浅谈马尔科夫动力学

童心海*
物理系，东京大学*
(Dated: February 24, 2025)

Contents

*xinhai@iis.u-tokyo.ac.jp

I 引言

本讲义是我于2025年2月在参加武汉大学同学们所组织讨论班的发言稿。2月初的时候，我被告知这学期的讨论班是以凝聚态理论为主题的。虽然这与我自己的研究方向不同，但是统计物理学应用非常广泛，我应该还是可以做出贡献。不过可惜的是，我也了解到理论物理讨论班基本这学期就是最后一届了。既然如此，对我来说就更有必要珍惜这次机会。

“为什么要选择介绍马尔科夫动力学”相信有的同学会有这样的疑问。实际上不仅仅是因为马尔科夫动力学是统计物理的研究重点，其在开放系统中的应用也是凝聚态物理，量子光学与量子信息等领域经常会涉及到的话题，参见专著[1]。甚至在前些时候引起关注的量子引力新进展用也被大量使用[2]。所以哪怕之后大家不接触统计物理学的研究，这方面介绍的内容还是会有帮助。相比之下，虽然我被建议介绍我最近有关数学物理的工作，但是我感觉并不合适。因为这些内容太过专门化且需要太多铺垫和繁难的计算，这很可能让大家失去兴趣。之前我就听说，理论物理讨论班的内容越来越“高深”，讨论了很多各种弦理论与前沿的场论的内容。那这次，我们不妨把学术品味“降低”一些，关注更加实用化的内容。

于是结合本人的研究经历和考虑大家的需求，我选择了马尔科夫动力学作为主题。这个框架简洁清晰地刻画了非平衡动力学的有关性质，由于其普遍的表述而广泛应用于相当多的话题中。而且，有关的话题数学计算普遍有趣但是又不太繁。很适合一次性介绍完。当然，实际情况也许会有一些出入。未能介绍完的部分，还请感兴趣的同学之后再看看。如果你们接着讨论剩下的内容，我非常高兴。有任何问题欢迎邮件联系我。

至于本讲义的写作风格，我了解到讨论班以本科生为主，还有大二的学生。考虑到同学们可能对统计物理理解可能略浅，我尽可能用文字叙述而非形式逻辑介绍部分内容。同时客观来说同学们水平必然有差异，这么做也是为了照顾对统计物理不太熟悉的同学。当然，必要的计算是少不了的。但是即便如此，我还是几乎把计算的所有细节给补全了。实际上我本人的导师，东京大学羽田野直道教授(Prof. Naomichi Hatano)经常告诫我论文写作时要“be kind to readers”，不要吝啬笔墨尽可能让人读的舒服，尽可能不要跳步。也许学术论文写作中未必要这样，但是在本讲义的写作过程中，我就采纳了这样的建议。另一方面，我的合作者之一，东京大学龚宗平教授(Prof. Zongping Gong)认为要减少论文写作的“堆砌感”从而进一步提高可读性。所以这次讲义的写作我没有像上次讲义一样一口气把所有计算写完再讨论，而是更注意行文的逻辑并尽量对每一处计算都进行必要的物理解释。另外，考虑到低年级本科生的阅读与学习习惯，我尽量全部用中文介绍专有名词并附上英文原文与链接。不过请允许我好为人师地提醒一句，阅读英文文献是科研与学习的必备技能。

最后祝同学们的理论物理道路有更多乐趣和收获，以及祝愿武汉大学物理系发展顺利！

II 基础知识介绍

本节希望能迅速介绍可能用到的知识，记号和有关的动机。需要注意的是，本节的目的是以尽可能短的篇幅给之后的内容进行铺垫，**而不是严肃地从头开始构造统计物理理论**。为了简便，全文中我们取约化普朗克常数$\hbar = 1$并用$\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$表示逆温。这里$k_{\mathrm{B}}$是玻尔兹曼常量而$T$是绝对温度。

物理学的伟大成就之一，便是能预言未来的现象。牛顿力学使得人们对于经典世界的理解大大深入。小到雨滴下落的轨迹，大到行星运动的周期，都原则上可以从牛顿力学推导出来。这样的思想被法国数学家与物理学家拉普拉斯发挥到极致，他认为只要知道了历史的一切信息，未来就是可以被推算的。这样的观点被称之为决定论(determinism)。虽然量子力学的出现使得传统的决定论受到很大打击，但是量子力学中动力学变量（波函数，密度矩阵等）的演化仍然是决定论的。

显然，适合自然界不同尺度与不同对象的动力学完全有可能极其不一样。我们一个有效的策略是对不同动力学过程进行分门别类的研究。如果我们只关心决定论视角下的动力学，我们可以先仔细考察所谓"历史的一切信息"到底意味着什么。假设现在系统处于时刻t_0，那么系统下一个瞬间的状态，也就是对应于时刻$t_0 + \mathrm{d}t$的状态，应该都由对应于时刻$t \leq t_0$的状态决定。我们考虑一个极其特殊的情况，如果系统下一个瞬间的状态**仅仅**由t_0的状态决定呢？也就是说，系统下一个瞬间状态只由现在的状态决定，而对更早的历史"没有记忆"。这样的动力学过程我们称之为马尔科夫过程（Markov process），本文主题正是研究这类过程的动力学。容易想到，马尔科夫动力学只是很小一类相对简单的动力学问题，但是其应用已经十分广泛且远不只局限于物理学。实际上，我们熟知的保守势场$V(\boldsymbol{r})$中的牛顿第二定律

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\boldsymbol{r} = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r}), \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t) \tag{1}$$

所描述的动力学过程正是马尔科夫的，这里m代表物体的质量。但是如果Eq. (1)右边被增加一个不恒为零的时间延迟(time-delayed)项$f(\boldsymbol{r}(t-\tau))$从而变为

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\boldsymbol{r}(t) = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r}(t)) + f(\boldsymbol{r}(t-\tau)), \quad \tau > 0, \tag{2}$$

那么其动力学就不再是马尔科夫的，因为系统任意时刻的状态也受τ时间之前的状态所影响。在文献[3]中，介绍了大量针对形如Eq. (2)形式微分方程的研究。参见Appendix A更多有关的讨论。

明显可以看出，无论是在方程(1)中还是(2)，系统的状态也就是位矢$\boldsymbol{r}(t)$是可以连续取值于全体实数的。但是下面为了不丢失马尔科夫动力学的本质且进一步简化讨论，我们先关注状态离散的情况。此时系统只能处在由正整数n标记的若干个状态中，而我们关注系统处于某个状态n的概率。一般来说，这些概率是随着时间变化的。我们将之记为$\{p_n(t)\} =: \boldsymbol{p}(t)$并自然要求其满足正定性与归一性

$$p_n(t) \geq 0 \tag{3a}$$

$$\sum_n p_n(t) = 1. \tag{3b}$$

这样的设置(setup)在物理上是很常见的，比如说单一种类的若干粒子与热源（和粒子源接触）[4]，那么系统在达到平衡态之前处于各种微观态的概率分布当然会随着时间变化。实际上，这种系统自由度是很大的。我们无法对每一个粒子（以及热库中的粒子）做形如牛顿第二定律(1)那样的动力学，所以退而求其次考虑系统粒子的统计规律。我们还很容易找到别的例子可以用这个框架描述，比如溶液中有若干中由n标记的物质反应，各种物质占总体的百分数也可以用$\{p_n(t)\}$表达从而用主方程讨论其动力学。后者这类系统可以被归纳为反应-扩散系统(reaction–diffusion system)。文献中其动力学往往用Fokker-Planck方程讨论，详见文献[5]。

现在，既然我们只关注马尔科夫过程，那么概率$p_n(t + \mathrm{d}t)$应该只与$\{p_n(t)\}$有关。在物理上发生的动力学过程中, 系统状态的演化既可能从n态跳去其他状态, 也可以从其他状态跳到n这个状态。将在系统处于m态的前提

下，下一时刻变化到n态的跃迁速率记为$W_{nm}(t)$。其物理意义可从下式看出：

$$\dot{p}_n(t) = \sum_m W_{nm}(t) p_m(t), \tag{4}$$

等号的右边表示了其他所有态对n态概率变化率的贡献。我们称矩阵$\boldsymbol{W}(t) := \{W_{nm}(t)\}$为跃迁矩阵(transition matrix，也叫rate matrix)，注意到一般来说它也是与时间有关的。

这样一来，Equation. (4)也可以写为更紧凑的形式写为更紧凑的形式(参见Appendix A更多有关跃迁矩阵的限制)

$$\dot{\boldsymbol{p}}(t) = \boldsymbol{W}(t)\boldsymbol{p}(t) \tag{5}$$

但是这一方程的物理意义还不够明确。从物理上来说，我们设想状态$p_n(t)$的变化应该由两个因素贡献，一个是系统从这个态跳往其他态，另外一个是其他态跳往这个态。为了改写Eq. (4),我们先注意到有

$$\sum_{nm} W_{nm}(t) p_m(t) = \sum_n \dot{p}_n(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_n p_n(t) = 0, \tag{6}$$

这里最后一个等式来自于概率守恒条件Eq. (3b). 我们注意到Eq. (6)是对任意概率分布$\{p_m(t)\}$成立的，特别地我们可以取$p_m(t) = \delta_{mk}$从而得到

$$0 = \sum_{nm} W_{nm}(t)\delta_{mk} = \sum_n W_{nk}(t). \tag{7}$$

这里$\delta_{\bullet\circ}$是克罗内克delta记号，这个概率分布的物理意义是系统一直静止地处于k状态，容易验证这样的选取满足条件(3)。于是Eq. (7)明确指出了概率守恒对于跃迁矩阵的约束。并不是随意写下形如Eq. (4)的方程就以表示真实的物理过程。利用Eq. (7)我们得以用如下方式表示跃迁矩阵$\boldsymbol{W}(t)$的对角元：

$$W_{nn}(t) = -\sum_{m\neq n} W_{mn}(t), \tag{8}$$

这里$\sum_{m\neq n}$代表对所有不等于n的m求和，规范的表达是$\sum_{m:m\neq n}$但是这里简化处理了。把Eq. (8)带入Eq. (4)中我们自然有

$$\dot{p}_n(t) = \sum_{m\neq n} W_{nm}(t)p_m(t) + W_{nn}(t)p_n(t) = \sum_{m\neq n} W_{nm}(t)p_m(t) - \sum_{m\neq n} W_{mn}(t)p_n(t). \tag{9}$$

从而得到教科书上规范形式的主方程

$$\dot{p}_n(t) = \sum_{m\neq n} [W_{nm}(t)p_m(t) - W_{mn}(t)p_n(t)]. \tag{10}$$

如此一来，Eq. (10)右边的物理意义十分明确，第一项表示从其他态跳到n态的概率，而第二项正式从n态跳往其他态的概率。这里再次强调，虽然Eq. (4)和Eq. (10)看起来形式很不一样，但是他们是完全等价的。前者貌似普遍而“随意”的多，后者看起来形式上颇为考究，但是由于概率守恒对跃迁矩阵的限制[cf. Eq. (3b)]，两者在数学上完全等价。当然，对于n连续取值的情况，也可以写出连续版本的主方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t) = \int \mathrm{d}y\, [W(x,y,t)p(y,t) - W(y,x,t)p(x,t)], \tag{11}$$

这里$W(x,y,t)$则应当理解为跃迁概率密度。为了提供更简单清晰的讨论，在下文中我们只关心n离散取值的情况，且只考虑跃迁矩阵$\boldsymbol{W}$不含时的情况。这样的设定并不会改变马尔科夫动力学的物理实质，同时使得记号会更简洁。

细心的读者应该已经发现了一些问题。主方程(10)和牛顿第二定律Eq. (1)描述的是完全不同的系统设置。首先很容易想到，前者是对（大量）粒子所处状态的统计规律，后者是描述单个质点的运动规律。但是更重

要的是，在写出主方程的时候我们就假设了系统在不同微观态中间跳跃。一般来说不同的微观态能量不一样，换言之系统和外界存在能量交换，说明我们在主方程中考虑的其实是**开放系统**(貌似牛顿运动方程[cf. Eq. (1)]中粒子的动能也在变化，但是如果把粒子和势场作为整体研究，系统仍然是封闭系统)。所谓开放系统，一般我们所考虑的研究对象（比如这里的粒子）会与环境（比如这里的热库）耦合。后者的自由度比前者还要大很多很多，直接将热库纳入牛顿力学体系处理是不现实的。试想我们关心杯子里一颗花粉的运动，难道还需要把杯子里的水分子都考虑进去吗？正是如此，我们不如把这里的花粉当成研究对象，只不过用开放系统的框架去处理即可。

既然我们已经对经典的开放系统有了一定了解，一个自然的问题是，对于量子情况下的开放系统，动力学是什么样子的呢？我们首先来看看量子开放系统的理论结构。同样的道理，总哈密顿量H_{T}应该包括三项：研究对象（简称系统）H_{S}，热库或者环境H_{B}，以及前两者的耦合H_{SB}。于是，哈密量应该写为

$$H_{\mathrm{T}} = H_{\mathrm{S}} + H_{\mathrm{B}} + H_{\mathrm{SB}}. \tag{12}$$

类比与经典情况下用概率的演化来表示动力学。如果我们关心总体的演化，其是个封闭系统。我们应该选取的动力学变量是所谓总密度算符$\rho_{\mathrm{T}}(t)$，其运动方程是熟知的冯·诺依曼方程

$$\dot{\rho}_{\mathrm{T}}(t) = -i[H_{\mathrm{T}}, \rho_{\mathrm{T}}(t)], \tag{13}$$

但是热库的自由度可以很大所以并不方便处理，我们还是老老实实只关心系统，用开放系统的思路来处理。接下来我们将讨论限于系统的自由度中，数学上我们引入叫做部分迹(partial trace)的操作：

$$\rho_{\mathrm{S}}(t) \coloneqq \mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}\, \rho_{\mathrm{T}}(t), \tag{14}$$

我们将总体系的密度算符$\rho_{\mathrm{T}}(t)$作热库空间的部分迹，其结果称为系统的约化密度算符(reduced density operator). 不严谨的说，求对热库的希尔伯特空间求部分迹的操作，就相当于“积分掉”我们不感兴趣的自由度。显然，获得$\rho_{\mathrm{S}}(t)$的运动方程就成了我们的核心任务。我们对Eq. (13)两边取部分迹就可以得到(好奇为何$\mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}[H_{\mathrm{B}}, \rho_{\mathrm{T}}(t)] = 0$的读者可以参考Appendix A)

$$\dot{\rho}_{\mathrm{S}}(t) = -i[H_{\mathrm{S}}, \rho_{\mathrm{S}}(t)] - i\,\mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}[H_{\mathrm{SB}}, \rho_{\mathrm{T}}(t)], \tag{15}$$

这里这个方程清晰的向我们展示，现在系统的动力学由两项简单叠加而成，一项来自系统本身冯诺依曼方程的演化，另外一项来自环境对系统的影响。如果可以忽略那么系统和环境相对独立演化，则动力学可以使用一般的量子力学理论处理。这一点可以这样看出来：在Eq. (15)中令$H_{\mathrm{SB}} = 0$，这个方程自然回到与冯诺依曼方程相同的结构。但是很多时候，耦合项H_{SB}是无法忽略的，甚至真实的实验中系统与环境的纠缠就是不可能绝对隔绝的。所以我们需要直面Eq. (15)中的第二项，这一项由于包括了环境的自由度而变得尤其棘手。

遗憾的是，关于这个问题目前我们还没有找到普遍的严格结果。而且一般来说，Eq. (15)表示的是非马尔科夫动力学（好奇这一点的读者可以参考Appendix A）。但是如果退而求此次，进行大量近似(包括马尔科夫近似)，我们还是可以得到所谓Lindblad主方程:

$$\dot{\rho}_{\mathrm{S}}(t) = -i[H_{\mathrm{S}} + \Delta H, \rho_{\mathrm{S}}(t)] + \sum_k \left[L_k \rho_{\mathrm{S}}(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \rho_{\mathrm{S}}(t)\} \right], \tag{16}$$

其中L_k表示jump operator, 一般来说它们与我们考虑问题的具体内容有关。而厄米算符ΔH表示Lamb shift，表示环境与系统相互作用对系统哈密顿量的修正。由于其表达式复杂且需要引入太多别的概念，这里仅仅形式上写出，具体表达式可以参考文献[6]中Eq. (55)下方的讨论。我们这里仅仅指出，当系统与环境无耦合的时候，Lamb shift项ΔH自然为0从而Eq. (16)可以回到冯·诺依曼方程。

目前“市面上”对Eq. (16)的推导都是十分复杂的。物理上的推导往往要经过大量繁琐的计算，可以参考文献[6]。原始的推导[7, 8]则更多基于数学上的方法，但是那需要引入很多抽象的概念。作为下一章的任务之

一，我们将给出目前所知的Lindblad方程最简单但是不严格的推导。这个方法是笔者导师的朋友，Prof. Yossi Avron告诉他的，然后导师又在与我讨论时教给我的。对于下一章介绍的对于Eq. (16)的推导，本文不声明任何原创性。

在进入下一章前，我们再引入一些会让后续的讨论非常方便的概念。我们先回顾经典主方程[cf. Eq. (4)]，在跃迁矩阵$\boldsymbol{W}$不含时的情况下，如果我们想在给定初始概率分布$\boldsymbol{p}(0)$的前提下求解这一方程，也就是

$$\dot{\boldsymbol{p}}(t) = \boldsymbol{W}\boldsymbol{p}(t) \tag{17}$$

也是很简单的。我们经过简单的计算

$$\ddot{\boldsymbol{p}}(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\boldsymbol{W}\boldsymbol{p}(t)] = \boldsymbol{W}\dot{\boldsymbol{p}}(t) = \boldsymbol{W}^2\boldsymbol{p}(t) \tag{18}$$

便可以归纳出

$$\boldsymbol{p}^{(n)}(t) = \boldsymbol{W}^n\boldsymbol{p}(t), \quad \forall n \in \mathbb{N} \tag{19}$$

这里上标(n)代表n阶导数。然后我们计算

$$\boldsymbol{p}(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\boldsymbol{p}^{(n)}(0) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\boldsymbol{W}^n\boldsymbol{p}(0) = e^{t\boldsymbol{W}}\boldsymbol{p}(0), \tag{20}$$

即可获得主方程的解。这里我们已经使用了矩阵指数$e^{\boldsymbol{A}} := \sum_{n=0}^{\infty}\boldsymbol{A}^n/n!$的定义。现在的问题是，量子情况[cf. Eq. (16)]下我们能否用类似的方法这么做？为了先看一个简单的例子，我们先考察前面提过的的冯·诺依曼方程

$$\dot{\rho}(t) = -i[H, \rho(t)], \tag{21}$$

这里为了简便我们已经假设系统哈密顿H不含时。显然Eq. (21)是Eq. (16)在没有环境项时候的特例。虽然很容易写出Eq. (21)在给定初始状态$\rho(0)$的解为

$$\rho(t) = e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt}. \tag{22}$$

但是如果我们想仿照Eq. (20)的推导，我们选择先将Eq. (21)改写为

$$\dot{\rho}(t) = \mathcal{U}(\rho(t)). \tag{23}$$

这里，$\mathcal{U}$是这样一种映射，它将一个算符映射为另外一个算符，计算规则是$\mathcal{U}(\bullet) := -i[H, \bullet]$。回忆量子力学中，算符本身就是一种映射，但是它被定义为希尔伯特空间中态对态的映射。现在我们引入的这种映射，当然是和算符这种映射是截然不同的(参考图Fig. 1和2来获得一个直观的理解)。我们称这种对象为超算符(superoperator)。 很容易验证，此时的超算符$\mathcal{U}$还是线性的，也就是说对于任意两个算符A, B和复数a, b，我们总有$\mathcal{U}(aA + bB) = a\mathcal{U}(A) + b\mathcal{U}(B)$. 对数学结构敏感的读者应该已经意识到，Eq. (23)和Eq. (17)其实是一回事，只要认识到矩阵本身也是被定义为矢量到矢量的映射。于是这两个方程可以概括为，**对动力学变量(概率分布向量/密度算符)的求一次时间导数等效于动力学生成元(跃迁矩阵/超算符)对其作用一次**。一样的道理，我们也可以通过简单计算

$$\ddot{\rho}(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\mathcal{U}(\rho(t))] = -i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[H, \rho(t)] = (-i)^2[H, [H, \rho(t)]] = \mathcal{U}^2(\rho(t)) \tag{24}$$

归纳出

$$\rho^{(n)}(t) = \mathcal{U}^n(\rho(t)), \quad \forall n \in \mathbb{N} \tag{25}$$

至此，我们也可以按照如下方式求解在给定初态$\rho(0)$条件下Eq. (23)的解：

$$\rho(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\rho^{(n)}(0) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\mathcal{U}^n(\rho(0)) = e^{t\mathcal{U}}\rho(0). \tag{26}$$

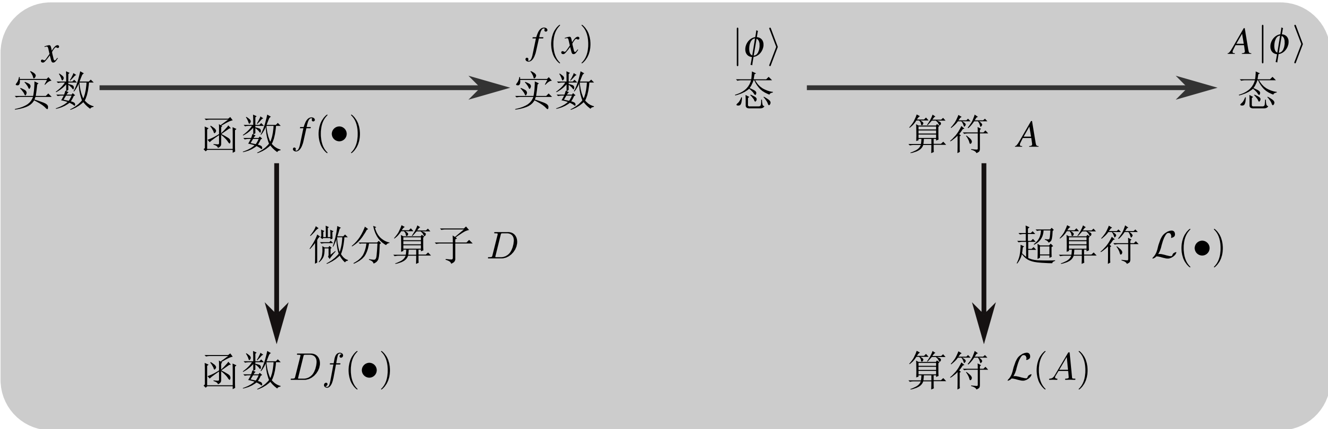

Figure 1: 利用图示与类比来理解超算符的概念。需要注意的是超算符并不是算符的依次作用，就如同导函数不是求导操作作为一个函数与原来的函数复合一样。

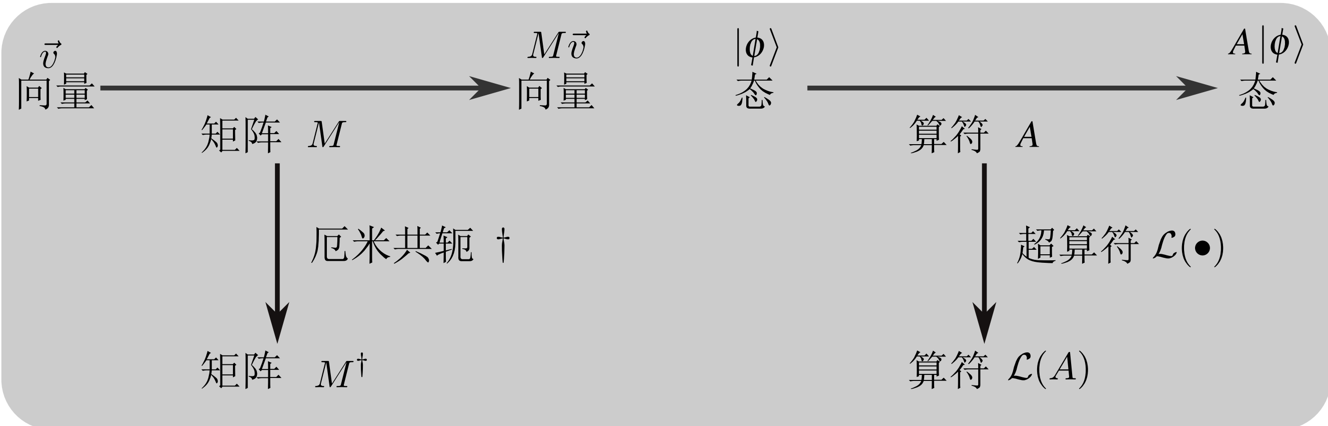

Figure 2: 利用图示与类比来理解超算符的概念。将希尔伯特空间的态，算符，超算符与线性代数课程中常见的向量，矩阵，矩阵操作（以厄米共轭为例）进行类比。由此也可以看出为何一般可以用矩阵表示算符。

这里我们同样类比矩阵指数定义了超算符指数。剩下的问题是如何显式地表达Eq. (26)的右边。为此我们先写出

$$e^{t\mathcal{U}}\rho(0) = \rho(0) + (-i)t[H,\rho(0)] + \frac{(-i)^2t^2}{2!}[H,[H,\rho(0)]] + \frac{(-i)^3t^3}{3!}[H,[H,[H,\rho(0)]]] + ... \tag{27}$$

再利用如下Hadamard's lemma：

$$e^{tA}Be^{-tA} = B + t[A,B] + \frac{t^2}{2!}[A,[A,B]] + \frac{t^3}{3!}[A,[A,[A,B]]] + ... \tag{28}$$

便可以得到和Eq. (22)一样的结果。虽然这里这样的解法显得笨拙，但是概念上的拓展是有帮助的。只要我们定义超算符

$$\mathcal{L}(\bullet) := -i[H_S,\bullet] + \sum_k \left[L_k \bullet L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \bullet\}\right] \tag{29}$$

便可以将Eq. (16)改写为

$$\dot{\rho}(t) = \mathcal{L}(\rho(t)) \tag{30}$$

从而至少写出对之后研究问题都很有帮助的形式解

$$\rho(t) = e^{t\mathcal{L}}(\rho(0)). \tag{31}$$

这里的超算符[cf. Eq. (29)]我们一般称之为Lindbladian超算符或简称为Lindbladian。

III 主方程的动力学性质

Lindblad方程[cf. Eq. (16)]的推导

现在，我们给出Eq. (16)的推导，为了简便我们不会引起歧义的时候略去下标s。需要说明的是这个推导是不严格的，具体体现在只能给出Eq. (16)的形式，而无法具体给出Lamb shift的表达式。但是由于推导总体来说计算很简单而且不抽象，仍然很适合入门。

在进行一切分析之前，我们先来想想一个物理上合理的动力学过程会给出什么样的函数形式$\rho(t)$。这个算符$\rho(t)$，起码得是一个密度算符，也就是说应当满足如下的半正定性与归一性的条件

$$\rho(t) \succeq 0 \tag{32a}$$

$$\operatorname{Tr}\rho(t) = 1, \tag{32b}$$

这也是之前对概率分布所施加条件(3)的量子版本。为了直观的理解条件Eq. (32)是怎么被满足的，我们先看看没有环境影响时，系统的动力学是什么样子的。我们记$U(t) := e^{-iHt}$为时间演化算符从而将Eq. (22)改写为

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U(t)^\dagger. \tag{33}$$

我们当然要求初始给定的密度算符$\rho(0)$是满足条件(32)的，那么$\rho(t)$对于任意一个时刻t还满足这些条件吗？这是很显然的。对于Eq. (32a),我们只需要按照定义即可。根据$\rho(0)$的正定性，对于任意希尔伯特空间的矢量$|\psi\rangle$都有$\langle\psi|\rho(0)|\psi\rangle \geq 0$。那么我们自然也有$\langle\psi|U(t)\rho(0)U(t)^\dagger|\psi\rangle := \langle\phi|\rho(0)|\phi\rangle \geq 0$,这里我们已经记$|\phi\rangle := U(t)^\dagger|\psi\rangle$. 对于Eq. (32b)显然有$\operatorname{Tr}\rho(t) = \operatorname{Tr}U(t)\rho(0)U(t)^\dagger = \operatorname{Tr}U(t)^\dagger U(t)\rho(0) = \operatorname{Tr}\rho(0) = 1$. 注意到我们这里**仅仅**用到了$U(t)^\dagger U(t) = \mathbb{1}$的性质，而不需要知道时间演化算符$U(t)$的具体形式。有的同学可能会疑问为什么不要求$\rho(t)$是厄米的，这是因为根据半正定性本身就是针对厄米算符而言的，厄米性已经被半正定性所包括。试想对于一个非厄米算符X和任意态$|\psi\rangle$，我们甚至不能断言$\langle\psi|X|\psi\rangle$就一定是一个实数，就更没有道理讨论其正负从而谈论半正定性了。另外，对于给定的初态我们总有$\operatorname{Tr}\rho(0) = 1$，所以Eq. (32b)也被称之为保迹性条件。

从上面的讨论，相信读者已经能理解是何种机制使得我们可以得到合理的动力学结果$\rho(t)$了。通俗的说，我们可以在$\rho(0)$两边分别放置一个算符和其厄米共轭，只要要求这个算符是幺正的，那么半正定性和归一性都可以满足。此外还有两个隐藏的条件。其一是，把$t = 0$带入到Eq. (33)后两边应该是恒等的：

$$\rho(0) \equiv U(0)\rho(0)U(0)^\dagger, \quad \text{对于任意的密度算符}\rho(0) \tag{34}$$

显然我们必须要求$U(0) = \mathbb{1}$才能满足这一要求，而这恰好也是自洽的，从$U(t)$的定义就可以看出来。其二是，Eq. (33)所描述的动力学是马尔科夫的。虽然从冯诺依曼方程(21)来看是显然的，我们这里还是做如下讨论。取$t = 0^+$,那么Eq. (33)告诉我们在0计算下一个时刻密度算符的值$\rho(t)$仅仅需要$t = 0$时刻的信息$\rho(0)$，对于更早的信息是不需要的。这是因为时间演化算符中所涉及的哈密顿算符H同样不依赖过去的信息。

哪怕经过了大量的讨论，不得不说此时我们仍旧没有解决问题：如何得到开放系统动力学的方程呢？所谓开放系统，至少有一个环境在影响系统。我们早就知道系统单独存在时候的演化是Eq. (33)，那么多个环境会怎么样呢？第一反应是，由于很多任意性在$\rho(t)$表达式的形式中，似乎很难想象怎么从Eq. (33)出发去修改。但是要注意，实际上我们对$\rho(t)$的表达式有不少限制：(i)半正定性，(ii)归一性，(iii)马尔科夫性的，(iv)带入$t = 0$时总可以恒等于$\rho(0)$. 为了满足第三个条件，我们还是只考虑$t = 0^+$时候的情况，不妨尝试写出如下形式：

$$\rho(t) = A(t)\rho(0)A(t)^\dagger + B(t)\rho(0)B(t)^\dagger \tag{35}$$

其中$A(\bullet)$和$B(\bullet)$是未必彼此恒等的算符函数。原则上Eq. (35)第二项也可以取作$B(t)g(\rho(0))B(t)^\dagger$，这里$g(\bullet)$是某个以算符为自变量的函数。但是为了让分析最简单我们直接选取$g(x) = x$。这里我们来仔细考察写下Eq. (35)这种形式的动机。我们之前已经对Eq. (15)的形式进行了讨论，环境影响系统动力学使之偏移标

准冯·诺依曼方程的方式是，在运动方程中简单叠加另外一项。那么我们有理由猜想Eq. (35)作为线性微分方程Eq. (15)的解也是简单叠加的形式。现在我们要一条一条对比限制条件从而得到关于$A(\bullet)$和$B(\bullet)$的信息。(i)半正定性是直接满足的，因为Eq. (35)右边两项都是半正定的，其和自然也是半正定的。(ii)归一性实际上要求

$$A(t)A(t)^{\dagger}+B(t)B(t)^{\dagger}=\mathbb{1}. \tag{36}$$

(iv)在$t=0$时候等号两侧恒等，等价于

$$\rho(0)=A(0)\rho(0)A(0)^{\dagger}+B(0)\rho(0)B(0)^{\dagger}, \tag{37}$$

一个合理的解是

$$A(0)=\mathbb{1} \tag{38a}$$
$$B(0)=0. \tag{38b}$$

以Eq. (38a)为基础，我们考虑在$t=0$附近$A(t)$的展开式：

$$A(t)\approx 1+at+o(t^2) \tag{39}$$

这里a是未必厄米但是与时间无关的算符。结合Eq. (36)中就有

$$A(t)^{\dagger}A(t)=1+\left(a^{\dagger}+a\right)t \implies B(t)^{\dagger}B(t)=-\left(a^{\dagger}+a\right)t. \tag{40}$$

现在我们就遇到问题，$B(t)$在$t=0$附近的展开式是什么？一方面，注意到Eq. (38b)实际上已经暗示$B(t)$的展开式第一项必然不是像$A(t)$第一项的$\mathbb{1}$，而应该是与t有关的，也就是形如t^{α}且$\alpha>0$。另一方面，我们又从Eq. (40)得出的结论知道，这个α必为$1/2$才能使得等号两边关于时间t的渐进行为相匹配(注意算符a不含时)。于是我们有

$$B(t)=b\sqrt{t}+o(t^2)\Rightarrow B^{\dagger}(t)=b^{\dagger}\sqrt{t}+o(t^2)\Rightarrow b^{\dagger}b=-\left(a^{\dagger}+a\right), \tag{41}$$

这里b是不含时的算符。实际上Eq. (41)告诉我们，算符a的厄米部分被算符b决定，我们可以引入**厄米算符**H来表示其反厄米部分(参见Appendix A有关这部分操作的细节)，从而有

$$a=-\frac{1}{2}b^{\dagger}b-iH \tag{42a}$$
$$a^{\dagger}=-\frac{1}{2}b^{\dagger}b+iH \tag{42b}$$

将Eqs. Eq. (39),(41)和(42)代入Eq. (35)得到

$$\begin{aligned}\rho(t)&=(1+at)\rho(0)\left(1+a^{\dagger}t\right)+b\sqrt{t}\rho(0)b^{\dagger}\sqrt{t}+o\left(t^2\right)\\&=\rho(0)+t\left[a\rho(0)+\rho(0)a^{\dagger}+b\rho(0)b^{\dagger}\right]+o\left(t^2\right)\\&=\rho(0)+t\left\{\left(-\frac{1}{2}b^{\dagger}b-iH\right)\rho(0)+\rho(0)\left(-\frac{1}{2}b^{\dagger}b+iH\right)+b\rho(0)b^{\dagger}\right\}+o\left(t^2\right)\\&=\rho(0)+t\left(-i[H,\rho(0)]-\frac{1}{2}\left\{b^{\dagger}b,\rho(0)\right\}+b\rho(0)b^{\dagger}\right)+o\left(t^2\right)\end{aligned} \tag{43}$$

两边除以t并取极限$t\to 0$就可以得到

$$\dot{\rho}(0)=-i[H,\rho(0)]+b\rho(0)b^{\dagger}-\frac{1}{2}\left\{b^{\dagger}b,\rho(0)\right\}, \tag{44}$$

注意时间零点我们是任意选取的，所以也就是说对于任意时刻我们都有

$$\dot{\rho}(t)=-i[H,\rho(t)]+b\rho(t)b^{\dagger}-\frac{1}{2}\left\{b^{\dagger}b,\rho(t)\right\}, \tag{45}$$

这便是和之前的Lindblad方程[cf. Eq. (16)]是完全一样的形式。我们现在立刻认识到，这里的厄米算符H就是系统的哈密顿量加上Lamb shift：$H_S+\Delta H$，而b算符就是所谓jump operator。我们完全可以把Eq. (35)中加上更多的项，

$$\rho(t)=A(t)\rho(0)A(t)^\dagger+\sum_k B_k(t)\rho(0)B_k(t)^\dagger \tag{46}$$

从而获得带有多个jump operator的Lindblad方程,只需要注意到$A(t)$的展开式不变而设定$B_k(t)=b_k\sqrt{t}$.

Lindblad方程[cf. Eq. (16)]的动力学性质

在简要讨论Lindblad方程有关的性质前，我们再将其重新列出以方便读者：

$$\dot{\rho}(t)=-i[H,\rho(t)]+\sum_k\left[L_k\rho(t)L_k^\dagger-\frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k,\rho(t)\}\right]:=\mathcal{L}(\rho(t)), \tag{47}$$

这里我们把$H_S+\Delta H$记作H并用$\{L_k\}$表示jump operators.

(i)首先我们想到，推导Eq. (47)的过程中，我们要求动力学过程是保迹的，也就是说

$$\operatorname{Tr}\rho(t)=\operatorname{Tr}\rho(0). \tag{48}$$

实际上作为一个自洽性检验，这一点是可以从Eq. (47)出发证明的。我们只需要验证

$$0=\operatorname{Tr}\dot{\rho}(t)=\operatorname{Tr}\mathcal{L}(\rho(t)). \tag{49}$$

为了证实Eq. (49)，我们只需要注意到对于任意的算符X都有

$$\begin{aligned}\operatorname{Tr}\mathcal{L}(X)&=-i\operatorname{Tr}[H,X]+\sum_k\operatorname{Tr}L_kXL_k^\dagger-\sum_k\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\{L_k^\dagger L_k,X\}\\&=0+\sum_k\operatorname{Tr}L_kXL_k^\dagger-\frac{1}{2}\sum_k\operatorname{Tr}L_k^\dagger L_kX-\frac{1}{2}\sum_k\operatorname{Tr}XL_k^\dagger L_k\\&=0.\end{aligned} \tag{50}$$

(ii)其次我们还可以设想，既然Lindbladian将一个给定密度矩阵映射为另外一个密度矩阵，那么起码要是保厄米性的。也就是说，输入一个厄米算符Y，给出的算符$\mathcal{L}(Y)$应该也是厄米的。我们对于任意一个算符X(未必厄米),证明更普遍的结论:

$$\mathcal{L}(X)^\dagger=\mathcal{L}(X^\dagger). \tag{51}$$

这是因为

$$\begin{aligned}&\mathcal{L}(X)=-i[H,X]+\sum_k L_kXL_k^\dagger-\frac{1}{2}\sum_k(L_k^\dagger L_kX+XL_k^\dagger L_k)\\\Longrightarrow\ &\mathcal{L}(X)^\dagger=i[H,X^\dagger]+\sum_k L_k^\dagger X^\dagger L_k-\frac{1}{2}\sum_k(X^\dagger L_k^\dagger L_k+L_k^\dagger L_kX^\dagger)=\mathcal{L}(X^\dagger).\end{aligned} \tag{52}$$

在Eq. (52)中要求$X=X^\dagger$，我们自然得到$\mathcal{L}(X)^\dagger=\mathcal{L}(X^\dagger)=\mathcal{L}(X)$。这也就是说$\mathcal{L}(X)$也是厄米算符，这就证明了保厄米性。Equation. (51)可以简单记为，厄米运算和Lindbladian运算可以交换次序。

(iii)再次我们自然设想的到，Eq. (47)中的密度算符是在演化的。意味着我们在考虑的是薛定谔绘景，那么对应的海森堡绘景是什么呢？这个问题等价于是问，对于任意算符X，随时间演化的表达式$X(t)$是什么？注意到物理上显然要求用两种绘景给出的$X(t)$的系综平均值是一致的，也就是要求

$$\operatorname{Tr}X(t)\rho\equiv\operatorname{Tr}X\rho(t). \tag{53}$$

我们断言，以如下超算符作为动力学生成元：

$$\mathcal{L}^\dagger(\bullet):=i[H,\bullet]+\sum_k\left(L_k^\dagger\bullet L_k-\frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k,\bullet\}\right) \tag{54}$$

来演化算符X的时候可以满足上述要求Eq. (53)。也就是说把

$$X(t)=e^{t\mathcal{L}^\dagger}(X) \tag{55}$$

带入到Eq. (53)中， 两边会恒等。 注意$\rho(t) = e^{t\mathcal{L}}(\rho)$是以Lindbladian为动力学生成元的， 相应的我们把Eq. (54)成为Lindbladian的伴随(adjoint)。直接去证明

$$\operatorname{Tr} e^{t\mathcal{L}^\dagger}(X)\rho=\operatorname{Tr} X e^{t\mathcal{L}}(\rho) \tag{56}$$

可能是很繁琐的。我们换一种策略，首先我们注意到对于任意两个算符X和Y，Lindbladian和其伴随满足如下恒等式

$$\operatorname{Tr}\mathcal{L}(X)Y=\operatorname{Tr} X\mathcal{L}^\dagger(Y), \tag{57}$$

注意不要把$\mathcal{L}^\dagger$中的dagger符号和算符厄米共轭的dagger符号相混淆。证明Eq. (57)也可以通过直接计算的方式：

$$\begin{aligned}
&\operatorname{Tr}\mathcal{L}(X)Y\\
=&\operatorname{Tr}\left\{-i[H,X]+\sum_k(L_k^\dagger XL_k-\{L_k^\dagger L_k,X\}/2)\right\}Y\\
=&-i\operatorname{Tr}[H,X]Y+\sum_k\operatorname{tr}L_k^\dagger XL_kY-\frac{1}{2}\sum_k\operatorname{tr}\{L_k^\dagger L_k,X\}Y\\
=&i\operatorname{Tr}X[H,Y]+\sum_k\operatorname{tr}XL_kYL_k^\dagger-\frac{1}{2}\sum_k\operatorname{tr}X\{L_k^\dagger L_k,Y\}\\
=&\operatorname{Tr}X\big[i[H,Y]+\sum_kL_kYL_k^\dagger-\{L_k^\dagger L_k,Y\}/2\big]\\
=&\operatorname{Tr}X\mathcal{L}^\dagger(Y).
\end{aligned} \tag{58}$$

那么将Eq. (56)两边做展开并证明每一阶都是相等的即可，证明相等的手续就是多次使用性质Eq. (58)。也就是说我们首先注意到

$$\begin{aligned}
&\operatorname{Tr} e^{t\mathcal{L}^\dagger}(X)\rho=\operatorname{Tr} X e^{t\mathcal{L}}(\rho)\\
\Longleftarrow\ &\sum_{n=0}^\infty\frac{t^n}{n!}\operatorname{Tr}(\mathcal{L}^\dagger)^n(X)\rho=\sum_{n=0}^\infty\frac{t^n}{n!}\operatorname{Tr}X\mathcal{L}^n(\rho)\\
\Longleftarrow\ &\operatorname{Tr}(\mathcal{L}^\dagger)^n(X)\rho=\operatorname{Tr}X\mathcal{L}^n(\rho)\\
\Longleftarrow\ &\operatorname{Tr}\mathcal{L}^n(\rho)X=\operatorname{Tr}\rho(\mathcal{L}^\dagger)^n(X),
\end{aligned} \tag{59}$$

然后利用性质Eq. (58)一次一次把作用在X上的$\mathcal{L}^\dagger$“搬运”到ρ上面去：

$$\operatorname{Tr}\rho(\mathcal{L}^\dagger)^n(X)=\operatorname{Tr}\mathcal{L}(\rho)(\mathcal{L}^\dagger)^{n-1}(X)=...=\operatorname{Tr}\mathcal{L}^n(\rho)X. \tag{60}$$

据此我们证实了所谓Lindbladian的伴随Eq. (54)确实是海森堡绘景中的动力学生成元。我们很容易看出

$$\mathcal{L}^\dagger(\mathbb{1})\equiv 0, \tag{61}$$

这意味着单位算符在动力学下不演化，和一般的量子力学中情况是一致的。

(iv)最后我们指出，Lindblad方程[cf. Eq. (16)]可以在各种简化条件下回到经典主方程[cf. Eq. (10)]。首先我们只关心只有一个jump operator的Lindblad方程，也就是

$$\dot\rho(t)=-i[H,\rho(t)]+L\rho(t)L^\dagger-\frac{1}{2}\{L^\dagger L,\rho(t)\}, \tag{62}$$

如果我们可以找到一组**固定**的基$\{|i\rangle\}$，来将密度算符给对角化，也就是说

$$\rho(t) = \sum_i p_i(t)\, |i\rangle\langle i| \,. \tag{63}$$

所以我们立刻就得到

$$\dot{p}_i(t) = \langle i|\dot{\rho}(t)|i\rangle \tag{64}$$

借助Lindblad方程[cf. Eq. (62)]就有

$$\dot{p}_i(t) = \langle i|\mathcal{L}(\rho(t))|i\rangle = \langle i|\mathcal{L}\left(\sum_j p_j(t)\, |j\rangle\langle j|\right)|i\rangle = \sum_j \langle i|\mathcal{L}(|j\rangle\langle j|)|i\rangle\, p_j(t) \coloneqq \sum_j R_{ij} p_j(t). \tag{65}$$

注意，现在我们还不能断言Eq. (65)就是主方程。因为我们强调过，主方程中的跃迁矩阵必须满足条件Eq. (7)，也就是我们需要证明$\sum_i R_{ij} = 0$。但是这是显然的，注意到我们可以利用已经证明的保迹性Eq. (50)

$$\sum_i R_{ij} = \sum_i \langle i|\mathcal{L}(|j\rangle\langle j|)|i\rangle = \mathrm{Tr}\,\mathcal{L}(|j\rangle\langle j|) = 0. \tag{66}$$

所以我们认定，Lindblad方程确实可以回到经典主方程，此时动力学变量就是密度矩阵的对角元。敏锐的读者可能会有疑惑，一个量子的方程怎么就突然回到经典了呢？量子的效应哪里丢掉了呢？实际上，我们一开始假定可以找到一组固定的基，这就一定程度上抹去了量子效应。因为我们相当于认为，跑遍$t \in \mathbb{R}$，所有的密度算符$\rho(t)$都可以同时对角化，也就是彼此对易。算符都对易了，也就把量子力学中一般来说算符的不对易性扔掉，容易设想这回到的经典情况。但是反直觉的是，我们要强调，哪怕我们用含时的基展开密度算符：$\rho(t) = \sum_i p_i(t)\, |i(t)\rangle\langle i(t)|$,我们仍然有关系

$$\dot{p}_i(t) = \langle i(t)|\dot{\rho}(t)|i(t)\rangle \,, \tag{67}$$

仿佛对时间求导不会作用在基矢量上一样。这是因为我们总有$\langle i(t)|i(t)\rangle = \mathbb{1}$，从而有$\langle \dot{i}(t)|i(t)\rangle + \langle i(t)|\dot{i}(t)\rangle = 0$,这里我们用$|\dot{i}(t)\rangle$来表示基矢量$|i(t)\rangle$对时间的一阶导数。如此一来

$$\dot{\rho}(t) = \sum_i \left[\dot{p}_i(t)\, |i(t)\rangle\langle i(t)| + p_i(t)\, \langle \dot{i}(t)|i(t)\rangle + p_i(t)\, \langle i(t)|\dot{i}(t)\rangle\right] = \sum_i \dot{p}_i(t)\, |i(t)\rangle\langle i(t)| \tag{68}$$

从而带给我们Eq. (67). 最后，我们以如下计算结束这个讲义(注意这里虚数单位i和指标i混淆了)：

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \langle i|\mathcal{L}(|j\rangle\langle j|)|i\rangle \\ &= \langle i|-i[H, |j\rangle\langle j|] + \left(L\, |j\rangle\langle j|\, L^\dagger - \frac{1}{2} L^\dagger L\, |j\rangle\langle j| - \frac{1}{2}\, |j\rangle\langle j|\, L^\dagger L\right)|i\rangle \\ &= \langle i|L|j\rangle\, \langle j|L^\dagger|i\rangle - \langle i|L^\dagger L|j\rangle\, \delta_{ij} \\ &= \begin{cases} |\, \langle i|L|j\rangle\, |^2 & i \neq j \\ |\, \langle i|L|i\rangle\, |^2 - \langle i|L^\dagger L|i\rangle = |\, \langle i|L|i\rangle\, |^2 - \sum_l |\, \langle l|L|i\rangle\, |^2 = -\sum_{l \neq i} |\, \langle l|L|i\rangle\, |^2 & i = j \end{cases} . \end{aligned} \tag{69}$$

于是我们可以看到 $\langle i|L|j\rangle$表示了从j态跳到i态的概率振幅，据此也可以某种程度理解为什么L被称之为jump operator.

IV 总结与致谢

总结

本讲义详细介绍了经典与量子主方程，他们被广泛地应用于描述马尔科夫动力学。虽然马尔科夫动力学是比较特殊且简单的一类动力学过程。但是一般来说，处理开放系统最成熟的框架就是使用这个框架。讨论班的主题是凝聚态理论，即使统计物理学研究开放系统的视角与凝聚态物理学不一样。我觉得自己的讲义还是可以帮助同学们入门。在讲义写作的过程中，我希望可以逻辑上平滑地逐步介绍有关的内容，尽力克服行文的"堆砌感"。坦率的讲，由于个人水平不足，这样做虽然不一定让读者满意，但是至少我有自信比去年的讲义更好读。

根据去年参加讨论班的经历，我个人感觉不仅仅需要仔细准备讲义，还需要细致地给大家介绍才行。这导致我介绍的较慢，所以去年讲义后半部分的很多内容没法涉及到。于是，我打算削减篇幅。的确有很多我个人很喜欢的东西没有介绍，比如动力学生成元的谱性质，熵产生率与细致平衡还有热力学性质等等。但是这些内容相比讲义现有的内容而言更加专门化，我自己喜欢不代表读者就感兴趣。同时要考虑到个人科研工作比较繁重，所以也只能忍痛割爱。毕竟赶制出来的稿子质量不高。相比起体量，我觉得质量才是最重要的。

这次讨论班对我个人而言也是很重要的。我了解到这应该是最后一届讨论班了，有点可惜这样的活动因为各种各样的而终止。祝愿大家之后学习与研究顺利。

致谢

•感谢各位同学们参加讨论班。

•感谢qq好友李，天津大学研究生给我指出大量笔误与逻辑不连贯的地方从而提高讲义的可读性。李基础很扎实，博闻强识，了解很多前沿话题，我经常在与他的交流中受益。我们在完成讲义的过程中也共同学习了一些内容。

•感谢武汉大学21级郑卜凡同学邀请我参加讨论班。他结合上次讨论班的情况，对此次讲义的篇幅，内容和讲法有不少建设性的建议。无疑这让我更有效率地完成讲义。

•感谢qq好友Physoul Wu，国科大研究生指出讲义若干笔误和逻辑性错误。他的建议使得我进一步补充了附录，从而进一步提升可读性。我和他在网上认识很久，一直以来同他讨论都很有收获。

•感谢武汉大学21级俞千野同学提出文中有些逻辑问题，以及指出插图中的错误。这使得讲义更适合入门。

•感谢东京大学龚宗平教授(Prof. Zongping Gong)，在与他的交流中我发现了讲义曾有的致命科学性错误。作为统计物理与凝聚态理论的知名专家，做过很多有关开放量子系统的深入研究，他自然一眼可以发现问题所在。但是如果我没有修改这个错误，这份讲义实在是令人思之发笑。

A 技术细节

更多有关马尔科夫性的讨论

首先说明的是马尔科夫性的判定等问题是很深的研究课题，我本人当然并不是这方面的专家。如果有不严谨甚至错误的地方还请告知我。

关于Eq. (2)的讨论—. 这里先需要指出，从运动方程的具体形式并不能断言其描述的动力学是否真的是马尔科夫的。具体来说，Eq. (1)是所谓时间局域的(time-local)，也就是说方程两边只和各种物理量在t处的取值有关。而Eq. (2)自然就是非时间局域的(time-nonlocal)。乍一看，好像从是否时间局域就足以断言动力学过程是否真的是马尔科夫的。但是这是错的，完全可以举出这样的例子，哪怕是时间局域的动力学仍然是非马尔科夫的。一个最简单的想法就是强行定义新的函数$g(t) := f(\boldsymbol{r}(t-\tau))$来隐藏时间的非局域性，但是这样的操作并不能改变动力学性质（也就是不改变运动方程的解）。这个例子可能过于平凡，感兴趣的读者可以参阅论文[9]从Eqs (2.19)到(2.27)的计算，从而了解如何通过数学手段将记忆核(用来表达时间非局域的一种函数)改写为时间局域的。还有一类情况，如果Eq. (1)中的质量m是与时间有关的，其动力学仍然可能是非马尔科夫的。

关于跃迁速率$W_{nm}(t)$的讨论—. 我们实际上已经假设，这个跃迁速率是与$p_m(t)$无关的，所以Eq. (4)对任意时间t都成立。否则，以t为时间起点来看，跃迁矩阵甚至和系统的初态有关。在文献[10, 11]提到，这种情况一定是非马尔科夫的。于是，我们实际上也可以确信，Eq. (4)的右边关于$\{p_n(t)\}$必然是线性的。

实际上$W_{nm}(t)$在当$n \neq m$的时候可以被理解为一种条件概率，衡量了粒子在t时刻处在m态前提下，$t+\mathrm{d}t$时刻处于n态的概率。但是当$n = m$时不能这样理解，我们只能通过概率守恒条件[cf. Eq. (8)]推算$W_{nn}(t)$的值。另外从方程 (10)可以看出$W_{nn}(t)$的值根本不起作用（即使求和包括了$n = m$的情况，前后两项也抵消了）。

我们也可以这样构建一个马尔科夫的动力学方程：先只设置跃迁矩阵的非对角元，从而得到Eq. (10)。然后利用概率守恒条件计算出对角元的值，从而将Eq. (10)改写为Eq. (4). 本讲义为了处理上更简单，采用倒过来介绍的方式。

证明$\mathrm{Tr}_{\mathbf{B}}[H_{\mathbf{B}}, \rho_{\mathbf{T}}(t)] = 0$

我们尝试证明一个更普遍的结论。考虑有两个希尔伯特空间$\mathcal{H}_1$与$\mathcal{H}_2$，算符A是定义在$\mathcal{H}_1$上而算符B是定义在$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$上的。我们希望可以证明

$$\mathrm{Tr}_1[A, B] = 0, \tag{A1}$$

这里是对第一个空间作部分迹。

首先我们需要搞清楚部分迹的计算规则。对于在希尔伯特空间$\mathcal{H}_1 \otimes H_2$上的算符$O$，关于第二个希尔伯特空间的部分定义如下：

$$\mathrm{Tr}_2\, O := \sum_x (\mathbb{1} \otimes \langle x|) O (\mathbb{1} \otimes |x\rangle) \tag{A2}$$

这里我们采用约定$(\mathbb{1} \otimes \langle x|)(\mathbb{1} \otimes |y\rangle) = \langle x|y\rangle = \delta_{xy}$。这个等式这会使得部分迹的计算结果(仍然是一个算符)不是作用在$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$上，而是作用在$\mathcal{H}_1$。直观的来想，对第二个希尔伯特空间求部分迹的操作就是把$\mathcal{H}_2$给“抹去”。根据式 (A2)，我们分别用(i, a)和(j, b)来标记第一与第二个希尔伯特空间的基，从而有：

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_2\, O &= \sum_x (\mathbb{1} \otimes \langle x|) \sum_{ijab} |ij\rangle\langle ij|\, O\, |ab\rangle\langle ab|\, (\mathbb{1} \otimes |x\rangle) \\
&= \sum_x \sum_{ijab} \delta_{jx}\delta_{bx} \langle ij|O|ab\rangle\, |i\rangle\langle a| \\
&= \sum_x \sum_{ia} \langle ix|O|ax\rangle\, |i\rangle\langle a| = \sum_{ia} \left(\sum_x \langle ix|O|ax\rangle \right) |i\rangle\langle a|
\end{aligned} \tag{A3}$$

这里我们根据约定使用了$(\mathbb{1} \otimes \langle x|)\, |ij\rangle = (\mathbb{1} \otimes \langle x|)(|i\rangle \otimes |j\rangle) = \delta_{jx}\, |i\rangle$。类似地，我们有关于第一个希尔伯特空间

的部分迹及其表达式：

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_1\, O &\coloneqq \sum_x (\langle x| \otimes \mathbb{1}) O (|x\rangle \otimes \mathbb{1}) \\
&= \sum_x \sum_{ijab} (\langle x| \otimes \mathbb{1})\, |ij\rangle\langle ij|\, O\, |ab\rangle\langle ab|\, (|x\rangle \otimes \mathbb{1}) \\
&= \sum_x \sum_{ijab} \delta_{ix}\delta_{ax}\, \langle ij|O|ab\rangle\, |j\rangle\langle b| \\
&= \sum_x \sum_{jb} \langle xj|O|xb\rangle\, |j\rangle\langle b| = \sum_{jb} \left(\sum_x \langle xj|O|xb\rangle \right) |j\rangle\langle b|
\end{aligned}
\tag{A4}
$$

有了这些基础，我们来证明Eq. (A1)。首先我们展开算符B

$$
B = \sum_{ijab} K_{ijab}\, |ij\rangle\langle ab|\,, \tag{A5}
$$

对于Eq. (A5)中的每一项我们都依据Eq. (A4)计算

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_1[A, |i\rangle\langle j| \otimes |a\rangle\langle b|] &= \mathrm{Tr}_1\, A\, |ij\rangle\langle ab| - \mathrm{Tr}_1\, |ij\rangle\langle ab|\, A \\
&= \sum_{j'b'} \sum_x \langle xj'|A\, |ij\rangle\langle ab||xb'\rangle - \sum_{j'b'} \sum_x \langle xj'||ij\rangle\langle ab|\, A|xb'\rangle \\
&= \sum_{j'b'} \sum_x \langle x|A|i\rangle\, \delta_{jj'}\delta_{ax}\delta_{bb'} - \sum_{j'b'} \sum_x \delta_{xi}\delta_{j'j}\, \langle a|A|x\rangle\, \delta_{bb'} \\
&= \sum_{j'b'} \langle a|A|i\rangle\, \delta_{jj'}\delta_{bb'} - \sum_{j'b'} \delta_{j'j}\, \langle a|A|i\rangle\, \delta_{bb'} \\
&= 0,
\end{aligned}
\tag{A6}
$$

自然就可以得到Eq. (A1).

为何一般来说Eq. (15)所表示的动力学是非马尔科夫的

前面已经提到过，仅仅从运动方程的数学形式无法断言所描述的过程究竟是不是马尔科夫的。这里就是一个典型的例子：虽然Eq. (15)确实是时间局域的，但是它一般是非马尔科夫的。我们通过一张图Fig. 3来物理上说明这一点，

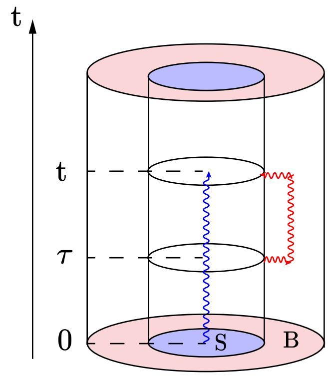

Figure 3: 这张图可以形象地解释非马尔科夫性的来源。蓝色部分是系统，红色部分是环境，但是我们一般把后者给trace掉了。系统的信息有一部分一直留在系统中（比如蓝色箭头），还有一部分耗散给了环境（红色箭头）。后者由于系统与环境的相互作用又会回到系统中。但是我们已经把环境给trace掉了，只关注系统的信息。所以综合来看，t时刻系统的信息来自于$\tau \in [0,t]$所有时刻系统的信息，而非只来自于t时刻与$t-\mathrm{d}t$时刻。也就是所谓非马尔科夫性。如果我们令$H_{\mathrm{SB}}=0$，去掉系统环境耦合后也就去掉了红色箭头的信息来源，动力学过程自然变成了马尔科夫的，也就是只针对系统的标准冯·诺依曼方程。

所以看出仅仅靠数学形式来判断是否是马尔科夫是不可靠的。那有没有容易判断的情况呢？还是有的，如果系统的动力学是**指数**型的，那么判定其为马尔科夫动力学是自洽的。具体来说，如果函数$f(t) = ae^{bt}$其中a, b都是常数。很容易知道$\dot{f}(t) = bf(t)$,这正是符合马尔科夫性的定义，方程右边只和此时函数f的取值有关。这样的动力学过程也是在自然界中很常见的，比如核物理中的指数衰变和种群数量指数增长。

厄米部分与反厄米部分

对于任何一个复数z，我们可以求出其实部与虚部：

$$z = \frac{z+z^*}{2} + i\frac{z-z^*}{2i} = \mathrm{Re}\, z + i\, \mathrm{Im}\, z \tag{A7}$$

其中$\mathrm{Re}\, z$和$\mathrm{Im}\, z$都是实数。那么我们仿照这个思路，对于任意算符或者矩阵也可以有

$$O = \frac{O+O^\dagger}{2} + i\frac{O+O^\dagger}{2i}, \tag{A8}$$

其中对应的两项分别称为厄米部分与反厄米部分。容易验证他们都是厄米算符。观察Eq. (41)中的结构，$-b^\dagger b/2$正是a的厄米部分。我们总可以引入厄米算符$-H$来表示其反厄米部分。

[1] Heinz-Peter Breuer and Francesco Petruccione. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press, USA, 2002.

[2] Jonathan Oppenheim. A postquantum theory of classical gravity? *Physical Review X*, 13(4):041040, 2023.

[3] Muthusamy Lakshmanan and Dharmapuri Vijayan Senthilkumar. *Dynamics of nonlinear time-delay systems*. Springer Science & Business Media, 2011.

[4] Christian Van den Broeck and Massimiliano Esposito. Ensemble and trajectory thermodynamics: A brief introduction. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 418:6–16, 2015.

[5] Ryuna Nagayama, Kohei Yoshimura, Artemy Kolchinsky, and Sosuke Ito. Geometric thermodynamics of reaction-diffusion systems: Thermodynamic trade-off relations and optimal transport for pattern formation. *arXiv preprint arXiv:2311.16569*, 2023.

[6] Daniel Manzano. A short introduction to the lindblad master equation. *Aip advances*, 10(2), 2020.

[7] Goran Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in mathematical physics*, 48:119–130, 1976.

[8] Vittorio Gorini, Andrzej Kossakowski, and Ennackal Chandy George Sudarshan. Completely positive dynamical semigroups of n-level systems. *Journal of Mathematical Physics*, 17(5):821–825, 1976.

[9] Ryohei Suzuki. Non-Markovian dynamics of entanglement in open quantum systems. Master's thesis, The University of Tokyo, Tokyo, Japan, January 2020.

[10] Peter Hänggi and Harry Thomas. Time evolution, correlations, and linear response of non-markov processes. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 26(1):85–92, 1977.

[11] Joseph L McCauley. A comment on the paper "stochastic feedback, nonlinear families of markov processes, and nonlinear fokker–planck equations" by td frank. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 382(2):445–452, 2007.