ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию
Кальметьева Рустема Шайнуровича
«Метод итераций Фейнмана–Чернова аппроксимации полугрупп»,
представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 1.1.6. – вычислительная математика.

В диссертационной работе Рустема Шайнуровича Кальметьева развивается подход к представлению решений дифференциальных уравнений через итерации Фейнмана–Чернова. В России это направление активно развивается и представлено в работах О. Г. Смолянова, Ю. Н. Орлова, В. Ж. Сакбаева и других.

Ввиду большого количества работ по этому направлению важно понять, в чем состоит новизна представленной к защите диссертационной работы. Насколько мне удалось понять, здесь можно выделить два основных пункта.

Во-первых, автор диссертационной работы подробно рассматривает частный класс случайных полугрупп, посредством итераций Фейнмана–Чернова которых осуществляется представление решений уравнений в частных производных диффузионного типа, а также линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Речь идет о случайных операторнозначных функциях, порождаемых аффинными преобразованиями аргумента в конечномерном евклидовом пространстве. Решение соответствующих дифференциальных уравнений выражается тогда как математическое ожидание от итераций Фейнмана–Чернова. Ключевым результатом здесь служит теорема 1.3.1 главы 1. Также в главе 1 рассматривается множество примеров и частных случаев утверждения теоремы.

Во-вторых, основная новизна работы, на мой взгляд, – на основе метода итераций Фейнмана–Чернова разработан и протестирован численный метод решения уравнений Колмогорова, чему посвящена глава 2. Этот метод стохастический, относится к классу методов Монте-Карло, как и известный метод Фейнмана–Каца. Автор подчеркивает, что применение детерминированных сеточных алгоритмов становится невозможным в задачах больших размерностей. Показано, что численный метод на основе итераций Фейнмана–Чернова имеет в общем случае такую же сложность, как и метод Фейнмана–Каца, а при определенных условиях (когда значения операторнозначной функции принадлежат представлению какой-либо конечномерной группы Ли) имеет меньшую сложность. При этом проведенные численные эксперименты показывают, что при одинаковом числе итераций разработанный метод дает более точные результаты. Доведение абстрактных математических теорем до конкретной реализованной программы для компьютера – большое достоинство работы и составляет, на мой взгляд, её главный результат.

Главы 3 и 4 диссертации посвящены применению метода итераций Фейнмана–Чернова к задачам квантовой теории. А именно, в главе 3 рассматривается необратимая динамика квантовых когерентных состояний при случайных внешних воздействиях. В главе 4 рассматриваются приближения оператора смещения для неканонических коммутационных соотношений. В отличие от хорошо известного случая канонических коммутационных соотношений операторы смещения в общем случае неунитарны и поэтому не могут быть представлены как оператор эволюции замкнутой квантовой системы. Однако доказано существование параметрического семейства неканонических коммутационных соотношений, для которых операторы смещения унитарны и потому к ним удается применить аппарат итераций Фейнмана–Чернова для численного приближения операторов смещения. Этот метод также был доведен до конкретного реализованного алгоритма, который был протестирован и сравнен с алгоритмами, реализованными в популярных математических программных пакетах. Результаты (в частности, представленные на рисунке 4.5) показали, что разработанный алгоритма выигрывает в плане времени выполнения при переходе к задачам больших размерностей.

Таким образом, диссертация представляет собой завершенное и целостное исследование, в центре которого находится метод итераций Фейнмана–Чернова.

Разработка численных методов решения уравнений диффузии и расчета квантовой динамики, в особенности для задач больших размерностей – актуальная задача на современном этапе развития науки и вычислительной техники, когда прогресс в ряде наук (физика, химия, материаловедение) связан с объемными вычислениями. Возможно, в этих науках стоит поискать задачи, в которых можно было бы применить разработанный численный алгоритм решения уравнений диффузионного типа.

Все математические результаты диссертации сформулированы в виде теорем и строго доказаны, все результаты, связанные с численными экспериментами, в достаточной мере обоснованы. В математической части работы автор диссертации продемонстрировал высокий уровень математической культуры и высокий уровень владения функциональным анализом и теорией случайных процессов. В компьютерной части работы автор продемонстрировал высокий уровень владения популярными языками программирования и математическими программными пакетами. Ещё раз здесь отмечу такое несомненное достоинство работы, как совмещение абстрактных математических методов и методов программирования.

Таким образом, диссертация Р. Ш. Кальметьева является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи аппроксимации сильно непрерывных полугрупп с помощью итераций

Фейнмана–Чернова, имеющей значение для развития вычислительной математики. Результаты диссертации являются новыми и получены соискателем самостоятельно. Диссертация дает полное представление о разработанном автором методе. Текст диссертации написан качественно. Приведенные примеры показывают, что этот метод может быть весьма плодотворно применен на практике. Работа содержит обоснованные, корректно доказанные математические результаты и подробно описанные численные алгоритмы.

В качестве замечаний можно отметить следующее:

1. Как отмечено в начале, тематика, связанная с представлением решений эволюционных уравнений через итерации Фейнмана–Чернова, активно представлена в России и за рубежом во множестве работ и ранее защищенных кандидатских и докторских диссертаций. Поэтому во вводной части не хватает обзора того, какие результаты были здесь получены и какие вопросы остаются открытыми. Такой обзор позволил бы лучше понять, в чем состоит новизна результатов первой главы. К сожалению, автор ограничивается фразой во введении: «О современном состоянии исследований в данной области можно судить по статьям [8–27] и обзорам [28–31], а также ссылкам в этих работах».

2. Одно из положений, выносимых на защиту, сформулировано следующим образом: «Разработан и реализован в виде программного комплекса численный метод моделирования необратимой эволюции квантовых систем». Такая формулировка представляется слишком общей. Из этой формулировки можно сдедать вывод, что разработан численный метод моделирования необратимой эволюции квантовых систем достаточно общего вида, тогда как на самом деле в главе 3 речь идет об очень частной модели.

3. В начале второй главы говорится, что использование сеточных алгоритмов становится практически невозможным для задач достаточно больших размерностей. Здесь хорошо было бы указать, начиная с каких размерностей в

настоящее время применение сеточных методов становится практически невозможным и какие характерные размерности задач, которые приходится решать в различных науках или прикладной сфере.

4. Один из ключевых результатов работы – это меньшая вычислительная сложность предложенного алгоритма решения уравнения Колмогорова по сравнению с методом Фейнмана–Каца в случае, когда значения операторнозначной функции принадлежат представлению какой-либо конечномерной группы Ли. Однако объясняется это только на словах: «Возможность уменьшения сложности возникает здесь из-за того, что операторы A_k в алгоритме MCFCh в этом случае однозначно восстанавливаются из элемента порождающей группы, и для вычисления $A_k u_0(x)$ во втором внутреннем цикле не требуется вычислений всех промежуточных шагов для каждой целевой точки». Ввиду важности этого результата стоило пояснить этот пункт подробнее: привести конкретную формулу восстановления и описание соответствующего улучшенного алгоритма.

5. На графиках на рисунках 2.1–2.3, иллюстрирующих преимущества предложенного численного алгоритма, не указано, что отложено по оси абсцисс (мне также не удалось найти этой информации и в тексте).

6. Во вводной части главы 3 говорится, что, среди прочего, будет приведено уравнение Фоккера–Планка для эволюции функции квазивероятностного распределения. Однако в последующем тексте главы уравнение Фоккера–Планка не упоминается. По-видимому, речь идет об уравнении (3.33), но необходимо было после этого уравнения явно написать, что это и есть искомое уравнение Фоккера–Планка.

7. Перед формулой (3.20) написано: «Пусть начальное состояние системы задается оператором плотности, определенным с помощью некоторой функции квазивероятностного распределения [92] (например, функции Вигнера, Q-функции

Хушими или P-функции Глаубера–Сударшана)». Однако в формуле (3.20) приведено вполне конкретное квазивероятностное представление из этого списка – P-представление Глаубера–Сударшана.

8. Наконец, согласно правилам русского языка в написании терминов, образованных соединением разных имен собственных («итерации Фейнмана–Чернова», «уравнение Фоккера–Планка» и т.п.), между именами следует использовать не дефис, а тире.

Перечисленные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы Р. Ш. Кальметьева. Все результаты диссертации полно представлены в публикациях соискателя и правильно отражены в автореферате.

Диссертационная работа «Метод итераций Фейнмана–Чернова аппроксимации полугрупп» отвечает всем требованиям Положения ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор Рустем Шайнурович Кальметьев заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.6. – вычислительная математика.

Официальный оппонент:
Трушечкин Антон Сергеевич,
д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник отдела математической физики,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук,
119991, г. Москва, ул. Губкина, д. 8.
Телефон: +7 (495) 984 81 41 * 36 62, E-mail: trushechkin@mi-ras.ru

«06» февраля 2024 г.
А. С. Трушечкин

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ
ВЕДУЩИЙ СПЕЦИАЛИСТ
О.О. ТИТОВА