Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 4. Монотонность классической относительной энтропии. Представление Гейзенберга для открытых систем. Генератор ГКСЛ типа классической диффузии

Теретёнков Александр Евгеньевич

1 октября 2025 г.

В прошлой лекции...

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

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

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

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

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

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.

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

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

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

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

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

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

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

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

- Cover T. M., Thomas J. A. Elements of information theory. – John Wiley & Sons, 2012. p. 81.

Физическая интерпретация

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

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

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

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

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

- T. Van Erven, P. Harremos. "Rényi divergence and Kullback-Leibler divergence." IEEE Transactions on Information Theory 60.7 (2014): 3797-3820.

"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

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

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