Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 15. Уравнение Хартри и приближение среднего поля. Проекционные методы вывода нелинейных кинетических уравнений и обобщённый проектор Кавасаки-Гантона

Теретёнков Александр Евгеньевич

12 мая 2025 г.

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Уравнение Хартри для матрицы плотности в $\mathcal{H}$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i \operatorname{Tr}_2[V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)]$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Уравнение Хартри для матрицы плотности в $\mathcal{H}$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i\,\mathrm{Tr}_2[V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)]$$

Утверждение. Уравнение Хартри также можно переписать как

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h + V_H(\rho(t)), \rho(t)],$$

где введён потенциал Хартри

$$V_H(\rho) \equiv \mathrm{Tr}_2(V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho) = \mathrm{Tr}_2(I \otimes \rho)(V_{12} + V_{21}).$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Уравнение Хартри для матрицы плотности в $\mathcal{H}$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i \operatorname{Tr}_2[V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)]$$

Утверждение. Уравнение Хартри также можно переписать как

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h + V_H(\rho(t)), \rho(t)],$$

где введён потенциал Хартри

$$V_H(\rho) \equiv \operatorname{Tr}_2(V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho) = \operatorname{Tr}_2(I \otimes \rho)(V_{12} + V_{21}).$$

Доказательство: $[V_H(\rho), \rho] = [\operatorname{Tr}_2(V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho), \rho] =$
$= \operatorname{Tr}_2((V_{12}+V_{21})(I\otimes\rho)(\rho\otimes I)) - \operatorname{Tr}_2((\rho\otimes I)(I\otimes\rho)(V_{12}+V_{21})) =$
$= \operatorname{Tr}_2[V_{12} + V_{21}, \rho \otimes \rho]$. □

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Уравнение Хартри получается из N-частичного уравнения Лиувилля-фон Неймана в $\mathcal{H}^{\otimes N}$

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -i[H_N, \rho_N(t)], \qquad H_N = \sum_j h_j + \frac{1}{N}\sum_{i \neq j} V_{ij}$$

$$h_j = \underbrace{I \otimes \ldots \otimes I}_{j-1} \otimes h \otimes I \otimes \ldots \otimes I, \quad h \in \mathcal{H}$$

V_{ij} — тоже подразумевает, что оператор нетривиально действует в i-м и j-м пространствах.

Приближение среднего поля (приближение Хартри)

$$\lim_{N \to +\infty} \mathrm{Tr}_{n+1,\ldots,N}\, \rho_N(t) = \otimes_1^n \rho(t)$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Доказательство: $n = 1$

$$\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\, \rho_N(t) = \rho(t)$$

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\, \rho_N(t)}_{=\rho(t)} = -i \lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N} [H_N, \rho_N(t)]$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

$$\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[\sum_{j=1}^{N} h_j, \rho_N(t)\right] =$$

$$= \lim_{N\to+\infty}\left([h, \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\,\rho_N(t)] + \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[\sum_{j=2}^{N} h_j, \rho_N(t)\right]\right) = [h,\rho(t)],$$

где учтено

$$\lim_{N\to+\infty}[h, \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\,\rho_N(t)] = [h,\rho(t)], \qquad \lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_j[h_j, \rho_N(t)] = 0$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

$$\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[\frac{1}{N}\sum_{i\neq j} V_{ij}, \rho_N(t)\right] =$$

$$= \lim_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[\sum_{j}(V_{1j}+V_{j1}), \rho_N(t)\right] =$$

в силу симметрии

$$= \lim_{N\to+\infty} \frac{N-1}{N} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[V_{12}+V_{21}, \rho_N(t)\right] =$$

$$= \lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2}\left[V_{12}+V_{21}, \mathrm{Tr}_{3,\ldots,N}\,\rho_N(t)\right] =$$

$$= \mathrm{Tr}_{2}\left[V_{12}+V_{21}, \rho(t)\otimes\rho(t)\right]$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h + V_H(\rho(t)) + V_D(\rho(t)),\rho(t)]$$

Потенциал Хартри

$$V_H(\rho) = \mathrm{Tr}_2(V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho)$$

Потенциал коллективных диссипативных процессов

$$V_D(\rho) = \frac{i}{2}\sum_{\alpha}(\mathrm{Tr}((V^{\alpha})^{\dagger}\rho)V^{\alpha} - \mathrm{Tr}(V^{\alpha}\rho)(V^{\alpha})^{\dagger})$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

Для чистых состояний

$$\rho(t) = |\psi_t\rangle\langle\psi_t|$$

получаем нелинейное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle = -i(h + V_H(\psi_t) + V_D(\psi_t))|\psi_t\rangle$$

$$V_H(\psi) = \langle\psi|(V_{12} + V_{21})|\psi\rangle$$

$$V_D(\psi) = \frac{i}{2}\sum_\alpha(\langle\psi|(V^\alpha)^\dagger|\psi\rangle V^\alpha - \langle\psi|V^\alpha|\psi\rangle(V^\alpha)^\dagger)$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

Доказательство:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \left(\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle\right)\langle\psi_t| + |\psi_t\rangle\left(\frac{d}{dt}\langle\psi_t|\right) =$$

$$= -i(h + V_H(\psi_t) + V_D(\psi_t))|\psi_t\rangle\langle\psi_t| + i|\psi_t\rangle(h + V_H(\psi_t) + V_D(\psi_t)) =$$

$$= -i[h + V_H(\rho(t)) + V_D(\rho(t)), \rho(t)]$$

$$V_H(\psi) = \langle\psi|(V_{12} + V_{21})|\psi\rangle = \mathrm{Tr}_2(V_{12} + V_{21}) I \otimes |\psi\rangle\langle\psi| =$$

$$= \mathrm{Tr}_2(V_{12} + V_{21}) I \otimes \rho$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

$$V_D(\psi) = \frac{i}{2}\sum_\alpha (\langle\psi|(V^\alpha)^\dagger|\psi\rangle V^\alpha - \langle\psi|V^\alpha|\psi\rangle(V^\alpha)^\dagger) =$$

$$= \frac{i}{2}\sum_\alpha (\mathrm{Tr}((V^\alpha)^\dagger|\psi\rangle\langle\psi|)V^\alpha - \mathrm{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|V^\alpha)(V^\alpha)^\dagger) =$$

$$= \frac{i}{2}\sum_\alpha (\mathrm{Tr}((V^\alpha)^\dagger\rho)V^\alpha - \mathrm{Tr}(\rho V^\alpha)(V^\alpha)^\dagger) \quad \square$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

Такое уравнение возникает в приближении среднего поля из линейного многочастичного уравнения $\mathcal{H}^{\otimes N}$

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -\, i \left[\sum_j h_j + \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \rho_N(t) \right] + \\ + \frac{1}{N} \sum_\alpha \left(W^\alpha \rho_N(t) (W^\alpha)^\dagger - \frac{1}{2} \{ (W^\alpha)^\dagger W^\alpha, \rho_N(t) \} \right),$$

где $W^\alpha = \sum_i V_i^\alpha$ — коллективные операторы.

$$\rho(t) = \lim_{N \to +\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\, \rho_N(t)$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -i\omega[J^z, \rho_N(t)] + \underbrace{\gamma_0}_{\frac{1}{N}N\gamma_0}\left(J^-\rho_N(t)J^+ - \frac{1}{2}\{J^+J^-, \rho_N(t)\}\right)$$

$$J^z = \sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\sigma_j^z, \qquad J^\pm = \sum_{j=1}^{N}\sigma_j^\pm$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -i\omega[J^z, \rho_N(t)] + \underbrace{\gamma_0}_{\frac{1}{N}N\gamma_0}\left(J^-\rho_N(t)J^+ - \frac{1}{2}\{J^+J^-, \rho_N(t)\}\right)$$

$$J^z = \sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\sigma_j^z, \qquad J^\pm = \sum_{j=1}^{N}\sigma_j^\pm$$

$$h = \frac{\omega}{2}\sigma^z, \quad V_H(\psi) = 0, \quad V_D(\psi) = \frac{iN\gamma_0}{2}(\langle\psi|\sigma^+|\psi\rangle\sigma^- - \langle\psi|\sigma^-|\psi\rangle\sigma^+)$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -i\omega[J^z,\rho_N(t)] + \underbrace{\gamma_0}_{\frac{1}{N}N\gamma_0}\left(J^-\rho_N(t)J^+ - \frac{1}{2}\{J^+J^-,\rho_N(t)\}\right)$$

$$J^z = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2}\sigma_j^z, \qquad J^\pm = \sum_{j=1}^N \sigma_j^\pm$$

$$h = \frac{\omega}{2}\sigma^z, \quad V_H(\psi) = 0, \quad V_D(\psi) = \frac{iN\gamma_0}{2}(\langle\psi|\sigma^+|\psi\rangle\sigma^- - \langle\psi|\sigma^-|\psi\rangle\sigma^+)$$

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -i\frac{\omega}{2}\sigma^z|\psi(t)\rangle + \\ + \frac{N\gamma_0}{2}(\langle\psi(t)|\sigma^+|\psi(t)\rangle\sigma^- - \langle\psi(t)|\sigma^-|\psi(t)\rangle\sigma^+)|\psi(t)\rangle$$

Пример

Распишем покомпонентно

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\psi_1(t) & = -i\frac{\omega}{2}\psi_1(t) - \frac{N\gamma_0}{2}|\psi_2(t)|^2\psi_1(t) \\ \frac{d}{dt}\psi_2(t) & = i\frac{\omega}{2}\psi_2(t) + \frac{N\gamma_0}{2}|\psi_1(t)|^2\psi_2(t) \end{cases}$$

Сохраняется нормировка

$$|\psi_1(t)|^2 + |\psi_2(t)|^2 = 1$$

Введём $p(t) = |\psi_1(t)|^2$, тогда

$$\psi_1(t) = \sqrt{p(t)}e^{i\theta(t)}$$
$$\psi_2(t) = \sqrt{1-p(t)}e^{i\phi(t)}$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\psi_1(t) = \frac{d}{dt}(\sqrt{p(t)}e^{i\theta(t)}) = \frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{p(t)}\psi_1(t) + i\dot{\theta}(t)\psi_1(t)$$

$$\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{p(t)}\psi_1(t) + i\dot{\theta}(t)\psi_1(t) = -i\frac{\omega}{2}\psi_1(t) - \frac{N\gamma_0}{2}(1-p(t))\psi_1(t)$$

$$\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{p(t)} + i\dot{\theta}(t) = -i\frac{\omega}{2} - \frac{N\gamma_0}{2}(1-p(t))$$

Приравнивая вещественные и мнимые части

$$\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{p(t)} = -\frac{N\gamma_0}{2}(1-p(t)), \qquad \dot{\theta}(t) = -\frac{\omega}{2}$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\psi_2(t) = \frac{d}{dt}(\sqrt{1-p(t)}e^{i\phi(t)}) = -\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{1-p(t)}\psi_2(t) + i\dot{\phi}(t)\psi_2(t)$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{1-p(t)}\psi_2(t) + i\dot{\phi}(t)\psi_2(t) = i\frac{\omega}{2}\psi_2(t) + \frac{N\gamma_0}{2}p(t)\psi_2(t)$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{1-p(t)} + i\dot{\phi}(t) = i\frac{\omega}{2} + \frac{N\gamma_0}{2}p(t)$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{1-p(t)} = \frac{N\gamma_0}{2}p(t), \quad \dot{\phi}(t) = \frac{\omega}{2}$$

Пример

Решения для фаз

$$\theta(t) = \theta(0) - \frac{\omega}{2}t, \qquad \phi(t) = \phi(0) + \frac{\omega}{2}$$

— такие же, как при свободной эволюции.

Пример

$$\frac{dp(t)}{(1-p(t))p(t)} = -N\gamma_0 dt$$

$$\int \frac{dp}{p(1-p)} = \int \left(\frac{1}{p} + \frac{1}{1-p}\right) dp = \ln p - \ln(1-p) = \ln \frac{p}{1-p}$$

$$\frac{p}{1-p} = \frac{p_D}{1-p_D} e^{-N\gamma_0(t-t_D)}$$

t_D — время задержки сверхизлучения: $p_D = \frac{1}{2}$.

$$p(t) = \frac{1}{e^{N\gamma_0(t-t_D)}+1}$$

Пример

Среднее число атомов в возбуждённом состоянии $Np(t)$.
Интенсивность излучения

$$I(t) = -N\omega\frac{d}{dt}p(t) = -N\omega\frac{d}{dt}\frac{1}{e^{N\gamma_0(t-t_D)}+1} =$$
$$= \frac{\gamma_0\omega N^2}{4}\frac{1}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{\gamma_0 N}{2}(t-t_D)\right)}$$

Бессвёрточное линейное кинетическое уравнение

Теорема

Пусть $\rho(t)$ - матрично-значная функция $t \in [t_0, +\infty)$, удовлетворяющая обыкновенному дифференциальному уравнению

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

где $\mathcal{L}(t)$ — супероператорно-значная функция, непрерывная для $t \in [t_0, +\infty)$, а λ — параметр.

Теорема 1 (продолжение)

Пусть $\mathcal{P}(t)$ — супероператорно-значная функция, которая непрерывно дифференцируема при $t \in [t_0, +\infty)$, и при каждом фиксированном t значение этой функции является идемпотентом $\mathcal{P}(t) = \mathcal{P}^2(t)$. Обозначим $\mathcal{Q}(t) \equiv I - \mathcal{P}(t)$, где I — тождественный супероператор.
Пусть $\mathcal{U}_{t_0}^t$ — решение задачи Коши.

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

Бессвёрточное линейное кинетическое уравнение

Теорема 1 (продолжение)

Тогда, при достаточно малой λ (и фиксированном t), $\mathcal{P}(t)\rho(t)$ удовлетворяет линейному кинетическому уравнению

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

где

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

$$\mathcal{I}(t) \equiv \dot{\mathcal{P}}(t)\mathcal{U}_{t_0}^{t}\mathcal{Q}(t) + \mathcal{P}(t)\dot{\mathcal{U}}_{t_0}^{t}\mathcal{Q}(t) - \mathcal{K}(t)\mathcal{P}(t)\mathcal{U}_{t_0}^{t}\mathcal{Q}(t).$$

Зависящий от времени проектор Арджироса-Келли

Вполне естественно рассматривать зависящий от времени проектор Арджироса-Келли вида

$$\mathcal{P}_{AK}(t)X = \mathrm{Tr}_B\, X \otimes \rho_B(t),$$

Такая ситуация возникает в

- *Accardi L., Kozyrev S.V., Pechen A.N.* Coherent Quantum Control of Λ-Atoms through the Stochastic Limit / Quantum Information and Computing, QP-PQ: Quantum Probab. White Noise Anal. 19, 2006. P. 1-17.

если записать его в терминах проекционных методов.

Динамика Робертсона

Определение

Если $\rho(t)$ *и* $\mathcal{P}(t)$ *при* $t \in [t_0, +\infty)$ *таковы, что*

$$\dot{\mathcal{P}}(t)\rho(t) = 0,$$

тогда говорят, что $\mathcal{P}(t)\rho(t)$ *эволюционирует в соответсвии с* ***динамикой Робертсона****.*

Динамика Робертсона

В случае динамики Робертсона $\mathcal{P}(t)\rho(t)$ удовлетворяет линейному кинетическому уравнению

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

где

$$\mathcal{K}(t) \equiv \left(\mathcal{P}(t)\dot{\mathcal{U}}_{t_0}^{t}\mathcal{P}(t)\right)(\mathcal{P}(t)\mathcal{U}_{t_0}^{t}\mathcal{P}(t))^{(-1)},$$
$$\mathcal{I}(t) \equiv \mathcal{P}(t)\dot{\mathcal{U}}_{t_0}^{t}\mathcal{Q}(t) - \mathcal{K}(t)\mathcal{P}(t)\mathcal{U}_{t_0}^{t}\mathcal{Q}(t).$$

А пертурбативное разложение $\mathcal{K}(t)$ и $\mathcal{I}(t)$ в λ для $\lambda \to +0$ является ***таким же, как*** для не зависящего от времени проектора.

Динамика Робертсона

Утверждение (Линейные кинетические уравнения второго порядка)

Для динамики Робертсона имеем

$$\mathcal{K}(t) = \lambda \mathcal{P}(t)\mathcal{L}(t)\mathcal{P}(t) + \lambda^2 \mathcal{P}(t)\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}(t) \int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{L}(t_1)\mathcal{P}(t) + O(\lambda^3),$$

$$\mathcal{I}(t) = \lambda \mathcal{P}(t)\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}(t) + \lambda^2 \mathcal{P}(t)\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}(t) \int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{L}(t_1)\mathcal{Q}(t) + O(\lambda^3),$$

где $\lambda \to 0$.

Динамика Робертсона

Обычно, чтобы условие $\dot{\mathcal{P}}(t)\rho(t) = 0$ было выполнено, зависимость $\mathcal{P}(t)$ не может быть выбрана "глобально" так, чтобы она выполнялась для $\rho(t)$, динамика которого определяется произвольным $\mathcal{L}(t)$. Вместо этого, она выбирается как сложная функция самого $\rho(t)$.

$$\mathcal{P}(t) = \mathcal{P}_{NL}(\rho(t)),$$

где $\mathcal{P}_{NL}(\rho)$ — функция, являющаяся нелинейным аналогом проектора из "стандартной" схемы вывода линейных кинетических уравнений.
С помощью этого трюка вывод нелинейного линейного кинетического уравнения может "***мимикрирует***" под вывод линейного.

Обобщенный проектор Кавасаки-Гантона

Определение (Шаг 0)

Пусть P_m, $m = 1, \ldots, M$ — набор самосопряжённых матриц, линейно независимых друг от друга и от единичныой матрицы. Эти матрицы будем называть ***релевантными наблюдаемыми****.*
Пусть $\rho_{ans}(\vec{E})$ — семейство матриц плотности, непрерывно дифференцируемых как функция параметров $\vec{E}$, принадлежащих области в $\mathbb{R}^M$, и удовлетворяющих условиям

$$\mathrm{Tr}\, P_m \rho_{ans}(\vec{E}) = E_m,$$

которые мы будем называть ***условиями согласованности****.*
Это семейство $\rho_{ans}(\vec{E})$ будем называть ***анзацем согласованным с релевантными наблюдаемыми*** *P_m.*

Обобщенный проектор Кавасаки-Гантона

Определение 2 (Шаг 1)

Пусть задан анзац $\rho_{ans}(\vec{E})$, согласованный с релевантными наблюдаемыми $\vec{P}$.
Введем семейство (линейных) супероператоров $\mathcal{P}_{KG,par}(\vec{E})$, также параметризованных вектором $\vec{E}$, которые действуют на произвольную матрицу X по формуле

$$\mathcal{P}_{KG,par}(\vec{E})X \equiv \rho_{ans}(\vec{E}) \operatorname{Tr} X + \left(\operatorname{Tr}(X\vec{P}) - (\operatorname{Tr} X)\vec{E}, \frac{\partial \rho_{ans}(\vec{E})}{\partial \vec{E}} \right).$$

Обобщенный проектор Кавасаки-Гантона

Определение 2 (Шаг 2)

Введем супероператорно-значную функцию $\mathcal{P}_{KG,NL}(\rho)$ матрицы плотности ρ по формуле

$$\mathcal{P}_{KG,NL}(\rho) = \mathcal{P}_{KG,par}(\vec{E})|_{\vec{E}\equiv \mathrm{Tr}\, \vec{P}\rho}$$

Обобщенный проектор Кавасаки-Гантона

Утверждение

Если $\operatorname{Tr}\rho = 1$ *(в частности, если* ρ *— матрица плотности)*

$$\mathcal{P}_{KG,NL}(\rho)\rho = \rho_{ans}(\vec{E})_{\vec{E}=\operatorname{Tr}(\rho\vec{P})}.$$

Таким образом, функция $\mathcal{F}(\rho) \equiv \mathcal{P}_{KG,NL}(\rho)\rho$ отображает произвольную матрицу плотности в матрицу плотности, соответствующую выбранному анзацу $\rho_{ans}(\vec{E})$ так, что средние по всем релевантным наблюдаемым исходной матрицы плотности ρ и анзаца $\rho_{ans}(\vec{E})$ совпадают.

Обобщенный проектор Кавасаки-Гантона

Определение 2 (Шаг 3)

Пусть матрица плотности $\rho(t)$ удовлетворяет уравнению

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

тогда определим супероператорно-значную функцию времени $t \in [t_0, +\infty)$

$$\mathcal{P}_{KG}(t) \equiv \mathcal{P}_{KG,NL}(\rho(t)).$$

Эту функцию будем называть ***обобщенным проектором Кавасаки-Гантона***, соответствующим анзацу $\rho_{ans}(\vec{E})$, согласованному с соответствующими наблюдаемыми $\vec{P}$.

Обычный проектор Кавасаки-Гантона

Стандартное определение проектора Кавасаки-Гантона основано на семействе распределений Гиббса вида

$$\rho_{Gibbs}(\vec{\beta}) = \frac{e^{-(\vec{\beta},\vec{P})}}{Z(\vec{\beta})}, \qquad Z(\vec{\beta}) \equiv \operatorname{Tr} e^{-(\vec{\beta},\vec{P})},$$

где $(\vec{\beta}, \vec{P}) \equiv \sum_m \beta_m P_m$. Тогда, решая систему

$$\operatorname{Tr} \vec{P} \rho_{Gibbs}(\vec{\beta}) = \vec{E}$$

относительно $\vec{\beta}$, где $\vec{E}$ играет роль семейства параметров, получаем функцию $\vec{\beta}(\vec{E})$ и семейство распределений Гиббса может быть репараметризована посредством $\vec{E}$. Такое репораметризованное семейство играет роль анзаца согласовного с набором $\vec{P}$, то есть в данном случае

$$\rho_{ans}(\vec{E}) = \rho_{Gibbs}(\vec{\beta}(\vec{E})).$$

Обычный проектор Кавасаки-Гантона

- *Kawasaki K., Gunton J.D.* Theory of Nonlinear Transport Processes: Nonlinear Shear Viscosity and Normal Stress Effects // Phys. Rev. A. 1973. V. 8, N 4.
- *Zubarev D., Morozov V.G., Röpke G.* Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes. Berlin: Akademie Verlag, 1997.
- *Seke J.* Equations of Motion in Nonequilibrium Statistical Mechanics of Open Systems // Phys. Rev. A. 1980. V. 21, N 6. P. 2156–2165.
- *Kato A., Kaufmann M., Muschik W., Schirrmeister D.* Different Dynamics and Entropy Rates in Quantum-Thermodynamics // J. Non-Equilib. Thermodyn. 2000. V. 25, N 1. P. 63–86.

Обычный проектор Кавасаки-Гантона

- *Semin V., Petruccione F.* Dynamical and Thermodynamical Approaches to Open Quantum Systems // Sci. Rep. 2020. V. 10, N 1. P. 2607.

$$\rho_{Renyi,q}(\vec{E}) = \frac{1}{Z_q(\vec{E})}\left(1 + \frac{q-1}{q}(\vec{\beta}(\vec{E}),\vec{E} - \vec{P})\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

где q — параметр энтропии Реньи, $Z_q(\vec{E})$ определяется условием нормировки

$$\mathrm{Tr}\,\rho_{Renyi,q}(\vec{E}) = 1,$$

а функции $\vec{\beta}(\vec{E})$ выбираются так, чтобы выполнялись условия согласованности.

Линейные анзацы

Утверждение

Пусть анзац $\rho_{ans}(\vec{E})$ *имеет вид* $\rho_{ans}(\vec{E}) = B_0 + (\vec{E}, \vec{B})$*, где* B_0 *и* $\vec{B}$ *представляют собой фиксированный (не зависящий от* $\vec{E}$*) набор матриц, тогда* $\mathcal{P}_{KG}(t) = \mathrm{const}$.

Линейные анзацы

Неформально говоря, в "стандартной" ситуации мы имеем

$$\rho_{ans}(\rho_S) = \rho_S \otimes \rho_B$$

при $\vec{E} = \rho_S$, $\rho_B = \mathrm{fix}$ и $\vec{P}$ таковы, что они образуют базис в линейном пространстве вида $X \otimes I$ вместе с $I \otimes I$.
Тогда проектор Кавасаки-Гантона сводится к проектору Арджироса-Келли

$$\mathcal{P}_{KG} = \mathcal{P}_{AK} = \mathrm{tr}_B(\,\cdot\,) \otimes \rho_B$$

Уравнение первого порядка

Утверждение

Для проектора Кавасаки-Гантона и начального условия в форме, определяемой анзацем, линейное кинетическое уравнение первого порядка (опуская члены $O(\lambda^2)$) принимает вид

$$\frac{d}{dt}\left(\rho_{ans}(\vec{E})|_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}\right)$$
$$= \lambda\left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial\rho_{ans}(\vec{E})}{\partial\vec{E}}\right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}$$

- Kh. Sh. Meretukov, A. E. Teretenkov, "On Time-Dependent Projectors and a Generalization of the Thermodynamical Approach in the Theory of Open Quantum Systems", Proc. Steklov Inst. Math., 324 (2024), 135–152 , arXiv: 2307.00607

Уравнение первого порядка

Что можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt}\vec{E}(t) = \lambda \, \mathrm{Tr}(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E}(t)),$$

Поэтому можно просто усреднить уравнение

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \lambda\mathcal{L}(t)\rho(t)$$

по отношению к релевантным наблюдаемым параметрам $\vec{P}$, предполагая $\rho(t) \approx \rho_{ans}(\vec{E}(t))$.

Уравнение первого порядка

Например, для $\rho(t)$ в гильбертовом пространстве вида $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$.

$$\rho_{ans}(\rho_1(t)) = \rho_1(t) \otimes \rho_1(t)$$

и при тех же $\vec{P}$, что и для Арджироса-Келли, получается уравнение типа Хартри

$$\frac{d}{dt}\rho_1(t) = \lambda \operatorname{Tr}_2(\mathcal{L}(t)(\rho_1(t) \otimes \rho_1(t))),$$

Уравнение второго порядка

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\left(\rho_{ans}(\vec{E})|_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}\right) = \\
&\lambda \left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial \rho_{ans}(\vec{E})}{\partial \vec{E}} \right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}} \\
&+ \lambda^2 \left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{L}(t_1)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial \rho_{ans}(\vec{E})}{\partial \vec{E}} \right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}} \\
&- \lambda^2 \left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial \rho_{ans}(\vec{E})}{\partial \vec{E}} \right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}} \times \\
&\qquad \times \left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{L}(t_1)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial \rho_{ans}(\vec{E})}{\partial \vec{E}} \right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}.
\end{aligned}
$$

Уравнение второго порядка

Если $\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E})\right) = 0$, то он принимает вид

$$\frac{d}{dt}\vec{E}(t) = \lambda^2 \,\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{L}(t_1)\rho_{ans}(\vec{E}(t))\right),$$

где $\vec{E}(t) = \mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}$. Для проектора Арджироса-Келли это приводит к обычным уравнениям второго порядка для открытых квантовых систем. И нестрого для общего анзаца $\rho_{ans}(\vec{E}(t))$ оно может быть "выведено" физическим способом, используя приближение $\rho(t) \approx \rho_{ans}(\vec{E}(t))$ вместо борновского приближения $\rho \approx \rho_S \otimes \rho_B$.