Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 4. Представление Гейзенберга для открытых систем. Генератор ГКСЛ типа классической диффузии. Классические и квантовые регрессионные формулы

Теретёнков Александр Евгеньевич

1 октября 2024 г.

В прошлой лекции...

Кинетическое 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.)

''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 полугрупповое свойство

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

Упражнение. Проверить.

Корреляционные функции в случае классических марковских цепей

$$\mathbb{E}x_{\xi(t_N)}\cdots x_{\xi(0)} =$$
$$= \sum_{k_N,\cdots,k_0} x_{k_N}(P_{t_N-t_{N-1}})_{k_N,k_{N-1}}\cdots x_{k_1}(P_{t_1})_{k_1,k_0}x_{k_0}(p_0)_{k_0}$$

Корреляционные функции в случае классических марковских цепей

$$\mathbb{E}x_{\xi(t_N)}\cdots x_{\xi(0)} = \\ = \sum_{k_N,\cdots,k_0} x_{k_N}(P_{t_N-t_{N-1}})_{k_N,k_{N-1}}\cdots x_{k_1}(P_{t_1})_{k_1,k_0}x_{k_0}(p_0)_{k_0}$$

$$\mathbb{E}x_{\xi(t_1)}x_{\xi(0)} = \sum_{k_1,k_0} x_{k_1}(P_{t_1})_{k_1,k_0}x_{k_0}(p_0)_{k_0} = x^T P_{t_1}(x\circ p_0) = \\ = (x(t_1)\circ x(0))^T p_0 = \mathbb{E}(x(t_1)\circ x(0))_{\xi_0}$$

Корреляционные функции в случае классических марковских цепей

$$\mathbb{E}x_{\xi(t_N)} \cdots x_{\xi(0)} =$$
$$= \sum_{k_N, \cdots, k_0} x_{k_N} (P_{t_N - t_{N-1}})_{k_N, k_{N-1}} \cdots x_{k_1} (P_{t_1})_{k_1, k_0} x_{k_0} (p_0)_{k_0}$$

$$\mathbb{E}x_{\xi(t_1)} x_{\xi(0)} = \sum_{k_1, k_0} x_{k_1} (P_{t_1})_{k_1, k_0} x_{k_0} (p_0)_{k_0} = x^T P_{t_1} (x \circ p_0) =$$
$$= (x(t_1) \circ x(0))^T p_0 = \mathbb{E}(x(t_1) \circ x(0))_{\xi_0}$$

$$\mathbb{E}x_{\xi(t_1)} y_{\xi(0)} = \mathbb{E}(x(t_1) \circ y(0))_{\xi_0}$$

Корреляционные функции в случае классических марковских цепей

$$
\mathbb{E}x_{\xi(t_N)} \cdots x_{\xi(0)} = \\
= \sum_{k_N, \cdots, k_0} x_{k_N} (P_{t_N - t_{N-1}})_{k_N, k_{N-1}} \cdots x_{k_1} (P_{t_1})_{k_1, k_0} x_{k_0} (p_0)_{k_0}
$$

$$
\mathbb{E}x_{\xi(t_1)} x_{\xi(0)} = \sum_{k_1, k_0} x_{k_1} (P_{t_1})_{k_1, k_0} x_{k_0} (p_0)_{k_0} = x^T P_{t_1} (x \circ p_0) = \\
= (x(t_1) \circ x(0))^T p_0 = \mathbb{E}(x(t_1) \circ x(0))_{\xi_0}
$$

$$
\mathbb{E}x_{\xi(t_1)} y_{\xi(0)} = \mathbb{E}(x(t_1) \circ y(0))_{\xi_0}
$$

$$
\frac{d}{dt_1} x(t_1) \circ y(0) = (Lx(t_1)) \circ y(0)
$$

Корреляционные функции в случае классических марковских цепей

Двухвременные корреляции

$$\frac{d}{dt_1} x(t_1) \circ y(0) = (Lx(t_1)) \circ y(0)$$

ведут себя так же как и одновременные

$$\frac{d}{dt_1} x(t_1) = Lx(t_1)$$

- Onsager L. Reciprocal relations in irreversible processes. II // Physical Review. – 1931. – Vol. 38, № 12. – P. 2265–2279.

Очевидные "хорошие" свойства ГКСЛ генератора

$$\frac{d}{dt}\rho_t = \mathcal{L}(\rho_t)$$

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

1. $\mathcal{L}(X^\dagger) = (\mathcal{L}(X))^\dagger$.
2. $\operatorname{Tr} \mathcal{L}(\rho) = 0$.

ГКСЛ и некоммутативные диффузионные уравнения

Генератор типа классической диффузии: $C_i = C_i^\dagger$

$$C_j \rho C_j - \frac{1}{2} C_j^2 \rho - \frac{1}{2} \rho C_j^2 = -\frac{1}{2} [C_j, [C_j, \rho]]$$

Отметим, что на супероператор $\partial_H \equiv -i[H, \cdot\,]$ можно смотреть как на абстрактное дифференцирование на алгебре матриц: он линеен и выполнено правило Лейбница

$$\partial_H (AB) = A \partial_H (B) + \partial_H (A) B.$$

$$\frac{d}{dt} \rho = \partial_H \rho + \frac{1}{2} \sum_j \partial_{C_j}^2 \rho$$

ГКСЛ и некоммутативные диффузионные уравнения

Утверждение. Всякий линейный супероператор Φ удовлетворяющий

$$\Phi(AB) = A\Phi(B) + \Phi(A)B$$

имеет вид $\Phi(A) = [H, A]$.

Упражнение. Спектр $[H, \ \cdot \ ]$? Если $H = \sum_j \varepsilon_j |j\rangle\langle j|$.

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Матрицы образуют гильбертово пространство относительно скалярного произведения $\langle\langle A|B\rangle\rangle = \mathrm{Tr}\, A^\dagger B$.
Это позволяет ввести сопряжённые супероператор относительно такого скалярного произведения по формуле

$$\langle\langle \mathcal{L}^*(A)|B\rangle\rangle = \langle\langle A|\mathcal{L}(B)\rangle\rangle$$

для произвольных матриц A и B.

- Michel Baranger, "Problem of overlapping lines in the theory of pressure broadening," Physical Review 111, 494 (1958)."

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Вычислим сопряжённый супероператор к $\mathcal{M} = X \cdot Y$:

$$\operatorname{Tr} A^\dagger \mathcal{M}(B) = \operatorname{Tr} A^\dagger X B Y = \operatorname{Tr} Y A^\dagger X B = \operatorname{Tr}(X^\dagger A Y^\dagger)^\dagger B$$

$$\mathcal{M}^* = X^\dagger \cdot Y^\dagger$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Вычислим сопряжённый супероператор к $\mathcal{M} = X \cdot Y$:

$$\operatorname{Tr} A^\dagger \mathcal{M}(B) = \operatorname{Tr} A^\dagger X B Y = \operatorname{Tr} Y A^\dagger X B = \operatorname{Tr}(X^\dagger A Y^\dagger)^\dagger B$$

$$\mathcal{M}^* = X^\dagger \cdot Y^\dagger$$

Тогда для ГКСЛ-генератора

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

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

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Свойства 1–2 для сопряжённого генератора:

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

Упражнение. Доказать, что генератор ГКСЛ $\mathcal{L} = \mathcal{L}^* \Leftrightarrow$ существует такое представление Линдблада для $\mathcal{L}$ в котором $H = 0$ и $C_j^\dagger = C_j$.

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

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 $\Phi(X) = UXU^\dagger$, $UU^\dagger = I_n$.

Двухвременные корреляционные функции в случае унитарной динамики

Пусть $U(t) = e^{-iHt}$, тогда

$$\begin{aligned}\langle X(t)Y(s)\rangle = \operatorname{Tr} X(t)Y(s)\rho &= \operatorname{Tr} U^\dagger(t)XU(t)U^\dagger(s)YU(s)\rho = \\ &= \operatorname{Tr} XU(t-s)YU(s)\rho U^\dagger(s)U^\dagger(t-s) = \\ &= \operatorname{Tr} YU(s-t)U(t)\rho U^\dagger(t)XU^\dagger(s-t)\end{aligned}$$

Двухвременные корреляционные функции в случае унитарной динамики

Пусть $U(t) = e^{-iHt}$, тогда

$$\langle X(t)Y(s)\rangle = \operatorname{Tr} X(t)Y(s)\rho = \operatorname{Tr} U^\dagger(t)XU(t)U^\dagger(s)YU(s)\rho =$$
$$= \operatorname{Tr} XU(t-s)YU(s)\rho U^\dagger(s)U^\dagger(t-s) =$$
$$= \operatorname{Tr} YU(s-t)U(t)\rho U^\dagger(t)XU^\dagger(s-t)$$

$$\Phi_t = U(t) \cdot U^\dagger(t)$$

$$\langle X(t)Y(s)\rangle = \operatorname{Tr} \Phi_t^*(X)\Phi_s^*(Y)\rho$$
$$\langle X(t)Y(s)\rangle = \operatorname{Tr} X\Phi_{t-s}(Y\Phi_s(\rho))$$
$$\langle X(t)Y(s)\rangle = \operatorname{Tr} Y\Phi_{s-t}(\Phi_t(\rho)X)$$

Двухвременные корреляционные функции

Чем плох выбор $\langle X(t)Y(s)\rangle = \operatorname{Tr} \Phi_t^*(X)\Phi_s^*(Y)\rho$?

Двухвременные корреляционные функции

Чем плох выбор $\langle X(t)Y(s)\rangle = \operatorname{Tr}\Phi_t^*(X)\Phi_s^*(Y)\rho$?

Вообще говоря, $\langle X(t)Y(t)\rangle = \operatorname{Tr}\Phi_t^*(X)\Phi_t^*(Y)\rho \neq \langle (XY)(t)\rangle$.

Двухвременные корреляционные функции

Чем плох выбор $\langle X(t)Y(s)\rangle = \operatorname{Tr} \Phi_t^*(X)\Phi_s^*(Y)\rho$?

Вообще говоря, $\langle X(t)Y(t)\rangle = \operatorname{Tr} \Phi_t^*(X)\Phi_t^*(Y)\rho \neq \langle (XY)(t)\rangle$.

Более того, в классическом случае, при $t \geqslant s$

$$\mathbb{E} x_{\xi(t)} y_{\xi(s)} = \sum_{klm} x_k (P_{t-s})_{kl} y_l (P_s)_{lm} p_m$$

Двухвременные корреляционные функции

Чтобы согласовать с классической динамикой при $t \geqslant s$

$$\mathbb{E} x_{\xi(t)} y_{\xi(s)} = \sum_{klm} x_k (P_{t-s})_{kl} y_l (P_s)_{lm} p_m$$

нужно выбрать

$$\langle X(t) Y(s) \rangle = \operatorname{Tr} X \Phi_{t-s}(Y \Phi_s(\rho)), \qquad t \geqslant s$$

Двухвременные корреляционные функции

Чтобы согласовать с классической динамикой при $t \geqslant s$

$$\mathbb{E} x_{\xi(t)} y_{\xi(s)} = \sum_{klm} x_k (P_{t-s})_{kl} y_l (P_s)_{lm} p_m$$

нужно выбрать

$$\langle X(t) Y(s) \rangle = \operatorname{Tr} X \Phi_{t-s}(Y \Phi_s(\rho)), \qquad t \geqslant s$$

Аналогично, при $t \leqslant s$

$$\mathbb{E} x_{\xi(t)} y_{\xi(s)} = \sum_{klm} y_k (P_{s-t})_{kl} x_l (P_t)_{lm} p_m$$

поэтому

$$\langle X(t) Y(s) \rangle = \operatorname{Tr} Y \Phi_{s-t}(\Phi_t(\rho) X), \qquad t \leqslant s$$

Двухвременные корреляционные функции

Регрессионная формула

$$\langle X(t)Y(s)\rangle = \begin{cases} \operatorname{Tr} X\Phi_{t-s}(Y\Phi_s(\rho)), & t \geqslant s \\ \operatorname{Tr} Y\Phi_{s-t}(\Phi_t(\rho)X), & t \leqslant s \end{cases}$$

В современном виде:

- Lax, M. (1963). Formal theory of quantum fluctuations from a driven state. Physical Review, 129(5), 2342.

Многовременные корреляционные функции

Упорядоченная корреляционная функция: $t_N \geqslant \cdots \geqslant t_1 \geqslant 0$

$$\langle X^{(N)}(t_N) \cdot \ldots \cdot X^{(0)}(0) \rangle = \operatorname{Tr} X^{(N)} \Phi_{t_N - t_{N-1}}(\ldots X^{(1)} \Phi_{t_1}(X^{(0)} \rho))$$

Многовременные корреляционные функции

Обобщённая регрессионная формула: $t_N \geqslant \cdots \geqslant t_1 \geqslant 0$

$$\langle Y^{(0)}(0) \cdot \ldots \cdot Y^{(N)}(t_N) X^{(N)}(t_N) \cdot \ldots \cdot X^{(0)}(0) \rangle =$$
$$= \operatorname{Tr} X^{(N)} \Phi_{t_N - t_{N-1}}(\ldots X^{(1)} \Phi_{t_1}(X^{(0)} \rho Y^{(0)}) Y^{(1)} \ldots) Y^{(N)}$$

- Haken, H., Weidlich, W. (1967). A theorem on the calculation of multi-time-correlation functions by the single-time density matrix. Zeitschrift für Physik, 205(1), 96-102.

Многовременные корреляционные функции

Обобщённая регрессионная формула: $t_N \geqslant \dots \geqslant t_1 \geqslant 0$

$$\langle Y^{(0)}(0) \cdot \ldots \cdot Y^{(N)}(t_N) X^{(N)}(t_N) \cdot \ldots \cdot X^{(0)}(0) \rangle =$$
$$= \operatorname{Tr} X^{(N)} \Phi_{t_N - t_{N-1}}(\ldots X^{(1)} \Phi_{t_1}(X^{(0)} \rho Y^{(0)}) Y^{(1)} \ldots) Y^{(N)}$$

- Haken, H., Weidlich, W. (1967). A theorem on the calculation of multi-time-correlation functions by the single-time density matrix. Zeitschrift für Physik, 205(1), 96-102.

Вообще говоря обобщённая регрессионная формула определяет не все корреляционные функции.
Упражнение. Для каких $t \geqslant 0, s \geqslant 0, r \geqslant 0$ обобщённая регрессионная формула не позволяет определить $\langle X(t) Y(s) Z(r) \rangle$? (В ответе предполагается неравенство или набор неравенств для t, s, r.)