Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 12. Локальное по времени кинетическое уравнение. Кумулянты Кубо — ван Кампена

Теретёнков Александр Евгеньевич

25 апреля 2023 г.

В прошлый раз...

Теорема 1 (Метод устранения временной свёртки)

$$\frac{d}{dt}\rho_t = \lambda \mathcal{L}_t \rho_t.$$

Тогда

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \mathcal{K}(t)\mathcal{P}\rho_t + \mathcal{I}(t)\mathcal{Q}\rho_{t_0},$$

где $\mathcal{Q} = I - \mathcal{P}$*,*

$$\mathcal{K}(t) \equiv \left(\frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P}\right)(\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P})^{(-1)},$$

$$\mathcal{I}(t) \equiv \frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{Q} - \mathcal{K}(t)\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{Q},$$

где $\mathcal{U}_{t_0}^t$ *— решение задачи Коши* $\frac{d}{dt}\mathcal{U}_{t_0}^t = \lambda\mathcal{L}_t\mathcal{U}_{t_0}^t, \mathcal{U}_{t_0}^{t_0} = I$*, при достаточно малых* t *или* λ*.*

Локальное по времени уравнение

Псевдообратный
$$\mathcal{A}^{(-1)}$$
выбирается так, что
$$\mathcal{A}^{(-1)}\mathcal{A} = \mathcal{P}, \qquad \mathcal{A}^{(-1)}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{A}^{(-1)} = 0.$$

Локальное по времени уравнение

Доказательство.

$$\rho_t = \mathcal{U}_{t_0}^t \rho_{t_0},$$

где $\mathcal{U}_{t_0}^t$ — решение задачи Коши

$$\frac{d}{dt}\mathcal{U}_{t_0}^t = \lambda \mathcal{L}_t \mathcal{U}_{t_0}^t, \qquad \mathcal{U}_{t_0}^{t_0} = I.$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t =& \frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P} + \frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{Q} \\
=& \left(\frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P}\right)(\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P})^{(-1)}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P} + \frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{Q} \\
=& \left(\frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P}\right)(\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P})^{(-1)}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t \\
&- \left(\frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P}\right)(\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{P})^{(-1)}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{Q} + \frac{d}{dt}\mathcal{P}\mathcal{U}_{t_0}^t\mathcal{Q}. \qquad \square
\end{aligned}$$

Локальное по времени уравнение

Теорема 2

При $\lambda \to 0$ *выполнено следующее асимптотическое разложение*

$$\mathcal{K}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \mathcal{K}_n(t),$$

$$\mathcal{K}_n(t) = \sum_{q=0}^{n-1} (-1)^q \sum_{\sum_{j=0}^{q} k_j = n, k_j \geqslant 1} \dot{\mathcal{M}}_{k_0}(t) \mathcal{M}_{k_1}(t) \ldots \mathcal{M}_{k_q}(t),$$

$$\mathcal{M}_k(t) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \mathcal{P} \mathcal{L}_{t_1} \ldots \mathcal{L}_{t_k} \mathcal{P},$$

$$\dot{\mathcal{M}}_k(t) \equiv \frac{d}{dt} \mathcal{M}_k(t).$$

Лемма. При $\lambda \to 0$

$$\left(I + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \mathcal{A}_k\right)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{q=0}^{n} (-1)^q \sum_{\sum_{j=1}^{q} k_j = n, k_j \geqslant 1} \mathcal{A}_{k_1} \dots \mathcal{A}_{k_q},$$

Доказательство.

$$\begin{aligned}\left(I + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \mathcal{A}_k\right)^{-1} &= \sum_{q=0}^{\infty} (-1)^q \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \mathcal{A}_k\right)^q \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} (-1)^q \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \sum_{\sum_{j=1}^{q} k_j = n, k_j \geqslant 1} \mathcal{A}_{k_1} \dots \mathcal{A}_{k_q} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{\sum_{j=1}^{q} k_j = n, k_j \geqslant 1} (-1)^q \mathcal{A}_{k_1} \dots \mathcal{A}_{k_q}. \qquad \square\end{aligned}$$

Доказательство теоремы.

$$\mathcal{U}_{t_0}^t = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \mathcal{L}_{t_1} \ldots \mathcal{L}_{t_k}.$$

$$\mathcal{K}(t) \equiv \frac{d}{dt} \mathcal{P} \mathcal{U}_{t_0}^t \mathcal{P} \left(\mathcal{P} \mathcal{U}_{t_0}^t \mathcal{P} \right)^{(-1)}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \dot{\mathcal{M}}_k(t) \left(\sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \mathcal{M}_m(t) \right)^{(-1)}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \dot{\mathcal{M}}_k(t) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{q=0}^{n} (-1)^q \sum_{\sum_{j=1}^q k_j = n, k_j \geqslant 1} \mathcal{M}_{k_1}(t) \ldots \mathcal{M}_{k_q}(t) \right)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{q=0}^{n-1} (-1)^q \sum_{\sum_{j=0}^q k_j = n, k_j \geqslant 1} \dot{\mathcal{M}}_{k_0}(t) \mathcal{M}_{k_1}(t) \ldots \mathcal{M}_{k_q}(t). \quad \square$$

Локальное по времени уравнение

Теорема 3

При $\lambda \to 0$ выполнено следующее асимптотическое разложение

$$
\begin{aligned}
\mathcal{I}(t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \mathcal{I}_n(t), \\
\mathcal{I}_n(t) &= \dot{\tilde{\mathcal{M}}}_n(t) \\
&+ \sum_{q=1}^{n-1} (-1)^q \sum_{\sum_{j=0}^{q} k_j = n, k_j \geqslant 1} \dot{\mathcal{M}}_{k_0}(t) \mathcal{M}_{k_1}(t) \ldots \mathcal{M}_{k_{q-1}}(t) \tilde{\mathcal{M}}_{k_q}(t),
\end{aligned}
$$

$$
\tilde{\mathcal{M}}_k(t) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \mathcal{P} \mathcal{L}_{t_1} \ldots \mathcal{L}_{t_k} \mathcal{Q}, \; \dot{\tilde{\mathcal{M}}}_k(t) \equiv \frac{d}{dt} \tilde{\mathcal{M}}_k(t).
$$

Локальное по времени уравнение

Доказательство.

$$
\begin{aligned}
\mathcal{I}(t) = &\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^n \dot{\tilde{\mathcal{M}}}_n(t) \\
&- \left(\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{q=0}^{n-1} (-1)^q \sum_{\sum_{j=0}^{q} k_j = n, k_j \geqslant 1} \dot{\mathcal{M}}_{k_0}(t) \mathcal{M}_{k_1}(t) \ldots \mathcal{M}_{k_q}(t) \right) \cdot \\
&\qquad \cdot \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \dot{\tilde{\mathcal{M}}}_k(t) \right) \\
= &\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^n \Bigg(\dot{\tilde{\mathcal{M}}}_n(t) \\
&+ \sum_{q=1}^{n-1} (-1)^q \sum_{\sum_{j=0}^{q} k_j = n, k_j \geqslant 1} \dot{\mathcal{M}}_{k_0}(t) \mathcal{M}_{k_1}(t) \ldots \mathcal{M}_{k_{q-1}}(t) \tilde{\mathcal{M}}_{k_q}(t) \Bigg). \square
\end{aligned}
$$

Локальное по времени уравнение

Первые члены

$$\mathcal{M}_0(t) = \mathcal{P},$$

$$\mathcal{M}_1(t) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P},$$

$$\mathcal{M}_2(t) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P},$$

$$\mathcal{M}_3(t) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P},$$

$$\mathcal{M}_4(t) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_4 \mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{L}_{t_4}\mathcal{P}$$

Локальное по времени уравнение

$n = 1$. Композиции: 1

$$\mathcal{K}_1(t) = \dot{\mathcal{M}}_1(t) = \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}$$

$n = 2$. Композиции: $2 = 1 + 1$

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_2(t) &= \dot{\mathcal{M}}_2(t) - \dot{\mathcal{M}}_1(t)\mathcal{M}_1(t) \\
&= \int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P} \\
&= \int_{t_0}^{t} dt_1 (\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P})
\end{aligned}$$

Локальное по времени уравнение

$n = 3$. Композиции: $3 = 2 + 1 = 1 + 2 = 1 + 1 + 1$

$$\mathcal{K}_3(t) = \dot{\mathcal{M}}_3(t) - \dot{\mathcal{M}}_2(t)\mathcal{M}_1(t) - \dot{\mathcal{M}}_1(t)\mathcal{M}_2(t) + \dot{\mathcal{M}}_1(t)\mathcal{M}_1(t)\mathcal{M}_1(t)$$

$n = 4$. Композиции: $4 = 3 + 1 = 2 + 2 = 1 + 3 = 2 + 1 + 1 = 1 + 2 + 1 = 1 + 1 + 2 = 1 + 1 + 1 + 1$

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_4(t) =& \dot{\mathcal{M}}_4(t) - \dot{\mathcal{M}}_3(t)\mathcal{M}_1(t) - \dot{\mathcal{M}}_2(t)\mathcal{M}_2(t) - \dot{\mathcal{M}}_1(t)\mathcal{M}_3(t) + \\ &+ \dot{\mathcal{M}}_2(t)\mathcal{M}_1(t)\mathcal{M}_1(t) + \dot{\mathcal{M}}_1(t)\mathcal{M}_2(t)\mathcal{M}_1(t) \\ &+ \dot{\mathcal{M}}_1(t)\mathcal{M}_1(t)\mathcal{M}_2(t) - (\mathcal{M}_1(t))^4\end{aligned}$$

Локальное по времени уравнение

В случае обнуления нечётных комбинаций $\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_{2m}}\ldots\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P}=0$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}_3(t) =& 0,\\
\mathcal{K}_4(t) =& \dot{\mathcal{M}}_4(t) - \dot{\mathcal{M}}_2(t)\mathcal{M}_2(t)\\
=& \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\\
& - \int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P} \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}
\end{aligned}
$$

Локальное по времени уравнение

Упорядочение интегралов по времени

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 f(t_1,t_2,t_3) = \int\limits_{\substack{t\geqslant t_1\geqslant t_0 \\ t\geqslant t_2\geqslant t_3\geqslant t_0}} dt_1 dt_2 dt_3 f(t_1,t_2,t_3)$$

$$= \int\limits_{t\geqslant t_1\geqslant t_2\geqslant t_3\geqslant t_0} dt_1 dt_2 dt_3 f(t_1,t_2,t_3) + \int\limits_{t\geqslant t_2\geqslant t_1\geqslant t_3\geqslant t_0} dt_1 dt_2 dt_3 f(t_1,t_2,t_3)$$

$$+ \int\limits_{t\geqslant t_2\geqslant t_3\geqslant t_1\geqslant t_0} dt_1 dt_2 dt_3 f(t_1,t_2,t_3)$$

$$= \int\limits_{t\geqslant t_1\geqslant t_2\geqslant t_3\geqslant t_0} dt_1 dt_2 dt_3 (f(t_1,t_2,t_3) + f(t_2,t_1,t_3) + f(t_3,t_1,t_2))$$

Локальное по времени уравнение

$$\mathcal{K}_4(t) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \cdot \\ \cdot \Big(\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{L}(t_1)\mathcal{L}(t_2)\mathcal{L}(t_3)\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{L}(t_1)\mathcal{P}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{L}(t_3)\mathcal{P} \\ - \mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{L}(t_2)\mathcal{P}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{L}(t_3)\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{L}(t_3)\mathcal{P}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{L}(t_2)\mathcal{P}\Big)$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

Заметим, что между проекторами $\mathcal{P}$ произведения упорядочены по времени. Оказывается, что в общем случае верна формула

$$\mathcal{K}^{(n)}(t) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-2}} dt_{n-1} \kappa_{p.o.}(\mathcal{L}_t \mathcal{L}_{t_1} \ldots \mathcal{L}_{t_{n-1}}),$$

где $\kappa_{p.o.}(\mathcal{L}_t \mathcal{L}_{t_1} \ldots \mathcal{L}_{t_{n-1}})$ — *частично упорядоченные кумулянты (Кубо - ван Кампена)*. (Для компактности дальнейших формул переобозначим $\mathcal{L}_t = \mathcal{L}(t)$.)

Локальное по времени кинетическое уравнение

1. Пишем строчку $\mathcal{P}\mathcal{L}\ldots\mathcal{L}\mathcal{P}$.
2. На её основе пишем все возможные строчки, вставляя операторы $\mathcal{P}$ так, чтобы получившая строчка содержала хотя бы один символ $\mathcal{L}$ между двумя операторами $\mathcal{P}$ и ставим знак $(-1)^{\#\mathcal{P}}$, где $\#\mathcal{P}$ — количество вставленных операторов $\mathcal{P}$.
3. Добавляем к первому символу $\mathcal{L}$ индекс t, а к остальным индексы t так, чтобы между любой парой супероператоров $\mathcal{P}$ индексы t_k были упорядочены по возростанию индекса k. Если таких способов несколько, то выписываем все возможные способы, сохраняя знак, получившийся на предыдущем шаге.
4. Складываем получившиеся члены с учётом знаков.