关于经典世界的信息守恒

陈童

Contents

1 引言

信息守恒是量子世界的特征，因为量子力学有幺正性，幺正性就意味着信息守恒。而经典世界人们通常认为是信息不守恒的，毕竟大家随时都可以删除电脑上的文章，删除文章就是擦除信息，擦除前后文章的信息并不守恒。

但在另一方面，世界的本源是量子的，经典世界可以看作是普朗克常数$\hbar$相对可以忽略时的极限情况。那为什么量子世界信息守恒，而作为其极限情况的经典世界却信息不守恒了呢？可见，传统的看法是经不住深究的。本文就是要重新探讨这个问题。从技术上来说，本文也许没有太多新的东西，但是本文的观念很可能是新的。

本文的结论是，经典世界同样是信息守恒的！所有信息不守恒的情况，都是因为我们考察的不是一个孤立系统，换言之，都是因为系统与外界之间存在信息的擦除和交换，甚至由此进一步导致能量交换（通常是热能），比如说，存在耗散的系统就属于这种情况。

量子世界的信息守恒是因为有量子力学幺正性。那么经典世界的信息守恒反映在经典物理的什么特性上呢？我们的回答是：**经典世界的信息守恒反映为相空间辛结构的保持。正是因为信息守恒要求保持辛结构，所以经典力学的孤立系统必定是哈密顿系统。换言之，由信息守恒可以导出孤立系统的演化方程必定是哈密顿正则方程。由此我们甚至可以给哈密顿系统下一个等价的定义，即，哈密顿系统即是信息守恒的动力系统。与之相关的，能量这一概念可以看作信息守恒和动力学演化双重要求的自然产物。**

本文按如下方式组织：首先，在第二节中，我们将从经典世界作为量子世界在$\hbar \to 0$时极限的角度考察什么是经典世界的信息守恒。在这一节中，我们首先讨论了量子和经典的对应原理，并表明经典系统的相空间上自然地有一个辛结构。然后，通过给量子幺正性取经典极限，我们可以论证经典世界的信息守恒就是相空间辛结构的保持。并且我们也论证了，信息守恒的经典系统和哈密顿正则系统其实是同义词。其次，在本文第三节中，通过回顾刘维尔定理，我们把信息守恒的概念引入到统计力学中，进而又讨论了经典力学如何推广到信息不守恒的情况，最后再把这种推广用到了对非平衡统计力学贾金斯基(Jarzynski)等式的推导中。在本文最后一节中，我们从信息守恒的角度简单回顾了哈密顿系统辛数值算法的基本思想。

2　从经典世界作为量子世界的极限看信息守恒

由于量子世界的信息守恒是毫无疑问的，它反映为量子力学幺正性。所以这一节不妨让我们从这个毫无疑问的地方出发，从经典世界作为量子世界在$\hbar \to 0$时的极限这个角度来考察什么是经典世界的信息守恒，进而讲清楚为什么说经典世界的信息守恒就是相空间辛结构的保持。

2.1 量子与经典的对应原理与相空间辛结构

我们的基本假设是量子世界和经典世界之间的对应原理: 即假设在普朗克常数$\hbar \to 0$时，有

$$[\widehat{A}, \widehat{B}]_Q/(i\hbar) = [A, B], \tag{1}$$

式中$\widehat{A}, \widehat{B}$为两个可观测量算符，A, B为与之相应的经典物理量，$[\widehat{A}, \widehat{B}]_Q = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$为量子的算符对易子，$[A, B]$称之为经典物理量之间的泊松括号，上式可以看作是它的一个基本定义。

当然，为了让泊松括号有更明确的表达式，我们还得假设量子系统的基本力学算符为$\widehat{q}^a, \widehat{p}_a$, 分别称作正则坐标算符与正则动量算符，这里我们假设指标$a = 1, 2, ..., n$，即假设我们考察的是一个n自由度系统。$\widehat{q}^a, \widehat{p}_a$满足如下量子力学基本对易关系

$$[\widehat{q}^a, \widehat{p}_b]_Q/(i\hbar) = \delta^a_b, \tag{2}$$

以及

$$[\widehat{q}^a, \widehat{q}^b]_Q = [\widehat{p}_a, \widehat{p}_b]_Q = 0. \tag{3}$$

可观测量算符$\widehat{A}$、$\widehat{B}$通常是$\widehat{q}^a, \widehat{p}_a$的函数，记为$\widehat{A}(\widehat{q}, \widehat{p}), \widehat{B}(\widehat{q}, \widehat{p})$。

$\widehat{q}^a, \widehat{p}_a$的经典对应物就是正则坐标$q^a$和正则动量$p_a$。在有些不强调指标的时候，我们也把正则坐标笼统地记为q，把正则动量笼统地记为p。(q, p)所构成的空间就是经典系统的相空间。与算符$\widehat{A}, \widehat{B}$对应的经典物理量A, B都是这个相空间上的函数，有时候记为$A(q, p)$和$B(q, p)$。根据前面量子与经典的对应原理，我们有

$$[q^a, p_b] = \delta^a_b, \quad [q^a, q^b] = [p_a, p_b] = 0. \tag{4}$$

进而可以得到泊松括号的明确表达式是

$$[A, B] = \frac{\partial A}{\partial q^a}\frac{\partial B}{\partial p_a} - \frac{\partial A}{\partial p_a}\frac{\partial B}{\partial q^a}, \tag{5}$$

式中我们默认对指标a使用了爱因斯坦求和约定，**同样的约定也适用于本文其它地方。**

值得强调的是，我们并没有对经典系统的动力学演化方程作任何假设，即**我们并没有预先假设哈密顿正则方程成立！甚至，我们到现在还没有引入哈密顿量的概念。** 我们只是根据量子与经典的对应原理，为经典系统引入了一个相空间，并根据量子与经典之间的对应关系定义了经典物理量之间的泊松括号。**上述泊松括号的明确表达式意味着相空间存在一个所谓的辛结构。**

为了看清楚这一点，我们注意到既然q, p都是相空间的坐标，地位其实是平等的，那我们不妨把它们写得更平等一点。具体来说，即引入$2n$维相空间的坐标$\mathbf{x} = (x^1, x^2, ...x^{2n})^T = (q^1, ..., q^n, p_1, ..., p_n)^T$，式中$T$表示转置操作，所以$\mathbf{x}$是一个具有$2n$个分量的列矢量，**注意它不是三维坐标矢量**。$\mathbf{x}$的各分量我们记为$x^i, i = 1, 2, ..., 2n$，前$n$个$i$指标代表正则坐标$q$，后$n$个$i$指标代表正则动量$p$。

进而我们就可以把泊松括号的表达式重写为

$$[A, B] = \frac{\partial A}{\partial x^i}\omega^{ij}\frac{\partial B}{\partial x^j} = (\partial_i A)\omega^{ij}(\partial_j B). \tag{6}$$

式中同样使用了求和约定，不过现在的求和是从1加到$2n$。式中的ω^{ij}可以看作一个$2n \times 2n$矩阵J的第i行和第j列，而矩阵J的表达式为

$$J = (\omega^{ij}) = \begin{pmatrix} 0_{n\times n} & 1_{n\times n} \\ -1_{n\times n} & 0_{n\times n} \end{pmatrix}, \tag{7}$$

这是一个反对称矩阵，式中$1_{n\times n}$表示$n \times n$的单位矩阵。特别的，我们有

$$[x^i, x^j] = \omega^{ij}. \tag{8}$$

注意，从泊松括号中，出现了反对称矩阵J，我们把它逆矩阵J^{-1}的矩阵元用下指标符号ω_{ij}来表示。很明显矩阵J^{-1}为，

$$J^{-1} = (\omega_{ij}) = \begin{pmatrix} 0_{n\times n} & -1_{n\times n} \\ 1_{n\times n} & 0_{n\times n} \end{pmatrix}. \tag{9}$$

这同样是一个反对称矩阵，满足$\omega_{ji} = -\omega_{ij}$。

所以泊松括号的表达式意味着相空间存在一个二阶反对称张量ω_{ij}, 与之对应的二阶微分形式为

$$\omega = \frac{1}{2}\omega_{ij}dx^i \wedge dx^j = dp_a \wedge dq^a. \tag{10}$$

ω就是所谓的辛形式，很显然，这是一个非退化的闭形式，满足

$$d\omega = 0. \tag{11}$$

相空间上给定了一个辛形式，就称之为定义了一个辛结构。所以，**从量子经典对应原理出发，我们得到了经典系统的相空间上存在一个辛结构的结论！** 从而经典系统的相空间是一个辛流形。

2.2 幺正性的经典极限与信息守恒

幺正性和幺正变换

一个量子系统所有可能量子态的集合构成希尔伯特空间$\mathcal{H}$。量子系统的物理可观测量对应于$\mathcal{H}$上的厄密算符。根据量子力学的玻恩规则，对于处在$|\psi\rangle$态上的系统，我们在$|\phi\rangle$态上测到它的概率为$|\langle\phi|\psi\rangle|^2$，其中两个量子态的内积$\langle\phi|\psi\rangle$也称之为概率幅，因为它的模方给出了概率。在量子力学中，概率(而不是量子态)才是我们在物理上真正测量的东西。

所谓的量子力学幺正性，指的是量子系统的希尔伯特空间$\mathcal{H}$可以进行一个到其自身的可逆变换U，假设在这个变换的作用下，$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$，$|\phi\rangle \to |\phi'\rangle = U|\phi\rangle$，幺正性指的就是变换前后态的内积保持不变，即

$$\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\psi\rangle. \tag{12}$$

很显然，根据玻恩规则，态的内积保持不变就意味着测量概率保持不变，从而也就意味着信息在变换之下的守恒。换言之，量子力学幺正性在物理上就意味着信息守恒。

由态的内积保持不变的要求，不难看出，上述变换算符U必定是一个幺正算符，即U是一个可逆算符，而且满足

$$U^{-1} = U^{\dagger}, \tag{13}$$

$U^{\dagger}$表示算符U的厄密共轭算符。因为U是幺正算符，所以我们也将U变换称作幺正变换。

刚才我们定义量子力学幺正性的时候，是把幺正变换作用在系统的量子态上。但其实，也可以等价地认为幺正变换对系统量子态没有作用，而是对物理可观测量算符有作用。具体来说，考察一个幺正变换U，再考察一个任意的可观测量算符$\widehat{A}$。在物理上，我们关心的其实总是算符的矩阵元，为此我们考察算符$\widehat{A}$在系统量子态$|\psi\rangle$和$|\phi\rangle$之间的矩阵元$\langle\phi|\widehat{A}|\psi\rangle$。由于在幺正变换之后$|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$, $|\phi\rangle \to U|\phi\rangle$，所以在幺正变换的作用下矩阵元$\langle\phi|\widehat{A}|\psi\rangle$将变换为

$$\langle\phi|\widehat{A}|\psi\rangle \to \langle\phi|U^{-1}\widehat{A}U|\psi\rangle. \tag{14}$$

很显然，为了满足这个物理矩阵元的变换关系，我们完全可以等价地认为幺正变换对系统量子态没有作用，而是会将算符$\widehat{A}$变换为

$$\widehat{A} \to U^{-1}\widehat{A}U. \tag{15}$$

根据幺正变换作用在系统量子态但是不作用在物理量算符上的观点，我们实际上是认为，我们的变换操作是“转动”了系统，但是没有“转动”实验室里测量系统的仪器，从而物理量算符不变。而根据幺正变换作用在物理量算符而不作用在系统量子态上的观点，我们是等价地认为，我们的操作是将实验室里的仪器作了一个反方向的“旋转”，同时保持待测系统原地不动，从而算符按照(15)式变换，而系统的量子态不变。

幺正变换的经典极限

现在，假设我们考察一个幺正变换的单参簇$U(\theta)$(满足$U(0) = 1$，1表示恒等变换), 设

$$U(\theta) = \exp\big(-i\theta\widehat{G}/\hbar\big), \tag{16}$$

式中$\widehat{G}$称作这个幺正变换单参簇的生成元。利用幺正条件$U^{-1} = U^{\dagger}$，容易有

$$\widehat{G}^{\dagger} = \widehat{G}. \tag{17}$$

也即是说，单参幺正变换的生成元必定为厄米算符，因此也就是一个物理可观测量。而将单参幺正变换按照(15)式作用在物理可观测量$\widehat{A}$上，我们就

可以得到可观测量的单参变换簇

$$\widehat{A}\big(\widehat{q}(\theta), \widehat{p}(\theta)\big) \equiv \exp\big(i\theta\widehat{G}/\hbar\big)\widehat{A}\exp\big(-i\theta\widehat{G}/\hbar\big). \tag{18}$$

幺正性意味着，量子系统在这一单参幺正变换之下保持信息守恒。

利用单参幺正变换，我们可以看到量子**幺正变换的经典极限其实就是经典力学中的正则变换**。为了看清楚这一点，考虑一个单参幺正变换$U(\theta)$，我们来考察θ为无穷小量ϵ的无穷小变换$U(\epsilon) = \exp(-i\epsilon\widehat{G}/\hbar)$。设某物理可观测量$\widehat{A}$在这一无穷小幺正变换的作用下变换为$\widehat{A} \to \widehat{A}' = U^{-1}(\epsilon)\widehat{A}U(\epsilon)$, 记变换前后物理量$\widehat{A}$的无穷小改变为$\delta\widehat{A} = \widehat{A}' - \widehat{A}$。则根据(18)式，我们将有$\delta\widehat{A} = (1 + i\epsilon\widehat{G}/\hbar + ...)\widehat{A}(1 - i\epsilon\widehat{G}/\hbar + ...) - \widehat{A} = \epsilon[\widehat{A}, \widehat{G}]_Q/(i\hbar)$, 即

$$\delta\widehat{A} = \epsilon[\widehat{A}, \widehat{G}]_Q/(i\hbar). \tag{19}$$

下面，我们取$\hbar \to 0$的经典极限。则根据量子与经典的对应原理，算符$\widehat{A}, \widehat{G}$将分别变成经典物理量A和G，而(19)式将变成

$$\delta A = \epsilon[A, G]. \tag{20}$$

这正好是分析力学中的无穷小正则变换的方程[1]，其中G就叫做无穷小正则变换的生成元。特别的，假设我们分别取$A = q^a$和$A = p_a$, 那么(20)式给出的就是

$$\delta q^a = \epsilon[q^a, G] = \epsilon\frac{\partial G}{\partial p_a}, \quad \delta p_a = \epsilon[p_a, G] = -\epsilon\frac{\partial G}{\partial q^a}. \tag{21}$$

假设记算符单参变换簇$\widehat{A}\big(\widehat{q}(\theta), \widehat{p}(\theta)\big)$的经典极限为$A\big(q(\theta), p(\theta)\big)$，并称相空间参数曲线$\big(q(\theta), p(\theta)\big)$为相流，那么由于相空间参数曲线上两个无限邻近的点相差的正好是一个无穷小量$d\theta = \epsilon$，从而由方程(21)可得相流满足的方程

$$\frac{dq^a}{d\theta} = \frac{\partial G}{\partial p_a}, \quad \frac{dp_a}{d\theta} = -\frac{\partial G}{\partial q^a}. \tag{22}$$

或者用相空间坐标$\mathbf{x} = (x^1, x^2, ...x^{2n})^T = (q^1, ..., q^n, p_1, ..., p_n)^T$将之写成

$$\frac{dx^i}{d\theta} = \omega^{ij}\partial_j G(\mathbf{x}). \tag{23}$$

[1]参见Goldstein H. Classical Mechanics. Third ed. 第9章-9.6节.

这个方程描述的是相空间点随着参数θ的某种“流动”，因此称之为相流。可见，量子的单参幺正变换的经典极限正是相空间满足(22)式(或(23)式)的相流！物理量$G(q,p)=G(\mathbf{x})$就称作相流的生成元。

既然量子幺正变换的物理含义是信息守恒，那作为其经典极限的无穷小正则变换和相流当然也具有信息守恒的含义，唯一的区别在于，一个是量子的信息，一个是经典信息。量子信息守恒的关键是幺正性，那么经典信息守恒的关键是什么呢？换言之，无穷小正则变换和相流是保持了经典力学的什么结构才使得它们保持信息守恒的呢？下面让我们来探讨这一关键问题。

首先我们将证明，无穷小正则变换和相流都保持相空间的辛结构！当然，我们只需对无穷小正则变换完成这一证明就够了，因为相流的本质就是持续进行的无穷小正则变换。记无穷小正则变换之前的正则变量为(q,p)，变换之后的正则变量为(q',p'), 其中

$$\begin{aligned} q'^a &= q^a + \delta q^a = q^a + \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_a} \\ p'_a &= p_a + \delta p_a = p_a - \epsilon \frac{\partial G}{\partial q^a}. \end{aligned} \tag{24}$$

式中，我们已经代入了(21)式。很容易直接验证，变换之后的辛形式$\omega' = dp'_a \wedge dq'^a$与变换之前的辛形式$\omega = dp_a \wedge dq^a$相等,

$$\begin{aligned} \omega' =& dp'_a \wedge dq'^a \\ =& \big(dp_a - \epsilon \frac{\partial^2 G}{\partial q^b \partial q^a} dq^b - \epsilon \frac{\partial^2 G}{\partial p_b \partial q^a} dp_b\big) \wedge \big(dq^a + \epsilon \frac{\partial^2 G}{\partial p_b \partial p_a} dp_b + \epsilon \frac{\partial^2 G}{\partial q^b \partial p_a} dq^b\big) \\ =& dp_a \wedge dq^a + \epsilon\big(\frac{\partial^2 G}{\partial p_b \partial p_a} dp_a \wedge dp_b - \frac{\partial^2 G}{\partial q^b \partial q^a} dq^b \wedge dq^a\big) \\ &+ \epsilon\big(\frac{\partial^2 G}{\partial q^b \partial p_a} dp_a \wedge dq^b - \frac{\partial^2 G}{\partial p_b \partial q^a} dp_b \wedge dq^a\big) \\ =& \omega. \end{aligned} \tag{25}$$

所以，辛形式在无穷小正则变换之下保持不变，即无穷小正则变换保持相空间辛结构。

反过来，也可以证明，相空间点(q,p)到临近(q',p')点的保持辛结构不变的无穷小变换必定是满足(21)式的无穷小正则变换。为了证明这一点，不

妨设我们要考察的无穷小变换为

$$q^a \to q'^a = q^a + \epsilon Q^a(q,p), \quad p_a \to p'_a = p_a + \epsilon P_a(q,p). \tag{26}$$

式中ϵ为无穷小量，Q^a, P_a均为相空间的函数。

假设上述变换保持辛结构，从而即有

$$dp'_a \wedge dq'^a - dp_a \wedge dq^a = 0. \tag{27}$$

代入上面的无穷小映射(26)，并展开到一阶无穷小，即有

$$\big(dP_a \wedge dq^a + dp_a \wedge dQ^a\big)\epsilon = 0. \tag{28}$$

由此即有

$$\begin{aligned}
0 =& dP_b \wedge dq^b + dp_a \wedge dQ^a \\
=& \frac{\partial P_b}{\partial q^a} dq^a \wedge dq^b + \frac{\partial P_b}{\partial p_a} dp_a \wedge dq^b + \frac{\partial Q^a}{\partial q^b} dp_a \wedge dq^b + \frac{\partial Q^a}{\partial p_b} dp_a \wedge dp_b \\
=& \frac{1}{2}\left(\frac{\partial P_b}{\partial q^a} - \frac{\partial P_a}{\partial q^b}\right) dq^a \wedge dq^b + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial Q^a}{\partial p_b} - \frac{\partial Q^b}{\partial p_a}\right) dp_a \wedge dp_b \\
&+ \left(\frac{\partial P_b}{\partial p_a} + \frac{\partial Q^a}{\partial q^b}\right) dp_a \wedge dq^b.
\end{aligned} \tag{29}$$

由此即可得到Q^a, P_a必须满足的方程

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial P_b}{\partial q^a} - \frac{\partial P_a}{\partial q^b} = 0 \\
&\frac{\partial Q^a}{\partial p_b} - \frac{\partial Q^b}{\partial p_a} = 0 \\
&\frac{\partial P_b}{\partial p_a} + \frac{\partial Q^a}{\partial q^b} = 0.
\end{aligned} \tag{30}$$

这三个方程看起来复杂，实际上它们的通解非常简单，不难验证，下面为它们的通解

$$Q^a = \frac{\partial G}{\partial p_a}, \quad P_a = -\frac{\partial G}{\partial q^a}. \tag{31}$$

式中G为某个任意的相空间函数。即是说，保持辛结构的无穷小映射(26)必定具有(31) 的形式, 从而也即满足(21)式。所以，它就是一个由G生成的无穷小正则变换。

实际上，保持相空间辛结构不变即是正则变换的一般定义，数学上也称这种保持辛结构不变的将(q,p)映射到(q',p')的微分同胚变换为辛同胚，**辛同胚和正则变换是一回事**。而相流就是一个依赖于参数θ的单参辛同胚。根据上面的论证可以知道，量子的单参幺正变换在$\hbar \to 0$ 的经典极限下就成为经典相空间的一个单参辛同胚。

推而广之，可以设想任何一个幺正变换都能通过选取一个合适的生成元$\widehat{G}$ 而写成$U(\theta_0) = \exp\big(-i\theta_0\widehat{G}/\hbar\big)$的形式，其中$\theta_0$为某个给定的数。换言之，可以设想将一个任意的幺正变换看成是位于某个单参幺正变换簇$U(\theta)$中。因此，根据以上关于单参幺正变换经典极限的讨论可以知道，这个幺正变换的经典对应物可以看成是由某个相流生成，从而必定为一个辛同胚。因此我们就可以下一个结论说，**任何一个幺正变换在合适的经典极限下，都会成为经典相空间上一个保持辛结构的辛同胚。**

注意，幺正变换的经典极限是由$U(\theta_0) = \exp\big(-i\theta_0\widehat{G}/\hbar\big)$并取$\hbar \to 0$定义的。很显然，根据这个定义，幺正算符$U(\theta_0)$本身并没有定义良好的经典极限，因为它的指数因子在$\hbar \to 0$极限下是剧烈振荡的，并且正是因为相位因子的这种振荡消除了量子相干性，所以我们才能在极限之下得到一个经典世界。但是，任何物理可观测量$\widehat{A}$在这个幺正变换之下的变换关系却有良好定义的经典极限，这个经典极限正好是相空间的辛同胚。

不妨举一些简单的例子：比方说对于一个单自由度的系统，记其正则坐标为x，正则动量为p。则变换$x \to p$、$p \to -x$显然是一个辛同胚。不难验证这个辛同胚对应的量子幺正变换为$U = \exp\big(-i\frac{\pi}{4\hbar}(\widehat{p}^2 + \widehat{x}^2)\big)$。再比方说空间反演变换，在经典上它作用为$q^a \to -q^a$, $p_a \to -p_a$，很显然这也是一个辛同胚。而它对应的量子的空间反演算符也的确是一个幺正变换。而比方说时间反演变换，在经典上它作用为$q^a \to q^a$, $p_a \to -p_a$，因此这会将辛形式映射为$\omega \to -\omega$，从而这不是一个辛同胚。而它对应的量子的时间反演算符也的确不是一个幺正变换，众所周知，那是一个反幺正变换。实际上，不难猜测，任何量子幺正变换对应的经典相空间变换都应该是保持辛形式的辛同胚，而任何量子反幺正变换对应的经典变换都应该将辛形式ω映射为$-\omega$。这可以看作是量子的维格纳对称表示定理[2]的经典对应物。

[2]参见Steven Weinberg, The quantum theory of fields, Volume I, 第二章的Appendix A。

因此，**量子幺正变换的经典对应物是相空间上保持辛结构的辛同胚映射，也称作正则变换。从而量子幺正性的经典对应物就应该是对相空间辛结构的保持。量子幺正性的物理含义是量子信息的守恒，从而经典上保持相空间辛结构的物理含义就应该是经典信息的守恒。**

能量的起源

量子幺正性意味着量子系统在时间演化之下是信息守恒的，而这又要求量子系统的时间演化是一种以时间为参数的单参幺正变换，这时候相应的幺正变换算符为

$$U(t) = \exp\big(-it\widehat{H}/\hbar\big), \tag{32}$$

$\widehat{H}$就是这一单参幺正变换的生成元。通常称$U(t)$为时间演化算符，称$\widehat{H}$为哈密顿算符，或者称之为能量算符，因为$\widehat{H}$的本征值就定义为系统的能量。很明显，可观测量算符在时间演化之下的单参变换簇为

$$\widehat{A}\big(\widehat{q}(t), \widehat{p}(t)\big) \equiv \exp\big(it\widehat{H}/\hbar\big)\widehat{A}\exp\big(-it\widehat{H}/\hbar\big). \tag{33}$$

这就是所谓的海森堡绘景中的算符。特别的，容易看出，海森堡绘景中的哈密顿算符就等于$\widehat{H}$本身，即是说哈密顿算符在时间演化之下是守恒的，相应于这一算符的本征值就是守恒量。这也就是为什么称哈密顿算符为能量算符的原因之一，因为它对应能量守恒。

根据前面关于单参幺正变换经典极限的讨论可以知道，量子时间演化的经典极限必定是经典相空间的一个相流，这个相流以物理的时间t为参数，以哈密顿量H为生成元，相应的相流方程为

$$\frac{dq^a}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_a}, \quad \frac{dp_a}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q^a}. \tag{34}$$

或者写成

$$\frac{dx^i}{dt} = \omega^{ij}\partial_j H(\mathbf{x}). \tag{35}$$

这就是著名的哈密顿正则方程。根据前面的讨论可知，哈密顿正则方程生成的相流必定是辛同胚。反过来，只要要求经典系统的时间演化是辛同

胚，也就是保持相空间辛结构，那它就必定是一个以时间t为参数的相流，从就必定有哈密顿正则方程！相应的时间演化的生成元就称作哈密顿量，哈密顿量的取值就称作能量。

由此可见，能量正是起源于时间演化之下保持信息守恒的要求，正是这一要求使得经典系统的时间演化是相空间的相流，而这一相流的生成元所刻画的就是能量。所以能量概念是以信息守恒为前提的，当然在热力学情况下可以稍作推广，后文会进一步讨论这种推广，并将之和贾金斯基(Jarzynski)等式联系起来。

3 信息守恒与统计力学

3.1 信息守恒与刘维尔定理

所以经典信息守恒的含义就是保持相空间辛结构，这样的系统必定是哈密顿系统，其时间演化必定满足哈密顿正则方程，而时间演化的生成元就是哈密顿量，也就是系统的能量。

另一方面，辛形式又决定了相空间的体积形式。对于一个n自由度的系统，其相空间体积形式Ω可以写成

$$\Omega = dp_1 \wedge dq^1 \wedge dp_2 \wedge dq^2 .... \wedge dp_n \wedge dq^n = \frac{1}{n!}\omega^{\wedge n}, \tag{36}$$

式中$\omega^{\wedge n}$表示n个ω以外积的形式乘起来。信息守恒保持辛形式就意味着，**信息守恒的经典系统必定保持相空间体积。** 特别的，假设初始$t=0$时刻在相空间任取一个区域D_0, 假设这个区域随时间演化到t时刻变成了区域D_t, 即D_0内的点在t时刻“流到”了D_t。则信息守恒必定意味着D_t的体积等于D_0的体积，记为

$$\mathrm{Vol}(D_t) = \mathrm{Vol}(D_0). \tag{37}$$

或者也可以简单地记作

$$\Omega_t = \Omega_0, \tag{38}$$

式中Ω_0表示0时刻的某个体积元，Ω_t表示这个初始体积元随时间“流到”t时刻所构成的t时刻体积元。这也就是著名的刘维尔定理。根据这个定理，相空间的相流必定是一种不可压缩“流体”。

在统计力学中，人们不再是考察单个系统，而是考察一个系综。换言之，人们考察相空间的一个概率密度分布$\rho(q,p,t)$。即假设系统在t时刻以概率$\rho(q,p,t)\Omega$处在相点(q,p)附近的体积元Ω中。

由于系统在相空间的轨迹不会凭空产生或者消失，这就意味着

$$\rho\big(q(t),p(t),t\big)\Omega_t = \rho\big(q(0),p(0),0\big)\Omega_0. \tag{39}$$

进一步，根据刘维尔定理，$\Omega_t = \Omega_0$，从而必有$\rho\big(q(t),p(t),t\big) = \rho\big(q(0),p(0),0\big)$，换言之

$$0 = \frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + [\rho, H]. \tag{40}$$

特别的，以上结果意味着，经典系综的信息量S(也就是熵)是不变的！因为

$$\frac{dS}{dt} = \frac{d}{dt}\int \big(-\rho\ln\rho\big)\Omega_t = 0. \tag{41}$$

所以，刘维尔定理意味着经典系综的信息量守恒。

正如大家熟知的，以上结论并不违反热力学第二定律！原因在于，热力学定律是在所谓的热力学极限下考虑问题，更重要的是，上面考察的熵是所谓的精细熵，而热力学熵则是一种粗粒化以后的粗粒化熵。经典系综的精细熵是守恒的，但是热力学极限下的粗粒化熵却是随时间增长的。

以上推理过程告诉我们，经典系统的信息守恒必然意味着按香农熵定义的信息量守恒。但是反过来则不然。从上面的推理过程可以看到，信息量守恒只需时间演化保持相空间体积，而信息守恒要求保持相空间辛结构。保持辛结构必定保体积，但是保体积不一定保辛结构，两者的区别可以从Gromov的不可压缩定理(non-squeezing theorem)看得很清楚。在物理上，这个区别是因为，保持信息量不变并不能完全排除系统和外界发生了信息的交换，因为有可能是达到了信息的“收支平衡”。

3.2 推广到信息不守恒的经典力学

前面我们讨论的都是信息守恒情形，但是现实中很多系统与外界之间是存在信息流耦合的，比如系统与外界存在热交换就属于这种情形，这一节我们就是要把经典力学理论推广到这种信息不守恒情形。

首先，根据刘维尔定理，对于信息守恒情形，我们有$\Omega_t = \Omega_0$，从而必有

$$\Omega_{t+\epsilon} = \Omega_t, \tag{42}$$

式中ϵ为一个无穷小的时间间隔。推广到信息不守恒情形，那这个等式就不能成立了，根据熵与相空间体积的关系，这时候我们应该有

$$\ln\big(\frac{\Omega_{t+\epsilon}}{\Omega_t}\big) = \delta S\big(\mathbf{x}_t\big), \tag{43}$$

式中$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}(t)$，而$\delta S(\mathbf{x})$表示系统在$\epsilon$时间之内熵的增加量，或者说从外界流入的信息量。不妨将这个信息增量写成$\delta S(\mathbf{x}_t) = \kappa(\mathbf{x}_t)\epsilon$，$\kappa(\mathbf{x}_t)$**为单位时间之内流入的信息量，如果是从系统中擦除信息，那么**$\kappa(\mathbf{x}_t)$**就取负值，**从而根据(43)式，即有

$$\Omega_{t+\epsilon} = \Omega_t \exp\big(\kappa(\mathbf{x}_t)\epsilon\big). \tag{44}$$

将这个式子沿着相空间的演化轨迹积分，即有

$$\Omega_\tau = \Omega_0 \exp\big(\int_0^\tau \kappa(\mathbf{x}_t)dt\big). \tag{45}$$

另一方面，信息不守恒的系统当然不再是哈密顿正则系统，所以我们需要对哈密顿正则方程(35)进行修正。最简单的修正是给它加上一个反映与外界之间信息耦合的项$\kappa^i(\mathbf{x})$

$$\frac{dx^i}{dt} = \omega^{ij}\partial_j H(\mathbf{x}) + \kappa^i(\mathbf{x}). \tag{46}$$

问题是，加上的这一项和前面的单位时间输入的信息量$\kappa(\mathbf{x})$之间是什么关系呢？

为了看清这两者的联系，我们根据坐标变换可以写出

$$\Omega_{t+\epsilon} = \Omega_t|\frac{\partial \mathbf{x}_{t+\epsilon}}{\partial \mathbf{x}_t}| = \Omega_t\big(1 + \epsilon\partial_i(\dot{x}^i)\big), \tag{47}$$

式中$|\frac{\partial \mathbf{x}_{t+\epsilon}}{\partial \mathbf{x}_t}|$表示雅可比行列式。代入修改以后的演化方程(46)，即有

$$\Omega_{t+\epsilon} = \Omega_t\big(1 + \epsilon(\omega^{ij}\partial_i\partial_j H + \partial_i\kappa^i)\big) = \Omega_t\big(1 + \epsilon\partial_i\kappa^i\big). \tag{48}$$

与(44)式相比，即有

$$\partial_i \kappa^i(\mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x}). \tag{49}$$

即是说，给定外界输入信息的比特率$\kappa(\mathbf{x})$, 通过求解这个方程，我们就能得出有信息输入时哈密顿正则方程的修正项$\kappa^i(\mathbf{x})$。这样，我们就把经典力学推广到了信息不守恒情形。

比如对于一个有阻尼的振子，阻尼力的存在使得系统“摩擦发热”，根据兰道尔原理，这就意味着系统的信息在不断被擦除，那么，什么信息被擦除了呢？回答是系统的初值信息在不断被擦除，这个擦除初值信息的过程，就是系统相空间的缩减过程。不难验证，有阻尼振子的相空间的确是随着时间缩减的。从系统擦除信息意味着相空间缩减，向系统额外输入信息当然就意味着相空间膨胀，因为需要更大的相空间来承载输入的信息。

3.3 信息不守恒与贾金斯基等式

下面我们来研究一个置于温度为T的恒温热库中的封闭系统，假设我们通过对系统的控制参数$\lambda(t)$，使得它在两个热力学平衡态之间演化。在演化的中间阶段，系统与热库之间有热量交换，因此这是一个信息不守恒的问题，在演化的中间阶段，其满足的动力学方程应该是(46)。

令系统在$0 \le t \le \tau$的时间段内经历从平衡态A到平衡态B的不可逆演化过程。在演化的初末态，也就是A态和B态，系统可以用正则系综来描述，从而相空间的概率分布函数为

$$\rho(\mathbf{x}_0, \lambda_A) = e^{[F_A - H(\mathbf{x}_0, \lambda_A)]/T}, \quad \rho(\mathbf{x}_\tau, \lambda_B) = e^{[F_B - H(\mathbf{x}_\tau, \lambda_B)]/T}, \tag{50}$$

式中F_A, F_B分别为A, B态的自由能，并且我们已经取了玻尔兹曼常数$k_B = 1$。

则我们有

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}_\tau, \lambda_B)\Omega_\tau &= e^{[F_B - H(\mathbf{x}_\tau, \lambda_B)]/T}\Omega_\tau \\ &= e^{[F_B - H(\mathbf{x}_\tau, \lambda_B)]/T} \exp\Big(\int_0^\tau \kappa(\mathbf{x}_t)dt\Big)\Omega_0 \\ &= e^{\left[F_B - F_A - H(\mathbf{x}_\tau, \lambda_B) + H(\mathbf{x}_0, \lambda_A) + T(\int_0^\tau \kappa(\mathbf{x}_t)dt)\right]/T}\rho(\mathbf{x}_0, \lambda_A)\Omega_0. \end{aligned} \tag{51}$$

式中第二个等号我们代入了(45)式。由于$\int_0^\tau \kappa(\mathbf{x}_t)dt$是整个演化过程热库向系统输入的熵，从而

$$Q = T(\int_0^\tau \kappa(\mathbf{x}_t)dt) \tag{52}$$

就是整个过程热库向系统输入的热量。因此

$$W = H(\mathbf{x}_\tau, \lambda_B) - H(\mathbf{x}_0, \lambda_A) - T(\int_0^\tau \kappa(\mathbf{x}_t)dt) \tag{53}$$

就是从初态到末态的整个过程，外界对系统所做的功。

从而我们就可以把(51)式改写成

$$\rho(\mathbf{x}_\tau, \lambda_B)\Omega_\tau = e^{\Delta F/T} e^{-W/T} \rho(\mathbf{x}_0, \lambda_A)\Omega_0, \tag{54}$$

式中$\Delta F = F_B - F_A$为初末态自由能的增量，这是一个纯粹的宏观状态参量，与微观过程无关。将上面这个式子两边对相空间积分，利用概率密度的归一化条件，即得

$$e^{-\Delta F/T} = \overline{e^{-W/T}}, \tag{55}$$

式中$\overline{e^{-W/T}}$表示$e^{-W/T}$的统计平均值。(55)式就是著名的贾金斯基等式, 它以定量的形式给出了封闭系统经历不可逆过程前后自由能的改变量与过程中外界对系统所做的功的统计平均值之间的联系。

4　信息守恒与辛算法

写出了一个经典系统的哈密顿量，有了哈密顿正则方程，剩下的任务就是求解它，然而可以精确求解的哈密顿系统并不多，更多的时候我们要求助于数值计算方法。对于求解哈密顿正则方程，数学家冯康先生注意到“如果在算法中能够保持辛几何的对称性，将可以避免人为耗散性这类算法的缺陷，成为具有高保真性的算法”，冯先生进而在国际上首次提出了著名的辛算法。与传统数值方法相比，辛算法具有长时间的稳定性和跟踪能力，在哈密顿系统的数值求解上显示了压倒性的优越性。

辛算法的关键是，其差分格式保持相空间的辛结构！因此从本文的观点来看，它具有信息守恒的特点，具体来说就是，辛算法既避免了在差分近

似中人为向系统输入额外信息，也避免了人为擦除信息。在我们看来，这正是辛算法具有优越性的根本原因。

下面我们以$n = 1$的单自由度系统为例，简单说明传统的显式欧拉算法如何不具有信息守恒，而辛欧拉算法又如何保持信息守恒。当然，我们要数值求解的，就是如下哈密顿正则方程

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}. \tag{56}$$

取时间步长为Δt, 并令第m步迭代的正则变量取值为

$$q_m \equiv q(m\Delta t), \quad p_m \equiv p(m\Delta t). \tag{57}$$

记第m步时的哈密顿量为$H(q_m, p_m)$, 则根据显式欧拉算法，我们将有如下差分格式

$$\begin{aligned} \frac{q_{m+1} - q_m}{\Delta t} &= \frac{\partial H}{\partial p_m} \\ \frac{p_{m+1} - p_m}{\Delta t} &= -\frac{\partial H}{\partial q_m}. \end{aligned} \tag{58}$$

根据这个差分格式，不难得到

$$\begin{aligned} dq_{m+1} &= \big(1 + \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_m \partial p_m}\big) dq_m + \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_m^2} dp_m \\ dp_{m+1} &= \big(1 - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_m \partial p_m}\big) dp_m - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_m^2} dq_m. \end{aligned} \tag{59}$$

由此不难计算辛形式，得

$$dp_{m+1} \wedge dq_{m+1} = \big[1 + (\Delta t)^2 \big(\frac{\partial^2 H}{\partial q_m^2} \frac{\partial^2 H}{\partial p_m^2} - (\frac{\partial^2 H}{\partial q_m \partial p_m})^2\big)\big] dp_m \wedge dq_m. \tag{60}$$

显然，这种差分格式并不保持辛形式不变，从而信息不守恒！

而在辛欧拉算法中，人们近似取哈密顿量的函数形式为$H(q_m, p_{m+1})$。相应的差分格式为

$$\begin{aligned} \frac{q_{m+1} - q_m}{\Delta t} &= \frac{\partial H}{\partial p_{m+1}} \\ \frac{p_{m+1} - p_m}{\Delta t} &= -\frac{\partial H}{\partial q_m}. \end{aligned} \tag{61}$$

根据这个差分格式，不难得到

$$
\begin{aligned}
& dq_{m+1} - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p_{m+1}^2} dp_{m+1} = \big(1 + \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_m \partial p_{m+1}}\big) dq_m \\
& \big(1 + \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_m \partial p_{m+1}}\big) dp_{m+1} = dp_m - \Delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q_m^2} dq_m .
\end{aligned} \tag{62}
$$

进而容易得到

$$
dp_{m+1} \wedge dq_{m+1} = dp_m \wedge dq_m . \tag{63}
$$

很显然，这种算法保持相空间辛结构，所以称之为辛欧拉算法。因此，根据本文的观点，辛欧拉算法是信息守恒的。