# 关于量子力学与随机过程的一种结合

**陈童**

October 24, 2024

## Contents



## 1 引言

这篇文章的缘起如下：众所周知，在经典物理中随机过程通常用朗之万方程来描写，它的核心就是在牛顿定律中引入噪声项。但是，我们也知道哈密顿力学才是描述经典力学的更好理论框架，因此我就想到一个问题，即如何在哈密顿力学框架中引入随机噪声，我很快就得到了一个答案。所以当时我在知乎上发了一条消息，说找到了哈密顿力学的一种推广，指的就是找到了哈密顿力学与随机过程的一种结合。不久之后，我又发现，按照我的思路，其实在量子力学的框架下引入随机噪声才是更自然的，而经典力学的情形只是$\hbar \to 0$时的极限，这就有了现在这篇文章。

当然，工作完成后我就系统调查了一下文献，然后发现很大程度上白高兴了，因为无论是结合量子力学与随机过程也好，还是结合经典哈密顿力学与随机过程也罢，这些大的创新点都是文献中早就有了的。留给我的只剩下我的思路好像还没有出现过，得到的具体结果好像文献中也没有，但是大的创新点都早就被别人占据了。因此我写论文的动力就失去了一大半，最后考虑到对这块知识通常人们可能都不知道，而且我的思路也的确有一定的优雅性，所以决定还是写成这篇文章。

# 2 海森堡绘景中的结合

本节我们考察在海森堡绘景中量子力学与随机过程的一种结合。

对于封闭的量子系统，在海森堡绘景中，物理量算符$A$的时间演化可以表示成

$$A(t+dt) = U^{-1}(dt)A(t)U(dt), \tag{1}$$

式中$U(dt)$为无穷小时间的时间演化算符，给定哈密顿算符$H$(当然是厄米算符), $U(dt)$ 由$U(dt) = \exp\big[-iHdt/\hbar\big]$给出。

但是实际的量子系统通常是开放系统，它要受到环境中的噪声的影响。根据Ito随机微积分([1, 2])，无穷小时间之内的维纳过程$dw$满足Ito 规则$(dw)^2 = dt$, 这就说明维纳噪声会影响系统的时间演化。考虑到维纳噪声(假设有$N$个独立的噪声)的影响以后，对开放系统量子力学的一个自然而简单的修改是，将时间演化算符$U(dt)$修改成如下形式

$$\begin{aligned} U(dt) &= \exp\big[-i(Hdt + \sum_a C_a dw_a)/\hbar\big], \\ U^{-1}(dt) &= \exp\big[i(Hdt + \sum_a C_a dw_a)/\hbar\big]. \end{aligned} \tag{2}$$

式中$dw_a(a = 1, 2, ..., N)$为由第$a$个独立噪声源所产生的无穷小维纳过程，$C_a$为某算符，不一定为厄米算符。如果$C_a$为厄米算符，则很显然有$U^{-1}(dt) = U^\dagger(dt)$, 从而算符演化方程(1)能够保持算符的厄米性。但是，如果$C_a$不是厄米算符，那$U^{-1}(dt) = U^\dagger(dt)$就不成立了，相应的，演化方程(1)也就无法保持算符的厄米性。

不过，无论$C_a$是否厄米，演化方程(1)总是能够保持量子力学的基本对易关系。为了看清楚这一点，考虑坐标算符$X(t)$和动量算符$P(t)$, 按照量子

力学基本对易关系，我们有

$$[X(t), P(t)] = i\hbar. \tag{3}$$

另一方面，根据演化方程(1)，很显然有

$$\begin{aligned}[X(t+dt), P(t+dt)] &= U^{-1}(dt)[X(t), P(t)]U(dt) \\ &= U^{-1}(dt) i\hbar U(dt) = i\hbar,\end{aligned} \tag{4}$$

从而算符的时间演化自动保持量子力学基本对易关系。

将(2)式代入(1)式，定义$[C_a dw_a, A] \equiv [C_a, A]dw_a$，并记

$$Hdt + \sum_a C_a dw_a \equiv F, \tag{5}$$

则根据标准的算符公式，有

$$\begin{aligned}A(t+dt) &= \exp\big[iF/\hbar\big]A(t)\exp\big[-iF/\hbar\big] \\ &= A(t) + \frac{i}{\hbar}[F, A(t)] + \frac{i^2}{2!\hbar^2}[F,[F,A(t)]] + \frac{i^3}{3!\hbar^3}[F,[F,[F,A(t)]]] + \ldots.\end{aligned}$$

运用如下Ito规则

$$(dt)^2 = dt dw_a = 0, \quad dw_a dw_b = \delta_{ab} dt, \tag{6}$$

不难得到上面关于$A(t+dt)$的级数展开中，

$$\frac{i^2}{2!\hbar^2}[F,[F,A(t)]] = -\frac{1}{2\hbar^2}\sum_a [C_a,[C_a,A]]dt, \tag{7}$$

而$F$的三次以及更高次项全部为零. 从而即有

$$dA = \frac{i}{\hbar}[Hdt + \sum_a C_a dw_a, A] - \frac{1}{2\hbar^2}\sum_a [C_a,[C_a,A]]dt. \tag{8}$$

式中$dA = A(t+dt) - A(t)$。这是一个关于算符$A(t)$的随机微分方程，它定义了一个算符值的Ito过程，同时它也是标准量子力学中海森堡运动方程的Ito推广, 不妨称之为随机海森堡方程。

作为对以上推导过程的一个检验。假设另有一算符$B(t)$，它也满足

$$dB = \frac{i}{\hbar}[Hdt + \sum_a C_a dw_a, B] - \frac{1}{2\hbar^2}\sum_a [C_a,[C_a,B]]dt. \tag{9}$$

则根据(8)式以及(9)式，并利用如下Ito微积分的规则

$$d(AB) = (dA)B + A(dB) + (dA)(dB), \tag{10}$$

不难得到，$AB$同样满足

$$d(AB) = \frac{i}{\hbar}[Hdt + \sum_a C_a dw_a, AB] - \frac{1}{2\hbar^2}\sum_a [C_a, [C_a, AB]]dt. \tag{11}$$

正好与直接从$AB(t+dt) = U^{-1}(dt)AB(t)U(dt)$得到的结果一致。也即是说，方程(8)保持算符的乘积关系，类似的，不难验证，它也保持算符的加法和数乘，从而算符演化方程(8)保持整个算符代数，它的解定义了算符代数的一个单参自同构。

# 3　薛定谔绘景中的结合

变换到薛定谔绘景的话，则算符不随时间演化, 随时间演化的是代表量子态的密度算符$\rho(t)$, 其时间演化方程为

$$\rho(t+dt) = U(dt)\rho(t)U^{-1}(dt). \tag{12}$$

类似的，应用Ito规则，即可以得到

$$d\rho = -\frac{i}{\hbar}[Hdt + \sum_a C_a dw_a, \rho] - \frac{1}{2\hbar^2}\sum_a [C_a, [C_a, \rho]]dt. \tag{13}$$

假设记$\rho(t)$相应的海森堡绘景密度算符为$\rho_0 = \rho(0)$, 记海森堡绘景$A(t)$算符对应的薛定谔绘景算符为$A_0 = A(0)$，从而

$$\mathrm{Tr}(\rho_0 A(t)) = \mathrm{Tr}(\rho(t)A_0), \tag{14}$$

等式左边是在海森堡绘景中计算，而等式右边则是在薛定谔绘景中计算。为了验证这个式子，我们注意到，在形式上，时间演化算符$U(dt)$可以积分，进而得到从0时刻到$t$时刻的有限时间的演化算符$U(t)$,

$$U(t) = \mathcal{T}\exp\big[-i\int_0^t (Hdt + \sum_a C_a dw_a)/\hbar\big], \tag{15}$$

式中$\mathcal{T}$表示编时操作。进而可以积分(12)式，并得到

$$\rho(t) = U(t)\rho_0 U^{-1}(t), \tag{16}$$

这也就是算符值随机微分方程(13)形式上的解。同样可以积分(1)式，并得到$A(t) = U^{-1}(t)A_0U(t)$。从而(14)式是直接了当的。

下面我们将方程(13)对维纳噪声求统计平均，依然记统计平均以后的$\rho(t)$为$\rho(t)$(注意不要混淆), 注意到$dw_a$的统计平均等于零, 进而即可以得到如下算符微分方程

$$\begin{aligned}\frac{d\rho}{dt} &= -\frac{i}{\hbar}[H,\rho] - \frac{1}{2\hbar^2}\sum_a [C_a,[C_a,\rho]] \\ &= -\frac{i}{\hbar}[H,\rho] + \frac{1}{\hbar^2}\sum_a \Big[C_a\rho C_a - \frac{1}{2}(C_a^2\rho + \rho C_a^2)\Big].\end{aligned} \tag{17}$$

这其实就是量子版本的Fokker-Planck方程。当然，通过对(16)式求统计平均，就可以得到这个方程形式上的解，写作

$$\rho(t) = \overline{U(t)\rho_0 U^{-1}(t)}, \tag{18}$$

式中$U(t)$由(15)式给出，$\overline{G}$表示将表达式$G$对维纳噪声求统计平均。这里值得强调的是，方程(17)的形式解是可以求出的，就是(18)式。

不妨将方程(17)与开放系统著名的Lindblad 方程([3, 4])进行比较，后者是

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho] + \frac{1}{\hbar^2}\sum_a \Big[L_a\rho L_a^\dagger - \frac{1}{2}(L_a^\dagger L_a\rho + \rho L_a^\dagger L_a)\Big]. \tag{19}$$

很明显，两者很像，但是有一些微妙的差别，特别的，如果$C_a$不是厄米算符，那这两个方程就无法相等同。但是，如果Lindblad算符$L_a$本身是厄米算符，满足$L_a^\dagger = L_a$, 那这时候Lindblad 方程和我们导出的方程(17)其实是一样的(只需要取$C_a = L_a$就可以了)。这时候，由于我们已经得到了方程(17)的形式解，那这个形式解当然也是相应Lindblad方程的解，也就是说，对于这种情况，形式上我们完全解出了Lindblad方程。

# 4 随机薛定谔方程

以上考察的是在随机噪声影响下，混态$\rho(t)$如何随时间演化，下面我们来考察纯态$|\psi(t)\rangle$如何随时间演化，利用时间演化算符$U(dt)$, 不难得到

$$\begin{aligned}|\psi(t+dt)\rangle &= U(dt)|\psi(t)\rangle = \exp\Big[-i(Hdt + \sum_a C_a dw_a)/\hbar\Big]|\psi(t)\rangle \\ &= |\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}(Hdt + \sum_a C_a dw_a)|\psi(t)\rangle - \frac{1}{2\hbar^2}\sum_a C_a^2 dt|\psi(t)\rangle.\end{aligned}$$

式中第二行我们利用了Ito规则。不妨定义$d|\psi\rangle \equiv |\psi(t+dt)\rangle - |\psi(t)\rangle$，进而即可以把这个结果写成

$$d|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}(H - i\frac{1}{2}\sum_a C_a^2/\hbar)|\psi(t)\rangle dt - \frac{i}{\hbar}\sum_a C_a|\psi(t)\rangle dw_a. \tag{20}$$

这是一个关于量子态的随机微分方程, 不妨称之为随机薛定谔方程。从这个方程可以看出，量子态的时间演化取决于如下非厄米的有效哈密顿量$H_{\text{eff}}$

$$H_{\text{eff}} = H - i\frac{1}{2}\sum_a C_a^2/\hbar. \tag{21}$$

值得说明的是，作为对Lindblad方程的一种考察，类似上面这样的随机薛定谔方程(细节上有出入，因为我们的方程不是源于对Lindblad方程的考察)是文献中早已出现过的。

如果$C_a$为厄米算符。则容易将(20)式厄米共轭，进而得到左矢满足的随机微分方程

$$d\langle\phi(t)| = \langle\phi(t)|\frac{i}{\hbar}(H + i\frac{1}{2}\sum_a C_a^2/\hbar)dt + \langle\phi(t)|\frac{i}{\hbar}\sum_a C_a dw_a. \tag{22}$$

根据(20)式和(22)式，不难得到

$$(d\langle\phi(t)|)|\psi(t)\rangle + \langle\phi(t)|(d|\psi(t)\rangle) = -\langle\phi(t)|\sum_a C_a^2/\hbar^2|\psi(t)\rangle dt. \tag{23}$$

这个结果告诉我们，如果按照标准的微分规则$d(\langle\phi|\psi\rangle) = (d\langle\phi(t)|)|\psi(t)\rangle + \langle\phi(t)|(d|\psi(t)\rangle)$定义量子态内积的时间微分，那结果将不等于零。也就是说，按照标准的微分规则，在随机薛定谔方程中，量子态的时间演化不保持内积不变，从而不是幺正的！当然，这很好理解，因为噪声的存在，会使得量子系统的信息不断丢失，从而没有幺正性。

但是，随机薛定谔方程(20)特殊的地方就在于，如果考虑到Ito微分的规则(10), 那就应该有

$$d(\langle\phi|\psi\rangle) = (d\langle\phi|)|\psi\rangle + \langle\phi|(d|\psi\rangle) + (d\langle\phi|)(d|\psi\rangle), \tag{24}$$

这时候代入(20)式和(22)式，并利用Ito规则，就不难得到

$$d(\langle\phi(t)|\psi(t)\rangle) = 0. \tag{25}$$

也就是说，如果$C_a$为厄米算符，那么按照Ito微分的规则，量子态的时间演化将是幺正的。不妨将这种幺正性称作Ito幺正性，以和标准的量子力学幺正性相区别。

作为随机薛定谔方程(20)最简单的例子，我们不妨假设算符$H$以及$C_a, a = 1, 2, ..., N$均不显含时间，且这些算符两两对易，即$[H, C_a] = 0, [C_a, C_b] = 0$，因此它们有一组共同的本征态$|nc_1...c_N\rangle$，满足

$$H|nc_1...c_N\rangle = E_n|nc_1...c_N\rangle, \quad C_a|nc_1...c_N\rangle = c_a|nc_1...c_N\rangle, \tag{26}$$

式中本征值$E_n, c_a$为一些数。则可以将量子态$|\psi(t)\rangle$按照这些本征态展开为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,c_a} \psi_{nc_1...c_N}(t)|nc_1...c_N\rangle, \tag{27}$$

式中波函数$\psi_{nc_1...c_N}(t)$为展开系数。将这个展开式代入随机微分方程(20)，即可以得到一组展开系数$\psi_{nc_1...c_N}(t)$所满足的随机微分方程，为

$$d\psi_{nc_1...c_N}(t) = -\frac{i}{\hbar}(E_n - i\frac{1}{2}\sum_a c_a^2/\hbar)\psi_{nc_1...c_N}(t)dt - \frac{i}{\hbar}\sum_a c_a\psi_{nc_1...c_N}(t)dw_a. \tag{28}$$

这组随机微分方程的解为

$$\psi_{nc_1...c_N}(t) = \exp\big(-\frac{i}{\hbar}E_n t - \frac{i}{\hbar}\sum_a c_a w_a(t)\big)\psi_{nc_1...c_N}(0). \tag{29}$$

因此，在这种情况下，原来随机薛定谔方程(20)的通解为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,c_a} \psi_{nc_1...c_N}(0)\exp\big(-\frac{i}{\hbar}E_n t - \frac{i}{\hbar}\sum_a c_a w_a(t)\big)|nc_1...c_N\rangle. \tag{30}$$

# 5 经典极限

原本的Lindblad 方程完全是一个量子力学方程，它并没有相应的经典对应物，换言之，它没有简单的定义良好的经典极限。但是我们的Lindblad 方程的类似物, 方程(13)，由于能够用算符对易子的形式写出来，所以根据量子与经典的对应原理，我们很容易得到它的经典对应物。

具体来说，根据量子与经典的对应原理，在$\hbar \to 0$的极限下，我们应该将量子的算符替换成经典相空间的函数，将量子的算符对易子$[\ ,\ ]/(i\hbar)$替换成经典的泊松括号$\{\ ,\ \}$. 这样替换以后，方程(13)的经典对应物即是

$$d\rho = \{Hdt + \sum_a C_a dw_a, \rho\} + \frac{1}{2}\sum_a\{C_a, \{C_a, \rho\}\}dt. \tag{31}$$

这就是随机噪声影响下的刘维尔方程，不妨称之为随机刘维尔方程。而方程(17)的经典对应物则是

$$\frac{d\rho}{dt} = \{H, \rho\} + \frac{1}{2}\sum_a \{C_a, \{C_a, \rho\}\}. \tag{32}$$

同样，随机海森堡方程(8)的经典对应物则是

$$dA = \{A, Hdt + \sum_a C_a dw_a\} + \frac{1}{2}\sum_a \{C_a, \{C_a, A\}\}dt. \tag{33}$$

它当然是考虑到随机噪声影响之后的哈密顿正则方程，不妨称之为随机哈密顿方程。

# References


[1] Bernt. Oksendal, Stochastic differential equations: an introduction with applications. Springer Science and Business Media, 2013.

[2] L. C. Evans, An introduction to stochastic differential equations[M]. American Mathematical Soc., 2012.

[3] G. Lindblad: On the generators of quantum dynamical semigroups, Commun. Math. Phys. 48, 119–130 (1976).

[4] V. Gorini, A. Kossakowski, E.C.G. Sudarshan: Completely positive dynamical semigroups of n-level systems, J. Math. Phys. 17, 821–825 (1976).