ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА
2024. Т. 55, вып. 3. С. 521–526

НОВАЯ МАТЕМАТИКА — ДВИЖУЩАЯ СИЛА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ НАУК

А. В. Богданов *, *А. Б. Дегтярев*, *В. В. Мареев*

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Анализируется ситуация с применением квантовых компьютеров, и делается вывод о необходимости развития квантовых вычислений безотносительно к развитию соответствующей вычислительной базы. Особо выделяется роль новой математики, связанной с функциональными интегралами, как средства для квантовых вычислений. Описаны проблемы фейнмановской формулировки, и показано, как построить подход, позволяющий генерировать квантовые алгоритмы. Указаны перспективы такого подхода для создания качественной теории дифференциальных уравнений в частных производных.

The situation with the applications of quantum computers is analyzed and a conclusion is made about the need to develop quantum computing regardless of the development of the corresponding computing base. Particularly highlighted is the role of new mathematics associated with functional integrals as a means for quantum computing. The problems of the Feynman formulation are described and it is shown how to construct an approach that allows the generation of quantum algorithms. The prospects of this approach for creating a qualitative theory of partial differential equations are indicated.

PACS: 89.20.Ff; 07.05.Tp

ВВЕДЕНИЕ

Проблемы классических вычислительных архитектур хорошо известны [1], и активные попытки найти их решение как с использованием графических ускорителей, так и с переходом на оптические коммуникаторы пока не очень впечатляют. Большие надежды были связаны с созданием квантовых компьютеров и формулировкой quantum supremacy, особенно в элегантной формулировке Р. Фейнмана: «Nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy» [2]. Однако, несмотря на значительные достижения в разработке и создании квантовых систем [3], ситуация далека от успешной, и новые компьютеры, скорее, работают как аналоговые системы. Более того, видимо, есть фундаментальное ограничение, связанное

* E-mail: a.v.bogdanov@spbu.ru

c Church–Turing thesis: "Any computational problem that can be solved by a classical computer can also be solved by a quantum computer. Conversely, any problem that can be solved by a quantum computer can also be solved by a classical computer, at least in principle given enough time" [4]. Проблемы совершенно очевидно связаны с необходимостью проводить измерения после каждого этапа вычислений, что превращает кубит в бит, и гигантские ускорения оказываются возможны, только если квантовая вычислительная система является полным аналогом изучаемой.

МАТЕМАТИКА КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Нам представляется, что указанные проблемы не являются основанием для отказа от квантовых вычислений в принципе, а их, наоборот, нужно интенсивно развивать для поиска высокопроизводительных алгоритмов на эмуляторах квантовых систем. Особенно многообещающе выглядит использование новой математики — функционального интегрирования, интенсивно разрабатываемого именно для квантовых систем, но применяемого для вычислительных проблем только с точки зрения приближенных (асимптотических) методов [5]. Каноническое представление для функции Грина в виде функционального интеграла было предложено Р. Фейнманом [6]:

$$G\left(q,t:q',t'\right)=\int D\Gamma\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t'}^{t}L(\dot q\left(\tau\right),q(\tau))\,d\tau\right\}, \tag{1}$$

где $D\Gamma$ — это «сумма по всем траекториям, соединяющим q' и q». Эта формулировка связана с тем, что исходная формула, компактная запись которой дана в работе [2],

$$\begin{aligned}G=\lim_{N\to\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\cdots\int\limits_{-\infty}^{\infty}\prod_{k=1}^{N-1}\Bigg\{dq_k\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m\left(q_k-q_{k-1}\right)}{2\Delta t}-\right.\right.\\ \left.\left.-\Delta tV\left(\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right)\right]\Bigg\}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\times\\ \times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m\left(q_N-q_{N-1}\right)}{2\Delta t}-\Delta tV\left(\frac{q_{N-1}+q_N}{2}\right)\right]\right\}\end{aligned} \tag{2}$$

не допускает строгого определения указанного в ней предельного перехода из-за стремления Δt к нулю в знаменателе, а требует дополнительной интерпретации. Фейнман и сам это понимал, поэтому предложил использовать тождество

$$\sqrt{\frac{2\pi i\hbar m}{\Delta t}}=\int d\widetilde{p}_k\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2m}\left[\widetilde{p}_k-\frac{m}{\Delta t}\left(q_N-q_{N-1}\right)\right]^2\right\},$$

чтобы исключить Δt в знаменателях и перейти к формулировке

$$G(q,t:q',t') = \int D\Gamma \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int\limits_{q'}^{q} p(\tau)\,dq(\tau) - \frac{i}{\hbar} \int\limits_{t'}^{t} H(p(\tau), q(\tau))\,d\tau \right\}, \quad (3)$$

где $D\Gamma$ означает сумму по путям, но уже в фазовом пространстве. Эта ситуация не столь проста. Дело в том, что в формуле (2) после указанной подстановки будет разное количество интегралов по q и p, поэтому формулу можно понимать только символически. Решение этой проблемы было дано в знаменитой статье Л. Д. Фаддеева и В. Н. Попова [7], и результат можно представить как

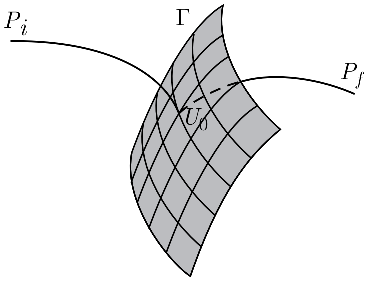
$$G(q,t:q',t') = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\widetilde{p}_{k_0}}{2\pi\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\widetilde{p}_{k_0+1}}{2\pi\hbar} 2\pi\hbar\delta\left(d\widetilde{p}_{k_0+1} - d\widetilde{p}_{k_0}\right) \int \partial\widetilde{D\Gamma} \times$$
$$\times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar}\left[-\int\limits_{p'}^{\widetilde{p}_{k_0}} q\,dp - E't' + E_0^{(1)}\left(t_{k_0} - \Delta t\right) - \int\limits_{t'}^{t_{k_0}-\Delta t} H(p,q)\,d\tau \right]\right\} \times$$
$$\times \int \widetilde{D\Gamma} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar}\left[-\int\limits_{\widetilde{p}_{k_0+1}}^{p} q\,dp - E_0^{(2)}\left(t_{k_0} + \Delta t\right) + Et - \int\limits_{t_{k_0}+\Delta t}^{t} H(p,q)\,d\tau \right]\right\},$$

где знак $(\sim)$ означает, что путь в фазовом пространстве соединяет точки с фиксированной координатой и фиксированным импульсом. При сравнении этого выражения с формулой (3) видно, что предельный переход уже осмыслен. Впрочем, в ряде работ корректность определения $G(q,t:q',t')$ была показана и напрямую (см., например, [8]).

НОВЫЙ ПОДХОД К ЭФФЕКТИВНЫМ КВАНТОВЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ

Физический смысл указанного преобразования очень важен (рисунок). Весь переход делится на две части, разделенные гиперповерхностью Г. По точкам гиперповерхности проводится обычное интегрирование, а под интегралом стоят два усеченных пропагатора в смешанном представлении. Проще всего с ними разобраться в подходе, развитом одним из соавторов [8]. Поскольку в фазовом пространстве возможны канонические преобразования с единичным детерминантом [9], делаем преобразование $(p,q) \to (Q,V)$ с генератором преобразования F:

$$H(P,X) \to H(Q,Y) = H\left(q, \frac{\partial F_1}{\partial t}\right) + \left.\frac{\partial F_1}{\partial t}\right|_{Q,Y}. \quad (4)$$



Обобщенные параметры воздействия гиперсферы и ветви траектории частиц: Г — обобщенные параметры удара на гиперповерхности; P_i — траектория входящей ветви; P_f — траектория исходящей ветви; U_0 — точка вычисления функции Грина

Далее вычисления очень просты. Потребуем, чтобы преобразованный H обращался в нуль, откуда для генератора получается уравнение в частных производных первого порядка (оно находится из (4) обращением в нуль левой части). Тогда каждый из усеченных функциональных интегралов обращается в функциональную дельта-функцию и вычисляется напрямую.

Результат имеет вид

$$G\left(P_i \to P_f\right) = \int dX_0\, C\delta\left(X_0 P_0\right) \exp\left\{i/h\left(P_f X_f - P_i X_i\right) + i/hF_1\big|_* + \right.$$
$$\left. + i/hF_1\big|_* + i/hQ_i\left(Y_0 - Y_i\right) + i/hQ_f(Y_f - Y_0),\right.$$

где

$$F_1 :\ H\left(X, \frac{\partial F_1}{\partial x}\right) = E$$

и символ $(*)$ означает, что в F необходимо поставить значения фазовых координат соответствующей ветви.

С точки зрения создания высокопроизводительных алгоритмов результат почти идеален. Мы имеем многомерный интеграл с размерностью на единицу меньше размерности пространства, а под интегралом независимо в каждой точке решается набор дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка (двух для действительных траекторий и четырех для комплексных). Поскольку решение таких уравнений эквивалентно в методе характеристик решению набора обыкновенных дифференциальных уравнений, предложенный алгоритм удивительно подходит для современных вычислительных комплексов с мощными CPU с большой оперативной памятью и связанными с ними GPGPU с тысячами ядер. Конечно, для эффективных вычислений требуется применение виртуализации и создание виртуального комплекса, адаптированного под алгоритм [10].

Следует обратить внимание на особую роль гиперповерхности Г (см. рисунок) с точки зрения организации расчетов квантовых систем.

Очевидные ее достоинства:

1) возможность перехода к другим координатам в процессах перестройки;

2) возможность локализации квантового скачка в процессах возбуждения;

3) возможность движения этой гиперповерхности для упрощения расчетов.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ПРЕИМУЩЕСТВА НОВОГО ПОДХОДА

Обратим дополнительно внимание на возможности предложенного представления для предварительного анализа пропагаторов. Поскольку задача сводится к расчету многомерных интегралов, а зависимость интеграла от параметров определяется поведением подынтегральной функции, возможно привлечение теории катастроф для изучения этой зависимости [11]. Эффективное представление о поведении этих интегралов основано на результатах анализа динамики критических точек подынтегрального выражения и использования специальных функций для аппроксимации канонических интегралов теории катастроф [11]. Отметим еще большую работу по получению функциональных представлений для большого количества дифференциальных уравнений в частных производных (включая нелинейные) [12]. Предлагаемый подход, таким образом, может служить основой для построения качественной теории дифференциальных уравнений в частных производных.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предлагается новый подход к построению эффективных вычислительных алгоритмов на основе идеи квантовых вычислений. Нам представляется, что полученные на его основе параллельные алгоритмы очевидным образом подходят для адаптации к современным вычислительным архитектурам. В качестве приложения можно указать и эффективный подход для качественного анализа решений дифференциальных уравнений в частных производных.

Работа выполнена при поддержке Центра искусственного интеллекта Санкт-Петербургского государственного университета (грант ID: 94062114).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Degtyarev A., Bogdanov A., Korkhov V.* Desktop Supercomputer: What Can It Do? // Phys. Part. Nucl. Lett. 2017. V. 14, No. 7. P. 985–992.
2. *Feynman R.* Simulating Physics with Computers // Intern. J. Theor. Phys. 1982. V. 21. P. 467–488.

3. *Nandhini S., Harpreet S., Akash U. N.* An Extensive Review on Quantum Computers // Adv. Engin. Software. 2022. V. 174. P. 103337.
4. *Soare R. I.* Turing Oracle Machines, Online Computing, and Three Displacements in Computability Theory // Ann. Pure Appl. Logic. 2009. V. 160, No. 3. P. 368–399.
5. *Рамон П.* Теория поля: современный вводный курс. М.: Мир, 1984.
6. *Фейман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968.
7. *Фаддеев Л. Д., Попов В. Н.* Ковариантное квантование гравитационного поля // УФН. 1973. Вып. 111, № 3. С. 427–450.
8. *Богданов А. В.* Вычисление амплитуды неупругого квантово-механического рассеяния через решения классических динамических задач // ЖТФ. 1986. Т. 56, № 7. С. 1409–1411.
9. *тер Хаар Д.* Основы гамильтоновой механики. М.: Наука, 1974.
10. *Gankevich I., Korkhov V., Balyan S., Gaiduchok V., Gushchanskiy D., Tipikin Yu., Degtyarev A., Bogdanov A.* Constructing Virtual Private Supercomputer Using Virtualization and Cloud Technologies // LNCS. 2014. V. 8584. P. 341–354.
11. *Постон Т., Стюарт И.* Теория катастроф и ее приложения. М.: Мир, 1980.
12. *Маслов В. П.* Комплексные марковские цепи и континуальный интеграл Фейнмана (для нелинейных уравнений). М.: Наука, 1976.