Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 9. Марковость на больших временах. Проекционные методы

Теретёнков Александр Евгеньевич

1 апреля 2024 г.

В прошлой серии...

Теорема 1

Пусть интеграл $G(t)$ *— непрерывная функция с конечными моментами* $\tilde{G}_p \equiv \int_0^\infty t^p G(t) dt$ *вплоть до* $(m+1)$*-го включительно для некоторого* $m \in \mathbb{N}$*. Тогда существуют* $\Delta\Omega_\lambda^{(m)} \in \mathbb{R}$ *и* $\Gamma_\lambda^{(m)} \geqslant 0$ *(по крайней мере при достаточно малых* λ*) и такое решение* $\rho^{(m)}(t;\lambda)$ *уравнения*

$$\frac{d}{dt}\rho^{(m)}(t;\lambda) = \mathcal{L}_\lambda^{(m)}(\rho^{(m)}(t;\lambda)),$$

$$\mathcal{L}_\lambda^{(m)}(\rho) = -i[\Delta\Omega_\lambda^{(m)}\sigma_+\sigma_-, \rho] + \Gamma_\lambda^{(m)}\left(\sigma_-\rho\sigma_+ - \frac{1}{2}\sigma_+\sigma_-\rho - \frac{1}{2}\rho\sigma_+\sigma_-\right),$$

что $\rho(t;\lambda) = \rho^{(m)}(t;\lambda) + O(\lambda^{2m+2})$ *при* $\lambda \to 0$ *и* $t > 0$ *(*$t = \mathrm{fix}$*).*

Конструктивное вычисление генератора

$$\Delta\Omega^{(m)}(t) = -\operatorname{Im}\tilde{p}^{(m)}(\lambda), \quad \Gamma(t)|_{\text{pert}} = -2\operatorname{Re}\tilde{p}^{(m)}(\lambda)$$

$$\tilde{p}^{(m)} = \sum_{n=0}^{m} \tilde{p}_n \lambda^{2n}$$

$$\tilde{G}_k = \frac{(-1)^k}{k!}\int_0^{\infty} t^k G(t)dt, \qquad k \in \mathbb{Z}_+$$

$$\tilde{p}_0 = -\tilde{G}_0$$

$$\tilde{p}_n = -\sum_{C_n} \tilde{G}_k \tilde{p}_{i_1 - 1} \dots \tilde{p}_{i_k - 1}.$$

$$C_n : i_1 \geqslant 1, \cdots, i_k \geqslant 1, \qquad i_1 + \dots i_k = n.$$

Конструктивное вычисление генератора

Несколько первых членов:

$$
\begin{aligned}
\tilde{p}_0 &= -\tilde{G}_0, \\
\tilde{p}_1 &= \tilde{G}_0\tilde{G}_1, \\
\tilde{p}_2 &= -\tilde{G}_0(\tilde{G}_1^2 + \tilde{G}_0\tilde{G}_2), \\
\tilde{p}_3 &= \tilde{G}_0(\tilde{G}_1^3 + 3\tilde{G}_0\tilde{G}_1\tilde{G}_2 + \tilde{G}_0^2\tilde{G}_3)
\end{aligned}
$$

Перенормировка начальных условий

Точная начальная редуцированная матрица плотности и начальное условие для решения $\rho^{(m)}(t;\lambda)$ из теоремы:

$$\rho(0;\lambda) = \begin{pmatrix} \varrho_{11} & \varrho_{10} \\ \varrho_{01} & \varrho_{00} \end{pmatrix}$$

$$\rho^{(m)}(0;\lambda) = \begin{pmatrix} |r^{(m)}(\lambda)|^2 \varrho_{11} & r^{(m)}(\lambda)\varrho_{10} \\ (r^{(m)}(\lambda))^* \varrho_{01} & \varrho_{00} + (1 - |r^{(m)}(\lambda)|^2)\varrho_{11} \end{pmatrix}$$

Конструктивное вычисление начального условия

При $\tilde{G}_0 \neq 0$

$$r^{(m)}(\lambda) = \sum_{n=1}^{m} r_n \lambda^{2n},$$

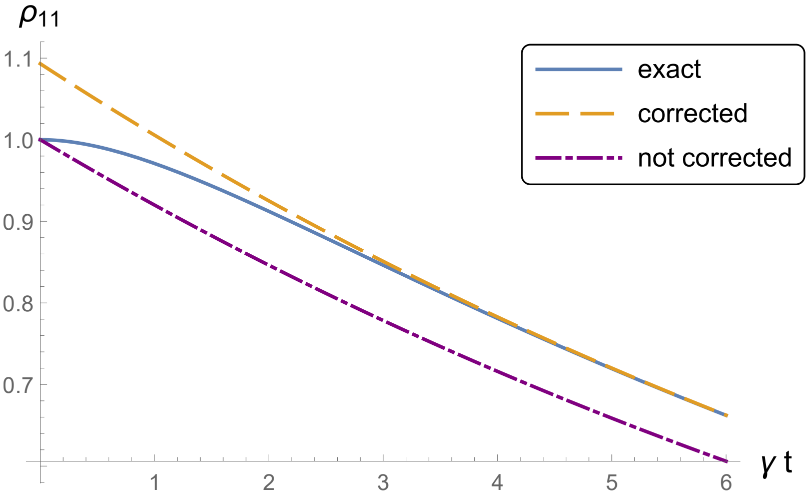
где $r_0 = 1$ и

$$r_n = \frac{1}{\tilde{p}_0} \left(n\tilde{p}_n - \sum_{k=1}^{n} \tilde{p}_k (n-k) r_{n-k} \right).$$

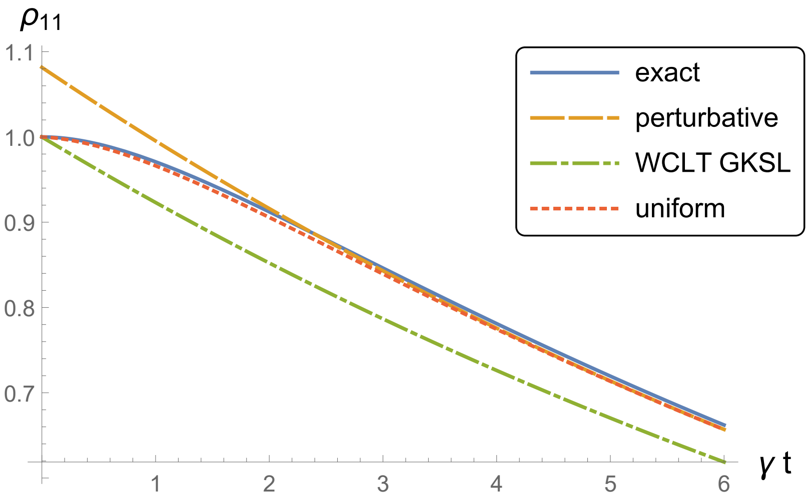
Конструктивное вычисление начального условия

Несколько первых членов:

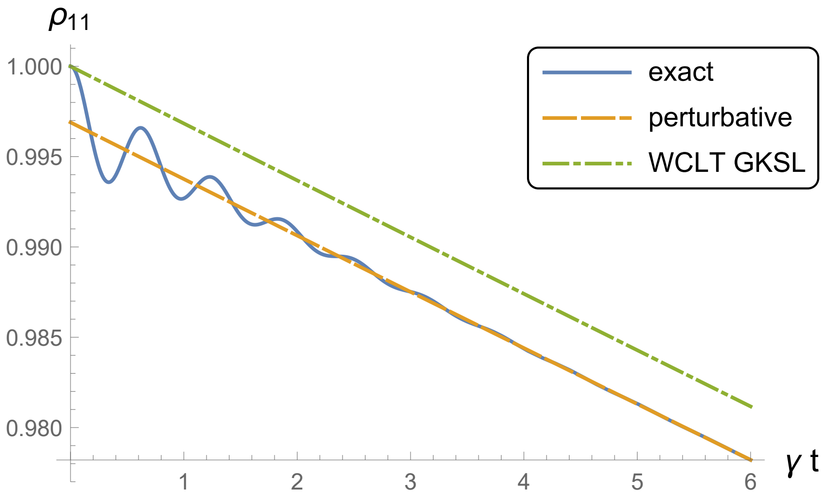
$$
\begin{aligned}
r_0 &= 1\\
r_1 &= -\tilde{G}_1,\\
r_2 &= \tilde{G}_1^2 + 2\tilde{G}_0\tilde{G}_2,\\
r_3 &= -(\tilde{G}_1^3 + 6\tilde{G}_0\tilde{G}_1\tilde{G}_2 + 3\tilde{G}_0^2\tilde{G}_3).
\end{aligned}
$$



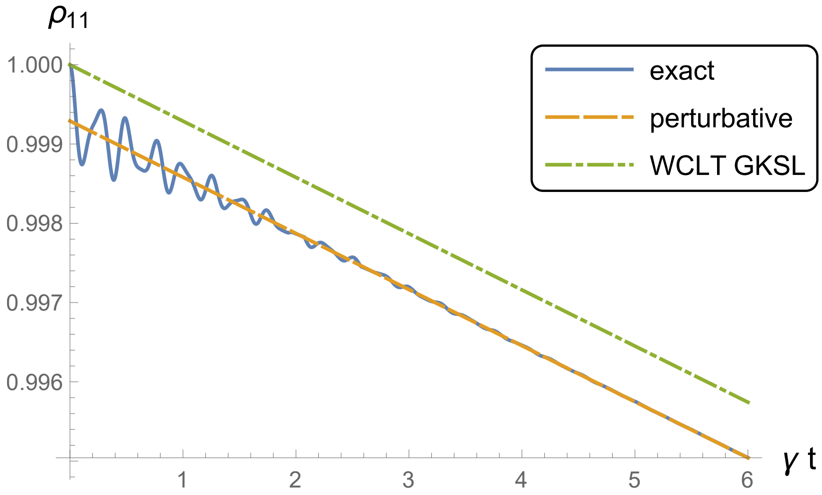
ρ_{11}
1.1
1.0
0.9
0.8
0.7
1
2
3
4
5
6
γ t
exact
corrected
not corrected



ρ_{11}
1.1
1.0
0.9
0.8
0.7
1
2
3
4
5
6
γ t
exact
perturbative
WCLT GKSL
uniform



ρ_{11}
1.000
0.995
0.990
0.985
0.980
exact
perturbative
WCLT GKSL
1
2
3
4
5
6
γ t


ρ_{11}
1.000
0.999
0.998
0.997
0.996
exact
perturbative
WCLT GKSL
1
2
3
4
5
6
γ t

Корреляционные функции

Если определить отображение $\Phi_{t_1}^{t_2}$ соотношением

$$\rho(t_2) = \Phi_{t_1}^{t_2}\rho(t_1), \qquad t_2 \geqslant t_1 \geqslant 0,$$

то марковские (основанные на регрессионной формуле) корреляционные функции

$$\langle \sigma_-(t_2)\sigma_+(t_1)\rangle_{\mathrm{M}} \equiv \mathrm{Tr}(\sigma_-\Phi_{t_1}^{t_2}(\sigma_+\Phi_0^{t_1}(|0\rangle\langle 0|)))$$

Точная корреляционная функция имеет вид

$$\langle \sigma_-(t_2)\sigma_+(t_1)\rangle \equiv \mathrm{Tr}\, U_{t_2}^{\dagger}(\sigma_-\otimes I_B)U_{t_2}U_{t_1}^{\dagger}(\sigma_+\otimes I_B)U_{t_1}|0\rangle\langle 0|\otimes|\mathrm{vac}\rangle\langle\mathrm{vac}|,$$

где U_t — унитарная динамика системы и окружения в представлении взаимодействия.

Корреляционные функции

Марковость в терминах корреляционных функций:

$$\langle \sigma_-(t_2)\sigma_+(t_1)\rangle_{\mathrm{M}} = \langle \sigma_-(t_2)\sigma_+(t_1)\rangle$$

- G. Lindblad, Comm. Math. Phys. 65 (3) 281–294 (1979).
- L. Accardi, A. Frigerio, J. T. Lewis, Publ. Res. Inst. Math. Sci. 18 (1) 97–133 (1982).
- L. Li, M. J. W. Hall, and H. M. Wiseman, Phys. Rep. **759**, 1–51 (2018).
- A. S. Holevo, Statistical structure of quantum theory. Vol. 67. Springer, 2003.

Корреляционные функции

В условиях теоремы 1 выполнено

$$\langle\sigma_-(t_2)\sigma_+(t_1)\rangle_{\mathrm{M}} = r^{(m)}(\lambda)\langle\sigma_-(t_2)\sigma_+(t_1)\rangle + O(\lambda^{2m+2}), \quad t_2 > t_1.$$

В общем случае, только при $m = 0$ верно $r^{(0)} = 1$.

- R. Dümcke, J. Math. Phys. **24** (2), 311–315 (1983).

Поэтому, строго говоря, динамика не марковская

- N.L. Gullo, I. Sinayskiy, T. Busch, F. Petruccione, arXiv:1401.1126 (2014).

Но вся немарковость локализована "внутри" времени корреляции, поэтому можно "перенормировать" определение.

А если какого-то момента не существует?

Рассмотрим случай

$$G(t) = g^2\Bigg(\chi e^{-\gamma|t|} +$$

$$+ \frac{1-\chi}{2}\left(e^{-\gamma|t|}(1 - \operatorname{Im}\operatorname{erf}(i\sqrt{\gamma|t|})) + e^{\gamma|t|}(1 - \operatorname{erf}(\sqrt{\gamma|t|}))\right)\Bigg),$$

где $\chi \in (0,1)$. Она имеет нулевой момент $\tilde{G}_0 = \chi\frac{g^2}{\gamma}$, но первый момент $\tilde{G}_1$ расходится:

$$\rho_{11} = |x(t;\lambda)|^2, \qquad x(t;\lambda) = x_0(t) + \lambda x_{\frac{1}{2}}(t) + O(\lambda^2),$$

где

$$x_0(t) = e^{-\chi\frac{g^2}{\gamma}t}, \qquad x_{\frac{1}{2}}(t) = O(t^{-\frac{1}{2}}), t \to +\infty$$

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Рассматривается уравнение вида

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

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Рассматривается уравнение вида

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

Базовый пример:
Гамильтониан

$$H = H_0 + \lambda H_I$$

Уравнение Лиувилля-фон Неймана в представлении взаимодействия

$$\frac{d}{dt}\rho_t = \lambda \mathcal{L}_t \rho_t, \qquad \mathcal{L}_t = -i[H_I(t), \cdot], \qquad H_I(t) = e^{iH_0 t} H_I e^{-iH_0 t}$$

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Введём супероператор, который является идемпотентном

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$$

Кроме того, введём оператор $\mathcal{Q}$

$$\mathcal{P} + \mathcal{Q} = I$$

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Введём супероператор, который является идемпотентном

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$$

Кроме того, введём оператор $\mathcal{Q}$

$$\mathcal{P} + \mathcal{Q} = I$$

Базовый пример (Argyres, Kelley, 1964)

$$\mathcal{P}\rho = \operatorname{Tr}_B \rho \otimes \rho_B$$

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Утверждение. Уравнение Накажимы-Цванцига (Nakajima, 1958; Zwanzig, 1960):

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \lambda\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho_t + \mathcal{I}_t\rho_{t_0} + \int_{t_0}^{t}\mathcal{K}_s^t\rho_s ds$$

$$\mathcal{K}_s^t = \lambda^2\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{G}_s^t\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}, \qquad \mathcal{I}_t = \lambda\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{G}_{t_0}^t\mathcal{Q},$$

$$\mathcal{G}_s^t = \overleftarrow{\mathrm{T}}\exp\left(\lambda\int_s^t\mathcal{Q}\mathcal{L}_\tau d\tau\right), \quad \mathcal{G}_s^s = I$$

Доказательство. Распишем уравнение Лиувилля-фон Неймана в проекциях

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \lambda\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho_t + \lambda\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\rho_t \\ \frac{d}{dt}\mathcal{Q}\rho_t = \lambda\mathcal{Q}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho_t + \lambda\mathcal{Q}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\rho_t \end{cases}$$

Интегрируя второе уравнение, имеем

$$\mathcal{Q}\rho_t = \mathcal{G}_{t_0}^t\mathcal{Q}\rho_{t_0} + \lambda\int_{t_0}^t \mathcal{G}_s^t\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}\rho_s ds,$$

$$\mathcal{G}_s^t = \overleftarrow{\mathrm{T}\exp}\left(\lambda\int_s^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_\tau d\tau\right), \quad \mathcal{G}_s^s = I$$

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Подставляя в первое уравнение, получаем уравнение Накажимы-Цванцига

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \lambda\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho_t + \lambda\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{G}_{t_0}^t\mathcal{Q}\rho_{t_0} + \lambda^2\int_{t_0}^t \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{G}_s^t\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}\rho_s ds$$

□

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Как правило, рассматирвают случай, когда $\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P} = 0$, тогда

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \mathcal{I}_t\rho_{t_0} + \int_{t_0}^{t} \mathcal{K}_s^t \rho_s ds$$

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Как правило, рассматирвают случай, когда $\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P} = 0$, тогда

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \mathcal{I}_t\rho_{t_0} + \int_{t_0}^{t} \mathcal{K}_s^t \rho_s ds$$

В частности для $\mathcal{P} = \mathrm{tr}_B(\cdot) \otimes \rho_B$

$\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho = -i(\mathrm{Tr}_B[H_I(t),\rho_S \otimes \rho_B]) \otimes \rho_B = -i[\mathrm{Tr}_B(H_I(t)\rho_B), \rho_S] \otimes \rho_B$

Таким образом, $\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho = 0$, если $\mathrm{Tr}_B(H_I(t)\rho_B) = 0$.

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Как правило, рассматирвают случай, когда $\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P} = 0$, тогда

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \mathcal{I}_t\rho_{t_0} + \int_{t_0}^{t} \mathcal{K}_s^t\rho_s ds$$

В частности для $\mathcal{P} = \mathrm{tr}_B(\cdot) \otimes \rho_B$

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho = -i(\mathrm{Tr}_B[H_I(t), \rho_S \otimes \rho_B]) \otimes \rho_B = -i[\mathrm{Tr}_B(H_I(t)\rho_B), \rho_S] \otimes \rho_B$$

Таким образом, $\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho = 0$, если $\mathrm{Tr}_B(H_I(t)\rho_B) = 0$.
Это выполнено в случае, когда рассматривается гауссовский бозонный резервуар с нулевым средним, а $H_I(t)$ — линеен по операторам рождения и уничтожения. Более того, в этом случае обнуление моментов нечётного порядка даёт

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\cdots\mathcal{L}_{t_{2k}}\mathcal{P} = 0,$$

что также часто предполагается.

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Член $\mathcal{I}_t \rho_{t_0}$ характеризует насколько начальное состояние согласовано с проекцией. Если $\mathcal{P}\rho_{t_0} = \rho_{t_0}$, то $\mathcal{I}_t \rho_{t_0} = 0$. В случае проектора $\mathcal{P} = \mathrm{tr}_B(\cdot) \otimes \rho_B$, $\mathcal{P}\rho_{t_0} = \rho_{t_0}$ соответствует факторизованным начальным состояниям вида $\rho_{t_0} = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B$.

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Если $\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P} = 0$ и $\mathcal{P}\rho_{t_0} = \rho_{t_0}$, то первый неисчезающий член — второго порядка по λ

$$\mathcal{K}_s^t = \lambda^2 \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{G}_s^t\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} = \lambda^2\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} + O(\lambda^3)$$

С учётом $\mathcal{L}_s\mathcal{P} = \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} + \mathcal{P}\mathcal{L}_s\mathcal{P} = \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}$, имеем

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \lambda^2\int_{t_0}^t \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_s\mathcal{P}\rho_s ds$$

— уравнение в приближении Борна.

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

В случае $\mathcal{P} = \mathrm{tr}_B(\cdot) \otimes \rho_B$, то оно принимает вид

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) \otimes \rho_B = -\lambda^2 \int_{t_0}^{t} \mathrm{Tr}_B[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_B]]ds \otimes \rho_B$$

"Сокращая" на ρ_B, имеем

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\lambda^2 \int_{t_0}^{t} \mathrm{Tr}_B[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_B]]ds$$

— такое уравнение уже возникало при "физическом" выводе уравнений.