближение оператора сдвига сразу строится для фиксированной размерности усеченного гильбертова пространства.

В сравнительном анализе рассматриваются следующие программные реализации аппроксимации операторов сдвига на языке Python:

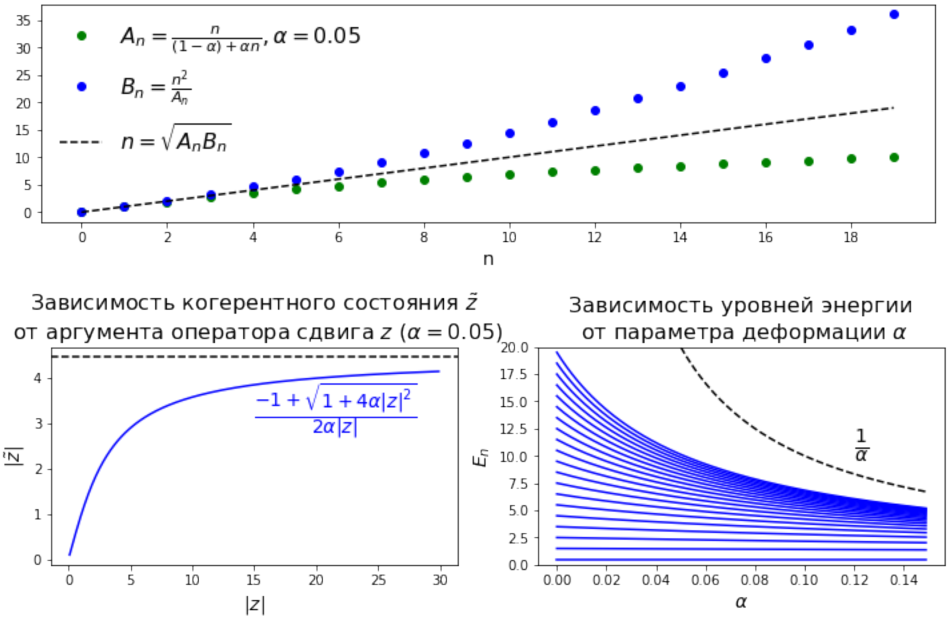

Рис. 2 — Последовательности A_n и $\frac{n^2}{A_n}$ для лестничных операторов (20) и (21) при $\alpha = 0.05$

1. **expm** – метод аппроксимации матричной экспоненты из пакета scipy[3,4];

2. **QuTiP** – метод аппроксимации классического оператора сдвига из достаточно популярного пакета для моделирования квантовых вычислений QuTiP (https://qutip.org/);

3. **Pade** – собственная реализация аппроксимации матричной экспоненты на основе метода, использующего аппроксимации Паде и принцип масштабирования и возведения в квадрат[3];

4. **eig** – нахождение матричной экспоненты с помощью диагонализации (может использоваться только для диагонализуемых операторов) на основе пакета scipy;

5. **triag** – нахождение матричной экспоненты с помощью эффективного алгоритма диагонализации трехдиагональной эрмитовой матрицы из пакета scipy (может использоваться только для эрмитовых матриц);

6. **triag_precalc** – оптимизированная версия метода **triag**, где часть предварительных вычислений делается заранее и не учитывается в подсчете времени выполнения;

[3] Al-Mohy A.H., Higham N.J. A New Scaling and Squaring Algorithm for the Matrix Exponential // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2009. — Vol. 31, no. 3. — Pp. 970–989.

[4] Higham N.J., Tisseur F. A Block Algorithm for Matrix 1-Norm Estimation, with an Application to 1-Norm Pseudospectra // S SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2000. — Vol. 21, no. 4. — Pp. 1185–1201.

7. **Chernoff** – алгоритм аппроксимации с помощью итераций Чернова.

Число итераций в методе Чернова выбиралось исходя из того, чтобы относительная ошибка на произвольном векторе не превосходила 10^{-4}. В качестве тестовой задачи бралось вычисление $\hat{D}_a(1+i)\,|(1+i)\sqrt{\#dim/10}\rangle$ для размерностей $\#dim$: [100,500,1000,2000].

Таблица 1 — Время работы алгоритмов для случая (1) в секундах в зависимости от размерности #dim усеченного гильбертова пространства

#dim	QuTiP	expm	Pade	eig	tridiag	tridiag_precalc	Chernoff
100	0.007	0.007	0.003	0.015	0.002	0.000	0.003
500	1.667	1.637	1.113	0.685	0.037	0.024	0.050
1000	11.77	12.38	6.75	3.49	0.19	0.15	0.18
2000	71.17	71.04	36.18	20.74	1.24	0.85	1.03

Заметим, что алгоритмы **tridiag** и **tridiag_precalc** неприменимы для задачи (2), так как в ней генераторы не являются эрмитовыми. Таким образом, метод приближенного вычисления операторов сдвига с помощью итераций Чернова может оказываться вычислительно эффективнее других методов в некоторых задачах моделирования квантовой динамики.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Сформулированы и доказаны достаточные условия сходимости последовательности усреднений итераций Фейнмана-Чернова для случайных аффинных преобразований аргумента к предельной сильно непрерывной полугруппе, разрешающей задачу Коши для соответствующего уравнения Фоккера-Планка.
2. Разработан алгоритм численной аппроксимации решений многомерных уравнений Колмогорова, порождаемых случайными аффинными преобразованиями аргумента.
3. Найдено однопараметрическое семейство операторов рождения и уничтожения, для которых операторнозначная функция сдвига является унитарной и удовлетворяет полугрупповому свойству на прямых, проходящих через начало координат.
4. Разработан и реализован в виде программного комплекса численный метод моделирования необратимой эволюции квантовых систем.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Kalmetev R.Sh., Orlov Yu.N., Sakbaev V.Zh.* Generalized Coherent States Representation // *Lobachevskii Journal of Mathematics.* — 2021. — Vol. 42, no. 11. — Pp. 2608–2614. — (WoS, Scopus, ВАК).

2. *Кальметьев Р.Ш., Орлов Ю.Н., Сакбаев В.Ж.* Итерации Чернова как метод усреднения случайных аффинных преобразований // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* — 2022. — Т. 62, № 6. — С. 1030–1041. — (WoS, Scopus, ВАК).

3. *Кальметьев Р.Ш., Орлов Ю.Н., Сакбаев В.Ж.* Усреднение случайных аффинных преобразований аргумента функций // *Уфимский математический журнал.* — 2023. — Т. 15, № 2. — С. 55–64. — (WoS, Scopus, ВАК).

4. *Kalmetev R.Sh., Orlov Yu.N., Sakbaev V.Zh.* Quantum Decoherence via Chernoff Averages // *Lobachevskii Journal of Mathematics.* — 2023. — Vol. 44, no. 6. — P. 2044–2050. — (WoS, Scopus, ВАК).

5. *Кальметьев Р.Ш.* Усреднение по Чернову линейных дифференциальных уравнений // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — 2023. — 12 стр. — (ВАК).

6. *Кальметьев Р.Ш.* Аппроксимация решений многомерного уравнения Колмогорова с помощью итераций Фейнмана-Чернова // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — 2023. — 15 стр. — (ВАК).

7. *Кальметьев Р.Ш.* Об операторах сдвига для обобщенных когерентных состояний // Труды Математического центра имени Н.И. Лобачевского. — 2021. — 61. — С. 51–54.

8. *Kalmetev R.Sh.* Quantum decoherence via Chernoff averages // International Online Conference «One-Parameter Semigroups of Operators 2023». — 2023. — Pp. 48-49.

Подписано в печать 27.12.2023. Заказ № А-9.
Формат 60x90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 90 экз.
ИПМ им.М.В.Келдыша РАН. 125047, Москва, Миусская пл., 4