Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 4. Уравнение ГКСЛ в представлении Гейзенберга. Кинетическое уравнение Паули и его свойства

Теретёнков Александр Евгеньевич

4 октября 2022 г.

В прошлой серии...

$$\mathcal{L}(\rho) = -i[H, \rho] + \sum_j \left(C_j \rho C_j^\dagger - \frac{1}{2}\{C_j^\dagger C_j, \rho\} \right)$$

Сопряжённый генератор

$$\mathcal{L}^*(X) = i[H, X] + \sum_j \left(C_j^\dagger X C_j - \frac{1}{2}\{C_j^\dagger C_j, X\} \right)$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Свойства 1–2 для сопряжённого генератора:

1. $\mathcal{L}^*(X^\dagger) = (\mathcal{L}^*(X))^\dagger$
2. $\mathcal{L}^*(I) = 0$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Решение уравнения ГКСЛ имеет вид

$$\rho_t = e^{\mathcal{L}t}\rho_0,$$

где отображение $\Phi_t = e^{\mathcal{L}t}$ удовлетворяет условию 1-параметрической полугруппы

$$\Phi_{t+s} = \Phi_t \Phi_s.$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Произвольную матрицу можно привести к жордановой форме.

$$J_n(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

Отметим, что $J_n(\lambda) = \lambda I_n + J_n(0)$ и $J_n(0)^n = 0$ — нильпотентна.

$$e^{J_n(\lambda)t} = e^{\lambda t} \sum_{k=0}^{n-1} J_n(0)^k \frac{t^k}{k!}, \qquad J_n(0)^0 \equiv I_n.$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Супероператор (пусть $X = X^\dagger$)

$$\langle X \rangle_t = \operatorname{Tr} X e^{\mathcal{L}t}(\rho_0) = \operatorname{Tr} e^{\mathcal{L}^* t}(X)\rho_0$$

Определим динамику наблюдаемых в представлении Гейзенберга:

$$X_t \equiv e^{\mathcal{L}^* t}(X)$$

$$\langle X \rangle_t = \operatorname{Tr} X_t \rho_0$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Уравнения Гейзенберга

$$\frac{d}{dt} X_t = \mathcal{L}^*(X_t)$$

— бесполезны, в реальности решаются уравнения

$$\frac{d}{dt} X_t = (\mathcal{L}^*(X))_t$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Существенное отличие от унитарной динамики:

$$(XY)_t \neq X_t Y_t$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

В унитарном случае $e^{i[H,\,\cdot\,]t} = e^{iHt} \cdot e^{-iHt}$

$$(XY)_t = e^{iHt} XY e^{-iHt} = e^{iHt} X e^{-iHt} e^{iHt} Y e^{-iHt} = X_t Y_t$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

В унитарном случае $e^{i[H,\,\cdot\,]t} = e^{iHt} \cdot e^{-iHt}$

$$(XY)_t = e^{iHt} XY e^{-iHt} = e^{iHt} X e^{-iHt} e^{iHt} Y e^{-iHt} = X_t Y_t$$

Утверждение. $\Phi : \mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{C}^{n\times n}$ — линейное, невырожденное и $\Phi(XY) = \Phi(X)\Phi(Y)$, то $\Phi(X) = LXL^{-1}$.
Если дополнительно потребовать $\Phi(X^\dagger) = \Phi(X)^\dagger$, то получим $\Phi(X) = UXU^\dagger$, $UU^\dagger = I_n$.

Кинетическое уравнение Паули. Классические Марковские цепи с непрерывным временем

$p_k(t) \equiv \rho_{kk}(t)$.

$$\frac{d}{dt} p_k(t) = \sum_j \gamma_{kj} p_j(t) - \left(\sum_i \gamma_{ik} \right) p_k(t)$$

Составим из компонент p_k вектор p. Условие нормировки $\sum_k p_k = 1$ можно переписать как $e^T p = 1$, где введён вектор

$$e = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Кинетическое уравнение Паули. Классические Марковские цепи с непрерывным временем

Перепишем кинетическое уравнение Паули

$$\frac{d}{dt}p = \gamma p - \gamma^T e \circ p,$$

где $\circ$ — поэлементное произведение n-векторов. γ — произвольная матрица с неотрицательными элементами.
Точно также уравнение ГКСЛ можно записать в виде:

$$\frac{d}{dt}\rho_t = -i[H, \rho_t] + \Psi(\rho_t) - \frac{1}{2}\{\Psi^*(I), \rho_t\},$$

где

$$\Psi(\rho) = \sum_j C_j \rho C_j^\dagger$$

— вполне положительное отображение (но не сохраняющее след).

Кинетическое уравнение Паули. Классические Марковские цепи с непрерывным временем

С другой стороны уравнение Паули имеет вид

$$\frac{d}{dt}p(t) = Lp(t),$$

Его решение

$$p(t) = P(t)p(0),$$

где $P(t) = e^{Lt}$ — стохастическая матрица, то есть это матрица с неотрицательным коэффициентами и $e^T P(t) = e^T$ ($\sum_i P_{ij}(t) = 1$). (Часто это определение транспонируют.)

Классические относительная энтропия и её монотонность

Расстояние Кульбака — Лейблера (относительная энтропия)

$$S(p||q) = \sum_i p_i \ln \frac{p_i}{q_i}$$

Более строго

$$S(p||q) = \begin{cases} \sum_{i:p_i \neq 0} p_i \ln \frac{p_i}{q_i}, & \operatorname{supp} p \subseteq \operatorname{supp} q \\ +\infty \end{cases}$$

Классические относительная энтропия и её монотонность

Почему расстояние?

$$S(p||q) \geqslant 0$$

причём равенство выполнено тогда и только тогда, когда $p = q$.

Классические относительная энтропия и её монотонность

Почему расстояние?

$$S(p||q) \geqslant 0$$

причём равенство выполнено тогда и только тогда, когда $p = q$. Для простоты ограничимся случаем $q_i > 0, p_i > 0$ и проверим только неравенство. Так как $\ln x \leqslant x - 1$ при $x > 0$, то

$$\sum_i p_i \ln \frac{p_i}{q_i} = -\sum_i p_i \ln \frac{q_i}{p_i} \geqslant$$

$$\geqslant -\sum_i p_i \left(\frac{q_i}{p_i} - 1 \right) = -\sum_i q_i + \sum_i p_i = 1 - 1 = 0$$

Утверждение. Пусть P — стохастическая матрица, тогда

$$S(Pp||Pq) \leqslant S(p||q)$$

Утверждение. Пусть P — стохастическая матрица, тогда

$$S(Pp||Pq) \leqslant S(p||q)$$

Доказательство.

$$S(Pp||Pq) - S(p||q) =$$

$$= \sum_{ij} P_{ij} p_j \ln \frac{\sum_k P_{ik} p_k}{\sum_k P_{ik} q_k} - \sum_j p_j \underbrace{}_{1=\sum_i P_{ij}} \ln \frac{p_j}{q_j} =$$

$$= \sum_{ij} P_{ij} p_j \left(\ln \frac{\sum_k P_{ik} p_k}{\sum_k P_{ik} q_k} - \ln \frac{p_j}{q_j} \right) = - \sum_{ij} P_{ij} p_j \ln \frac{p_j \sum_k P_{ik} q_k}{q_j \sum_k P_{ik} p_k} =$$

$$= - \sum_{ij} P_{ij} p_j \ln \frac{P_{ij} p_j \sum_k P_{ik} q_k}{P_{ij} q_j \sum_k P_{ik} p_k}$$

$$S(Pp||Pq) - S(p||q) = -\sum_{ij} P_{ij} p_j \ln \frac{P_{ij} p_j \sum_k P_{ik} q_k}{P_{ij} q_j \sum_k P_{ik} p_k}$$

$$p_j^{(i)} = \frac{P_{ij} p_j}{\sum_k P_{ik} p_k}, \qquad q_j^{(i)} = \frac{P_{ij} q_j}{\sum_k P_{ik} q_k}, \qquad p_i' = \sum_k P_{ik} p_k$$

$$p_j^{(i)} \geqslant 0, \ \sum_j p_j^{(i)} = 1, \qquad q_j^{(i)} \geqslant 0, \ \sum_j q_j^{(i)} = 1, \qquad \forall i$$

$$S(Pp||Pq) - S(p||q) = -\sum_{ij} p_i' p_j^{(i)} \ln \frac{p_j^{(i)}}{q_j^{(i)}} = -\sum_i p_i' S(p^{(i)}||q^{(i)}) \leqslant 0 \qquad \square$$

Физическая интерпретация

Пусть P — неприводимая стохастическая матрица, представим $(p_{\text{st}})_i = \frac{e^{-\beta\varepsilon_i}}{Z}, Z = \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}$.

$$S(p||p_{\text{st}}) = \sum_i p_i \ln p_i - \sum_i p_i \ln(p_{\text{st}})_i = -S(p) + \beta \underbrace{\sum_i p_i\varepsilon_i}_{\mathcal{E}} + \ln Z =$$

$$= \beta(\mathcal{E}(p) - TS(p) + T\ln Z) = \beta(F_p - F_{\text{eq}})$$

Таким образом, мы получили отклонение значения свободной энергии от равновесного значения. При марковской динамики оно монотонно убывает.

Некоторые обобщения

Относительные энтропии Реньи:

$$S_\alpha(p||q) = \frac{1}{\alpha - 1} \ln \sum_{i=1}^{n} p_i^\alpha q_i^{1-\alpha}$$

Утверждение. Пусть P — стохастическая матрица, тогда

$$S_\alpha(Pp||Pq) \leqslant S_\alpha(p||q), \qquad \alpha \in [0, +\infty]$$

"Представление Гейзенберга" для классических марковских цепей

Отметим, что если x_k — вещественная функция от k ("наблюдаемая"), то ей тоже можно сопоставить вектор $x \in \mathbb{R}^n$, тогда

$$\mathbb{E}x_\xi = \sum_i x_i (p)_i = x^T p, \qquad (p)_i = \mathbb{P}(\xi = i)$$

''Представление Гейзенберга'' для классических марковских цепей

Отметим, что если x_k — вещественная функция от k (''наблюдаемая''), то ей тоже можно сопоставить вектор $x \in \mathbb{R}^n$, тогда

$$\mathbb{E}x_\xi = \sum_i x_i (p)_i = x^T p, \qquad (p)_i = \mathbb{P}(\xi = i)$$

В частности,

$$\mathbb{E}1 = 1 = \sum_i p_i = e^T p$$

''Представление Гейзенберга'' для классических марковских цепей

Отметим, что если x_k — вещественная функция от k (''наблюдаемая''), то ей тоже можно сопоставить вектор $x \in \mathbb{R}^n$, тогда

$$\mathbb{E}x_\xi = \sum_i x_i (p)_i = x^T p, \qquad (p)_i = \mathbb{P}(\xi = i)$$

В частности,

$$\mathbb{E}1 = 1 = \sum_i p_i = e^T p$$

Можно перенести эволюцию распределения вероятностей на наблюдаемые:

$$\mathbb{E}x_{\xi(t)} = x^T p_t = x^T P_t p_0 = (P_t^T x)^T p_0 = x(t)^T p_0 = \mathbb{E}x_{\xi(0)}(t)$$

где $x(t) = (P_t)^T x$ — сопряжённая эволюция наблюдаемых.

Корреляционные функции в случае классических марковских цепей

Классическая марковская цепь задаётся

$$\mathbb{P}(\xi_t = k|\xi_s = m) = (P_{t-s})_{km}, \qquad t \geqslant s$$
$$\mathbb{P}(\xi_0 = m) = (p_0)_m$$

Отсюда следует

$$p_t = P_t p_0$$

(где $\mathbb{P}(\xi_t = m) = (p_t)_m$) и полугпповое свойство

$$P_t P_s = P_{t+s}, \forall t \geqslant, s \geqslant 0 \qquad P_0 = I$$

Упражнение. Проверить.