Часть 7

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ

Квантовая энтропия (энтропия фон Неймана)

Рассмотрим микросистему, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. Пусть $|\,\rho_i\,\rangle$ – собственные вектора матрицы плотности, отвечающие собственным значениям ρ_i (для простоты будем считать их невырожденными):

$$\hat{\rho}\,|\,\rho_i\,\rangle = \rho_i\,|\,\rho_i\,\rangle.$$

Очевидно, что ρ_i имеет смысл вероятности найти квантовую систему в чистом состоянии $\hat{\rho}_i = |\,\rho_i\,\rangle\langle\,\rho_i\,|$. Поэтому $0 \le \rho_i \le 1$.

В базисе $\{|\,\rho_i\,\rangle\}$ матрица плотности имеет диагональный вид. Поэтому в базисе собственных векторов квантовая энтропия (или энтропия фон Неймана) может быть определена аналогично классической (информационной) энтропии $H(X)$ Шеннона при помощи собственных значений:

$$S = -\sum_i \rho_i \ln\,\rho_i.$$

Докажем, что полученное на предыдущем слайде выражение для энтропии можно переписать в универсальном виде:

$$S \equiv S(\hat{\rho}) = -\left\langle \ln \hat{\rho} \right\rangle_{\rho} = -\mathbf{Tr}\,(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}).$$

Эта формула верна для любого представления матрицы плотности, и никак не связана со специфическим базисом собственных векторов матрицы $\hat{\rho}$.

Доказательство начнем с факта, что в базисе собственных векторов $F(\hat{\rho})\,|\,\rho_i\,\rangle = F(\rho_i)\,|\,\rho_i\,\rangle$. Тогда:

$$-\mathbf{Tr}\,(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\sum_i \langle\, \rho_i \,|\, \hat{\rho} \ln \hat{\rho} \,|\, \rho_i \,\rangle = -\sum_i \rho_i \ln \rho_i.$$

При помощи унитарного преобразования $\hat{U}$ перейдем от матрицы $\hat{\rho}$ в базисе собственных векторов к матрице плотности в каком-либо другом базисе. Обозначим эту матрицу через $\hat{\rho}_*$. То есть $\hat{\rho}_* = \hat{U}\,\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger$ Поскольку физическое состояние микросистемы при таком преобразовании не меняется, то $\left\langle A \right\rangle_{\rho} = \left\langle A \right\rangle_{\rho_*}$.

Кроме того:

$$\ln \hat{\rho}_* = \ln \left(\hat{U}\,\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger \right) = \ln \hat{U} + \ln \left(\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger \right) = \ln \left(\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger \right) + \ln \hat{U} = \\ = \ln \left(\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger\,\hat{U} \right) = \ln \hat{\rho}.$$

Учитывая два последних результата, получаем:

$$-\left\langle \ln\, \hat{\rho}_* \right\rangle_{\rho_*} = -\left\langle \ln\, \hat{\rho}_* \right\rangle_{\rho} = -\left\langle \ln\, \hat{\rho} \right\rangle_{\rho}.$$

Таким образом, наше утверждение доказано. Из него сразу следует, что энтропия S не изменяется при любых унитарных преобразованиях базиса, в котором записана матрица $\hat{\rho}$, то есть

$$S\left(\hat{U}\,\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger \right) = S\left(\hat{\rho}\right).$$

Note: для практических вычислений удобнее находить собственные вектора и собственные значения матрицы плотности. При этом считается, что $0 \cdot \ln(0) = 0$. А потом вычислять энтропию по формуле $S = -\sum\limits_i \rho_i\, \ln\, \rho_i$.

Note: наоборот, для доказательства общих соотношений удобно операторное выражение для энтропии в виде $S = -\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\, \ln \hat{\rho}\right)$.

Ограничения на величину энтропии фон Неймана

С учетом определения энтропии фон Неймана S в терминах собственных значений ρ_i и принимая во внимание, что все $0 \leq \rho_i \leq 1$, немедленно приходим к неравенству $S \geq 0$. Равенство достигается, когда одно из значений $\rho_k = 1$, а остальные значения равны нулю.

Если энтропия S имеет N ненулевых собственных значений, то $S \leq \ln(N)$. Равенство достигается, когда все $\rho_i = 1/N$, то есть когда квантовая система находится в максимально однородном состоянии. Доказательство этого факта полностью аналогично доказательству неравенства $H(X) \leq \ln(N)$, которое было проведено в параграфе "Ограничения на величину шенноновской энтропии".

Таким образом, аналогично классической энтропии Шеннона $H(X)$, квантовая энтропия фон Неймана S удовлетворяет двойному неравенству

$$0 \leq S \leq \ln(N).$$

Энтропия чистого состояния

Возьмем произвольное чистое состояние $|\,\psi\,\rangle$. Ему отвечает матрица плотности $\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\langle\,\psi\,|$, для которой уравнение на собственные вектора и собственные значения записывается в виде:

$$\hat{\rho}\,|\,\rho_i\,\rangle = \rho_i\,|\,\rho_i\,\rangle \;\Rightarrow\; \langle\,\psi\,|\;\rho_i\,\rangle|\,\psi\,\rangle = \rho_i\,|\,\rho_i\,\rangle.$$

Поэтому матрица плотности чистого состояния имеет один собственный вектор $|\,\rho_1\,\rangle = |\,\psi\,\rangle$, которому соответствует единственное собственное значение $\rho_1 = \langle\,\psi\,|\;\rho_1\,\rangle = \langle\,\psi\,|\;\psi\,\rangle = 1$. Тогда энтропия чистого состояния

$$S_\psi = -1\cdot\ln(1) = 0.$$

Поскольку $S \geq 0$, то мы показали, что любое чистое состояние обладает максимально возможной для макроскопического наблюдателя (!!!) информацией о свойствах квантовой системы. Это утверждение полностью согласуется с примечанием к Постулату N1 из раздела "Постулаты квантовой механики".

Гипотеза о скрытых параметрах

Вообще говоря, понятие максимально возможного количества информации, которое доступно макроскопическому наблюдателю, может быть НЕ эквивалентно понятию полной информации, которой обладает квантовая система в чистом или смешанном состоянии.

Например, можно предположить, что существуют некие ”тонкие” характеристики квантовой системы, которые принципиально не улавливаются при помощи наших грубых макроскопических приборов. И, если бы, экспериментаторы могли знать эти характеристики, то предсказания поведения квантовых систем можно было бы проводить абсолютно детерминистически в духе классической физики. Но мы не знаем и никогда не узнаем эти ”тонкие” параметры. Поэтому вынуждены строить вероятностную теорию, которая относится к реальному поведению микрообъектов как, например, классическая термодинамика и статфизика к поведению классического идеального газа.

Такие ”тонкие” параметры получили название скрытых параметров квантовой механики.

В настоящее время:

- не удалось построить ни одной логически непротиворечивой теории со скрытыми параметрами, которая могла бы хоть немного конкурировать с квантовой механикой по количеству описываемых явлений микромира при минимальных предположениях относительно базовых постулатов теории;
- экспериментально подтвержденное нарушение неравенств Белла исключает самые простые и естественные концепции скрытых параметров (локальные скрытые параметры, т.е. совместимые с аксиомами теории относительности);
- нелокальные скрытые параметры не исключены, но тогда требуется пересмотреть основы всей современной физики. А к этому нет никаких серьезных оснований.

Проще всего, вслед за Н.Бором, постулировать, что в квантовом мире случайность имеет фундаментальную природу... Но следует ли это делать?...

Пример вычисления энтропии смешанного состояния

Выше было показано, что матрица плотности $\hat{\rho}^{(1)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ отвечает смешанному состоянию. Найдем энтропию этого состояния. Нам необходимо знать только собственные значения данной матрицы. Для этого решим характеристическое уравнение:

$$0 = \mathbf{det}\left(\hat{\rho}^{(1)} - \rho^{(1)}\hat{1}\right) = \mathbf{det}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \rho^{(1)} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} - \rho^{(1)} \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2} - \rho^{(1)}\right)^2.$$

Из него находим два корня $\rho_1^{(1)} = \rho_2^{(1)} = 1/2$. Поэтому энтропия фон Неймана рассматриваемого состояния равна:

$$S^{(1)} = -2 \cdot \frac{1}{2}\ \ln\frac{1}{2} = \ln 2 \approx 0{,}69\,\mathbf{нат} = \ 1\,\mathbf{бит}.$$

Энтропия Шеннона для этого состояния составляет:

$$H^{(1)} = -2 \cdot \frac{1}{2}\ \log_2\frac{1}{2} = \ 1\,\mathbf{бит}.$$

Видно, что энтропия смешанного состояния больше нуля. Поэтому в матрице плотности смешанного состояния содержится меньше информации о квантовой системе, чем в векторе состояния чистого состояния. Это легко понять, поскольку декогеренция уничтожает информацию об относительной фазе.

Сравнение квантовой и классической энтропий

В предыдущем примере $S = H$. Но это равенство выполняется далеко не всегда. Рассмотрим двухуровневую квантовую систему с базисом $|\,1\,\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ и $|\,2\,\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. В этом базисе определим два чистых состояния $|\,\psi_1\,\rangle = |\,1\,\rangle$ и $|\,\psi_2\,\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\,1\,\rangle + |\,2\,\rangle\right)$ и построим матрицу плотности смешанного состояния, если вероятности $W_1 = W_2 = 1/2$. Имеем:

$$\hat{\rho} = W_1\hat{\rho}_1 + W_2\hat{\rho}_2 = \frac{1}{2}\left(|\,\psi_1\,\rangle\langle\,\psi_1\,| + |\,\psi_2\,\rangle\langle\,\psi_2\,|\right) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}3 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы

$$\rho_1 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2}\right) \approx 0,854 \ \text{и}\ \rho_2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) \approx 0,146.$$

При вычислении энтропии фон Неймана в битах удобно перейти от логарифмов по основанию "e" к логарифмам по основанию "2". Тогда находим:

$$S = -\left(\rho_1 \ln \rho_1 + \rho_2 \ln \rho_2\right) = -\ln 2 \cdot \left(\rho_1 \log_2 \rho_1 + \rho_2 \log_2 \rho_2\right) =$$

$$= \ln 2 \cdot \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2\sqrt{2}} \log_2 \left(\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}\right)\right) \approx 0,6 \cdot \ln 2 = 0,6\,\text{бит} \approx 0,86\,\text{нат}.$$

Для того же самого состояния классическая энтропия Шеннона равна:

$$H = -W_1 \log_2 W_1 - W_2 \log_2 W_2 = -2 \cdot \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} = 1\,\text{бит} \approx 1,44\,\text{нат}.$$

Практическое наблюдение: таким образом в рассматриваемом случае $H > S$. То есть, принципиально, при помощи квантовых систем можно передать или обработать БОЛЬШЕ информации, чем с помощью их классических аналогов. На этом основаны методы квантового сверхплотного кодирования и эффективные алгоритмы квантовых вычислений, которые реализуются с помощью запутанных состояний.

Вопрос: всегда ли $H \geq S$, или неравенство можно обратить?

Ответ: **ВСЕГДА**. Сформулируем это утверждение более строго. Пусть имеется наблюдаемая F, которая (для простоты!) обладает дискретным невырожденным спектром $\{f_\ell\}$. Если квантовая система описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$, то каждое значение спектра измеряется с вероятностью $w_\ell = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{P}_\ell\right) = \langle\, f_\ell \,|\, \hat{\rho} \,|\, f_\ell \,\rangle$, где $\hat{P}_\ell = |\, f_\ell \,\rangle \langle\, f_\ell \,|$ – проектор на состояние $|\, f_\ell \,\rangle$. Следовательно, для величин f_ℓ можно задать ансамбль $X = \{f_\ell,\, w_\ell\}$. Тогда

$$H(X) \geq S(\hat{\rho}).$$

Равенство достигается, если $\left[\hat{F},\, \hat{\rho}\right] = 0$, то есть когда $w_i \equiv \rho_i$.

Докажем данное неравенство. Рассмотрим матрицу $\hat{\rho}$ в базисе собственных векторов $\hat{\rho} = \sum\limits_i \rho_i \,|\, \rho_i \,\rangle \langle\, \rho_i \,|$. Тогда для вероятностей w_ℓ можем записать

$$w_\ell = \sum_i |C_{\ell\, i}|^2 \rho_i, \quad \textbf{где} \quad C_{\ell\, i} = \langle\, f_\ell \,|\, \rho_i \,\rangle.$$

Коэффициенты $C_{\ell\, i}$ удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_{\ell} |C_{\ell\, i}|^2 = \left\langle \rho_i \left| \sum_{\ell} \hat{P}_{\ell} \right| \rho_i \right\rangle = \langle \rho_i \,|\, \hat{1} \,|\, \rho_i \rangle = \langle \rho_i \,|\, \rho_i \rangle = 1.$$

Энтропия Шеннона ансамбля X имеет вид:

$$H(X) = -\sum_{\ell} w_{\ell} \ln w_{\ell}.$$

Применим к ней неравенство Йенсена. Поскольку функция $f(x) = -x \ln x$ является вогнутой, то с учетом разложения w_{ℓ} по ρ_i, которое было получено на предыдущем слайде, и используя нормировку коэффициентов $|C_{\ell\, i}|^2$, находим:

$$\begin{aligned} H(X) \;&\geq\; \sum_{\ell} \sum_{i} |C_{\ell\, i}|^2 H(\rho_i) = \sum_{i} H(\rho_i) \sum_{\ell} |C_{\ell\, i}|^2 = \sum_{i} H(\rho_i) = \\ &= \; -\sum_{i} \rho_i \ln \rho_i \;=\; S\,(\hat{\rho}). \end{aligned}$$

Неравенство доказано.

Квантовая относительная энтропия и неравенство Клейна

Пусть проводятся измерения некоторой наблюдаемой F со спектром $\{f_\ell\}$ в микросистемах, которые описываются матрицами плотности $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ соответственно. Тогда квантовой относительной энтропией матрицы $\hat{\rho}$ по отношению к матрице $\hat{\sigma}$ называется величина

$$S(\hat{\rho}\,||\,\hat{\sigma}) = -\mathbf{Tr}(\hat{\rho}\ln\hat{\sigma}) + \mathbf{Tr}(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) = -\mathbf{Tr}(\hat{\rho}\ln\hat{\sigma}) - S(\hat{\rho}).$$

Квантовая относительная энтропия удовлетворяет неравенству Клейна

$$S(\hat{\rho}\,||\,\hat{\sigma}) \geq 0,$$

которое является квантовым аналогом неравенства Гиббса. Докажем это неравенство.

Пусть в базисе собственных векторов матрицы $\hat{\rho} = \sum\limits_i \rho_i \,|\,\rho_i\,\rangle\langle\,\rho_i\,|$ и $\hat{\sigma} = \sum\limits_k \sigma_k \,|\,\sigma_k\,\rangle\langle\,\sigma_k\,|$. Тогда

$$S(\hat{\rho}\,||\,\hat{\sigma}) = -\sum_i \langle\,\rho_i\,|\,\hat{\rho}\ln\hat{\sigma}\,|\,\rho_i\,\rangle + \sum_i \rho_i \ln\rho_i =$$

$$= \; -\sum_i \rho_i \,\langle \rho_i \,|\ln\hat\sigma\,|\,\rho_i\,\rangle + \sum_i \rho_i \ln\rho_i \; =$$

$$= \; -\sum_i \rho_i \sum_k \ln\sigma_k \,|\,\langle\,\rho_i\,|\;\sigma_k\,\rangle\,|^2 + \sum_i \rho_i \ln\rho_i .$$

В силу вогнутости функции $f(x) = \ln x$ при $x \in (0,\,1]$ (проверьте это самостоятельно!) можем воспользоваться неравенством Йенсена

$$\sum_k |\,\langle\,\rho_i\,|\;\sigma_k\,\rangle\,|^2 \ln\sigma_k \;\le\; \ln\left(\sum_k |\,\langle\,\rho_i\,|\;\sigma_k\,\rangle\,|^2\,\sigma_k\right) \;=\; \ln\zeta_i .$$

Легко видеть, что $0 \le \zeta_i \le 1$ и $\sum_i \zeta_i = 1$.Тогда величины ζ_i можно трактовать как вероятности и, следовательно,

$$S\,(\hat\rho\,||\,\hat\sigma) \;\ge\; -\sum_i \rho_i \ln\zeta_i + \sum_i \rho_i \ln\rho_i \;=\; \sum_i \rho_i \ln\left(\frac{\rho_i}{\zeta_i}\right) \;=\; H(P||Q) \;\ge\; 0,$$

где используются ансамбли $P = \{f_i,\,\rho_i\}$ $Q = \{f_i,\,\zeta_i\}$. Неравенство доказано.

Квантовая совместная энтропия и субаддитивность

Пусть имеется квантовая система, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}_{AB}$. И пусть эта система состоит из двух подсистем $"A"$ и $"B"$. Тогда квантовой совместной энтропией рассматриваемой квантовой системы называется величина

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) = -\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_{AB}\right).$$

Как и классическая совместная энтропия, квантовая совместная энтропия обладает свойством субаддитивности

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) \leq S\left(\hat{\rho}_{A}\right) + S\left(\hat{\rho}_{B}\right),$$

где $\hat{\rho}_A = \mathbf{Tr}_B \hat{\rho}_{AB}$ и $\hat{\rho}_B = \mathbf{Tr}_A \hat{\rho}_{AB}$ – матрицы плотности подсистем $"A"$ и $"B"$ соответственно. Воспользуемся очевидным свойством частичного следа

$$\mathbf{Tr}(\ldots) = \mathbf{Tr}_A\Big(\mathbf{Tr}_B(\ldots)\Big) = \mathbf{Tr}_B\Big(\mathbf{Tr}_A(\ldots)\Big).$$

и докажем свойство субаддитивности при помощи неравенства Клейна. Имеем:

$$\begin{aligned} 0 \quad &\leq \quad S\left(\hat{\rho}_{AB} \,||\, \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B\right) = -\mathbf{Tr}\Big(\hat{\rho}_{AB} \ln\left(\hat{\rho}_A \, \hat{\rho}_B\right)\Big) - S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) = \\ &= \quad -\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_A\right) - \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_B\right) - S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) = \end{aligned}$$

$$= \; -\mathbf{Tr}_A\Big(\mathbf{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB}\ln\hat{\rho}_A)\Big) - \mathbf{Tr}_B\Big(\mathbf{Tr}_A(\hat{\rho}_{AB}\ln\hat{\rho}_B)\Big) - S(\hat{\rho}_{AB}) =$$

$$= \; -\mathbf{Tr}_A\Big((\mathbf{Tr}_B\,\hat{\rho}_{AB})\ln\hat{\rho}_A\Big) - \mathbf{Tr}_B\Big((\mathbf{Tr}_A\,\hat{\rho}_{AB})\ln\hat{\rho}_B\Big) - S(\hat{\rho}_{AB}) =$$

$$= \; -\mathbf{Tr}_A(\hat{\rho}_A\ln\hat{\rho}_A) - \mathbf{Tr}_B(\hat{\rho}_B\ln\hat{\rho}_B) - S(\hat{\rho}_{AB}) = S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B) - S(\hat{\rho}_{AB}),$$

что и требовалось доказать. Равенство достигается для некоррелированых подсистем "A" и "B", то есть когда $\hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$.

Для квантовой энтропии выполняется свойство сильной субаддитивности, которое аналогично соответствующему свойству для классической энтропии. Пусть квантовая система описывается матрицей плотности $\hat{\rho}_{ABC}$ и состоит из трех подсистем "A", "B" и "C". Тогда

$$S(\hat{\rho}_{ABC}) + S(\hat{\rho}_B) \leq S(\hat{\rho}_{AB}) + S(\hat{\rho}_{BC}).$$

В квантовом случае доказательство гораздо сложнее классического. Его можно найти, например, в книге М. Нильсен, И.Чанг, "Квантовые вычисления и квантовая информация", М. "Мир" (2006), § 11.4. Мы это доказательство проводить не будем.

Свойство субаддитивности для состояния Вернера

Покажем, что состояние Вернера автоматически удовлетворяет свойству субаддитивности при любых значениях $x \in [0,\, 1]$. Для рассматриваемого состояния размерность Гильбертова пространства $N = 4$. Поэтому из разделе "Ограничения на величину энтропии фон Неймана" сразу следует, что

$$S\left(\hat{\rho}^{(W)}\right) \;\leq\; \ln 4 \;=\; 2\,\ln 2.$$

В разделе "Редукционное условие сепарабельности" были найдены матрицы плотности подсистем "A" и "B" в виде

$$\hat{\rho}_A^{(W)} = \hat{\rho}_B^{(W)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Используя результаты раздела "Пример вычисления энтропии смешанного состояния" для энтропий подсистем "A" и "B" немедленно можем написать, что $S\left(\hat{\rho}_A^{(W)}\right) = S\left(\hat{\rho}_B^{(W)}\right) = \ln 2$. Тогда

$$S\left(\hat{\rho}_A^{(W)}\right) + S\left(\hat{\rho}_B^{(W)}\right) \;= 2\,\ln 2 \geq\; S\left(\hat{\rho}^{(W)}\right)$$

при любых $x \in [0,\, 1]$, что и требовалось проверить.

Субаддитивность и второе начало термодинамики

Часто второе начало термодинамики формулируют следующим образом: энтропия любой системы (например, нашей Вселенной) не может убывать со временем. Покажем, что второе начало термодинамики может быть получено из свойства субаддитивности энтропии фон Неймана.

Рассмотрим микрочастицу "A" в термодинамическом окружении (или в термостате) "B". Пусть при $t \leq t_0$ микрочастица и окружение не взаимодействовали друг с другом. Тогда в момент времени t_0 матрицу плотности всей замкнутой системы $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{AB}(t_0)$ можно записать в виде $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{A\,0} \otimes \hat{\rho}_{B\,0}$.. По свойству субаддитивности

$$S\left(\hat{\rho}_0\right) = S\left(\hat{\rho}_{A\,0}\right) + S\left(\hat{\rho}_{B\,0}\right).$$

В произвольный момент времени эволюция матрицы плотности замкнутой квантовой системы может быть записана при помощи УНИТАРНОГО оператора эволюции $\hat{U}(t,\, t_0)$ в виде:

$$\hat{\rho}_{AB}(t) = \hat{U}(t,\, t_0)\, \hat{\rho}_0\, \hat{U}^{\dagger}(t,\, t_0).$$

В разделе "Квантовая энтропия" было показано, что энтропия фон Неймана не меняется при унитарных преобразованиях. Поэтому

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}(t)\right) = S\left(\hat{\rho}_0\right).$$

С другой стороны при $t > t_0$ между микрочастицей и термостатом началось взаимодействие. Поэтому матрицу плотности всей $\hat{\rho}_{AB}(t)$ всей системы уже нельзя записать в простом факторизованном виде. Согласно условию субаддитивности это приводит к тому, что

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}(t)\right) \le S\left(\hat{\rho}_A(t)\right) + S\left(\hat{\rho}_B(t)\right).$$

Поэтому

$$S\left(\hat{\rho}_{A\,0}\right) + S\left(\hat{\rho}_{B\,0}\right) \le S\left(\hat{\rho}_A(t)\right) + S\left(\hat{\rho}_B(t)\right).$$

Если рассматривать Вселенную как набор микрочастиц во внешнем окружении (например, в поле Хиггса, в поле реликтовых фотонов или нейтрино) то при помощи последнего неравенства можно сразу заключить, что энтропия Вселенной не может убывать. То есть со временем энтропия Вселенной достигнет максимума, установится тепловое равновесие и Вселенная придет к тепловой смерти... Ну это только в нулевом приближении...

Квантовая взаимная информация

Квантовая взаимная информация вводится по аналогии с классической $I(X:Y)$ по формуле

$$I_Q(\hat\rho_A:\hat\rho_B)=S\left(\hat\rho_A\right)+S\left(\hat\rho_B\right)-S\left(\hat\rho_{AB}\right)\,\geq\,0,$$

что следует из свойства субаддитивности энтропии фон Неймана. Величина $I_Q(\hat\rho_A:\hat\rho_B)$ является мерой степени корреляции двух квантовых подсистем "A" и "B". Чтобы пояснить сказанное, приведем несколько примеров.

1) Для состояния Белла

$$\left|\,\Psi^-\,\right\rangle\,=\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\right\rangle^{(A)}\left|-\right\rangle^{(B)}\,-\,\left|-\right\rangle^{(A)}\left|+\right\rangle^{(B)}\right)$$

матрица плотности $\hat\rho_{AB}=\left|\,\Psi^-\,\right\rangle\left\langle\,\Psi^-\,\right|$. Это матрица плотности чистого состояния. Поэтому $S\left(\hat\rho_{AB}\right)=0$ (см. раздел "Матрица плотности чистого состояния"). В то время как матрицы плотности каждой из подсистем $\hat\rho_A=\hat\rho_B=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$. (см. "Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ"). Для них $S\left(\hat\rho_A\right)=S\left(\hat\rho_B\right)=\ln 2$.

Тогда квантовая взаимная информация двух подсистем в состоянии Белла

$$I_Q^{-}(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 2\,\ln 2,$$

что означает максимально возможную степень корреляции.

2) Для смеси состояний

$$\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2}\left(|+\rangle^{(A)}\langle+|^{(A)} \otimes |-\rangle^{(B)}\langle-|^{(B)} + |-\rangle^{(A)}\langle-|^{(A)} \otimes |+\rangle^{(B)}\langle+|^{(B)}\right)$$

энтропия всей квантовой системы $S(\hat{\rho}_{AB}) = -2\,\frac{1}{2}\,\ln\frac{1}{2} = \ln 2$. Матрицы плотности каждой из подсистем $\hat{\rho}_A = \hat{\rho}_B = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$. Для них $S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) = \ln 2$. Тогда квантовая взаимная информация смеси будет

$$I_Q^{mixt}(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 2\,\ln 2 - \ln 2 = \ln 2$$

меньше, чем для запутанного белловского состояния.

3) Если же $\hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$, то

$$I_Q^{prod}(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 0.$$

Любые корреляции отсутствуют.

Неравенство треугольника

Иначе оно называется неравенством Араки–Либа:

$$S(\hat{\rho}_{AB}) \geq |S(\hat{\rho}_A) - S(\hat{\rho}_B)|.$$

Данное неравенство является квантовым аналогом неравенств $H(X,Y) \geq H(X)$ и $H(X,Y) \geq H(Y)$, которые были найдены в разделе "Доказательство субаддитивности".

Докажем неравенство треугольника. Введем чистое состояние $|\,\psi_{ABC}\,\rangle$ так, что $\hat{\rho}_{AB} = \mathbf{Tr}_C \hat{\rho}_{ABC} = \mathbf{Tr}_C(|\,\psi_{ABC}\,\rangle\langle\,\psi_{ABC}\,|)$. Тогда из свойства субаддитивности следует неравенство

$$S(\hat{\rho}_{AC}) \leq S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_C).$$

В разделе "Разложение Шмидта" было показано, что если система, которая состоит из двух подсистем, находится в чистом состоянии, то ненулевые наборы собственных значений матриц плотности ее подсистем совпадают. Это автоматически приводит к совпадению численных значений энтропий обеих подсистем.

Разобьем квантовую систему "ABC" на подсистемы "AC" и "B". Тогда $S(\hat{\rho}_{AC}) = S(\hat{\rho}_B)$. Теперь разделим "$ABC$" на подсистемы "$AB$" и "$C$". В этом случае $S(\hat{\rho}_C) = S(\hat{\rho}_{AB})$. Подставляем найденные равенства в последнее неравенство и получаем

$$S(\hat{\rho}_B) \leq S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_{AB}).$$

Аналогично из условия субаддитивности

$$S(\hat{\rho}_{BC}) \leq S(\hat{\rho}_B) + S(\hat{\rho}_C)$$

приходим к неравенству

$$S(\hat{\rho}_A) \leq S(\hat{\rho}_B) + S(\hat{\rho}_{AB}).$$

Поскольку энтропия неотрицательна, то объединяя два доказанных результата при помощи модуля немедленно приходим к неравенству Араки-Либа, которое принципиально отличается от своего классического аналога.

Вогнутость квантовой энтропии

Рассмотрим матрицу плотности $\hat{\rho} = \sum\limits_{\ell} W_\ell \hat{\rho}_\ell$ такую, что матрицы плотности $\hat{\rho}_\ell$ сами являются матрицами плотности смешанных состояний. Тогда задача на собственные вектора и собственные значения каждой из таких матриц имеет вид:

$$\hat{\rho}_\ell \,|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle = \rho_{\ell\, i} \,|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle, \text{ где } \langle\, \rho_{\ell\, i} \,|\, \rho_{\ell\, i'} \,\rangle = \delta_{i\, i'} \text{ и } \sum_i \rho_{\ell\, i} = 1.$$

Наложим на вектора $|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle$ дополнительное условие

$$\langle\, \rho_{\ell\, i} \,|\, \rho_{\ell'\, i'} \,\rangle = \delta_{\ell\, \ell'}\, \delta_{i\, i'},$$

которое является обобщением свойства ортогональности проекторов на макроскопически различимые состояния. Тогда:

$$\hat{\rho} \,|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle = \left(\sum_{\ell'} W_{\ell'} \hat{\rho}_{\ell'} \right) |\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle = W_\ell\, \rho_{\ell\, i} \,|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle,$$

то есть вектор $|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle$ является собственным вектором оператора $\hat{\rho}$, отвечающим собственному значению $W_\ell\, \rho_{\ell\, i}$.

С учетом сказанного выше, получаем:

$$S(\hat{\rho}) \;=\; -\sum_{\ell\, i} (W_\ell\, \rho_{\ell\, i}) \ln (W_\ell\, \rho_{\ell\, i}) = -\sum_\ell W_\ell \ln W_\ell \left(\sum_i \rho_{\ell\, i} \right) - $$

$$- \;\sum_\ell W_\ell \left(\sum_i \rho_{\ell\, i} \ln \rho_{\ell\, i} \right) = H(X) + \sum_\ell W_\ell\, S(\hat{\rho}_\ell),$$

где ансамбль $X = \{\rho_{\{i\}\,\ell},\; W_\ell\}$. Поскольку энтропия Шеннона всегда неотрицательна (т.е. $H(X) \geq 0$), то немедленно получаем свойство вогнутости энтропии фон Неймана:

$$S\left(\sum_\ell W_\ell \hat{\rho}_\ell \right) \;\geq\; \sum_\ell W_\ell\, S(\hat{\rho}_\ell).$$

Это свойство полностью аналогично свойству вогнутости энтропии Шеннона. Его также можно вывести при помощи неравенства Йенсена или из свойства субаддитивности (см., например, книгу Дж.Прескилл, ”Квантовая информация и квантовые вычисления”, т.1, стр.278, М. ”РХД” (2008)). Проделайте эти выводы самостоятельно.

Теорема о невозможности клонирования произвольного смешанного состояния

В разделе "Постулаты квантовой механики" легко была доказана теорема о невозможности клонирования произвольного чистого состояния. Имеется аналогичная теорема о невозможности клонирования произвольного смешанного состояния (так называемая "No-broadcast theorem").

Теорема: предположим, что имеется некоторое квантовое состояние, которое описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. Тогда невозможно создать микросистему с матрицей плотности $\hat{\rho}_{AB}$ в прямом произведении гильбертовых пространств $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ такую, что $\mathrm{Tr}_A\, \hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}$ и $\mathrm{Tr}_B\, \hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}$.

Доказательство этой теоремы достаточно сложно. Его детали можно найти в работе Barnum, H., C. M. Caves, C. A. Fuchs, R. Jozsa, and B. Schumacher, Physical Review Letters vol.76, p.2818 (1996).

Хотя точное клонирование квантового состояния невозможно, но приближенное копирование смешанного квантового состояния осуществимо. Это было показано в работе: V. Buzek and M. Hillery, Physical Review A 54, p.1844 (1996).