

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Matemática
Programa de Pós-Graduação em Matemática

**Semigrupos dinâmicos quânticos a tempo
contínuo**

Dissertação de Mestrado

Josué Knorst

Porto Alegre, outubro de 2018.

Dissertação submetida por Josué Knorst ¹ como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Matemática pelo Programa de Pós-Graduação em Matemática do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Professor Orientador:

Artur Oscar Lopes (PPGMat-UFRGS)

Banca Examinadora:

Adriana Neumann de Oliveira (PPGMat-UFRGS)

Carlos Felipe Lardizabal Rodrigues (PPGMat-UFRGS)

Leonardo Fernandes Guidi (IME-UFRGS)

Data da Prestação: 4 de Outubro de 2018.

¹Bolsista da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES

Agradecimentos

Este trabalho não teria acontecido se não fosse uma lista bastante grande (mas enumerável) de pessoas em minha vida. Tentarei lembrar da maioria dos mestre e doutores, da matemática e da vida, que me deram conselhos e empurrões, desde os primeiros passos nesta área. Meu contato com a matemática começou muito cedo, na OBMEP (Olimpíada Brasileira de Matemática das Escolas Públicas). Mais especificamente no PIC, onde conheci a professora Roberta Manfroi Ló e o professor Oclide Dotto. Graças a eles descobri o quanto a matemática pode ser divertida! Sou muito grato a eles por terem me acolhido tão bem no programa e terem me propiciado inúmeros sábados de deleite matemático. À Beth e ao casal Marilaine e Alvino, por terem me acompanhado em várias cerimônias de premiação e pelo constante incentivo, ano após ano, até os dias de hoje. É de grande satisfação frequentar o mesmo instituto que vocês e lembrar de tudo que compartilharam comigo. Ao professor Rogério Steffenon, que também me acolheu no PIC e teve influência significativa no que veio a acontecer após o PIC. Sou eternamente grato pelos conselhos e pelas portas abertas, sobretudo pelo empurrãozinho que me fez entrar de cabeça no bacharelado em matemática e conhecer o IMPA ainda bem jovem. Agradeço também aos diretores da escola onde cursei o Ensino Médio, a Décio Martins Costa, pela flexibilidade ímpar que me deu condições de aproveitar tais oportunidades.

Ao professor Eduardo Brietzke, por uma generosa contribuição na minha formação, vide todos os cursos de análise mais topologia! Aos colegas de graduação e mestrado, destaco Jader, Marcus, Yuri, Will, Feltes, Hugo e claro, Izabella. Alguns presentes por toda a graduação até hoje! São parceiros tanto pra longas discussões teóricas, façam elas sentido matematicamente ou não, quanto para as toscas piadas de cada dia. Na sala da pós ou em algum

bar, parceiros de matemática, café e cerveja. Mesmo que seja só para trocar uma ideia e tomar uma cerveja pré-jogo do Grêmio, vocês estiveram lá em todo o tipo de momento, desde os de lazer até os mais delicados. Obrigado! Incluo também as divas da aplicada, faziam do LICC um lugar muito aconchegante: Bruna, Ana Paula, Júlia e Izabella (por um tempo, né?). Vocês fizeram meus dias muito mais leves e fáceis. Se na matemática ainda temos o estigma de poucas mulheres, eu tenho o privilégio de conhecer vocês e lembrar que lugar de mulher é onde ela quiser. Gratidão a mais duas mulheres: as secretárias Rosane e Láuria, sempre dispostas a solucionar e esclarecer os pontos obscuros da pós-graduação, vocês me ajudaram a "jogar com o regulamento embaixo do braço" quando foi necessário. Ao professor Álvaro Ramos, pela amizade, incentivo e pelos mates em meio a seminários e congressos em diversos cantos por aí. Ao professor Carlos Felipe, pela disponibilidade em esclarecer dúvidas muito antes de ser membro da banca deste trabalho e pelo entusiasmo pela teoria que se refletiu em nós. Ao meu orientador, Artur Lopes, pela paciência, confiança e orientação. Foram valiosos conselhos, além de boa parte da minha formação. É uma honra aprender e trabalhar contigo.

Aos amigos que me apoiaram aqui em Porto Alegre e em Picada Café. À Bianca, pela amizade em momentos cruciais, onde me fizeste perceber o melhor em mim. Éverton e Jonas, pelas diversas indiadas em que nos metemos! À Andresa, Marcelo, Alcides e Aline, por terem aberto suas famílias e casas a mim. Obrigado pela receptividade e apoio! É muito mais fácil viver nessa grande e povoada Porto Alegre com a presença de vocês. Aos demais amigos que em algum momento me fizeram ser uma pessoa melhor, em diversos aspectos da vida, de consciência política à espiritualmente. Sejam eles escoteiros ou dançarinos de pole dance, sou grato por conhecê-los!

Por fim, eu devo muito à minha família. Dedico este trabalho a vocês! Por terem acreditado em mim, pelo apoio incondicional. Muitas foram as lições de vida e os abraços apertados em finais de semana corridos em meio a semestres turbulentos. Vocês me inspiram e me orgulham, por tudo que já passaram nas suas vidas. Ao meu irmão, pelo eterno companheirismo, de quem teve papel fundamental na minha personalidade. Do rock ao fanatismo gremista, foram muitos os exemplos que tive de ti. Sérgio, Sônia e Jonas: amo vocês! Izabella, minha melhor amiga e namorada, companheira pra tudo e pra toda hora. Minha gratidão por compartilhar tantas experiências comigo. Obrigado por enxergar além, por me inspirar a ser o melhor que eu

posso ser. Tu é uma das melhores coisas que já me aconteceu na minha vida. Pelos meses de péssimo humor e pouca disponibilidade que tu suportou com sorrisos e muito carinho, enquanto eu trabalhava nesta dissertação, eu sou eternamente grato. Meus dias são muito mais alegres ao teu lado, eu te amo muitão! ”Diante da vastidão do tempo e da imensidão do universo, é um imenso prazer para mim dividir um planeta e uma época com você”.

À Marcus e Izabella pela prévia leitura deste texto, à banca pelas excelentes críticas com as quais este texto ganhou em qualidade e redação e novamente à Artur por inúmeras dicas e correções na redação.

*” Mathematics, rightly viewed,
possesses not only truth,
but supreme beauty.”*

- Russell, Bertrand.

Resumo

Neste trabalho introduzimos brevemente o formalismo matemático da Mecânica Quântica e analisamos em detalhe a classe dos operadores completamente positivos (e sua conhecida representação de Kraus). Seguindo [10], definimos o que chamamos de semigrupos dinâmicos quânticos (QDS) e semigrupos markovianos quânticos (QMS), em analogia aos semigrupos clássicos da teoria de processos estocásticos com t real e $t \geq 0$. Explorando a relação entre o semigrupo e seu gerador infinitesimal, encontramos condições necessárias e suficientes para que um operador seja o gerador infinitesimal de um destes semigrupos quânticos com t real e $t \geq 0$. Um operador que satisfaz esta condição é chamado de operador condicionalmente completamente positivo. O tópico mais importante nesta dissertação é o seguinte: seguindo [10] descrevemos uma representação destes geradores originalmente devida à Lindblad [23].

Palavras-chave: Mecânica Quântica, Semigrupos Dinâmicos Quânticos, Semigrupos Markovianos Quânticos, operadores completamente positivos, operadores condicionalmente completamente positivos, processos estocásticos, gerador infinitesimal, Lindblad.

Abstract

In this work we briefly introduce the mathematical formalism of the theory of Quantum Mechanics and we analyze in great details the class of completely positive operators (and also their well-known Kraus representation). Following [10], we define what we call quantum dynamical semigroups (QDS) and quantum markov semigroups (QMS), in analogy with classical semigroups arising from stochastic processes theory where t is real and $t \geq 0$. Exploring the relation between a semigroup and his infinitesimal generator, we find necessary and sufficient conditions to an operator become an infinitesimal generator of one of those quantum semigroups where t is real and $t \geq 0$. An operator which satisfies this condition is called conditionally completely positive. We present (following [10]) a representation for those generators originally due to Lindblad [23].

Keywords: Quantum Mechanics, Quantum Dynamical Semigroups, Quantum Markov Semigroups, completely positive operators, conditionally completely positive operators, stochastic processes, infinitesimal generator, Lindblad.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Mecânica Quântica I: contextualização	2
1.2	Preliminares	3
1.3	Mecânica Quântica II: formalismo	6
2	Positividade de operadores	10
2.1	Produto tensorial	11
2.2	Operadores completamente positivos	17
3	Semigrupos dinâmicos	28
3.1	Estrutura inicial	28
3.2	Caracterizações	40
3.3	Considerações físicas sobre o operador \mathcal{L} de Lindblad	59
	Referências Bibliográficas	61

Capítulo 1

Introdução

Esta dissertação é estruturada em 3 capítulos. Neste primeiro, introduziremos muito brevemente a teoria da Mecânica Quântica e seu formalismo matemático, além de revisarmos as noções de Álgebra Linear necessárias para a compreensão do que vamos abordar neste texto. Após, discutiremos a estrutura requerida para entender as propriedades básicas dos operadores em questão; ao mesmo tempo em que apresentamos ferramentas úteis iremos também familiarizar o leitor com o objeto principal do nosso estudo. Finalmente, seguindo [10], no último capítulo dissertamos sobre alguns dos resultados principais da teoria dos semigrupos dinâmicos quânticos e discutimos também algumas analogias com o que já era conhecido da teoria clássica de semigrupos, onde t é real e $t \geq 0$.

Iremos considerar uma família a tempo contínuo, $t \geq 0$, de operadores completamente positivos e que definem um semigrupo. Este semigrupo por sua vez possui um gerador infinitesimal \mathcal{L} .

O tópico mais importante nesta dissertação é o seguinte: seguindo [10] descrevemos uma representação deste gerador infinitesimal \mathcal{L} originalmente devida à Lindblad [23] (ver Corolário 3.2.7).

Na última subseção 3.3 iremos brevemente discutir do ponto de vista da Física a relevância e o interesse no estudo de tal tipo de semigrupo.

O tópico desta dissertação faz parte do que se chama de Teoria da Informação Quântica. Uma boa referência sobre este assunto é o texto [27].

1.1 Mecânica Quântica I: contextualização

Vamos discutir aqui um pouco do contexto onde este trabalho se encaixa. A teoria de interesse por trás de toda a matemática aqui apresentada é a Mecânica Quântica.

A Mecânica Quântica é a teoria que descreve as leis físicas que regem as partículas de massa muito pequena. Tenha em mente que enquanto um mosquito tem massa em torno de 10^{-5} Kg e uma bactéria em torno de 10^{-15} Kg, um elétron, que é uma partícula para a qual as leis da mecânica quântica se aplicam, tem massa aproximada de 9.11×10^{-31} Kg. Ou seja, são leis aprimoradas para partículas minúsculas que poderiam a princípio não ter consequências muito interessantes. Mas com o amplo entendimento delas foi possível criar novas tecnologias, por exemplo o transistor, um componente essencial da atual eletrônica que possibilitou, após anos de revolução tecnológica, que tenhamos hoje aparelhos como computadores e celulares. Tamanho desenvolvimento demandou uma rigorosa teoria matemática acompanhando as leis físicas.

Uma ideia anterior à teoria quântica era esperar de uma teoria física que ela previsse o resultado de um experimento quando se sabiam todas as condições iniciais do sistema. Porém a mecânica quântica nos convenceu de que nem sempre isso é possível, sobrando para nós a possibilidade de inferir probabilidades de determinados eventos acontecerem. Muitos podem se perguntar se essa falta de exatidão não é fruto de uma limitação na teoria ou de falta de conhecimento sobre variáveis escondidas, mas na verdade todas evidências apontam se tratar de apenas mais uma característica da natureza.

Para colocar em bases sólidas o conhecimento experimental adquirido, formulamos postulados com os quais desenvolvemos a teoria que formaliza tais experimentos. O primeiro destes postulados, quando se fala em mecânica quântica, é a existência de uma correspondência entre o sistema quântico e um objeto matemático chamado espaço de Hilbert. Alguns tópicos da álgebra linear irão sendo invocados ao longo do texto. A seguir, uma revisão destes conceitos é apresentada. A discussão sobre o formalismo matemático da Mecânica Quântica é retomada na seção subsequente.

1.2 Preliminares

Em geral, na Mecânica Quântica fazemos uso de operadores lineares em espaços de Hilbert. Vamos apresentar a seguir de forma breve alguns dos conceitos e noções pertinentes ao assunto. Contudo, neste texto vamos nos restringir à álgebra linear em dimensão finita, o que facilita a discussão dos resultados mas não representa necessariamente uma perda de profundidade no entendimento dos mesmos.

Considere, por ora, \mathcal{H} como um espaço de Hilbert sobre o corpo dos complexos. Isso significa que \mathcal{H} é um espaço vetorial equipado com um produto interno, o qual define uma norma pela relação $\|u\| = \sqrt{\langle u, u \rangle}$. Além disso, pedimos que toda sequência de Cauchy relativa a essa norma seja convergente. Por esta última propriedade, conferimos a \mathcal{H} o título de completo.

Considere no conjunto \mathbb{C}^n seu produto interno natural

$$\langle u, v \rangle = \sum_{i=1}^n u_i \bar{v}_i.$$

Todo produto interno dá origem a uma norma pela relação $\|u\| = \sqrt{\langle u, u \rangle}$, o que em \mathbb{C}^n nos dá a norma

$$\|u\| = \left(\sum_{i=1}^n |u_i|^2 \right)^{1/2}.$$

Este produto interno faz de \mathbb{C}^n um espaço de Hilbert. Todo espaço de Hilbert \mathcal{H} de dimensão finita é isomorfo a algum \mathbb{C}^n . Nesse caso, os operadores lineares $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ podem ser identificados com \mathcal{M}_n , o conjunto das matrizes $n \times n$ cujas entradas são números complexos.

A norma de um operador linear $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é definida por

$$\|T\| := \sup\{\|Tu\| : u \in \mathcal{H}, \|u\| = 1\}.$$

Em dimensão finita sempre vale $\|T\| < \infty$ e ainda é garantida a existência de um elemento $u \in \mathcal{H}$, com $\|u\| = 1$ que atinge o supremo acima. Esta é a norma mais natural a se considerar no espaço \mathcal{M}_n . Ela faz de \mathcal{M}_n um

espaço de Hilbert. Para o nosso propósito será interessante considerar outro produto interno, portanto outra norma (que também fará \mathcal{M}_n um espaço de Hilbert). Faremos isso mais adiante.

Definição 1.2.1. *Dado um operador linear $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$, entre dois espaços de Hilbert de dimensão finita, definimos a **adjunta** de T como sendo o único operador linear $T^* : \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{H}$ que satisfaz*

$$\langle u, T^*v \rangle = \langle Tu, v \rangle, \quad \forall u \in \mathcal{H}, v \in \mathcal{K}.$$

Dado T operador linear entre dois espaços de Hilbert de dimensão finita sempre existe T^* .

Observação 1.2.2. *Dadas bases no espaço de partida e no espaço de chegada, T pode ser representado por uma matriz A . Decorre facilmente que a matriz que representa o operador T^* é a matriz transposta conjugada de A . Portanto, é imediata a identificação entre operadores de \mathbb{C}^n e matrizes em \mathcal{M}_n .*

Definição 1.2.3. *Um operador T é dito **autoadjunto** no caso em que $\mathcal{H} = \mathcal{K}$ e $T = T^*$.*

Um operador $T : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ autoadjunto é diagonalizável e todos os seus autovalores são números reais (ver [22] ou [17]).

Definição 1.2.4. *Um operador linear $T : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ é dito **operador positivo** se é autoadjunto e $\langle u, Tu \rangle \geq 0$ para todo $u \in \mathbb{C}^n$. Neste caso, denotamos $T \geq 0$.*

Definição 1.2.5. *Um operador linear $\mathcal{T} : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ é dito uma **aplicação positiva** quando preserva as matrizes positivas de \mathcal{M}_n , isto é, $\mathcal{T}(A) \geq 0$, para toda matriz $A \geq 0$. Também escrevemos $\mathcal{T} \geq 0$.*

Escrevemos $A \geq B$ para representar $A - B \geq 0$. Um operador $T : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ positivo admite uma base de autovetores na qual sua matriz é diagonal e todos os seus autovalores são não negativos. A rigor, na literatura usa-se mais para esta condição a denominação *positivo semidefinido*, deixando o

termo positivo para quando a desigualdade acima é estrita, mas neste texto vamos omitir o semidefinido e este só aparecerá quando, e se for, necessária a distinção.

Note que se $\mathcal{T} : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ é uma aplicação positiva, e $A \leq 0$ (o que significa nada mais que $-A \geq 0$), então $\mathcal{T}(A) \leq 0$, pois $-\mathcal{T}(A) = \mathcal{T}(-A) \geq 0$.

Um primeiro teorema ajuda a caracterizar de forma mais prática e elegante tais operadores.

Teorema 1.2.6. *Seja $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, para $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$. Então as seguintes condições são equivalentes:*

1. T é positivo.
2. $T = T^*$ e os autovalores de T são números reais não-negativos.
3. T é da forma U^*U para algum operador $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$.

Corolário 1.2.7. *Se $A \geq 0$, então $X^*AX \geq 0$. Mais geralmente, se $A \geq B$, então $X^*AX \geq X^*BX$, para todos $A, B, X \in \mathcal{H}$.*

Outra classe de operadores que vai nos interessar é a seguinte.

Definição 1.2.8. *Seja $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$. Um operador $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é dito **unitário** se $U^*U = UU^* = I$, onde I denota a identidade em \mathbb{C}^n .*

Se A é matriz autoadjunta então $U = e^{iA}$ é uma matriz unitária, pois neste caso $(e^{iA})^* = e^{-iA}$. Vale ressaltar aqui que a norma de operadores neste espaço satisfaz a propriedade chamada propriedade de C^* -norma, a saber

$$\|T^*T\| = \|T\|^2.$$

Resultados semelhantes a alguns descritos acima são verdadeiros para $\mathcal{T} : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ em vez de $T : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$.

Por fim, vamos considerar em \mathcal{M}_n o produto interno definido por

$$\langle A, B \rangle = \text{tr}(A^*B), \tag{1.1}$$

onde tr é a aplicação traço, que sob as matrizes, tem o efeito de somar os elementos da diagonal. Com esse produto interno, \mathcal{M}_n é espaço de Hilbert. Dado um funcional linear $G : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathbb{C}$ se pode mostrar que existe uma matriz A tal que para todo B vale

$$G(B) = \langle A, B \rangle .$$

Nossa revisão baseou-se no capítulo inicial de [5].

1.3 Mecânica Quântica II: formalismo

Vamos agora descrever a matemática que permite modelar as propriedades principais que se obtém a partir de diversos experimentos observados na física quântica. As medições da mecânica quântica são chamadas de **observáveis** e representadas matematicamente por operadores autoadjuntos agindo em um espaço de Hilbert complexo. Portanto, para nós, um observável será sempre uma matriz autoadjunta. Os valores que podem ser obtidos em medições num sistema de natureza quântica são descritos pelos possíveis autovalores de um observável (operador autoadjunto).

As funções no mundo clássico correspondem aos operadores autoadjuntos na Mecânica Quântica. Já as probabilidades correspondem aos operadores densidade. Como se sabe uma probabilidade pode ser caracterizada como um operador linear agindo em funções (Teorema de Riesz). As probabilidades no mundo clássico correspondem aos operadores densidade na Mecânica Quântica.

Definição 1.3.1. *Seja $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$. Um operador $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é dito **operador densidade** se é autoadjunto, positivo e tem traço igual a 1.*

Vamos denotar um operador densidade genérico agindo em \mathbb{C}^n por ρ . Como exemplo, note que

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

é um operador densidade. Tal ρ codifica o experimento que foi preparado com a sobreposição de dois estados que chamamos de *estados puros*, que são

as densidades que representam projeções ortogonais a elementos do espaço. O primeiro é a projeção ortogonal P_1 sobre o subespaço gerado pelo elemento $(1, 0, 0)$ do espaço de Hilbert \mathbb{C}^3 . O segundo é a projeção P_2 associada ao elemento $(0, 1, 0)$. Respectivamente, eles tem probabilidades associadas de $\frac{1}{3}$ e $\frac{2}{3}$. Matematicamente,

$$\rho = \frac{1}{3}P_1 + \frac{2}{3}P_2 = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Naturalmente, não é necessário que sejam projeções sobre os vetores canônicos e_1, e_2, e_3 . Para ilustrar, a seguinte densidade é um segundo exemplo. Esta se decompõe em projeções $\frac{1}{4}P_u + \frac{1}{4}P_v + \frac{1}{2}P_w$, onde $u = \left(0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$, $v = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$ e $w = \left(\frac{3}{5}, 0, \frac{4}{5}\right)$. Então,

$$\frac{1}{4}P_u + \frac{1}{4}P_v + \frac{1}{2}P_w = \frac{1}{200} \begin{pmatrix} 61 & 25 & 48 \\ 25 & 50 & 25 \\ 48 & 25 & 89 \end{pmatrix}.$$

O **valor esperado** de um observável quando o sistema quântico é descrito pela densidade ρ é então interpretado pelo valor

$$\langle A \rangle_\rho = \langle A, \rho \rangle = \text{tr}(\rho A).$$

Dado um operador densidade A podemos associar a ele um funcional linear $\omega : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathbb{C}$, onde

$$\omega(B) = \langle A, B \rangle = \text{tr}(BA).$$

Note que $w(I) = 1$. Se $B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é autoadjunta (observável) então $\omega(B)$ é um número real. Se $B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é um operador positivo (observável) então $\omega(B)$ é um número não negativo.

Um funcional linear w da forma acima é algumas vezes chamado de estado C^* -dinâmico (ver por exemplo [7] ou [25]).

Em certos problemas da Mecânica Quântica aparece de maneira natural um observável específico H , o qual chamamos de Hamiltoniano. Em alguns

casos este operador autoadjunto H descreve a evolução temporal do sistema quântico de maneira que a evolução dinâmica à tempo contínuo $t \geq 0$ fica completamente determinada. Neste caso, chamamos a dinâmica de fechada ou reversível. Dentro desse contexto, a maneira como os objetos evoluem é uma questão de representação.

Na representação de Heisenberg, grande físico do século XX, a dinâmica quântica é descrita por observáveis $A(t)$, $t \geq 0$, que evoluem ao longo do tempo $t \geq 0$. Mais precisamente, o fazem de acordo com a equação:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)], \quad (1.2)$$

onde \hbar é uma constante física (constante de Planck), H é o Hamiltoniano (operador autoadjunto) associado ao sistema físico em consideração e os colchetes definem o *comutador* de dois operadores, que nada mais é do que a expressão

$$[A, B] = AB - BA. \quad (1.3)$$

Fixada uma matriz inicial $A_0 = A(0)$ a evolução $A(t)$ fica bem definida pela equação acima. Vamos descrever explicitamente tal evolução $A(t)$, $t \geq 0$. Seja $U(t) = e^{-itH/\hbar}$, então dada a condição inicial $A(0) = A_0$ temos que a solução da equação (1.2) é dada por

$$A(t) = U(t)^{-1}A_0 U(t) = e^{itH/\hbar}A_0e^{-itH/\hbar}.$$

De fato, temos que

$$\begin{aligned} \frac{dA(t)}{dt} &= \frac{iH}{\hbar}e^{itH/\hbar}A_0e^{-itH/\hbar} + e^{itH/\hbar}A_0e^{-itH/\hbar} \left(\frac{-iH}{\hbar} \right) \\ &= \frac{i}{\hbar}(HA(t) - A(t)H). \end{aligned}$$

Por esse motivo, o operador $\Phi_t : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ dado por $\Phi_t(A) = U(t)^{-1}AU(t)$ é chamado operador de evolução. Note que se A_0 é autoadjunta então $A(t)$ também o é.

Já na visão de Schrödinger, outro grande nome da física do século XX, a dinâmica quântica pode ser descrita como a evolução temporal de operadores

densidades $\rho(t)$, $t \geq 0$. A dependência temporal do operador densidade $\rho(t)$ é descrita pela equação de Schödinger:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)]. \quad (1.4)$$

onde $[\cdot, \cdot]$ foi definido em (1.3). A solução $\rho(t)$, $t \geq 0$, é dada pela inversa do operador de evolução:

$$\rho_0 \mapsto \rho(t) = \Phi_{-t}(\rho) = U(t)\rho_0U(t)^{-1}.$$

A condição inicial é descrita por um operador densidade $\rho_0 = \rho(0)$. Note que se ρ_0 é operador densidade então $\rho(t)$ também o é.

Observação 1.3.2. *As representações de Heisenberg e Schrödinger estão relacionadas pelo dual do operador de evolução. Isto é, se considerarmos os pares $(A(t), \rho_0)$ e $(A_0, \rho(t))$ que correspondem as dinâmicas, temos*

$$\langle A(t), \rho_0 \rangle = \langle A_0, \rho(t) \rangle.$$

Para verificarmos a expressão acima, primeiramente note que $U(t)^{-1} = U(t)^*$ e portanto $(U(t)^{-1}A_0U(t))^* = U(t)^{-1}A_0U(t)$. Temos

$$\begin{aligned} \langle A(t), \rho_0 \rangle &= \text{tr}[A(t)^*\rho_0] = \text{tr}[(U(t)^{-1}A_0U(t))^*\rho_0] = \text{tr}[U(t)^{-1}A_0U(t)\rho_0] \\ &= \text{tr}[A_0U(t)\rho_0U(t)^{-1}] = \langle A_0, U(t)\rho_0U(t)^{-1} \rangle = \langle A_0, \rho(t) \rangle. \end{aligned}$$

onde acima usamos uma propriedade elementar do traço, $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$.

Esta observação nos diz que tomando o dual do operador de evolução sobre os observáveis, obtemos um operador de evolução sobre os operadores densidade segundo a outra representação. Isto será analisado mais detalhadamente nos próximos capítulos. As formulações acima foram adaptadas das seções 1.1 em [33] e 5.2 em [10]. Um comentário pertinente é que nem todas as dinâmicas admitem tal Hamiltoniano. Essas chamamos de dinâmicas abertas ou irreversíveis. Na verdade, os exemplos das construções feitas a partir do capítulo 3 em sua maioria são dinâmicas abertas.

Capítulo 2

Positividade de operadores

Vamos agora descrever algumas consequências que a Mecânica Quântica impõe sobre a estrutura matemática que a representa. Note que no exemplo dos sistemas fechados, temos um operador de evolução que age nos observáveis e mais do que isso, é uma aplicação positiva. De acordo com a definição 1.2.4,

$$\begin{aligned}\langle v, \Phi_t(A)v \rangle &= \langle v, e^{\frac{itH}{\hbar}} A e^{-\frac{itH}{\hbar}} v \rangle = \\ &= \langle (e^{\frac{itH}{\hbar}})^* v, A e^{-\frac{itH}{\hbar}} v \rangle = \langle e^{-\frac{itH}{\hbar}} v, A(e^{-\frac{itH}{\hbar}} v) \rangle \geq 0,\end{aligned}$$

isto é, $\Phi_t(A) \geq 0$. Esta característica é também requerida em sistemas mais gerais.

Estamos interessados agora em analisar a evolução de dois sistemas quânticos ao mesmo tempo. Digamos que os sistemas são representados pelos espaços de Hilbert \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 e que suas evoluções são descritas por operadores $\Phi_{1,t}$ e $\Phi_{2,t}$, respectivamente. Qual estrutura matemática deveria representá-los simultaneamente? Na configuração clássica, consideramos o produto cartesiano dos espaços e a teoria se estende naturalmente.

Na Mecânica Quântica é necessário considerar o sistema composto e para descrever a Física do problema será necessário considerar o conceito de produto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Suponha, por simplicidade que a dinâmica em \mathcal{H}_2 está parada: $\Phi_{2,t}(B) = B$. Como estender $\Phi_{1,t}$ para este novo espaço? A dinâmica deveria tomar elementos $A \otimes B \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ e levar em $\Phi_{1,t}(A) \otimes B$. Isto é, o operador no novo espaço deveria agir como

$$\Phi_t(A \otimes B) = \Phi_{1,t}(A) \otimes B, \quad \forall A \in \mathcal{H}_1, B \in \mathcal{H}_2.$$

No caso em que $\Phi_{1,t}(A) = e^{\frac{itH}{\hbar}} A e^{-\frac{itH}{\hbar}}$ vamos ver que é claro que este operador está preservando os observáveis. Contudo, para evoluções mais gerais, não é imediato que Φ_t assim definido é de fato um operador positivo.

Antes de definirmos esse tipo de operador, vamos detalhar a estrutura matemática de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ (e que atende aos nossos propósitos). Observamos que a próxima seção é particularmente carregada de notação, o que pode desanimar o leitor e fazê-lo perder de vista o objetivo principal que temos em mente. Para uma primeira leitura, recomendamos que o leitor pule esta seção e vá direto para a definição 2.2.1 (continuando o fluxo de raciocínio até aqui seguido).

2.1 Produto tensorial

O que segue é fortemente inspirado nos textos [17] e [25].

No produto cartesiano $V \times W$ considere os pares (u, v) onde $u \in V$ e $w \in W$. Seja $C(V, W)$ o subespaço gerado por todos os elementos da forma

$$\begin{aligned} (v_1 + v_2, w) - (v_1, w) - (v_2, w) \\ (v, w_1 + w_2) - (v, w_1) - (v, w_2) \\ (rv, w) - r(v, w) \\ (v, rw) - r(v, w) \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde $v_i \in V$, $w_i \in W$ e $r \in \mathbb{C}$. Agora definimos a relação de equivalência $z \sim y$ se $z - y \in C(V, W)$. Como é usual, a partir desta relação \sim se pode criar classes de equivalência. Dados $v \in V$ e $w \in W$ a classe de (v, w) é denotada por $v \otimes w$.

O conjunto das classes é denotado $V \otimes W$ e as operações nas classes estão bem definidas. Um elemento $v \otimes w$ (uma classe de equivalência), $v \in V, w \in W$, no conjunto assim obtido $V \otimes W$, vai descrever o objeto matemático que buscamos. O motivo da construção acima é que o produto tensorial é linear em cada entrada, ou seja, para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $u, v \in V$ e $w \in W$,

$$(\alpha u + \beta v) \otimes w = (\alpha u) \otimes w + (\beta v) \otimes w.$$

Ainda, $\alpha(u \otimes w) = (\alpha u) \otimes w = u \otimes (\alpha w)$. Se 0 denota o elemento neutro em V ou W , então $0 \otimes 0$ é o neutro para a soma neste novo espaço.

O que segue pode ser feito tanto para \mathcal{M}_n quanto para \mathbb{C}^n . Seja $\{v_i, i = 1, 2, \dots, n\}$, base ortogonal de \mathbb{C}^n e $\{w_j, j = 1, 2, \dots, m\}$, base ortogonal de \mathbb{C}^m . Um elemento genérico em $\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m$ é da forma

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{ij}(v_i \otimes w_j), \quad a_{ij} \in \mathbb{C}.$$

Eis a diferença. No contexto clássico, a dimensão do produto cartesiano nada mais é que a soma das dimensões individuais. Enquanto que a dimensão de $\mathbb{C}^3 \times \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^5$ é 5, a dimensão de $\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^2$ é o produto $3 \cdot 2 = 6$. O produto tensorial permite descrever em termos matemáticos a interferência de medição no sistema composto.

Existe uma estrutura natural de produto interno em $\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m$: dados $(a_1 \otimes a_2)$ e $(b_1 \otimes b_2)$ em $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$ definimos

$$\langle (a_1 \otimes a_2), (b_1 \otimes b_2) \rangle = \langle a_1, b_1 \rangle \cdot \langle a_2, b_2 \rangle.$$

A operação acima deve ser estendida linearmente em $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$. Desta forma podemos definir uma norma $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$, para $x \in \mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$, o que torna $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$ um espaço de Hilbert. Note que se u_1, u_2 é base ortonormal de \mathbb{C}^2 e v_1, v_2 também é base ortonormal de \mathbb{C}^2 então

$$u_1 \otimes v_1, u_1 \otimes v_2, u_2 \otimes v_1, u_2 \otimes v_2$$

é base ortonormal em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ segundo o produto interno acima definido.

Considere os operadores lineares $A_1 : \mathbb{C}^m \rightarrow \mathbb{C}^m$ e $A_2 : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$, Então, por definição, o operador linear $A_1 \otimes A_2$ age em $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$ da seguinte forma: dado $a_1 \otimes a_2$ temos

$$(A_1 \otimes A_2)(a_1 \otimes a_2) = A_1(a_1) \otimes A_2(a_2).$$

A ação deve ser estendida linearmente em $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$. Usando o produto interno descrito acima podemos definir o conceito de dual. É fácil ver que o dual de $(A_1 \otimes A_2)$ é $(A_1^* \otimes A_2^*)$:

$$\langle (A_1 \otimes A_2)(a_1 \otimes a_2), (b_1 \otimes b_2) \rangle = \langle A_1(a_1) \otimes A_2(a_2), (b_1 \otimes b_2) \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \langle A_1(a_1), b_1 \rangle \cdot \langle A_2(a_2), b_2 \rangle = \langle a_1, A_1^*(b_1) \rangle \cdot \langle a_2, A_2^*(b_2) \rangle \\
&= \langle a_1 \otimes a_2, A_1^*(b_1) \otimes A_2^*(b_2) \rangle = \langle a_1 \otimes b_1, (A_1^* \otimes A_2^*)(b_1 \otimes b_2) \rangle.
\end{aligned}$$

Se A_1 e A_2 forem autoadjuntos, então $A_1 \otimes A_2$ é autoadjunto. Ainda, se A_1 e A_2 forem positivos, então $A_1 \otimes A_2$ é positivo:

$$\langle a_1 \otimes a_2, (A_1 \otimes A_2)(a_1 \otimes a_2) \rangle = \langle a_1, A_1(a_1) \rangle \cdot \langle a_2, A_2(a_2) \rangle \geq 0$$

Por definição a composta do operador $A_1 \otimes A_2$ com $B_1 \otimes B_2$ age em $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$ da seguinte forma: dado $a_1 \otimes a_2$ então

$$(A_1 \otimes A_2) \circ (B_1 \otimes B_2) (a_1 \otimes a_2) = (A_1 \circ B_1)(a_1) \otimes (A_2 \circ B_2)(a_2).$$

O elemento neutro para a operação de composição é $I \otimes I$. Se A_1 e A_2 são inversíveis então $(A_1^{-1} \otimes A_2^{-1})$ é o inverso de $(A_1 \otimes A_2)$. Com isso, se U_1 e U_2 são unitários então $(U_1 \otimes U_2)$ é unitário.

Dadas duas matrizes A ($m \times m$) e B ($n \times n$) que descrevem operadores lineares temos que $A \otimes B$ também descreve uma matriz, esta agindo em $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$ que é isomorfo a $\mathbb{C}^{m \cdot n}$. É útil algumas vezes usar a representação matricial de $A \otimes B$ em $\mathbb{C}^{m \cdot n}$. A que segue é chamada **produto de Kronecker**. Sejam A uma matriz $m \times n$ e B uma matriz $p \times q$. Então temos a seguinte representação matricial:

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix},$$

ou seja, o termo $a_{ij}B$ é o elemento a_{ij} da matriz A multiplicado pela matriz B . Por exemplo, se

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

e

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 1 \end{pmatrix},$$

então

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} 1 \cdot B & 2 \cdot B \\ 0 \cdot B & 1 \cdot B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 3 & 1 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Um desafio é demonstrar que a representação é realmente algo útil para manipular os termos, no sentido de que analisar a positividade de $A \otimes B$ para duas matrizes $A \in \mathcal{M}_n, B \in \mathcal{M}_d$ é equivalente ao olharmos para a representação matricial do tensor, e analisarmos a positividade da matriz agora em \mathcal{M}_{dn} .

Teorema 2.1.1. *O tensor $A \otimes B$ com $A \in \mathcal{M}_d, B \in \mathcal{M}_n$ representa uma aplicação positiva em $\mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^n$ se e somente se, a sua representação matricial via produto de Kronecker é uma matriz positiva de \mathcal{M}_{dn} .*

A demonstração deste fato é bastante carregada de notação, sendo assim apenas conferir que o teorema vale para matrizes 2x2 talvez convença o leitor de que o resultado é verdade - sem passar pela demonstração do caso geral. (Faça as contas!)

Demonstração. Para tanto, vamos mostrar que $(A \otimes B)(e_i \otimes e_j) = Ae_i \otimes Be_j$ é o vetor imagem da matriz de Kronecker de $A \otimes B$ aplicado no vetor gerador pelo tensor $e_i \otimes e_j$. Primeiramente, note que o vetor Ae_i nada mais é do que a i -ésima coluna de A, enquanto Be_j é a j -ésima coluna de B. Segue que

$$(Ae_i) \otimes (Be_j) = \begin{pmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \\ \vdots \\ a_{di} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{1j} \\ b_{2j} \\ \vdots \\ b_{nj} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1i}b_{1j} \\ \vdots \\ a_{1i}b_{nj} \\ a_{2i}b_{1j} \\ \vdots \\ a_{di}b_{nj} \end{pmatrix}$$

Agora, note que $e_i \otimes e_j$ na forma de vetor de \mathbb{C}^{dn} também é um vetor do tipo e_k , bastando descobrir qual é esse elemento k . Bom, basta notar que cada um dos zeros de e_i até o $(i-1)$ -ésimo é transformado em n zeros por e_j .

Até que chega o 1 da i -ésima entrada de e_i que faz aparecer uma cópia de e_j na sequência, nos trazendo mais $j-1$ zeros até que enfim aparece o elemento 1 do vetor, na entrada $(i-1)n+j$. Ou seja, $e_i \otimes e_j = e_{(i-1)n+j} \in \mathbb{C}^{dn}$. Isso quer dizer que a imagem de $e_i \otimes e_j$ por $A \otimes B$ é precisamente a coluna $(i-1)n+j$ da representação matricial desse tensor de matrizes. Note que

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1d}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2d}B \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{d1}B & a_{d2}B & \cdots & a_{dd}B \end{pmatrix}$$

e cada bloco $a_{ij}B$ tem o tamanho de B : $n \times n$. Ou seja, a coluna $(i-1)n+j$ é o empilhamento da j -ésima coluna de cada um dos blocos $a_{1i}B, a_{2i}B, \dots, a_{di}B$. Isso nos dá

$$(A \otimes B)(e_{(i-1)n+j}) = \begin{pmatrix} a_{1i}b_{1j} \\ a_{1i}b_{2j} \\ \vdots \\ a_{1i}b_{nj} \\ a_{2i}b_{1j} \\ \vdots \\ a_{di}b_{nj} \end{pmatrix}$$

Como este vetor é o mesmo encontrado pela manipulação de $(Ae_i) \otimes (Be_j)$, está provado o teorema. □

Considere agora as matrizes E_{ij} em \mathcal{M}_d , cuja única entrada não-nula é a da linha i e coluna j , esta entrada sendo igual a 1. Então seguem as seguintes propriedades:

Proposição 2.1.2. *Se $\{e_i\}$ são os vetores da base canônica de \mathbb{C}^d , então:*

1. $E_{ij}(e_k) = \delta_{jk}e_i$;
2. $E_{ij}E_{kl} = \delta_{jk}E_{il}$;
3. $E_{ij}^* = E_{ji}$;
4. O conjunto de matrizes $\{E_{ij}\}$ com $1 \leq i, j \leq d$ geram o espaço \mathcal{M}_d ;

5. Para cada elemento $X \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$, existem matrizes $X_{kl} \in \mathcal{M}_d, 1 \leq k, l \leq n$ tais que X pode ser escrito como a soma

$$\sum_{k,l=1}^n X_{kl} \otimes E_{kl}.$$

Demonstração. Note que para um vetor $v = (v_1, \dots, v_d)$ temos

$$(E_{ij}v)_k = \sum_{l=1}^d (E_{ij})_{kl} v_l.$$

Mas no nosso caso específico, temos que o único elemento $(E_{ij})_{kl}$ não nulo é $(E_{ij})_{ij} = 1$. Ou seja,

$$(E_{ij}v)_k = \sum_{l=1}^d \delta_{ik} \delta_{jl} v_l.$$

O que nos dá $(E_{ij}v)_k = 0$ se $k \neq i$, e $(E_{ij}v)_i = \sum_{l=1}^d \delta_{jl} v_l = v_j$. Concluimos então que $E_{ij}v = (v_j) \cdot e_i$. Em particular, para $v = e_m$, temos $E_{ij}e_m = \delta_{jm}e_i$.

Agora, veja que no produto de matrizes $(AB)_{mn}$, temos

$$(AB)_{mn} = \sum_{p=1}^d a_{mp} b_{pn}.$$

Olhando para $E_{ij}E_{kl}$, os termos não nulos dessa soma se resumem ao termo $a_{ij}b_{kl}$ que só aparece se tivermos $p = j = k$, e neste caso o termo $(E_{ij}E_{kl})_{il} = 1$, donde $E_{ij}E_{kl} = \delta_{jk}E_{il}$.

Pela definição de E_{ij} , é imediato que o único termo não-nulo em E_{ij}^T passa da linha i e coluna j para a linha j e coluna i : $E_{ij}^T = E_{ji}$. Como é uma matriz de entradas reais, $E_{ij}^* = E_{ji}$.

Dada uma matriz $A \in \mathcal{M}_d$, escrevendo seu termo geral por a_{ij} , é imediata a verificação de que

$$A = \sum_{i,j=1}^d a_{ij} E_{ij}.$$

Então o espaço é gerado pelas matrizes $\{E_{ij}\}$. Agora, note que

$$\langle E_{ij}, E_{kl} \rangle = \text{tr}(E_{ij}^* E_{kl}) = \text{tr}(E_{ji} E_{kl}) = \delta_{ik} \text{tr}(E_{jl}) = \delta_{ik} \delta_{jl}$$

Onde $\text{tr}(E_{jl}) = \delta_{jl}$ usa que a diagonal contém a entrada não nula somente quando $j = l$. Com isso, concluímos que se $E_{ij} \neq E_{kl}$, temos $\langle E_{ij}, E_{kl} \rangle = 0$, mostrando que os elementos são ortogonais, portanto linearmente independentes. Como o número de matrizes, a saber d^2 , coincide com a dimensão do espaço, esse conjunto é base do espaço!

Por fim, sendo $\{E_{ij}; 1 \leq i, j, \leq d\}$ base do espaço de matrizes \mathcal{M}_d , segue que os produtos tensoriais $\{E_{ij} \otimes E_{kl}, \text{ com } 1 \leq i, j \leq d \text{ e } 1 \leq k, l \leq n\}$ formam uma base do espaço produto tensorial $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$. Então dado $X \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$, existem constantes $c_{ij}^{kl} \in \mathbb{C}$ tais que

$$X = \sum_{i,j=1}^d \sum_{k,l=1}^n c_{ij}^{kl} E_{ij} \otimes E_{kl} = \sum_{k,l=1}^n \left(\sum_{i,j=1}^d c_{ij}^{kl} E_{ij} \right) \otimes E_{kl}.$$

Definindo

$$X_{kl} := \sum_{ij} c_{ij}^{kl} E_{ij},$$

obtemos

$$X = \sum_{k,l=1}^n X_{kl} \otimes E_{kl}.$$

□

2.2 Operadores completamente positivos

Definição 2.2.1. *Um operador $\Phi : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ é dito **completamente positivo** se para todo $n \geq 1$, o operador $\Phi_n := \Phi \otimes \mathcal{I}_n : \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$, que age em $A \otimes B \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$ como*

$$\Phi_n(A \otimes B) = \Phi(A) \otimes B,$$

é positivo.

Observação 2.2.2. A definição acima equivale a dizer que a aplicação Φ agindo como abaixo é uma aplicação positiva.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \Phi(A_{11}) & \Phi(A_{12}) & \dots & \Phi(A_{1n}) \\ \Phi(A_{21}) & \Phi(A_{22}) & \dots & \Phi(A_{2n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi(A_{n1}) & \Phi(A_{n2}) & \dots & \Phi(A_{nn}) \end{pmatrix}$$

A matriz no lado esquerdo representa $\sum_{i,j=1}^n A_{ij} \otimes E_{ij}$, enquanto que a da direita representa $\Phi_n \left(\sum_{i,j=1}^n A_{ij} \otimes E_{ij} \right) = \sum_{i,j=1}^n \Phi(A_{ij}) \otimes E_{ij}$.

Para ilustrar essa propriedade, vamos considerar o seguinte exemplo, que na verdade é um contraexemplo. Seja $\mathcal{T} : \mathcal{M}_2 \rightarrow \mathcal{M}_2$ o operador que toma a transposta da matriz. Isto é, $\mathcal{T}(A) = A^T$, ou ainda

$$\mathcal{T} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}.$$

Este operador é positivo, pois os autovalores de uma matriz são os mesmos autovalores de sua transposta. Portanto, se $A \geq 0$, temos que seus autovalores são não-negativos e o mesmo vale para A^T . Então \mathcal{T} é operador positivo. Mas será que é completamente positivo?

De fato não é. Considere o produto tensorial $\mathcal{M}_2 \otimes \mathcal{M}_2$ e o operador $\mathcal{T}_2 = \mathcal{T} \otimes \mathcal{I}_2$ agindo em $\mathcal{M}_2 \otimes \mathcal{M}_2$. Primeiramente, a matriz em \mathcal{M}_4 a seguir representa o elemento $\sum_{i,j=1}^2 E_{ij} \otimes E_{ij}$. Veremos na demonstração de 2.2.3 que este elemento, abaixo representado, é positivo como tensor.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

De fato, como matriz de \mathcal{M}_4 , ela tem os seguintes autovalores: 0,0,0,2 (confira!). Isso atesta que a matriz é positiva (no sentido de semidefinida). Contudo, a ação de \mathcal{T}_2 sobre ela tem imagem igual a $\sum_{i,j=1}^2 E_{ji} \otimes E_{ij}$, a qual tem representação matricial igual a

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Conferindo seus autovalores, chegamos a $-1, 1, 1, 1$. Portanto, não é uma matriz positiva e \mathcal{T}_2 falha em ser um operador positivo. O que significa que a operação de transposta é positiva mas não completamente positiva.

Checar a condição acima foi deveras trabalhoso. Felizmente, Kraus [20], um dos primeiros que reconheceu a importância física dessa classe de operadores chegou a um celebrado teorema que os caracteriza.

Teorema 2.2.3 (Representação de Kraus). $\Phi : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ é uma aplicação completamente positiva se e somente se existirem matrizes $\{V_k\}_{k=1}^l \subset \mathcal{M}_d$ tais que

$$\Phi(A) = \sum_{k=1}^l V_k^* A V_k, \text{ para toda matriz } A \in \mathcal{M}_d.$$

Demonstração. A volta é a direção mais fácil. Seja $A \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$ um elemento positivo do produto tensorial. Vamos mostrar que $\Phi_n(A)$ também é um elemento positivo em $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$. Isto significa verificar $\langle v, \Phi_n(A)v \rangle \geq 0$, para todo $v \in \mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^n$.

Para isso, escrevemos $A = \sum_{i,j=1}^n A_{ij} \otimes E_{ij}$ e obtemos

$$\Phi_n(A) = \sum_{i,j=1}^n \Phi(A_{ij}) \otimes E_{ij}.$$

Agora, tomando um vetor genérico em $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$,

$$v = \sum_{k=1}^d \sum_{l=1}^n \alpha_{kl} (e_k \otimes e_l) = \sum_{l=1}^n \left(\sum_{k=1}^d \alpha_{kl} e_k \right) \otimes e_l = \sum_{l=1}^n f_l \otimes e_l,$$

onde $f_l := \sum_{k=1}^d \alpha_{kl} e_k$. Assim,

$$\begin{aligned}
\Phi_n(A)v &= \left(\sum_{i,j=1}^n \Phi(A_{ij}) \otimes E_{ij} \right) \left(\sum_{l=1}^n f_l \otimes e_l \right) \\
&= \sum_{i,j,l=1}^n \Phi(A_{ij}) f_l \otimes E_{ij} e_l = \sum_{i,j=1}^n \Phi(A_{ij}) f_j \otimes e_i.
\end{aligned}$$

Por fim,

$$\begin{aligned}
\langle v, \Phi_n(A)v \rangle &= \left\langle \sum_{k=1}^n f_k \otimes e_k, \sum_{i,j=1}^n \Phi(A_{ij}) f_j \otimes e_i \right\rangle \\
&= \sum_{i,j,k=1}^n \langle f_k, \Phi(A_{ij}) f_j \rangle \langle e_k, e_i \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle f_i, \Phi(A_{ij}) f_j \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \left\langle f_i, \sum_{m=1}^{d^2} V_m^* A_{ij} V_m f_j \right\rangle = \sum_{i,j=1}^n \sum_{m=1}^{d^2} \langle f_i, V_m^* A_{ij} V_m f_j \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \sum_{m=1}^{d^2} \langle V_m f_i, A_{ij} V_m f_j \rangle = \sum_{i,j=1}^n \sum_{m=1}^{d^2} \langle g_i^m, A_{ij} g_j^m \rangle,
\end{aligned}$$

onde $g_i^m = V_m f_i$, para $m = 1, \dots, d^2$. Segue

$$\begin{aligned}
\langle v, \Phi_n(A)v \rangle &= \sum_{m=1}^{d^2} \sum_{i,j=1}^n \langle g_i^m, A_{ij} g_j^m \rangle \\
&= \sum_{m=1}^{d^2} \sum_{i,j,k=1}^n \langle g_k^m, A_{ij} g_j^m \rangle \langle e_k, e_i \rangle \\
&= \sum_{m=1}^{d^2} \sum_{i,j,k,l=1}^n \langle g_k^m, A_{ij} g_l^m \rangle \langle e_k, E_{ij} e_l \rangle \\
&= \sum_{m=1}^{d^2} \sum_{i,j,k,l=1}^n \langle g_k^m \otimes e_k, A_{ij} g_l^m \otimes E_{ij} e_l \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{m=1}^{d^2} \sum_{k,l=1}^n \left\langle g_k^m \otimes e_k, \sum_{i,j=1}^n (A_{ij} \otimes E_{ij})(g_l^m \otimes e_l) \right\rangle \\
&= \sum_{m=1}^{d^2} \left\langle \left(\sum_{k=1}^n g_k^m \otimes e_k \right), \sum_{i,j=1}^n (A_{ij} \otimes E_{ij}) \left(\sum_{l=1}^n g_l^m \otimes e_l \right) \right\rangle \\
&= \sum_{m=1}^{d^2} \left\langle w_m, \sum_{i,j=1}^n (A_{ij} \otimes E_{ij}) w_m \right\rangle \\
&= \sum_{m=1}^{d^2} \langle w_m, A w_m \rangle \geq 0, \text{ pois } A \text{ é positivo.}
\end{aligned}$$

Isto é, $\langle v, \Phi_n(A)v \rangle \geq 0$. Portanto Φ_n é positiva e Φ é completamente positiva.

Por outro lado, temos que $\Phi_n = \Phi \otimes \mathcal{I}_n : \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$ é uma aplicação positiva, para todo n . Em particular, para $n = d$ vamos considerar as E_{ij} definidas anteriormente. Temos

$$\begin{aligned}
&\left(\sum_{i,j=1}^d E_{ij} \otimes E_{ij} \right)^2 = \sum_{i,j,k,l=1}^d (E_{ij} E_{kl}) \otimes (E_{ij} E_{kl}) \\
&= \sum_{i,j,l=1}^d (E_{ij} E_{jl}) \otimes (E_{ij} E_{jl}) = \sum_{j=1}^d \sum_{i,l=1}^d E_{il} \otimes E_{il} \\
&\Rightarrow \sum_{i,j=1}^d E_{ij} \otimes E_{i,j} = \frac{1}{d} \left(\sum_{i,j=1}^d E_{ij} \otimes E_{ij} \right)^2 \geq 0.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\Phi_d \left(\sum_{i,j=1}^d E_{ij} \otimes E_{ij} \right) = \sum_{i,j=1}^d \Phi(E_{ij}) \otimes E_{ij} \geq 0.$$

Logo, existe um elemento $X \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_d$ tal que $\sum_{i,j=1}^d \Phi(E_{ij}) \otimes E_{ij} = X^* X$. Como X pode ser escrito como $X = \sum_{i,j=1}^d X_{ij} \otimes E_{ij}$, obtemos (e partir

daqui só indicaremos os índices, fica subentendido que eles são somados de 1 até d)

$$\begin{aligned}
X^*X &= \left(\sum_{i,j} X_{ij} \otimes E_{ij} \right)^* \left(\sum_{k,l} X_{kl} \otimes E_{kl} \right) \\
&= \sum_{i,j,k,l} (X_{ij}^* \otimes E_{ji})(X_{kl} \otimes E_{kl}) = \sum_{i,j,l} (X_{ij}^* X_{il}) \otimes E_{jl} \\
&= \sum_{j,l} \left(\sum_i X_{ij}^* X_{il} \right) \otimes E_{jl}.
\end{aligned}$$

Portanto $\Phi(E_{ab}) = \sum_i X_{ia}^* X_{ib}$ para cada $1 \leq a, b \leq d$. Feito isso, definimos

$$V_{ij} := \sum_k E_{kj} X_{ik}.$$

Com isso,

$$V_{ij}^* = \sum_l X_{il}^* E_{jl}.$$

Afirmação: $\Phi(E_{ab}) = \sum_{i,j} V_{ij}^* E_{ab} V_{ij}$

Primeiramente, note que $\sum_j E_{jj} = I_d$. Temos

$$\sum_{i,j} V_{ij}^* E_{ab} V_{ij} = \sum_{i,j} \left(\sum_l X_{il}^* E_{jl} \right) E_{ab} \left(\sum_k E_{kj} X_{ik} \right) = \sum_{i,j,k,l} X_{il}^* E_{jl} E_{ab} E_{kj} X_{ik}.$$

Os termos não nulos são apenas os termos onde $l = a$ e $k = b$. Segue

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i,j} X_{ia}^* E_{ja} E_{ab} E_{bj} X_{ib} = \sum_{i,j} X_{ia}^* E_{jb} E_{bj} X_{ib} = \sum_{i,j} X_{ia}^* E_{jj} X_{ib} \\
&= \sum_i X_{ia}^* \left(\sum_j E_{jj} \right) X_{ib} = \sum_i X_{ia}^* X_{ib},
\end{aligned}$$

e está provada a afirmação. Mais geralmente, seja $A = \sum_{i,j} a_{ij} E_{ij} \in \mathcal{M}_d$. Observe que os termos a_{ij} são as entradas da matriz, portanto números complexos, não matrizes. Então

$$\begin{aligned} \Phi(A) &= \Phi\left(\sum_{i,j} a_{ij} E_{ij}\right) = \sum_{i,j} a_{ij} \Phi(E_{ij}) = \sum_{i,j} a_{ij} \sum_k V_k^* E_{ij} V_k \\ &= \sum_{i,j,k} a_{ij} V_k^* E_{ij} V_k = \sum_k V_k^* \left(\sum_{i,j} a_{ij} E_{ij}\right) V_k = \sum_k V_k^* A V_k. \end{aligned}$$

□

Uma caracterização útil é a seguinte:

Teorema 2.2.4. *Seja $\Phi : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ uma aplicação linear. Então Φ é completamente positiva se e somente se, para todo $n \geq 1$, toda coleção de matrizes $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{M}_d$ e de vetores $u_1, \dots, u_n \in \mathbb{C}^d$, valer que*

$$\sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \Phi(A_i^* A_j) u_j \rangle \geq 0.$$

Demonstração. Suponha que Φ é uma aplicação completamente positiva. Então dadas matrizes $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{M}_d$, definimos $X = \sum_{i=1}^n A_i \otimes E_{1i} \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$ e dados vetores $u_1, \dots, u_n \in \mathbb{C}^d$ definimos $v = \sum_{k=1}^n u_k \otimes e_k \in \mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^n$. Da positividade completa de Φ usamos que Φ_n é uma aplicação positiva em $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$. Em particular, devemos ter $\langle v, \Phi_n(X^* X) v \rangle \geq 0$.

Note que

$$\begin{aligned} X^* X &= \left(\sum_{i=1}^n (A_i)^* \otimes (E_{1i})^*\right) \left(\sum_{j=1}^n A_j \otimes E_{1j}\right) \\ &= \sum_{i,j=1}^n A_i^* A_j \otimes E_{ij} \end{aligned}$$

Portanto,

$$\Phi_n(X^* X) v = \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i,j=1}^n \Phi(A_i^* A_j) \otimes E_{ij}\right) (u_k \otimes e_k)$$

$$= \sum_{i,j,k=1}^n \Phi(A_i^* A_j) u_k \otimes E_{ij} e_k = \sum_{i,j=1}^n \Phi(A_i^* A_j) u_j \otimes e_i$$

Enfim,

$$\begin{aligned} 0 \leq \langle v, \Phi_n(X^* X)v \rangle &= \left\langle \sum_{k=1}^n u_k \otimes e_k, \sum_{i,j=1}^n \Phi(A_i^* A_j) u_j \otimes e_i \right\rangle \\ &= \sum_{i,j,k=1}^n \langle u_k, \Phi(A_i^* A_j) u_j \rangle \langle e_k, e_i \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \Phi(A_i^* A_j) u_j \rangle, \end{aligned}$$

e está provada uma das implicações. Para a outra direção, precisamos mostrar que $\Phi_n = \Phi \otimes \mathcal{I}_n$ é uma aplicação positiva em $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$. Para tanto, seja $B = A^* A \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$ uma matriz positiva. Queremos que $\Phi_n(B)$ seja positiva. A se escreve como $\sum_{i,j=1}^n A_{ij} \otimes E_{ij}$. Logo,

$$\begin{aligned} B &= \left(\sum_{i,j=1}^n A_{ij}^* \otimes E_{ji} \right) \left(\sum_{k,l=1}^n A_{kl} \otimes E_{kl} \right) \\ &= \sum_{i,j,k,l=1}^n A_{ij}^* A_{kl} \otimes E_{ji} E_{kl} = \sum_{i,j,l=1}^n A_{ij}^* A_{il} \otimes E_{jl} \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j,l=1}^n A_{ij}^* A_{il} \otimes E_{jl} \right) \\ &= \sum_{m=1}^n \left(\sum_{k,l=1}^n A_{mk}^* A_{ml} \otimes E_{kl} \right). \end{aligned}$$

Na última expressão só foram renomeados os índices a fim de se tornar mais clara a demonstração no que segue. Considere agora um vetor genérico em $\mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^n$:

$$\begin{aligned} v &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} (e_i \otimes e_j) = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^d \alpha_{ij} e_i \right) \otimes e_j \\ u_j &:= \sum_{i=1}^d \alpha_{ij} e_i \quad \Rightarrow \quad v = \sum_{j=1}^n u_j \otimes e_j. \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
\Phi_n(B)v &= \sum_{m=1}^n \left(\sum_{k,l=1}^n \Phi(A_{mk}^* A_{ml}) \otimes E_{kl} \right) \left(\sum_{j=1}^n u_j \otimes e_j \right) \\
&= \sum_{m=1}^n \sum_{j,k,l=1}^n \Phi(A_{mk}^* A_{ml}) u_j \otimes E_{kl} e_j \\
&= \sum_{m=1}^n \sum_{j,k=1}^n \Phi(A_{mk}^* A_{mj}) u_j \otimes e_k
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned}
\langle v, \Phi_n(B)v \rangle &= \left\langle \sum_{i=1}^n u_i \otimes e_i, \sum_{m=1}^n \sum_{j,k=1}^n \Phi(A_{mk}^* A_{mj}) u_j \otimes e_k \right\rangle \\
&= \sum_{i,j,k,m=1}^n \langle u_i, \Phi(A_{mk}^* A_{mj}) u_j \rangle \langle e_i, e_k \rangle = \sum_{m=1}^n \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \Phi(A_{mi}^* A_{mj}) u_j \rangle
\end{aligned}$$

Para cada m fixo, o somatório de dentro é ≥ 0 por hipótese. Segue que $\langle v, \Phi_n(B)v \rangle \geq 0$, para todo $v \in \mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^n$. Portanto, Φ_n é uma aplicação positiva e concluímos que Φ é completamente positiva. \square

Outra ferramenta de bastante utilidade para nós é conhecida como desigualdade de Schwarz.

Teorema 2.2.5 (Desigualdade de Schwarz). *Seja $\Phi : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ uma aplicação completamente positiva. Então*

$$\Phi(A^*)[\Phi(I_d)]^{-1}\Phi(A) \leq \Phi(A^*A)$$

Em particular, caso $\Phi(I_d) = I_d$, temos que

$$\Phi(A^*)\Phi(A) \leq \Phi(A^*A).$$

Observação 2.2.6. Note que da hipótese decorre somente $\Phi(I_d) \geq 0$. Não estamos assumindo que $\Phi(I_d) > 0$, o que não garante que exista uma inversa global para $\Phi(I_d)$. Suponha que $w \in \text{Ker}(\Phi(I_d))$. Como $\Phi(I_d) = \sum_{i=1}^k V_i^* V_i$, segue

$$0 = \langle w, 0 \rangle = \langle w, \Phi(I_d)w \rangle = \sum_{i=1}^k \langle w, V_i^* I_d V_i w \rangle = \sum_{i=1}^k \langle V_i w, V_i w \rangle = \sum_{i=1}^k \|V_i w\|^2.$$

Ou seja, $V_i w = 0$ para todo $i \in \{1, \dots, k\}$. Ainda,

$$\Phi(A^* A)w = \sum_{i=1}^k V_i^* A^* A V_i w = 0 \quad \text{e também} \quad \Phi(A)w = 0.$$

Assim, definindo $\Phi(I_d)^{-1} : \text{Im}(\Phi(I_d)) \oplus \text{Ker}(\Phi(I_d))$ como

$$\Phi(I_d)^{-1}(\Phi(I_d)v + w) = v, \quad \forall v \in \mathbb{C}^d, \quad w \in \text{Ker}(\Phi(I_d)),$$

vamos obter

$$\langle w, \Phi(A^* A)w - \Phi(A^*)[\Phi(I_d)]^{-1}\Phi(A)w \rangle = \langle w, 0 \rangle = 0.$$

E portanto esses vetores não representam problema para a conclusão do teorema.

Demonstração. Dada a observação, podemos supor que $\Phi(I_d)$ é inversível (mesmo que localmente). Usando a hipótese de que Φ é completamente positiva, vamos usar a positividade de $\Phi_2 : \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_2 \rightarrow \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_2$.

Para $X = A \otimes E_{11} + I_d \otimes E_{12}$ temos

$$\begin{aligned} X^* X &= (A^* \otimes E_{11} + I_d \otimes E_{21})(A \otimes E_{11} + I_d \otimes E_{12}) \\ &= A^* A \otimes E_{11} + A^* \otimes E_{12} + A \otimes E_{21} + I_d \otimes E_{22}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\Phi_2(X^* X) = \Phi(A^* A) \otimes E_{11} + \Phi(A^*) \otimes E_{12} + \Phi(A) \otimes E_{21} + \Phi(I_d) \otimes E_{22} \geq 0,$$

ou seja,

$$\Phi \begin{pmatrix} A^*A & A^* \\ A & I_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi(A^*A) & \Phi(A^*) \\ \Phi(A) & \Phi(I_d) \end{pmatrix} \geq 0.$$

A seguinte afirmação conclui a demonstração.

Afirmação. A matriz em blocos

$$\begin{pmatrix} X & Z \\ Z^* & Y \end{pmatrix}$$

é positiva se e somente se $X, Y \geq 0$, Y é invertível e $X \geq ZY^{-1}Z^*$.

De fato,

$$\begin{pmatrix} X & Z \\ Z^* & Y \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} I_d & -ZY^{-1} \\ 0 & I_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X & Z \\ Z^* & Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_d & 0 \\ -Y^{-1}Z^* & I_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X - Z^*Y^{-1}Z & 0 \\ 0 & Y \end{pmatrix}$$

Logo, a positividade da matriz inicial é equivalente a positividade da última matriz em blocos. Por sua vez, esta é positiva se os blocos da diagonal o são. Isto é, $X - Z^*Y^{-1}Z \geq 0$. Fica assim provada a afirmação.

Para concluir o teorema, basta usar $X = \Phi(A^*A)$, $Y = \Phi(I)$ e $Z = \Phi(A^*)$ com $\Phi(A^*) = \Phi(A)^*$.

□

Capítulo 3

Semigrupos dinâmicos

3.1 Estrutura inicial

As definições a seguir podem ser estendidas para espaços mais gerais que são os espaços de Banach de dimensão infinita. Tudo o que diremos sobre tais espaços é que todo espaço de Hilbert é um espaço de Banach com a norma induzida pelo produto interno e portanto \mathcal{M}_n e \mathbb{C}^n são exemplos destes espaços. Observamos que estaremos interessados aqui principalmente no caso dos espaços de dimensão finita.

Definição 3.1.1. *Uma família $\{\mathcal{T}_t\}$ de matrizes ou de operadores agindo sobre \mathcal{M}_n e indexada por $t \in \mathbb{R}_+$ é um **semigrupo dinâmico** se satisfaz:*

- (i) $\mathcal{T}_0 = I$, o operador identidade no espaço em questão
- (ii) $\mathcal{T}_{t+s} = \mathcal{T}_t \circ \mathcal{T}_s = \mathcal{T}_s \circ \mathcal{T}_t$, para todos $s, t \in \mathbb{R}_+$.

Enquanto que *dinâmico* é o termo usado para nos lembrar de que \mathcal{T}_t pode ser pensado como uma evolução temporal, a segunda propriedade nos diz que essa evolução não depende nem do passado nem do momento presente. Estamos então assumindo que a evolução é *homogênea no tempo*. Se faz necessária agora uma condição de continuidade.

Definição 3.1.2. *Um semigrupo dinâmico $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ é dito **uniformemente contínuo** se a aplicação $t \mapsto \mathcal{T}_t$ é contínua, i.e.,*

$$\forall s \geq 0, \quad \lim_{t \rightarrow s} \|\mathcal{T}_s - \mathcal{T}_t\| = 0.$$

Definição 3.1.3. *Seja $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ um semigrupo dinâmico uniformemente contínuo em \mathcal{M}_n . Defina*

$$\mathcal{D}(\mathcal{L}) := \left\{ A \in \mathcal{M}_n \mid \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_t(A) - A}{t} \text{ existe e pertence a } \mathcal{M}_n \right\}.$$

O gerador infinitesimal desse semigrupo é definido como o operador $\mathcal{L} : \mathcal{D}(\mathcal{L}) \subseteq \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ dado pela expressão:

$$\mathcal{L}(A) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_t(A) - A}{t}, \text{ para toda } A \in \mathcal{D}(\mathcal{L}).$$

Vamos descrever agora de forma sumária e informal o principal foco do presente trabalho. É natural considerar um semigrupo $\mathcal{T}_t, t \geq 0$, na forma

$$A \rightarrow A_t = \mathcal{T}_t(A) = e^{t\mathcal{L}} A, \quad (3.1)$$

onde $\mathcal{L} : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ é linear. O operador \mathcal{L} será denominado de gerador infinitesimal do semigrupo. É fundamental na teoria que para todo $t \geq 0$ o operador $e^{t\mathcal{L}}$ seja completamente positivo. Nosso principal objetivo é caracterizar os possíveis \mathcal{L} que cumprem tal condição. No Corolário 3.2.7 iremos mostrar que a condição para tanto seria que \mathcal{L} fosse da forma

$$\mathcal{L}(A) = \Psi(A) + G^* A + AG, \quad (3.2)$$

para alguma aplicação completamente positiva $\Psi : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ e uma matriz $G \in \mathcal{M}_n$.

Um exemplo de tal tipo de \mathcal{L} poderia ser

$$A \rightarrow \mathcal{L}(A) = \frac{i}{\hbar} [H, A] + \sum_j V_j^* A V_j, \quad (3.3)$$

onde $H \in \mathcal{M}_n$ é autoadjunto e $V_j \in \mathcal{M}_n$ são matrizes quaisquer.

Na seção 3.3 vamos apresentar algumas considerações que justificam o interesse nesta classe de transformações \mathcal{L} do ponto de vista da Física. É interessante entender em um exemplo (que trata da interação de um subsistema de dimensão finita e um reservatório) o que significam as duas parcelas a direita na expressão (3.3). Nesta mencionada seção iremos também apresentar uma outra representação possível do operador \mathcal{L} .

Vamos voltar agora para a sequência de resultados preliminares que nos irão preparar para o nosso objetivo principal a ser apresentado na seção 3.2.

Note que da hipótese de que o semigrupo é uniformemente contínuo não decorre de imediato que o limite acima existe para todas as matrizes. Contudo, no caso de dimensão finita, veremos que este é o caso. Para tanto, vamos recorrer a um conceito familiar aos cursos de análise funcional:

Definição 3.1.4. *Um operador linear $T : \mathcal{D}(T) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ em um espaço de Hilbert é dito **fechado** se para qualquer sequência $(x_n) \subset \mathcal{H}$ convergente a um elemento $x \in \mathcal{H}$ e tal que $T(x_n) \rightarrow y \in \mathcal{H}$ valer que*

$$x \in \mathcal{D}(T) \quad e \quad T(x) = y.$$

No nosso caso, $\mathcal{H} = \mathcal{M}_n$ e T é o recém definido gerador infinitesimal \mathcal{L} . Vamos usar esta definição juntamente com o seguinte resultado:

Teorema 3.1.5. *Se $T : \mathcal{D}(T) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é um operador linear **limitado** e fechado, então $\mathcal{D}(T)$ é um subconjunto fechado de \mathcal{H} .*

Demonstração. Dada uma sequência $x_n \rightarrow x \in \overline{\mathcal{D}(T)}$, note que a sequência $T(x_n)$ é de Cauchy pois dado $\varepsilon > 0$, existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que $n, m \geq n_0 \Rightarrow \|x_n - x_m\| < \varepsilon$. Assim,

$$\|T(x_n) - T(x_m)\| \leq \|T\| \cdot \|x_n - x_m\| < \varepsilon, \quad \text{para todos } n, m \geq n_0.$$

Sendo $T(x_n)$ de Cauchy em \mathcal{H} de Hilbert, existe o limite $y = \lim T(x_n)$. Por fim, usando que T é operador fechado, concluímos que $x \in \mathcal{D}(T)$ e $T(x) = y$. \square

Com estas noções em mãos, podemos enunciar o seguinte resultado:

Teorema 3.1.6. *Dado um semigrupo dinâmico $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ uniformemente contínuo agindo em \mathcal{M}_n , seu gerador infinitesimal \mathcal{L} é um operador fechado definido em todo o espaço, isto é, $\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \mathcal{M}_n$.*

Ideia da demonstração. Este resultado envolve várias proposições que resumiremos em alguns passos. Primeiro, verifica-se que \mathcal{L} é fechado. Após,

como \mathcal{L} é definido em um espaço de dimensão finita, ele é automaticamente limitado. A parte crucial é mostrar que $\mathcal{D}(\mathcal{L})$ é um subespaço denso em \mathcal{M}_n . Para concluir, basta usar o teorema anterior para argumentar que $\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \overline{\mathcal{D}(\mathcal{L})} = \mathcal{M}_n$. O resultado final é o encontrado no corolário 5.1.8 em [10] e enunciado a seguir:

Teorema 3.1.7. *Se $\mathcal{L} : \mathcal{D}(\mathcal{L}) \subseteq \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ é o gerador infinitesimal de um semigrupo uniformemente contínuo $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ de operadores limitados em um espaço de Banach \mathcal{B} , então \mathcal{L} é um operador linear fechado e $\mathcal{D}(\mathcal{L})$ é um subespaço denso de \mathcal{B} .*

Indo na mesma direção de explorar a relação entre semigrupo e gerador infinitesimal mencionamos o seguinte resultado em dimensão finita.

Teorema 3.1.8. *Se a família $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ de operadores lineares agindo em \mathcal{M}_n é um semigrupo dinâmico uniformemente contínuo, então o semigrupo é diferenciável para todo $t \in \mathbb{R}_+$. Além disso, o gerador infinitesimal satisfaz*

$$\mathcal{T}_t = e^{t\mathcal{L}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathcal{L})^n}{n!}.$$

Na verdade, $e^{t\mathcal{L}}$ é a única solução da equação diferencial de Chapman-Kolmogorov

$$\mathcal{L}\mathcal{T}_t = \frac{d\mathcal{T}_t}{dt} = \mathcal{T}_t\mathcal{L},$$

com condição inicial $\mathcal{T}_0 = I : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$.

Demonstração. Primeiramente vamos conferir que a família de operadores definida pela série acima está bem definida, é um semigrupo dinâmico e ainda, uniformemente contínuo.

Pela continuidade da norma de operador, temos

$$\|e^{t\mathcal{L}}\| = \left\| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathcal{L})^n}{n!} \right\| \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n \|\mathcal{L}\|^n}{n!} = e^{t\|\mathcal{L}\|} < \infty \quad (3.4)$$

e os operadores estão bem definidos. Para verificar que vale a propriedade de composição, vamos usar o seguinte resultado (aos interessados, consultem [12]).

Lema 3.1.9. Se $A, B : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ (ou ainda, $A, B \in \mathcal{M}_n$) são tais que $AB = BA$, então vale

$$e^{A+B} = e^A e^B = e^B e^A$$

Como $(t\mathcal{L})(s\mathcal{L}) = ts\mathcal{L}^2 = st\mathcal{L}^2 = (s\mathcal{L})(t\mathcal{L})$, segue que $e^{(t+s)\mathcal{L}} = e^{t\mathcal{L}}e^{s\mathcal{L}}$ e portanto a família de operadores é semigrupo dinâmico.

Ainda, abrindo as contas para uma matriz qualquer $A \in \mathcal{M}_n$ obtemos

$$\begin{aligned} \left\| \frac{e^{t\mathcal{L}}(A) - A}{t} - \mathcal{L}(A) \right\| &= \frac{1}{t} \left\| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n \mathcal{L}^n}{n!}(A) - A - t\mathcal{L}(A) \right\| \\ &= \frac{1}{t} \left\| \left(A + t\mathcal{L}(A) + \frac{t^2 \mathcal{L}^2(A)}{2!} + \dots + \frac{t^n \mathcal{L}^n(A)}{n!} + \dots \right) - A - t\mathcal{L}(A) \right\| \\ &= \frac{1}{t} \left\| \sum_{n=2}^{\infty} \frac{t^n \mathcal{L}^n}{n!}(A) \right\| \leq \frac{1}{t} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{t^n \|\mathcal{L}\|^n}{n!} \cdot \|A\| \\ &= \frac{1}{t} (e^{t\|\mathcal{L}\|} - t\|\mathcal{L}\| - 1) \|A\| = \left(\frac{e^{t\|\mathcal{L}\|} - 1}{t} - \|\mathcal{L}\| \right) \|A\|. \end{aligned}$$

Fazendo o limite quando $t \rightarrow 0$, obtemos

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \left\| \frac{e^{t\mathcal{L}}(A) - A}{t} - \mathcal{L}(A) \right\| &\leq \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{e^{t\|\mathcal{L}\|} - 1}{t} - \|\mathcal{L}\| \right) \|A\| \\ &= \|A\| \left(\frac{d}{dt} e^{t\|\mathcal{L}\|} \right) \Big|_{t=0} - \|A\| \cdot \|\mathcal{L}\| \\ &= \|A\| \cdot \|\mathcal{L}\| - \|A\| \cdot \|\mathcal{L}\| = 0. \end{aligned}$$

Donde concluímos que o limite abaixo vale para toda matriz $A \in \mathcal{M}_n$:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{e^{t\mathcal{L}}(A) - A}{t} = \mathcal{L}(A) \quad \text{com} \quad e^{0\mathcal{L}}(A) = A.$$

Ou seja, o semigrupo $e^{t\mathcal{L}}$ tem gerador infinitesimal igual a \mathcal{L} . Completando as hipóteses, temos

$$\begin{aligned}
\lim_{t \rightarrow s} \|e^{s\mathcal{L}} - e^{t\mathcal{L}}\| &= \lim_{t \rightarrow s} \|e^{(s-t)\mathcal{L}}e^{t\mathcal{L}} - e^{t\mathcal{L}}\| = \lim_{t \rightarrow s} \|(e^{(s-t)\mathcal{L}} - I)e^{t\mathcal{L}}\| \\
&= \lim_{t \rightarrow s} \|e^{(s-t)\mathcal{L}} - I\| \cdot \|e^{t\mathcal{L}}\| = \lim_{t \rightarrow s} \left\| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(s-t)^n \mathcal{L}^n}{n!} \right\| \cdot \|e^{t\mathcal{L}}\| \\
&\leq \lim_{t \rightarrow s} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|s-t|^n \|\mathcal{L}^n\|}{n!} \cdot \|e^{t\mathcal{L}}\| = \lim_{t \rightarrow s} (e^{|t-s|\|\mathcal{L}\|} - 1) \cdot \|e^{t\mathcal{L}}\| \\
&= (e^0 - 1) \|e^{s\mathcal{L}}\| = 0,
\end{aligned}$$

donde concluimos que $e^{t\mathcal{L}}$ é um semigrupo dinâmico uniformemente contínuo.

Agora mostraremos que a condição de diferenciabilidade em $t = 0$ dada pelo teorema anterior juntamente com a propriedade de semigrupo garante a diferenciabilidade em todo $t \in \mathbb{R}_+$. E ainda, que o semigrupo satisfaz as equações de Chapman-Kolmogorov. Para $t > 0$,

$$\frac{d}{dt}\mathcal{T}_t = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_{t+s} - \mathcal{T}_t}{s} = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_t(\mathcal{T}_s) - \mathcal{T}_t}{s} = \mathcal{T}_t \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_s - I}{s} = \mathcal{T}_t \mathcal{L}$$

e

$$\frac{d}{dt}\mathcal{T}_t = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_{t+s} - \mathcal{T}_t}{s} = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_s(\mathcal{T}_t) - \mathcal{T}_t}{s} = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_s - I}{s} \mathcal{T}_t = \mathcal{L}\mathcal{T}_t.$$

Portanto, o semigrupo \mathcal{T}_t satisfaz as equações de Chapman-Kolmogorov, assim como $e^{t\mathcal{L}}$. Ora, a solução desta EDO é única (vide [12]), logo $e^{t\mathcal{L}} = \mathcal{T}_t$. \square

Agora estamos mais próximos do objeto de estudo mais importante deste texto. A partir daqui, os semigrupos de interesse são aqueles que agem nas matrizes. Os semigrupos formados por matrizes serão ferramentas auxiliares na construção destes.

Definição 3.1.10. *Um semigrupo dinâmico quântico (QDS) sobre \mathcal{M}_n em tempo contínuo é uma família $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ de operadores lineares que satisfaz as seguintes condições:*

1. $\mathcal{T}_0(A) = A$, para toda matriz $A \in \mathcal{M}_n$.
2. $\mathcal{T}_{t+s}(A) = \mathcal{T}_t(\mathcal{T}_s(A)) = \mathcal{T}_s(\mathcal{T}_t(A))$, para toda matriz $A \in \mathcal{M}_n, \forall s, t \geq 0$.
3. \mathcal{T}_t é completamente positivo para todo $t \geq 0$.

Observação 3.1.11. Em dimensão infinita, existe mais uma condição sobre a família que define tais operadores como normais (segundo [10]). Ela decorre do formalismo matemático da mecânica quântica. Para o nosso caso de dimensão finita, ela é automaticamente satisfeita:

Condição extra. Para cada densidade ρ , a aplicação $A \mapsto \text{tr}(\rho \mathcal{T}_t(A))$ de \mathcal{M}_n em \mathbb{C} é contínua. Ou seja, o valor esperado do sistema em evolução $\langle \mathcal{T}_t(A) \rangle_\rho = \langle \mathcal{T}_t(A), \rho \rangle = \text{tr}[\rho \mathcal{T}_t(A)]$ ainda é uma função contínua do observável.

Em dimensão finita, transformações lineares são automaticamente contínuas, donde segue a continuidade do traço e do operador \mathcal{T}_t . Assim, a condição é sempre verificada.

Definição 3.1.12. Um semigrupo dinâmico quântico $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ é dito **semigrupo markoviano quântico** (QMS) em tempo contínuo quando

$$\mathcal{T}_t(I_n) = I_n, \quad \forall t \geq 0,$$

onde I_n é a matriz identidade de \mathcal{M}_n .

Proposição 3.1.13. Se $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ é semigrupo dinâmico quântico e uniformemente contínuo, vale a propriedade

$$\mathcal{T}_t(I_n) = e^{t\mathcal{L}}(I_n) = I_n \Leftrightarrow \mathcal{L}(I_n) = 0. \quad (3.5)$$

Demonstração. Por um lado, derivando a expressão $e^{t\mathcal{L}}(I_n) = I_n$ obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} e^{t\mathcal{L}}(I_n) &= \frac{d}{dt} I_n = 0 \\ \Rightarrow 0 &= \mathcal{L} e^{t\mathcal{L}}(I_n) = \mathcal{L}(I_n). \end{aligned}$$

Por outro,

$$e^{t\mathcal{L}}(I_n) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t\mathcal{L})^k}{k!}(I_n) = I_n + t\mathcal{L}(I_n) + \frac{t^2}{2!}\mathcal{L}^2(I_n) + \dots = I_n.$$

□

A condição anterior lembra um análogo clássico na teoria de cadeias de Markov. A saber, P é uma matriz estocástica (do tipo d por d) se, por definição, todas as suas entradas são não-negativas e a soma das entradas em cada linha é 1. Esta última condição implica na equação $P(\mathbf{1})=\mathbf{1}$, onde $\mathbf{1}$ é o vetor em \mathbb{R}^d cujas entradas são todas iguais a 1.

No contexto de cadeias de Markov a tempo contínuo $t \geq 0$, a propriedade procurada é que para todo $t \geq 0$ fixado, $\mathcal{P}^t = e^{tL}$ seja estocástica. Sabemos que é necessário para isto que $e^{tL}(\mathbf{1}) = \mathbf{1}$, para todo $t \geq 0$. Isso ocorre se e somente se, para o gerador infinitesimal L (definido via o mesmo limite $t \rightarrow 0$ que tratamos aqui), valer que $L(\mathbf{1})=0$. Na verdade é necessário mais: as entradas da diagonal de L devem ser negativas, enquanto que as demais devem ser nulas ou positivas. Para um excelente texto sobre cadeias de Markov a tempo contínuo, recomendamos a leitura da dissertação em [6].

Uma analogia dos **semigrupos markovianos quânticos** (QMS) em tempo contínuo com a teoria das cadeias de Markov a tempo contínuo é descrita pelo exemplo apresentado em [32]. Vamos elaborar sobre isto. Pode-se mostrar que dada uma matriz estocástica P , temos que $L := P - I$ é uma matriz que gera um semigrupo estocástico e^{tL} , como foi descrito acima.

Uma matriz estocástica P pode ser caracterizada como uma matriz tal que

a) $P(\mathbf{1})=\mathbf{1}$,

e ainda

b) dado qualquer vetor $v \in \mathbb{R}^d$ com todas as entrada positivas então temos que $u = P(v)$ também tem todas as entradas positivas.

O resultado principal desta dissertação vai mostrar que o operador \mathcal{L} que descreve um QDS é da forma (3.2).

O análogo quântico da propriedade acima mencionada leva em conta um operador completamente positivo $\mathcal{T} : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ (que faria assim o papel do item b) acima para a matriz P) e o operador $\mathcal{L} = \mathcal{T} - I$, onde I é o operador identidade agindo em \mathcal{M}_d . Vamos mostrar que podemos escrever

este operador $\mathcal{T} - I$ na forma desejada, ou seja, na forma

$$A \rightarrow \phi(A) + \kappa^* A + A\kappa.$$

Para isso, escrevemos a representação de Kraus de \mathcal{T} :

$$\mathcal{T}(A) = \sum_{i=1}^n K_i^* A K_i$$

e, escolhendo um vetor unitário qualquer $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{C}^n$, definimos

$$\kappa = \sum_{i=1}^n \bar{x}_i V_i, \text{ onde } V_i := K_i - x_i I.$$

Ainda, definimos um operador auxiliar $\phi : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ via

$$\phi(A) := \sum_{i=1}^n V_i^* A V_i.$$

Afirmação: $(\mathcal{T} - I)(A) = \phi(A) + \kappa^* A + A\kappa.$

De fato, temos que

$$\begin{aligned} \phi(A) + \kappa^* A + A\kappa &= \sum_{i=1}^n (K_i - x_i I)^* A (K_i - x_i I) + x_i V_i^* A + A \bar{x}_i V_i \\ &= \sum_{i=1}^n K_i^* A K_i + K_i^* A (-x_i I) - \bar{x}_i A K_i + \bar{x}_i x_i A + x_i V_i^* A + A \bar{x}_i V_i \\ &= \mathcal{T}(A) + \sum_{i=1}^n |x_i|^2 A + \sum_{i=1}^n -\bar{x}_i A K_i - x_i K_i^* A + x_i V_i^* A + A \bar{x}_i V_i \\ &= \mathcal{T}(A) + A + \sum_{i=1}^n -\bar{x}_i A K_i - x_i K_i^* A + x_i V_i^* A + A \bar{x}_i V_i \\ &= \mathcal{T}(A) + A + \sum_{i=1}^n -\bar{x}_i A K_i - x_i K_i^* A + x_i (K_i - x_i)^* A + A \bar{x}_i (K_i - x_i) \\ &= \mathcal{T}(A) + A + \sum_{i=1}^n -\bar{x}_i A K_i - x_i K_i^* A + x_i K_i^* A - x_i \bar{x}_i A + A \bar{x}_i K_i - A \bar{x}_i x_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \mathcal{T}(A) + A + \sum_{i=1}^n -|x_i|^2 A - A|x_i|^2 \\
&= \mathcal{T}(A) + A - 2A|x|^2 \\
&= \mathcal{T}(A) + A - 2A \\
&= \mathcal{T}(A) - A = (\mathcal{T} - I)(A) = \mathcal{L}(A).
\end{aligned}$$

Como veremos no Corolário 3.2.7 esta expressão representa um gerador de Lindblad válido.

Suponha agora que \mathcal{T} (que faz o papel do P) satisfaça também a condição $\mathcal{T}(I_n) = I_n$ (análoga a condição a) acima). Deste modo

$$\mathcal{L}(I_n) = (\mathcal{T} - I)(I_n) = 0 \in \mathcal{M}_n.$$

A partir da Proposição 3.1.13 obtemos a propriedade $e^{t\mathcal{L}}(I_n) = I_n$, $t \geq 0$. Fica assim ainda mais justificado a nomenclatura “Semigrupo *Markoviano Quântico*”, $t \geq 0$, que foi empregada na teoria acima descrita.

A motivação para a condição descrita acima é devida a necessidade da preservação das densidades para o operador dual. Para tanto, vamos introduzir este operador brevemente agora:

Definição 3.1.14. *Dado $\mathcal{T} : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ um operador linear sobre as matrizes, definimos o dual de \mathcal{T} , o operador $\mathcal{T}^* : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$, que age sobre as matrizes como o operador que satisfaz*

$$\langle \mathcal{T}(A), B \rangle = \langle A, \mathcal{T}^*(B) \rangle,$$

para todas matrizes $A, B \in \mathcal{M}_n$.

Note agora que se $\rho \in \mathcal{D}_n$, onde $\mathcal{D}_n \subset \mathcal{M}_n$ é o subconjunto de matrizes densidades e \mathcal{T}_t é semigrupo markoviano quântico, vale que

$$\begin{aligned}
Tr(\mathcal{T}_t^*(\rho)) &= Tr(I_n \mathcal{T}_t^*(\rho)) = \langle I_n, \mathcal{T}_t^*(\rho) \rangle = \langle \mathcal{T}_t(I_n), \rho \rangle \\
&= \langle I_n, \rho \rangle = Tr(I_n \rho) = Tr(\rho) = 1,
\end{aligned}$$

e portanto as densidades são preservadas pelo operador, como desejado. Ainda, se $\mathcal{T}_t = e^{t\mathcal{L}}$, então $\mathcal{T}_t^* = e^{t\mathcal{L}^*}$, pois

$$\langle A, e^{t\mathcal{L}}(B) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \langle A, \mathcal{L}^n(B) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \langle (\mathcal{L}^*)^n(A), B \rangle = \langle e^{t\mathcal{L}^*}(A), B \rangle.$$

Exemplo 3.1.15 (Dinâmicas fechadas). *Considere a família de operadores lineares unitários $\{U_t, t \geq 0\}$, onde $U_t : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ é definido por $U_t = e^{-itH}$, para algum operador autoadjunto H (hamiltoniano). Defina então a família $\mathcal{T}_t : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ por*

$$\mathcal{T}_t(A) = U_t^* A U_t = e^{itH} A e^{-itH}, \quad t \geq 0.$$

Esta família é um QMS, como caso particular do próximo exemplo. Veremos que $\mathcal{L}(A) = i[H, A]$.

Exemplo 3.1.16. *Generalizando o anterior, seja $P_t = e^{tG} \in \mathcal{M}_n$, com $G \in \mathcal{M}_n$. A propriedade markoviana se reflete sobre G como a condição $G + G^* = 0$. Temos $P_t^* = e^{tG^*}$. Defina $\mathcal{T}_t : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$ por*

$$\mathcal{T}_t(A) = P_t^* A P_t = e^{tG^*} A e^{tG}, \quad t \geq 0.$$

Afirmamos que esta família é um exemplo de QMS.

1. *Claramente $\mathcal{T}_0(A) = P_0^* A P_0 = e^{0G^*} A e^{0G} = A, \forall A \in \mathcal{M}_n$;*
2. *Para cada $A \in \mathcal{M}_n, s, t \geq 0$ temos*

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_t(\mathcal{T}_s(A)) &= P_t^*(\mathcal{T}_s(A))P_t = P_t^*(P_s^* A P_s)P_t = e^{tG^*} e^{sG^*} A e^{sG} e^{tG} \\ &= e^{(t+s)G^*} A e^{(s+t)G} = P_{t+s}^* A P_{t+s} = \mathcal{T}_{t+s}(A); \end{aligned}$$

3. *A positividade completa decorre de imediato da Representação de Kraus, conforme 2.2.3.*

Até aqui $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ é semigrupo dinâmico quântico, porém vale ainda que

$$\mathcal{T}_t(I_n) = P_t^* I_n P_t = e^{tG^*} I_n e^{tG} = e^{t(G+G^*)} = e^{0t} = I_n.$$

Logo, é também QMS. Vamos verificar a continuidade uniforme. Para tanto, note que

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_t(A) &= e^{tG^*} A e^{tG} = (e^{tG^*} - I + I) A e^{tG} = (e^{tG^*} - I) A e^{tG} + A e^{tG} \\ &= (e^{tG^*} - I) A e^{tG} + A(e^{tG} - I) + A,\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow s} \|\mathcal{T}_t(A) - \mathcal{T}_s(A)\| &= \lim_{t \rightarrow s} \|\mathcal{T}_s(\mathcal{T}_{t-s}(A) - A)\| \\ &= \lim_{t \rightarrow s} \|e^{sG^*} (\mathcal{T}_{t-s}(A) - A) e^{sG}\| \\ &\leq \|e^{sG^*}\| \cdot \|e^{sG}\| \lim_{t \rightarrow s} \|\mathcal{T}_{t-s}(A) - A\| \\ &\leq \|e^{sG^*}\| \cdot \|e^{sG}\| \lim_{h \rightarrow 0} \|\mathcal{T}_h(A) - A\| \\ &= \|e^{sG^*}\| \cdot \|e^{sG}\| \lim_{h \rightarrow 0} \|(e^{hG^*} - I) A e^{hG} + A(e^{hG} - I)\| \\ &\leq \|e^{sG^*}\| \cdot \|e^{sG}\| \lim_{h \rightarrow 0} (\|(e^{hG^*} - I) A e^{hG}\| + \|A(e^{hG} - I)\|) \\ &= \|e^{sG^*}\| \cdot \|e^{sG}\| (\|(e^{0G^*} - I) A e^{0G}\| + \|A(e^{0G} - I)\|) \\ &= \|e^{sG^*}\| \cdot \|e^{sG}\| (\|(I - I) A e^{0G}\| + \|A(I - I)\|) = 0.\end{aligned}$$

Vamos calcular seu gerador infinitesimal \mathcal{L} :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(A) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_t(A) - A}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{e^{tG^*} A e^{tG} - A}{t} \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{e^{tG^*} A (e^{tG} - I_n) + (e^{tG^*} - I_n) A}{t} \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} e^{tG^*} A \frac{(e^{tG} - I_n)}{t} + \lim_{t \rightarrow 0} \frac{(e^{tG^*} - I_n)}{t} A \\ &= e^{0G^*} A G + G^* A.\end{aligned}$$

$$\therefore \mathcal{L}(A) = A G + G^* A.$$

No exemplo anterior, $G = -iH$, donde

$$\mathcal{L}(A) = A(-iH) + (-iH)^* A = i(HA - AH) = i[H, A].$$

Exemplo 3.1.17. Considere $\Psi : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ uma aplicação completamente positiva, isto é, $\Psi(A) = \sum_{j=1}^k V_j^* A V_j$ para toda $A \in \mathcal{M}_n$. Então a aplicação $\mathcal{T}_t(A) = e^{t\Psi}(A)$ é um semigrupo dinâmico quântico.

Note que $\mathcal{T}_0(A) = e^{0\Psi}(A) = A$ e

$$\mathcal{T}_{t+s}(A) = e^{(t+s)\Psi}(A) = (e^{t\Psi} \circ e^{s\Psi})(A) = \mathcal{T}_t(\mathcal{T}_s(A)).$$

Agora, vamos conferir que para cada $n \geq 1$, $(e^{t\Psi})_n$ é uma aplicação positiva:

$$\begin{aligned} (e^{t\Psi})_n(A \otimes B) &= \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^m \Psi^m}{m!} \right)_n (A \otimes B) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^m \Psi_n^m}{m!} (A \otimes B) \geq 0, \end{aligned}$$

pois por hipótese Ψ_n é uma aplicação positiva, donde

$$\Psi_n^m(A \otimes B) = \Psi_n \circ \dots \circ \Psi_n(A \otimes B) \geq 0,$$

para todo $m \geq 1$.

3.2 Caracterizações

O principal resultado desta seção (e da dissertação) é o Corolário 3.2.7. Mais precisamente nesta seção vamos apresentar resultados que fornecem caracterizações dos **semigrupos dinâmicos quânticos** (QDS) em dimensão finita. A condição de preservação da identidade (QMS) pelo semigrupo, o que o torna um **semigrupo Markoviano**, estará também caracterizada neste Corolário. Os resultados desta seção de baseiam no capítulo 5 de [10] que tratam da questão em dimensão qualquer.

Na seção 3.3 iremos apresentar também uma outra representação da transformação \mathcal{L} diferente daquela descrita no Corolário 3.2.7. Uma discussão sobre esta questão aparece também em [21].

O seguinte teorema fornece uma primeira ferramenta para o nosso estudo.

Teorema 3.2.1. *Seja \mathcal{L} um operador em \mathcal{M}_n tal que $\mathcal{L}(A^*) = \mathcal{L}(A)^*$ para toda $A \in \mathcal{M}_n$. Então são equivalentes as afirmações:*

1) *Para toda $A \in \mathcal{M}_n$ e todo $t \geq 0$ temos*

$$e^{t\mathcal{L}}(A^*)e^{t\mathcal{L}}(A) \leq e^{t\mathcal{L}}(A^*A).$$

2) *Para toda $A \in \mathcal{M}_n$ temos*

$$A^*\mathcal{L}(A) + \mathcal{L}(A^*)A \leq \mathcal{L}(A^*A).$$

Demonstração. Dado que a afirmação 1) é válida, o que vamos fazer é uma derivada de cada lado para obter a afirmação 2) Vamos primeiramente usar a equação de Chapman-Kolmogorov para obter

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(e^{t\mathcal{L}}(A^*)e^{t\mathcal{L}}(A) \right) \Big|_{t=0} &= \left(\mathcal{L}(e^{t\mathcal{L}}(A^*))e^{t\mathcal{L}}(A) + e^{t\mathcal{L}}(A^*)\mathcal{L}(e^{t\mathcal{L}}(A)) \right) \Big|_{t=0} \\ &= \mathcal{L}(A^*)A + A^*\mathcal{L}(A). \end{aligned}$$

Temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(A^*)A + A^*\mathcal{L}(A) &= \frac{d}{dt} \left(e^{t\mathcal{L}}(A^*)e^{t\mathcal{L}}(A) \right) \Big|_{t=0} \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{e^{t\mathcal{L}}(A^*)e^{t\mathcal{L}}(A) - A^*A}{t} \\ &\leq \lim_{t \rightarrow 0} \frac{e^{t\mathcal{L}}(A^*A) - A^*A}{t} \\ &= \frac{d}{dt} \left(e^{t\mathcal{L}}(A^*A) \right) \Big|_{t=0} \\ &= \left(\mathcal{L}e^{t\mathcal{L}}(A^*A) \right) \Big|_{t=0} \\ &= \mathcal{L}(A^*A), \end{aligned}$$

onde na penúltima igualdade usamos novamente Chapman-Kolmogorov. Reciprocamente, assumindo a afirmação 2) ganhamos que a expressão $\mathcal{L}(A^*A) - \mathcal{L}(A^*)A - A^*\mathcal{L}(A)$ é positiva. Segue portanto, pelo corolário 1.2.7 a positividade da seguinte expressão para todas $A, B \in \mathcal{M}_n$:

$$\begin{aligned}
& B^*[\mathcal{L}(A^*A) - \mathcal{L}(A^*)A - A^*\mathcal{L}(A)]B \geq 0 \\
& \Leftrightarrow B^*\mathcal{L}(A^*A)B \geq B^*\mathcal{L}(A^*)AB + B^*A^*\mathcal{L}(A)B \\
& \Leftrightarrow B^*\mathcal{L}(A^*A)B \geq B^*\mathcal{L}(A^*)AB + (AB)^*\mathcal{L}(A)B.
\end{aligned}$$

Usaremos tal expressão no caso particular em que escolhermos matrizes A e B como a parte positiva e parte negativa de um operador autoadjunto, donde $AB = 0$, que simplificará a expressão para

$$B^*\mathcal{L}(A^*A)B \geq 0.$$

Em particular, desta última desigualdade podemos concluir que para toda matriz positiva $X \geq 0$ vale $B^*\mathcal{L}(X)B \geq 0$ (\star).

O segundo passo desta implicação é provar que o operador $e^{t\mathcal{L}}$ é um operador positivo. Este fato é bastante delicado - em geral. Contudo, no nosso caso, no qual estamos assumindo a veracidade da afirmação 2), podemos colocar a mão em algumas das contas por trás deste fato. Para tanto, usaremos o seguinte limite, cuja prova rigorosa é mostrada mais adiante em 3.2.2:

$$e^{t\mathcal{L}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(I - \left(\frac{t\mathcal{L}}{n} \right) \right)^{-n}.$$

O que podemos fazer é garantir que os operadores dentro da operação de limite são positivos para valores suficientemente grandes de n , de onde seguirá a positividade do operador $e^{t\mathcal{L}}$.

Afirmção. $(I - \lambda^{-1}\mathcal{L})^{-1} \geq 0$ para $\lambda > \|\mathcal{L}\|$.

De fato, a afirmação equivale a mostrar que dado $A = A^*$ e $(I - \lambda^{-1}\mathcal{L})(A) \geq 0$ podemos obter $A \geq 0$. Para tanto, vamos invocar a decomposição da matriz autoadjunta A em suas partes positiva X e negativa Y (veja [5]). Isto é,

$$A = X - Y, \quad XY = 0 \quad \text{e} \quad X, Y \geq 0.$$

Como $Y = Y^*$, usamos o teorema de Kraus para obter

$$0 \leq Y(I - \lambda^{-1}\mathcal{L})(A)Y = YAY - \lambda^{-1}Y\mathcal{L}(A)Y$$

$$\begin{aligned}
&= Y(X - Y)Y - \lambda^{-1}Y\mathcal{L}(X - Y)Y \\
&= -Y^3 - \lambda^{-1}Y\mathcal{L}(X)Y + \lambda^{-1}Y\mathcal{L}(Y)Y.
\end{aligned}$$

Lembre que $XY = 0$ e que $Y\mathcal{L}(X)Y \geq 0$ donde $-\lambda^{-1}Y\mathcal{L}(X)Y \leq 0$ e seguimos com

$$\begin{aligned}
0 &\leq -Y^3 + \lambda^{-1}Y\mathcal{L}(Y)Y \\
&\Rightarrow 0 \leq Y^3 \leq \lambda^{-1}Y\mathcal{L}(Y)Y.
\end{aligned}$$

Ainda, $Y = Y^*$ implica $\|Y^3\| = \|Y\|^3$. Segue

$$\|Y\|^3 \leq \lambda^{-1}\|Y\mathcal{L}(Y)Y\| \leq \lambda^{-1}\|Y\|^3\|\mathcal{L}\|.$$

Finalmente, se $Y \neq 0$, então $1 \leq \lambda^{-1}\|\mathcal{L}\|$, o que contradiz a hipótese inicial de que $\lambda > \|\mathcal{L}\|$. Logo, $Y = 0$ e concluímos que $A = X - Y = X \geq 0$. Isto prova a afirmação.

Com a afirmação, podemos garantir que para n suficientemente grande, cada operador $(I - (t/n)\mathcal{L})^{-n}$ é positivo e portanto, o limite também será. Provado que o operador $e^{t\mathcal{L}}$ é positivo, vamos ao passo final.

Considere a aplicação $s \mapsto e^{(t-s)\mathcal{L}}(e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A))$ e sua derivada:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds} (e^{(t-s)\mathcal{L}}(e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A))) &= \frac{d}{ds} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{((t-s)\mathcal{L})^n}{n!} (e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)) \\
&= \frac{d}{ds} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t-s)^n}{n!} \mathcal{L}^n (e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)).
\end{aligned}$$

Lembre que todos esses operadores são limitados (dimensão finita), e portanto as séries convergem em norma, o que justifica a entrada da derivada na série:

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{ds} \left(\frac{(t-s)^n}{n!} \mathcal{L}^n (e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)) \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-n(t-s)^{n-1}}{n!} \mathcal{L}^n(e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t-s)^n}{n!} \mathcal{L}^n \left(\frac{d}{ds} (e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)) \right) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-(t-s)^{n-1} \mathcal{L}^{n-1}}{(n-1)!} \mathcal{L}(e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)) \\
&\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t-s)^n}{n!} \mathcal{L}^n [\mathcal{L}e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A) + e^{s\mathcal{L}}(A^*)\mathcal{L}e^{s\mathcal{L}}(A)] \\
&= -e^{(t-s)\mathcal{L}}(e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)) + e^{(t-s)\mathcal{L}}[\mathcal{L}e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A) + e^{s\mathcal{L}}(A^*)\mathcal{L}e^{s\mathcal{L}}(A)] \\
&= e^{(t-s)\mathcal{L}} \left(-e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A) + \mathcal{L}e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A) + e^{s\mathcal{L}}(A^*)\mathcal{L}e^{s\mathcal{L}}(A) \right).
\end{aligned}$$

Lembre que $e^{(t-s)\mathcal{L}}$ é positivo e que o argumento do operador é uma matriz negativa (no sentido de que menos ela é positiva), por hipótese. Logo, o resultado é negativo (lembre da observação pós 1.2). Isto é,

$$\frac{d}{ds} (e^{(t-s)\mathcal{L}}(e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A))) \leq 0.$$

Agora, basta integrar a desigualdade acima de $s = 0$ a $s = t$ para obter

$$\begin{aligned}
&\left(e^{(t-s)\mathcal{L}}(e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)) \right) \Big|_{s=t} - \left(e^{(t-s)\mathcal{L}}(e^{s\mathcal{L}}(A^*)e^{s\mathcal{L}}(A)) \right) \Big|_{s=0} \leq 0 \\
&e^{t\mathcal{L}}(A^*)e^{t\mathcal{L}}(A) \leq e^{t\mathcal{L}}(A^*A)
\end{aligned}$$

O que é exatamente a desigualdade em 1). □

O lema que faltava é conhecido como uma variante da fórmula de Trotter-Kato, bastando trocar t por $-t$ e tomar as inversas. Esta abaixo é encontrada em [18].

Lema 3.2.2. *Para $\mathcal{L} : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_n$, tem-se*

$$e^{t\mathcal{L}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(I - \left(\frac{t\mathcal{L}}{n} \right) \right)^{-n}.$$

Demonstração. O que vamos mostrar toma um caminho um pouco diferente. Justificaremos o limite

$$e^A = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(I + \frac{A}{n} \right)^n .$$

Então bastará substituir A por $-t\mathcal{L}$ e tomar as inversas para obter o limite desejado. Para tanto, considere $T = I + \frac{A}{n}$ e $B = e^{\frac{A}{n}}$. Temos

$$e^A - \left(I + \frac{A}{n} \right)^n = B^n - T^n = (B - T)(B^{n-1} + B^{n-2}T + \dots + T^{n-1})$$

Estimamos

$$\left\| e^A - \left(I + \frac{A}{n} \right)^n \right\| \leq \|B - T\| n \cdot \max\{\|B^i T^{n-i-1}\|; 0 \leq i \leq n-1\}$$

Para isto note que $\|T\| = \|I + \frac{A}{n}\| \leq 1 + \|\frac{A}{n}\| \leq e^{\|\frac{A}{n}\|}$ e $\|B\| = \|e^{\frac{A}{n}}\| \leq e^{\|\frac{A}{n}\|}$. Então

$$\|B^i T^{n-i-1}\| \leq \|B\|^i \|T\|^{n-i-1} \leq e^{\frac{\|A\|}{n}(i+n-i-1)} = e^{\|A\|\frac{n-1}{n}} .$$

Ainda,

$$\begin{aligned} \|B - T\| &= \|e^{A/n} - I - A/n\| = \left\| \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{A}{n} \right)^k \right\| \leq \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\|A\|}{n} \right)^k \\ &= \frac{\|A\|^2}{n^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+2)!} \left(\frac{\|A\|}{n} \right)^k \leq \frac{\|A\|^2}{n^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\|A\|}{n} \right)^k = \frac{\|A\|^2}{n^2} e^{\frac{\|A\|}{n}} \end{aligned}$$

De modo que obtemos

$$\begin{aligned} \left\| e^A - \left(I + \frac{A}{n} \right)^n \right\| &\leq n \frac{\|A\|^2}{n^2} e^{\frac{\|A\|}{n}} \cdot e^{\|A\|\frac{n-1}{n}} \\ &= \frac{\|A\|^2}{n} e^{\|A\|} \rightarrow 0, \text{ quando } n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Segue que $e^{-t\mathcal{L}} = \lim \left(I - \frac{t\mathcal{L}}{n} \right)^n$ e por fim, $e^{t\mathcal{L}} = \lim \left(I + \frac{t\mathcal{L}}{n} \right)^n$.

□

Aqui cabe um comentário a respeito da afirmação (1) do teorema. Como toda matriz positiva se escreve como A^*A para alguma matriz A , o argumento do operador em (1) é qualquer matriz positiva. Ou seja, (1) basicamente nos diz que o operador $e^{t\mathcal{L}}$ é uma aplicação positiva. Usando $\mathcal{L}(A^*) = \mathcal{L}(A)^*$ para obter $e^{t\mathcal{L}}(A^*) = e^{t\mathcal{L}}(A)^*$ decorre de (1) que

$$e^{t\mathcal{L}}(A^*A) \geq e^{t\mathcal{L}}(A)e^{t\mathcal{L}}(A)^* \geq 0.$$

Contudo, o objetivo é conseguir a positividade completa do operador. Para tanto, introduzimos o conceito que enfim conecta os semigrupos dinâmicos quânticos à propriedade sobre o gerador infinitesimal. Fixar uma dimensão d para as matrizes nos ajudará a manipular os objetos mais adiante. Deixaremos a letra n para o conjunto das matrizes no segundo fator. Lembre que \mathcal{I}_n representa o operador identidade que age em \mathcal{M}_n e $I = I_d \otimes I_n$. Assim, reservamos a partir de agora as letras cursivas para operadores que agem em matrizes e as não-cursivas para as matrizes (de fato).

Definição 3.2.3. *Uma aplicação linear $\mathcal{L} : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ é dita **condicionalmente completamente positiva** (abreviado CCP) se para todo $n \geq 1$ o operador $\mathcal{L}_n := \mathcal{L} \otimes \mathcal{I}_n : \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$ satisfaz*

$$\mathcal{L}_n(X^*X) - X^*\mathcal{L}_n(X) - \mathcal{L}_n(X^*)X + X^*\mathcal{L}_n(I)X \geq 0, \quad (\blacktriangle)$$

para todo $X \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$.

Note que, com a exceção de $X^*\mathcal{L}_n(I)X$, todos os demais termos já apareceram antes. Na sequência, a primeira caracterização prometida. Observe que uma aplicação condicionalmente completamente positiva pode não ser uma aplicação linear positiva.

Proposição 3.2.4. *Seja $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ um semigrupo uniformemente contínuo agindo em \mathcal{M}_d com gerador infinitesimal \mathcal{L} . Então \mathcal{T}_t é completamente positivo e portanto um semigrupo dinâmico quântico se e somente se \mathcal{L} é condicionalmente completamente positivo e $\mathcal{L}(A^*) = \mathcal{L}(A)^*$, para toda $A \in \mathcal{M}_d$.*

Demonstração. Seja $\{\mathcal{T}_t, t \geq 0\}$ um semigrupo dinâmico quântico com gerador infinitesimal \mathcal{L} . Considere, como na seção 2.1 os operadores $\mathcal{T}_{n,t} :$

$\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n \rightarrow \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$ definidos por

$$\mathcal{T}_{n,t}(A \otimes B) = \mathcal{T}_t(A) \otimes B, \text{ para todos } t \geq 0, A \in \mathcal{M}_d, B \in \mathcal{M}_n.$$

Para cada $n \geq 1$, o semigrupo $\{\mathcal{T}_{n,t}, t \geq 0\}$ é uniformemente contínuo em $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$. Ainda, seu gerador, que denotaremos por \mathcal{L}_n age por $\mathcal{L}_n(A \otimes B) = \mathcal{L}(A) \otimes B$ para todo $A \otimes B \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$.

O primeiro passo é obter uma desigualdade de Schwarz para $\mathcal{T}_{n,t}$ a partir da obtida para \mathcal{T}_t , conforme 2.2.5. Como \mathcal{T}_t é completamente positivo, vale para toda matriz $A \in \mathcal{M}_d$ que

$$\mathcal{T}_t(A^*)[\mathcal{T}_t(I_d)]^{-1}\mathcal{T}_t(A) \leq \mathcal{T}_t(A^*A).$$

Facilitando nossa vida, nas contas que seguem denotamos $I = I_n = I_d$. Note que $\mathcal{I}_n(A \otimes B) = A \otimes B$ donde $\mathcal{I}_n(I) = I = \mathcal{I}_n(I)^{-1}$. Assim, obtemos para todo $A \in \mathcal{M}_d, B \in \mathcal{M}_n$

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_t(A^*)[\mathcal{T}_t(I)]^{-1}\mathcal{T}_t(A) \otimes B^*B &\leq \mathcal{T}_t(A^*A) \otimes B^*B \\ \downarrow \\ \mathcal{T}_t(A^*)[\mathcal{T}_t(I)]^{-1}\mathcal{T}_t(A) \otimes \mathcal{I}_n(B^*)\mathcal{I}_n(I)^{-1}\mathcal{I}_n(B) &\leq \mathcal{T}_t(A^*A) \otimes \mathcal{I}_n(B^*B) \\ \downarrow \\ (\mathcal{T}_t(A^*) \otimes \mathcal{I}_n(B^*)) \circ (\mathcal{T}_t(I)^{-1} \otimes \mathcal{I}_n(I)^{-1}) \circ (\mathcal{T}_t(A) \otimes \mathcal{I}_n(B)) &\leq \mathcal{T}_t(A^*A) \otimes \mathcal{I}_n(B^*B) \\ \downarrow \\ \mathcal{T}_{n,t}(A^* \otimes B^*) \circ \mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1} \circ \mathcal{T}_{n,t}(A \otimes B) &\leq \mathcal{T}_{n,t}(A^*A \otimes B^*B) \\ \downarrow \\ \mathcal{T}_{n,t}([A \otimes B]^*) \circ \mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1} \circ \mathcal{T}_{n,t}(A \otimes B) &\leq \mathcal{T}_{n,t}([A \otimes B]^*[A \otimes B]) \end{aligned}$$

Vimos na seção 2.1 (mais especificamente prop. 2.1.2) que todo elemento $X \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$ pode ser escrito como soma de elementos da forma $A \otimes B$. Por linearidade, estendemos a desigualdade desejada para $\mathcal{T}_{n,t}$:

$$\mathcal{T}_{n,t}(X^*) \circ \mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1} \circ \mathcal{T}_{n,t}(X) \leq \mathcal{T}_{n,t}(X^*X)$$

Com ela em mãos, seguimos

$$\begin{aligned}
\frac{\mathcal{T}_{n,t}(X^*X) - X^*X}{t} &\geq \frac{\mathcal{T}_{n,t}(X^*)[\mathcal{T}_{n,t}(I)]^{-1}\mathcal{T}_{n,t}(X) - X^*X}{t} \\
\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_{n,t}(X^*X) - X^*X}{t} &\geq \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}_{n,t}(X^*)[\mathcal{T}_{n,t}(I)]^{-1}\mathcal{T}_{n,t}(X) - X^*X}{t} \\
\frac{d}{dt} \left(\mathcal{T}_{n,t}(X^*X) \right) \Big|_{t=0} &\geq \frac{d}{dt} \left(\mathcal{T}_{n,t}(X^*)[\mathcal{T}_{n,t}(I)]^{-1}\mathcal{T}_{n,t}(X) \right) \Big|_{t=0} \\
\left(\mathcal{L}_n \circ \mathcal{T}_{n,t}(X^*X) \right) \Big|_{t=0} &\geq \left(\mathcal{L}_n \circ \mathcal{T}_{n,t}(X^*)[\mathcal{T}_{n,t}(I)]^{-1}\mathcal{T}_{n,t}(X) \right) \Big|_{t=0} \\
+\mathcal{T}_{n,t}(X^*) \left(\frac{d}{dt} \mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1} \right) \mathcal{T}_{n,t}(X) + \mathcal{T}_{n,t}(X^*)[\mathcal{T}_{n,t}(I)]^{-1} \mathcal{L}_n \circ \mathcal{T}_{n,t}(X) &\Big|_{t=0} \\
\Rightarrow \mathcal{L}_n(X^*X) &\geq \mathcal{L}(X^*)X - X^*[\mathcal{L}_n(I)]X + X^*\mathcal{L}_n(X)
\end{aligned}$$

Sendo valida a ultima desigualdade para todo $n \in \mathbb{N}$ temos que \mathcal{L} e condicionalmente completamente positivo.

Observacao: A conta que foi omitida acima e a derivacao a seguir.

$$\begin{aligned}
0 = \frac{d}{dt}[I] &= \frac{d}{dt}[\mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1}\mathcal{T}_{n,t}(I)] = \frac{d}{dt}[\mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1}]\mathcal{T}_{n,t}(I) + \mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1} \frac{d}{dt}[\mathcal{T}_{n,t}(I)] \\
&\Rightarrow \frac{d}{dt}[\mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1}]\mathcal{T}_{n,t}(I) = -\mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1}[\mathcal{L}_n \circ \mathcal{T}_{n,t}(I)] \\
&\Rightarrow \frac{d}{dt}[\mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1}] = -\mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1}[\mathcal{L}_n \circ \mathcal{T}_{n,t}(I)]\mathcal{T}_{n,t}(I)^{-1}
\end{aligned}$$

Resta mostrar que $\mathcal{L}(A^*) = \mathcal{L}(A)^*$. Para tanto, vamos escrever o operador completamente positivo \mathcal{T}_t na representacao de Kraus e obter

$$\mathcal{T}_t(A) = \sum_{j=0}^l V_j^* A V_j \Rightarrow \mathcal{T}_t(A)^* = \sum_{j=0}^l [V_j^* A V_j]^*$$

$$= \sum_{j=0}^l V_j^* A^* (V_j^*)^* = \sum_{j=0}^l V_j^* A^* V_j = \mathcal{T}_t(A^*).$$

Donde segue, derivando em $t = 0$ que

$$\begin{aligned} \left((\mathcal{L} \circ \mathcal{T}_t(A))^* \right) \Big|_{t=0} &= \left(\mathcal{L} \circ \mathcal{T}_t(A^*) \right) \Big|_{t=0} \\ \Rightarrow \mathcal{L}(A^*) &= \mathcal{L}(A)^*. \end{aligned}$$

Reciprocamente, vamos assumir sem perda de generalidade que $\mathcal{L}(I) \leq 0$. Isto porque se este não for o caso, basta tomar $\mathcal{K} = \mathcal{L} - c$ onde $c = \|\mathcal{L}(I)\|$ e notar que a desigualdade que define os operadores condicionalmente completamente positivos (\blacktriangle) é a mesma para ambos os operadores. Isto é,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_n(X^*X) - X^*\mathcal{L}_n(X) - \mathcal{L}_n(X^*)X + X^*\mathcal{L}_n(I)X &= \\ \mathcal{K}_n(X^*X) - X^*\mathcal{K}_n(X) - \mathcal{K}_n(X^*)X + X^*\mathcal{K}_n(I)X & \end{aligned}$$

Ainda, $\mathcal{T}_t = e^{t\mathcal{L}} = e^{ct}e^{t(\mathcal{L}-c)} = e^{ct}e^{t\mathcal{K}}$, donde segue que \mathcal{T}_t é completamente positivo se e somente se $e^{t\mathcal{K}}$ é completamente positivo.

Portanto, assumiremos sem perda de generalidade que $\mathcal{L}(I) \leq 0$, o que simplifica (\blacktriangle) para simplesmente

$$\mathcal{L}_n(X^*X) - X^*\mathcal{L}_n(X) - \mathcal{L}_n(X^*)X \geq 0$$

Agora a proposição 3.2.1 terá utilidade. Sabendo que vale $\mathcal{L}_n(A^*) = \mathcal{L}_n(A)^*$, segue que

$$e^{t\mathcal{L}_n}(X^*X) \geq e^{t\mathcal{L}_n}(X^*)e^{t\mathcal{L}_n}(X)$$

Agora note que, como toda matriz positiva $A \in \mathcal{M}_d$ pode ser escrita como $A = X^*X$ para uma certa matriz $X \in \mathcal{M}_d$, temos que

$$e^{t\mathcal{L}_n}(A) \geq e^{t\mathcal{L}_n}(X^*)e^{t\mathcal{L}_n}(X) = e^{t\mathcal{L}_n}(X)^*e^{t\mathcal{L}_n}(X) \geq 0$$

e portanto $\mathcal{T}_{n,t} = e^{t\mathcal{L}_n}$ é uma aplicação positiva, para todo $n \geq 1$. Concluímos que \mathcal{T}_t é completamente positivo. \square

Antes da próxima caracterização, temos de provar um lema bastante técnico.

Lema 3.2.5. *Seja \mathcal{L} um operador condicionalmente completamente positivo em \mathcal{M}_d . Então para todo $n \in \mathbb{N}$, toda coleção $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{M}_d$ e toda coleção $u_1, \dots, u_n \in \mathbb{C}^d$ vale que*

$$\sum_{j=1}^n A_j u_j = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_j) u_j \rangle \geq 0.$$

Demonstração. Esta demonstração sem sombra de dúvidas é a menos intuitiva do texto. Envolve a construção de operadores espertos posicionados de maneira igualmente esperta. Dada a hipótese de que \mathcal{L} é um operador condicionalmente completamente positivo, vamos utilizar a desigualdade em (▲) com o operador $X = \sum_{j=1}^n A_j \otimes E_{1j}$, onde E_{ij} é matriz cuja única entrada não-nula é a da linha i e coluna j , e esta entrada é 1. Já vimos na prop 2.1.2 algumas propriedades úteis, como $E_{i,j} e_l = e_i \delta_{jl}$, $E_{ij}^* = E_{ji}$ e $E_{ik} E_{kj} = E_{ij}$.

Temos $X^* = \sum_{j=1}^n (A_j \otimes E_{1j})^* = \sum_{j=1}^n A_j^* \otimes E_{j1}$. Ainda,

$$X^* X = \sum_{i,j=1}^n (A_i^* \otimes E_{i1})(A_j \otimes E_{1j}) = \sum_{i,j=1}^n (A_i^* A_j) \otimes E_{ij}.$$

Aplicando em (▲) obtemos, para um vetor $u \in \mathbb{C}^n$ que

$$\langle u, (\mathcal{L}_n(X^* X) - X^* \mathcal{L}_n(X) - \mathcal{L}_n(X^*) X + X^* \mathcal{L}_n(I) X) u \rangle \geq 0$$

Vamos trabalhar os termos separadamente. Primeiro, vamos escolher $u = \sum_{k=1}^n u_k \otimes e_k$. Assim,

$$\begin{aligned} \langle u, (\mathcal{L}_n(X^* X) u) \rangle &= \sum_{i,j=1}^n \langle u, (\mathcal{L}(A_i^* A_j) \otimes E_{ij}) u \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, (\mathcal{L}(A_i^* A_j) \otimes E_{ij}) u_l \otimes e_l \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, \mathcal{L}(A_i^* A_j) u_l \otimes E_{ij} e_l \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k, (\mathcal{L}(A_i^* A_j) u_l) \rangle \cdot \langle e_k, E_{ij} e_l \rangle \end{aligned}$$

Mas $\langle e_k, E_{ij}e_l \rangle = \langle e_k, e_i\delta_{jl} \rangle = \delta_{jl}\delta_{ki}$. De modo que as parcelas não-nulas dos somatórios se resumem a quando $j = l$ e $i = k$. Isto é,

$$\langle u, (\mathcal{L}_n(X^*X)u) \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, (\mathcal{L}(A_i^*A_j)u_j) \rangle$$

A próxima parcela é

$$\begin{aligned} \langle u, -X^*\mathcal{L}_n(X)u \rangle &= \sum_{i,j=1}^n \langle u, (A_i^* \otimes E_{i1})(\mathcal{L}(A_j) \otimes E_{1j})u \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, (A_i^* \mathcal{L}(A_j) \otimes E_{ij})u_l \otimes e_l \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, A_i^* \mathcal{L}(A_j)u_l \otimes E_{ij}e_l \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k, A_i^* \mathcal{L}(A_j)u_l \rangle \cdot \langle e_k, E_{ij}e_l \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, A_i^* \mathcal{L}(A_j)u_j \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle A_i u_i, \mathcal{L}(A_j)u_j \rangle \\ &= \sum_{j=1}^n \langle \sum_{i=1}^n A_i u_i, \mathcal{L}(A_j)u_j \rangle = \sum_{j=1}^n \langle 0, \mathcal{L}(A_j)u_j \rangle = 0 \end{aligned}$$

(Lembre da hipótese!).

A seguir vem

$$\begin{aligned} \langle u, -\mathcal{L}_n(X^*)Xu \rangle &= \sum_{i,j=1}^n \langle u, \mathcal{L}(A_i^* \otimes E_{i1})(A_j \otimes E_{1j})u \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, (\mathcal{L}(A_i^*)A_j \otimes E_{ij})u_l \otimes e_l \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, \mathcal{L}(A_i^*)A_j u_l \otimes E_{ij}e_l \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k, \mathcal{L}(A_i^*) A_j u_l \rangle \cdot \langle e_k, E_{ij} e_l \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^*) A_j u_j \rangle = 0
\end{aligned}$$

Por fim,

$$\begin{aligned}
\langle u, X^* \mathcal{L}_n(I) X u \rangle &= \sum_{i,j=1}^n \langle u, (A_i^* \otimes E_{i1}) (\mathcal{L}(I) \otimes I) (A_j \otimes E_{1j}) u \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \langle u, (A_i^* \mathcal{L}(I) A_j \otimes E_{ij}) u \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, (A_i^* \mathcal{L}(I) A_j \otimes E_{ij}) u_l \otimes e_l \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, (A_i^* \mathcal{L}(I) A_j \otimes E_{ij}) u_l \otimes e_l \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k \otimes e_k, A_i^* \mathcal{L}(I) A_j u_l \otimes E_{ij} e_l \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^n \langle u_k, A_i^* \mathcal{L}(I) A_j u_l \rangle \cdot \langle e_k, E_{ij} e_l \rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, A_i^* \mathcal{L}(I) A_j u_j \rangle = 0
\end{aligned}$$

Ou seja, de

$$\langle u, (\mathcal{L}_n(X^* X) - X^* \mathcal{L}_n(X) - \mathcal{L}_n(X^*) X + X^* \mathcal{L}_n(I) X) u \rangle \geq 0$$

obtemos

$$\sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_j) u_j \rangle \geq 0.$$

□

Estamos prontos para a seguinte caracterização.

Teorema 3.2.6. *Um operador $\mathcal{L} : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ que satisfaz $\mathcal{L}(A^*) = \mathcal{L}(A)^*$ é condicionalmente completamente positivo se e somente se existirem uma aplicação completamente positiva $\Psi : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ e uma matriz $G \in \mathcal{M}_d$ tal que*

$$\mathcal{L}(A) = \Psi(A) + G^*A + AG,$$

para toda $A \in \mathcal{M}_d$. Além disso, G satisfaz

$$G + G^* = \mathcal{L}(I) - \Psi(I) \leq \mathcal{L}(I).$$

Corolário 3.2.7. *Um semigrupo uniformemente contínuo $\mathcal{T}_t, t \geq 0$, é semigrupo dinâmico quântico, se e somente se, seu gerador infinitesimal \mathcal{L} é da forma*

$$\mathcal{L}(A) = \Psi(A) + G^*A + AG, \quad (3.6)$$

para alguma aplicação completamente positiva $\Psi : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ e uma matriz $G \in \mathcal{M}_d$.

Conforme Proposição 3.1.13 o semigrupo $\mathcal{T}_t, t \geq 0$, será Markoviano quando

$$\mathcal{L}(I_d) = \Psi(I_d) + G^* + G = 0. \quad (3.7)$$

Demonstração. Vamos começar pela demonstração da volta da equivalência. Seja $\mathcal{L} : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ um operador da forma

$$\mathcal{L}(A) = \Psi(A) + G^*A + AG$$

com Ψ uma aplicação completamente positiva em \mathcal{M}_d e G uma matriz em \mathcal{M}_d . Defina $G_n = G \otimes I_n \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$. Com isso, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_n(A \otimes B) &= \Psi(A) \otimes B + G^*A \otimes B + AG \otimes B \\ &= \Psi_n(A \otimes B) + (G^* \otimes I_n)(A \otimes B) + (A \otimes B)(G \otimes I_n) \\ &= \Psi_n(A \otimes B) + G_n^*(A \otimes B) + (A \otimes B)G_n \end{aligned}$$

Isto vale para todos $A \in \mathcal{M}_d, B \in \mathcal{M}_n$. Como os elementos da forma $E_{ij} \otimes E_{kl}$ geram o espaço $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_n$, estendemos linearmente para obter

$$\mathcal{L}_n(X) = \Psi_n(X) + G_n^* X + X G_n$$

Então, para verificar a condição (\blacktriangle) de ser condicionalmente completamente positivo, computamos

$$\begin{aligned} & \mathcal{L}_n(X^* X) - X^* \mathcal{L}_n(X) - \mathcal{L}_n(X^*) X + X^* \mathcal{L}_n(I) X \\ &= [\Psi_n(X^* X) + G^*(X^* X) + (X^* X)G] - X^*[\Psi_n(X) + G^* X + XG] \\ & \quad - [\Psi_n(X^*) + G^* X^* + X^* G] X + X^*[\Psi_n(I) + G^* I + IG] X \\ &= \Psi_n(X^* X) - X^* \Psi_n(X) - \Psi_n(X^*) X + X^* \Psi_n(I) X \end{aligned}$$

Ou seja, \mathcal{L} é condicionalmente completamente positivo se e somente se Ψ o for. Contudo, como vimos no exemplo 3.1.17, Ψ completamente positiva nos leva a $e^{t\Psi}$ completamente positiva. Ou seja, $\mathcal{T}_t = e^{t\Psi}$ é semigrupo dinâmico quântico, com gerador infinitesimal Ψ . Segundo a proposição 3.2.4, segue que Ψ é condicionalmente completamente positivo. Com isso, \mathcal{L} também é condicionalmente completamente positivo.

Para a outra direção, vamos precisar introduzir notação. Considere vetores $u, v, w \in \mathbb{C}^d$ e a aplicação $|u\rangle\langle v| : \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$ agindo por

$$(|u\rangle\langle v|)w = \langle w, v\rangle u$$

Vamos explorar algumas propriedades deste operador:

Propriedade 1. $|u\rangle\langle v|$ é linear. De fato,

$$\begin{aligned} (|u\rangle\langle v|)(\alpha w + z) &= \langle \alpha w + z, v\rangle u = \alpha \langle w, v\rangle u + \langle z, v\rangle u \\ &= \alpha(|u\rangle\langle v|)w + (|u\rangle\langle v|)z \end{aligned}$$

Propriedade 2. $|\alpha u + v\rangle\langle w| = \alpha|u\rangle\langle w| + |v\rangle\langle w|$. Para todo $z \in \mathbb{C}^d$, temos

$$\begin{aligned} (|\alpha u + v\rangle\langle w|)z &= \langle z, w\rangle(\alpha u + v) = \alpha \langle z, w\rangle u + \langle z, w\rangle v \\ &= \alpha(|u\rangle\langle w|)z + (|v\rangle\langle w|)z. \end{aligned}$$

Propriedade 3. Se $u = (u_1, \dots, u_d)$ e $v = (v_1, \dots, v_d)$, a matriz que representa $|u\rangle\langle v|$ nas bases canônicas é $A = (a_{ij}) \in \mathcal{M}_d$ com $a_{ij} = u_i \bar{v}_j$. Note que

$$(Aw)_k = \sum_{i=1}^d a_{ki} w_i = \sum_{i=1}^d u_k \bar{v}_i w_i = u_k \sum_{i=1}^d \bar{v}_i w_i = u_k \langle w, v \rangle$$

Logo, $Aw = \langle w, v \rangle u = (|u\rangle\langle v|)w$.

Propriedade 4. Para toda $A \in \mathcal{M}_d$, $A|u\rangle\langle v| = |Au\rangle\langle v|$. De fato,

$$(A|u\rangle\langle v|)w = A(\langle w, v \rangle u) = \langle w, v \rangle Au = (|Au\rangle\langle v|)w$$

Propriedade 5. A adjunta de $|u\rangle\langle v|$ é $|v\rangle\langle u|$. De fato, $A^* = (\overline{a_{ji}}) = (\overline{u_j \bar{v}_i}) = (\bar{u}_j v_i)$. Segue que $A^* = (v_i \bar{u}_j) = |v\rangle\langle u|$.

Observação. Para quem conhece a notação de braket (ou notação de Dirac), esta é uma notação do mesmo tipo, porém adaptada para os devidos fins.

Dito isto, vamos supor que \mathcal{L} é condicionalmente completamente positivo. A ideia aqui é usar o lema 3.2.5 e o teorema 2.2.4 para encontrar uma aplicação completamente positiva. Para podermos usar o teorema, vamos considerar $n \geq 1$ e coleções A_1, \dots, A_n de matrizes em \mathcal{M}_d e de vetores $u_1, \dots, u_n \in \mathbb{C}^d$. Para encaixar no lema, seja $e \in \mathbb{C}^d$ um vetor unitário e:

$$u_{n+1} := e \in \mathbb{C}^d, \quad v := -\sum_{j=1}^n A_j u_j \in \mathbb{C}^d \quad e \quad A_{n+1} := |v\rangle\langle e| \in \mathcal{M}_d$$

Então

$$\sum_{j=1}^{n+1} A_j u_j = \sum_{j=1}^n A_j u_j + |v\rangle\langle e| e = -v + \langle e, e \rangle v = 0$$

Segundo o lema 3.2.5, vale que

$$\sum_{i,j=1}^{n+1} \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_j) u_j \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_j) u_j \rangle + \sum_{i=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_{n+1}) e \rangle$$

$$+ \sum_{j=1}^n \langle e, \mathcal{L}(A_{n+1}^* A_j) u_j \rangle + \langle e, \mathcal{L}(A_{n+1}^* A_{n+1}) e \rangle \geq 0$$

Veja que

$$\begin{aligned} A_{n+1}^* A_{n+1} w &= (|e\rangle\langle v|)(|v\rangle\langle e|)(w) = (|e\rangle\langle v|)(\langle w, e\rangle v) \\ &= \langle w, e\rangle (|e\rangle\langle v|)v = \langle w, e\rangle \langle v, v\rangle e = \|v\|^2 \langle w, e\rangle e = \|v\|^2 |e\rangle\langle e| w \\ &\therefore A_{n+1}^* A_{n+1} = \|v\|^2 |e\rangle\langle e| \end{aligned}$$

Defina então $2C = \langle e, \mathcal{L}(|e\rangle\langle e|)e \rangle$ para obter

$$\begin{aligned} \langle e, \mathcal{L}(A_{n+1}^* A_{n+1})e \rangle &= 2C \|v\|^2 = 2C \langle v, v \rangle \\ &= 2C \sum_{i,j=1}^n \langle -A_i u_i, v \rangle = -2C \sum_{i=1}^n \langle u_i, A_i^* v \rangle \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$2C \langle v, v \rangle = -2C \sum_{j=1}^n \langle v, A_j u_j \rangle = -2C \sum_{j=1}^n \langle A_j^* v, u_j \rangle$$

Enfim,

$$2C \langle v, v \rangle = -C \sum_{i=1}^n \langle u_i, A_i^* v \rangle - C \sum_{j=1}^n \langle A_j^* v, u_j \rangle$$

Chegamos a

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_j) u_j \rangle + \sum_{i=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_{n+1}) e \rangle + \sum_{j=1}^n \langle e, \mathcal{L}[(A_j^* A_{n+1})^*] u_j \rangle \\ - C \sum_{i=1}^n \langle u_i, A_i^* v \rangle - C \sum_{j=1}^n \langle A_j^* v, u_j \rangle \geq 0 \quad (\star) \end{aligned}$$

Usando que $\mathcal{L}(A^*) = \mathcal{L}(A)^*$, reescrevemos

$$\langle e, \mathcal{L}[(A_j^* A_{n+1})^*] u_j \rangle = \langle e, \mathcal{L}(A_j^* A_{n+1})^* u_j \rangle = \langle \mathcal{L}(A_j^* A_{n+1}) e, u_j \rangle$$

Segue

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_j) u_j \rangle + \sum_{i=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_{n+1}) e \rangle + \sum_{j=1}^n \langle \mathcal{L}(A_j^* A_{n+1}) e, u_j \rangle \\ - C \sum_{i=1}^n \langle u_i, A_i^* v \rangle - C \sum_{j=1}^n \langle A_j^* v, u_j \rangle \geq 0. \end{aligned}$$

Agrupamos:

$$\sum_{i=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_{n+1}) e \rangle - C \sum_{i=1}^n \langle u_i, A_i^* v \rangle = \sum_{i=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_{n+1}) e - C A_i^* v \rangle.$$

Usando $A_i^* A_{n+1} = A_i^* |v\rangle\langle e| = |A_i^* v\rangle\langle e|$, obtemos

$$\sum_{i=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_{n+1}) e - C A_i^* v \rangle = \sum_{i=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(|A_i^* v\rangle\langle e|) e - C A_i^* v \rangle.$$

Agora aparece a matriz que desejamos. Defina:

$$G^* u = \mathcal{L}(|u\rangle\langle e|) e - C \cdot u.$$

Afirmação: G é linear. De fato, como \mathcal{L} é linear e $|u\rangle\langle e|$ é linear em u , segue que G é linear. Então:

$$\sum_{i=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(|A_i^* v\rangle\langle e|) e - C A_i^* v \rangle = \sum_{i=1}^n \langle u_i, G^*(A_i^* v) \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, G^* A_i^* A_j u_j \rangle.$$

Analogamente,

$$\sum_{j=1}^n \langle \mathcal{L}(A_j^* A_{n+1}) e, u_j \rangle - C \sum_{j=1}^n \langle A_j^* v, u_j \rangle = \sum_{j=1}^n \langle \mathcal{L}(A_j^* A_{n+1}) e - C A_j^* v, u_j \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=1}^n \langle \mathcal{L}(|A_j^* v\rangle \langle e|)e - CA_j^* v, u_j \rangle = \sum_{j=1}^n \langle G^* A_j^* v, u_j \rangle = \sum_{j=1}^n \langle A_j^* v, Gu_j \rangle \\
&= \sum_{j=1}^n \langle v, A_j Gu_j \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle A_i u_i, A_j Gu_j \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, A_i^* A_j Gu_j \rangle.
\end{aligned}$$

Finalmente, (\star) é reescrita como

$$\begin{aligned}
&\sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \mathcal{L}(A_i^* A_j) u_j \rangle + \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, G^* A_i^* A_j u_j \rangle + \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, A_i^* A_j G u_j \rangle \geq 0 \\
&\Leftrightarrow \sum_{i,j=1}^n \langle u_i, [\mathcal{L}(A_i^* A_j) + G^* A_i^* A_j + A_i^* A_j G] u_j \rangle \geq 0.
\end{aligned}$$

Basta agora denotar $\Psi(A) = \mathcal{L}(A) + G^* A + AG$ e notar que a última expressão se revela como

$$\sum_{i,j=1}^n \langle u_i, \Psi(A_i^* A_j) u_j \rangle \geq 0.$$

Note que esta expressão é exatamente aquela da proposição 2.2.4 e ainda, as matrizes A_1, \dots, A_n e os vetores u_1, \dots, u_n eram quaisquer. Concluímos então que Ψ é completamente positiva e \mathcal{L} tem a expressão desejada, com Ψ completamente positiva e $G \in \mathcal{M}_d$. □

Para o corolário, veja que os teoremas desta seção apresentam as seguintes equivalências:

$$\mathcal{T}_t \text{ é } e^{t\mathcal{L}} \text{ é CP} \Leftrightarrow \mathcal{L} \text{ é CCP e } \mathcal{L}(A^*) = \mathcal{L}(A)^* \Leftrightarrow \mathcal{L}(A) = \Psi(A) + G^* A + AG,$$

onde CP abrevia completamente positivo e CCP abrevia condicionalmente completamente positivo.

3.3 Considerações físicas sobre o operador \mathcal{L} de Lindblad

Vamos apresentar a seguir uma breve justificativa (em termos da Física) do interesse no estudo do sistema a tempo contínuo descrito pelo operador gerador infinitesimal \mathcal{L} na forma aqui considerada. Referimos o leitor a [8] para uma análise mais completa do assunto.

É instrutivo entender em um exemplo (que trata da interação de um subsistema de dimensão finita e um reservatório) o que significa a expressão (3.3).

Considere um Hamiltoniano completo (subsistema de dimensão finita e reservatório) e que é dado por $H = H_S + H_R + H_{SR}$.

O operador de Lindblad \mathcal{L} é o operador responsável pela interação entre o subsistema de dimensão finita (representado pela matriz densidade reduzida na representação de interação

$$\tilde{\rho} = e^{i\hbar(H_S+H_R)t} \rho e^{-i\hbar(H_S+H_R)t},$$

que é o traço parcial sobre R (reservatório) da matriz densidade completa) e o reservatório.

A forma de equação mestra na forma Lindbladiana aqui considerada (descrita por \mathcal{L}) é resultado de uma série de hipóteses naturais do ponto de vista da Física (ver [8]) envolvendo as interações entre o subsistema analisado e o reservatório:

i) no instante inicial $t = 0$ não há correlação entre o subsistema e o reservatório. Isto implica na fatoração da matriz densidade completa na forma $\rho(0)\rho_R(0)$.

ii) aproximação de Born. O reservatório é considerado como um sistema muito maior do que o subsistema de dimensão finita e a interação entre eles é fraca o suficiente para admitir que os auto-estados do reservatório são constantes ao longo do tempo, ou seja, a matriz densidade completa é fatorada na forma $\rho(t)\rho_{R,0}$.

iii) aproximação de Born-Markov. Hipótese de que a derivada no tempo da matriz densidade depende apenas do instante presente $t \geq 0$.

iv) rápido decaimento das correlações no Hamiltoniano H_{SR} . Admitindo um Hamiltoniano da forma $H_{SR} = \sum_i \gamma_i \Gamma_i$, onde γ_i são operadores que agem sobre o subsistema e Γ_i operadores que agem sobre o reservatório, e tais que tem o valor esperado $tr(\Gamma_i(t)\Gamma_j(t')\rho_{R,0}) = \delta(t - t')$.

Uma representação alternativa para a transformação $\mathcal{L} : \mathcal{M}_d \rightarrow \mathcal{M}_d$ seria

$$A \rightarrow \mathcal{L}(A) = i[A, H] + \frac{1}{2} \sum_j [L_j, AL_j^*] + [L_j A, L_j^*],$$

onde L_j são matrizes quaisquer em \mathcal{M}_d (ver [21]).

Referências Bibliográficas

- [1] R. Alicki, M. Fannes. *Quantum Dynamical Systems*. Oxford University Press, 2000.
- [2] S. Attal, A. Joye and C.-A. Pillet, *Open Quantum Systems I - The Hamiltonian Approach*. Springer-Verlag, 2006.
- [3] A. Baraviera, R. Exel and A. Lopes, *A Ruelle Operator for continuous time Markov chains*. São Paulo Journal of Mathematical Sciences, Volume 4 , n. 1, pages 1-16, 2010.
- [4] F. Benatti. *Dynamics, Information and Complexity in Quantum Systems*. Springer Verlag, 2009.
- [5] R. Bhatia, *Positive Definite Matrices*. Princeton University Press, 2007.
- [6] L. B. Borsato, *Operador de Ruelle para Cadeias de Markov a Tempo Contínuo*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2018.
- [7] O. Bratteli and D. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics I*. Springer-Verlag, 1979.
- [8] H-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford Univ. Press, 2002
- [9] H. Bringuier. *Central Limit Theorem and Large Deviation Principle for Continuous Time Open Quantum Walks*. Annales Henri Poincaré 18, 2017.
- [10] M.-H. Chang, *Quantum Stochastics*. Cambridge University Press, 2015.

- [11] M.-H. Chang. *Recurrence and Transience of Quantum Markov Semigroups*. Probability Surveys Vol. 11 (2014) 1-82. ISSN: 1549-5787.
- [12] C. Doering and A. Lopes, *Equações Diferenciais Ordinárias*. 6. ed. IMPA, 2016.
- [13] D. E. Evans, *Quantum Symmetries on Operator Algebras*. Oxford Press, 1998.
- [14] D. E. Evans and R. Hoegh-Krohn, *Spectral Properties of Positive Maps on C^* -Algebras*. Journal of the London Mathematical Society, 17, pp. 345–355, 1978.
- [15] F. Fagnola, R. Rebolledo. *Notes on the Qualitative Behaviour of Quantum Markov Semigroups*. In: S. Attal, A. Joye, C.-A. Pillet (eds.) Open Quantum Systems III - Recent Developments. Lecture Notes in Mathematics 1882 pp. 161-206.
- [16] V. Gorini, A. Kossakowski and E. C. G. Sudarshan, *Completely positive dynamical semigroups of N -level systems*. Journal of Mathematical Physics 17, p. 821, 1976.
- [17] P. R. Halmos, *Finite-dimensional vector spaces*. Springer-Verlag, 1974.
- [18] F. Hiai and D. Petz, *Introduction to Matrix Analysis and Applications*. Springer-Verlag, 2014.
- [19] M. Kac, *Integration in function spaces and some of its applications*. Accademia Nazionale dei Lincei, Pisa, 1980
- [20] K. Kraus, *General state changes in quantum theory*. Annals of Physics, Volume 64, Issue 2, p. 311-335, 1970.
- [21] C. F. Lardizabal, *Open quantum semigroups, Markov chains and related questions, notas - UFRGS* (2018)
- [22] E. Lima, *Álgebra Linear, Proj. Euclides*, IMPA (2018)
- [23] G. Lindblad, *On the generators of quantum dynamical semigroups*. Royal Institute of Technology, 1976.

- [24] A. O. Lopes, A. Neumann and Ph. Thieullen, *A thermodynamic formalism for continuous time Markov chains with values on the Bernoulli Space: entropy, pressure and large deviations*, Journal of Statistical Physics, Volume 152, Issue 5, pages 894-933, 2013.
- [25] A. O. Lopes, *Introdução à Matemática da Mecânica Quântica*. Notas de aula, 2018. Acesso livre em <http://mat.ufrgs.br/~alopes/hom/livroquantum.pdf>
- [26] C. Pellegrini, *Continuous Time Open Quantum Random Walks and Non-Markovian Lindblad Master Equations*. Journal of Statistical Physics, Volume 154, Issue 3, pages 838–865, 2014.
- [27] D. Petz, *Quantum Information Theory and Quantum Statistics*. Springer-Verlag, 2008.
- [28] R. Rebolledo. *Complete Positivity and the Markov structure of Open Quantum Systems*. In: S. Attal, A. Joye, C.-A. Pillet (eds.) Open Quantum Systems II. Lecture Notes in Mathematics 1882 pp. 161-206.
- [29] I. Sinayskiy, F. Petruccione. *Microscopic derivation of open quantum walks*. Phys. Rev. A 92, 032105 (2015).
- [30] D.W. Stroock. *An Introduction to the Theory of Large Deviations*. Springer-Verlag, 1984.
- [31] M. Takesaki. *Theory of Operator Algebras I*. Springer-Verlag, 1979.
- [32] M. Wolf, J. I. Cirac. *Dividing quantum channels*. Commun. Math. Phys. 279, 147-168 (2008).
- [33] M. M. Wolf, *Quantum Channels & Operations - Guided Tour*. 2010. Acesso livre em <https://www-m5.ma.tum.de/foswiki/pub/M5/Allgemeines/MichaelWolf/QChannelLecture.pdf>