Caracterización y Medidas No Markovianas

Kenyi Takagui-Perez

October 25, 2024

§1 Introducción

En sistemas cuánticos abiertos, el prototipo de un proceso de Markov se da por un semigrupo dinámico cuántico, que es la solución de una ecuación maestra para la matriz de densidad reducida con estructura de Lindblad. Sin embargo, en sistemas físicos realistas, la suposición de una dinámica de Markov solo puede ser una aproximación que se basa en un número de simplificaciones en su mayoría bastante drásticas. En sistemas cuánticos complejos, por lo tanto, a menudo se encuentran procesos dinámicos que se desvían no solo cuantitativamente sino también cualitativamente del comportamiento relativamente simple predicho por una evolución temporal de Markov.

Las ecuaciones maestras gobiernan la evolución temporal de un sistema cuántico que interactúa con un entorno y pueden escribirse en una variedad de formas. Las ecuaciones maestras independientes del tiempo o sin memoria se pueden expresar en la conocida forma de Lindblad. De hecho, cualquier ecuación maestra local en el tiempo, Markoviana o no Markoviana, también puede escribirse en una forma similar a Lindblad. Un procedimiento de diagonalización da como resultado una representación única y canónica de la ecuación, que se puede utilizar para caracterizar completamente la no Markovianidad de la evolución temporal. Recientemente se han presentado varias medidas diferentes de no Markovianidad que reflejan, en diferentes grados, la aparición de tasas negativas de decoherencia en la forma similar a Lindblad de la ecuación maestra. Por lo tanto, proponemos usar las tasas negativas de decoherencia mismas tal como aparecen en la forma canónica de la ecuación maestra para caracterizar completamente la no Markovianidad.

§2 Caracterizando la No Markovianidad

Para ser más precisos decimos que la forma canónica es llevar la ecuación maestra a una forma local tal que la tasa de coherencia está únicamente definida. Veamos el método que se usa en el paper. Recordemos la ecuación maestra el tiempo local

$$\begin{aligned}\dot{\rho}(t) &= \int_0^t ds (K_{s,t} \circ \phi_s)[\rho(0)] \\ &= \int_0^t ds (K_{s,t} \circ \phi_s \circ \phi_t^{-1})\phi_t[\rho(0)] \\ &= \Lambda_t[\rho(t)]\end{aligned}$$

Esto lo podemos escribir como

$$\dot{\rho} = \Lambda_t[\rho] = \sum_k A_k(t)\rho B_k^\dagger(t)$$

Decimos que tenemos N operadodres $\{G_m; m = 0, 1, 2, ..., N-1\}$ tal que ellos tienen las siguientes propiedades:$\{G_0 = \frac{\hat{1}}{\sqrt{d}}; G_m = G_m^\dagger; Tr[G_m G_n] =_{mn}\}$ Con esta nueva base de operadores podemos expandir A_k y B_k tal que queden $A_k = \sum_i G_i a_{ik}; \quad B_k = \sum_j G_j b_{jk}$ reemplazamos eso en la ecuación maestra

$$\dot{\rho} = \sum_k \sum ij a_{ik} b_{jk}^* G_i \rho G_j = \sum_{ij} c_{ij} G_i \rho G_j$$

usamos la propiedad de $G_m = G_m^\dagger$ y que ρ y $\dot{\rho}$ son Hermitianos $\sum_{ij} c_{ij} G_i \rho G_j = \sum_{ij} c_{ij}^* G_j \rho G_i = \sum_{ij} c_{ij}^* G_i \rho G_j$ separamos los elementos que contienen un índice 0 de los otros índices i, j

$$\dot{\rho} = \sum_{ij} c_{ij}^* G_i \rho G_j = c_{00} G_0 \rho G_0 + \sum_i c_{0i}^* G_i \rho G_0 + \sum_j c_{j0}^* G_0 \rho G_j + \sum_{i \neq j} C_{ji}^* G_i \rho G_j$$

usamos la definición de la base de $G_0 = \frac{\hat{1}}{\sqrt{d}}$

$$\dot{\rho} = \sum_{ij} c_{ij}^* G_i \rho G_j = c_{00} \frac{\rho}{d} + \sum_i c_{0i}^* G_i \frac{\rho}{\sqrt{d}} + \sum_j c_{j0}^* \frac{\rho}{\sqrt{d}} G_j + \sum_{i \neq j} C_{ji}^* G_i \rho G_j$$

identificando $C = \frac{1}{2} \frac{c_{00}}{d} + \sum_i \frac{c_{i0}}{\sqrt{d}} G_i$ obtenemos:

$$\dot{\rho} = C\rho + \rho C^\dagger + \sum_{i \neq j} C_{ji}^* G_i \rho G_j$$

Si aplicamos la traza y su propiedad cíclica para reacomodar la posición de rho y teniendo en cuenta que $Tr[\dot{\rho}]$ tal que obtenemos: $C + C^\dagger = -\sum_{i,j=1}^{N-1} d_{ij} G_j G_i$. Identificamos $H = \frac{1}{2} i\hbar (C - C^\dagger)$ entonces podemos escribir

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \sum_{i,j=1}^{N-1} d_{ij}(t) \Big(G_i \rho G_j - \frac{1}{2} G_j G_i, \rho \Big)$$

La matriz de decoherencias $\mathbf{d}$ es independiente del tiempo. Debido a la construcción de arriba decimos que los elementos de matriz tienen la siguiente expresión

$$d_{ij} = \sum_k Tr[G_i A_k] Tr[G_j B_k \dagger]$$

Esta también se puede escribir en su forma diagonal ya que es Hermitiana

$$d_{ij} = \sum_k U_{ik} \gamma_k U_{jk}^*$$

donde los autovalores γ_k de $\mathbf{d}$ son reales, pero no necesariamente positivos en todos los tiempos, y los U_{ik} son matrices unitarias hechas de los mismos autovectores de $\mathbf{d}$, con $\sum_k U_{ik} U_{jk}^* = \delta_{ij}$. Ahora para recuperar la expresión de la ecuación maestra usamos las propiedades de la base G_m y definimos $L_k(t) = \sum_{i=1}^{N-1} U_{ik}(t) G_i$, entonces queda, recuperando la dependencia del tiempo,

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H(t), \rho] + \sum_{k=1}^{d^2-1} \gamma_k(t) \Big[L_k(t) \rho L_k^\dagger(t) - \frac{1}{2} \big\{ L_k^\dagger(t) L_k(t), \rho \big\} \Big]$$

Se puede notar que la ecuación es similar a la ecuación de Lindblad para una ecuación maestra sin memoria. Sin embargo, listamos algunas diferencias:

- La dependencia de tiempo de la tasa de decoherencia y los operadores L_k
- Las tasas de decoherencia están únicamente determinadas
- Las tasa de decoherencia puede ser negativa, correspondiendo a interacciones entre el ambiente y el sistema de tal manera que el sistema podría "recobrar coherencia", es decir, revertir el proceso de decaimientos más tempranos

Si las tasas de decoherencia canónicas son positivas en todos los tiempos, entonces la evolución sobre cualquier intervalo de tiempo es completamente positiva. Además, para sistemas finitos, tener tasas de decoherencia positivas para todos los tiempos es equivalente a divisibilidad de la evolución a una secuencia de evoluciones infinitesimalmente positivas.

Procesos no-Markovianos: Ahora establecemos la siguiente definición de no-Markovianidad: una ecuación maestra local es *Markoviana* a un dado tiempo, si y solo si las tasas de decoherencia canónicas son positivas. Asimismo, la evolución es *no-Markoviana* si una o más de las tasas de decoherencia son estrictamente negativas. Ofrecemos dos ejemplos en los que se puede ver más fácilmente a qué nos referimos. Digamos que tenemos la siguiente ley de evolución

$$\begin{aligned}\dot{\rho} &= [2\gamma(t) + \tilde{\gamma}(t)][2\sigma_x\rho\sigma_x + 2\sigma_y\rho\sigma_y - 4\rho] \\ &- \gamma(t)[2\sigma_-\rho\sigma_+ - \sigma_+\sigma_-\rho - \rho\sigma_+\sigma_-] \\ &- \gamma(t)[2\sigma_+\rho\sigma_- - \sigma_-\sigma_+\rho - \rho\sigma_-\sigma_+]\end{aligned}$$

Para que esta sea una evolución no-Markoviana parecería que hay dos formas, $\gamma(t) > 0$ o que $2\gamma(t) + \tilde{\gamma}(t) < 0$. Sin embargo, al llevarla a su forma canónica la ecuación se puede reescribir como

$$\dot{\rho} = [\gamma(t) + \tilde{\gamma}(t)][2\sigma_x\rho\sigma_x + 2\sigma_y\rho\sigma_y - 4\rho]$$

y vemos que en realidad solo con una condición podría ser no-Markoviana, esta siendo $\gamma(t) + \tilde{\gamma}(t) < 0$. Otro caso en el que se puede ver la necesidad de llevar las cosas a su forma canónica es considerando la siguiente ecuación maestra

$$\dot{\rho} = L\rho L^\dagger - \frac{1}{2}(L^\dagger L\rho + \rho L \dagger L) - [L^\dagger\rho L - \frac{1}{2}(LL^\dagger\rho + \rho LL^\dagger)]$$

donde a primera vista parece generar una evolución no-Markoviana. Sin embargo, si escogemos $L = (1 + iH/\hbar)/\sqrt{2}$ terminaremos con una ecuación maestra de la forma

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho]$$

que corresponde a una evolución Markoviana.

Ahora pasamos a mencionar algunas medidas de no-Markovianidad basadas en el signo que acompaña a la tasa de decoherencia en algún tiempo dado. Para describir la no-Markovianidad en un canal individual usamos

$$f_k(t) := max[0, -\gamma(t)] \geq 0.$$

O para un tiempo t sin considerar canales individuales

$$f(t) = \sum_{k=1}^{d^2-1} f_k(t) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{d^2-1}\left[|\gamma_k(t)| - \gamma_k(t)\right]$$

, si extedemos esta expresión pero para un rango de tiempo tendríamos la expresión

$$F_k(t, t') = \int_t^{t'} ds f_k(s)$$

que caracteriza *la cantidad total de no-Markovianidad en el canal k sobre el intervalo de tiempo* $[t, t']$. También podemos definir una medida discreta como el número de tasas de decoherencias estrictamente negativas

$$n(t) := \#\{k : \gamma_k(t) < 0\} = \#\{k : f_k(t) > 0\}$$

lo llamamos *el índice no-Markov.*

Para ejemplificar el uso de estas medidas tomamos el caso de un solo canal de decoherencia. Consideramos la siguiente ecuación maestra $\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[K(t), \rho] + \alpha(t)[A(t)\rho A(t)^\dagger - \frac{1}{2}\{A(t)^\dagger A(t), \rho\}]$. Su forma canónica será

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

De la definición de no-Markovianidad, la evolución del sistema es no-Markoviana, en el tiempo t si y solo si $gamma(t) < 0$. La cantidad total de no-Markovianidad se calcularía como

$$F(t, t') = -\int_{\gamma(t)<0} ds\gamma(s)$$

Además, el índice discreto no-Markov sería la unidad cuando $\gamma(t) < 0$ o cero caso contrario.

Medidas de distancia: Se construye una medida para la no Markovianidad de la dinámica cuántica de los sistemas abiertos basada en la distancia de seguimiento de dos estados cuánticos que describe la probabilidad de distinguir con éxito estos estados. La idea básica que subyace a esta construcción es que los procesos markovianos tienden a reducir continuamente la distinguibilidad entre dos estados cualesquiera, mientras que la propiedad esencial del comportamiento no markoviano es el crecimiento de esta distinguibilidad. La pérdida de distinguibilidad de los estados se interpreta como un flujo de información del sistema abierto a su entorno.

Para construir la medida para la no-Markovianidad necesitamos una medida para la distancia entre dos estados cuánticos ρ_1 y ρ_2. Tal medida es dada por la distancia traza que es definida como

$$D(\rho_1, \rho_2) = \frac{1}{2}Tr|\rho_1 - \rho_2|$$

donde $|A| = \sqrt{A^\dagger A}$. Una propiedad que debemos resaltar es que todos los mapas Φ que preservan la traza y son positivos completamente son contracciones para esta métrica

$$D(\Phi_{\rho_1}, \Phi_{\rho_2}) \leq D(\rho_1, \rho_2)$$

Esto significa que ninguna operación cuántica que preserve la traza alguna vez pueda incrementar la distingibilidad de dos estados.

Supongamos que tenemos un proceso cuántico dado por una ecuación maestra Markoviana,

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

con $\mathcal{L}\rho = -i[H, \rho] + \sum_i \gamma_i \Big[A_i\rho A_i\dagger - \frac{1}{2}\{A_i\dagger A_i, \rho\}\Big]$ envolviendo tasas de relajación positivas $\gamma_i \geq 0$. Tal ecuación maestra nos lleva a mapas dinámicos $\Phi(t) = exp(\mathcal{L}t)$, $t \geq 0$, que describe la dinámica de la matriz densidad a través de la relación $\rho(t) = \Phi(\tau)\rho(0)$. Se puede demostrar que

$$D(\rho_1(\tau + t), \rho_2(\tau + t)) \leq D(\rho_1(t), \rho_2(t))$$

donde $\rho_{1,2}(t) = \Phi(t)\rho_{1,2}(0)$. Por lo tanto, la distancia de la traza de los estados $\rho_{1,2}(t)$, con cualquier estado inicial $\rho_{1,2}(0)$, es una función del tiempo monótonamente decreciente. La interpretación de esto viene en que esta es una característica de procesos cuánticos Markovianos, implicando que bajo una evolución Markoviana dos estados cualquiera generalmente se convierten cada vez menos distingibles conforme el tiempo incrementa. Además, se puede probar que la desigualdad dada arriba se cumple para todo proceso Markoviano dependiente del tiempo definido por la ecuación maestra con $\gamma_i(t) \geq 0$.

Definimos la tasa de cambio de la distancia de traza con

$$\sigma(t, \rho_{1,2}(0)) = \frac{d}{dt} D(\rho_1(t), \rho_2(t)).$$

Hay muchos procesos para los cuales σ es mayor que cero para ciertos tiempos. Es a este tipo de procesos a los que definimos como *no-Markovianos*. Entonces complementamos la definición dada antes para procesos no Markovianos ahora diciendo que un proceso es no-Markoviano si existe un par de estados iniciales $\rho_{1,2}(0)$ y un cierto tiempo t tal que $\sigma(t, \rho_{1,2}(0)) > 0$.

Tomamos el caso para un qubit para ejemplificar este caso. Dada una matriz de densidad de un solo qubit ρ, dado que las matrices de Pauli forman una base para matrices complejas de 2×2, la representación de la esfera de Bloch se puede dar como:

$$\rho = I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$$

donde $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z)$ y $|\vec{r}| \leq 1$.

Los valores esperados de las matrices de Pauli σ_x, σ_y y σ_z se pueden calcular a partir de la matriz de densidad ρ de la siguiente manera:

$$r_x = Tr(\rho\sigma_x); \quad r_y = Tr(\rho\sigma_y); \quad r_z = Tr(\rho\sigma_z)$$

donde Tr denota la operación de traza. La distancia de traza entre dos qubits en la representación de Bloch es igual a la mitad de la distancia euclidiana entre sus vectores de Bloch. Por ejemplo, supongamos que tenemos dos qubits con vectores de Bloch $\vec{r_1}$ y $\vec{r_2}$. La distancia euclidiana entre estos vectores viene dada por:

$$d(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \sqrt{(r_{1x} - r_{2x})^2 + (r_{1y} - r_{2y})^2 + (r_{1z} - r_{2z})^2}$$

La distancia de traza entre estos qubits es entonces: $D(\rho_1, \rho_2) = \frac{1}{2} d(\vec{r_1}, \vec{r_2})$. La ecuación maestra para un qubit en la representación de Bloch viene dada por:

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[\mathcal{H}, \rho] + \mathcal{L}(\rho)$$

donde ρ es la matriz de densidad del qubit, $\mathcal{H}$ es el hamiltoniano del sistema y $\mathcal{L}(\rho)$ es el superoperador de Lindblad que describe la dinámica disipativa del sistema .

El vector de Bloch es una representación de un estado de qubit que se usa comúnmente en la mecánica cuántica. El vector de Bloch está relacionado con la matriz de densidad de un estado qubit por:

$$\vec{r} = \mathrm{Tr}(\rho\vec{\sigma})$$

donde ρ es la matriz de densidad del estado qubit y $\vec{\sigma}$ es un vector que contiene las tres matrices de Pauli. La ecuación maestra para un qubit en la representación de Bloch se puede derivar de la ecuación maestra para un qubit en la representación de la matriz de densidad usando la relación entre el vector de Bloch y la matriz de densidad.

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma})$$

La ecuación maestra para un qubit en la representación de Bloch se puede escribir como:

$$\frac{d}{dt}\vec{r} = \vec{u} + D\vec{r}$$

donde $\vec{r}$ es el vector de Bloch del estado qubit, $\vec{u}$ es el vector de deriva y D es la matriz de amortiguamiento. El vector de deriva $\vec{u}$ y la matriz de amortiguamiento D dependen del sistema físico específico que se esté considerando. En general, el vector de deriva $\vec{u}$ describe la evolución coherente del estado del qubit, mientras que la matriz de amortiguamiento D describe la evolución incoherente del estado del qubit debido al ruido ambiental. El vector de deriva u_j se define como $(1/2)Tr[\sigma_j \Lambda(1)]$ y la matriz de amortiguamiento D_{jk} se define como $(1/2)Tr[\sigma_j \Lambda(\sigma_k)]$. La ecuación de Bloch se puede escribir como $\dot{v} = u + Dv$ donde v es el vector de Bloch.

$$u_j = \frac{1}{2}tr[\sigma_j \Lambda(1)]; \quad D_{jk} = \frac{1}{2}tr[\sigma_j \Lambda(\sigma_k)]; \quad \frac{dv}{dt} = u + Dv$$

La distancia de traza de dos operadores de densidad cualquiera, ρ y $\rho + \delta\rho$, es

$$(\delta s_{Tr})^2 := \frac{1}{4}(Tr|\delta\rho|)^2 = \frac{1}{4}\delta\mathbf{x}.\delta\mathbf{x}$$

Queremos ver qué pasa cuando dos matrices de densidad difieren en un $\delta\rho$ entonces considerando la ecuación maestra en la representación de Bloch para un vector de Bloch obtenemos que $\delta\dot{x} = D\delta x$, y por lo tanto

$$\frac{d}{dt}((\delta s_{Tr})^2) = \frac{1}{4}[\dot{x}.\delta x + \delta x.\delta\dot{x}] = \frac{1}{4}\delta x^T(D + DT)\delta x$$

Con esa ecuación vemos que la traza entre un par de operadores de densidad incrementa si y solo si puede incrementar entre un par de estados infinitesimalmente separados. Pero, la ecuación también nos dice que puede incrementar si y solo si la matriz $D + D^T$ tiene autovalores positivos. Esto es, *La distancia traza del qubit puede precensiar no-Markovianidad en el tiempo t si y solo si la matriz de amortiguamiento satisfase la condición*

$$\lambda_{\max}[D(t) + D^T(t)] > 0$$

donde $\lambda_{\max}(A)$ denota el máximo autovalor de A.

§3 Conclusión

La forma canónica de la ecuación maestra nos da la forma matemática necesaria para poder evaluar la no-Markovianidad de un sistema dado. Tal forma canónica nos deja las tasas de decoherencia únicamente determinadas. Llegamos a que una tasa de decoherencia canónica positiva (negativa) corresponde a una evolución Markoviana (no-Markoviana). Esto nos llevó a definir la medida de no-Markovianidad llamada distancia de traza que nos dice qué tipo de evolución está pasando basada en la tasa de cambio de la distancia de traza. Asimismo, para cada uno de estos pasos para caracterizar la no-Markovianidad del sistema vimos algunos ejemplos. Primero, cómo es que llevar el sistema a su forma canónica era crucial para la caracterización. Segundo, el caso de un sistema de un solo canal a modo de prueba. Finalmente, tercero, tratamos el caso de la ecuación maestra de un qubit en su representación de Bloch. Los resultados anteriores demuestran el valor de indagar más en aspectos de la caracterización de evolución no-Markoviana. Finalmente, sería también interesante explorar los aspectos experimentales relacionados con los conceptos tocados en el texto.

§4 Bibliografía

- G. Lindblad, Comm. Math. Phys. 48, 119 (1976)
- M.J.W. Hall, J.D. Cresser, L. Li and E. Andersson, "Canonical form of master equations and characterization of non-Markovianity," Phys. Rev. A 89, 042120 (2014).
- H.-P. Breuer, E.-M. Laine, and J. Piilo, "Measure for the Degree of Non-Markovian Behavior of Quantum Processes in Open Systems," Phys. Rev. Lett. 103, 210401 (2009)