通过柯尔莫哥洛夫一致性评估经典性中的非马尔可夫性与热力学特征

ArghyaMaity[1], Ahana Ghoshal[2], Kelvin Onggadinata[1], Teck Seng Koh[1†] 新加坡南洋理工大学物理与数学科学学院，新加坡 *637371*，*21 Nanyang Link*[2] 德国锡根大学自然科学与工程学院，*Walter-Flex-Straße 3*，*57068* 锡根

柯尔莫哥洛夫一致性条件（KCC）界定了经典动力学与量子动力学之间的统计边界。违反该条件意味着时间关联的经典马尔可夫描述失效。在本研究中，我们建立了KCC违背与开放量子动力学中的非马尔可夫性之间的直接解析联系，揭示记忆效应如何表现为对经典概率一致性的偏离。在一般的双能级开放量子系统框架下，我们定量建立了KCC违背幅度与若干关键信息论及热力学量之间的联系，例如互信息、法诺因子、热交换和熵产生率，从而能够以热力学视角诠释时间量子关联。此外，我们揭示了KCC违背、Leggett–Garg不等式与Kirkwood–Dirac准概率分布的负性之间的形式对应关系，并将它们确定为时间量子非经典性的互补判据。因此，我们的结果为关联开放量子系统中量子性的量子信息论、热力学和时间指标提供了统一框架。

arXiv:2601.01122v1 [quant-ph] 3 Jan 2026

一、引言

理解经典动力学与量子动力学之间的边界，仍是物理学中的一项核心挑战 [1–6]。区分真正的量子行为与经典随机演化，对于揭示动力学过程的基本性质以及推动量子技术的发展至关重要；在量子技术中，相干性、噪声和记忆效应决定着实际应用的极限。

人们已经发展出多种理论框架，以解释经典性如何从量子力学中涌现 [7–29]。其中，开放量子系统视角 [7–10, 24]将经典行为归因于退相干，即由于环境耦合，优选（指针）基中的相干性迅速受到抑制 [7–10, 24, 30, 31]。经过短暂的退相干时间后，系统的约化态在该基下实际上变为对角态，从而产生类经典统计。然而，单靠退相干并不能确保多时刻概率满足经典一致性关系；即便相干性消失，测量反作用以及残余的系统—环境关联仍可能导致经典随机性的违背 [24]。这一观察适用于关于经典性涌现的各种不同理论方法。尤其是，由于开放量子系统中的退相干不足以确保柯尔莫哥洛夫一致性，因此它同样无法解释退相干历史框架中的经典性 [11, 12]，；该框架通过整个量子事件序列的一致性来刻画经典行为。有趣的是，额外假设马尔可夫性，便足以确立开放系统中的退相干会导向退相干历史 [24]。

柯尔莫哥洛夫一致性条件（KCC） [30,32], 对经典行为提出了更严格的要求：对中间变量进行边缘化时，多时刻概率分布必须保持相互一致。任何违反 KCC 的情况都表明不存在潜在的经典随机过程，因此意味着存在非经典演化。在量子系统中，这类违反自然源于相干性、记忆效应或环境反馈，因此 KCC 是识别非经典性的有力操作工具。当动力学变为非马尔可夫时，记忆效应和信息回流可能导致违反柯尔莫哥洛夫一致性条件，从而揭示经典概率结构的崩塌。

在马尔可夫区间内，动力学没有记忆，且独立于过去的干预，因此 KCC 自动得到满足。事实上，对于马尔可夫量子过程，柯尔莫哥洛夫一致性与动力学相干性之间的一一对应关系已得到确立 [15]。这一认识已部分拓展至非马尔可夫领域——在该领域中会出现信息回流和记忆效应 [18]。然而，由于非马尔可夫性可能以多种形式呈现，也可以通过多种方法加以刻画，因此探索其不同方面，以获得新的、具有物理意义的认识，仍然十分重要。在现实情境中，大多数量子系统都以非马尔可夫方式演化，因此有必要确定在何种条件下仍能产生一致且有效地呈现经典性的统计结果。有趣的是，近期研究表明，即使没有显式退相干，也可能出现类似经典的行为。孤立的多体系统即使具有高度相干性，也可能由于非可积性和混沌而呈现有效的经典统计特性，因为它们会抑制粗粒化慢观测量中的可观测量子效应 [13, 14, 21]。这些结果表明，退相干与动力学复杂性都促成了经典性的涌现，而非马尔可夫记忆则为其瓦解带来了新的途径。

在开放量子系统中，信息回流、时间关联以及由记忆效应引发的相干性复兴等非经典特征发挥着至关重要的作用。理解这些效应有助于洞察信息与热力学之间的相互作用——将KCC违背与熵产生、热流和不可逆性等量联系起来。建立KCC违背程度与这些热力学观测量之间的定量联系，可以揭示量子演化的信息论层面与能量层面如何交织在一起。

在这项工作中，我们采用精确的主方程方法，对柯尔莫哥洛夫一致性条件（KCC）的违背进行解析评估，揭示开放量子系统中的经典性如何失效，以及在何种条件下这种失效会加剧。解析结果表明，KCC违背程度取决于正衰减率与负衰减率之间的相互作用，由此将开放量子动力学的三个基本方面——哈密顿演化、耗散和记忆效应——联系起来。我们表明，KCC违背的出现可作为非马尔可夫演化所诱发的非经典随机行为的一种操作性指标。此外，我们还确立了KCC违背与标准非马尔可夫性度量之间的明确联系，例如RHP（CP可分性）[33, 34]和BLP（信息回流）[35–37]度量。特别是，KCC违背会在正衰减率的作用下呈指数抑制，而负衰减率区间——它们既导致RHP不可分性，也导致BLP复兴——则充当放大通道。

我们进一步研究KCC违背与信息论及热力学量之间的对应关系，包括互信息、热流和熵产生。为阐明其物理意义，我们探讨这种时间非经典性是否与热力学不可逆性相关。在某些条件下，我们表明，交换热量和熵产生率可作为KCC违背的热力学见证。总体而言，我们的分析提供了一个统一框架，将信息动力学、热力学与非马尔可夫记忆效应联系起来，用于表征量子时间关联。

理解时间非经典性的另一种基本视角来自Leggett–Garg不等式（LGIs）[38, 39], ，它检验宏观实在论——即系统在任何时刻都具有确定属性，且这些属性独立于测量这一假设。柯尔莫哥洛夫一致性条件（KCC）包含一个密切相关的概念，它要求不同时刻的联合概率与其边缘分布保持一致。由于LGIs和KCC均源于时间实在论与非侵入性这两项相同的经典假设，任何满足KCC的动力学也必然满足LGIs [40, 41]。因此，违反任一条件都意味着偏离经典随机描述，并揭示出真实的量子时间关联。更广泛地说，Kirkwood–Dirac准分布为序贯量子测量提供了互补视角，其负性可直接刻画非经典干涉效应 [42, 43]。在这项工作中，我们在一个耗散量子比特模型中建立了KCC违背程度、KD负性与LGI违背之间的明确关系。我们的结果表明，这些时间量子性的不同表现具有共同的物理起源：由与暂时为负的衰减率相关的非马尔可夫记忆效应所驱动的相干性复兴。

本文其余部分的组织如下。在第II节中，我们介绍柯尔莫哥洛夫一致性及其违背的数学表述。随后，我们给出用于研究非马尔可夫动力学的III节内容；接着在第IV 和V节介绍两个具体模型，以便以清晰易懂的方式获得解析和数值结果。在第VI 和VII节中，我们将柯尔莫哥洛夫一致性违背与两种非马尔可夫性度量联系起来，即RHP度量和BLP度量。我们进一步考察其与信息论和热力学量之间的对应关系，包括第VIII节中的互信息，以及第X节中的热流和熵产生。在第IX节中，我们将柯尔莫哥洛夫一致性违背与Fano因子联系起来。最后，在第XI 和XII节中，我们讨论其与Leggett–Garg不等式以及Kirkwood–Dirac准概率分布负性之间的形式联系，并在第XIII节总结全文。

II. 柯尔莫哥洛夫一致性及其违背

柯尔莫哥洛夫扩张定理保证了：当多时刻联合概率分布族满足柯尔莫哥洛夫一致性条件时，一个定义良好的经典随机过程必然存在。对于在时刻 $t_1' < t_2' < \ldots < t_n'$ 的一系列 n 测量结果 x_1，x_2、……、x_n，该条件要求对任意变量子集进行边缘化后，得到其余结果的正确联合概率。具体而言，对于任意 $k \leq n$，

$$\sum_{x_k} P(x_n, \ldots, x_{k+1}, x_k, x_{k-1}, \ldots, x_1) = P(x_n, \ldots, x_{k+1}, x_{k-1}, \ldots, x_1). \tag{1}$$

任何偏离柯尔莫哥洛夫一致性条件的情况都表明存在 KCC违背。为简单起见，可以考虑两时刻情形（t_1'，t_2'），其违背程度量化为

$$\mathrm{viol}_{x_2}(t_1', t_2') = \left| \sum_{x_1} P(x_2, x_1) - P(x_2) \right|. \tag{2}$$

这里，$P(x_2, x_1)$ 表示在时刻 t_1' 获得测量结果 x_1 、并在时刻 t_2' 获得 x_2 的联合概率，而$P(x_2)$表示在时刻 t_1' 未进行先前测量时，于 t_2' 时得到结果 x_2 的单时刻概率。非零值 $\mathrm{viol}_{x_2}(t_1', t_2') > 0$ 表明经典随机描述遭到破坏。对于两时刻概率，原则上存在两个可能的边缘一致性条件。然而，对较晚时刻结果 x_2 进行边缘化会平凡地重现 t_1' 时的统计结果，而对较早时刻结果 x_1 进行边缘化则提供了一个非平凡的测量诱导扰动检验。因此，我们将注意力限制在后者上，如公式 2 所示。经典演化隐含地假设存在一个稳定的指针基，在该基下，测量不会扰动动力学，且联合概率保持定义良好。退相干通过抑制量子相干性，自然地选择这样的基，从而确保满足柯尔莫哥洛夫一致性条件。

相比之下，在非马尔可夫动力学中，信息可以从环境回流至系统，从而导致偏离经典随机行为。这种偏离

可以通过KCC违背来捕捉。在双时刻情形下，这可表示为 $\sum_{x_1} P(x_2,\ x_1) \neq P(x_2)$，这凸显了经典随机性的崩解。本文聚焦于时间局域主方程出现负衰减率时产生的非马尔可夫动力学，并旨在建立KCC违背与非马尔可夫性之间的直接联系。

III. 具有负衰减速率的时间局域主方程

我们考虑一个初始态为 $\rho(0)$ 的量子系统，该系统在系统哈密顿量 $H_{\rm sys}$ 的作用下演化，并与外部储库耦合。在演化开始时，假设储库处于由 $\rho_R = \frac{e^{-\beta' H_R}}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta' H_R}\right)}$ 给出的热平衡态，其中 H_R 是储库的局域哈密顿量，$\beta' = 1/k_B T$ 是储库的逆温度，k_B 为玻尔兹曼常数。此外，在初始时刻，假设系统与储库之间不存在关联，因此联合系统–浴态可以表示为直积 $\rho_{sR}(0) = \rho(0) \otimes \rho_R$。基于这些初始假设，系统的动力学可由精确的时间局域主方程给出

$$\frac{d\rho(t')}{dt'} = -\frac{i}{\hbar}\left[H_{\rm sys}, \rho(t')\right] + \mathcal{D}[\rho(t')], \tag{3}$$

其中第一项描述系统的幺正演化，而 $\mathcal{D}[\rho(t')]$表示耗散子，它涵盖了系统与储库相互作用所引起的耗散和涨落效应。耗散子的形式为

$$\mathcal{D}[\rho(t')] = \sum_{\varepsilon \geq 0} \Gamma'_\varepsilon(t')\, L_{A(\varepsilon)}[\rho(t')] + \widetilde{\gamma}'_\varepsilon(t')\, L_{A^\dagger(\varepsilon)}[\rho(t')], \tag{4}$$

with

$$L_{A(\varepsilon)}[\rho(t')] = A(\varepsilon)\rho(t')A^\dagger(\varepsilon) - \tfrac{1}{2}\{A^\dagger(\varepsilon)A(\varepsilon), \rho(t')\}, \tag{5}$$

其中 $A(\varepsilon)$ 是与能量相差 $\hbar\varepsilon$的能量本征态之间跃迁相关的跃迁算符。 $\Gamma'_\varepsilon(t')$ 和 $\widetilde{\gamma}'_\varepsilon(t')$ 是时变衰减率，由储库的谱性质及其相关函数决定。当速率 $\Gamma_\varepsilon(t)$ 和 $\widetilde{\gamma}_\varepsilon(t)$ 始终为正时，动力学是马尔可夫的且完全正。然而，当这些速率暂时变为负值时，动力学变为非马尔可夫的，这表明信息从环境回流至系统。

在弱系统–储库耦合条件下，并保留系统–储库耦合强度的二阶项，衰减率近似为 [44, 45]

$$\begin{aligned}
\gamma'_\varepsilon(t') &\approx \int_0^{t'} ds \int \tfrac{d\omega'}{2\pi}\, \mathcal{J}(\omega') \cos[(\omega' - \varepsilon)(t' - s)], \\
\widetilde{\gamma}_\varepsilon(t') &\approx 2\int_0^{t'} ds \int \tfrac{d\omega'}{2\pi}\, \mathcal{J}(\omega') n(\omega') \cos[(\omega' - \varepsilon)(t' - s)],
\end{aligned} \tag{6}$$

其中 $\Gamma'_\varepsilon(t') = 2\gamma_\varepsilon(t') \mp \widetilde{\gamma}_\varepsilon(t')$ 和 $n(\omega') = [e^{\beta'\hbar\omega'} \mp 1]^{-1}$，上（下）号分别对应玻色子（费米子）储库。

IV. 模型

我们考虑一个由哈密顿量描述的单量子比特系统

$$H_{\rm sys} = \frac{\hbar}{2}\omega_0 \sigma_z, \tag{7}$$

其中 ω_0 是量子比特跃迁频率，σ_z 是泡利-z矩阵。系统与一个由以下哈密顿量描述的玻色储库相耦合

$$H_R = \hbar\omega'_c \int_0^\infty d\omega' a^\dagger_{\omega'} a_{\omega'}, \tag{8}$$

其中，$a^\dagger_{\omega'}$ 和$a_{\omega'}$ 分别表示频率为 ω'的储库模的产生算符和湮灭算符。这些算符满足正则对易关系$[a_{\omega'}, a^\dagger_{\omega''}] = \delta(\omega' - \omega'')$。 ω_c是截止频率，它决定了储库的记忆时间尺度。系统与储库之间的相互作用表示为

$$H_I = \hbar\sqrt{\omega'_c} \int_0^\infty d\omega' \chi(\omega') \left(\sigma_+ a_{\omega'} + \sigma_- a^\dagger_{\omega'}\right), \tag{9}$$

其中，$\sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ 是量子比特的升算符和降算符。无量纲函数 $\chi(\omega')$刻画了量子比特与储库之间的频率相关耦合强度。它与储库的谱密度函数 $\mathcal{J}(\omega')$通过 $2\pi\omega_c|\chi(\omega')|^2 = \mathcal{J}(\omega')$相关。为描述环境结构，我们采用如下形式的超欧姆谱密度 $\mathcal{J}(\omega) = \alpha\, \omega^s e^{-\omega'/\omega'_c}$，其中 $s > 1$。在此情形下，系统的动力学方程可化为

$$\frac{d\rho(t')}{dt'} = -\frac{i}{\hbar}\left[H_{\rm sys}, \rho(t')\right] + \Gamma'_\varepsilon(t')\, L_{\sigma_-}[\rho(t')] + \widetilde{\gamma}'_\varepsilon(t')\, L_{\sigma_+}[\rho(t')]. \tag{10}$$

为简化分析，我们通过以量子比特频率 ω_0 为单位测量所有频率，并以 ω_0^{-1} 为单位测量时间，引入无量纲变量。我们定义

$$t = \omega_0 t', \qquad \Gamma(t) = \frac{\Gamma'(t')}{\omega_0}, \qquad \widetilde{\gamma}(t) = \frac{\widetilde{\gamma}'(t')}{\omega_0},$$
$$\omega_c = \frac{\omega'_c}{\omega_0}, \qquad \beta = \beta'\hbar\omega_0.$$

V. 单量子比特系统的 Kolmogorov一致性条件

我们将该系统视为一个单量子比特，其在时间t的态由密度矩阵表示

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} a(t) & c(t) \\ c^*(t) & 1 - a(t) \end{pmatrix}. \tag{11}$$

为检验柯尔莫哥洛夫一致性条件的有效性，我们必须首先指定执行测量所采用的测量基。我们考虑如下定义的一般正交归一测量基

$$|u_1\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle,$$
$$|u_2\rangle = -e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|1\rangle, \tag{12}$$

其中 $0 \le \theta \le \pi$ 和 $0 \le \phi < 2\pi$。现在我们需要确定两类概率：单时概率和条件概率。单时概率是通过让系统从其初态演化至测量时刻，然后进行投影测量而得到的。条件概率则是先在中间时刻测量系统，使测量后态继续演化，再进行第二次测量而得到的。

为了检验柯尔莫哥洛夫一致性条件是否成立，我们针对结果 $|u_1\rangle$计算量 $\mathrm{viol}(t_1,\ t_2)$。在这种情况下，它定义为

$$\mathrm{viol}_{u_1}(t_1,t_2) = \big|p_{u_1}(t_2) - \Pi_{u_1}(t_2)\big|. \tag{13}$$

这里，$p_{u_1}(t_2)$表示在时间t_2 进行单次测量且此前未进行任何测量时，获得结果 $|u_1\rangle$ 的概率；$\Pi_{u_1}(t_2)$表示条件概率的经典混合，其定义为

$$\Pi_{u_1}(t_2) := p_{u_1}(t_1)\,p_{u_1}(t_2\,|\,u_1) + p_{u_2}(t_1)\,p_{u_1}(t_2\,|\,u_2), \tag{14}$$

其中，$p_{u_i}(t_1)$是在时间 t_1获得结果 $|u_i\rangle$的概率，而 $p_{u_1}(t_2\mid u_i)$是在已知时间 t_1获得结果 $|u_i\rangle$的条件下，于时间 t_2 获得 $|u_1\rangle$ 的条件概率。单时概率 $p_{u_i}(t_i)$为

$$p_{u_1}(t_i) = \tfrac{1}{2} + \big(a(t_i) - \tfrac{1}{2}\big)\cos\theta + \sin\theta\,\Re\big[e^{i\phi}c(t_i)\big],$$
$$p_{u_2}(t_i) = 1 - p_{u_1}(t_i),$$

以及条件概率 $p_{u_1}(t_2|u_i)$ a re

$$p_{u_1}(t_2\,|\,u_i) = \tfrac{1}{2} + \big(a_{u_i}(t_2) - \tfrac{1}{2}\big)\cos\theta + \sin\theta\,\Re\big[e^{i\phi}c_{u_i}(t_2)\big].$$

这里，$a_{u_i}(t_2)$ 和 $c_{u_i}(t_2)$ 分别表示由 $|u_i\rangle$ 在时刻 t_1 演化至 t_2的测量后态的布居和相干元素。将这些概率表达式代入式（13），得到

$$\mathrm{viol}_{u_1}(t_1,t_2) = \big|\,\mathcal{P}(t_1,t_2) \;+\; \mathcal{C}(t_1,t_2)\,\big|,$$

其中

$$\mathcal{P}(t_1,t_2) = \cos\theta\Big\{\big(a(t_2) - \tfrac{1}{2}\big) - \sum_{i=1}^{2} p_{u_i}(t_1)\big(a_{u_i}(t_2) - \tfrac{1}{2}\big)\Big\},$$

$$\mathcal{C}(t_1,t_2) = \sin\theta\Big\{\Re\big[e^{i\phi}c(t_2)\big] - \sum_{i=1}^{2} p_{u_i}(t_1)\Re\big[e^{i\phi}c_{u_i}(t_2)\big]\Big\}.$$

非零违背项的存在$(t_1,\ t_2)$ 因此表明柯尔莫哥洛夫一致性遭到破坏，反映了非经典性对动力学的影响。单时刻概率和条件概率的详细计算，以及柯尔莫哥洛夫一致性违背项 $\mathrm{viol}(t_1,\ t_2)$的推导，请参见附录 A。为了更明确地说明这种违背，我们考虑两个特殊但普遍存在的情形，以便详细分析 KCC违背的性质及其与相关热力学性质的联系。

情形 I： 我们考虑系统初始制备于态 $\rho(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$，其中

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\big(|0\rangle + |1\rangle\big),$$

并在计算基 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$中进行测量。该情形对应的参数为 $a(0) = c(0) = \frac{1}{2}$, $\theta = \frac{\pi}{2}$ 和 $\phi = 0$。系统–浴相互作用自然地选择计算基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$作为指针基。相比之下，在 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 基中进行测量则有意偏离这一优选基，从而使KCC违背得以显现。对于此情形，结果 $|+\rangle$对应的柯尔莫哥洛夫一致性违背为

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \tfrac{1}{2}\,\exp\Big(-\tfrac{1}{2}G(0,t_2)\Big) \big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big| \tag{15}$$

其中 $G(t_0,t) := \int_{t_0}^{t}\lambda(s)\,ds$，且 $\lambda(s) := \Gamma_\varepsilon(s) + \widetilde{\gamma}_\varepsilon(s)$。代入时变衰减率的表达式$\lambda(s)$后，最终得到

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \tfrac{1}{2}\exp\Big(-\tfrac{1}{2}\int_0^{t_2}\Big[\Gamma_\varepsilon(s) + \widetilde{\gamma}_\varepsilon(s)\Big]ds\Big) \big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big|. \tag{16}$$

详细计算见附录 A 。由于该设置关于测量结果 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$对称，因此两种情况下的结果相同，即 $\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \mathrm{viol}_-(t_1,t_2)$。为简化符号，我们省略结果下标，并将违背量记为 $\mathrm{viol}(t_1,t_2)$。

为揭示正、负衰减率贡献的影响，我们将任意实函数 $x(t)$ 分解为其正部和负部，$x(t) = x^+(t) - x^-(t)$，其中$x^\pm(t) \ge 0$。将此方法应用于总衰减率 $\lambda(t) = \Gamma_\varepsilon(t) + \widetilde{\gamma}_\varepsilon(t)$，其中 $\lambda^\pm(t) = \Gamma_\varepsilon^\pm(t) + \widetilde{\gamma}_\varepsilon^\pm(t)$，定义

$$\lambda(t) = \lambda^+(t) - \lambda^-(t),$$
$$M(t_2) := \int_0^{t_2}\lambda^+(s)\,ds, \quad N(t_2) := \int_0^{t_2}\lambda^-(s)\,ds, \tag{17}$$

从而 $\int_0^{t_2}\lambda(s)\,ds = M(t_2) - N(t_2)$。代入方程（16）得到因式分解形式

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \tfrac{1}{2}\,e^{-\frac{1}{2}M(t_2)}\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big| \times e^{+\frac{1}{2}N(t_2)}. \tag{18}$$

此处，包含正弦项的因子完全源于由系统哈密顿量支配的幺正动力学，并刻画了由于选择非对易测量基而产生的测量统计的相干振荡。当$\sin(\omega_0 t_1) = 0$或$\sin(\omega_0(t_2 - t_1)) = 0$时，KCC 违背消失，即当 t_1 或区间 $\Delta = t_2 - t_1$ 等于 π/ω_0的整数倍时。否则，违背变为非零，方程（18）揭示了经典柯尔莫哥洛夫一致性如何遭到破坏，以及在何种条件下这种破坏可以得到增强。第一个指数项 $e^{-\frac{1}{2}M(t_2)}$表示正衰减率导致的相干性衰减，而最后一个指数项$e^{+\frac{1}{2}N(t_2)}$量化了与负衰减率贡献相关的非马尔可夫信息回流所引起的违背增强。因此，KCC违背体现了两种相互对立机制之间的竞争：(i) 促进经典一致性和宏观实在论的马尔可夫阻尼；以及 (ii) 恢复相干性并使非经典统计复苏的非马尔可夫信息回流。

式（18）中违背的解析形式直接得出上界

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) \le \frac{1}{2}\, e^{-\frac{1}{2}[M(t_2)-N(t_2)]},$$

它由 $|\sin(\omega_0 t_1)\,\sin(\omega_0(t_2-t_1))| \le 1$ 得出。值得注意的是，若 $N(t_2) > M(t_2)$，则界中的指数会变为正值，因此右侧在形式上可能超过1/2。然而，总体违背仍受正弦前因子的限制，而很大的 $N(t_2)$ 通常表明时间局域描述或完全正性可能失效的区域。

为验证解析结果，我们进行了数值模拟，并将其趋势与理论预测进行比较。

图 1(a) 展示了不同环境截断频率 ω_c 下退相干率 $\Gamma(t)$ 随时间的演化，其中 ω_c 是谱密度函数中的参数。相应地，图 1(b) 展示了衰减率的总正面积（M）和总负面积（N）随 ω_c 的变化情况。插图还展示了总面积（$M+N$）；由于对所有 ω_c 而言，M 大于 N，总面积会随 ω_c 增大而增加。因此，图 1(c) 中所示的时间违背 $\mathrm{viol}(t_1,t_2)$ 会随着 ω_c 增大而减小，这与式 18 一致。这一关系也解释了图 1(c) 插图中的趋势：随着负贡献 N 减小，违背程度也随之减弱。

情况II： 为进行进一步的数值研究，我们现在考虑一个不同于上述模型的替代模型。我们考虑一个初态为$|\psi(0)\rangle = |0\rangle$的量子比特，其哈密顿量为 $H = \frac{\omega_0}{2}\sigma_z + \Omega\sigma_x$. 在 σ_z 基上的投影算符，$P_0 = |0\rangle\langle 0|$；$P_1 = |1\rangle\langle 1|$。我们对这一情形进行数值研究，并采用与情形 I 相同的参数值，因此衰减率参数将与图1(a)中的结果相同，其正面积和负面积也将与图1(b)相同。现在，关于截断频率的KCC违背结果 $\mathrm{viol}(t_1,\ t_2)$ 显示如下

频率 ω_c 如图 2所示。我们可以看到，KC违背对于衰减率的正面积和负面积表现出相同的特性。

在非马尔可夫区间中，KCC违背由衰减率的行为所支配。接下来，我们依据 RHP [46] 和 BLP [36]判据，建立不同非马尔可夫性度量之间的解析联系。

VI. 柯尔莫哥洛夫一致性条件的违背与非马尔可夫性的RHP度量

Rivas–Huelga–Plenio（RHP）度量通过捕捉量子动力学映射完全正（CP）可分性的失效来量化非马尔可夫性。具体而言，只要两个时刻之间的中间映射不再保持完全正，该度量便非零。对于具有典范衰减率的时间局域主方程 $\chi_k = \{\Gamma_\varepsilon, \tilde{\gamma}_\varepsilon\}$，如式（3）所示，非马尔可夫性的 RHP度量可化简为 Andersson 等人提出的基于负衰减率的非马尔可夫性度量公式等人 [47]。文献 [46], 证明了这两种方法的等价性，并给出了二维希尔伯特空间中非马尔可夫性的 RHP度量表达式：

$$\mathcal{N}_{\mathrm{RHP}}(T) = \int_0^T \sum_k \max\{0, -\chi_k(t)\}\, dt. \tag{19}$$

因此，根据式（17），可得

$$\mathcal{N}_{\mathrm{RHP}}(T) = \int_0^T \lambda^-(s)\, ds = N(T), \tag{20}$$

对于情形 I，直接得到

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \tfrac{1}{2}\, e^{-\frac{1}{2}M(t_2)}\, e^{+\frac{1}{2}\mathcal{N}_{\mathrm{RHP}}(t_2)}\, \mathcal{S}(t_1,t_2), \tag{21}$$

其中 $\mathcal{S} = |\sin(\omega_0 t_1)\,\sin(\omega_0(t_2-t_1))|$。因此，KCC违背随着RHP度量所表征的非马尔可夫性呈指数增长，同时受到正衰减贡献和相干动力学的振荡性质的抑制。因此，完全正可除性的丧失直接表现为所观察到的柯尔莫哥洛夫一致性违背。

VII. 柯尔莫哥洛夫一致性条件的违背与BLP非马尔可夫性度量

Breuer 等人 [35, 36]提出的非马尔可夫性度量，通过环境向系统的信息回流来刻画开放量子动力学中的记忆效应。在这一框架中，当两个量子态之间的可区分性（以适当的距离度量表示，例如

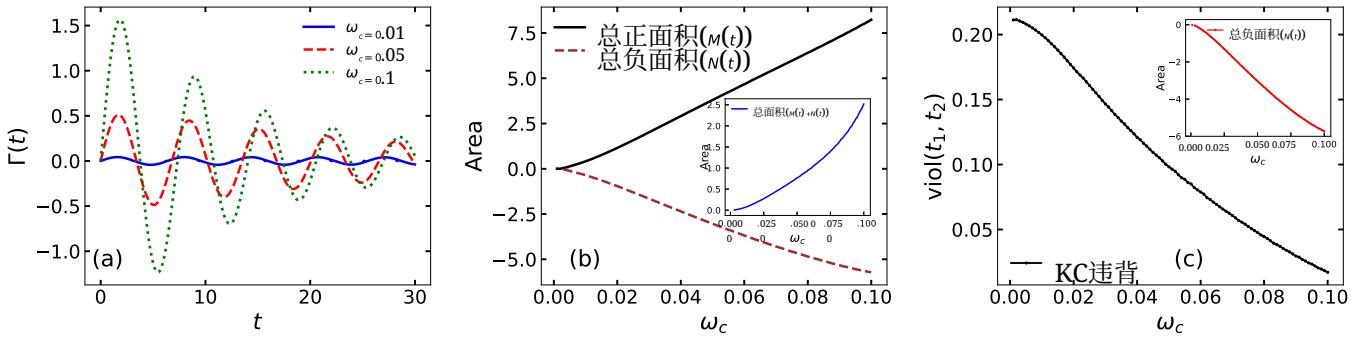


图 1. 情形 I 的解析结果。谱密度指数固定为 $s = 1.5$，系统-浴耦合强度为 $\alpha = 0.5$，浴温为 $T = 300$，系统哈密顿量频率为 $\omega_0 = 1.0$。为使所有参数均无量纲，$t' = \omega_0 t$。$\Gamma'(t) = \Gamma(t')/\omega_0$。(a) 不同截止频率 ω_c 下，退相干率 $\Gamma(t)$ 随时间的变化。改变 ω_c 会显著改变 $\Gamma(t)$ 的结构，尤其是其负值区域的范围，从而能够调控非马尔可夫性的程度。(b) 在较长时间窗口 ($t = 30$) 内计算的衰减率总正面积 $M(t)$ 和总负面积 $N(t)$ 随 ω_c 的变化。对于所有截止频率，正贡献均占主导，因而净面积总体增加，如插图所示。(c) Kolmogorov 一致性违背量 viol(t_1, t_2) 随 ω_c 的变化。测量在 $t_1 = 15.0$ 进行，第二次测量在 $t_2 = 30.0$ 进行。与解析表达式（18）一致，违背量随截止频率增加而减小，反映了负速率贡献的减少，插图也对此作了说明。

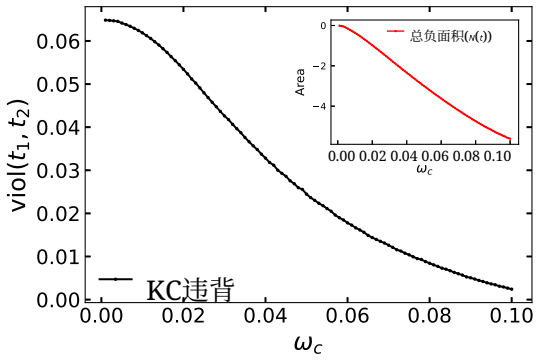


图2. 情形 II 的解析结果。所有系统和浴参数均与图 1(a) 中使用的相同，因此衰减率的正、负面积与情形 I 的相同。总演化时间和测量时刻也设为相同。KC违背对衰减率正、负面积表现出相同的定性依赖关系，这证实其行为由两者的相互作用决定，而非取决于具体情形的细节。

迹距离）随时间增加时，就可判定演化具有非马尔可夫性。对于两个态$\rho_1(t)$和 $\rho_2(t)$，其迹距离暂时增大意味着信息流发生逆转，表明非马尔可夫演化所具有的单调性遭到破坏。

考虑两个量子态，$\rho_1(t)$和 $\rho_2(t)$，它们按照式（3给出的动力学方程演化。它们在时刻 t的迹距离定义为

$$D(t) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}|\rho_1(t) - \rho_2(t)|. \tag{22}$$

该量可用作衡量它们可区分性的指标。对于纯粹的马尔可夫演化，$D(t)$会随时间单调递减，而 $D(t)$的任何暂时增加都表明存在非马尔可夫动力学。Breuer–Laine–Piilo（BLP）非马尔可夫性度量定义为

$$\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}} = \max_{\rho_1(0)} \int_{\sigma>0} dt\sigma(t, \rho_1(0), \rho_2(0)), \tag{23}$$

其中 $\sigma(t, \rho_1(0)\ \rho_2(0)) = \frac{d}{dt}D(t)$，而 $\rho_2(0)$ 选为与 $\rho_1(0)$ 正交的态，因为初始为正交态时信息回流最大 [48]。

考虑一般的正交初态对$\rho_1(0) = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$和 $\rho_2(0) = |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$，其中

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \cos\frac{\delta}{2}|0\rangle + e^{i\zeta}\sin\frac{\delta}{2}|1\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= -e^{-i\zeta}\sin\frac{\delta}{2}|0\rangle + \cos\frac{\delta}{2}|1\rangle, \end{aligned} \tag{24}$$

分别为，其中 $0 \le \delta \le \pi$ 和 $0 \le \zeta < 2\pi$。对于这种情况，在主方程演化后，时刻 t 的迹距离变为

$$D(t) = \sqrt{e^{-G(0,t)}\sin^2\delta + e^{-2G(0,t)}\cos^2\delta}, \tag{25}$$

BLP非马尔可夫性度量的形式为

$$\begin{aligned} &\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}(t) = \max\{\widetilde{N}_1(t),\ \widetilde{N}_2(t)\}, \\ &\text{with}\ \ \widetilde{N}_1(t) = \frac{1}{2}\int_0^t \lambda^-(s)\, e^{-\frac{1}{2}G(0,s)}\, ds, \\ &\qquad\qquad \widetilde{N}_2(t) = \int_0^t \lambda^-(s)\, e^{-G(0,s)}\, ds. \end{aligned} \tag{26}$$

由 $\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}$ 的这一表达式，我们得到

$$\begin{aligned} &\tfrac{1}{2}\mathcal{S}(t_1,t_2)\Big(1 - \tfrac{1}{2}A^+(t_2) + \tfrac{1}{2}\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}(t_2)\Big) \ \le\ \mathrm{viol}_+(t_1,t_2) \\ &\le\ \tfrac{1}{2}\mathcal{S}(t_1,t_2)\Big(1 - \tfrac{1}{2}A^+(t_2) + 2\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}(t_2)\Big), \end{aligned} \tag{27}$$

因此，$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2)$ 其上下界分别由斜率介于 $\mathcal{S}/4$ 和 $\mathcal{S}$ 之间的BLP非马尔可夫性度量的线性函数给出（偏移量相同$\frac{1}{2}\mathcal{S}(t_1,t_2)(1-\frac{1}{2}A^+(t_2))$）。详细计算见附录B。

在接下来的章节中，我们将研究KCC违背与信息论量和热力学量之间的关系。

VIII. 柯尔莫哥洛夫一致性违背与量子互信息之间的关系

KCC违背揭示了非经典时间行为，而互信息则度量系统与环境之间的关联。将这两个量联系起来，可以从信息论的角度解释KCC违背，并探究它是否直接源于非马尔可夫演化中的关联回流。

系统的约化动力学由式（10）中的林德布拉德主方程给出，它可以表示为系统与储库的整体幺正演化，随后对储库自由度进行迹运算。因此，时刻 t 的复合系统-储库态为$\rho_{SR}(t) = U_{SR}(t)\ \rho(0)\ \otimes \rho_R U_{SR}^{\dagger}(t)$，其中 $U_{SR}(t)$ 是联合幺正演化算符。时刻 t系统与储库之间的量子互信息为

$$I_{S:R}(t) = S(\rho(t)) + S(\rho_R) - S(\rho_{SR}(t)), \tag{28}$$

其中，$S(\rho) = -\mathrm{Tr}(\rho\ln\rho)$ 是系统 ρ的冯·诺依曼熵。在式（28）中，我们采用了玻恩近似，该近似假设系统与储库之间的耦合足够弱，因此系统–储库关联可以忽略不计，且储库的态在整个演化过程中近似保持不变。由于 $\rho_{SR}(t)$ 按幺正方式演化，$S(\rho_{SR}(t)) = S(\rho_{SR}(0)) = S(\rho(0)) + S(\rho_R)$。因此，$I_{S:R}(t) = S(\rho(t)) - S(\rho(0))$。若初态为纯态，则 $S(\rho(0)) = 0$。因此，$I_{S:R}(t) = S(\rho(t))$。所以，互信息等于约化系统的冯·诺依曼熵。

此前讨论的在马尔可夫主方程下演化的单量子比特态的约化密度矩阵由式（11）给出。$\rho(t)$ 的冯·诺依曼熵为

$$S(\rho(t)) = f\left[\frac{1+r(t)}{2}\right],$$

其中，$f[p] = -p\ln p - (1-p)\ln(1-p)$ 是二元熵函数，$r(t)$ 是该态的布洛赫长度。对于态$\rho(t)$，布洛赫长度 $r(t)$ 的形式为

$$r(t) = \sqrt{(2a(t)-1)^2 + 4|c(t)|^2}.$$

与*KCC*违背的关系：对于初态 $|+\rangle$ 和在 σ_x 本征基下进行的测量，结果 $|+\rangle\langle+|$ 对应的 KC违背为

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = |c(t_2)|\,|\sin(\omega_0 t_1)\sin[\omega_0(t_2-t_1)]|.$$

这里，$|c(t_2)| = \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(0,\ t_2)}$（见式 (A5)）。因此，在 ω_0、t_1和 t_2固定时，KCC违背与该态的相干振幅成正比。将上述关系中的 $|c(t_2)|$代入布洛赫长度，可得

$$r(t_2)^2 = (2a(t_2)-1)^2 + 4\left(\frac{\mathrm{viol}_+(t_1,t_2)}{|\sin(\omega_0 t_1)\sin[\omega_0(t_2-t_1)]|}\right)^2.$$

因此，互信息可以显式地用 KCC违背表示为

$$I_{S:R}(t) = f\left[\frac{1+r(t)}{2}\right] \tag{29}$$
$$= f\left[\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{(2a(t_2)-1)^2 + 4\frac{\mathrm{viol}_+(t_1,t_2)^2}{\sin^2(\omega_0 t_1)\sin^2[\omega_0\Delta]}}\right)\right].$$

根据这一关系，我们可以量化测得的 KCC违背对应多少互信息（相关性）。

推论与界：

(i) 上界。由于 $|\sin| \le 1$，因此

$$\mathrm{viol}(t_1,t_2) \le |c(t_2)|.$$

因此，

$$r(t_2)^2 \ge (2a(t_2)-1)^2 + 4\,\mathrm{viol}(t_1,t_2)^2,$$

从而得到了以 KCC违背和布居不平衡表示的互信息下界。

(ii) 布居平衡情形。若 $a(t_2) = 1/2$，则

$$r(t_2) = 2|c(t_2)| = 2\,\frac{\mathrm{viol}(t_1,t_2)}{|\sin(\omega_0 t_1)\sin[\omega_0(t_2-t_1)]|},$$

因此，

$$I_{S:E}(t_2) = f\left(\frac{1}{2}\left[1+2\,\frac{\mathrm{viol}(t_1,t_2)}{|\sin(\omega_0 t_1)\sin[\omega_0(t_2-t_1)]|}\right]\right).$$

对于较小的 viol，对二元熵展开可得

$$I_{S:E}(t_2) \approx \frac{2}{\ln 2}\left(\frac{\mathrm{viol}(t_1,t_2)}{|\sin(\omega_0 t_1)\sin[\omega_0(t_2-t_1)]|}\right)^2 + O(\mathrm{viol}^4),$$

表明互信息与 KCC违背呈二次依赖关系。

IX. 法诺因子与柯尔莫哥洛夫一致性违背之间的解析关系

法诺因子通过比较事件的方差与均值，简洁地衡量任意计数过程中的涨落，并被广泛用于区分经典无记忆动力学与存在时间关联的过程 [49–52]。在泊松过程和二元（伯努利）过程中，独立的无记忆序列会产生等于

一的法诺因子，因此任何偏离一的情况都直接反映了时间关联的存在。在我们的二元情形中，所有多时间统计量都由这类关联完全决定，而柯尔莫哥洛夫一致性条件的违背则表明，这些统计量不可能来自任何经典无记忆模型。因此，法诺因子可作为这种行为的操作性指标：偏离一的程度量化了关联强度，进而表明存在KCC违背。确立这一联系，将KCC违背这一数学概念与可通过实验观测的量联系起来，从而为二元随机过程中的非马尔可夫行为提供了清晰的物理解释。

法诺因子的定义。 为了量化测量波动，考虑在固定时刻 t对 σ_x基进行重复投影测量。得到“+”结果的概率为

$$p_+(t) = \frac{1}{2} + \Re[c(t)] = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(0,t)}\cos(\omega_0 t).$$

对于取值为 X 的二元（伯努利）随机变量，当得到“+”结果时取值为1，当得到“–”结果时取值为0，其法诺因子定义为方差与均值之比：

$$F_X(t) = \frac{\mathrm{Var}(X)}{\mathbb{E}[X]} = \frac{p_+(1-p_+)}{p_+} = 1 - p_+(t).$$

代入 $p_+(t)$可得

$$F_X(t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(0,t)}\cos(\omega_0 t) = \frac{1}{2} - |c(t)|\cos(\omega_0 t).$$

因此，法诺因子与系统相干性的实部呈线性关系。

法诺因子与KCC违背之间的解析联系。我们知道，对于情形I，KCC违背为

$$\mathrm{viol}(t_1,t_2) = |c(t_2)|\,\big|\sin(\omega_0 t_1)\,\sin[\omega_0(t_2-t_1)]\big|.$$

从上述表达式中消去 $|c(t_2)|$ ，可得时刻 t_2的法诺因子与 t_1 和 t_2之间的KCC违背之间的精确解析关系：

$$F_X(t_2) = \frac{1}{2} - \frac{\mathrm{viol}(t_1,t_2)}{\big|\sin(\omega_0 t_1)\,\sin[\omega_0(t_2-t_1)]\big|}\cos(\omega_0 t_2),$$

对所有 $\omega_0 t_1$， $\omega_0(t_2-t_1)$ 均成立，且正弦因子不为零。

在这种情况下，测量结果服从伯努利过程，因为对二能级系统进行一次投影测量会产生两种可能的结果。非马尔可夫信息回流维持了密度矩阵中的非对角项，从而使 F 增大并趋近于 1，同时增强柯尔莫哥洛夫一致性违背。上述关系表明，$\mathrm{viol}(t_1,t_2)$ 和 $F_X(t_2)$ 均由同一物理量支配，即相干性模$|c(t)|$。由于 $|c(t)|$取决于 $(\Gamma(t)+\tilde{\gamma}(t))$ 的积分的指数，因此，任何负衰减率都会暂时增强相干性模，进而同时增强 $\mathrm{viol}(t_1,t_2)$，并使 F_X 偏离 $1/2$。因此，

即使存在热（混合）环境，有限的 KCC违背也可作为非马尔可夫记忆回流的操作性指标。具体而言，对于满足 $\sin(\omega_0 t_1) = \sin[\omega_0(t_2-t_1)] = 1$ 的时刻 t_1 和t_2 ，该关系可简化为

$$F_X(t_2) = \frac{1}{2} - \mathrm{viol}(t_1,t_2)\cos(\omega_0 t_2).$$

因此，更强的 KC违背对应于更强的非经典涨落（更小的法诺因子），尤其当 $\cos(\omega_0 t_2) > 0$ 时。

X. 柯尔莫哥洛夫一致性违背：热交换与熵产生率

为阐明开放量子系统中柯尔莫哥洛夫一致性违背的物理意义，自然要探讨这种时间非经典性是否与热力学量和不可逆性相关。在这一背景下，系统与储库之间的热交换发挥着核心作用，因为它反映了开放系统演化过程中与耗散相关的能量流。熵产生通过相干性损失和信息回流来量化不可逆性，为此提供了一种互补的热力学度量。因此，将热交换和熵产生与KCC违背进行比较，可以揭示这些现象是否源于某种共同的潜在物理机制，而不是动力学中彼此无关的特征。

系统在从 $t = 0$ 到 $t = t_2$ 的演化过程中从环境吸收的热量定义为$Q = \mathrm{Tr}[\rho(t_2)H] - \mathrm{Tr}[\rho(0)H]$. 我们得到,

$$\begin{aligned} Q &= \omega_0\left(\rho_{00}(t_2) - \tfrac{1}{2}\right) \\ &= \omega_0\left[e^{-G(0,t_2)}\left(\tfrac{1}{2} + \int_0^{t_2} e^{G(0,u)}\Gamma(u)\,du\right) - \tfrac{1}{2}\right], \end{aligned} \tag{30}$$

现在，为了结合违背$(t_1,\ t_2)$ 与热量 Q之间的关系，我们令 $e^{-G(0,t_2)}$ 并将违背代入（30），得到精确恒等式

$$\begin{aligned} Q = \omega_0\Bigg[&\left(\frac{2\,\mathrm{viol}(t_1,t_2)}{\sin(\omega_0 t_1)\,\sin(\omega_0(t_2-t_1))}\right)^2 \\ &\left(\tfrac{1}{2} + \int_0^{t_2} e^{G(0,u)}\Gamma(u)\,du\right) - \tfrac{1}{2}\Bigg]. \end{aligned} \tag{31}$$

此处 $Q \le 0$ 表示系统向环境释放热量。方程（31）给出了KC违背与交换的热量之间的精确代数关系。然而，该关系不仅涉及违背本身，还涉及额外的函数 $I[\Gamma,\tilde{\gamma}] := \int_0^{t_2} e^{G(0,u)}\Gamma$（$u$） du，它取决于 Γ（t）的详细时间分布或速率的完整变化历程。这意味着，通常 KC违背与热量之间不存在一一映射。不过，在某些特殊情况下，可能存在这种映射，例如

诸如
纯激发： 如果 $\tilde{\gamma}(t) \equiv 0$，则可得到显式的见证函数

$$W(Q) = \frac{\mathcal{S}}{2}\sqrt{1 - \frac{Q}{\omega_0}}. \tag{32}$$

然而，在纯激发或纯衰减等极限区间内，可以得到闭式代数关系。这些区间凸显了 KC违背 如何直接响应由负速率或时变速率所编码的非马尔可夫效应，而热量则反映了与热浴之间的净能量交换。因此，对这两个量进行比较能够更深入地理解记忆效应：KC违背刻画相干性保持，而热量则表征布居动力学。二者共同构成非马尔可夫性的互补见证量。

现在使用 Spohn 公式 [53],

$$\begin{aligned}\sigma(t) &= -\mathrm{Tr}\big[\mathcal{L}_t(\rho(t))\big(\ln\rho(t) - \ln\rho_{\mathrm{eq}}\big)\big] \\ &= \frac{d}{dt}S(\rho(t)) - \beta\,\dot{Q}(t),\end{aligned} \tag{33}$$

其中 $\dot{S}(\rho) = -\mathrm{Tr}[\rho\ln\rho]$，并且 $Q(t) = \omega_0 a(t)$，定义 $r(t) = \sqrt{(a-\frac{1}{2})^2 + |c|^2}$ 可得

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{(a-\frac{1}{2})\dot{a} + \Re[c^*\dot{c}]}{r}\ln\left(\frac{\frac{1}{2}+r}{\frac{1}{2}-r}\right),$$

因此，精确的熵产生率为

$$\begin{aligned}\sigma(t) = &-\frac{(a-\frac{1}{2})(\Gamma-\lambda a) - \frac{1}{4}\lambda e^{-G(0,t)}}{r(t)}\ln\left(\frac{\frac{1}{2}+r(t)}{\frac{1}{2}-r(t)}\right) \\ &- \beta\,\omega_0\big(\Gamma(t) - \lambda(t)a(t)\big).\end{aligned} \tag{34}$$

弱相干区间内的近似关系。 在许多现实情况下，系统经过一定程度的阻尼后接近最大混合点 $a \approx \frac{1}{2}$，且相干性较小。作小 r 展开（$r \ll 1$）。此时可以利用冯·诺依曼熵在最大混合点附近的二次展开。对于 $r \ll 1$，熵展开 $S \simeq \ln 2 - 2r^2 + O(r^4)$给出 $\frac{dS}{dt} \simeq \frac{\lambda}{2}e^{-G(0,t)}$。通过违背量将 e^{-G}表示为$\overline{\mathrm{viol}}$，可得到近似标度关系

$$\sigma(t_2) \;\approx\; 2\,\lambda(t_2)\,\frac{\mathrm{viol}(t_1,t_2)^2}{\sin^2(\omega_0 t_1)\,\sin^2(\omega_0(t_2-t_1))} - \beta\,\omega_0\,\dot{a}(t_2). \tag{35}$$

在小相干／近最大混合区间内，该关系近似成立： σ 是一个与 $\lambda(t)\,\mathrm{viol}_{S^2}^2$（相干性驱动）成正比的项和一个布居／热量项$-\beta\omega_0\dot{a}$之和。若布居变化较小， σ 近似与 viol^2成比例。作为见证 $\dot{a} \approx 0$,

$$W(\sigma,\lambda) = \frac{\mathcal{S}}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{Q}{\lambda}}. \tag{36}$$

KCC违背和《熵》产生均源于同一动力学起源：积分速率 $G(0,\ t)$ 控制着相干性衰减。然而，虽然 viol 仅取决于 $\lambda(t) = \Gamma(t) + \tilde{\gamma}(t)$，但《熵》产生率还对各个布居贡献 $\Gamma(t)$ 和 $\tilde{\gamma}(t)$ 通过 $\dot{a}(t)$ 而敏感。因此，闭合的泛函依赖关系 $\sigma = \sigma(\mathrm{viol})$ 通常并不存在。然而，这表明，在《熵》产生由对角项弛豫主导的区域，KCC违背会受到抑制；而当相干性回流发挥显著作用时，KCC违背则会增强。这建立了一种具有物理意义的联系：两种量都能响应系统中信息流的强度和特征，从而为非马尔可夫量子过程中的经典随机描述失效提供互补视角。然而，在 $\dot{a} \simeq 0$ 和 $r \ll 1$，式（35）表明，《熵》产生主要由 KCC违背的 二次 项决定，从而在记忆效应与耗散之间建立直接的定量联系。

XI. Kirkwood–Dirac准概率分布与柯尔莫哥洛夫一致性之间的关系

由于KCC违背和KD负性都源于量子相干性与测量扰动在时间上的相互作用，因此研究这两个指标之间的定量联系是很自然的。具体而言，我们旨在建立一种精确的代数关系，表明KCC违背可完全解释为KD准概率分布中包含的净非经典干涉。这一联系为通过基于KD的诊断来认证由记忆效应引起的非经典统计提供了直接途径。

对于分别在时间 $t_1 < t_2$ 进行的两次投影测量，其投影算符分别为 $\{P_a\}$ 和 $\{P_b\}$，时间分离的 Kirkwood–Dirac 准分布定义为

$$\mathrm{KD}(b,a) := \mathrm{Tr}[P_b(t_2)\,P_a(t_1)\,\rho_0]\,, \tag{37}$$

其中， $P_a(t_1)$ 和 $P_b(t_2)$ 是海森堡绘景算符，ρ_0 是初态。KD分布可能取负值或复数值，但始终满足柯尔莫哥洛夫一致性条件，这一点可从其边缘化中看出

$$\begin{aligned}\sum_a \mathrm{KD}(b,a) &= \mathrm{Tr}[P_b(t_2)\rho_0] = p_b(t_2), \\ \sum_b \mathrm{KD}(b,a) &= \mathrm{Tr}[P_a(t_1)\rho_0] = p_a(t_1).\end{aligned} \tag{38}$$

由中间投影坍缩和条件演化构造的经典联合分布为

$$p_{\mathrm{cl}}(b,a) = p_a(t_1)\,p(b|a), \tag{39}$$

其中， $p(b|a)$表示在 t_1获得结果 a 的条件下，于 t_2 获得结果 b 的条件概率。柯尔莫哥洛夫一致性条件要求

$$p_b(t_2) = \sum_a p_a(t_1)\,p(b|a), \tag{40}$$

而该条件的违背程度由下式量化

$$\mathrm{viol}_b = \left| p_b(t_2) - \sum_a p_a(t_1)\, p(b|a) \right|. \tag{41}$$

定义 KD干涉贡献

$$\mathcal{I}(a,b) := \mathrm{KD}(b,a) - p_a(t_1)\, p(b|a). \tag{42}$$

利用边缘分布 $\sum_a \mathrm{KD}(b,\ a) = p_b(t_2)$，我们得到确切恒等式

$$\sum_a \mathcal{I}(a,b) = p_b(t_2) - \sum_a p_a(t_1)\, p(b|a), \tag{43}$$

因此，KCC违背可写为

$$\mathrm{viol}_b = \left| \sum_a \mathcal{I}(a,b) \right| = \left| \sum_a \left(\mathrm{KD}(b,a) - p_a(t_1)\, p(b|a) \right) \right|. \tag{44}$$

方程（44）表明，对于给定的最终结果，KCC违背等于KD分布的总非经典（干涉）贡献。因此，$\mathrm{KD}(b,\ a)$ 中的任何非经典性（负性或复数性质）都足以导致 KCC违背。

对于情形 I，我们可以写成

$$\mathrm{viol}_+ = \left| \sum_{a\in\{+,-\}} \Big[\mathrm{KD}(+,a) - p_a(t_1)\, p(+|a) \Big] \right|. \tag{45}$$

由方程（16）和（45），我们得到柯尔莫哥洛夫一致性违背与积分衰减率（Γ（t）和 $\tilde{\gamma}$（t））之间的闭式关系。该关系明确揭示了记忆效应与我们模型中 KD准概率分布干涉之间的直接联系。

XII. 柯尔莫哥洛夫一致性违背与 Leggett–Garg不等式的关系

柯尔莫哥洛夫一致性和 Leggett–Garg不等式代表施加于单个量子系统时间统计的两种不同经典性条件。柯尔莫哥洛夫一致性约束单时刻与多时刻概率分布之间的相容性，而 Leggett–Garg不等式则通过时间关联函数检验宏观实在论和非侵入式可测性的联合假设。因此，在同一动力学框架内探讨柯尔莫哥洛夫一致性违背与 Leggett–Garg不等式违背之间的关系，或二者的差异，是很自然的。

为回答这一问题，我们分析一个经历开放系统动力学并在不同时间进行测量的二能级系统的这两个判据。作为具体示例，我们考虑如下二值观测量的选择。我们考虑情形 I，并将以下量作为我们的二值观测量

$$\text{choose } Q = \sigma_x, \quad Q|q\rangle = q\,|q\rangle, \quad q = \pm 1.$$

两时关联函数：由于 $|+\rangle$ 是 Q 的本征态，在 $t = 0$ 处进行投影测量不会改变该态。因此，关联器的海森堡定义与序贯定义相一致。可得

$$C(0,t_1) = \langle Q(0)\, Q(t_1)\rangle = e^{-\frac{1}{2}G(0,t_1)} \cos(\omega_0 t_1), \tag{46}$$

$$C(t_1,t_2) = \langle Q(t_1)\, Q(t_2)\rangle = e^{-\frac{1}{2}G(t_1,t_2)} \cos\big(\omega_0 (t_2 - t_1)\big), \tag{47}$$

$$C(0,t_2) = \langle Q(0)\, Q(t_2)\rangle = e^{-\frac{1}{2}G(0,t_2)} \cos(\omega_0 t_2). \tag{48}$$

.....的推导见 $C(0,t_1)$、 $C(0,t_2)$ 和 $C(t_1,t_2)$ 附录。

柯尔莫哥洛夫一致性违背：柯尔莫哥洛夫一致性要求， t_2 处的边缘概率等于以 t_1处结果为条件的联合概率之和。就两时关联器而言，这归结为乘法约束 $C(0,t_2) = C(0,t_1)\, C(t_1,t_2)$。因此，其违背程度可量化为

$$\mathrm{viol}_+ = \tfrac{1}{2} \left| C(0,t_1)\, C(t_1,t_2) - C(0,t_2) \right|. \tag{49}$$

代入上述显式表达式可得其闭式形式

$$\mathrm{viol}_+ = \tfrac{1}{2}\, e^{-\frac{1}{2}G(0,t_2)} \left| \sin(\omega_0 t_1)\, \sin\big(\omega_0 (t_2 - t_1)\big) \right|.$$

方程（49）表明，KCC违背直接衡量了关联函数分解的失效。

与 *Leggett–Garg* 不等式的联系：对于三个测量时刻$0 < t_1 < t_2$，标准的 Leggett–Garg（LG）组合为

$$K_3 = C(0,t_1) + C(t_1,t_2) - C(0,t_2), \tag{50}$$

其宏观实在论界限为 $K_3 \le 1$。

利用式（49），我们可以将式（50）改写为

$$K_3 = \mathcal{F}(t_1,t_2) \ \pm\ 2\,\mathrm{viol}_+, \tag{51}$$

其中 $\mathcal{F}(t_1,t_2) = C(0,t_1)C(t_1,t_2) - C(0,t_2)$，其中符号取决于 $\mathrm{sgn}[\,C(0,t_1)C(t_1,t_2) - C(0,t_2)\,]$ 和$|\mathcal{F}(t_1,t_2)| \le 1$。因此，LG不等式可分解为一个因子化的经典项，外加一个与KCC违背成正比的修正项。这一关系进一步表明，任何满足柯尔莫哥洛夫一致性条件的概率分布集合都不可能违背 Leggett–Garg不等式，正如先前研究所述 [40, 41]。

XIII. 结论

在这项工作中，我们表明，柯尔莫哥洛夫一致性条件的违背为开放量子系统中的时间非经典性提供了一种强有力且统一的特征。不仅能够表明其偏离了经典马尔可夫行为，KCC违背还被证明

能够编码有关记忆效应、相干性动力学以及系统与其环境之间热力学交换的丰富信息。

我们首先为耗散量子比特模型中的 KCC违背推导出了精确的解析表达式，从而能够透明、定量地理解这类违背如何取决于动力学所固有的非马尔可夫特征。通过直接求解精确主方程，我们明确地将 KCC违背的大小与积分衰减率联系起来，揭示了正、负衰减率贡献之间的明显竞争。正衰减率会使 KCC违背呈指数衰减，而暂时为负的衰减率——这是非马尔可夫记忆效应的典型特征——则会使其大小呈指数增长。这表明，KCC违背是探测相干性回流以及信息从环境中回流的灵敏指标。我们通过对两种具有代表性的动力学情形进行明确模拟，以数值分析证实了解析结果所揭示的趋势。在这两种情形中，我们都发现，衰减率为正的区域总面积始终大于负值部分。因此，尽管存在暂时的负衰减率区间，KCC违背仍会随时间延长而逐渐减弱。这些结果证实，KCC违背的行为和大小取决于系统与环境相互作用的强度和特征，尤其取决于退相干与记忆效应之间的平衡。

我们进一步确立了 KCC 违背与非马尔可夫性的知名度量指标（包括 RHP 和 BLP量化指标）之间的明确联系。除了非马尔可夫性之外，我们还将 KCC 违背与信息论和热力学量联系起来，包括量子互信息、法诺因子、热交换和熵产生。特别是，我们证明，测得的 KCC 违背为系统与其环境之间共享的互信息提供了定量下界，从而为时间非经典性提供了一种直接的操作性解释，即以信息关联来解释。与法诺因子的关系进一步表明，KCC 违背是一种可通过实验获取的特征，并将其与二元随机过程的涨落性质联系起来。在某些动力学区域中，我们证明交换热量和熵产生率可以作为 KCC 违背的热力学见证量。尽管一般不存在一一对应的泛函关系，但这两个量最终都受相同的相干性衰减机制支配，这阐明了耗散和不可逆性在抑制或增强时间量子效应方面所起的作用。最后，我们在同一个耗散量子比特模型中，发现了 KCC 违背、Kirkwood–Dirac负性与 Leggett–Garg 不等式违背之间的明确关系。我们的分析表明，这些看似不同的时间量子性概念具有共同的物理起源：由非马尔可夫记忆效应引起的相干性复兴，而这种记忆效应与暂时为负的衰减率相关。

综上所述，我们的结果表明，柯尔莫哥洛夫一致性条件是评估量子随机动力学中经典性的一项有力标准。我们展示了非马尔可夫记忆效应和热力学信息流会在这种一致性上留下清晰且可量化的印记。从这一视角来看，KCC违背提供了一种统一且可操作的时间非经典性概念，连接了动力学、信息和热力学特征，为开放量子系统中的经典性评估提供了一条概念清晰的途径。

XIV. 致谢

本研究由新加坡教育部通过其学术研究基金计划（T2EP50222-0038 和 RG154/24）资助。A. Ghoshal 感谢亚历山大·冯·洪堡基金会的支持。

[1] G. S.Engel, T. R.Calhoun, E. L.Read, T.-K. Ahn, T. Man˘cal, Y.-C. Cheng, R. E. Blankenship, and G. R. Fleming, Evidencefor wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems, 《自然》**446**, 782 (2007年). [2] S. Huelga and M. Plenio, Vibrations, quanta andbiology, 《当代物理学》 **54**, 181 (2013), https://doi.org/10.1080/00405000.2013.829687. [3] F. Plastina, A. Alecce, T. J. G. Apollaro, G. Falcone, G. Fran- cica, F. Galve, N. Lo Gullo, and R. Zambrini, Irreversible work and inner friction in quantum thermodynamic processes, 《物理评论快报》 **113**, 260601 (2014年). [4] M. Lostaglio, Anintroductoryreview of the resource theory ap-proach to thermodynamics, 《物理学进展报告》 **82**, 114001 2019(). [5] J. O. Gonz´alez, J. P. Palao, D. Alonso, and L. A. Correa, Clas- sical emulation of quantum-coherent thermal machines, Phys. Rev.E**99**,062102 (2019).

[6] L. Wang、M. A. Allodi 和 G. S. Engel，《生物物理系统中的激发态动力学可由量子相干揭示》，《自然综述：化学》**3**，477（2019）。[7] W. H. Zurek，《退相干、环境诱导超选择与经典世界的量子起源》，《现代物理评论》**75**，715（2003）。[8] E. Joos、H. D. Zeh、C. Kiefer、D. J. W. Giulini、J. Kupsch 和 I.-O. Stamatescu 编，《量子理论中的退相干与经典世界的显现》，第2版（施普林格，2013）。[9] M. Schlosshauer，《退相干与量子到经典的转变》（施普林格，柏林，海德堡，2007年）。[10] M. Schlosshauer，量子退相干，《物理学报告》**831**，1 2019( )，量子退相干。[11] F. Dowker 和 A. Kent，《量子力学的一致历史方法》，《统计物理学杂志》**82**，1575（1996）。[12] R. B. Griffiths，《量子力学的一致历史方法》，载于《斯坦福哲学百科全书》，E. N. Zalta 编（形而上学研究实验室，斯坦福大学，

2019）2019年夏季版。[13] D. Schmidtke 和 J. Gemmer，《有限封闭自旋系统中某类量子历史近似一致性与马尔可夫性的数值证据》，《物理评论 E》93，012125（2016）。[14] J. Gemmer 和 R. Steinigeweg，《封闭量子系统中 k 步马尔可夫且一致的动力学中的熵增》，《物理评论 E》89，042113（2014）。[15] A. Smirne、D. Egloff、M. G. D´ıaz、M. B. Plenio 和 S. F. Huelga，《量子马尔可夫过程的相干性与非经典性》，《量子科学与技术》4，01LT01（2018）。[16] P. Strasberg 和 M. G. D´ıaz，《经典量子随机过程》，《物理评论 A》100，022120（2019）。[17] S. Milz 和 K. Modi，《量子随机过程与量子非马尔可夫现象》，《PRX Quantum》2，030201（2021）。[18] S. Milz、D. Egloff、P. Taranto、T. Theurer、M. B. Plenio、A. Smirne 和 S. F. Huelga，《非马尔可夫量子过程何时具有经典性？》，《物理评论 X》10，041049（2020）。[19] P. Strasberg，《量子随机热力学：基础与精选应用》（牛津大学出版社，2022）。[20] S. Milz、F. Sakuldee、F. A. Pollock 和 K. Modi，《（量子）因果建模与一般概率理论的柯尔莫哥洛夫扩张定理》，《Quantum》4，255（2020）。[21] P. Strasberg、A. Winter、J. Gemmer 和 J. Wang，《纯态动力学中的经典性、马尔可夫性与局域细致平衡》，《物理评论 A》108，012225（2023）。[22] R. Gambini、R. A. Porto 和 J. Pullin，《量子引力导致的基本退相干：入门综述》，《广义相对论与引力》39，1143（2007年）。[23] G. Ghirardi 和 A. Bassi，《坍缩理论》，载于《斯坦福哲学百科全书》，E. N. Zalta 和 U. Nodelman 编（形而上学研究实验室，斯坦福大学，2025年），2025年冬季版。[24] P. Strasberg，《有（或无）退相干的经典性：概念、与马尔可夫性的关系及随机矩阵理论方法》，SciPost Phys. 15，024（2023）。[25] A. J. Leggett，《检验量子力学的极限：动机、现状与前景》，《物理学杂志：凝聚态》14，R415（2002）。[26] J. Berjon、E. Okon 和 D. Sudarsky，《对宇宙学中经典性涌现的主流解释的批判性评述》，《物理评论 D》103，043521（2021）。[27] W. H. Zurek，《量子达尔文主义》，《自然·物理》5，181（2009）。[28] J. K. Korbicz，《通向客观性的道路：量子达尔文主义、谱广播结构与强量子达尔文主义——综述》，《Quantum》5，571（2021）。[29] W. H. Zurek，《经典世界的量子理论：环境诱导超选择、环境辅助不变性、量子达尔文主义与现存子》，《熵》24，10 3390 24111520 2022。/e（）。[30] H. P. Breuer 和 F. Petruccione，《开放量子系统理论》（牛津大学出版社，纽约，2002）。[31] I. de Vega 和 D. Alonso，《非马尔可夫开放量子系统的动力学》，《现代物理评论》89，015001（2017）。[32] A. N. Kolmogorov，《概率论基础》，《概率论基础》（切尔西出版公司，英国牛津，1950），第 viii，71–viii，71 页。

[33] A. Rivas、S. F. Huelga 和 M. B. Plenio，量子演化的纠缠与非马尔可夫性，《物理评论快报》105，050403 2010年( )。[34] A. Rivas 、 S. F. Huelga 和 M. B. Plenio，量子非马尔可夫性：表征、量化与检测，《物理学进展报告》77，094001 (2014年)。[35] H.-P. Breuer、E.-M. Laine 和 J. Piilo，开放系统中量子过程非马尔可夫行为程度的度量，《物理评论快报》103，210401 (2009年)。[36] E.-M. Laine、J. Piilo 和 H.-P. Breuer，量子过程非马尔可夫性的度量，《物理评论 A》81，062115 (2010年)。[37] K. Onggadinata 和 T. S. Koh，利用准随机过程有效度量信息回流，《物理评论 A》111，062214 2025年( )。[38] A. J. Leggett 和 A. Garg，量子力学与宏观实在论：无人观看时，磁通还存在吗？《物理评论快报》54，857 (1985年)。[39] A. J. Leggett，实在论与物理世界，《物理学进展报告》71，022001 (2008年)。[40] M. Asano、T. Hashimoto、A. Khrennikov、M. Ohya 和 Y. Tanaka，识别模棱两可图形时对Leggett–Garg不等式的情境广义化的违背，《物理学文摘》2014年，014006 (2014年)。[41] C. Emary、N. Lambert 和 F. Nori，Leggett–Garg不等式，《物理学进展报告》77，016001 (2013)。[42] J. G. Kirkwood，近经典系综的量子统计，《物理评论》44，31 (1933年)。[43] P. A. M. Dirac，论经典力学与量子力学之间的类比，《现代物理评论》17，195 (1945年)。[44] W.-M. Zhang、P.-Y. Lo、H.-N. Xiong、M. W.-Y. Tu 和 F. Nori，开放量子系统的一般非马尔可夫动力学，《物理评论快报》109，170402 (2012年)。[45] H.-N. Xiong 、 W.-M. Zhang 、 X. Wang 和 M.-H. Wu，与储库强耦合的腔的精确非马尔可夫动力学，《物理评论 A》82，012105 (2010年)。[46] A. Rivas、S. F. Huelga 和 M. B. Plenio，量子非马尔可夫性：表征、量化与检测，《物理学进展报告》77，094001 (2014年)。[47] M. J. W. Hall、J. D. Cresser、L. Li 和 E. Andersson，主方程的规范形式与非马尔可夫性的表征，《物理评论 A》89，042120 (2014年)。[48] S. Wißmann、A. Karlsson、E.-M. Laine、J. Piilo 和 H.-P. Breuer，非马尔可夫量子动力学的最优态对，《物理评论 A》86，062108 (2012年)。[49] U. Fano，辐射的电离产额。II. 离子数的涨落，《物理评论》72，26 (1947年)。[50] C. Gardiner 和 P. Zoller，《量子噪声：自发辐射及其他应用中的马尔可夫与非马尔可夫量子随机方法手册》，第3版，Springer协同学丛书，第56卷（施普林格，2004年）。[51] Y. V. Nazarov 和 Y. M. Blanter，《量子输运：纳米科学导论》，第1版（剑桥大学出版社，2009年）。[52] N. G. van Kampen，《物理与化学中的随机过程》，第三次修订版（爱思唯尔，2007年）。[53] A. Rivas 和 S. F. Huelga，《开放量子系统：导论》（Springer物理学简编，施普林格，西班牙，2012年）。

附录 A：单量子比特系统柯尔莫哥洛夫一致性条件的计算

我们将该系统视为一个量子比特，其在时间 t 的态由密度矩阵表示

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} a(t) & c(t) \\ c^*(t) & 1-a(t) \end{pmatrix}. \tag{A1}$$

系统的哈密顿量为 $H_{\text{sys}} = \frac{\hbar}{2}\omega_0\sigma_z$，系统所遵循的时间局域主方程为

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\big[H_{\text{sys}}, \rho(t)\big] + \Gamma_\varepsilon(t)\, L_{\sigma_-}[\rho(t)] + \widetilde{\gamma}_\varepsilon(t)\, L_{\sigma_+}[\rho(t)]. \tag{A2}$$

其中 $L_{A(\varepsilon)}[\rho(t)] = A(\varepsilon)\rho(t)A^\dagger(\varepsilon) - \frac{1}{2}\{A^\dagger(\varepsilon)A(\varepsilon)\ \rho(t)\}$。由式 (A2) 的幺正部分可得 $\big[-\frac{i}{\hbar}[H_{\text{sys}}, \rho(t)]\big]_{\underline{00}} = 0$，因为 H_{sys} 的对角元为 0。因此，哈密顿演化不会影响布居动力学。接下来，计算耗散贡献可得

$$\big[\Gamma_\varepsilon(t)L_{\sigma_-}[\rho(t)]\big]_{00} = \Gamma_\varepsilon(t)(1-a(t)), \qquad \big[\widetilde{\gamma}_\varepsilon(t)L_{\sigma_+}[\rho(t)]\big]_{00} = -\widetilde{\gamma}_\varepsilon(t)a(t).$$

综合这些结果， $a(t)$ 的运动方程为

$$\dot{a}(t) = \Gamma_\varepsilon(t) - \lambda(t)a(t)$$

其中 $\lambda(t) := \Gamma_\varepsilon(t) + \widetilde{\gamma}_\varepsilon(t)$。类似地，对于相干项 $c(t)$，可得

$$\dot{c}(t) = -\Big(i\omega_0 + \tfrac{1}{2}\lambda(t)\Big)c(t).$$

定义 $G(t_0, t) := \int_{t_0}^{t} \lambda(s)\, ds$，我们得到

$$a(t) = e^{-G(t_0,t)}\Big(a(t_0) + \int_{t_0}^{t} e^{G(t_0,s)}\Gamma_\varepsilon(s)\, ds\Big), \qquad c(t) = c(t_0)e^{-i\omega_0(t-t_0)}\, e^{-\frac{1}{2}G(t_0,t)}. \tag{A3}$$

为检验柯尔莫哥洛夫一致性条件是否成立，我们需要计算量 $\text{viol}(t_1, t_2) = \Big|\sum_{x_1} P(x_2, x_1) - P(x_2)\Big|$。这里， $P(x_2, x_1)$ 表示在时刻 t_1 获得测量结果 x_1，且在时刻 t_2 获得测量结果 x_2 的联合概率；而 $P(x_2)$ 表示在 t_1 未进行先前测量时，于 t_2 获得结果 x_2 的单时刻概率。为了计算这些概率，我们必须指定一个测量基。我们考虑如下定义的一般正交归一测量基

$$|u_1\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\,|1\rangle, \qquad |u_2\rangle = -e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\,|0\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,|1\rangle,$$

其中 $0 \le \theta \le \pi$ 和 $0 \le \phi < 2\pi$。现在，我们来计算对应于 $|u_1\rangle$ 的测量结果下的量 $\text{viol}(t_1, t_2)$。为此，我们需要确定两类概率：单时概率和条件概率。计算单时概率时，令系统从其初态演化至测量时刻，然后进行投影测量。计算条件概率时，先在中间时刻测量系统，再让测量后态继续演化，随后进行第二次测量。这些概率共同使我们能够评估柯尔莫哥洛夫一致性违背。

单时概率： 考虑系统根据主方程从初始时间 $t = 0$ 演化至 $t = t_i$。在时间 t_i，我们在基 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$上进行投影测量。测量后，态坍缩为 $|u_1\rangle\langle u_1|$ 或 $|u_2\rangle\langle u_2|$。在时间 t_i 获得测量结果 $|u_1\rangle$ 或 $|u_2\rangle$ 的概率为

$$p_{u_1}(t_i) = \text{Tr}[|u_1\rangle\langle u_1|\rho(t_i)] = \frac{1}{2} + \big(a(t_i) - \frac{1}{2}\big)\cos\theta + \sin\theta\,\Re\big[e^{i\phi}c(t_i)\big] \quad \text{and} \quad p_{u_2}(t_i) = 1 - p_{u_1}(t_i), \tag{A4}$$

with

$$a(t_i) = e^{-G(0,t_i)}\Big(a(0) + \int_0^{t_i} e^{G(0,s)}\Gamma_\varepsilon(s)\, ds\Big), \qquad c(t_i) = c(0)e^{-i\omega_0 t_i}\, e^{-\frac{1}{2}G(0,t_i)}. \tag{A5}$$

在 t_1时的测量后状态： 如果在时间 t_1 于基 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$上进行投影测量，系统状态会根据测量结果坍缩为相应投影算符中的一个。如果测量结果为 $|u_1\rangle$，则时间 t_1 的测量后状态变为 $\rho_{u_1}(t_1) = |u_1\rangle\langle u_1|$，其在计算基下的矩阵元为

$$a_{u_1}(t_1) = \cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{1+\cos\theta}{2}, \qquad c_{u_1}(t_1) = \frac{1}{2}e^{-i\phi}\sin\theta.$$

同样，如果测量结果对应于 $|u_2\rangle$，测量后态 $\rho_{u_2}(t_1) = |u_2\rangle\langle u_2|$ 的矩阵元为

$$a_{u_2}(t_1) = \sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1-\cos\theta}{2}, \qquad c_{u_2}(t_1) = -\frac{1}{2}e^{-i\phi}\sin\theta.$$

从 t_1 到 $t_2 = t_1 + \Delta$的演化： 在时刻 t_1测量后，测量后态 $\rho_{u_i}(t_1)$ $(i = 1,2)$ 按照式（A2）给出的相同时间局域主方程演化。矩阵元对应的运动方程见式（A3）。因此，时刻 t_2 的演化后布居和相干性可写为

$$a_{u_i}(t_2) = e^{-G(t_1,t_2)}\Big[a_{u_i}(t_1) + \int_{t_1}^{t_2} e^{G(t_1,s)}\Gamma_\varepsilon(s)\,ds\Big], \qquad i = 1,2.$$

and

$$c_{u_i}(t_2) = c_{u_i}(t_1)\,e^{-i\omega_0\Delta - \frac{1}{2}G(t_1,t_2)}.$$

条件概率： 利用式（A4）给出的单时刻测量概率的一般表达式，在 t_1 时测得的结果为 $|u_1\rangle$或 $|u_2\rangle$的条件下，在时刻 t_2测得结果为 $|u_1\rangle$的条件概率可表示为

$$p_{u_1}(t_2\,|\,u_i) = \frac{1}{2} + \big(a_{u_i}(t_2) - \frac{1}{2}\big)\cos\theta + \sin\theta\,\Re\big[e^{i\phi}c_{u_i}(t_2)\big].$$

柯尔莫哥洛夫一致性违背： 为检验柯尔莫哥洛夫一致性条件是否成立，我们计算量 viol(t_1,t_2)。在此情形下，对于结果 $|u_1\rangle$，其定义为

$$\mathrm{viol}_{u_1}(t_1,t_2) = \big|p_{u_1}(t_2) - \Pi_{u_1}(t_2)\big|, \tag{A6}$$

其中， Π_{u_1} 是定义为

$$\Pi_{u_1}(t_2) := p_{u_1}(t_1)\,p_{u_1}(t_2\,|\,u_1) + p_{u_2}(t_1)\,p_{u_1}(t_2\,|\,u_2). \tag{A7}$$

代入单时刻概率和条件概率的显式形式，并按照对角项（布居）和非对角项（相干性）贡献对各项分组后，我们可以将违背量表示为以下紧凑形式:

$$\mathrm{viol}_{u_1}(t_1,t_2) = \big|\,\mathcal{P}(t_1,t_2) + \mathcal{C}(t_1,t_2)\,\big|,$$

其中

$$\mathcal{P}(t_1,t_2) = \cos\theta\,\Big\{\big(a(t_2) - \tfrac{1}{2}\big) - p_{u_1}(t_1)\big(a_{u_1}(t_2) - \tfrac{1}{2}\big) - p_{u_2}(t_1)\big(a_{u_2}(t_2) - \tfrac{1}{2}\big)\Big\},$$

$$\mathcal{C}(t_1,t_2) = \sin\theta\,\Big\{\Re\big[e^{i\phi}c(t_2)\big] - p_{u_1}(t_1)\,\Re\big[e^{i\phi}c_{u_1}(t_2)\big] - p_{u_2}(t_1)\,\Re\big[e^{i\phi}c_{u_2}(t_2)\big]\Big\}.$$

类似地，我们可以计算结果 $|u_2\rangle$对应的 KC违背项。因此，非零的 viol(t_1,t_2) 表明柯尔莫哥洛夫一致性遭到破坏，反映了动力学中非经典性的影响。现在我们考虑几种特殊情形，以更详细地分析 KC违背。

1. 情形 I

我们认为系统最初制备于态 $\rho(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$，其中

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\big(|0\rangle + |1\rangle\big),$$

测量在基 $\{|+\rangle,|-\rangle\}$ 中进行。该情形对应于参数 $a(0) = c(0) = \frac{1}{2}$、$\theta = \frac{\pi}{2}$ 和 $\phi = 0$。对于此情形，与获得结果 $|+\rangle$ 相关的单时间概率和条件概率表示为

$$p_+(t_i) = \tfrac{1}{2} + \Re[c(t_i)] = \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(0,t_i)}\cos(\omega_0 t_i),$$
$$p_+(t_2\,|\pm) = \frac{1}{2} + \Re\big[c_\pm(t_2)\big] = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(t_1,t_2)}\cos(\omega_0\Delta), \tag{A8}$$

结果 $+$的柯尔莫哥洛夫一致性条件要求

$$p_+(t_2) \stackrel{?}{=} p_+(t_1)\,p_+(t_2|+) + p_-(t_1)\,p_+(t_2|-).$$

现在我们来定义

$$A := \tfrac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(0,t_1)}\cos(\omega_0 t_1), \quad B := \tfrac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(t_1,t_2)}\cos(\omega_0\Delta), \quad C := \tfrac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(0,t_2)}\cos(\omega_0 t_2),$$

因此，$p_\pm(t_1) = \frac{1}{2} \pm A$, $p_+(t_2|\pm) = \frac{1}{2} \pm B$, $p_+(t_2) = \frac{1}{2} + C$，经过简单的代数运算可得

$$p_+(t_1)p_+(t_2|+) + p_-(t_1)p_+(t_2|-) = \tfrac{1}{2} + 2AB.$$

因此，结果 $|+\rangle\langle+|$ 的柯尔莫哥洛夫一致性违背为

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \big|2AB - C\big|.$$

利用 $\cos(\omega_0 t_2) = \cos(\omega_0 t_1)\cos(\omega_0\Delta) - \sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0\Delta)$ 以及 $G(0, t_2) = G(0, t_1) + G(t_1, t_2)$，我们得 et

$$2AB - C = \tfrac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}G(0,t_2)}\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0\Delta).$$

因此，

$$\begin{aligned}\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) &= \tfrac{1}{2}\,\exp\Big(-\tfrac{1}{2}G(0,t_2)\Big)\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big| \\ &= \tfrac{1}{2}\,\exp\Big(-\tfrac{1}{2}\int_0^{t_2}\lambda(s)\,ds\Big)\,\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big|.\end{aligned} \tag{A9}$$

代入时变衰减率 $\lambda(s)$ 的表达式，我们最终得到

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \tfrac{1}{2}\,\exp\Big(-\tfrac{1}{2}\int_0^{t_2}\Big[\Gamma_\varepsilon(s) + \widetilde{\gamma}_\varepsilon(s)\Big]\,ds\Big)\,\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big|. \tag{A10}$$

由于该设置关于测量结果 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 对称，因此两种情况下均成立相同的结果，即 $\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \mathrm{viol}_-(t_1,t_2)$。为简化记号，我们因此省略结果下标，并将违反量记为 $\mathrm{viol}(t_1,t_2)$。为揭示正、负衰减率贡献的影响，我们将任意实函数 $x(t)$ 分解为其正部和负部，$x(t) = x^+(t) - x^-(t)$，其中 $x^\pm(t) \geq 0$。将此应用于总衰减率 $\lambda(t) = \Gamma_\varepsilon(t) + \widetilde{\gamma}_\varepsilon(t)$，其中 $\lambda^\pm(t) = \Gamma_\varepsilon^\pm(t) + \widetilde{\gamma}_\varepsilon^\pm(t)$，我们定义

$$\lambda(t) = \lambda^+(t) - \lambda^-(t), \qquad M(t_2) := \int_0^{t_2}\lambda^+(s)\,ds, \qquad N(t_2) := \int_0^{t_2}\lambda^-(s)\,ds,$$

从而 $\int_0^{t_2}\lambda(s)\,ds = M(t_2) - N(t_2)$。代入（A10）得到因式分解形式

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \tfrac{1}{2}\,e^{-\frac{1}{2}\left(M(t_2)-N(t_2)\right)}\,\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big|. \tag{A11}$$

衰减率的负值部分，用 $\lambda^-(t)$ 表示，对应于系统与其环境之间信息流方向的暂时逆转。这些时段标志着信息回流：此前流失到环境中的相干性或关联会部分恢复到系统中。这种行为是非马尔可夫动力学的典型特征，表明其偏离了纯粹的无记忆演化。因此，

$$\mathrm{viol}_+(t_1,t_2) = \underbrace{\tfrac{1}{2}\,e^{-\frac{1}{2}M(t_2)}\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big|}_{\text{positive-rate damping}} \times \underbrace{e^{+\frac{1}{2}N(t_2)}}_{\text{negative-rate (non-Markovian) enhancement}}. \tag{A12}$$

附录B：BLP非马尔可夫性度量与KC违背之间的关系

我们考虑两个量子态， $\rho_1(t)$ 和 $\rho_2(t)$，它们按照式（3）中给出的动力学方程演化。它们在时刻 t的迹距离定义为

$$D(t) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}|\rho_1(t) - \rho_2(t)|. \tag{B1}$$

该量用于度量它们的可区分性。对于纯马尔可夫演化， $D(t)$ 随时间单调递减，而 $D(t)$ 的任何暂时性增加都表明存在非马尔可夫动力学。Breuer–Laine–Piilo（BLP）非马尔可夫性度量定义为

$$\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}} = \max_{\rho_1(0)} \int_{\sigma>0} dt\sigma(t, \rho_1(0), \rho_2(0)), \tag{B2}$$

其中， $\sigma(t,\ \rho_1(0)\ \rho_2(0)) = \frac{d}{dt}D(t)$，且 $\rho_2(0)$ 选为与 $\rho_1(0)$ 正交的态，因为最大的信息回流发生在初始态彼此正交时。

考虑一般的正交初态对

$$\begin{aligned}
\rho_1(0) &= |\psi_1\rangle\langle\psi_1| \quad \text{with} \quad |\psi_1\rangle = \cos\frac{\delta}{2}|0\rangle + e^{i\zeta}\sin\frac{\delta}{2}|1\rangle, \\
\rho_2(0) &= |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \quad \text{with} \quad |\psi_2\rangle = -e^{-i\zeta}\sin\frac{\delta}{2}|0\rangle + \cos\frac{\delta}{2}|1\rangle,
\end{aligned} \tag{B3}$$

其中 $0 \le \delta \le \pi$ 和 $0 \le \zeta < 2\pi$。在由时间局域主方程所描述的动力学下，时刻 t演化后的态为

$$\rho_1(t) = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\delta}{2}e^{-G(0,t)} + Q(0,t) & \frac{1}{2}z(t) \\ \frac{1}{2}z^*(t) & \sin^2\frac{\delta}{2}e^{-G(0,t)} + Q(0,t) \end{pmatrix},$$

$$\rho_2(t) = \begin{pmatrix} \sin^2\frac{\delta}{2}e^{-G(0,t)} + Q(0,t) & -\frac{1}{2}z(t) \\ -\frac{1}{2}z^*(t) & \cos^2\frac{\delta}{2}e^{-G(0,t)} + Q(0,t) \end{pmatrix},$$

其中 $z(t) = \sin\delta e^{-i(\zeta+\omega_0 t)}\, e^{-\frac{1}{2}G(0,\ t)}$，且 $Q(0,\ t) = e^{-G(0,t)}\int_0^t e^{G(0,s)}\Gamma_\varepsilon(s)\, ds$。这两个态之间的迹距离（用于量化它们的可区分性）为

$$D(t) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}|\rho_1(t) - \rho_2(t)| = \sqrt{|z(t)|^2 + e^{-2G(0,t)}\cos^2\delta} = \sqrt{e^{-G(0,t)}\sin^2\delta + e^{-2G(0,t)}\cos^2\delta}. \tag{B4}$$

对 $D(t)$关于时间求导，得到

$$\sigma(t,\delta) = \frac{d}{dt}D(t) = -\frac{\lambda(t)}{2D(t)}(e^{-G(0,t)}\sin^2\delta + 2e^{-2G(0,t)}\cos^2\delta). \tag{B5}$$

这里，演化态对初始条件的依赖完全归结为单个参数 δ。因此，只有当 $\lambda(t) < 0$ 时，$\sigma(t,\ \delta) > 0$，也就是说，在信息从环境回流到系统的时间区间内。记 $\lambda^-(t) = \max\{-\lambda(t)\ 0\}$，我们可以写成

$$\text{for } \sigma(t,\delta) > 0, \quad \sigma(t,\delta) = \frac{\lambda^-(t)}{2D(t)}(e^{-G(0,t)}\sin^2\delta + 2e^{-2G(0,t)}\cos^2\delta). \tag{B6}$$

BLP非马尔可夫性度量对 $\sigma(t,\ \delta)$ 的这些正贡献随时间积分，并对式（B2）给出的所有初态对取最大值。对于固定的 t，对 δ 取最大值会得到两个情形：

$$\begin{aligned}
&\text{For } e^{-G(0,t)} < \frac{1}{4}, \quad \delta_{\max} = \frac{\pi}{2}, \qquad \sigma(t,\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\lambda^-(t)e^{-\frac{1}{2}G(0,t)} \\
&\text{For } e^{-G(0,t)} > \frac{1}{4}, \quad \delta_{\max} = 0, \qquad \sigma(t,0) = \lambda^-(t)e^{-G(0,t)}.
\end{aligned} \tag{B7}$$

这表明，BLP度量的最优初态会随$G(0,\ t)$所体现的有效退相干而变化。因此，时刻 t 之前的BLP非马尔可夫性度量可表示为

$$\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}(t)=\max\{\widetilde{N}_1(t),\,\widetilde{N}_2(t)\},\quad \text{with}\ \ \widetilde{N}_1(t)=\frac{1}{2}\int_0^t \lambda^-(s)\,e^{-\frac{1}{2}G(0,s)}\,ds,\ \ \widetilde{N}_2(t)=\int_0^t \lambda^-(s)\,e^{-G(0,s)}\,ds. \tag{B8}$$

现在，我们来建立式（A10）中给出的 KC 违背项与 BLP非马尔可夫性度量 $\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}$之间的关系。对于 $\delta_{\max}=\frac{\pi}{2},\dot{D}(t)=-\frac{1}{2}\lambda(t)D(t)$。从 0到 t_2积分，并取 $D(0)=1$，可得

$$D(t_2)=1-\frac{1}{2}\int_0^{t_2}\lambda(s)\,e^{-\frac{1}{2}G(0,s)}\,ds=1-\frac{1}{2}A^{\dagger}(t_2)+\widetilde{N}_1(t_2), \tag{B9}$$

其中 $A^{+}(t_2):=\int_0^{t_2}\lambda^{+}(s)\ e^{-\frac{1}{2}G_{-}(0,s)}ds$。情形 I 的 KC 违背项为

$$\mathrm{viol}_{+}(t_1,t_2)=\tfrac{1}{2}\ \exp\Big(-\tfrac{1}{2}G(0,t_2)\Big)\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big|, \tag{B10}$$

将 $\delta_{\max}=\frac{\pi}{2}$ 代入可得

$$\mathrm{viol}_{+}(t_1,t_2)=\tfrac{1}{2}\,D(t_2)\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big|. \tag{B11}$$

将 $D(t_2)$代入此处，柯尔莫哥洛夫一致性违背变为

$$\mathrm{viol}_{+}(t_1,t_2)=\frac{1}{2}\,|\sin(\omega_0 t_1)\ \sin(\omega_0(t_2-t_1))|\ \big[1-\tfrac{1}{2}A^{+}(t_2)+\widetilde{N}_1(t_2)\big]. \tag{B12}$$

由于函数 $e^{-\frac{1}{2}G_{(0,t)}}$和 $e^{-G(0,t)}$满足以下关系，因此我们可以在解析上关联 $\widetilde{N}_1(t)$ 与 $\widetilde{N}_2(t)$,

$$0<e^{-G(0,t)}\le e^{-\frac{1}{2}G(0,t)}\le 1\qquad(\text{for } G(0,t)\ge 0), \tag{B13}$$

因此，对时间积分可得

$$\frac{1}{2}\widetilde{N}_2(t)\le\ \widetilde{N}_1(t). \tag{B14}$$

因此，由式（B8）可得

$$\frac{1}{2}\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}(t)\le\widetilde{N}_1(t)\le 2\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}(t). \tag{B15}$$

因此，我们得到

$$\tfrac{1}{2}\mathcal{S}(t_1,t_2)\Big(1-\tfrac{1}{2}A^{+}(t_2)+\tfrac{1}{2}\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}(t_2)\Big)\ \le\ \mathrm{viol}_{+}(t_1,t_2)\ \le\ \tfrac{1}{2}\mathcal{S}(t_1,t_2)\Big(1-\tfrac{1}{2}A^{+}(t_2)+2\mathcal{N}_{\mathrm{BLP}}(t_2)\Big), \tag{B16}$$

其中 $\mathcal{S}=\big|\sin(\omega_0 t_1)\sin(\omega_0(t_2-t_1))\big|$。因此，$\mathrm{viol}_{+}(t_1,\ t_2)$ 的上下界分别由斜率介于 $\mathcal{S}/4$ 和 $\mathcal{S}$之间的 BLP非马尔可夫性度量的线性函数给出（具有相同的偏移量 $\frac{1}{2}\mathcal{S}(t_1,\ t_2)(1-\frac{1}{2}A^{+}(t_2))$）。

附录C：柯尔莫哥洛夫一致性违背与热交换之间的关系

在本节中，我们分析对于经历非马尔可夫开放系统动力学的二能级系统，柯尔莫哥洛夫一致性（KC）条件的违背与和环境交换的热量之间的联系。这里我们考虑情形I。为此，我们已在 A3 中推导出如下解

$$\rho_{01}(t)=\frac{1}{2}e^{-i\omega_0 t}\,e^{-\frac{1}{2}G(0,t)}, \tag{C1}$$

$$\rho_{00}(t)=e^{-G(0,t)}\left(\tfrac{1}{2}+\int_0^t e^{G(0,u)}\Gamma(u)\,du\right). \tag{C2}$$

$G(0,\ t_2) = \int_0^{t_2} \lambda(s)ds$。现在，对于初态 $\rho(0) = |+\rangle\langle+|$，其中 $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$，并在$\sigma_x$ 基上进行投影测量。两个时刻 $t_1 < t_2$ 的 KC 违背量为

$$\mathrm{viol}(t_1, t_2) = \frac{1}{2}\, e^{-\frac{1}{2}G(0,t_2)} \left|\sin(\omega_0 t_1)\, \sin\left(\omega_0(t_2 - t_1)\right)\right|. \tag{C3}$$

在 $t = 0$ 与 $t = t_2$ 之间从环境吸收的热量定义为

$$Q = \mathrm{Tr}\big[\rho(t_2)H\big] - \mathrm{Tr}\big[\rho(0)H\big]. \tag{C4}$$

由于 $\langle H\rangle_t = \omega_0\left(\rho_{00}(t) - \frac{1}{2}\right)$，且 $\rho_{00}(0) = 1/2$，我们得到

$$Q = \omega_0\left(\rho_{00}(t_2) - \tfrac{1}{2}\right). \tag{C5}$$

将 $\rho_{00}(t)$ 的精确解代入，得到

$$Q = \omega_0\left[e^{-G(0,t_2)}\left(\tfrac{1}{2} + \int_0^{t_2} e^{G(0,u)}\Gamma(u)\, du\right) - \tfrac{1}{2}\right]. \tag{C6}$$

现在，为了结合违背$(t_1,\ t_2)$ 与热量 Q之间的关系，根据公式C3 我们确定

$$e^{-G(0,t_2)} = \left(\frac{2\,\mathrm{viol}(t_1, t_2)}{\sin(\omega_0 t_1)\, \sin(\omega_0(t_2 - t_1))}\right)^2. \tag{C7}$$

将（C7）代入（C6），得到精确恒等式

$$Q = \omega_0\left[\left(\frac{2\,\mathrm{viol}(t_1, t_2)}{\sin(\omega_0 t_1)\, \sin(\omega_0(t_2 - t_1))}\right)^2\left(\tfrac{1}{2} + \int_0^{t_2} e^{G(0,u)}\Gamma(u)\, du\right) - \tfrac{1}{2}\right]. \tag{C8}$$

公式（C8）是一个精确代数 *KC*违背与交换的热量之间的关系。然而，它不仅涉及违背，还涉及附加的 泛函

$$I[\Gamma, \widetilde{\gamma}] := \int_0^{t_2} e^{G(0,u)}\Gamma(u)\, du, \tag{C9}$$

它取决于 $\Gamma(t)$ 的具体时间分布，或速率的完整历史。这意味着，通常而言，KC违背与热量之间不存在一一映射。不过，在某些特殊情况下，例如

- **对称速率：** $\Gamma(t) = \widetilde{\gamma}(t) = \frac{1}{2}\lambda(t)$。

  $\lambda(t) = 2\Gamma(t)$ 和 $\Gamma = \widetilde{\gamma}$ 在初始 $a(0) = \frac{1}{2}$ 的条件下，可以得到 $a(t) = \frac{1}{2}$ 对所有 t 均成立（因为常微分方程 $\dot{a} = \Gamma - \lambda a = \Gamma - 2\Gamma$在该初始条件下有 $a = \frac{1}{2}$ 解）。因此， $Q = 0$ 恒等于零，而违背量 $= \frac{1}{2}e^{-G/2}S$ 可能非零。

- **纯激发：** 若 $\widetilde{\gamma}(t) \equiv 0$，则

$$Q = \omega_0\Big(1 - e^{-G(0,t_2)}\Big) = \omega_0\left(1 - \left(\tfrac{2\,\mathrm{viol}(t_1,t_2)}{S}\right)^2\right),$$

  其中 $S = \sin(\omega_0 t_1)\, \sin(\omega_0(t_2 - t_1))$。由此得到显式关系

$$\mathrm{viol}(t_1, t_2) = \frac{S}{2}\sqrt{1 - \frac{Q}{\omega_0}}. \tag{C10}$$

- **纯衰减：** 若 $\Gamma(t) \equiv 0$，则

$$Q = \frac{\omega_0}{2}\big(e^{-G(0,t_2)} - 1\big),$$

  因此

$$\mathrm{viol}(t_1, t_2) = \frac{S}{2}\sqrt{1 + \frac{2Q}{\omega_0}}. \tag{C11}$$

  此处 $Q \le 0$ 系统将热量释放到环境中。

附录 D：柯尔莫哥洛夫一致性违背与熵产生

KC违背。对于情形I，初态 $|+\rangle=(|0\rangle+|1\rangle)/\sqrt{2}$、哈密顿量 $H=(\omega_0/2)\,\sigma_z$，以及在时刻 $t_1<t_2$于 σ_x 基上进行的投影测量，柯尔莫哥洛夫一致性（KC）违背为

$$\mathrm{viol}(t_1,t_2)=\tfrac{1}{2}\,e^{-\frac{1}{2}G(0,t_2)}\Big|\sin(\omega_0 t_1)\,\sin\big(\omega_0(t_2-t_1)\big)\Big|, \tag{D1}$$

其中 $G(0,\ t)=\int_0^t\lambda(s)\,ds$ 和 $\lambda(t)=\Gamma(t)+\tilde{\gamma}(t)$。

熵产生率。使用 Spohn 公式，

$$\sigma(t)=-\mathrm{Tr}\big[\mathcal{L}_t(\rho(t))\big(\ln\rho(t)-\ln\rho_{\mathrm{eq}}\big)\big]=\frac{d}{dt}S(\rho(t))-\beta\,\dot{Q}(t), \tag{D2}$$

其中 $S(\rho)=-\mathrm{Tr}[\rho\ln\rho]$ 和 $Q(t)=\omega_0 a(t)$，我们将态写为

$$\rho(t)=\begin{pmatrix}a(t) & c(t)\\ c^*(t) & 1-a(t)\end{pmatrix},\qquad c(t)=\tfrac{1}{2}e^{-i\omega_0 t}\,e^{-\frac{1}{2}G(0,t)}.$$

定义 $r(t)=\sqrt{(a-\frac{1}{2})^2+|c|^2}$ 并使用 $\dot{c}(t)=(-i\omega_0-\frac{1}{2}\lambda)c(t)$，得到

$$\frac{dS}{dt}=-\frac{(a-\frac{1}{2})\dot{a}+\mathrm{Re}[c^*\dot{c}]}{r}\ln\!\left(\frac{\frac{1}{2}+r}{\frac{1}{2}-r}\right),\qquad \mathrm{Re}[c^*\dot{c}]=-\tfrac{1}{4}\lambda e^{-G(0,t)},\quad \dot{a}=\Gamma-\lambda a.$$

因此，精确的熵产生率为

$$\sigma(t)=-\frac{(a-\frac{1}{2})(\Gamma-\lambda a)-\frac{1}{4}\lambda e^{-G(0,t)}}{r(t)}\ln\!\left(\frac{\frac{1}{2}+r(t)}{\frac{1}{2}-r(t)}\right)-\beta\,\omega_0\big(\Gamma(t)-\lambda(t)a(t)\big). \tag{D3}$$

弱相干区间内的近似关系。在许多实际情况下，系统经过一定程度的阻尼后，会接近最大混合点 $a\approx\frac{1}{2}$，且相干性较小。进行小 r 展开（$r\ll 1$）。此时可以使用最大混合点附近冯·诺依曼熵的二次展开。对于 $r\ll 1$，熵展开 $S\simeq\ln 2-2r^2+O(r^4)$ 得到 $\frac{dS}{dt}\simeq\frac{\lambda}{2}e^{-G(0,t)}$。通过 viol 表示 e^{-G}，可得近似标度关系

$$\sigma(t_2)\ \approx\ 2\,\lambda(t_2)\,\frac{\mathrm{viol}(t_1,t_2)^2}{\sin^2(\omega_0 t_1)\,\sin^2(\omega_0(t_2-t_1))}\ -\ \beta\,\omega_0\,\dot{a}(t_2). \tag{D4}$$

在小相干／近最大混合区间内，关系式（Approx）成立：σ 是一个与$\lambda(t)\ \mathrm{viol}_{S^2}^{\ 2}$（相干性驱动）成正比的项与一个布居／热量项 $-\beta\omega_0\dot{a}$ 之和。若布居变化较小，则 σ 近似随 viol^2 变化。

KC违背和熵产生都源于同一个动力学起因：控制相干性衰减的积分速率 $G(0,t)$。然而，viol 仅取决于 $\lambda(t)=\Gamma+\tilde{\gamma}$，而熵产生率还对各个布居贡献 Γ 和 $\tilde{\gamma}$ 通过 $\dot{a}(t)$的影响敏感。因此，一般而言，不存在封闭的泛函关系 $\sigma=\sigma(\mathrm{viol})$。尽管如此，在 $\dot{a}\simeq 0$ 和 $r\ll 1$的区间内，式（D4）表明，熵产生由一个关于 KC违背的二次 项主导，从而确立了记忆效应与耗散之间的直接定量联系。

附录 E：柯尔莫哥洛夫一致性违背及其与 Leggett–Garg 不等式的关系

我们考虑一个初始制备于纯态的量子比特

$$\rho(0)=|+\rangle\langle+|,\qquad |+\rangle=\tfrac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle),$$

在系统哈密顿量作用下演化

$$H=\tfrac{\omega_0}{2}\,\sigma_z,$$

并与由时间依赖的激发速率 $\tilde{\gamma}(t)$ 和 $\Gamma(t)$ 表征的耗散环境相互作用。假设约化动力学是时间局域的，并由完全正动力学映射 $\Lambda(t_b,\ t_a)$ 表示。作为二值观测量，我们选择

$$Q=\sigma_x,\qquad Q|q\rangle=q|q\rangle,\quad q=\pm 1.$$

在计算基 $\{|0\rangle,|1\rangle\}$ 中，非对角密度矩阵元 $c(t) = \rho_{01}(t)$ 遵循运动方程

$$\dot{c}(t) = -\Big(i\omega_0 + \tfrac{1}{2}[\Gamma(t) + \widetilde{\gamma}(t)]\Big)c(t),$$

其关于 $t_b \geq t_a$ 的形式解为

$$c(t_b) = c(t_a)\,\exp\big[-i\omega_0(t_b - t_a) - \tfrac{1}{2}G(t_a,t_b)\big]\,, \quad G(t_a,t_b) = \int_{t_a}^{t_b}[\Gamma(s) + \widetilde{\gamma}(s)]\,ds.$$

现在，我们推导柯尔莫哥洛夫一致性和 Leggett–Garg不等式中涉及的相关两时关联函数。

关联函数 $C(0,t_1)$。 时刻 0 与 t_1 之间的两时关联器定义为

$$C(0,t_1) = \langle Q(0)Q(t_1)\rangle.$$

一般而言，在开放系统动力学中，该量既可以通过海森堡绘景（非侵入式）关联器定义，也可以通过序贯投影测量方案定义。在本例中，这两种定义一致，因为初始态$|+\rangle$ 是 Q的本征态，对应本征值为 $+1$。因此，在 $t = 0$ 时刻对 Q 进行投影测量不会改变该态。于是，关联器可简化为单时刻期望值，

$$C(0,t_1) = \mathrm{Tr}[Q\,\rho(t_1)].$$

由于 $Q = \sigma_x$，该期望值仅取决于相干性，

$$C(0,t_1) = 2\,\mathrm{Re}\,\rho_{01}(t_1).$$

利用初始条件为 $c(0) = \frac{1}{2}$ 时的主方程解，我们得到

$$C(0,t_1) = e^{-\frac{1}{2}G(0,t_1)}\cos(\omega_0 t_1). \tag{E1}$$

序贯关联函数 $C(t_1,\ t_2)$。 现在考虑在时间 t_1对 Q 进行投影测量，随后在 $t_2 > t_1$进行第二次测量。相应的关联器定义为

$$C(t_1,t_2) = \sum_{q_1,q_2=\pm1} q_1 q_2\, p(q_1 \text{ at } t_1,\ q_2 \text{ at } t_2).$$

在 t_1 进行测量并得到结果 q_1 后，制备的测量后态为

$$\rho(t_1^+) = P_{q_1} = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & q_1 \\ q_1 & 1 \end{pmatrix},$$

其相干性为 $c(t_1^+) = q_1/2$。将该态从 t_1 演化至 t_2，得到

$$c(t_2) = \tfrac{q_1}{2}\,\exp\big[-i\omega_0(t_2 - t_1) - \tfrac{1}{2}G(t_1,t_2)\big]\,.$$

因此，在时间 t_2， Q的条件期望值为

$$\langle Q(t_2)\rangle_{q_1} = 2\,\mathrm{Re}\,c(t_2) = q_1\,e^{-\frac{1}{2}G(t_1,t_2)}\cos\big(\omega_0(t_2 - t_1)\big).$$

将此表达式代入 $C(t_1,\ t_2)$ 的定义，并利用 $\sum_{q_1} p(q_1) = 1$ 和 $q_1^2 = 1$，可得

代入

$$C(t_1,t_2) = e^{-\frac{1}{2}G(t_1,t_2)}\cos\big(\omega_0(t_2 - t_1)\big). \tag{E2}$$

柯尔莫哥洛夫一致性违背。柯尔莫哥洛夫一致性要求，时刻 t_2 的边缘概率等于时刻 t_1所有中间结果对应的联合概率之和。对于二值观测量，该条件可简化为乘法约束 $C(0,\ t_2) = C(0,\ t_1)\,C(t_1,\ t_2)$。因此，我们将柯尔莫哥洛夫一致性违背的程度定义为

$$\mathrm{viol}_+ = \tfrac{1}{2}\,\big|\,C(0,t_1)C(t_1,t_2) - C(0,t_2)\,\big|. \tag{E3}$$

代入方程（E1）和（E2），可得闭式表达式

$$\mathrm{viol}_+ = \tfrac{1}{2}\, e^{-\frac{1}{2}G(0,t_2)} \big|\sin(\omega_0 t_1)\, \sin\!\big(\omega_0(t_2-t_1)\big)\big|.$$

与 *Leggett–Garg*不等式的联系。 标准的三时刻 Leggett–Garg组合为

$$K_3 = C(0,t_1) + C(t_1,t_2) - C(0,t_2),$$

对于任何满足非侵入可测性的宏实在理论，均有 $K_3 \le 1$ 。利用方程（E3），该量可改写为

$$\begin{aligned} K_3 &= C(0,t_1) + C(t_1,t_2) - C(0,t_2) \\ &= \Big[C(0,t_1) + C(t_1,t_2) - C(0,t_1)C(t_1,t_2)\Big] - \Big[C(0,t_2) - C(0,t_1)C(t_1,t_2)\Big] \\ &=: \mathcal{F}(t_1,t_2) + \Big[C(0,t_1)C(t_1,t_2) - C(0,t_2)\Big] \\ &= \mathcal{F}(t_1,t_2) \;\pm\; 2\,\mathrm{viol}_+, \end{aligned} \tag{E4}$$

此处符号由 sgn[$C(0,\ t_1)C(t_1,\ t_2)\ - C(0,\ t_2)$]确定。