

经典信息与量子信息论*

路尚润†

(中山大学物理学院, 广东广州, 510275)

2024 年 1 月 9 日

摘要: 信息论是研究信息的传输、存储和处理的学科。本文从经典信息论出发, 介绍了自信息、信息熵, 并逐步引入联合熵、条件熵、互信息和相对熵等概念。随后结合量子力学, 引入了纯态与混态的概念, 探讨了直积态与纠缠态, 并引入密度矩阵这种独立的描述方式。在前者的基础上, 引入了量子信息论, 介绍了冯诺依曼熵和相对熵的概念, 以及二者的性质。最后, 通过数值计算研究了两种量子系统的演化过程, 包括双量子比特耦合和单模光场与热库的相互作用。

关键词: 量子信息论, 密度矩阵, 主方程

Classical Information and Quantum Information Theory

Shangrun Lu

School of Physics, Sun Yat-sen University, Guangzhou, Guangdong, China

January 9, 2024

Abstract: Information theory is the study of the transmission, storage, and processing of information. This paper commences with classical information theory, introducing fundamental concepts such as self-information and entropy, gradually incorporating advanced notions including joint entropy, conditional entropy, mutual information, and relative entropy. Subsequently, integrating principles from quantum mechanics, the concepts of pure and mixed states are introduced, exploring tensor product states and entangled states, and adopting the independent description method of density matrices. Building upon the former, quantum information theory is introduced, covering concepts such as Von Neumann entropy and relative entropy, along with their properties. Finally, numerical simulations are employed to investigate the evolution processes of two quantum systems: the coupling of two qubits and the interaction between a single-mode optical field and a thermal reservoir.

Keywords: Quantum Information Theory, Density Matrix, Master Equation

*量子力学讨论班课程论文

†学号: 21305127 专业: 物理学 邮箱: lushr3@mail2.sysu.edu.cn

Contents

| | | |
|----------|---------------------------|-----------|
| 1 | 引言 | 1 |
| 2 | 经典信息论 | 1 |
| 2.1 | 自信息 | 1 |
| 2.2 | 信息熵 | 2 |
| 2.3 | 联合熵与条件熵 | 3 |
| 2.4 | 互信息 | 3 |
| 2.5 | 相对熵 (Kullback-Leibler 散度) | 4 |
| 3 | 量子力学基础 | 5 |
| 3.1 | 期望值 | 5 |
| 3.2 | 矩阵的迹 | 5 |
| 3.3 | 复合体系 | 6 |
| 3.3.1 | 纯态与混态 | 6 |
| 3.3.2 | 直积态与纠缠态 | 6 |
| 4 | 密度矩阵 | 7 |
| 4.1 | 纯态的密度矩阵 | 7 |
| 4.2 | 混态的密度矩阵 | 9 |
| 4.3 | 约化密度矩阵 | 10 |
| 4.4 | 两体施密特分解 | 11 |
| 5 | 量子信息论 | 13 |
| 5.1 | 冯诺依曼熵 | 13 |
| 5.2 | 凹性 | 15 |
| 5.3 | 相对熵与互信息 | 15 |
| 6 | 一些应用以及数值求解 | 17 |
| 6.1 | 主方程 | 17 |
| 6.2 | 双量子比特耦合 | 17 |
| 6.3 | 热库演化 | 19 |
| 7 | 总结 | 21 |

1 引言

“信息论”或者称为“通讯中的数学理论”，是研究信息的传输、存储和处理的学科。它起源于上世纪四十年代，并由克劳德·香农在其经典论文《通信的数学理论》中第一次提出。

经典信息论主要关注的是描述和分析在经典信息系统中的信息量、传输效率、和信息编码等问题。然而，随着量子力学的发展和应用，量子信息论迅速兴起，成为信息科学中新兴的领域。一些经典信息论中的难题在量子信息论中得以解决，经典信息论的理论与方法在量子信息论中基本仍然适用，并且量子信息论通过量子力学引入了量子纠缠等新的概念。

2 经典信息论

2.1 自信息

首先引入信息的概念，按香农的定义，信息是用来消除不确定性的东西。事件发生的概率越大，那么事件的信息量就越小。为量化一个事件的不确定性大小，就引入了信息熵的概念。因此自信息应当满足以下性质：

- 连续性：信息 I 随着 p 的变化而连续变化；
- 单调递减性：发生的概率越小，确定其发生所需要的信息越大；
- 当 $p \rightarrow 0$ 时， $I \rightarrow \infty$ 。即确定不可能事件发生的信息量为无穷大；
- 当 $p \rightarrow 1$ 时， $I \rightarrow 0$ 。即确定一定发生的事件信息量为 0；
- 独立随机事件的自信息之和等于各自信息的代数和。

事实上，可以证明，此时信息的取法应当为

$$I(X = x_i) = \log \frac{1}{p(X = x_i)}. \quad (1)$$

其中 X 为随机变量， x_i 为随机变量的某个取值，通常取值为 1 或 0。

自信息 I 的含义为，一个变量的值先验为 x_i ，但我们不知道，仅仅知道其发生的概率，此时需要确定其发生的信息量即为自信息。

可以定义联合自信息，即

$$I(X = x_i, Y = y_i) = \log \frac{1}{p(X = x_i, Y = y_i)}. \quad (2)$$

若 X 与 Y 独立, 则由

$$I(X = x_i, Y = y_i) = \log \frac{1}{p(X = x_i)} + \log \frac{1}{p(Y = y_i)} = I(X = x_i) + I(Y = y_i). \quad (3)$$

也验证了其第五条性质。

2.2 信息熵

信息熵是对一个事件不确定性的度量, Shannon 规定了其的性质:

- 熵是连续的: $f(p_1, p_2, \dots, p_n)$ 在 p_i 上连续;
- 熵在等概率时, 为单调函数:

即当 $H(N) = f(\frac{1}{N}, \frac{1}{N}, \dots, \frac{1}{N})$ 时, 若 $M > N$, 应有 $H(M) > H(N)$ 。

- 熵具有可加性:

$$f(p_1, p_2, \dots, p_n) = f(p_1 + p_2 + \dots + p_m, p_{m+1}, \dots, p_n) + (p_1 + p_2 + \dots + p_m)f(p'_1, p'_2, \dots, p'_m). \quad (4)$$

其中 $p'_i = \frac{p_i}{p_1 + p_2 + \dots + p_m}$, 其物理含义为: 独立观察 n 个事件所获得的信息等价于先对 m 个事件合并观察所得到的信息加上 m 个事件按概率出现时所观察得到的信息。

根据以上三个性质可以推得熵的表达式, 即各个取值自信息的期望, 为

$$H(X) = E(I(X = x_i)) = \sum_{i=1}^n p(X = x_i) \log \frac{1}{p(X = x_i)}. \quad (5)$$

上式即称为经典信息熵 (Shannon 熵), 一般对数以 2 为底。

可以简单地举一个例子, 假设系统仅有一个比特 (Bit), 当一个人收到一段由比特发出的信号时, 如

$$100110011110\dots, \quad (6)$$

其均由 0 或 1 组成, 假设 0 的取值概率为 p , 1 的取值概率为 $(1 - p)$, 当 N 足够大时, 此时所有可能的 01 排序的排列组合数目为

$$\frac{N!}{(pN)!((1-p)N)!} \approx \frac{1}{p^{pN}(1-p)^{(1-p)N}} = 2^{NH}. \quad (7)$$

其中熵 $H = -p \log p - (1-p) \log (1-p)$, 将所有可能取值编码到二进制即需要 NH 个比特。

2.3 联合熵与条件熵

对服从联合分布的 $p(x, y)$ 的一对离散变量 (X, Y) ，其联合熵为

$$H(X, Y) = \sum p(X = x_i, Y = y_i) \log \frac{1}{p(X = x_i, Y = y_i)}. \quad (8)$$

如果 X 与 Y 独立，应当有 $H(X, Y) = H(X) + H(Y)$ 。

同时也可以定义一个随机变量在另一个随机变量给定时的条件熵，为

$$H(X|Y) = \sum p(X = x_i, Y = y_i) \log \frac{1}{p(X = x_i|Y = y_i)}. \quad (9)$$

两者有着一定的联系：可以从条件信息 (condition information) 去考虑，条件熵 $H(X|Y)$ 的意义是，在已知 Y 的条件下，获得 X 对于整体信息量的增加，即

$$H(X, Y) = H(X) + H(Y|X) = H(Y) + H(X|Y). \quad (10)$$

也可以称为链式法则 (chain rule of entropy)。

2.4 互信息

互信息 (mutual information) 是一个随机变量包含另一个随机变量的度量，为

$$I(X; Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y) = H(X) - H(X|Y) = H(Y) - H(Y|X). \quad (11)$$

表示在已知 Y 条件发生的条件下，对 X 的结果了解的信息的增加程度，其有一些性质：

- $I(X; Y) = I(Y; X)$ ，即 X 包含 Y 的信息与 Y 包含 X 的信息一致；
- 如果 X 与 Y 一一对应，如 $Y = 2X$ ，则有 $H(X|Y) = H(Y|X)$ ，此时有 $I(X; Y) = H(X) = H(Y)$ ；
- 如果 X 与 Y 独立，由熵的可加性可知，互信息 $I(X; Y) = 0$ 。

其也可以写为

$$I(X; Y) = \sum_{x, y} p(X = x, Y = y) \log \frac{p(X = x, Y = y)}{p(X = x)p(Y = y)}. \quad (12)$$

互信息、联合熵、条件熵与信息熵的关系可以通过一张简单的文氏图展示：

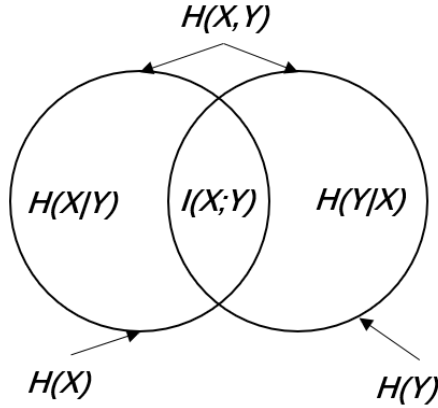


图 1: 互信息、联合熵、条件熵与信息熵的关系文氏图

2.5 相对熵 (Kullback-Leibler 散度)

相对熵指的是不同的概率分布之间信息的差距。也可以说是两种概率分布之间的“距离”，后面会看到这个性质。

对于两个分布密度函数 $p(x)$ 与 $q(x)$ ，相对熵的定义为

$$D(p||q) = \sum_x p(X = x) \log \frac{p(x)}{q(x)}. \quad (13)$$

可以得到，相对熵满足

$$H_p(X) = H_u(X) - D(p||u) = \log |\chi| - D(p||u). \quad (14)$$

其中 u 为均匀分布， χ 为变量 X 的分布范围。上式可以简单地理解为，当我们对分布完全未知时，可以认为其是均匀分布，当我们知道分布后，即可利用相对熵进行修正，其公式类似于“距离”的可加性，因此也可称其为两种分布之间的“距离”。

互信息可以用相对熵表达出，即

$$I(X; Y) = D(p(X = x_i, Y = y_i) || p(X = x_i)p(Y = y_i)), \quad (15)$$

以及

$$I(X; Y) = H(X) + H(Y) - D(p(X = x_i, Y = y_i) || p(X = x_i)p(Y = y_i)). \quad (16)$$

可以看出，其呈现出一种距离的形式。

3 量子力学基础

为保证内容的连贯性，我们介绍回顾一些后面用到的量子力学基础^[1]。

3.1 期望值

对于一个物理量 F ，对同一系综的不同系统重复测量所得到的期望值 \bar{A} 与 A 在态上的期望值，即满足

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle, \quad (17)$$

其中 ψ 为系统所处的态。

可以定义一个算符 $P_i = |i\rangle \langle i|$ ，显然有测量得到态 $|i\rangle$ 的本征值 λ_i 的概率为

$$p_i = \langle \psi | i \rangle \langle i | \psi \rangle = \langle \psi | P_i | \psi \rangle. \quad (18)$$

根据基本假设，任何一个可测量量均对应量子力学中的一个厄密算符，可以写为 \mathcal{O} ，记期望值为 $\langle \mathcal{O} \rangle$ ，则有

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle. \quad (19)$$

各个厄米算符的期望值可以认为是我们能够从态中提取到的信息。

3.2 矩阵的迹

矩阵的迹为所有对角元的和，可以通过定义式进行简单计算，得到其一些性质：

- $Tr(AB) = Tr(BA)$;
- $Tr(ABC) = Tr(CAB) = Tr(BCA)$.

根据性质可得，对于一个么正变换 U ，其并不改变矩阵的迹，因为

$$Tr(UFU^\dagger) = Tr(U^\dagger UF) = Tr(F). \quad (20)$$

对于一个线性算符 \mathcal{O} ，可以定义其迹 $Tr(\mathcal{O})$ ，满足

$$Tr(\mathcal{O}) = \sum_i \langle i | \mathcal{O} | i \rangle. \quad (21)$$

其中 $|i\rangle$ 为希尔伯特空间的一组正交归一的基矢，并且其是不依赖于表象的，因为各个表象之间仅差一个表象变换，而表象变换并不影响矩阵的迹。

应当指出，在希尔伯特空间中矩阵求迹的性质一并非完全适用，前提是算符 AB 对易。

3.3 复合体系

3.3.1 纯态与混态

为讨论更加直观，我们专注于讨论一个两体系统 A 和 B。

· 纯态：

纯态是指能用单一波函数描述的态，或者说是两体系统 A+B 的 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 中的任意相干叠加态，即

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{nm} C_{nm} |\Psi_n\rangle_A \otimes |\psi_m\rangle_B, \quad (22)$$

其中 $|\Psi_n\rangle_A \otimes |\psi_m\rangle_B$ 为正交归一基矢，其一般可以分为可分离态 (直积态) 与不可分离态 (纠缠态)，我们将会在后面进行讨论。

· 混态：

混态是若干个纯态 $|\Psi^i\rangle_{AB}$ 的非相干混合。各个纯态 $|\Psi^i\rangle_{AB}$ 之间的相位并不固定，因此并不存在相干叠加的干涉问题，且态之间也未必一定要正交。确切描述非相干混合的不同纯态的方法是利用纯态系综的概念：

$$\{|\lambda_i\rangle, p_i, i = 1, 2, \dots, \sum_i p_i = 1\}. \quad (23)$$

即某个系综内，态 $|\lambda_i\rangle$ 出现的概率为 p_i 。

3.3.2 直积态与纠缠态

对于两量子体系纯态，分别用 Hilbert 空间 \mathcal{H}_A 和 \mathcal{H}_B 中的矢量 $|\psi\rangle_A$ 和 $|\phi\rangle_B$ 描述，若 $|\Psi\rangle_{AB}$ 可表示为二者的直积，即

$$|\Psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B, \quad (24)$$

则称 $|\Psi\rangle_{AB}$ 为直积态，否则称其为纠缠态。

可以将其推广至 N 体量子系统的纯态，即若 N 体量子体系的量子态可表示为

$$|\Psi\rangle_{ABC\dots} = |\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B \otimes |\chi\rangle_C \otimes \dots, \quad (25)$$

其中

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{ABC\dots} &\in \mathcal{H}_{ABC\dots}, \mathcal{H}_{ABC\dots} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C \otimes \dots, \\ |\psi\rangle_A &\in \mathcal{H}_A, |\phi\rangle_B \in \mathcal{H}_B, |\chi\rangle_C \in \mathcal{H}_C, \dots \end{aligned} \quad (26)$$

则称 $|\Psi\rangle_{ABC\dots}$ 为直积态，否则称为纠缠态。

对于混态的讨论较为复杂，其内容对之后的讨论并无太大影响，因此我们不再对其展开论述，细致的讨论可以参考^[2]。

4 密度矩阵

密度矩阵是不同于态的一种描述体系的方法，在之前我们说过，混态难以用单纯的波函数表述，此时密度矩阵体现了相比于态描述方法的优越性。我们从纯态入手，逐步建立密度矩阵的量子力学体系。

4.1 纯态的密度矩阵

我们知道，对于 Fock 态，有投影算符 $|n\rangle\langle n|$ ，其可以将某个态 $|\psi\rangle$ 投影到 $|n\rangle$ 上，并得到其对应的相位与大小。

我们可以将上述概念进行推广，考虑在薛定谔绘景下，态矢随着时间演化，设量子态为 $|\psi(t)\rangle$ ，且其满足归一化条件 ($\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$)，则可定义其相应的密度算符 (Density Operator)

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|. \quad (27)$$

其满足以下性质

$$\begin{aligned} \rho^\dagger &= \rho, \\ \rho^2 &= \rho. \end{aligned} \quad (28)$$

而此时如果采用 Fock 表象，其为离散的，因此可表示为矩阵形式，称为密度矩阵 (Density Matrix)，其矩阵元为

$$\rho_{nn'}(t) = \langle n|\rho(t)|n'\rangle = \langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|n'\rangle = C_n(t)C_{n'}^*(t), \quad (29)$$

其中 $C_n(t) = \langle n|\psi(t)\rangle$ 描述态 $|\psi(t)\rangle$ 在 $|n\rangle$ 上的分量大小与相位。其对角元为

$$\rho_{nn}(t) = |C_n(t)|^2 = |\langle n|\psi(t)\rangle|^2 > 0, \quad (30)$$

描述的是此时测量算符 \hat{n} ，得到其本征值 n 的概率。由归一化条件可知，其对角元之和满足

$$\text{Tr}\rho = \sum_n |C_n(t)|^2 = 1. \quad (31)$$

我们写出密度矩阵整体的形式，根据之前的计算可知，此时可以左右各插入一个投

影算符

$$\rho = \sum_{nn'} C_n(t) C_{n'}^*(t) |n\rangle \langle n'| = \sum_{nn'} \rho_{nn'} |n\rangle \langle n'|. \quad (32)$$

可见，若某个矩阵元 $\rho_{nn'}$ 为 0，则有 $C_n(t) = 0$ 或 $C_{n'}(t) = 0$ ，因此若矩阵元 $\rho_{nn'}$ 出现时，其波函数必定包含 $|n\rangle$ 和 $|n'\rangle$ 的分量，即投影到这两个态上的大小不为 0。若 $|\psi\rangle$ 本身即为一个 Fock 态，那么此时其矩阵为一个对角矩阵，且对角元仅有一个值，其余均为 0。

引入密度矩阵后，根据式 (19) 可知，有

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle &= \langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle = \sum_{nn'} \langle \psi | n \rangle \langle n | \mathcal{O} | n' \rangle \langle n' | \psi \rangle \\ &= \sum_{nn'} C_n^* \mathcal{O}_{nn'} C_{n'} = \sum_{nn'} \rho_{n'n} \mathcal{O}_{nn'} \\ &= \sum_{n'} (\rho \mathcal{O})_{n'n'} = \sum_n (\mathcal{O} \rho)_{nn}. \end{aligned} \quad (33)$$

利用矩阵求迹的定义式，可以得到

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}(\rho \mathcal{O}) = \text{Tr}(\mathcal{O} \rho). \quad (34)$$

即可以利用矩阵求迹的方式，并且结合密度矩阵得到算符在态中的期望值。

我们之前说过，密度矩阵是一种不同于态描述的一种方式，而在薛定谔绘景中，态随时间的演化满足薛定谔方程，而密度矩阵是一个含时算符，故密度矩阵应当也要随时间演化，其应当满足一定的数学形式。

从态 $|\psi\rangle$ 出发，利用薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \quad (35)$$

并对密度算符求导，可得

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) &= \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \frac{\partial \langle \psi(t)|}{\partial t} \\ &= \frac{H |\psi(t)\rangle}{i\hbar} \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \frac{\langle \psi(t)| H}{i\hbar} \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)]. \end{aligned} \quad (36)$$

称为刘维尔方程，即密度算符随时间演化所满足的方程。

4.2 混态的密度矩阵

根据之前的介绍，混态并不能单纯的用某个态矢描述，因此难以得到体系的信息，密度矩阵在此即可以发挥重要的作用。

根据正规算符的谱分解^[3]，总可以有体系中正交完备的态矢为 $|\psi_i\rangle$ ($i = 1, 2, 3, \dots$)。我们说过，此时需要用混态系综的概念去描述，假设时间 t 时系统位于态 $|\psi_i\rangle$ 的概率为 p_i ，根据概率守恒的要求，有 $0 \leq p_i \leq 1, \sum_i p_i = 1$ ，即一种纯态的混态统计表述。此时密度算符可以定义为

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_i p_i \rho_i, \quad (37)$$

其中 $\rho_i = |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ 为与纯态 $|\psi_i\rangle$ 对应的密度算符。可以证明，其此时仍然保持纯态密度算符的某些性质，即

$$\begin{aligned} \rho^\dagger &= \rho, \\ \text{Tr} \rho &= \sum_i p_i \text{Tr} \rho_i = \sum_i p_i = 1, \\ \frac{d}{dt} \rho &= \sum_i p_i \frac{d}{dt} \rho_i = \frac{1}{i\hbar} \sum_i p_i [H, \rho_i] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H, \rho]. \end{aligned} \quad (38)$$

此时并不满足 $\rho^2 = \rho$ ，应当为

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \sum_{ii'} p_i p_{i'} |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_{i'}\rangle \langle \psi_{i'}| = \sum_{ii'} p_i p_{i'} |\psi_i\rangle \langle \psi_{i'}| \delta_{ii'} \\ &= \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \leq \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \rho (p_i^2 \leq p_i). \end{aligned} \quad (39)$$

可知，非纯态的密度矩阵满足 $\text{Tr} \rho^2 \leq 1$ 。

此时力学量的平均值也可以用密度矩阵描述，即

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle &= \sum_i p_i \langle \psi_i | \mathcal{O} | \psi_i \rangle = \sum_i p_i \text{Tr}(\rho_i \mathcal{O}) \\ &= \text{Tr}(\sum_i p_i \rho_i \mathcal{O}) = \text{Tr}(\rho \mathcal{O}). \end{aligned} \quad (40)$$

可见，不同于态的描述，密度矩阵对混态也有着基本与纯态一致的量子体系描述方式。

最后我们简单讨论下 Fock 表象下的混态密度矩阵所代表的意义，假设算符，此时

有

$$\rho_{nn'} = \sum_i p_i \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n' \rangle = \sum_i p_i C_n^i C_{n'}^{i*}. \quad (41)$$

其中 $C_n^i = \langle n | \psi_i \rangle$ ，其对角元为

$$\rho_{nn} = \sum_i p_i |C_n^i|^2 \geq 0. \quad (42)$$

$|C_n^i|^2$ 描述的是在纯态 $|\psi_i\rangle$ 中算符 \hat{n} 得到本征值 n 的概率，而 ρ_{nn} 描述的即为在混态中测量到本征值 n 的概率，可以称其为混合态下的量子态 $|n\rangle$ 的布居 (population)，即混合态下体系处于 $|n\rangle$ 的概率。

对于非对角元 $\rho_{nn'}$ ，其描述的是 $|n\rangle$ 与 $|n'\rangle$ 的相干 (coherence)，若其为 0 则说明二者在此混态下并不相干。

倘若此时 Fock 表象的基矢即为之前所设的 $|\psi_i\rangle$ ，则此时 ρ 即为对角矩阵，对角元 $\rho_{nn} = p_n$ 。

4.3 约化密度矩阵

对于一个两体复合体系 $A+B$ ，假设 $|\psi_i\rangle_A \otimes |\varphi_\mu\rangle_B = |\psi_i\rangle_A |\varphi_\mu\rangle_B$ (直积) 构成复合体系的一组完备基，称为非耦合表象。复合体系的任何一个量子态可以表示为其线性组合，即

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{i\mu} a_{i\mu} |\psi_i\rangle_A |\varphi_\mu\rangle_B, \quad (43)$$

其中 $\sum_{i\mu} |a_{i\mu}|^2 = 1$ 。相应的密度矩阵为

$$\rho_{AB} = |\Psi\rangle_{AB} \langle \Psi| = \sum_{i\mu j\nu} a_{j\nu}^* a_{i\mu} |\psi_i\rangle_A |\varphi_\mu\rangle_{BB} \langle \varphi_\nu|_A \langle \psi_j|, \quad (44)$$

显然，其为复合体系的一个纯态。

设 \mathcal{O}_A 为一个可观测量，且其仅仅对 A 系统产生依赖，则在复合体系下，算符应当可以表示为

$$\mathcal{O} = \mathcal{O}_A \otimes I_B, \quad (45)$$

其中 I_B 为 B 体系内的一个单位算符，其作用于 B 空间，因此在复合体系下，可以利用纯态密度矩阵计算 \mathcal{O} 的期望值，即

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}_{AB}(\rho_{AB} \mathcal{O}). \quad (46)$$

带入先前所介绍的非耦合表象，显然有

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{O} \rangle &= {}_{AB} \langle \Psi | \mathcal{O}_A \otimes I_B | \Psi \rangle \\
&= \sum_{j\nu} a_{j\nu B}^* \langle \varphi_\nu |_A \langle \psi_j | \mathcal{O}_A \otimes I_B \sum_{i\mu} a_{i\mu} |\psi_i\rangle_A |\varphi_\mu\rangle_B \\
&= \sum_{ij\mu} a_{j\mu}^* a_{i\mu A} \langle \psi_j | \mathcal{O}_A | \psi_i \rangle_A.
\end{aligned} \tag{47}$$

经过简单计算可得，有

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}_A(\rho_A \mathcal{O}_A), \tag{48}$$

其中

$$\rho_A = \sum_{ij\mu} a_{i\mu} a_{j\mu}^* |\psi_i\rangle_{AA} \langle \psi_j| = \text{Tr}_B(\rho_{AB}). \tag{49}$$

称为约化密度矩阵 (reduced density matrix)，利用其计算 $\langle \mathcal{O} \rangle$ 仅需要对其与算符的乘积进行取迹

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}_A(\rho_A \mathcal{O}_A). \tag{50}$$

其有以下性质

$$\begin{aligned}
\rho_A^\dagger &= \rho_A, \\
\rho_A &\text{非负}, \\
\text{Tr}_A(\rho_A) &= 1.
\end{aligned} \tag{51}$$

而 $\rho_A^2 = \rho_A$ 不一定成立。倘若 $|\Psi\rangle_{AB}$ 为一个直积态，此时子系中的描述也为纯态，则 $\rho_A^2 = \rho_A$ 成立；而更一般的来讲，对较大体系的纯态，其一般是纠缠态，而子体系中的描述则对应混态，此时应当用混态密度矩阵进行描述。

从而我们也可以从约化密度矩阵的角度定义直积态与纠缠态，对于一个 N 体复合体系，倘若

$$\rho_{ABC\dots} = \rho_A \otimes \rho_B \otimes \rho_C \dots, \tag{52}$$

则可称 $|\Psi\rangle_{ABC\dots}$ 为一个直积态，否则称为纠缠态。

4.4 两体施密特分解

对于两体的纠缠特性，可以利用施密特 (Schmidt) 分解进行研究，我们知道对于一个两体复合体系 A+B 的任何一个量子态可以表示为

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{n\nu} c_{n\nu} |\psi_n\rangle_A \otimes |\varphi_\nu\rangle_B, \tag{53}$$

而 $|\psi_n\rangle_A$ 和 $|\varphi_\nu\rangle_B$ 分别是其子空间的一组正交归一化基

$${}_A\langle\psi_m|\psi_n\rangle_A = \delta_{mn}, {}_B\langle\psi_\nu|\psi_\mu\rangle_B = \delta_{\nu\mu}. \quad (54)$$

可以作局域正交变换

$$|\chi_n\rangle_B = \sum_{\nu} c_{n\nu} |\varphi_\nu\rangle_B. \quad (55)$$

此时有

$$|\phi\rangle_{AB} = \sum_n |\phi_n\rangle_A |\chi_n\rangle_B, \quad (56)$$

其满足

$${}_B\langle\chi_m|\chi_n\rangle_B = \sum_{\nu} c_{m\nu}^* c_{n\nu} = p_n \delta_{nm}. \quad (57)$$

可以令其归一化, 令 $|f_n\rangle_B = |\chi_n\rangle_B / \sqrt{p_n}$, 则有

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle_A |f_n\rangle_B. \quad (58)$$

令

$$\lambda_n = \sqrt{p_n}, n = 1, 2, \dots, M. \quad (59)$$

λ_n 称为 Schmidt 系数, 而 M 称为 Schmidt 数。

可以看到, 通过这种变换可以得到一个对角阵, 且 M 应当是 n 的个数, 即这个态包含 A 态非零分量的个数, 利用分解后的态 $|f_n\rangle_B$ 此时其在 B 态中的非零分量个数也为 M , 我们对 Schmidt 数进行简单论述。

显然, 如果 $M = 1$, 则此时为直积态, 而 $M > 1$ 则为纠缠态。我们再对其密度矩阵进行分析, 有

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle_{AB} {}_{AB}\langle\psi| = \sum_{nm} \sqrt{p_n p_m} |\psi_n\rangle_A |f_n\rangle_B {}_B\langle f_m| {}_A\langle\psi_m|, \quad (60)$$

而约化密度矩阵为

$$\begin{aligned} \rho_A &= Tr_B(\rho_{AB}) = \sum_n p_n |\psi_n\rangle_{AA}\langle\psi_n|, \\ \rho_B &= Tr_A(\rho_{AB}) = \sum_n p_n |f_n\rangle_{BB}\langle f_n|. \end{aligned} \quad (61)$$

此时, 其具有相同的非零对角元, 说明二者的秩和迹相同。

可以看出, M 的数量越大, 此时两体系统纠缠的态越多, 说明其在一定程度上可

以衡量两体纠缠，而 Schmidt 系数可以用于构造熵，即 Von Neumann 熵。同时，利用约化密度矩阵的非零对角元相同的性质，可以定义一个两体纠缠度 (纠缠熵)，即

$$S(\rho_A) = S(\rho_B) = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \log \rho_B) = -\sum_{n=1}^M \lambda_n \log \lambda_n. \quad (62)$$

其中 \log 一般以 2 为底，显然有直积态的纠缠熵为 0，而非直积态的纠缠熵均大于 1，其可以衡量二者的纠缠程度。

对于 N 体的纠缠，同样可以参考文献^[2]，其不能再像两体进行 Schmidt 分解。

5 量子信息论

先前，我们讨论了许多两体问题，并以 Schmidt 分解给出了纠缠的衡量程度，接着，我们讲述量子信息论。

5.1 冯诺依曼熵

与香农熵类似，密度矩阵的冯诺依曼熵 (Von Neumann 熵) 的定义是

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho). \quad (63)$$

根据矩阵求迹的性质，可以看出其在么正变换 $\rho \rightarrow U \rho U^{-1}$ 下保持不变，从而我们可以利用么正变换将密度矩阵对角化，即

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (64)$$

其中 $|\psi_i\rangle$ 是正交归一的，并且 $p_i > 0$ ，则显然

$$\rho \log \rho = \begin{pmatrix} p_1 \log p_1 & & & \\ & p_2 \log p_2 & & \\ & & p_3 \log p_3 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (65)$$

从而

$$S(\rho) = -\sum_i p_i \log p_i. \quad (66)$$

与香农熵是一致的。

很显然，冯诺依曼熵也是正的，即

$$S(\rho) \geq 0. \quad (67)$$

仅有纯态时其取 0，同时，我们也可以确定对 k 维空间冯诺依曼熵的上界为

$$S(\rho) \leq \log k. \quad (68)$$

是在 k 个态等概率出现时所得到的，即

$$\rho = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} = \frac{1}{k} I. \quad (69)$$

其中 I 为单位矩阵，在这种情况下，可以称系统处于最大混合状态。

对于一个两体纯态，可以对其进行施密特分解，从而得到子部分的密度算符分别为

$$\begin{aligned} \rho_A &= \sum_i p_i |\psi_A^i\rangle \langle \psi_A^i|, \\ \rho_B &= \sum_i p_i |\psi_B^i\rangle \langle \psi_B^i|. \end{aligned} \quad (70)$$

从而有

$$S(\rho_A) = - \sum_i p_i \log(p_i) = S(\rho_B), \quad (71)$$

即两体纠缠系统的纯态，其子部分的冯诺依曼熵是相等的，正如式 (62) 所示，从而其可以衡量两体纠缠度。

根据之上的结论，如果 AB 系统的维度一致，均为 k ，则可知两体纠缠度的最大值即为 $\log k$ ，此时 $p_i = 1/k$ ，从而 AB 系统的态为

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{k}} \sum_i |\psi_A^i\rangle |\psi_B^i\rangle. \quad (72)$$

可以被称为最大纠缠态。

5.2 凹性

冯·诺伊曼熵具有凹性，是一个凹函数。设有两个密度算符 ρ_1, ρ_2 ，构造 $\rho(t) = t\rho_1 + (1-t)\rho_2$ ，其中 $0 \leq t \leq 1$ ，要证明

$$\frac{d^2}{dt^2} S(\rho(t)) \leq 0. \quad (73)$$

利用简单的求导以及一个积分公式 $\log \rho = \int_0^\infty ds \left(\frac{1}{s+1} - \frac{1}{s+\rho(t)} \right)$ 可得

$$\frac{d^2}{dt^2} S(\rho(t)) = - \int_0^\infty ds \text{Tr} \left(\dot{\rho} \frac{1}{s+\rho(t)} \dot{\rho} \frac{1}{s+\rho(t)} \right). \quad (74)$$

可以将取迹部分变为两个算符的乘积，即 $\text{Tr}(A^2)$ ，其中 $A = (s + \rho(t))^{-1/2} \rho(t) (s + \rho(t))^{-1/2}$ ，则显然其是正定的，即可得到式 (73)。

根据凹函数的性质，我们知道

$$\sum_i p_i S(\rho_i) \leq S\left(\sum_i p_i \rho_i\right), \quad (75)$$

说明将多个密度矩阵混合会使得冯诺依曼熵增加，所增加的增量一般被称为 Holevo 信息，记为

$$\chi = S\left(\sum_i p_i \rho_i\right) - \sum_i p_i S(\rho_i). \quad (76)$$

5.3 相对熵与互信息

相对熵的引入与经典基本一致，是表示实际的密度矩阵 ρ 与我们预期的密度矩阵 σ 的“距离”，即

$$S(\rho||\sigma) = \text{Tr}(\rho \log \rho - \rho \log \sigma), \quad (77)$$

称为 σ 与 ρ 的量子相对熵，可以证明，其一定满足

$$S(\rho||\sigma) \geq 0. \quad (78)$$

仅当 $\rho = \sigma$ 时等号成立。具体的证明比较数学，可以参考文献^[4]。

举一个简单的例子，考虑两体系统 AB，将其密度矩阵记为 ρ_{AB} ，两体系的约化密度矩阵分别为 ρ_A 与 ρ_B ，一般复合系统的态为混合态，因此

$$\rho_{AB} \neq \rho_A \otimes \rho_B. \quad (79)$$

但我们可以假设二者没有关联，即猜测

$$\sigma_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B. \quad (80)$$

则量子相对熵为

$$\begin{aligned} S(\rho_{AB}||\sigma_{AB}) &= Tr_{AB}(\rho_{AB} \log \rho_{AB} - \rho_{AB} \log \rho_A - \rho_{AB} \log \rho_B) \\ &= S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}). \end{aligned} \quad (81)$$

可见，其类似于经典中定义的互信息，可见其也是大于等于 0 的，即

$$I(A; B) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}) \geq 0. \quad (82)$$

上式也被称为熵的次可加性。但事实上，量子互信息也不再具有经典互信息的意义，因此在此仅仅是与经典对应进行了引入。

熵还具有一种很强的单调性，具体证明可以参考^[5]。例如对两体系统 AB，假设有两个密度算符 ρ_{AB} 与 σ_{AB} ，记 A 的约化密度矩阵分别为 $\rho_A = Tr_B \rho_{AB}$ 与 $\sigma_A = Tr_B \sigma_{AB}$ ，则量子相对熵的单调性是指

$$S(\rho_{AB}||\sigma_{AB}) \leq S(\rho_A||\sigma_A). \quad (83)$$

即对一个系统的子部分求迹会导致相对熵降低。

对于一个三部分的量子系统 ABC，设密度算符为 ρ_{ABC} ，有约化密度算符 $\rho_A = Tr_{BC} \rho_{ABC}$ ， $\rho_{BC} = Tr_A \rho_{ABC}$ ，引入

$$\sigma_{ABC} = \rho_A \otimes \rho_{BC}. \quad (84)$$

计算其与真实的系统的相对熵，有

$$S(\rho_{ABC}||\sigma_{ABC}) = S_A + S_{BC} - S_{ABC}. \quad (85)$$

若再分别对 C 取迹，则有

$$S(\rho_{AB}||\sigma_{AB}) = S(\rho_{AB}||\rho_A \otimes \rho_B) = S_A + S_B - S_{AB}. \quad (86)$$

利用单调性有

$$S(\rho_{ABC}||\sigma_{ABC}) \geq S(\rho_{AB}||\sigma_{AB}), \quad (87)$$

即

$$S_{AB} + S_{BC} \geq S_B + S_{ABC}. \quad (88)$$

称为熵的强次可加性 (Strong Subadditivity)。

倘若我们再引入一个辅助系统 D，则应有 $S_{AB} = S_{CD}$ ，以及 $S_{ABC} = S_D$ ，从而

$$S_{CD} + S_{BC} \leq S_B + S_D. \quad (89)$$

若引入条件熵 $S(A|B) = S_{AB} - S_B$ ，则有

$$S(C|D) + S(C|B) \geq 0. \quad (90)$$

则两个条件熵不能同时为负。实际上，条件熵是可以取负的，当 AB 系统处于最大纠缠态时 (纯态)，则 $S_{AB} = 0$ ，但 S_B 最大，显然条件熵是负的。

因此，C 不可能同时与 D 和 B 处于最大纠缠态，这称为量子纠缠的单配性 (Monogamy of Entanglement)。

6 一些应用以及数值求解

在本节，我们介绍一些量子系统的演化并进行一些数值求解，给出熵的变化。

6.1 主方程

在之前我们已经推出，一个封闭的系统，其密度矩阵随时间的演化满足

$$\frac{d}{dt}\rho = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho]. \quad (91)$$

即刘维尔方程，实际上，这也能通过 Kraus 算符推出，因为封闭系统仅有一个非零的 Kraus 算符，即时间演化算符。

对于一个开放量子系统，其有许多非零的 Kraus 算符，此时系统演化用 Lindblad 方程描述

$$\hbar \frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] - \frac{1}{2}(\Gamma\rho(t) + \rho(t)\Gamma) + \sum_{m=1} L_m \rho(t) L_m^\dagger, \quad (92)$$

其中 L_m 称为 Lindblad 算符，描述系统与环境的相互作用。具体推导可以参考^[6]。

6.2 双量子比特耦合

首先，我们在封闭系统下利用刘维尔方程计算两体演化的纠缠熵。

考虑量子光学中双量子比特 (二能级人工原子, 量子计算的基本单元) 之间相互作用, 在弱耦合区间内, 利用 Jaynes-Cummings 模型 (JC Model), 可以构造其哈密顿量为

$$H = \hbar\omega_a\sigma_{az} + \hbar\omega_b\sigma_{bz} + \hbar g(\sigma_{a+}\sigma_{b-} + \sigma_{b+}\sigma_{a-}). \quad (93)$$

其中 g 为耦合强度, ω 是与能级间距有关的参数, σ 为 Pauli 矩阵。将哈密顿量展开到 $H_a \otimes H_b$ 的本征空间, 即

$$H = \begin{pmatrix} \omega_a + \omega_b & & & \\ & \omega_a - \omega_b & g & \\ & g & -\omega_a + \omega_b & \\ & & & -\omega_a - \omega_b \end{pmatrix}. \quad (94)$$

考虑两个相同的量子比特, 即 $\omega_a = \omega_b$, 耦合对角元消除, 代入刘维尔方程, 可以得到一个线性微分方程组, 可以发现 $|11\rangle$ 态与 $|00\rangle$ 是不耦合的, 因为其能量已经达到最高或者最低, 但 $|01\rangle$ 与 $|10\rangle$ 是耦合的。

代入求解微分方程组, 并设初始态为 $|01\rangle$, 数值求解可以得到系统的演化过程如2所示。

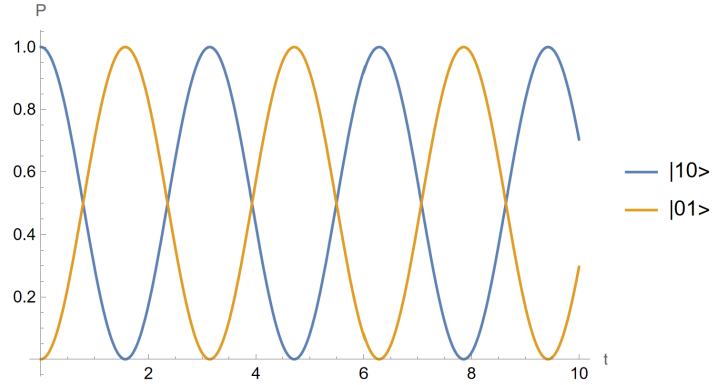


图 2: 双量子比特耦合随时间的演化过程

可以看出, 两个量子比特在不断交换能量, 我们计算了其纠缠熵, 即

$$S = - \sum_{i=1,2} p_i \log_2 p_i, \quad (95)$$

其中 p_i 为某个态的取值概率, 数值求解结果如3所示。

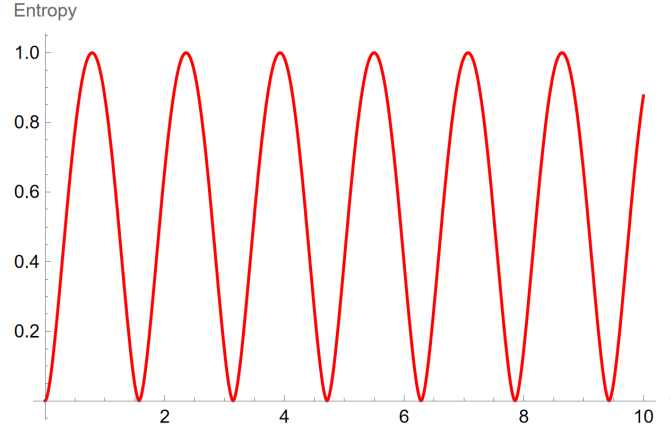


图 3: 双量子比特耦合纠缠熵随时间的变化

可见，在系统态为两个本征态的叠加时，此时纠缠熵最大，也称为双模最大纠缠态 (GHZ 态)，在量子计算中有着较多的应用。

倘若我们可以在此时对系统进行测量，所测量的即为 GHZ 态，但时间演化周期很短，一个量子操作的时间可能远远超出其演化周期，因此这种制备方式的保真度较低，只是一种理想状态下的制备方式，我们在此仅仅是为分析其纠缠熵。

6.3 热库演化

将一个系统与热库进行相互作用，会使得系统发生演化，我们具体计算热库情况下的密度矩阵演化。

对于一个与玻色热库接触的单模光场，其密度矩阵的演化满足主方程^[7]

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) = & -\frac{\Gamma}{2}\bar{n}(\omega_0)[ss^+\rho_S(t) - s^+\rho_S(t)s] \\ & -\frac{\Gamma}{2}[\bar{n}(\omega_0) + 1][s^+s\rho_S(t) - s\rho_S(t)s^+] + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (96)$$

其中热库的平均光子数为:

$$\bar{n}(\omega_0) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right) - 1}, \quad (97)$$

Γ 为系统与热库的耦合强度，对于单模光场，算符 $s = a$ 。

理论上，系统光子数是不受限的，但为更简单地显示结果，我们将光场限制在光子数为 0 与 1，即设系统维度为 2，代入产生湮灭算符的具体形式，可以进行数值求解微分方程。

在不同的温度 (平均热光子数) 下，设置初态为基态，其态的演化过程如4所示

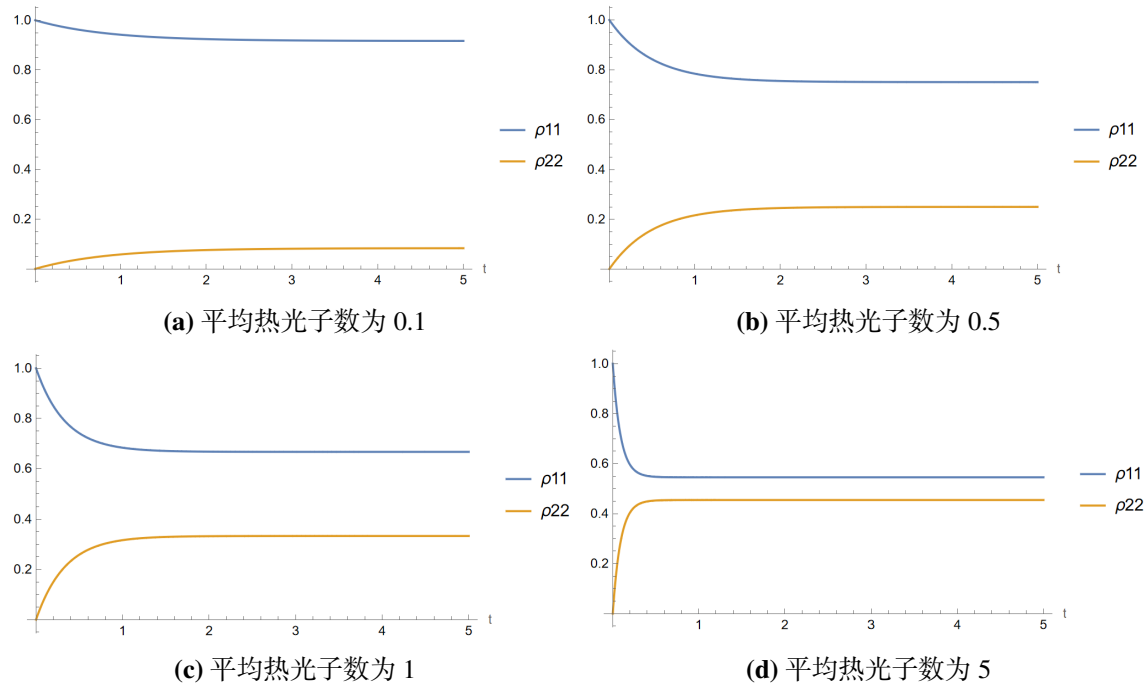


图 4: 不同温度下单模光场的态随时间的演化

平均热光子数即代表温度的高低，可以看出，温度越高时，其最终态会越趋近于等概率分布在两个态，符合热力学的演化过程。

当温度为无穷时，由于系统有限，仅仅考虑正温度的情况，其最终会演化到等概率分布在两个态上，这并不符合正常人的思维，因为人们总是认为其一定分布在能量最高的态上，但实际上正温度系统是无法到达这种状态的，只有负温度系统才能出现这种状态，具体可以参考^[8]，我们在此专注于其熵变过程。

在初态，其是纯态 $|0\rangle$ ，因此冯诺依曼熵 $S = 0$ ，而随系统与外界交换热量，其发生不可逆过程，虽然系统并非封闭，但系统在不断吸热，根据热力学第二定律，熵在逐渐增大，在平均热光子数为 0.1 时，求解结果如⁵所示

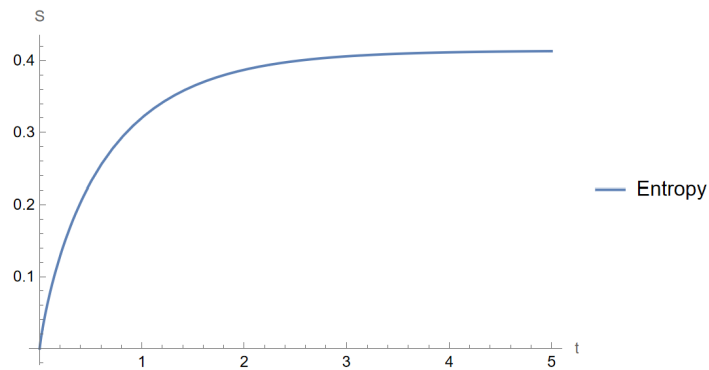


图 5: 单模光场与热库接触的冯诺依曼熵随时间的变化

实际上, 无论平均热光子数取多少, 其变化曲线形状一致, 只是熵的最大值在不断趋近于 1, 并且趋近速度逐渐增大, 这也是符合热力学的, 因为温差越大, 传热越快, 熵变显然也越快。

7 总结

在本文中, 我们从经典信息论入手, 介绍了自信息的概念, 并引入了信息熵, 在其基础之上引入了联合熵、条件熵、互信息和相对熵。

接着, 我们从一些量子力学的基础引入了纯态与混态对的概念, 对纯态下的直积态与纠缠态进行了介绍, 并且通过波函数难以描述混态从而引入了密度矩阵, 详细阐述了其各种性质, 以及纯态、混态以及约化密度矩阵的区别和各自意义, 同时介绍了两体 Schmidt 分解, 用于后面的两体系统阐述。

在经典信息论以及密度矩阵的基础上, 接着我们引入了量子信息论, 介绍了冯诺依曼熵和其一些性质, 并且阐述了相对熵的概念, 介绍了相对熵的次可加性和强次可加性。

最后, 我们利用数值计算了两种量子系统随时间的演化过程。首先是双量子比特相互作用的 JC 模型, 求解了其耦合态之间的相互传态, 并计算了纠缠熵随时间的变化过程, 能够一定程度上实现双模最大纠缠态的制备。第二个是单模光场 (并且限制系统最多有一个光子) 与热库的相互作用, 求解了其在不同平均热光子数下的态的演化, 利用热力学解释了这个过程, 并且计算了冯诺依曼熵, 阐述了其为何单调递增。

综上, 本文从经典信息论入手, 通过密度矩阵的量子体系描述方式引入了量子信息论, 并且进行了具体求解。调研充分、推导严谨并且进行了具体计算。

参考文献

- [1] 曾谨言. 量子力学. 卷 II 5 版[M]. 5 版. 北京: 科学出版社, 2013.
- [2] HORODECKI R, HORODECKI P, HORODECKI M, et al. Quantum entanglement[J]. Rev. Mod. Phys., 2009, 81: 865-942.
- [3] NIELSEN M A, CHUANG I L. Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition[M]. Cambridge University Press, 2011.
- [4] WITTEN E. A mini-introduction to information theory[J]. La Rivista del Nuovo Cimento, 2020, 43(4): 187-227.
- [5] LIEB E H, RUSKAI M B. Proof of the strong subadditivity of quantum-mechanical entropy[J]. Journal of Mathematical Physics, 1973, 14: 1938-1941.

- [6] MANZANO D. A short introduction to the Lindblad master equation[J]. AIP Advances, 2020, 10(2).
- [7] 张智明. 量子光学[M]. 北京: 科学出版社, 2015.
- [8] 林宗涵. 热力学与统计物理学 (第二版) [M]. 北京大学出版社, 2018.

附录

```

 $\Gamma = 1$ ; (*耗散系数*)
 $n = 1$ ; (*热库粒子数*)
(*定义算符和初始条件*)
 $a = \{\{0, 1\}, \{0, 0\}\}$ ;
adagger = ConjugateTranspose[a];
(*共轭转置*)
initialState =  $\{\{1, 0\}, \{0, 0\}\}$ ;
(*定义微分方程*)
eqn[t_] :=  $\{\rho'[t] == -\Gamma/2 * n * (a.adagger.\rho[t] - adagger.\rho[t].a) -$ 
 $\Gamma/2 * (n+1) * (adagger.a.\rho[t] - a.\rho[t].adagger) +$ 
 $ConjugateTranspose[-\Gamma/2 * n * (a.adagger.\rho[t] - adagger.\rho[t].a) -$ 
 $\Gamma/2 * (n+1) * (adagger.a.\rho[t] - a.\rho[t].adagger)], \rho[0] == initialState\}$ ;
(*求解方程*)
sol = NDSolve[eqn[t],  $\rho$ , {t, 0, 10}];
(*数值求解微分方程组*)
 $\rho[t_] := \rho[t] /. sol[[1, 1]]$ ;
(*绘图*)
Plot[Evaluate[ $\{\rho[t][[1, 1]], \rho[t][[2, 2]]\}$ ], {t, 0, 5},
(*绘图 计算*)
AxesLabel  $\rightarrow \{ "t", PlotRange \rightarrow Full, PlotLegends \rightarrow \{ " \rho_{11}", " \rho_{22}" \}$ 
(*坐标轴标签 绘制范围 全范围 绘图的图例*)
Plot[Evaluate[ $-\rho[t][[1, 1]] \times \log[2, \rho[t][[1, 1]] - \rho[t][[2, 2]] \times \log[2, \rho[t][[2, 2]]$ ],
(*绘图 计算 对数*)
{t, 1, 5}, AxesLabel  $\rightarrow \{ "t", "S", PlotRange \rightarrow Full, PlotLegends \rightarrow \{ "Entropy" \}$ 
(*坐标轴标签 绘制范围 全范围 绘图的图例 熵*)

```

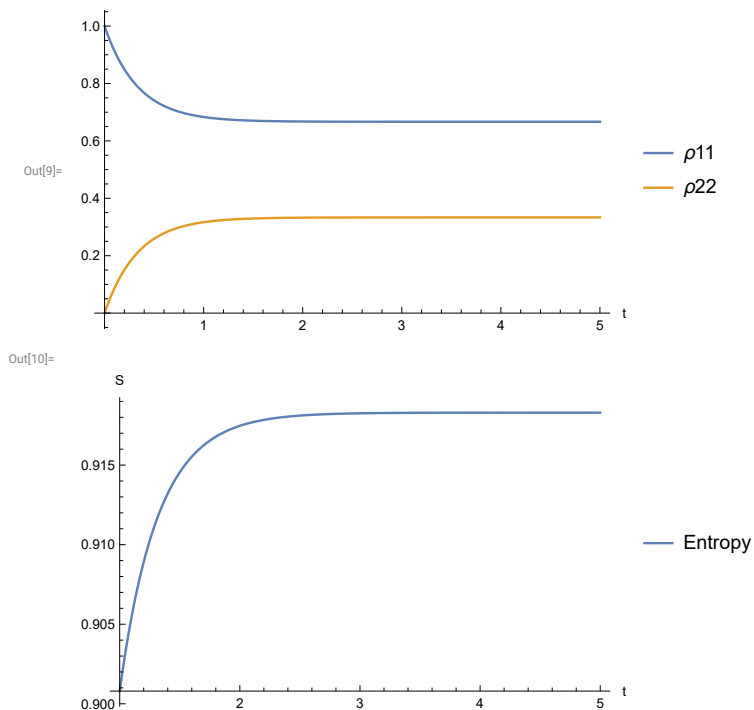


图 6: 热库演化求解

```

In[1]:= (*求解方程*)
eqns = {I a1'[t] == 1 a2[t], I a2'[t] == 1 a1[t]};
          虚数单位          虚数单位
(*初始条件*)
initialConditions = {a1[0] == 1, a2[0] == 0};
(*求解*)
solution = NDSolve[{eqns, initialConditions}, {a1[t], a2[t]}, {t, 0, 10}];
          数值求解微分方程组
(*绘图*)
plot = Plot[Evaluate[{Abs[a1[t]]^2, Abs[a2[t]]^2} /. solution], {t, 0, 10},
          绘图 计算          绝对值          绝对值
          PlotRange -> All, PlotLegends -> {"|10>", "|01>"}, AxesLabel -> {"t", "P"}]
          绘制范围          全部 绘图的图例          坐标轴标签

entanglementEntropy =
  -Abs[a1[t]]^2 Log[2, Abs[a1[t]]^2] - Abs[a2[t]]^2 Log[2, Abs[a2[t]]^2];
          绝对值          对数 绝对值          绝对值          对数 绝对值
plot = Plot[Evaluate[{entanglementEntropy} /. solution], {t, 0, 10},
          绘图 计算
          PlotRange -> All, AxesLabel -> {"t", "Entropy"}, PlotStyle -> Red]
          绘制范围          全部 坐标轴标签          熵          绘图样式          红色

```

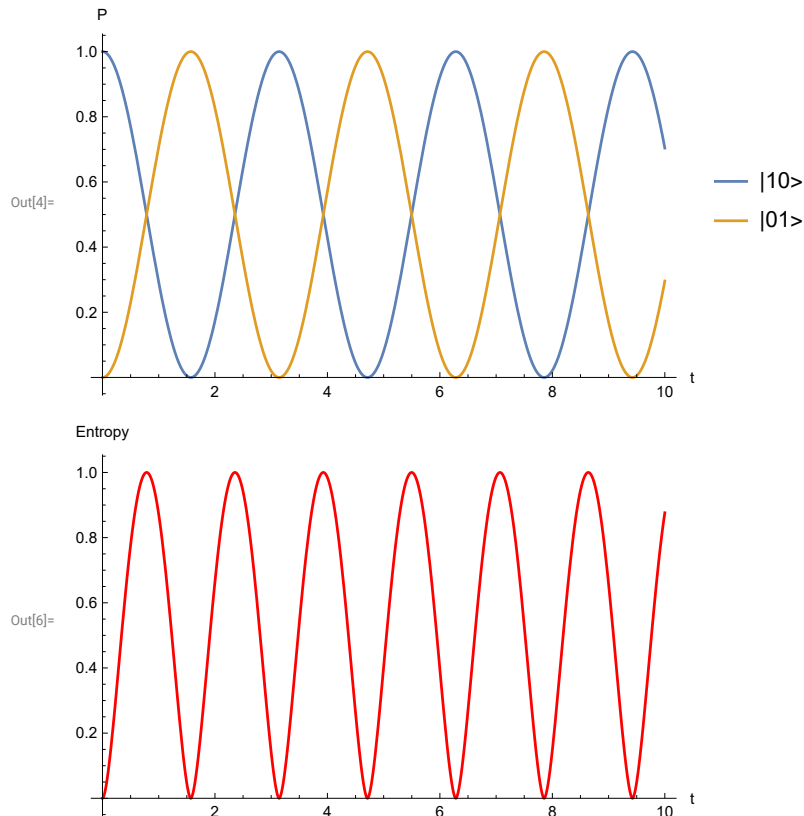


图 7: 双量子比特耦合求解