

Quantum Information Theory

Yury Holubeu *

June 8, 2025

This note is not intended for distribution. The quantum theory of information are discussed in detail. The note has solved problems and summary of special topics. Readers who have opened this note for the first time are highly recommended to read the preface.

Contents

Preface and main motivation	7
I — Typical Quantum Inform Theory in a Nutshell —	8
1 Об основных методах и концепциях	8
1.1 Основные методы квантовой информации	8
1.1.1 Определения и смысл состояний, запутанности и измерений	8
1.1.2 Преобразования состояний, простейших квантовых вентелях	10
1.1.3 Определения операторов и отображений	12
1.1.4 Основные свойства матриц плотности систем	12
1.1.5 Теоремы о свойствах состояний, операторов и измерений	13
1.1.6 Об квантовых энтропиях	14
1.1.7 О квантовой информации	14
1.1.8 О квантовых каналах	14
1.1.9 Описание многочастичных систем	14
1.1.10 Об энтропии	14
1.1.11 Quantum Channels: Basics	14
1.1.12 Quantum Channels: Special Features	15
1.1.13 General ways to compute something with cubits?	15
1.1.14 General ways to compute something with superconductors	15
1.2 О природе квантовой механике, информации и сути происходящего	15
1.2.1 О смысле измерений и коллапсе волновой функции	15
1.2.2 О проверках основ квантовой механики	16
1.3 О приложениях, особых квантовых схемах с вентелями	16
1.3.1 О квантовом поиске (?????)	16
1.4 Темы лекций Филиппова введения	16
2 Об другом	16
2.1 Темы Холево	16
2.1.1 Введение	16
2.1.2 X1. Стандартная статистическая модель квантовой механики	16
2.1.3 X2. Статистика квантовых измерений	17
2.1.4 X3. Эволюция открытой системы	17
2.1.5 X4. Последовательные и непрерывные процессы измерения	17
2.1.6 X5. Процессы в пространстве Фока	17
II — Special Topics in a Nutshell —	18
2.2 О тензорных сетях и другом	18
2.2.1 Об типичном квантовом шифровании и криптографии (?????)	18
2.2.2 Ф-лб. Квантовые тензорные сети.	18
2.2.3 Ф-л7. Состояния матричного произведения (MPS). Операторы в виде одномерной тензорной сети (MPO).	18

*<https://yuriholubeu.github.io/>, yuri.holubev@gmail.com

2.2.4	Ф-л8. Оптимизация тензорной сети MPS. Анзац многомасштабной перенормировки перепутанности (MERA).	18
2.2.5	Ф-л9. Бозоны и фермионы. Вторичное квантование	18
III	Основы квантовой информации	19
3	Понятия квантовой теории информации	19
3.1	Основные законы квантовой механики	19
3.2	Проверка законов квантовой механики	19
3.2.1	Эксперимент ЭПР	19
3.2.2	Опыт Аспе	19
3.3	Введение и обзор квантовой теории информации по Нельсону и Чангу	19
3.3.1	Квантовые биты	31
3.3.2	Несколько кубитов	33
3.4	Квантовые вычисления	34
3.4.1	Однокубитовые элементы	35
3.5	Квантовые вычисления	35
3.6	Введение в квантовую механику	35
3.7	Введение в информатику	36
3.8	Другие темы основ	36
3.8.1	Квантовые базы данных	36
IV	Квантовая теория информации	37
4	Квантовая информация по Холево	37
4.0.1	Введение	37
4.1	СТАНДАРТНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	45
4.1.1	1. Основные понятия	45
4.1.2	2. Симметрии, кинематика, динамика	52
4.1.3	3. Составные системы	57
4.1.4	4. Проблема скрытых параметров	60
4.2	СТАТИСТИКА КВАНТОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ	65
4.2.1	1. Обобщенные наблюдаемые	65
4.2.2	2. Квантовая теория статистических решений	70
4.2.3	3. Ковариантные наблюдаемые	79
4.3	ЭВОЛЮЦИЯ ОТКРЫТОЙ СИСТЕМЫ	85
4.3.1	1. Преобразования квантовых состояний и наблюдаемых	85
4.3.2	2. Квантовые динамические полугруппы	89
4.4	ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЕ И НЕПРЕРЫВНЫЕ ПРОЦЕССЫ ИЗМЕРЕНИЯ	98
4.4.1	1. Статистика последовательных измерений	98
4.4.2	2. Процессы непрерывного измерения	106
4.5	ПРОЦЕССЫ В ПРОСТРАНСТВЕ ФОКА	114
4.6	§1. Квантовое стохастическое исчисление	114
4.6.1	1.2 Стохастический интеграл.	116
4.6.2	1.3 Квантовая формула Ито.	118
4.6.3	2. Расширения в пространстве Фока	122
5	Квантовый шум и квантовые преобразования	132
6	Исправление квантовых ошибок	133
7	Энтропия и информация	133

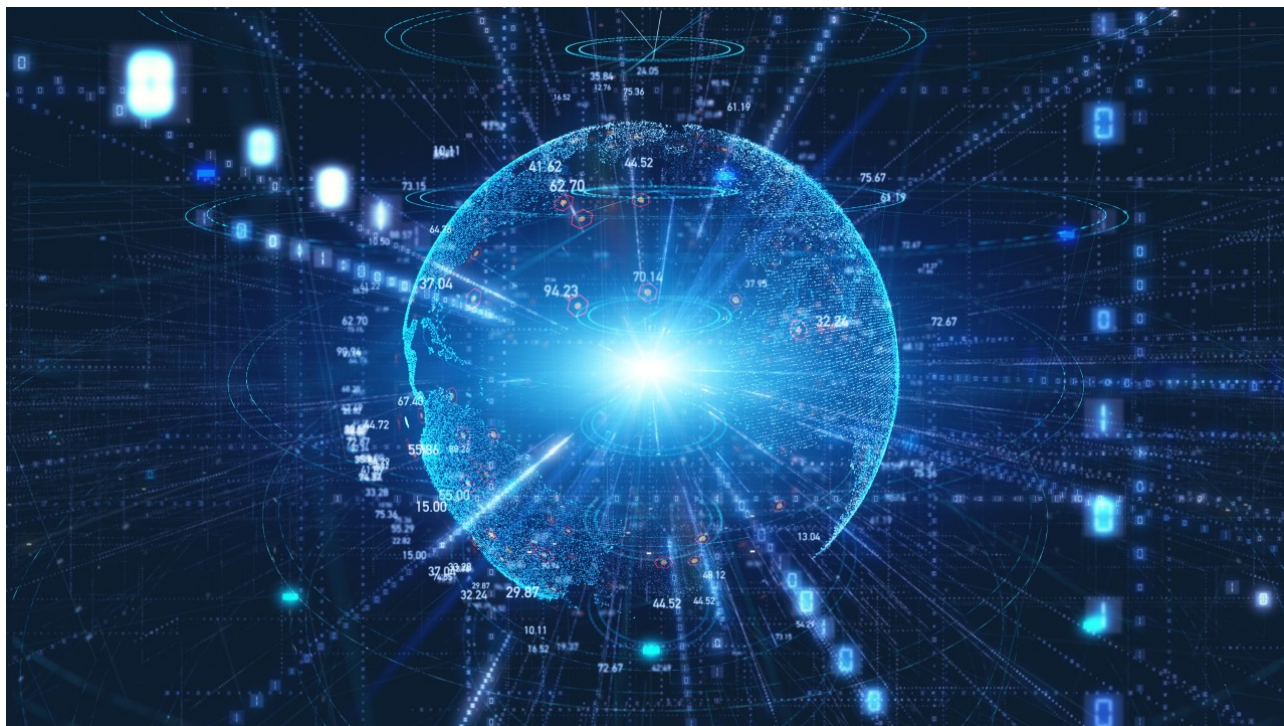
8	Квантовая теория информации	133
V	Квантовые вычисления	134
9	Квантовые схемы	134
9.0.1	Моделирование квантового компьютера	134
10	Квантовое преобразование Фурье и его приложения	134
11	Квантовые алгоритмы поиска	134
12	О физической реализации квантовых компьютеров	134
VI	Problems	136
13	Типичные задачи	136
13.1	Общие вопросы	136
13.1.1	Problems about проверку основ теории	136
13.2	Типичные задачи (!!)	136
13.2.1	Problems about понимание состояний, запутанности, простейших преобразований	136
13.2.2	Задачи о кубитах	138
13.2.3	Задачи о кутритах и схожем	138
14	Другие задачи (????)	138
14.0.1	Разные задачи (????)	138
14.0.2	Об особенных квантовых каналах (?????)	139
VII	Well-known and Important Articles	140
15	The Physical Implementation of Quantum Computation by DiVincenzo	140
15.1	Introduction	140
15.2	Why <i>quantum</i> information processing?	140
15.3	Realizing quantum computation	141
15.4	Desiderata for quantum communication	148
15.5	Summary	149
16	Topological phases and quantum computation Kitaev, Laumann	149
16.1	Introduction: The quest for protected qubits	149
16.2	Topological phenomena in 1D: boundary modes in the Majorana chain	150
16.2.1	Nature of topological degeneracy (spin language)	151
16.2.2	Reduction of TFIM to SPSC by the Jordan-Wigner transformation	152
16.2.3	Majorana operators	153
16.2.4	General properties of quadratic fermionic Hamiltonians	154
16.2.5	Why are the boundary modes robust?	155
16.3	The two-dimensional toric code	155
16.3.1	Ground states	156
16.3.2	Excitations	157
16.4	Abelian anyons and quasiparticle statistics	158
16.4.1	Superslection sectors and fusion rules	160
16.4.2	Mutual statistics implies degeneracy on the torus	160
16.4.3	The toric code in a field: perturbation analysis	161
16.4.4	Robustness of the topological degeneracy	161

16.4.5	Emergent symmetry: gauge formulation	162
16.5	The honeycomb lattice model	163
16.5.1	A (redundant) representation of a spin by 4 Majorana operators	164
16.5.2	Solving the Honeycomb Model using Majoranas	164
16.5.3	Fermionic spectrum in the honeycomb lattice model	166
16.5.4	Quasiparticle statistics in the gapped phase	167
16.5.5	Nonabelian phase	168
16.5.6	Robustness of chiral modes	169
VIII	Old, Fundamental Theories	171
IX	Special Effects, Properties: Main Articles	172
X	Experiments: Main Articles	173
XI	Typical Theories: Other Articles	174
17	Quantum variance: a measure of quantum coherence and quantum correlations for many-body systems by Frérot, Roscilde	174
17.1	Introduction	174
17.2	Separating classical and quantum fluctuations.	176
17.3	Properties of the quantum variance.	177
17.4	Quantum variance of a global observable and volume law.	178
17.5	Quantum variance does not go critical at a thermal transition.	180
17.6	Quantum variance of bipartite fluctuations and area law.	180
17.7	Quantum variance provides quantum correlations.	181
17.8	Conclusions and outlook.	183
17.9	Operator approach to coherent vs. incoherent fluctuations in mixed states: area law of quantum coherence	184
17.10	Path-integral representation of a generic density matrix and of the quantum variance	186
17.11	Quantum variance as generalized de Broglie wavelength	187
17.11.1	Quantum variance for simple models	187
17.11.2	Imaginary-time fluctuations as quantum coherent fluctuations	188
17.12	Quantum variance vs. skew information and local quantum uncertainty	190
17.12.1	Wigner, Dyson, Lieb and the convexity of quantum variance	190
17.12.2	Quantum variance vs. local quantum uncertainty	191
17.13	Quantum variance vs. quantum Fisher information: quantum correlations and metrology	192
17.13.1	Quantum variance as a lower bound to the quantum Fisher information	193
17.13.2	Metrological implications: the interferometric power	194
17.14	Quantum variance, skew information and quantum Fisher information of bipartite fluctuations for free fermions	194
17.14.1	Quantum variance	194
17.14.2	Wigner-Yanase skew information	195
17.14.3	Quantum Fisher information	196
17.14.4	Discussion	196
17.15	Measurement of bipartite quantum variance with quantum-gas microscopes	197
17.16	Quantum variance as multiparticle entanglement witness	198
XII	Other theories	199

XIII	Other, Non-Typical Theory	200
18	On temporal entropy and the complexity of computing the expectation value of local operators after a quench by Carignano, Ramos Marimón	200
18.1	Introduction.	200
18.2	Setup	201
18.2.1	Compressing the tMPS	201
18.2.2	The rank of the reduced transition matrices	203
18.2.3	Relation to other definitions of temporal entanglement	204
18.3	Numerical results.	205
18.4	Conclusions.	206
18.5	Appendix	208
18.5.1	The algorithm	208
18.5.2	Estimate of the bond dimension for a given fidelity	211
18.5.3	Comparison with other approaches	211
XIV	Typical Theory: Another Explanations	214
XV	Articles about Potential Applications	215
XVI	Very Special Effects	216
XVII	Other Experiments	217
XVIII	Другие темы	218
19	Другие темы	218
20	On temporal entropy and the complexity of computing the expectation value of local operators after a quench by Carignano, Ramos Marimón	218
20.1	Introduction.	218
20.2	Setup	219
20.2.1	Compressing the tMPS	219
20.2.2	The rank of the reduced transition matrices	221
20.2.3	Relation to other definitions of temporal entanglement	222
20.3	Numerical results.	223
20.4	Conclusions.	224
20.5	Appendix	226
20.5.1	The algorithm	226
20.5.2	Estimate of the bond dimension for a given fidelity	229
20.5.3	Comparison with other approaches	229
XIX	Appendix	232
A	Введение	232
A.1	Общая мотивация	232
A.1.1	Множество приложений	232
A.1.2	Польза в плане развития как профессионала	232
A.1.3	Польза в плане саморазвития	232

A.1.4	Удивительные факты	232
A.2	Мотивация к разделам	232
A.3	Мышление профессионала в	232
A.3.1	Актуальнейшие приложения	232
A.3.2	Построение с нуля	232
A.3.3	Способы догадаться до всех главных идей	232
A.4	Мышление для эффективного изучения	232
A.4.1	Способы изучения предмета	233
A.4.2	Необходимые темы для	233
A.4.3	Дополнительные темы для	233
A.5	Acknowledgements	233
A.6	Literature	233
A.6.1	Основная	233
A.6.2	Extra Literature	234
A.7	Обзор	234
A.7.1	предмет в двух словах	235
A.7.2	Итоговые формулы и закономерности	235
A.7.3	обзор теоретических подходов	235
A.7.4	Результаты	235
A.7.5	Преимущества квантовой информации	235
A.7.6	Обзор дальнейших развитий	235
A.8	Связи с другими науками	235
A.9	Описание записи	235
A.9.1	Общее описание записи	235
A.9.2	Особенности глав и разделов	236
A.9.3	Обозначения и константы	236
A.10	Головоломки квантовой информации	236
A.10.1	Бытовые головоломки	236
A.10.2	Типичные вопросы	236
A.10.3	Вопросы о квантовых схемах	236
A.10.4	Принципиальные головоломки	236
A.10.5	Головоломки о деталях	236
A.11	Короткий исторический обзор	236
B	Математические дополнения	236
B.1	Некоторые методы линейной алгебры	237
C	Некоторые методы программирования	237
C.1	Некоторые сведения из теории вероятностей	238
C.2	Теория групп	238
C.3	Теорема Соловея—Китаева	238
C.4	Теория чисел	238

Preface and main motivation



Let's discuss some minimum knowledge and motivation that would be good to understand for studying the subject.

Квантовая теория информации очень четко говорит об одном из самого важного в квантовой и фундаментального в механике: о состояниях, измерениях, их преобразованиях

(напишу тут подробно, что это на самом деле крутейший предмет. Спустя 1.5 года как на физтехе прошел понял, что это очень очень стоит того, чтобы очень много в нем просиживать, и все-таки пройти вдоль и поперек его!)

Квантовая теория информации в 2023 году многое может дать для устройства на работу, для приложений квантовой механики

(раскрою, что это один из самых прикладных предметов, один из самых востребованных. Чисто можно начать зарабатывать только за счет того, что 1 этот предмет и поймешь! Так что он один из самых важных, по крайней мере в 2023 году. Проверю потом еще эти утверждения, но пока очень в это верю.)

Одни из лучших идейных головоломок

Одни из лучших технических головоломок

Part I

Typical Quantum Inform Theory in a Nutshell

1 Об основных методах и концепциях

1.1 Основные методы квантовой информации

1.1.1 Определения и смысл состояний, запутанности и измерений

Типичные состояния

Состояния Белла для двух кубитов:

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$$

$$|\varphi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

$$|\varphi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$$

Это О.Н.Б. из перепутанных состояний

Чистые / факторизованные

Чистые могут быть перепутанными или не перепутанными.

Чистые не перепутанные:

$$\psi_{AB} = \psi_A \otimes \psi_B$$

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle \langle\psi| = |\varphi\rangle \langle\varphi| \otimes |\xi\rangle \langle\xi|$$

$$\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$$

Чистые перепутанные:

$$\psi_{AB} \neq \psi_A \otimes \psi_B$$

$$\psi_{AB} = |\psi\rangle \langle\psi| \neq |\varphi\rangle \langle\varphi| \otimes |\xi\rangle \langle\xi|$$

здесь нет вообще корреляций.

(???!!! примеры???!!!)

Смешанные состояния

Смешанные не перепутанные:

$$\rho_{AB} \neq |\psi\rangle \langle\psi|$$

$$\rho^{AB} = \sum_k p_k \rho_k^A \otimes \rho_k^B,$$

где p_k - коэффициенты в выпуклой сумме.

(???!!! примеры???!!!)

сепарабельные / распутанные / не запутанные / состояния

Физический смысл незапутанных состояний в том, что если у нас есть физическая величина, состоящая из тензорного произведения величины одной части системы F и величины второй части системы G есть произведение их средних значений

$$\langle F \otimes G \rangle = \langle F \rangle \cdot \langle G \rangle.$$

Кстати, если было бы перепутанное, то $\langle F \otimes G \rangle \neq \langle F \rangle \cdot \langle G \rangle$, то ест были бы корреляции.

Другими словами, можно брать произведение результатов.

(там что я измеряю X , коллега измеряет Y , мы перемножаем их и считаем матожидание)

Проверка сепарабельности делается следующими способами.

Критерий Переса-Городецких:

$$\rho_{AB}^{T_B} \geq 0 \implies \text{сепарабельно}$$

$$\rho_{AB}^{T_B} \geq 0 \quad \underbrace{\iff}_{\dim H_A \cdot \dim H_B \leq 6} \text{сепарабельно}$$

В частности для двух кубитов, критерий Переса-Городецких утверждает, что их матрица плотности является сепарабельной тогда и только тогда, когда она остается матрицей плотности при частичном транспонировании.

(ниже где-то он доказан)

Коррелированные (классическим и квантовым образом) состояния

Коррелированные состояния - это состояния, у которых $\rho_{AB} \neq \rho_A \otimes \rho_B$.

(?? только так определяются, никак иначе?)

Есть классическая корреляция, когда можно представить в виде выпуклой суммы

$$\rho_{AB} = \sum_k p_k \rho_A^k \otimes \rho_B^k$$

Есть квантовая корреляция, когда

$$\rho_{AB} \neq \sum_k p_k \rho_A^k \otimes \rho_B^k$$

это же запутанность.

Свойства:

множество всех сепарабельных состояний для данной системы выпукло.

Запутанные состояния

Запутанность, это когда

$$\rho_{AB} \neq \sum_k p_k \rho_A^k \otimes \rho_B^k$$

Критерии:

ранг Шмидта больше 2.

(по определению его, см. разложение Шмидта.)

(?? примеры !!!)

Свойства:

множество всех квантово перепутанных состояний для данной системы не выпукло.

(?? энтропия перепутанности???)

Также есть:

максимально перепутанное состояние:

(напишу потом)

(???? как получить запутанное состояние? типичный вопрос)

Квантовый инструмент

POVM - мера, соответствующая измерению

POVM - это мера E , которая сопоставляется каждому исходу,

удовлетворяющая $E = E^+ \geq 0$, и вероятность каждого исхода вычисляется по

$$p(i) = \text{tr}(\rho E_i)$$

Теорема Озавы утверждает, что для любого инструмента \mathcal{M} и любого состояния S существует семейство апостериорных состояний $\{S_x; x \in \mathcal{Q}\}$, т. е. операторов плотности S_x , таких что:

1. функция $x \rightarrow \text{Tr } S_x Y$ μ_s -измерима для любого $Y \in \mathcal{F}(\mathcal{C})$;
2. $\text{Tr } \mathcal{M}(B)[S]Y = \int_B (\text{Tr } S_x Y) \mu_s(dx)$.

Теорема Озавы имеет принципиальное значение, поскольку демонстрирует согласованность понятия (вполне положительного) инструмента со стандартным формализмом квантовой механики.

Взаимно несмещенный базис (??!!)

Квантовый канал

Квантовый канал - это линейное, вполне положительное отображение, сохраняющее след.

(тут пояснение про вполне положительность, что за определение)

1.1.2 Преобразования состояний, простейших квантовых вентелях

(по идее тут и хватит для простых вентелей)

О разложении Шмидта

Разложение Шмидта

$$\begin{aligned} |\psi^{AB}\rangle &\in \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B \quad \dim \mathcal{H}^A = d \leq D = \dim \mathcal{H}^B \\ |\psi^{AB}\rangle &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^D c_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle \\ c_{ij} &= \sum_{k=1}^d U_{ik} \lambda_k V_{kj} \end{aligned}$$

Разложение Шмидта

$$\begin{aligned} |\psi^{AB}\rangle &\in \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B \quad \dim \mathcal{H}^A = d \leq D = \dim \mathcal{H}^B \\ |\psi^{AB}\rangle &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^D \sum_{k=1}^d U_{ik} \lambda_k V_{kj} |i\rangle \otimes |j\rangle \\ |\psi^{AB}\rangle &= \sum_{k=1}^d \lambda_k \left(\sum_{i=1}^d U_{ik} |i\rangle \right) \otimes \left(\sum_{j=1}^D V_{kj} |j\rangle \right) \\ |\psi^{AB}\rangle &= \sum_{k=1}^d \lambda_k |f_k\rangle \otimes |g_k^*\rangle, \quad \langle f_k | f_l \rangle = \langle g_k | g_l \rangle = \delta_{kl} \end{aligned}$$

Пример: Запишите разложение Шмидта для состояния

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}(|H\rangle \otimes |H\rangle + |H\rangle \otimes |V\rangle + |V\rangle \otimes |H\rangle - |V\rangle \otimes |V\rangle) \\ &\frac{1}{2}(|H\rangle \otimes |H\rangle + |H\rangle \otimes |V\rangle + |V\rangle \otimes |H\rangle - |V\rangle \otimes |V\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}|H\rangle \otimes (|H\rangle + |V\rangle) + \frac{1}{2}|V\rangle \otimes (|H\rangle - |V\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|H\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle) + |V\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right] \end{aligned}$$

Разложение Шмидта

$$\begin{aligned} |\psi^{AB}\rangle &\in \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B \quad \dim \mathcal{H}^A = d \leq D = \dim \mathcal{H}^B \\ |\psi^{AB}\rangle &= \sum_{k=1}^d \lambda_k |f_k\rangle \otimes |g_k\rangle, \quad \langle f_k | f_l \rangle = \langle g_k | g_l \rangle = \delta_{kl} \\ &\lambda_k \geq 0 \end{aligned}$$

Ранг Шмидта r - число ненулевых λ_k

$$|\psi^{AB}\rangle = \sum_{k=1}^r \lambda_k |f_k\rangle \otimes |g_k\rangle$$

Для факторизованных состояний $r = 1$, для перепутанных $r > 1$

Обозначения для стандартного базиса кубитных состояний

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \mathbb{C}^2 \\ |00\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle, \quad |01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle, \\ |10\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle, \quad |11\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle & \mathbb{C}^{2^2} \end{aligned}$$

(ладно, я скоро пойму, но еще подумать нужно)

Принципиальная схема квантового компьютера

(картинку от Филиппова вставлю, там и обсуждение короткое этого.)

1.1.3 Определения операторов и отображений

(подробно обсужу определения, укажу критерии и места применения)

Положительность оператора

Матрица плотности подсистем

Блочная положительность оператора

Положительное отображение / оператор

(тут укажу следствия и где оно нужно)

Вполне положительное отображение (?!)

Вполне положительное отображение - это линейное отображение Φ_t , для которого отображение $\Phi_t \otimes \text{Id}_k$ является положительным для всех $\text{Id}_k : \mathcal{B}(\mathcal{H}_k) \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_k)$, $k = 1, 2, \dots$

пример вполне положительного отображения: $\Phi[\varrho] = A\varrho A^\dagger$ ($\Phi \otimes \text{Id}$)[X] = $A \otimes I \cdot X \cdot A^\dagger \otimes I$
 $X = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \geq 0$ ($\Phi \otimes \text{Id}$)[X] = $\sum_i \lambda_i \underbrace{A \otimes I |\psi_i\rangle}_{|\varphi_i\rangle} \underbrace{\langle \psi_i| A^\dagger \otimes I}_{\langle \varphi_i|} \geq 0$

Пример вполне положительного отображения: $\Phi[\varrho] = \sum_k A_k \varrho A_k^\dagger$ представление крауса

Пример не вполне положительного отображения: транспонирование $(\Phi \otimes \text{Id})[\varrho_{AB}] \equiv \varrho_{AB}^\top \not\geq 0$

Матрица Чоя

Деполаризующее отображение (????!!)

1.1.4 Основные свойства матриц плотности систем

Свидетель перепутанности

Выпуклость матриц плотности

(опишу, что про это известно)

Критерий Переса-Городецких

Критерий Переса-Городецких: Матрица плотности двух кубитов является сепарабельной тогда и только тогда, когда она остается матрицей плотности при частичном транспонировании.

(пример, что над большей чем 6 размерностью крит П-Г не работает??)

1.1.5 Теоремы о свойствах состояний, операторов и измерений

Критерий Переса-Городецких

Критерий Переса-Городецких:

$$\rho_{AB}^{T_B} \geq 0 \implies \text{сепарабельно}$$

$$\rho_{AB}^{T_B} \geq 0 \iff \text{сепарабельно}$$

$\underbrace{\quad}_{\dim H_A \cdot \dim H_B \leq 6}$

(тут указание на доказательство)

Изоморфизм Чоя-Ямолковского - критерий квантового канала

Согласно изоморфизму Чоя-Ямолковского, линейное отображение Φ является квантовым каналом тогда и только тогда, когда соответствующая матрица Чоя Ω_Φ является матрицей плотности, удовлетворяющей условию $\text{tr}_1 \Omega_\Phi = \frac{1}{d} I$.

Необходимость следует тривиально из определений.

(??? как???)

для доказательства достаточности рассмотрим формулу обращения:

$$\begin{aligned} \Phi[X] &= d \text{tr}_2 [\Omega_\Phi \cdot I \otimes X^\top] \\ d \text{tr}_2 [\Omega_\Phi \cdot I \otimes X^\top] &= \text{tr}_2 \left[\sum_{i,j=1}^d \Phi[|i\rangle\langle j|] \otimes |i\rangle\langle j| \cdot I \otimes X^\top \right] = \\ &= \text{tr}_2 \left[\sum_{i,j=1}^d \Phi[|i\rangle\langle j|] \otimes |i\rangle\langle j| X^\top \right] = \sum_{i,j=1}^d \Phi[|i\rangle\langle j|] \langle j | X^\top | i \rangle = \\ &= \sum_{i,j=1}^d \Phi[|i\rangle\langle j|] \langle i | X | j \rangle = \Phi \left[\sum_{i,j=1}^d |i\rangle\langle i | X | j \rangle \langle j| \right] = \Phi[X] \end{aligned}$$

$$\Phi[X] = d \text{tr}_2 [\Omega_\Phi \cdot I \otimes X^\top] \quad \text{tr}_1 \Omega_\Phi = \frac{1}{d} I \quad \text{tr}[\Phi[X]] = d \text{tr} [\Omega_\Phi \cdot I \otimes X^\top] = d \text{tr} [\text{tr}_1 [\Omega_\Phi] X^\top] = \text{tr} [I \cdot X^\top] = \text{tr}[X]$$

$$\Omega_\Phi = \sum_k \lambda_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad - \text{спектральное разложение} \quad \lambda_k \geq 0, \quad |\psi_k\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$$

$$|\psi_k\rangle = \sum_i \mu_i^{(k)} |f_i^{(k)}\rangle \otimes |g_i^{(k)}\rangle \quad - \text{разложение шмидта для каждого вектора}$$

$$\Omega_\Phi = \sum_{k,i,j} \lambda_k \mu_i^{(k)} \mu_j^{(k)} |f_i^{(k)}\rangle \langle f_j^{(k)}| \otimes |g_i^{(k)}\rangle \langle g_j^{(k)}|$$

$$\begin{aligned} \Phi[X] &= d \text{tr}_2 \left[\sum_{k,i,j} \lambda_k \mu_i^{(k)} \mu_j^{(k)} |f_i^{(k)}\rangle \langle f_j^{(k)}| \otimes |g_i^{(k)}\rangle \langle g_j^{(k)}| \cdot I \otimes X^\top \right] = \\ &= d \sum_{k,i,j} \lambda_k \mu_i^{(k)} \mu_j^{(k)} |f_i^{(k)}\rangle \langle f_j^{(k)}| \langle \overline{g_i^{(k)}} | X | \overline{g_j^{(k)}} \rangle \end{aligned}$$

(тут пример применения и указание случаев)

1.1.6 Об квантовых энтропиях

Обзор энтропий

неравенство Араки-Либя

1.1.7 О квантовой информации

О границе Холево (?!!!!)

(интересно, потом напишу)

1.1.8 О квантовых каналах

Суть

(!!!! тут определение!!!!)

О пропускной способности канала

$p(y | x)$ -стохастическая матрица вероятностей переходов

$$p(y | x) \geq 0, \quad \sum_y p(y | x) = 1$$

Унистационарность канала

(?? для задачи актуально понять определение??)

О канале Ландау-Стритера

1.1.9 Описание многочастичных систем

(?? потом мб перекину в раздел квантмеха про них же, ибо что-то уже про это создавал раньше)

1.1.10 Об энтропии

(очень важный раздел, додумаю скоро!!!)

Основные формулы

Смысл энтропии

1.1.11 Quantum Channels: Basics

О словах

δ -типичные слова

δ -типичное слово - слово w длины n , имеющее вероятность p_w , если

$$2^{-n(H(X)+\delta)} < p_w < 2^{-n(H(X)-\delta)}$$

Для записи $N \approx 2^{nH(X)}$ типичных слов требуется $\log_2 N \approx nH(X)$ бит, т.е. $H(X)$ бит на символ!

Утверждение. Любой код, использующий битовые строки длины $n(H(X) - \delta)$, имеет асимптотически исчезающую вероятность ошибки, стремящуюся к единице при $n \rightarrow \infty$.

Схема сжатия в $1/R$ раз:

$\mathcal{E}^{(n)} : (x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow$ битовая строка длины nR

Схема развертывания:

$\mathcal{D}^{(n)} : \text{битовая строка длины } nR \rightarrow (x_1, x_2, \dots, x_n)$

Схема сжатия-развертывания надежна, если

$$P \{ \mathcal{D}^{(n)} (\mathcal{E}^{(n)} (x_1, x_2, \dots, x_n)) = (x_1, x_2, \dots, x_n) \} \rightarrow 1$$

при $n \rightarrow \infty$.

Теорема Шеннона: для надежной схемы $R \geq H(X)$.

Ф-л1. Классическая теория передачи информации

(общие концепции тут)

Ф-л2. Классическая информация через квантовые каналы

Ф-л3. Пропускная способность в терминах «сжатия квантовой информации». Аддитивность классической пропускной способности для канала, разрушающего перепутанность.

(я хз, о чем тут, скорее всего какие-то общие умные слова)

1.1.12 Quantum Channels: Special Features

Ф-л4 Взаимная информация, Сверхплотное кодирование, Пропускная способность с перепутанностью

Ф-л5 Невозможность клонирования квантовой информации, «телепортация», квантовая пропускная способность

1.1.13 General ways to compute something with cubits?

(в духе, допустим есть кубит, как с помощью этого можно было бы сделать квантовый компьютер? Важный идейный вопрос)

1.1.14 General ways to compute something with superconductors

(в духе, допустим что-то есть в сверхпроводимости, как с помощью этого можно было бы сделать квантовый компьютер? Важный идейный вопрос)

1.2 О природе квантовой механике, информации и сути происходящего

(пока идея в том, чтобы отдельно вопросы эти тут обсудить, потому что до этого подход "используем формулы, помним их ключевые". Тут - серьезные вопросы)

1.2.1 О смысле измерений и коллапсе волновой функции

(подробно ответ на этот вопрос, как это делается?)

1.2.2 О проверках основ квантовой механики

Об экспериментах Аспе

(см. Филлипов, пока не актуально. в теории сперва напишу, большая тема.)

1.3 О приложениях, особых квантовых схемах с вентелями

(такого много можно увидеть, здесь подробно про них и типичные схемы и алгоритмы напишу)

1.3.1 О квантовом поиске (?????)

Основные формулы (????)

Ускорение в сравнении с классикой \sqrt{N} .

1.4 Темы лекций Филиппова введения

(мб это выше уже будет написано, пока на всякий случай раздел для них.)

2 Об другом

2.1 Темы Холево

(надо все это выгружать, потому что иначе я ничего не пойму.)

2.1.1 Введение

0.1. Конечномерные системы 9 0.2. Общие постулаты статистического описания 11
0.3. Классические и квантовые системы 1- 0.4. Рандомизация в классической и квантовой статистике.. 14 0.5. Выпуклая геометрия разложений единицы и фундаментальные пределы точности 15 0.6. Проблема соответствия 16 0.7. Повторные и непрерывные измерения 16 0.8. Необратимая динамика.. 1В 0.9. Квантовые случайные процессы 18

2.1.2 X1. Стандартная статистическая модель квантовой механики

§ 1. Основные понятия Ш 1.1. Операторы в Гильбертовом пространстве Ш 2. Оператор плотности 21 1.3. Спектральная мера 22 1.4. Статистический постулат 22 1.5. Совместимые наблюдаемые 23 1.6. Простейший пример 25 § 2. Симметрии, кинематика, динамика 27 2.1. Группы симметрии 27 2.2. Однопараметрические группы 2 2.3. Соотношения Г. Вейля „.... 29 2.4. Гауссовские состояния. 32 § 3. Составные системы 33 3.1. Тензорное произведение гильбертовых пространств... 33 3.2. Произведение квантовых состояний 34 3.3. Независимость и предельные теоремы..... 35 § 4. Проблема скрытых параметров 37 4.1. Скрытые параметры и квантовая дополнительность... 37 4.2. Скрытые параметры и квантовая целостность.... 39 4.3. Структура множества квантовых корреляций..... 42

2.1.3 X2. Статистика квантовых измерений

§ 1. Обобщенные наблюдаемые 43 1.1. Разложения единицы 43 1.2. Обобщенная статистическая модель квантовой механики.. 45 1.3. Геометрия множества обобщенных наблюдаемых... 47 § 2. Квантовая теория статистических решений 49 2.1. Проверка гипотез 49 2.2. Байесовская задача 50 2.3. Пропускная способность квантового канала связи... 53 2.4. Общая формулировка 55 2.5. Квантовые неравенства Рао—Крамера 57 § 3. Ковариантные наблюдаемые 60 3.1. Формулировка проблемы 60 3.2. Структура ковариантного разложения единицы.... 61 3.3. Обобщенные системы импримитивности 62 3.4. Случай абелевой группы 63 3.5. Каноническая сопряженность в квантовой механике... 65 3.6. Локализуемость 68

2.1.4 X3. Эволюция открытой системы

§ 1. Преобразования квантовых состояний и наблюдаемых... 69 1.1. Вполне положительные отображения 69 1.2 Операции, динамические отображения 71 1.3. Условные ожидания 73 § 2. Квантовые динамические полугруппы 74 2.1. Определение и примеры 74 2.2. Инфинитезимальный оператор 75 2.3. Свойство консервативности 77 2.4. Ковариантные эволюции 79 2.5. Эргодические свойства 80 2.6. Расширения динамических полугрупп 81

2.1.5 X4. Последовательные и непрерывные процессы измерения

§ 1. Статистика последовательных измерений 85 1.1. Понятие инструмента 85 1.2. Представление вполне положительного инструмента... 87 1.3. Три уровня описания квантовых измерений 89 1.4. Воспроизводимость 90 1.5. Измерения непрерывных наблюдаемых 91 § 2. Процессы непрерывного измерения 93 2.1. Неразрушающие измерения 93 2.2. «Квантовый парадокс Зенона» 95 2.3. Предельная теорема для сверток инструментов.... 96 2.4. Сверточные полугруппы инструментов -98 2.5. Инструментальные процессы *00

2.1.6 X5. Процессы в пространстве Фока

§ 1. Квантовое стохастическое исчисление '03 1.1. Основные определения -03 1.2. Стохастический интеграл 105 1.3. Квантовая формула Ито 108 1.4. Квантовые стохастические дифференциальные уравнения. ПО § 2. Расширения в пространстве Фока. 113 2.1 Винеровский и пуассоновский процессы в пространстве Фока 114 2.2. Стохастические эволюции и расширения динамических полугрупп 116 2.3. Расширения инструментальных процессов 119 2.4. Стохастические представления процессов непрерывного измерения 121 2.5. Нелинейные стохастические уравнения апостериорной динамики

Part II

Special Topics in a Nutshell

(доп. тем очень много, хоть всю жизнь в них можно сидеть)

2.2 О тензорных сетях и другом

2.2.1 Об типичном квантовом шифровании и криптографии (?????)

Основные формулы (????)

(простые модели, объем - 2-3 вводных лекций тут.)

2.2.2 Ф-л6. Квантовые тензорные сети.

2.2.3 Ф-л7. Состояния матричного произведения (MPS). Операторы в виде одномерной тензорной сети (MPO).

2.2.4 Ф-л8. Оптимизация тензорной сети MPS. Анзац многомасштабной перенормировки перепутанности (MERA).

(детали какие-то супер глубокие)

2.2.5 Ф-л9. Бозоны и фермионы. Вторичное квантование

(хз, мб удалю, мб это и не нужно, посмотрим)

Part III

Основы квантовой информации

3 Понятия квантовой теории информации

(!! суть этого в запись про квантмех и 1ю часть перенесу, пока плохо понимаю, что тут главное, а что нет)

3.1 Основные законы квантовой механики

3.2 Проверка законов квантовой механики

3.2.1 Эксперимент ЭПР

(подробно о нем, пока не думал особо)

3.2.2 Опыт Аспе

(подробно о нем, пока не думал особо)

3.3 Введение и обзор квантовой теории информации по Нельсону и Чангу

(пошли выгрузки, в 1ю часть добавлю потом их)

Глобальные перспективы

В области квантовых вычислений и квантовой информации изучаются задачи по обработке информации, которые могут быть выполнены с использованием квантовомеханических систем. Просто и очевидно, не так ли? Подобно тому, как было со многими простыми, но глубокими идеями, прошло довольно много времени, прежде чем кто-либо стал думать об обработке информации при помощи квантовомеханических систем. Чтобы понять, почему это произошло, мы должны вернуться в прошлое и последовательно рассмотреть каждую из областей, внесших фундаментальный вклад в квантовые вычисления и квантовую информацию, квантовую механику, информатику, теорию информации и криптографию. Чтобы получить некоторое представление о существенно различных направлениях, слившихся воедино в квантовых вычислениях и квантовой информации, вы должны на протяжении нашего короткого исторического обзора перечисленных областей последовательно представлять себя физиком, специалистом по информатике, по теории информации, и, наконец, криптографом.

История квантовых вычислений и квантовой информации

На рубеже девятнадцатого и двадцатого веков в науке назревала революция.

В физике разразилась серия кризисов. Проблема состояла в том, что физические теории того времени (называемые сейчас классической физикой) предсказывали абсурдные результаты, например, существование «ультрафиолетовой катастрофы» с бесконечными энергиями, или неизбежность постепенного падения электронов на атомные ядра. Сначала такие проблемы разрешались путем введения в классическую

физику специальных гипотез, но по мере того, как улучшалось понимание свойств атомов и излучения, выдвигаемые объяснения все более и более усложнялись. В начале 20-х гг. XX в. после четвертьвекового смятения кризис достиг своего пика и вылился в создание современной теории квантовой механики. С этого времени квантовая механика стала неотъемлемой частью науки и с невероятным успехом применялась ко всему, что находится под солнцем и внутри него, включая структуру атома, термоядерные реакции в звездах, сверхпроводники, структуру ДНК и элементарные частицы. Что представляет собой квантовая механика? Квантовая механика — это математическая платформа, или совокупность правил, предназначенная для построения физических теорий. Например, существует физическая теория,

известная как квантовая электродинамика, с фантастической точностью описывающая взаимодействие атомов со светом. Квантовая электродинамика построена на основе квантовой механики, но содержит специфические правила, не определяемые квантовой механикой. Связь квантовой механики с конкретными физическими теориями, например, с квантовой электродинамикой, в чем-то похожа на связь операционной системы компьютера с конкретной прикладной программой — операционная система задает некоторые базовые параметры и режимы работы, но не определяет, каким образом прикладные программы будут выполнять свои специфические задачи.

Принципы квантовой механики просты, но даже специалисты находят их противоречащими интуиции, истоки квантовых вычислений и квантовой информации можно усмотреть в постоянном желании физиков лучше понять квантовую механику. Самый известный критик квантовой механики Альберт Эйнштейн до конца жизни так и не примирился с теорией, которую сам же помог создать. Поколения физиков боролись с трудностями квантовой механики, пытаясь приспособить ее предсказания к человеческой интуиции. Одной из задач области квантовых вычислений и квантовой информации является разработка инструментов, которые развивали бы наше интуитивное понимание квантовой механики и делали ее предсказания более доступными для человеческого разума. Например, в начале 80-х гг. ученых стало интересовать, можно ли использовать квантовые эффекты для передачи сигнала со скоростью, превышающей скорость света, что безоговорочно запрещено эйнштейновской теорией относительности. Решение этой проблемы свелось к выяснению того, можно ли копировать неизвестное квантовое состояние. Если бы копирование оказалось возможным, то при помощи квантовых эффектов можно было бы передавать сигнал со скоростью, превышающей скорость света. Однако копирование, столь легко выполнимое для классической информации, в общем случае оказывается невозможным в квантовой механике. Эта теорема о невозможности копирования (no-cloning theorem), сформулированная в начале 80-х гг., является одним из самых первых результатов в области квантовых вычислений и квантовой информации. С тех пор к ней было сделано много уточнений, и теперь у нас есть концептуальные инструменты, позволяющие понимать, насколько хорошо может работать устройство (всегда несовершенное) квантового копирования. Эти инструменты, в свою очередь, были применены для понимания других аспектов квантовой механики. Другое историческое направление, внесшее вклад в развитие квантовых вычислений и квантовой информации, зародилось в 70-х гг. в связи с интересом к получению полного контроля над одиночными квантовыми системами. В приложениях квантовой механики до 70-х гг. обычно осуществлялся общий контроль над объемным образцом, содержащим невообразимое количество квантовомеханических систем, ни одна из которых не была доступна напрямую. Например, квантовая механика замечательно объясняет сверхпроводимость. Но поскольку сверхпроводник представляет собой огромный (по сравнению с атомными масштабами) образец проводящего металла, мы можем

исследовать лишь немногие аспекты его квантовомеханической природы. При этом отдельные квантовые системы, составляющие сверхпроводник, остаются недоступными. Такие устройства, как ускорители частиц, позволяют получать ограниченный доступ к отдельным квантовым системам, но по-прежнему не дают полного контроля над элементарными системами.

Начиная с 70-х гг. было разработано много методов управления одиночными квантовыми системами. В качестве примера можно привести методы удержания одиночного атома в «атомной ловушке», обеспечивающие его изоляцию от всего остального мира и позволяющие с невероятной точностью исследовать различные аспекты его поведения. При помощи сканирующего туннельного микроскопа удастся перемещать отдельные атомы, составляя из них заданные массивы. Были продемонстрированы электронные устройства, работа которых основана на переносе единичных электронов.

К чему все эти усилия, направленные на достижение полного контроля над одиночными квантовыми системами? Если оставить в стороне многочисленные технологические причины и сосредоточиться только на чистой науке, то главный ответ будет таков: исследователи действовали из интуитивных соображений. В науке самые глубокие озарения часто приходят тогда, когда разрабатывается метод для исследования новой области Природы. Например,

появление радиоастрономии в 30-40-х гг. повлекло за собой ряд захватывающих открытий, в том числе ядра галактики Млечный Путь, пульсаров и квазаров.

В физике низких температур достигнуты поразительные успехи в результате поиска способов понижения температур различных систем. Точно также,

работая над проблемой получения полного контроля над одиночными квантовыми системами, мы исследуем нетронутую область Природы в надежде открыть новые, неожиданные явления. Сейчас мы делаем лишь первые шаги в этих направлениях и уже получили несколько интересных сюрпризов. Чего же можно ожидать, если мы добьемся более полного контроля над одиночными квантовыми системами и распространим его на более сложные системы? Квантовые вычисления и квантовая информация естественным образом вписываются в эту программу. Они ставят ряд практических задач разных уровней сложности для людей, ищущих способы лучшего манипулирования одиночными квантовыми системами, стимулируют развитие новых экспериментальных методик и показывают наиболее интересные направления, в которых нужно ставить эксперименты. И наоборот, возможность управления одиночными квантовыми системами играет существенную роль, если мы хотим воспользоваться мощностью квантовой механики применительно к квантовым вычислениям и квантовой информации.

Несмотря на большой интерес к рассматриваемой области, усилия по построению систем обработки квантовой информации дали на сегодняшний день скромные результаты. Современная техника для квантовых вычислений представлена маленькими квантовыми компьютерами, способными выполнять десятки операций над несколькими квантовыми битами (кубитами). Были продемонстрированы экспериментальные прототипы устройств для реализации квантовой криптографии — способа секретной связи на больших расстояниях — и даже на таком уровне, когда они могут быть полезны в некоторых реальных приложениях. Однако разработка технологий для реализации крупномасштабной обработки квантовой информации остается серьезной задачей для физиков и инженеров будущего. Давайте перейдем от квантовой механики к еще одному великому интеллектуальному триумфу двадцатого столетия — информатике (computer science).

Истоки информатики теряются в глубине веков. Например, клинописные таблички свидетельствуют, что ко времени правления Хаммурапи (около 1750 г.

до н. э.) вавилоняне разработали некоторые довольно сложные алгоритмы, и весьма вероятно, что многие идеи относятся к еще более ранним временам.

Начало современной информатики было положено великим математиком Аланом Тьюрингом в его выдающейся работе 1936 г. Тьюринг подробно описал абстрактное понятие, которое мы назвали бы сейчас программируемым компьютером, а именно, модель вычислений, впоследствии названную в его честь машиной Тьюринга. Он показал, что существует универсальная машина Тьюринга, которая может использоваться для моделирования любой другой машины Тьюринга. Более того, он утверждал, что его универсальная машина полностью отвечает на вопрос, что значит решать задачу алгоритмическими средствами. Иначе говоря, если алгоритм может быть выполнен на любом физическом устройстве, например, на современном персональном компьютере, то существует эквивалентный алгоритм для универсальной машины Тьюринга, который решает ту же самую задачу, что и алгоритм, выполняемый на персональном компьютере. Это утверждение, называемое тезисом Чёрча-Тьюринга (в честь Тьюринга и другого пионера информатики Алонцо Черча),

устанавливает эквивалентность между физическим понятием класса алгоритмов, выполнение которых возможно на некотором физическом устройстве,

и строгим математическим понятием универсальной машины Тьюринга.

Широкое признание этого тезиса положило начало развитию обширной теории информатики.

Вскоре после появления работы Тьюринга были построены первые компьютеры на электронных компонентах. Джон фон Нейман разработал простую теоретическую модель, объясняющую, как на практике собрать компьютер,

обладающий всеми свойствами универсальной машины Тьюринга. Тем не менее 1.1. Глобальные перспективы 23 нее, настоящая разработка аппаратного обеспечения началась только в 1947 г.,

когда Джон Бардин, Уолтер Браттейн и Уилл Шокли создали транзистор.

С этого момента мощь компьютерного «железа» стала расти поразительными темпами. В 1965 г. Гордон Мур даже сформулировал закон этого роста,

известный как закон Мура, согласно которому производительность компьютеров, обеспечиваемая при одной и той же цене, будет удваиваться примерно каждые два года.

Как это ни удивительно, закон Мура оставался приблизительно справедливым на протяжении десятилетий. Тем не менее, большинство наблюдателей ожидают, что этот сказочный рост прекратится где-то в районе первых двух десятилетий двадцать первого века. Традиционные подходы к разработке компьютерной технологии начинают упираться в фундаментальные трудности,

связанные с размерами. По мере того, как электронные устройства становятся все меньше и меньше, в их функционирование постепенно вмешиваются квантовые эффекты.

Одним из возможных решений проблемы, связанной с прекращением действия закона Мура, является переход к другой вычислительной парадигме.

Одна из таких парадигм предоставляется квантовой теорией вычислений, основанной на идее использования для выполнения вычислений квантовой механики, а не классической физики. Оказывается, что несмотря на возможность применения классического компьютера для моделирования квантового компьютера, эффективное осуществление такого моделирования невозможно.

Таким образом, квантовые компьютеры существенно превосходят по скорости классические компьютеры. Это преимущество в скорости настолько значительно, что по мнению многих исследователей никакой мыслимый прогресс в классических вычислениях не поможет преодолеть разрыв в производительности между классическим и квантовым компьютерами.

Что имеется в виду под «эффективным» или «неэффективным» моделированием) квантового компьютера? Многие ключевые понятия, необходимые для ответа на этот вопрос, фактически появились еще до того, как возникла идея квантового компьютера. В частности, понятия эффективного и неэффективного алгоритма обрели математическую точность в теории сложности вычислений. Грубо говоря, эффективным является алгоритм, время выполнения которого полиномиально зависит от объема решаемой задачи. Для выполнения неэффективного алгоритма, напротив, требуется сверхполиномиальное (обычно экспоненциальное) время. В конце 60-х и начале 70-х гг. было замечено,

что машина Тьюринга обладает как минимум такой же эффективностью, как и любая другая модель вычислений, в том смысле, что задача, которая может быть эффективно решена в рамках некоторой модели вычислений, может быть эффективно решена и на машине Тьюринга путем использования машины Тьюринга для моделирования другой модели вычислений. Это наблюдение было сформулировано в виде усиленной версии тезиса Чёрча-Тьюринга:

Любой алгоритмический процесс может быть эффективно смоделирован на машине Тьюринга.

Усиление этой версии тезиса Чёрча-Тьюринга заключено в слове «эффективно». Если сильный тезис Чёрча-Тьюринга верен, то из него следует, что независимо от типа машины, используемой для выполнения алгоритмов, эта машина может быть эффективно смоделирована при помощи стандартной машины Тьюринга. Это важное усиление, поскольку оно подразумевает, что для анализа возможности эффективного выполнения данной вычислительной задачи мы можем ограничиться анализом машины Тьюринга.

Некоторые аргументы против сильного тезиса Чёрча-Тьюринга нашлись в области аналоговых вычислений. Уже после Тьюринга различные группы исследователей обнаружили, что некоторые типы аналоговых компьютеров могут эффективно решать задачи, не имеющие, по всей видимости, эффективного решения на машине Тьюринга. На первый взгляд такие аналоговые компьютеры нарушают сильную форму тезиса Чёрча-Тьюринга. К сожалению, если сделать реалистичные предположения о наличии шума в аналоговых компьютерах, то они окажутся неэффективными во всех известных реализациях и не смогут решать задачи, не имеющие эффективного решения на машине Тьюринга. Этот урок, состоящий в том, что при оценке эффективности модели вычислений необходимо учитывать влияние реального шума, стал одним из первых крупных выводов, брошенных квантовым вычислениям и квантовой информации. Ответом на него стала разработка теории кодов, исправляющих квантовые ошибки, и устойчивых к ошибкам квантовых вычислений. Таким образом, в отличие от аналоговых вычислений квантовые вычисления в принципе допускают наличие конечного уровня шума, сохраняя свои вычислительные достоинства.

Первое серьезное возражение против сильного тезиса Чёрча-Тьюринга появилось в середине 70-х гг., когда Роберт Соловей и Волкер Штрассен показали, что проверить, является ли целое число простым или составным, можно с помощью вероятностного алгоритма. В тесте Соловея-Штрассена случайность использовалась как существенная часть алгоритма. Алгоритм не давал достоверного ответа на вопрос, является ли данное целое число простым или составным, определяя это лишь с некоторой вероятностью. Повторяя тест Соловея-Штрассена несколько раз, можно определить это почти наверняка.

Нужно особо отметить, что во время появления теста Соловея-Штрассена не было известно какого-либо эффективного детерминированного алгоритма для проверки целых чисел на простоту.¹ Получалось, что компьютеры, имеющие доступ к генератору случайных чисел, могли эффективно выполнять вычислительные задачи, для которых

не было эффективного решения на традиционной детерминированной машине Тьюринга. Это открытие послужило толчком к поиску других вероятностных алгоритмов, который полностью оправдал себя,

приведя к созданию успешно развивающейся области исследований.

Вероятностные алгоритмы поставили под сомнение тезис Чёрча-Тьюринга, показав, что существуют эффективно решаемые задачи, которые, тем не менее, не могут быть эффективно решены на детерминированной машине Тьюринга.

Впрочем, возникшее затруднение легко устраняется простой модификацией тезиса: Любой алгоритмический процесс может быть эффективно смоделирован на вероятностной машине Тьюринга.

Эта модификация сильного тезиса Чёрча-Тьюринга должна оставлять чувство неудовлетворенности. Не может ли оказаться так, что через некоторое время еще какая-нибудь модель вычислений позволит эффективно решать задачи,

не имеющие эффективного решения в рамках модели вычислений Тьюринга? Можно ли найти модель вычислений, которая бы эффективно моделировала любую другую модель вычислений? Заинтересовавшись этим вопросом, Дэвид Дойч в 1985 г. решил выяснить,

можно ли использовать законы физики для вывода еще более сильной версии тезиса Чёрча-Тьюринга. Вместо принятия специальных гипотез Дойч стал искать физическую теорию для обоснования тезиса Чёрча-Тьюринга, которое было бы столь же надежным, как и статус самой этой теории. В частности,

Дойч попытался описать вычислительное устройство, которое было бы способно эффективно моделировать произвольную физическую систему.

Поскольку законы физики в конечном счете являются квантовомеханическими, Дойч естественным образом пришел к рассмотрению вычислительных устройств,

основанных на принципах квантовой механики. От этих устройств — квантовых аналогов машин, описанных Тьюрингом полвека назад — ведет свое начало концепция современного квантового компьютера, используемая в этой книге.

На момент написания книги еще не было ясно, достаточно ли универсального квантового компьютера Дойча для эффективного моделирования произвольной физической системы. Доказательство или опровержение этой гипотезы представляет собой одну из больших проблем в области квантовых вычислений и квантовой информации. Возможно, например, что некоторый эффект из квантовой теории поля или даже более эзотерический эффект,

основанный на теории струн, квантовой гравитации или на какой-либо другой физической теории, может вывести нас за рамки универсального квантового компьютера Дойча, предоставив еще более мощную модель вычислений. На данном этапе мы этого просто не знаем.

Модель квантового компьютера Дойча позволила оспорить сильную форму тезиса Чёрча-Тьюринга. Дойч задался вопросом, может ли квантовый компьютер эффективно решать вычислительные задачи, не имеющие эффективного решения на классическом компьютере, даже если это вероятностная машина Тьюринга. Он построил простой пример, показывающий, что квантовые компьютеры действительно могут превосходить по вычислительной эффективности классические компьютеры.

Этот выдающийся первый шаг, сделанный Дойчем, в последующие десять лет был развит многими людьми. Кульминация этого развития пришлась на 1994 г., когда Питер Шор продемонстрировал, что две исключительно важные задачи — поиск простых сомножителей целого числа и так называемая задача вычисления дискретного логарифма — могут быть эффективно решены на 26 Глава 1. Введение и общий обзор квантовом компьютере. Это вызвало большой интерес, поскольку две указанные задачи

считались (и по-прежнему считаются) эффективно неразрешимыми на классическом компьютере. Результаты Шора убедительно показывали,

что квантовые компьютеры превосходят по производительности машины Тьюринга, включая их вероятностный вариант. Следующее доказательство эффективности квантовых компьютеров появилось в 1995 г., когда Лов Гровер показал, что выполнение другой важной задачи — проведения поиска в некотором неструктурированном поисковом пространстве — также может быть ускорено на квантовом компьютере. Правда, алгоритм Гровера не давал такого эффектного ускорения, как алгоритмы Шора, но ввиду широкого применения методологий, основанных на поиске, он вызвал значительный интерес.

Примерно в то же время, когда были открыты алгоритмы Шора и Гровера, многие разрабатывали идею Ричарда Фейнмана, высказанную им в 1982 г.

Фейнман указал, что моделирование квантовомеханических систем на классических компьютерах сопряжено с существенными трудностями, и предположил, что построение компьютеров на основе принципов квантовой механики позволило бы этих трудностей избежать. В 90-х гг. несколько групп исследователей начали развивать эту идею, показав несомненную возможность использования квантовых компьютеров для эффективного моделирования систем, не имеющих какой-либо известной эффективной модели на классическом компьютере. Вероятно, в будущем одним из главных применений квантовых компьютеров станет моделирование квантовомеханических систем, слишком сложных для моделирования на классическом компьютере. Решение этой задачи требует глубоких научных и технологических разработок.

Какие еще задачи квантовые компьютеры могут решать быстрее, чем классические? Краткий ответ таков: мы не знаем. Разработать хороший квантовый алгоритм трудно. Пессимист может усмотреть причину в том, что квантовые компьютеры подходят только для уже известных применений. Мы придерживаемся другой точки зрения. Разработка алгоритмов для квантовых компьютеров трудна потому, что здесь приходится сталкиваться с двумя непростыми проблемами, которых нет при разработке алгоритмов для классических компьютеров. Во-первых, наша интуиция имеет корни в классическом мире. Если мы прибегнем к помощи этой интуиции при разработке алгоритмов, то алгоритмические идеи, к которым придем, будут классическими. Для создания хороших квантовых алгоритмов необходимо «отключить» классическую интуицию хотя бы на каком-то этапе процесса разработки, используя для достижения желаемого результата чисто квантовые эффекты. Во-вторых, недостаточно разработать алгоритм, который просто является квантовомеханическим. Этот алгоритм должен быть лучше, чем любой из существующих классических алгоритмов! Ведь может случиться так, что кто-то найдет алгоритм,

использующий чисто квантовые аспекты квантовой механики, но этот алгоритм не будет представлять большого интереса из-за существования классических алгоритмов со сравнимой производительностью. Сочетание двух описанных проблем делает разработку новых квантовых алгоритмов многообещающей задачей для будущего.

1.1. Глобальные перспективы 27 Поставим вопрос еще шире: можно ли сделать какие-либо обобщения относительно производительности квантовых компьютеров по сравнению с классическими? Что именно делает квантовые компьютеры эффективнее классических, если, конечно, это на самом деле так? Задачи какого класса можно эффективно решать на квантовом компьютере и как этот класс соотносится с классом задач, эффективно решаемых на классическом компьютере? Одной из самых интригующих особенностей квантовых вычислений и квантовой информации является то, насколько мало известно об ответах на эти вопросы! Необходимость их лучшего понимания представляет собой великий вызов будущему.

Подойдя к переднему краю квантовых вычислений, давайте обратимся к истории другого направления мысли, внесшего вклад в квантовые вычисления и квантовую информацию: теории информации. В 40-х гг. одновременно со взрывным развитием информатики происходила революция в понимании связи (communication). В 1948 г. Клод Шеннон опубликовал пару выдающихся работ,

заложивших основы современной теории информации и связи.

Возможно, самый важный шаг, сделанный Шенноном, состоял в математическом определении понятия информации. Во многих математических науках существует значительная гибкость в выборе фундаментальных определений. Попробуйте несколько минут подумать, исходя из самых обычных соображений, над следующим вопросом: как бы вы подошли к математическому определению понятия «источник информации»? Широкое распространение получили сразу несколько решений этой проблемы; однако определение Шеннона оказалось гораздо более плодотворным в плане улучшения понимания.

Его использование привело к получению целого ряда серьезных результатов и созданию обширной теории, которая, по всей видимости, адекватно отражает многие (хотя и не все) реальные проблемы связи.

Шеннона интересовали два ключевых вопроса, относящихся к обмену информацией по каналу связи. Во-первых, какие ресурсы требуются для передачи информации по каналу связи? Например, телефонным компаниям нужно знать, сколько информации они могут надежно передать по данному телефонному кабелю. Во-вторых, может ли информация передаваться таким образом,

чтобы она была защищена от шумов в канале связи? Шеннон ответил на два этих вопроса, доказав две фундаментальные теоремы теории информации. Первая из них — теорема о кодировании для канала без шума — определяет, какое количество физических ресурсов требуется для хранения выходных данных источника информации. Вторая фундаментальная теорема Шеннона — теорема о кодировании для канала с шумом — определяет, какое количество информации можно надежно передать по каналу связи в присутствии шума. Шеннон показал, что для достижения надежной передачи в присутствии шума можно использовать коды, исправляющие ошибки.

Теорема Шеннона о кодировании для канала с шумом устанавливает верхний предел защиты информации, обеспечиваемой кодами, исправляющими ошибки. К сожалению, теорема не дает явного вида кодов, при помощи которых можно было бы достичь этого предела на практике. С момента опубликования

работ Шеннона и до настоящего времени исследователи разрабатывают все новые и лучшие классы кодов, исправляющих ошибки, пытаясь приблизиться к пределу, установленному теоремой Шеннона. Существует сложная теория кодов, исправляющих ошибки, которая предлагает пользователю, желающему разработать хороший код, множество вариантов выбора. Такие коды широко применяются; они используются, например, в проигрывателях компакт-дисков,

компьютерных модемах и спутниковых системах связи. Квантовая теория информации развивалась похожим образом. В 1995 г. Бен Шумахер доказал аналог теоремы Шеннона о кодировании в отсутствие шума,

по ходу дела определив «квантовый бит», или «кубит», как реальный физический ресурс. Однако до сих пор неизвестно никакого аналога теоремы Шеннона о кодировании для канала с шумом применительно к квантовой информации. Несмотря на это, по аналогии с классическими эквивалентами была разработана теория исправления квантовых ошибок, которая, как уже упоминалось,

позволяет квантовым компьютерам эффективно проводить вычисления в присутствии шума, а также осуществлять надежную связь по квантовым каналам с

шумом. Классические идеи исправления ошибок оказались очень важными для разработки и понимания кодов, исправляющих квантовые ошибки. В 1996 г. независимо работавшие Роберт Калдербанк с Питером Шором и Эндрю Стин открыли важный класс квантовых кодов, называемых сейчас CSS-кодами, по первым буквам их фамилий. Впоследствии эти коды были отнесены к категории симплектических (стабилизирующих) кодов, независимо разработанных Робертом Калдербанком, Эриком Рейнсом, Питером Шором и Нейлом Слоуном, а также Даниэлем Готтесманом. Эти открытия, опирающиеся на основные идеи классической теории линейного кодирования, в значительной степени способствовали быстрому пониманию кодов, исправляющих квантовые ошибки, и их применению в области квантовых вычислений и квантовой информации. Теория кодов, исправляющих квантовые ошибки, была разработана с целью защиты квантовых состояний от шума. А как насчет передачи обычной классической информации по квантовому каналу? Насколько эффективно это можно делать? В этой области было обнаружено несколько сюрпризов. В 1992 г. Чарльз Веннет и Стивен Уиснер объяснили, как передавать два классических бита информации путем передачи от отправителя к получателю только одного квантового бита. Это было названо сверхплотным кодированием. Еще больший интерес представляют результаты в области распределенных квантовых вычислений. Представьте, что у вас есть два соединенных в сеть компьютера, на которых решается некоторая задача. Сколько передач по сети требуется для решения этой задачи? Недавно было показано, что квантовые компьютеры могут потребовать экспоненциально меньшего количества передач для решения определенных задач по сравнению с классическими сетевыми компьютерами! К сожалению, эти задачи пока не представляют особого интереса в реальных условиях, и имеют некоторые нежелательные технические ограничения. Важным вопросом, которым нужно заняться в области кванто-

1.1. Глобальные перспективы 29

Вых вычислений и квантовой информации в будущем, является поиск практически важных задач, для которых распределенные квантовые вычисления имеют значительное преимущество над распределенными классическими вычислениями. Но вернемся к теории информации. Эта теория начинается с изучения свойств одиночного канала связи. В приложениях мы часто имеем дело не с одним каналом связи, а с сетью из многих каналов. Свойства таких сетей,

относящиеся к передаче информации, изучаются в сетевой теории информации, которая развилась в обширную и сложную науку. Сетевая квантовая теория информации, напротив, во многом еще только зарождается. Мы очень мало знаем даже о возможностях передачи информации по сетям квантовых каналов. В последние несколько лет был получен ряд довольно ошеломляющих предварительных результатов; однако единой сетевой теории информации для квантовых каналов пока не существует. Одного примера из этой области должно хватить, чтобы убедить вас в значимости такой общей теории. Предположим, что мы пытаемся передавать информацию от Алисы к Бобу по квантовому каналу с шумом. Если этот канал имеет нулевую пропускную способность для квантовой информации, то по нему нельзя надежно передавать никакую информацию. Теперь допустим, что мы рассматриваем две копии канала, работающие синхронно. С интуитивной точки зрения очевидно (и это можно строго доказать), что для квантовой информации такой канал также имеет нулевую пропускную способность. Но если мы изменим направление одного из каналов на обратное, как показано на рис. 1.1, то оказывается, что иногда можно получить ненулевую пропускную способность для передачи информации от Алисы к Бобу! Противоречащие интуиции свойства наподобие только что описанного иллюстрируют странную природу квантовой информации. Лучшее понимание возможностей передачи информации по сетям квантовых каналов представляет собой большую проблему в

области квантовых вычислений и квантовой информации.

Рис. 1.1. Если в классическом случае мы имеем два канала с сильным шумом и нулевой пропускной способностью, работающих параллельно, то объединенный канал также имеет нулевую пропускную способность. Неудивительно, что если изменить направление одного из каналов на обратное, то мы по-прежнему будем иметь нулевую пропускную способность. В квантовомеханическом случае обращение одного из каналов с нулевой пропускной способностью может позволить нам передавать информацию!

Давайте сменим тему, обратившись к старому как мир искусству криптографии. Говоря в самых общих чертах, криптография решает проблему осуществления связи или вычислений с участием двух и более сторон, которые не могут доверять друг другу. Самая известная криптографическая проблема— это передача секретных сообщений. Предположим, что две стороны желают засекретить связь. Например, вы хотите передать продавцу номер своей кредитной карты в обмен на товары, причем так, чтобы этот номер не могла перехватить третья сторона. Это делается при помощи криптографического протокола. Далее в книге мы подробно опишем работу криптографических протоколов, а пока достаточно провести несколько простых разграничений. Наиболее важно понимать различие между криптосистемами с секретным ключом (private key) и криптосистемами с открытым ключом (public key).

Работа криптосистемы с секретным ключом основана на том, что две стороны, Алиса и Боб, используют для связи секретный ключ, известный только им. Точный формат ключа сейчас не имеет значения; представьте себе строку нулей и единиц. Главное в том, что этот ключ используется Алисой для шифрования информации, которую она хочет послать Бобу. Зашифрованную информацию Алиса посылает Бобу, который теперь должен восстановить исходную информацию. Как именно Алиса зашифрует сообщение—зависит от секретного ключа, поэтому для восстановления исходного сообщения Боб должен знать этот ключ, чтобы обратить примененное Алисой преобразование.

К сожалению, криптосистемы с секретным ключом имеют недостатки во многих отношениях. Наиболее фундаментальный вопрос —как распределять ключи? Проблема распределения ключей по своей сложности во многом аналогична исходной проблеме секретной связи —третья сторона может перехватить ключ, а затем использовать его для расшифровки передаваемых сообщений.

Одним из самых первых открытий в области квантовых вычислений и квантовой информации стал тот факт, что квантовая механика позволяет исключить нарушение конфиденциальности при распределении ключей.

Соответствующая процедура известна как квантовая криптография или квантовое распределение ключей. Основная идея заключается в том> чтобы использовать квантовомеханический принцип, согласно которому наблюдение в общем случае возмущает наблюдаемую систему. Если злоумышленник попытается вести подслушивание во время передачи ключа между Алисой и Бобом, то его присутствие будет проявляться в виде возмущения канала связи, используемого Алисой и Бобом для согласования ключа. В таком случае Алиса и Боб могут отбросить биты ключа, принятые во время подслушивания, и начать все заново. Принципы квантовой криптографии были впервые предложены Стивеном Уиснером в конце 60-х гг., но, к сожалению, его работу не приняли к печати! В 1984 г. Чарльз Беннет и Джиллз Брассар, опираясь на более раннюю работу Уиснера, предложили квантовомеханический протокол распределения ключей,

исключающий любую возможность их компрометации. С тех пор было предложено множество квантовых криптографических протоколов и разработано не меньшее количество их экспериментальных прототипов. На момент написания 1.1. Глобальные

перспективы 31 книги эти прототипы почти достигли такого состояния, когда они могут быть полезны в реальных приложениях ограниченного масштаба.

Вторым важным типом криптосистем являются криптосистемы с открытым ключом. Эти криптосистемы не опираются на предварительную передачу секретного ключа между Алисой и Бобом. Вместо этого Боб просто публикует свой «открытый ключ», делая его доступным всем желающим. Алиса может воспользоваться этим открытым ключом для шифрования сообщения,

посылаемого Бобу. Интересно, что при этом третья сторона не может использовать открытый ключ Боба для расшифровки сообщения! Точнее говоря,

шифрующее преобразование выбирается настолько хитроумным и нетривиальным способом, что его исключительно трудно (хотя в принципе возможно) обратить,

зная только открытый ключ. Чтобы обращение было простым для Боба, у него есть секретный ключ, соответствующий открытому ключу. Вместе эти ключи позволяют с легкостью выполнять расшифровку. Секретный ключ известен только Бобу, и это дает ему определенную степень уверенности, что никто другой не сможет прочесть сообщение Алисы. Действительно, вряд ли у кого-то окажется достаточно вычислительных ресурсов, чтобы обратить шифр только по открытому ключу. Таким образом, криптосистемы с открытым ключом решают проблему распределения ключей, делая ненужной передачу секретного ключа перед установлением связи.

Удивительно, что криптография с открытым ключом, которая произвела революцию в области криптографии, не получала широкого распространения до середины 70-х гг., когда она была независимо предложена Уитфилдом Диффи и Мартином Хеллманом, а также Ральфом Меркле. Немного позже Рональд Райвест, Ади Шамир и Леонард Эдельман разработали криптосистему RSA, которая на момент написания книги является наиболее распространенной криптосистемой рассматриваемого типа, превосходно сочетающей в себе безопасность и практичность. В 1997 г. выяснилось, что все это — криптография с открытым ключом, криптосистемы Диффи-Хеллмана и RSA — на самом деле было изобретено в конце 60-х и начале 70-х гг. исследователями из Британского разведывательного управления GCHQ.

Безопасность криптосистем с открытым ключом основана на том факте,

что обращение стадии шифрования только при наличии открытого ключа в общем случае должно быть затруднительным. Например, оказывается, что задача обращения стадии шифрования RSA тесно связана с задачей факторизации. Предположение о безопасности RSA во многом обусловлено верой в то,

что задачу факторизации трудно решить на классическом компьютере.

Однако быстрый алгоритм факторизации на квантовом компьютере, разработанный Шором, мог бы использоваться для взлома RSA! Другие криптосистемы с открытым ключом также могли бы быть взломаны, если бы был известен быстрый классический алгоритм решения задачи о вычислении дискретного логарифма, подобный шоровскому квантовому алгоритму вычисления дискретного логарифма. Именно это практическое применение квантовых компьютеров — взлом криптографических кодов — в значительной степени стимулировало интерес к квантовым вычислениям и квантовой информации.

32 Глава 1. Введение и общий обзор Выше мы рассматривали исторические корни квантовых вычислений и квантовой информации. Конечно, с ростом и развитием этой области из нее выделились самостоятельные подобласти исследований.

Возможно, наиболее поразительным из них является изучение квантовой запутанности. Запутанность — это уникальный квантовомеханический ресурс,

который играет ключевую роль во многих наиболее интересных применениях квантовых вычислений и квантовой информации; это своего рода железо в бронзовом

веке классического мира. Запутанность считается фундаментальным ресурсом Природы, сравнимым по важности с энергией, информацией,

энтропией или любым другим фундаментальным ресурсом. В последние годы предпринимаются огромные усилия, направленные на лучшее понимание ее свойств. Хотя законченной теорий запутанности пока нет, к настоящему времени удалось достичь некоторого прогресса в понимании этого странного понятия квантовой механики. Многие исследователи надеются, что дальнейшее изучение свойств запутанности даст сведения, которые будут способствовать разработке ее новых применений в области квантовых вычислений и квантовой информации.

1.1.2 Направления будущих исследований Мы немного познакомились с историей и современным состоянием квантовых вычислений и квантовой информации. Что ждет нас в будущем? Что могут предложить квантовые вычисления и квантовая информация науке, технике и всему человечеству? Что нового дает эта область по сравнению с ее родительскими дисциплинами — информатикой, теорией информации и физикой? Каковы основные нерешенные проблемы? Перед тем, как переходить к более подробному описанию вычислений и квантовой информации, мы сделаем несколько очень коротких замечаний по этим глобальным вопросам.

Квантовые вычисления и квантовая информация научили нас думать о вычислениях физически, и мы обнаружили, что этот подход открывает много новых возможностей в области связи и обработки информации. Специалисты по информатике и теории информации получили новую плодотворную парадигму для исследований. Более того, фактически мы поняли, что любая физическая теория, а не только квантовая механика, может служить базисом для теории обработки информации и теории связи. В результате этих исследований однажды могут быть созданы устройства обработки информации, намного превосходящие по своим возможностям современные вычислительные и коммуникационные системы, что будет иметь свои положительные и отрицательные последствия для всего общества.

Конечно, квантовые вычисления и квантовая информация ставят перед физиками массу задач, но при этом не совсем понятно, что та область предлагает физике в долгосрочной перспективе. Мы полагаем, что точно так же, как мы научились думать о вычислениях физически, мы можем научиться думать о физике в терминах вычислений. Физика традиционно является дисциплиной,

где основное внимание сосредоточено на понимании «элементарных» объектов и простых систем, однако многие интересные аспекты Природы проявляются лишь с ростом размеров и сложности. Такие явления отчасти исследуются в химии, и инженерных науках, но всякий раз довольно специфическим образом. Квантовые вычисления и квантовая информация предоставляют новые инструменты, позволяющие перебрасывать мост от простого к относительно сложному: в сфере вычислений и алгоритмов есть систематические средства для построения и изучения таких систем. Применение идей из этих областей уже начинает приводить к выработке новых взглядов на физику. Мы надеемся, что в последующие годы этот подход будет успешно применяться во всех ее разделах.

Выше были кратко рассмотрены некоторые ключевые мотивации и идеи,

лежащие в основе квантовых вычислений и квантовой информации. В остальной части этой главы будет дано более техническое, но по-прежнему доступное введение в эти мотивации и идеи в надежде сформировать у вас общее представление о рассматриваемой области в ее современном состоянии.

3.3.1 Квантовые биты

биты - это фундаментальное понятие в области классических вычислений и классической информации. Квантовые вычисления и квантовая информация построены вокруг аналогичного понятия квантового бита (quantum bit), или для краткости кубита (qubit). В этом разделе мы описываем свойства одиночных кубитов и систем, состоящих из нескольких кубитов, сопоставляя их со свойствами классических битов.

Что такое кубит? Мы намерены описывать кубиты как математические объекты с некоторыми заданными свойствами. «Но постойте, — скажете вы, — ведь кубиты являются физическими объектами!» Действительно, кубиты, подобно битам, реализуются как физические системы, и в разд. 1.5 (а также в гл. 7) мы подробно расскажем, как осуществляется переход от абстрактного математического представления к реальным системам. Однако по большей части мы будем рассматривать кубиты как абстрактные математические объекты. Такой подход удобен тем, что предоставляет нам свободу при построении общей теории квантовых вычислений и квантовой информации, не зависящей от конкретной системы, используемой для ее реализации.

Так что же такое кубит? Аналогично классическому биту, который может находиться в состоянии 0 или 1, кубит также имеет состояние. Двумя возможными состояниями кубита являются $|0\rangle$ и $|1\rangle$, соответствующие, как можно догадаться, состояниям 0 и 1 классического бита. Символ $|\rangle$ называется дираковским обозначением, и мы будем часто с ним встречаться, поскольку это стандартное обозначение состояний в квантовой механике. Различие между битами и кубитами в том, что кубит может находиться в состоянии, отличном от $|0\rangle$ или $|1\rangle$. Можно составить линейную комбинацию состояний, часто называемую суперпозицией:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle.$$

Числа α и β являются комплексными, хотя для многих целей их можно без особого ущерба считать действительными. Иначе говоря, состояние кубита представляет собой вектор в двумерном комплексном векторном пространстве. Специальные состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ называются состояниями вычислительного базиса и образуют ортонормированный базис этого векторного пространства. Мы можем измерить бит, чтобы определить, находится ли он в состоянии 0 или 1. Например, компьютеры делают это каждый раз, когда считывают содержимое своей памяти. Но мы не можем измерить кубит, чтобы определить его квантовое состояние, т. е. значения α и β . Из квантовой механики следует, что можно получить лишь гораздо более ограниченную информацию о квантовом состоянии. При измерении кубита мы получаем либо результат 0 с вероятностью $|\alpha|^2$, либо результат 1 с вероятностью $|\beta|^2$. Разумеется, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, так как $|\alpha|^2$, либо результат 1 с вероятностью $|\beta|^2$. Разумеется, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, поскольку сумма вероятностей должна быть равна единице. Геометрически мы можем интерпретировать это как условие, что состояние кубита должно иметь единичную длину. Таким образом, в общем случае состояние кубита представляет собой единичный вектор в двумерном комплексном векторном пространстве.

Этот разрыв между ненаблюдаемым состоянием кубита и доступными нам наблюдениями лежит в основе квантовых вычислений и квантовой информации. В большинстве наших абстрактных моделей мира существует прямое соответствие между элементами абстракции и реальностью, точно так же, как планы архитектора по постройке здания соответствуют конечному результату строительства. Отсутствие такого прямого соответствия в квантовой механике затрудняет интуитивное понимание поведения квантовых систем. Однако существует не прямое соответствие: состояния кубита можно менять тем или иным способом, в результате чего данные измерения

будут существенно зависеть от различных свойств состояния. Таким образом, наличие квантовых состояний приводит к реальным, экспериментально подтверждаемым следствиям, которые, как мы увидим, и определяют эффективность квантовых вычислений и квантовой информации. Способность кубита находиться в состоянии суперпозиции противоречит нашим обыденным представлениям об окружающем физическом мире. Классический бит подобен монете: либо орел, либо решка. Для несовершенных монет возможны промежуточные состояния, например, балансирование на ребре, но в идеальном случае их можно отбросить. Кубит, напротив, до момента наблюдения может находиться в целом континууме состояний между $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Подчеркнем еще раз, что измерение кубита всегда дает только 0 или 1 с некоторой вероятностью. Например, кубит может находиться в состоянии

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

измерение которого в половине случаев ($|1/\sqrt{2}|^2$) дает результат 0, а в другой половине случаев - результат 1. Мы будем часто возвращаться к этому состоянию, которое иногда обозначается как $|+\rangle$.

Несмотря на эту странность, реальность кубитов не вызывает сомнений. Их существование и свойства были подтверждены многочисленными экспериментами (обсуждаемыми в разд. 1.5 и гл. 7). Для реализации кубитов можно использовать много различных физических систем. Чтобы получить конкретное представление о том, как это может быть сделано, полезно перечислить некоторые из возможных способов такой реализации: две разных поляризации фотона; направление ядерного спина в однородном магнитном поле; два состояния электрона в одиночном атоме, как показано на рис. 1.2. В модели атом& электрон может существовать либо в так называемом основном, либо в возбужденном состояниях, которые мы будем обозначать как $|0\rangle$ и $|1\rangle$ соответственно. Облучая атом светом с подходящей энергией в течение некоторого времени, можно перевести электрон из состояния $|0\rangle$ в состояние $|1\rangle$ и наоборот. Но более интересно то, что сокращая время облучения можно оставить электрон, первоначально находившийся в состоянии $|0\rangle$, на полпути между $|0\rangle$ и $|1\rangle$ в состоянии $|+\rangle$.

Само собой разумеется, что интерпретации суперпозиции состояний, как и вероятностной природы наблюдений над квантовыми системами, уделялось много внимания. Однако в этой книге мы не будем касаться подобных дискуссий. Наша цель будет состоять в построении математических и концептуальных схем предикативного характера. Одной из схем, полезных при рассмотрении кубитов, является следующее геометрическое представление. Поскольку $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, можно переписать формулу (1.1) в виде

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left(\cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right)$$

где θ, φ и γ - действительные числа. В гл. 2 будет показано, что множитель $e^{i\gamma}$ можно игнорировать, поскольку он не приводит к наблюдаемым объектам, и по этой причине формула (1.3) фактически сводится к

$$|\psi\rangle = \left(\cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right).$$

Числа θ и φ задают точку на единичной трехмерной сфере, как показано на рис. 1.3. Эта сфера часто называется сферой Блоха; она позволяет наглядно представлять состояние одиночного кубита и часто служит в качестве превосходного «испытательного стенда» для идей из области квантовых вычислений и квантовой информации. Многие

операции над одиночными кубитами, рассматриваемые далее в этой главе, изящно описываются с использованием сферы Блоха. Однако, нужно иметь в виду, что возможности этого представления ограничены, так как не известно простого обобщения сферы Блоха на случай нескольких кубитов.

Сколько информации представляет кубит? Как ни парадоксально, на единичной сфере бесконечное количество точек, поэтому в принципе можно хранить все тексты Шекспира в бесконечном двоичном разложении θ . Однако этот вывод оказывается обманчивым из-за поведения кубита при наблюдении. Вспомните, что измерение кубита дает только 0 или 1. Более того, измерение меняет состояние кубита - он коллапсирует из суперпозиции $|0\rangle$ и $|1\rangle$ в определенное состояние, соответствующее результату измерения. Например, если измерение $|+\rangle$ дает 0, то после измерения кубит останется в состоянии $|0\rangle$. Почему происходит этот коллапс - никто не знает. Как обсуждается в гл. 2, такое поведение является просто одним из фундаментальных постулатов квантовой механики. Для наших целей важно то, что одно измерение дает только один бит информации о состоянии кубита, разрешая тем самым кажущийся парадокс. Определить же коэффициенты α и β для состояния кубита, заданного формулой (1.1), можно только путем измерения бесконечного множества одинаково приготовленных кубитов.

Еще более интересным может быть следующий вопрос: сколько информации представляет кубит, если мы не измеряем его? Ответить на него не так

просто, поскольку нельзя определить количество информации, не выполняя соответствующего измерения. Тем не менее, здесь есть принципиально важный момент. Когда Природа реализует эволюцию замкнутой квантовой системы, не выполняя никаких «измерений», она, по-видимому, следит за всеми непрерывными переменными, описывающими состояние (такими, как α и β). Можно сказать, что в состоянии кубита Природа прячет массу скрытой информации. Еще более интересно то, что потенциальный объем этой дополнительной информации, как мы скоро увидим, экспоненциально растет с увеличением числа кубитов. Понимание этой скрытой квантовой информации является той задачей, которую мы пытаемся решать на протяжении значительной части книги; это ключевой момент в вопросе о том, что же именно делает квантовую механику столь эффективным инструментом обработки информации.

3.3.2 Несколько кубитов

Предположим, что у нас есть два кубита. Будь это классические биты, для них существовало бы четыре возможных состояния: 00, 01, 10 и 11. Подобно этому, система двух кубитов имеет четыре состояния вычислительного базиса, обозначаемых как $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ и $|11\rangle$. Пара кубитов также может находиться в суперпозициях этих четырех состояний, поэтому для описания квантового состояния такой системы требуется сопоставить каждому состоянию вычислительного базиса комплексный коэффициент, иногда называемый амплитудой. В итоге вектор состояния, описывающий два кубита, имеет вид

$$|\psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle$$

Подобно случаю одиночного кубита, результат измерения $x (= 00, 01, 10 \text{ или } 11)$ встречается с вероятностью $|\alpha_x|^2$ и после измерения кубиты остаются в состоянии $|x\rangle$. Требование, чтобы сумма вероятностей равнялась единице, выражается условием нормировки $\sum_{x \in [0,1]^2} |\alpha_x|^2 = 1$, где $[0,1]^2$ обозначает множество строк из двух символов, где каждый символ является либо нулем, либо единицей. Для системы двух кубитов мы

могли бы измерять только подмножество кубитов, скажем, первый кубит. Возможно, вы догадались, как это работает: при измерении только первого кубита получается 0 с вероятностью $|\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2$, а система переходит в состояние

$$|\psi'\rangle = \frac{\alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle}{\sqrt{|\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2}}$$

Обратите внимание, что состояние после измерения перенормировано на коэффициент $\sqrt{|\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2}$, поэтому оно по-прежнему удовлетворяет условию нормировки, как и следует ожидать для допустимого квантового состояния. 38 Глава 1. Введение и общий обзор Важным частным случаем состояния двух кубитов является состояние Белла, или ЭПР-пара,

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Это безобидное на первый взгляд состояние ответственно за многие сюрпризы в области квантовых вычислений и квантовой информации. Оно играет ключевую роль в квантовой телепортации и сверхплотном кодировании, которые обсуждаются в подразд. 1.3.7 и разд. 2.3 соответственно, и является прототипом многих других интересных квантовых состояний. Для состояния Белла характерно то, что при измерении первого кубита возможны два результата: 0 с вероятностью $1/2$ и конечным состоянием $|\varphi'\rangle = |00\rangle$, и 1 с вероятностью $1/2$ и конечным состоянием $|\varphi'\rangle = |11\rangle$. Как следствие, измерение второго кубита всегда дает тот же результат, что и измерение первого кубита, т. е. данные измерений оказываются коррелированными. Над состоянием Белла можно выполнять измерения и других типов, применяя сначала некоторые операции к

первому или второму кубиту, и эта любопытная корреляция между результатами измерения первого и второго кубитов по-прежнему будет существовать. Эти корреляции вызывают большой интерес с момента появления известной работы Эйнштейна, Подольского и Розена (ЭПР), в которой было впервые указано на странные свойства состояний наподобие белловского. Идеи ЭПР были подхвачены и значительно развиты Джоном Беллом, доказавшим потрясающий факт: корреляция измерений в состоянии Белла сильнее любой корреляции, которая может существовать между какими-либо классическими системами. Эти результаты, подробно описанные в разд. 2.6, были первым указанием на то, что квантовая механика позволяет обрабатывать информацию принципиально иначе, чем в классическом мире.

В более общем случае мы можем рассмотреть систему из n кубитов. Состояния вычислительного базиса этой системы имеют вид $|x_1 x_2 \dots x_n\rangle$, а ее квантовое состояние характеризуется 2^n амплитудами. Для $n = 500$ это больше, чем оцениваемое количество атомов во вселенной! Ни на каком мыслимом классическом компьютере невозможно сохранить все эти комплексные числа. В гильбертовом пространстве поистине много места. Однако Природа в принципе манипулирует такими невообразимыми объемами данных даже для систем, содержащих лишь несколько сотен атомов. Она как бы держит у себя 2^{500} скрытых черновиков, на которых выполняет вычисления по мере эволюции системы. Было бы очень хорошо воспользоваться этой потенциально огромной вычислительной мощностью. Но как состыковать квантовую механику и вычисления?

3.4 Квантовые вычисления

Изменения, происходящие с квантовым состоянием, можно описать на языке квантовых вычислений. Аналогично тому, как классический компьютер строится из электрических схем, содержащих провода и логические элементы,

квантовый компьютер строится из квантовых схем, которые состоят из проводов и 1.3. Квантовые вычисления 39 элементарных квантовых элементов, позволяющих передавать квантовую информацию и манипулировать ею. В этом разделе мы опишем некоторые простейшие квантовые элементы и приведем несколько примеров схем, иллюстрирующих их применение, включая схему для телепортации кубитов!

3.4.1 Однокубитовые элементы

Схемы классических компьютеров состоят из проводов (wires) и логических элементов (gates). Провода используются для передачи информации, тогда как логические элементы выполняют манипуляции с этой информацией, преобразуя ее из одного вида в другой. Рассмотрим, например, классические однобитовые логические элементы. Единственным нетривиальным членом этого класса является элемент NOT. Его функционирование определяется таблицей значений (truth table), в которой $0 \rightarrow 1$ и $1 \rightarrow 0$, т. е. состояния 0 и 1 обмениваются.

Можно ли определить для кубитов аналогичный квантовый элемент NOT? Допустим, что у нас есть некоторый процесс, который переводит состояние $|0\rangle$ в состояние $|1\rangle$ и наоборот. Очевидно, что такой процесс был бы хорошим кандидатом на роль квантового аналога элемента NOT. Однако указание действия элемента на состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ ничего не говорит о том, что происходит с суперпозициями этих состояний. Нужны дополнительные сведения о свойствах квантовых элементов. На самом деле квантовый элемент NOT действует линейно, т. е. переводит состояние

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

в соответствующее состояние, где $|0\rangle$ и $|1\rangle$ поменялись ролями:

$$\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$$

3.5 Квантовые вычисления

Однокубитовые элементы Многокубитовые элементы Измерения в базисах, отличных от вычислительного Квантовые схемы Схема копирования кубита? Пример: состояния Белла Пример: квантовая телепортация Квантовые алгоритмы Классические вычисления на квантовом компьютере Квантовый параллелизм Алгоритм Дойча | Алгоритм Дойча-Йожа Классификация квантовых алгоритмов Экспериментальная обработка квантовой информации Эксперимент Штерна-Герлаха Перспективы практической обработки квантовой информации Квантовая информация Квантовая теория информации: примеры задач Квантовая информация в более широком контексте

3.6 Введение в квантовую механику

Линейная алгебра Базисы и линейная независимость Линейные операторы и матрицы Матрицы Паули Скалярное произведение Собственные векторы и собственные значения Сопряженные и эрмитовы операторы Q Тензорное произведение Операторные функции Коммутатор и антикоммутатор Полярное разложение и разложение по сингулярным числам Постулаты квантовой механики Пространство состояний Эволюция Квантовые измерения Различение квантовых состояний Проективные измерения POVM-измерения Фаза Составные системы • Квантовая механика: общий взгляд Сверхплотное кодирование Оператор плотности Ансамбли квантовых состояний Общие свойства операторов плотности Редуцированный оператор плотности Разложение Шмидта и

расширения до чистого состояния Парадокс Эйнштейна - Подольского - Розена и неравенство Белла

3.7 Введение в информатику

Вычислительные модели Машины Тьюринга Схемы Анализ вычислительных задач
Как количественно оценивать компьютерные ресурсы Сложность вычислений Задачи
разрешения и классы сложности P и NP Другие классы сложности Вычисления и
энергия Перспективы информатики

3.8 Другие темы основ

(тут менее полезные темы, но тем не менее, нам их говорили)

3.8.1 Квантовые базы данных

Алгоритм поиска Гровера

(пока не пишу, ибо не до него)

(тут укажу применения. но особо не до него, так-то нужно особенно его много
проходить, чтобы понять.)

Part IV

Квантовая теория информации

4 Квантовая информация по Холево

4.0.1 Введение

0.1. Конечномерные системы. Изложение теории вероятностей принято начинать с конечной схемы. Следуя этой традиции, рассмотрим конечное вероятностное пространство Ω . Имеют место три тесно связанных между собой факта, которые по-разному выражают классичность вероятностной схемы:

1. множество событий $A \subset \Omega$ образует булеву алгебру;
2. множество распределений вероятностей $[p_1, \dots, p_N]$ на Ω является симплексом, т. е. выпуклым множеством, в котором каждая точка однозначно представляется в виде смеси (выпуклой комбинации) крайних точек;
3. множество случайных величин $[\lambda_1, \dots, \lambda_N]$ на Ω образует коммутативную алгебру (относительно поточечного умножения).

Квантовым аналогом этой схемы является модель N -уровневой системы. Аналог распределения вероятностей - состояние такой системы описывается матрицей плотности эрмитовой $N \times N$ -матрицей S , удовлетворяющей условиям положительной определенности и единичности следа

$$S \geq 0, \text{Tr } S = 1;$$

аналог случайной величины - наблюдаемая описывается произвольной эрмитовой $N \times N$ -матрицей X . Пусть

$$X = \sum_{j=1}^n x_j E_j$$

- спектральное разложение эрмитовой матрицы X , где $x_1 < x_2 < \dots$ - собственные числа, E_1, E_2, \dots - проекторы на соответствующие собственные подпространства. Набор $\mathbf{E} = \{E_j\}$ образует ортогональное разложение единицы:

$$E_j E_k = \delta_{jk} E_j; \quad \sum_{j=1}^n E_j = I$$

где I - единичная матрица. Из свойств (0.1), (0.3) следует, что соотношение

$$\mu_S^X(x_j) = \text{Tr } S E_j; \quad j = 1, \dots, n$$

задает распределение вероятностей на спектре $\text{Sp} X = \{x_1, x_2, \dots\}$ наблюдаемой X ; в квантовой механике постулируется, что это есть распределение вероятностей наблюдаемой X в состоянии S .

В частности, среднее значение X в состоянии S есть

$$E_S(X) = \text{Tr } SX$$

Если в этой модели ограничиться рассмотрением только диагональных матриц

$$S = \begin{bmatrix} p_1 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & p_N \end{bmatrix}, \quad \tilde{\lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \lambda_N \end{bmatrix},$$

то мы возвращаемся к классической схеме с N элементарными событиями, где, в частности, (0.5) сводится к $E_S(X) = \sum_{j=1}^N p_j \lambda_j$. То же самое мы получили бы, рассматривая только одновременно диагонализуемые, т. е. коммутирующие (перестановочные между собой) матрицы. Поскольку имеются наблюдаемые, описываемые некоммутирующими матрицами, модель N -уровневой системы не сводится к классической схеме.

Роль индикаторов событий в квантовом случае играют наблюдаемые, принимающие значения 0 или 1, т. е. эрмитовы идемпотентные матрицы: $E^2 = E$. Вводя унитарное координатное пространство $\mathcal{H} = \mathbf{C}^N$, в котором действуют $N \times N$ -матрицы, такую матрицу E можно рассматривать как ортогональный проектор на подпространство \mathcal{E} в \mathcal{H} . Таким образом, квантовые события можно отождествить с подпространствами унитарного пространства. Множество квантовых событий, называемое квантовой логикой, частично упорядочено (по включению) и наделено операциями $\mathcal{E}_1 \vee \mathcal{E}_2$ (линейная оболочка подпространств $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$), $\mathcal{E}_1 \wedge \mathcal{E}_2$ (пересечение подпространств $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$), \mathcal{E}' (ортогональное дополнение) с известными свойствами. Неклассичность модели N -уровневой системы можно выразить тремя различными утверждениями:

1. квантовая логика событий не является булевой алгеброй, поскольку в ней не выполнено тождество дистрибутивности

$$\mathcal{E}_1 \wedge (\mathcal{E}_2 \vee \mathcal{E}_3) = (\mathcal{E}_1 \wedge \mathcal{E}_2) \vee (\mathcal{E}_1 \wedge \mathcal{E}_3)$$

Вследствие этого, нет «элементарных событий», на которые однозначно распадалось бы любое квантовое событие;

2. выпуклое множество состояний не является симплексом, т. е. представление матрицы плотности в виде смеси крайних точек неоднозначно;
3. комплексная оболочка множества наблюдаемых является некоммутативной (ассоциативной) алгеброй.

В бесконечномерном случае вместо матриц приходится рассматривать операторы, действующие в некотором гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Математически корректное изложение основных понятий квантовой механики в гильбертовом пространстве было впервые дано Дж. фон Нейманом [26]. Он, в частности, подчеркнул существенное различие между эрмитовыми (симметричными) и самосопряженными операторами, которое, конечно, не проводилось в предшествовавших физических работах и указал, что именно условие самосопряженности обеспечивает в случае $\dim \mathcal{H} = \infty$ аналог спектрального разложения (0.2). Другой круг вопросов в случае $\dim \mathcal{H} = \infty$ связан с уточнением понятия следа и соответствующего класса операторов с конечным следом. Математическая схема, называемая стандартной формулировкой квантовой механики в гильбертовом пространстве, рассматривается в гл. 1.

0.2. Общие постулаты статистического описания. Каждая из математических структур - квантовая логика событий, выпуклое множество состояний и алгебра квантовых наблюдаемых - может быть охарактеризована определенной системой аксиом, но возникающие при этом характеристические проблемы оказываются совсем не

тривиальными и по существу составляют отдельные направления исследований, обзор которых выходит за рамки настоящей статьи (см., в частности, Сигал [32], Макки [23], Варадараян [160], Людвиг [125], Гаддер [95]). Имея дело с конкретным объектом - квантовой теорией вероятностей в гильбертовом пространстве, не приходится прибегать к тем или иным системам аксиом; более того, именно знание структурных особенностей этого объекта и дает основание для мотивировки той или иной аксиомы. Одним из полезных уроков аксиоматического подхода является, однако, указание на плодотворный параллелизм в описании классических и квантовых систем. Формулируемые ниже положения являются модификацией первых четырех аксиом Макки, одинаково применимых как к классическим, так и квантовым системам.

(I) Заданы множество \mathcal{S} , элементы которого называются состояниями и множество D , элементы которого называются (вещественными) наблюдаемыми. Для любой пары $S, X \in \mathcal{S}$ задано распределение вероятностей $\mu_S^X(dx)$ на σ -алгебре $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ борелевских подмножеств вещественной прямой \mathbb{R} , называемое распределением вероятностей наблюдаемой X в состоянии S .

Состояние S интерпретируется как более или менее детальное описание приготовления статистического ансамбля независимых индивидуальных представителей рассматриваемой системы, а наблюдаемая X - как величина, измеряемая определенным прибором для каждого представителя в данном ансамбле. Аксиома (I), таким образом, предполагает воспроизводимость индивидуальных экспериментов и устойчивость частот при их независимых повторениях. Следующая аксиома выражает возможность смешивания ансамблей.

(II) Для любых $S_1, S_2 \in \mathcal{S}$ и любого числа $p, 0 < p < 1$, существует $S \in \mathcal{S}$, такое, что

$$\mu_S^X = p\mu_{S_1}^X + (1-p)\mu_{S_2}^X.$$

для всех $X \in \mathcal{N}$; S называется смесью состояний S_1, S_2 в пропорции $p : (1-p)$.

Следующая аксиома говорит о возможности преобразования информации, полученной при измерении наблюдаемой. Пусть f борелевская функция из \mathbb{R} в \mathbb{R} . Если $X_1, X_2 \in \mathcal{N}$ таковы, что для ВСЕХ $S \in \mathcal{S}$

$$\mu_S^{X_2}(B) = \mu_S^{X_1}(f^{-1}(B)); \quad B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$$

где $f^{-1}(B) = \{x : f(x) \in B\}$, то наблюдаемая X_2 функционально подчинена наблюдаемой X_1 . В этом случае будем писать $X_2 = f \circ X_1$.

(III) Для любой $X_1 \in \mathcal{N}$ и любой борелевской функции f существует $X_2 \in \mathcal{N}$, такая что $X_2 = f \circ X_1$.

Пару непустых множеств $(\mathcal{S}, \mathcal{N})$, удовлетворяющих аксиомам (I)-(III), назовем статистической моделью. Статистическая модель называется отделимой, если

(IV) Из того, что $\mu_S^{X_1} = \mu_S^{X_2}$ для всех $X \in \mathcal{N}$ следует $S_1 = S_2$; из того, что $\mu_S^{X_1} = \mu_S^{X_2}$ для всех $S \in \mathcal{S}$ следует $X_1 = X_2$.

Для отделимой модели операция смешивания в \mathcal{S} и отношение функциональной подчиненности в \mathcal{N} определены однозначно. Тем самым множество состояний \mathcal{S} наделяется выпуклой структурой, а множество наблюдаемых \mathcal{N} получает частичную упорядоченность.

Наблюдаемые X_1, \dots, X_m называются совместимыми, если они функционально подчинены некоторой наблюдаемой X , т. е. $X_j = f_j \circ X; j = 1, \dots, m$. Совместимые наблюдаемые могут быть измерены в одном эксперименте. Наблюдаемые, совместимые со

всеми наблюдаемыми $X \in \mathcal{N}$, образуют центр статистической мо-

дели. Запас элементов в центре определяет степень классичности модели.

0.3. Классические и квантовые системы. Пусть $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega))$ - измеримое пространство, $\text{Re}(\Omega)$ - выпуклое множество всех вероятностных мер на Ω , а $\Omega(\Omega)$ совокупность всех вещественных случайных величин с естественным отношением функциональной подчиненности. Пусть

$$\mu_P^X(B) = P(X^{-1}(B)) : B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

- распределение вероятностей $X \in D(\Omega)$ относительно $P \notin \text{Re}(\Omega)$. Пара $(\mathfrak{P}(\Omega), \mathcal{D}^-(\Omega))$ образует отделимую статистическую модель, которую можно назвать колмогоровской. В этой модели все наблюдаемые совместимы и центр совпадает с $\Omega(\Omega)$. Для простоты продемонстрируем совместимость наблюдаемых с конечным множеством значений. Всякая такая наблюдаемая имеет представление, аналогичное (0.2)

$$\therefore (\omega) = \sum_{j=1}^n x_j E_j(\omega)$$

где $E_j(\omega)$ есть индикатор множества $B_j = \{\omega_1 : X(\omega) = x_j\}$. Множества B_j образуют разбиение пространства Ω , а $\{E_j(\omega)\}$ являются аналогом ортогонального разложения единицы (0.3). Если X_1, \dots, X_m - произвольный набор таких наблюдаемых, то достаточно взять разбиение $\{B_j\}$ более мелкое, чем все разбиения, соответствующие наблюдаемым X_i , чтобы было возможно представить все X_i как функции наблюдаемой X , соответствующей такому разбиению $\{B_j\}$.

Статистическая модель N -уровневой квантовой системы фактически была описана в п. 1. Если наблюдаемая X имеет спектральное разложение (0.2), то наблюдаемая $f \circ X$ определяется как

$$f \circ X = \sum_{j=1}^n f(x_j) E_j$$

Квантовые наблюдаемые X_1, \dots, X_m совместимы тогда и только тогда, когда соответствующие матрицы перестановочны, т. е.

$$X_i X_j = X_j X_i; i, j = 1, \dots, m$$

Центр такой модели тривиален: он состоит из матриц, кратных единичной, т. е. только из постоянных наблюдаемых.

Для совместимых наблюдаемых естественно вводится совместное распределение вероятностей относительно любого состояния S . Если же X_1, \dots, X_m несовместимы, то совместное распределение относительно произвольного состояния не существует. Это обстоятельство отражает квантовый принцип дополнительности. Физические измерения над микрообъектами осуществляются макроскопическими экспериментальными установками, каждая из которых предполагает (ложную и специфичную организацию пространственно-временной среды. Разные способы такой организации, отвечающие разным наблюдаемым, могут быть взаимно исключающими (хотя и относятся к одному и тому же микрообъекту), т. е. дополнительными. Наличие обширного запаса несовместимых наблюдаемых - первое из основных отличий квантовой статистики от классической.

Один из наиболее спорных вопросов квантовой теории проблема скрытых параметров, т. е. вопрос о принципиальной возможности описания квантовой статистики в терминах классического вероятностного пространства. Первая попытка доказательства невозможности введения скрытых параметров была предпринята Дж. фон Нейманом в

[26] и долгое время его аргументы рассматривались как решающие. В 1966 г. Дж. Белл обратил внимание на их неполноту и указал на другое фундаментальное свойство квантовомеханического описания, которое можно обозначить как свойство целостности¹¹. Математически оно связано с принципом суперпозиции и с тем обстоятельством,

1. Английский термин - pop-separability. ством, что составные квантовые системы описываются с помощью тензорного, а не декартова произведения, как в классической теории вероятностей. Свойства дополненности и целостности лежат в основе негативных результатов в проблеме скрытых параметров, которые обсуждаются в конце гл. 1.

0.4. Рандомизация в классической и квантовой статистике. Вернемся к колмогоровой модели и рассмотрим случайную величину (0.6). В каждой точке $\omega \in \Omega$ она с вероятностью 1 принимает одно из значений x_j . В математической статистике, в частности в теории статистических решений полезно рассмотрение «рандомизованных» случайных величин, которые определяются указанием вероятностей $M_j(\omega)$, ($0 \leq M_j(\omega) \leq 1$) принятия значения x_j для любого элементарного события ω . Набор функций $\mathbf{M} = \{M_j(\omega)\}$ характеризуется условиями

$$M_j(\omega) \geq 0; \quad \sum_{j=1}^n M_j(\omega) = 1; \quad \omega \in \Omega$$

и описывает неточное измерение случайной величины X , т. е. измерение со случайными ошибками. Распределение вероятностей такого измерения относительно вероятностной меры P дается формулой

$$\mu_P^M(x_j) = \int_{\Omega} P(d\omega) M_j(\omega)$$

В частности, измерение является точным (безошибочным), если $M_j(\omega) = E_j(\omega)$. Таким образом возникает другая классическая статистическая модель, которую по имени создателя теории статистических решений можно назвать моделью Вальда.

Естественно рассмотреть квантовый аналог модели Вальда, в которой наблюдаемая с конечным множеством значений описывается конечным разложением единицы, т. е. семейством матриц (операторов) $\mathbf{M} = \{M_j\}$, удовлетворяющим условиям

$$M_j \geq 0; \quad \sum_{j=1}^n M_j = I$$

Вероятность j -го исхода в состоянии S определяется формулой, аналогичной (0.9)

$$\mu_S^M(x_j) = \text{Tr } S M_j$$

Эти определения естественно переносятся и на наблюдаемые с произвольным множеством значений. Так возникает обобщенная статистическая модель квантовой механики (см. §2.1).

Общие разложения единицы в квантовой теории появляются на рубеже 70-х годов. К этому независимо приводят исследования по квантовой аксиоматике (Г. Людвиг), по проблеме воспроизводимости, связанной с повторными измерениями (Э. Б. Дэвис и Дж. Льюис); по квантовой теории статистических решений (А. С. Холево) и другие работы. Обобщенная статистическая модель квантовой механики является логическим следствием ее вероятностной структуры и дает основу для рассмотрения ряда вопросов, не находящих удовлетворительного решения в рамках стандартной формулировки.

0.5. Выпуклая геометрия разложений единицы и фундаментальные пределы точности. Хотя описанное выше расширение понятия наблюдаемой формально аналогично введению рандомизованных величин в классической статистике, неортогональные разложения единицы имеют в квантовой теории принципиально более важное значение, нежели просто средство описания неточных измерений. Дело в том, что и с математической, и с физической точек зрения наибольший интерес представляют крайние точки выпуклого множества разложений единицы (0.10), описывающие статистику предельно точных и максимально информативных измерений. В классическом случае крайние точки множества (0.8) совпадают с нерандомизованными процедурами $\{E_j(\omega)\}$, соответствующими обычным случайным величинам. Однако в квантовом случае крайние точки множества (0.10) при $n > 2$ уже не исчерпываются ортогональными разложениями единицы. Следовательно, для описания предельно точных квантовых измерений требуются, в общем случае, неортогональные разложения единицы.

С другой стороны, как показал М. А. Наймарк (1940), произвольное разложение единицы расширяется до ортогонального в некотором объемлющем гильбертовом пространстве. Это позволяет истолковать неортогональное разложение единицы как обычную наблюдаемую в расширении исходной квантовой системы, содержащем независимую дополнительную систему. Таким образом, измерение над расширением может быть более точным и информативным, чем любое прямое квантовое измерение. Этот парадоксальный с точки зрения классической статистики факт связан с затронутым в п. 3 квантовым свойством целостности.

В 1940 -50 годы в работах Д. Габора и Л. Бриллюэна было высказано предположение, что квантово-механическая природа канала связи должна налагать фундаментальные ограничения на скорость передачи и точность воспроизведения информации. Этот вопрос приобрел актуальность в 60-е годы с появлением квантовых каналов связи - систем передачи информации, основанных на свойствах когерентного лазерного излучения. В 70-е годы была создана последовательная квантовая теория статистических решений, которая дает принципиальную основу для рассмотрения вопросов предельной точности и информативности измерений (см. К. Хелстром [37], А. С Холево [43]).

В этой теории решающие процедуры - измерения описываются разложениями единицы в гильбертовом пространстве системы и решаются задачи об отыскании экстремума некоторого функционала (меры точности, шенноновской информации) в классе квантовых решающих процедур, обычно подчиненных дополнительным ограничениям (несмещенности, ковариантности и т. п.) (см. гл. 2).

0.6. Проблема соответствия. Одна из трудностей в стандартной формулировке квантовой механики состоит в невозможности сопоставления некоторым величинам, таким как время, угол, фаза и т. п. самосопряженного оператора в гильбертовом пространстве системы. Причина кроется в теореме единственности Стоуна-фон Неймана, которая налагает жесткие ограничения на спектры канонически сопряженных наблюдаемых.

К этому же кругу вопросов можно отнести и трудности с локализуемостью (т. е. введением ковариантных наблюдаемых положения) для релятивистских квантовых частиц с нулевой массой. Рассмотрение в качестве наблюдаемых неортогональных разложений единицы, подчиненных условиям ковариантности, аналогичных коммутационным соотношениям Вейля в теореме Стоуна-фон Неймана, позволяет в значительной степени избежать этих трудностей (см. гл. 2). В спектральной теории неортогональные разложения единицы возникают как обобщенные спектральные меры несамосопряженных операторов. В соответствии с этим, например, оператор,

отвечающий наблюдаемой времени, оказывается максимальным эрмитовым (но не самосопряженным). Можно сказать, что обобщенная статистическая модель квантовой механики на новом математическом уровне оправдывает «наивное» представление о вещественной наблюдаемой, как об эрмитовом, но не обязательно самосопряженным, операторе.

0.7. Повторные и непрерывные измерения. В колмогоровской модели преобразования состояний системы могут быть описаны с помощью условных вероятностей. Пусть в результате измерения случайной величины (0.6) получено значение x_j . При этом классическое состояние, т. е. вероятностная мера $P(d\omega)$ на Ω преобразуется по формуле

$$P(A) \rightarrow P(A | B_j) = \frac{\int_{\Omega} P(d\omega) E_j(\omega)}{\int_{\Omega} P(d\omega) E_j(\omega)}; \quad A \in \mathcal{B}(\Omega)$$

Очевидно, что если результат измерения не принимается во внимание, то состояние P вообще не изменяется:

$$P(A) \rightarrow \sum_{j=1}^n P(A | B_j) P(B_j) = P(A)$$

В квантовой статистике ситуация качественно более сложна. Аналогом преобразования (0.12) является знаменитый проекционный постулат Дж. фон Неймана

$$S \rightarrow S_j = \frac{E_j S E_j}{\text{Tr } S E_j}$$

где S оператор плотности состояния перед измерением, а S_j после измерения наблюдаемой (0.2), в результате которого получено значение x_j . Основанием для этого постулата служит феноменологическая гипотеза воспроизводимости, подразумевающая предельную точность и минимальность возмущения, вносимого измерением наблюдаемой X . Если результат измерения не принимается во внимание, то состояние S преобразуется по формуле, аналогичной (0.13):

$$S \rightarrow \sum_{j=1}^n S_j \mu_S^X(x_j) = \sum_{j=1}^n E_j S E_j$$

Однако в общем случае $\sum_j E_j S E_j \neq S$; это означает, что изменение состояния в ходе квантового измерения не сводится только к преобразованию информации и отражает также принципиально неустранимое и необратимое физическое воздействие измерительного прибора на наблюдаемую систему. С проекционным постулатом связан целый ряд проблем; не затрагивая вопросов философского характера, которые выходят за пределы вероятностной интерпретации, остановимся на конкретных проблемах, которые успешно решаются в рамках обобщенной статистической модели квантовой механики.

Принципиальную трудность представляет формулировка проекционного постулата для наблюдаемых с непрерывным спектром. Для описания изменения состояния при произвольном квантовом измерении Э. Б. Дэвис и Дж. Льюис (1970) ввели понятие инструмента - меры со значениями в множестве преобразований квантовых состояний. Этим понятием охватываются и неточные измерения, не удовлетворяющие условию воспроизводимости, что позволяет включить и случай непрерывного спектра. С каждым инструментом связано разложение единицы, причем инструментам, возникающим из

проекционного постулата, отвечают ортогональные разложения единицы. Понятие инструмента открывает возможность описания статистики любой последовательности квантовых измерений.

Новое освещение получает вопрос о траекториях, восходящий к фейнмановской формулировке квантовой механики. Процесс непрерывного (во времени) измерения квантовой наблюдаемой можно представить как предел «серий» последовательных неточных измерений. Математическое описание такого предела обнаруживает замечательные аналогии с классической схемой суммирования случайных величин, функциональными предельными теоремами в теории вероятностей и представлением Леви-Хинчина для процессов с независимыми приращениями (см. гл. 4).

0.8. Необратимая динамика. Обратимая динамика изолированной квантовой системы описывается уравнением

$$S \rightarrow U_t S U_t^{-1}; \quad -\infty < t < \infty,$$

где $\{U_t\}$ -группа унитарных операторов. Если система является открытой, т. е. взаимодействует с окружением, то ее эволюция является, как правило, необратимой. Пример такого необратимого изменения состояния, обусловленного взаимодействием с измерительным прибором, дается соотношением (0.15). Наиболее общий вид динамического отображения, задающего конечную эволюцию открытой системы, включает как (0.16), так и (0.15):

$$S \rightarrow \sum_j V_j S V_j^*$$

где $\sum_j V_j^* V_j = I$. Среди всевозможных аффинных преобразований выпуклого множества состояний, отображения (0.17) выделяются специфически некоммутативным свойством полноты по ложительности, возникшим и играющим важную роль в современной теории операторных алгебр.

Непрерывная марковская эволюция открытой системы описывается динамической полугруппой динамических отображений, удовлетворяющей определенным условиям непрерывности (см. Э. Б. Дэвис [78]). Динамические полугруппы являются некоммутативным аналогом марковских полугрупп в теории вероятностей. В 1976 г. Г. Линдблад и независимо, в конечномерном случае, В. Горини, А. Коссаковский и Э. Сударшан получили полное описание инфинитезимального оператора непрерывной по норме динамической полугруппы. Этот результат, лежащий в основе многих фактов теории квантовых случайных процессов, рассматривается в гл. 3.

0.9. Квантовые случайные процессы. Одним из стимулов возникновения теории квантовых случайных процессов послужила проблема расширения динамической полугруппы до обратимой динамики «большой системы», включающей открытую систему и окружение. Возможность такого расширения означает, в частности, согласованность понятия динамической полугруппы с основным динамическим принципом квантовой механики, выраженным соотношением (0.16).

В теории вероятностей подобное расширение марковской полугруппы до группы временных сдвигов в пространстве траекторий, соответствующих марковскому случайному процессу, осуществляется известной конструкцией Колмогорова-Даниэля. Понятие квантового случайного процесса, играющее важную роль в проблеме расширения динамической полугруппы, было сформулировано Л. Аккарди, А. Фриджеро и Дж. Льюнсом (1980). Роль марковского свойства особенно подчеркивалась Л. Аккарди. В 80-е годы теория квантовых случайных процессов превратилась в обширное самостоятельное поле исследований (см., в частности, сборники [141]-[145]).

Аналитический аппарат квантового стохастического исчисления, позволяющий, в частности, строить нетривиальные классы квантовых случайных процессов и конкретные расширения динамических полугрупп, был предложен Р. Л. Хадсоном и К. Р. Партасарати (1982). Квантовое стохастическое исчисление возникает на пересечении двух концепций - временной фильтрации в смысле теории случайных процессов и вторичного квантования в пространстве Фока. В конце 60-х годов Р. Стритер и Х. Араки указали на структуру непрерывного тензорного произведения, которая лежит в основе связи между безграничной делимостью, процессами с независимыми приращениями и пространством Фока. Благодаря этому, пространство Фока оказывается носителем процессов «квантового шума», которые дают универсальную модель окружения открытой квантовой системы. Квантовое стохастическое исчисление представляет интерес и с точки зрения классической теории случайных процессов. Оно перебрасывает мост между исчислением Ито и вторичным квантованием, открывает неожиданные связи между непрерывными и скачкообразными процессами, позволяет по-новому взглянуть на понятие стохастического интеграла. Наконец, на этой основе развиваются потенциально важные приложения, относящиеся к теории управления и фильтрации для квантовых случайных процессов (см. гл. 5).

4.1 СТАНДАРТНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

4.1.1 1. Основные понятия

1.1. Операторы в гильбертовом пространстве.

Изложению теории операторов в гильбертовом пространстве, в значительной мере стимулированной проблемами квантовой механики, посвящено много прекрасных книг (см., в частности, [2], [30]). Ниже мы лишь напоминаем некоторые факты и фиксируем обозначения.

Далее \mathcal{C} обозначает сепарабельное комплексное гильбертово пространство. Для скалярного произведения в \mathcal{C} используется дираковское обозначение $\langle \varphi | \psi \rangle$, причем считается, что форма $\langle \varphi | \psi \rangle$ линейна по ψ и антилинейна по φ . Символ $|\psi\rangle\langle\varphi|$ обозначает оператор, действующий на вектор $\chi \in \mathcal{H}$ по формуле

$$|\psi\rangle\langle\varphi|\chi = \psi\langle\varphi|\chi\rangle.$$

В частности, если $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, то $|\psi\rangle\langle\psi|$ есть проектор на вектор $\psi \in \mathcal{H}$. Линейная оболочка множества операторов вида $|\psi\rangle\langle\varphi|$ совпадает с множеством операторов конечного ранга в \mathcal{H} .

Если X -ограниченный оператор в \mathcal{H} , то X^* обозначает сопряженный оператор, определяемый соотношением

$$\langle \varphi | X^* \psi \rangle = \langle X \varphi | \psi \rangle; \quad \varphi, \psi \in \mathcal{H}.$$

$$\langle \varphi | X^* \psi \rangle = \langle X \varphi | \psi \rangle; \quad \varphi, \psi \in \mathcal{H}$$

Множество ограниченных операторов в \mathcal{C} является банаховой алгеброй с инволюцией $*$. Оператор $X \in \mathcal{B}(\mathcal{B})$ эрмитов, если $X = X^*$. Унитарным оператором называется оператор U , такой что $U^*U = UU^* = I$, где I - единичный оператор. Проектором называется эрмитов оператор E , такой что $E^2 = E$. Эрмитов оператор X положителен ($X \geq 0$), если $\langle \psi | X \psi \rangle \geq 0$ для всех $\psi \in \mathcal{H}$. Для положительного оператора однозначно определен положительный квадратный корень.

Для всякого ограниченного положительного оператора T однозначно определен след

$$\mathrm{Tr} T = \sum_{i=1}^{\infty} \langle e_i | T e_i \rangle \leq +\infty$$

где $\{e_i\}$ произвольный ортонормированный базис. Оператор T называется ядерным (оператором со следом), если он является линейной комбинацией положительных операторов с конечным следом. Для такого оператора след определяется однозначно, как сумма абсолютно сходящегося ряда вида (1.1). Множество ядерных операторов $\mathfrak{I}(\mathcal{H})$ является банаховым пространством относительно нормы $\|T\|_1 = \mathrm{Tr} \sqrt{T^*T}$, причем множество операторов конечного ранга плотно в $\mathfrak{I}(\mathcal{H})$.

Множество $\mathfrak{I}(\mathcal{C})$ образует двусторонний идеал в алгебре $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$. Сопряженное к банахову пространству $\mathfrak{I}(\mathcal{C})$ изоморфно $\mathfrak{B}(\mathcal{G})$, причем двойственность определяется билинейной формой

$$\langle T, X \rangle = \mathrm{Tr} TX; \quad T \in \mathfrak{I}(\mathcal{H}), \quad X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}).$$

Нижний индекс h в обозначении множества операторов означает, что рассматривается соответствующее подмножество эрмитовых операторов, например, $\mathfrak{B}_h(\mathcal{H})$ есть вещественное банахово пространство ограниченных эрмитовых операторов в \mathcal{C} . Отметим, что $\mathfrak{I}_h(\mathcal{H})^* = \mathfrak{B}_h(\mathcal{C})$, причем двойственность по-прежнему задается формой (1.2).

Кроме сходимости по операторной норме в $\mathcal{O}(\mathcal{H})$, часто используются более слабые понятия сходимости. Последовательность $\{X_n\}$ сходится к X сильно, если $\lim \|X_n \psi - X \psi\| = 0$ для всех $\psi \in \mathcal{H}$, слабо, если $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \varphi | X_n \psi \rangle = \langle \varphi | X \psi \rangle$ для всех $\varphi, \psi \in \mathcal{C}$, и w^* -слабо (ультраслабо), если $\lim \mathrm{Tr} T X_n = \mathrm{Tr} T X$ для всех $T \in \mathfrak{I}(\mathcal{Z})$. Если $\{X_n\}$ ограниченная по норме последовательность операторов, такая что $X_n \leq X_{n+1}$, то X_n сходится сильно, слабо и w^* -слабо к ограниченному оператору X (обозначается $X_n \uparrow X$).

1.2 Оператор плотности.

Так называется всякий положительный оператор S с единичным следом:

$$S \geq 0; \quad \mathrm{Tr} S = 1.$$

Множество операторов плотности $\subseteq (\mathcal{H})$ является выпуклым подмножеством вещественного линейного пространства $\mathfrak{B}_h(\mathcal{C})$; более того, оно является основанием конуса положительных элементов, порождающего $\mathfrak{I}_h(\mathcal{C})$. Точка S выпуклого множества \odot называется крайней, если из того, что $S = pS_1 + (1-p)S_2$, где $S_1, S_2 \in \mathcal{G}$, $0 < p < 1$, следует $S_1 = S_2 = S$. Крайними точками множества $\odot(\mathcal{H})$ являются одномерные проекторы

$$S_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|,$$

где $\psi \in \mathcal{H}$, $\langle\psi | \psi\rangle = 1$. Всякий оператор плотности представим в виде счетной выпуклой комбинации

$$S = \sum_{j=1}^{\infty} p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

где $\langle\psi_j | \psi_j\rangle = 1$, $p_j \geq 0$, $\sum_{j=1}^{\infty} p_j = 1$. Одно из таких представлений дается спектральным разложением оператора S , когда ψ_j являются его собственными векторами, а p_j соответствующими собственными числами.

Рассмотрим множество $\mathcal{E}(\mathcal{H})$ проекторов в \mathcal{H} , изоморфное квантовой логике событий (замкнутых линейных подпрост-

ранств \mathcal{H}). Вероятностной мерой на $\mathcal{E}(\mathcal{H})$ называется вещест-

венная функция μ со свойствами: 1) $0 \leq \mu(E) \leq 1, E \in (\mathcal{H})$; 2) если $\{E_j\} \subset \mathcal{E}(\mathcal{H})$, причем $E_j E_k = 0$ при $j \neq k$ и $\sum_j E_j = I$, то

$$\sum_j \mu(E_j) = 1$$

Отвечая на вопрос Макки, Глисон (1957) доказал следующую теорему.

Т е о р е м а. Пусть $\dim \mathcal{H} \geq 3$. Тогда всякая вероятностная мера на $\mathcal{E}(\mathcal{H})$ имеет вид

$$\mu(E) = \text{Tr } S E$$

где S - однозначно определяемый оператор плотности.

Случай $\dim \mathcal{H} = 2$ является особым - для него легко указать меры, не представимые в виде (1.4), однако они не используются в квантовой теории. Доказательство теоремы Глисона совершенно нетривиально и породило целое направление в некоммутативной теории меры, посвященное всевозможным обобщениям и упрощениям этой теоремы (см. обзор Кручиньского в [141]).

По поводу некоммутативной теории меры и интегрирования см. обзоры Ш. А. Аюпова и А. Н. Шерстнева и другие статьи в сборниках [18], [34].

1.3 Спектральная мера.

Пусть \mathcal{L} множество с σ -алгеброй измеримых подмножеств $\mathcal{B}(\mathcal{L})$. Ортогональным разложением единиц в \mathcal{H} называется проекторно-значная мера на $\mathcal{B}(\mathcal{L})$,

т. е. функция множеств $E: \mathcal{B}(\mathcal{L}) \rightarrow \mathcal{E}(\mathcal{H})$, удовлетворяющая

условиям:

1. если $B_1, B_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{L})$ и $B_1 \cap B_2 = \emptyset$, то $E(B_1) E(B_2) = 0$;

2) если $\{B_j\}$ - конечное или счетное разбиение \mathcal{L} на попарно-непересекающиеся измеримые подмножества, то где ряд сходится сильно.

$$\sum_j E(B_j) = I$$

Пусть X -оператор с плотной областью определения $\mathcal{D}(X) \subset \mathcal{H}$. Обозначим $\mathcal{D}(X^*)$ множество векторов φ таких, что существует $\chi \in \mathcal{H}$, для которого

$$\langle \varphi | X \psi \rangle = \langle \chi | \psi \rangle; \psi \in \mathcal{D}(X)$$

Определим оператор X^* с областью определения $\mathcal{D}(X^*)$, полагая $X^* \varphi = \chi$. Оператор X называется эрмитовым (симметрическим), если $X \subseteq X^*$, и самосопряженным, если $X = X^*$.

Спектральная теорема (фон Нейман, Стоун, Рисс, 1929-1932) устанавливает взаимно однозначное соответствие между ортогональными разложениями единицы E на σ -алгебре $\mathcal{B}(\mathbf{R})$ борелевских подмножеств вещественной прямой \mathbf{R} и самосопряженными операторами в \mathcal{H} по формуле

$$X = \int_{-\infty}^{\infty} x E(dx)$$

где интеграл понимается в подходящем смысле (см. [30]). Разложение единицы E называется спектральной мерой оператора X . Для любой борелевской функции f определен самосопряженный оператор

$$f \circ X = \int_{-\infty}^{\infty} x E(dx)$$

спектральная мера \mathbf{F} которого связана со спектральной мерой оператора X соотношением

$$F(B) = E(f^{-1}(B)), B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

Совокупность всех самосопряженных операторов в \mathcal{H} обозначим $D(\mathcal{H})$.

1.4. Статистический постулат. С каждой квантовомеханической системой связывается сепарабельное комплексное гильбертово пространство \mathcal{H} . Состояния системы описываются операторами плотности в \mathcal{H} . Вещественной наблюдаемой называется любой самосопряженный оператор в \mathcal{C} . Распределение вероятностей наблюдаемой X в состоянии S задается соотношением

$$\mu_S^X(B) = \text{Tr } SE(B), B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

где \mathbf{E} - спектральная мера X . Определенную таким образом отделимую статистическую модель $((\mathcal{H}), \mathcal{D}(\mathcal{C}))$ будем называть стандартной статистической моделью квантовой механики.

Из (1.5), (1.6) вытекает, что среднее значение наблюдаемой X в состоянии S ,

$$E_s(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x \mu_S^X(dx)$$

равно

$$\mathbf{E}_s(X) = \text{Tr } SX$$

(по крайней мере, для ограниченных наблюдаемых).

Крайние точки множества $\subseteq (\mathcal{C})$, описываемые операторами плотности (1.3), называются чистыми состояниями, а вектор ψ называется вектором состояния. Среднее значение наблюдаемой X в таком состоянии равно

$$\mathbf{E}_{s_\psi}(X) = \langle \psi | X \psi \rangle.$$

Допуская вольность речи, ограниченной наблюдаемой иногда называют произвольный $X \in \mathcal{B}(\mathcal{C})$. Соотношение (1.7) определяет линейный положительный нормированный ($E_s(I) = 1$) функционал на алгебре $\mathcal{O}(\mathcal{C})$, т. е. состоян и е в смысле теории алгебр (предыдущие рассуждения поясняют происхождение этого математического термина). Состояние на $\mathcal{B}(\mathcal{C})$, определяемое оператором плотности по формуле (1.7), является нормальным в том смысле, что если $X_n \uparrow X$, то $\mathbf{E}_s(X_n) \rightarrow \mathbf{E}_s(X)$.

Алгеброй фон Неймана называется всякая алгебра ограниченных операторов в \mathcal{C} , содержащая единичный оператор, замкнутая относительно инволюции и предельного перехода в сильной (слабой) операторной топологии. С любой алгеброй фон Неймана \mathcal{P} , как и с $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$, ассоциируется статистическая модель, в которой состояниями являются нормальные состояния на \mathcal{P} , а наблюдаемыми - самосопряженные операторы, присоединенные к \mathcal{B} . Такие модели занимают промежуточное положение между квантовой и классическими (соответствующими коммутативным алгебрам \mathfrak{B}), и играют

важную роль в теории квантовых систем с бесконечно большим числом степеней свободы - полей и сред (см. [7], [9], [51]).

1.5. Совместимые наблюдаемые. Коммутатором ограниченных операторов X, Y называется оператор

$$[X, Y] = XY - YX$$

Операторы $X, Y \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ - перестановочны (коммутируют), если $[X, Y] = 0$. Самосопряженные операторы X, Y называются перестановочными, если перестановочны их спектральные меры. Следующие утверждения эквивалентны:

1. Наблюдаемые X_1, \dots, X_n совместимы, т. е. существует наблюдаемая X и борелевские функции f_1, \dots, f_n такие, что $X_j = f_j \circ X; j = 1, \dots, n$.
2. Операторы X_1, \dots, X_n перестановочны.

Если E_1, \dots, E_n - спектральные меры совместимых наблюдаемых X_1, \dots, X_n , то соотношение

$$E(B_1 \times \dots \times B_n) = E_1(B_1) \cdot \dots \cdot E_n(B_n); B_j \in \mathcal{B}$$

однозначно определяет ортогональное разложение единицы \mathbf{E} на $\mathcal{B}(\mathbb{R}^n)$, называемое совместной спектральной мерой операторов X_1, \dots, X_n . Для любого оператора плотности S определено совместное распределение вероятностей наблюдаемых X_1, \dots, X_n

$$\mu_S^{X_1, \dots, X_n(B)} = \text{Tr } SE(B), B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^n)$$

Для любой борелевской функции $f(x_1, \dots, x_n)$ определена наблюдаемая

$$f(x_1, \dots, X_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) E(dx_1 \dots dx_n)$$

причем

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_S(f(\dot{x}_1, \dots, x_n)) &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) \times \\ &\times \mu_{is}^{X_1, \dots, X_n(dx_1 \dots dx_n)}. \end{aligned}$$

Существование несовместимых наблюдаемых отражает квантовый принцип дополнительности. Количественное выражение этого принципа дает соотношение неопределенностей. Для наблюдаемых X, Y , имеющих конечный второй момент относительно состояния S , корректно определяются билинейные формы

$$\langle X, Y \rangle_S = \text{Re Tr } YSX, [X, Y]_S = 2 \text{Im Tr } YSX$$

(см. [43, гл. II]). Пусть $\mathbf{X} = [X_1, \dots, X_n]$ - набор произвольных наблюдаемых с конечным вторым моментом. Введем вещественные матрицы

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_S(\mathbf{X}) &= [\langle X_i - \mathbf{I} \cdot \mathbf{E}_S(X_i), X_j - \mathbf{I} \cdot \mathbf{E}_S(X_j) \rangle_S]_{i,j=1, \dots, n} \\ \mathbf{C}_S(\mathbf{X}) &= [[X_i, X_j]_S]_{i,j=1, \dots, n} \end{aligned}$$

Из положительной определенности полуторалинейных форм $X, Y \rightarrow \text{Tr } Y^*SX, \text{Tr } XSY^*$ вытекает неравенство ¹⁾

$$\mathbf{D}_S(\mathbf{X}) \geq \pm \frac{i}{2} \mathbf{C}_S(\mathbf{X})$$

1. Впервые такое неравенство было указано Робертсоном (1934); впоследствии оно неоднократно переоткрывалось (см. [17]). где левая и правая части рассматриваются как комплексные эрмитовы матрицы. Для двух наблюдаемых $X = X_1, Y = X_2$ неравенство (1.8) равносильно соотношению неопределенностей Шрёдингера-Робертсона

$$\mathbf{D}_s(X) \cdot \mathbf{D}_s(Y) \geq \langle \langle X - \mathbf{I} \cdot \mathbf{E}_s(X), Y - \mathbf{I} \cdot \mathbf{E}_s(Y) \rangle \rangle^2 + \frac{1}{4}[X, Y]_s^2,$$

где

$$\mathbf{D}_s(\dot{X}) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mathbf{E}_s(X))^2 \mu_s^X(dx)$$

- дисперсия наблюдаемой X в состоянии S . Если X, Y -совместимые наблюдаемые, то величина

$$\begin{aligned} & \langle X - \mathbf{I} \cdot \mathbf{E}_S(X), Y - \mathbf{I} \cdot \mathbf{E}_s(Y) \rangle_s = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mathbf{E}_S(X))(y - \mathbf{E}_s(Y)) \mu_S^{X,Y}(dxdy) \end{aligned}$$

представляет собой ковариацию X, Y в состоянии S ; при этом $[X, Y]_S = 0$ и (1.9) превращается в неравенство Коши-Шварца для ковариации случайных величин.

Детальный обзор многообразных вариантов и обобщений соотношения неопределенностей см. в [17].

Заметим, что если X, Y - произвольные (ограниченные) операторы, то

$$\langle X, Y \rangle_S = \text{Tr } SX \circ Y$$

где

$$X \circ Y = \frac{1}{2}(XY + YX)$$

- йорданово (симметризованное) произведение операторов X, Y . Величина вида (1.10) в квантовой статистической механике называется корреляцией, хотя если наблюдаемые X, Y не совместимы, она не связана каким-либо простым образом с измерениями X, Y .

1.6. Простейший пример. Пусть $\dim \mathcal{H} = 2$. Базис в $\mathcal{D}(\mathcal{C})$ образован матрицами

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

где σ_i -матрицы Паули. Полагая $X(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^3 a_i \sigma_i$, где $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3) \in R^3$, имеем

$$X(\mathbf{a}) \cdot X(\mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{I} + iX(\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

\mathbf{a}, \mathbf{b} . Отсюда

$$\text{Tr } X(\mathbf{a})X(\mathbf{b}) = 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

Всякая матрица плотности однозначно записывается в виде

$$S(\mathbf{a}) = \frac{1}{2}(\mathbf{I} + X(\mathbf{a}))$$

где $|a| \leq 1$. Таким образом, $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ как выпуклое множество изоморфно единичному шару в \mathbf{R}^3 , причем чистые состояния соответствуют точкам сферы $|\mathbf{a}| = 1$. В этом случае

$$S(\mathbf{a}) = |\psi(\mathbf{a})\rangle\langle\psi(\mathbf{a})|$$

где $\psi(a)$ -единичный вектор состояния. Поскольку $\langle\psi(a) | \psi(-a)\rangle = 0$, то соотношение

$$X(a) = |\psi(a)\rangle\langle\psi(a)| - |\psi(-a)\rangle\langle\psi(-a)|, (|a| = 1)$$

дает спектральное разложение наблюдаемой $X(\mathbf{a})$. Итак, наблюдаемая $X(\mathbf{a})$ принимает значения ± 1 , причем вероятность значения ± 1 в состоянии $S(\mathbf{b})$ ($|\mathbf{b}| \leq 1$) есть

$$\text{Tr } S(\mathbf{b})S(\pm\mathbf{a}) = \frac{1}{2}(1 \pm \mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$$

так что $X(a)$ имеет распределение Бернулли.

В физике конечномерное гильбертово пространство обычно описывает внутренние (спиновые) степени свободы квантовой системы. Случай $\dim \mathcal{H} = 2$ отвечает минимальному спину $1/2$. Матрица $\frac{1}{2}X(\mathbf{a})$ описывает наблюдаемую спина в направлении \mathbf{a} , а оператор плотности $S(\mathbf{a})$ ($|\mathbf{a}| = 1$) - «полностью поляризованное состояние», в котором спин в направлении \mathbf{a} имеет точное значение $\frac{1}{2}$. Операторы плотности с $|\mathbf{a}| < 1$, представляющие собой смеси полностью поляризованных состояний, описывают «частично поляризованные» состояния, в частности, $\mathbf{a} = 0$ соответствует хаотическому состоянию $S(0) = \frac{1}{2}\mathbf{I}$.

Из соотношения (1.11) следует, что наблюдаемые $X(\mathbf{a})$, $X(\mathbf{b})$ совместимы тогда и только тогда, когда \mathbf{a} и \mathbf{b} коллинеарны. С другой стороны, для всех $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbf{R}^3$

$$X(\mathbf{a})X(\mathbf{b}) + X(\mathbf{b})X(\mathbf{a}) = 2(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{I}$$

Фиксируем некоторое состояние и рассмотрим соотношение

$$X(\mathbf{a}) + X(\mathbf{b}) = X(\mathbf{a} + \mathbf{b}).$$

Оно показывает, что распределение Бернулли устойчиво по отношению к сложению наблюдаемых, подчиненных соотношению антикоммутации (1.14), и что в квантовой теории вероятностей существует векторное пространство бернуллиевских случайных величин размерности, большей единицы (в обычной теории вероятностей таким свойством обладают только гауссовские случайные величины).

На самом деле такое пространство существует для любой конечной размерности n . Пусть $\mathcal{C}(n)$ - конкретная алгебра Клиффорда, т. е. комплексная алгебра матриц, порождаемая эрмитовыми образующими X_1, \dots, X_n , удовлетворяющими соотношениям

$$X_j^2 = \mathbf{I}, \lambda_j \bar{\lambda}_k + X_k X_j = 0; k \neq j; k, j = 1, \dots, n$$

Более точное определение и дальнейшие сведения об алгебрах Клиффорда см., например, в [160]. Полагая $X(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^n a_j X_j$ для $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n) \in \mathbf{R}^n$, соотношения (1.16)

можно записать в форме (1.14). При этом, конечно, выполняется (1.15). Наблюдаемые $X(\mathbf{a}), \mathbf{a} \in \mathbf{R}^n$, принимают только значения $\pm|\mathbf{a}|$ и поэтому имеют распределение Бернулли относительно любого состояния на алгебре $\mathcal{C}(n)$.

На алгебре Клиффорда естественно определяется «бернуллиевское состояние», подобное многомерному гауссовскому распределению в обычной теории вероятностей (т. н. квазисвободное состояние канонических антикоммутирующих соотношений [58], [150]).

4.1.2 2. Симметрии, кинематика, динамика

2.1. Группы симметрий. Рассмотрим отделимую статистиче-

скую модель $(\mathfrak{S}, \mathfrak{D})$. Пусть задана пара взаимно однозначных

преобразований: Ψ , отображающее \mathfrak{S} на \mathcal{S} и Φ , отображающее \mathfrak{D} на \mathfrak{D} , причем

$$\mu_{\Psi(S)}^{\Phi(X)}(B) = \mu_S^X(B); B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

для всех $S \in \mathfrak{S}, X \in \mathfrak{D}$. Отсюда следует, что Ψ является аффинным отображением, т. е.

$$\Psi\left(\sum_{i=1}^n p_i S_i\right) = \sum_{i=1}^n p_i \Psi(S_i)$$

если $p_i \geq 0, \sum_{i=1}^n p_i = 1$. Преобразование Ψ назовем симметрией в пространстве состояний.

Теорема (Вигнер, 1931). Всякая симметрия пространства квантовых состояний имеет вид

$$\Psi(S) = USU^*$$

где U унитарный или антиунитарный оператор в \mathcal{G} .

Для средних значений наблюдаемых имеем

$$\text{Tr } \Psi(S)X = \text{Tr } S\Psi^*(X)$$

где

$$\Psi^*(X) = U^*XU$$

С точки зрения наблюдаемой статистики преобразование (2.1) состояний эквивалентно преобразованию (2.2) наблюдаемых. В первом случае говорят о картине Шрёдингера, а во втором о картине Гейзенберга.

Пусть G - группа и $g \rightarrow \Psi_g$ - представление G в группу симметрий $\odot(\mathcal{H})$, так что

$$\Psi_{g_1 \cdot g_2} = \Psi_{g_1} \cdot \Psi_{g_2}; g_1, g_2 \in G$$

Если G -связная топологическая группа, а представление $g \rightarrow \Psi_g$ непрерывно, то Ψ_g представляется в виде

$$\Psi_g(S) = U_g S U_g^*$$

где $g \rightarrow U_g$ - проективное унитарное представление группы G в пространстве \mathcal{C} , т. е. операторы U_g унитарны и удовлетворяют уравнению

$$U_{g_1} U_{g_2} = \omega(g_1, g_2) U_{g_1 \cdot g_2}$$

где $\omega(g_1, g_2)$ - множитель представления - комплексная функция, удовлетворяющая определенным алгебраическим соотношениям (см., например, Варадараян [160]).

2.2. Однопараметрические группы. В случае $G = \mathbf{R}$, как показали Вигнер и Баргманн, всегда можно выбрать $\omega(g_1, g_2) = 1$, так что однопараметрическая группа симметрий определяется унитарным представлением \mathbf{R} в \mathcal{C} .

Т е о р е м а (Стоун, 1932). Пусть $t \rightarrow U_t, t \in \mathbf{R}$ - сильно непрерывная группа унитарных операторов в \mathcal{H} , так что

$$U_{t_1} U_{t_2} = U_{t_1+t_2}; t_1, t_2 \in \mathbf{R}.$$

Тогда существует самосопряженный оператор A в \mathcal{H} , такой что $U_t = e^{itA}$. Обратно, для любого самосопряженного оператора A семейство $e^{itA}, t \in \mathbf{R}$, образует сильно непрерывную однопараметрическую группу.

Итак, предположив, например, что статистическое описание изолированной квантовой системы инвариантно относительно выбора начала отсчета времени, мы приходим к выводу, что в \mathcal{H} существует самосопряженный оператор H такой, что состояние системы в момент времени t описывается формулой

$$S_t = e^{-iHt} S_0 e^{iHt}$$

Оператор H называется гамильтонианом (или наблюдаемой энергии) системы. Из (2.4) следует уравнение эволюции (в картине Шрёдингера)

$$i \frac{dS_t}{dt} = [H, S_t]$$

Если $S_0 = |\psi_0\rangle \langle \psi_0|$ - чистое состояние, то $S_t = |\psi_t\rangle \langle \psi_t|$, где $\{\psi_t\}$ - семейство векторов в \mathcal{H} , удовлетворяющее уравнению шрёдингера

$$i \frac{d\psi_t}{dt} = H\psi_t$$

Как правило, H - неограниченный оператор (полуограниченный снизу), так что в соотношениях (2.5), (2.6) следует позаботиться об областях определения.

Уравнение эволюции в картине Гейзенберга имеет вид

$$X_t = e^{iHt} \check{X}_0 e^{-iHt}; i \frac{dX_t}{dt} = [X_t, H]$$

Аналогично, из предположения о пространственной однородности вытекает существование самосопряженного оператора P , такого что состояние квантовой системы в системе отсчета, сдвинутой на расстояние x вдоль данной координатной оси, определяется уравнением

$$S_x = e^{-iPx} S_0 e^{iPx}$$

Оператор P называется оператором импульса вдоль этой оси. Вообще, всякой однопараметрической группе симметрий геометрического или кинематического характера отвечает самосопряженный оператор, порождающий по формулам типа (2.4), (2.7) преобразования квантовых состояний.

2.3. Соотношения Г. Вейля. инематика нерелятивистских систем как классических, так и квантовых, основана на прин. ципе относительности Галилея, согласно которому описание изолированной системы одинаково во всех инерциальных системах отсчета.

Пусть $W_{\alpha, \nu}$ - унитарный оператор, порождающий преобразование состояний при переходе в систему отсчета, сдвинутую на расстояние x и движущуюся относительно исходной со скоростью v вдоль выделенной координатной оси. Тогда $(x, v) \rightarrow W_{x, v}$ есть проективное представление группы $G = \mathbf{R}^2$ в гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Можно доказать, что соотношение (2.3) приводится к виду

$$W_{x_1, v_1} W_{x_2, v_2} = \exp \left[-\frac{im}{2} (x_1 v_2 - x_2 v_1) \right] W_{x_1+x_2, v_1+v_2}$$

где m - вещественный параметр (связанный с массой частицы) и далее строго положительный. Выделяя однопараметрические подгруппы - группу пространственных сдвигов $V_x = W_{x, 0}$ и группу «галилеевых бустов» $U_v = W_{0, v}$, соотношение (2.8) можно переписать в виде

$$U_v V_x = e^{imxv} V_x U_v; \quad x, v \in \mathbf{R},$$

причем $W_{x, v} = e^{imxv/2} V_x U_v$. Соотношение (2.9) называется каноническим коммутационным соотношением (ККС) Г. Вейля [10].

Согласно теореме Стоуна,

$$U_v = e^{imvQ}, \quad V_x = e^{-ixP},$$

где Q, P - самосопряженные операторы в \mathcal{H} . Рассматривая Q как вещественную наблюдаемую, заметим, что соотношение

$$V_x^* E(B+x) V_x = E(B); \quad B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

для спектральной меры E оператора Q . Это же равносильно тому, что распределение вероятностей наблюдаемой преобразуется ковариантно при пространственных сдвигах (2.7):

$$\mu_{s_x}^Q(B+x) = \mu_{s_0}^Q(B); \quad B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

для любого состояния S_0 . Это дает основание назвать Q наблюдаемой координаты вдоль выделенной оси. Симметричное рассуждение показывает, что P/m есть наблюдаемая скорости изолированной квантовой системы.

Представлением ККС считается любая конкретная пара (V, U) , удовлетворяющая соотношениям (2.9). Представление называется неприводимым, если в \mathcal{C} нет замкнутого подпространства, инвариантного относительно V_x, U_v . Неприводимым является представление Шрёдингера в $\mathcal{C} = L^2(\mathbf{R})$

$$V_x \psi(\xi) = \psi(\xi - x), \quad U_v \psi(\xi) = e^{imv\xi} \psi(\xi)$$

В этом представлении Q задается оператором умножения на ξ , а P - оператором $i^{-1} \frac{d}{d\xi}$.

Операторы P, Q имеют общую плотную инвариантную область определения и удовлетворяют на ней ККС Гейзенберга ¹⁾:

$$[P, Q] = iI$$

Операторы P, Q называются каноническими наблюдаемыми. Обратный переход от соотношения Гейзенберга к соотношению Вейля (экспоненцирование) имеет ряд аналитических тонкостей, связанных с неограниченностью операторов P, Q и породил обширную математическую литературу (см. Йоргенсен, Мур [112]).

Принципиальное значение для квантовой механики имеет тот факт, что ККС определяют канонические наблюдаемые P, Q практически однозначно.

Теорем а (Стоун-фон Нейман, 1931). Всякое сильно непрерывное представление ККС— водимых представлений, каждое из которых унитарно эквивалентно представлению Шрёдингера.

В частности, в любом представлении ККСР, Q , как и в представлении Шрёдингера, неограничены и имеют лебегов спектр, простирающийся на всю вещественную прямую. С этим связана известная трудность с установлением разумного принципа соответствия в квантовой механике. Вопрос состоит в определении канонически сопряженных квантовых наблюдаемых, аналогичным обобщенным координатам и импульсам в

1. Соотношение (2.111) впервые было рассмотрено в 50-х годах прошлого века ирландским математиком Грейвсом, который развил соответствующее символическое исчисление. гамильтоновом формализме квантовой механики, и связан с: проблемой квантования классических систем. Так, в классической механике время и энергия, подобно координате и импульсу, являются канонически сопряженными величинами. Однако наблюдаемая энергии H имеет ограниченный снизу спектр, поэтому из теоремы Стоуна-фон Неймана вытекает, что не существует самосопряженного оператора времени T , которым был бы связан с H каноническим коммутационным соотношением. Эти трудности, возникающие и для других канонических пар, разрешаются в рамках обобщенной статистической модели квантовой механики (см. гл. 2, §3).

Аналогично формулируются ККС для систем с произвольным числом степеней свободы. Пусть $\{Z, \Delta\}$ -симплектическое пространство, т. е. вещественное линейное пространство с билинейной кососимметричной формой $\Delta(z, z'); z, z' \in Z$. Представлением ККС называется семейство $z \rightarrow W(z)$ унитарных операторов в гильбертовом пространстве \mathcal{H} , удовлетворяющее ККС Вейля-Сигала

$$W(z)W(z') = \exp \frac{i}{2} \Delta(z, z') W(z + z')$$

Если форма Δ невырождена, а Z конечномерно, то оно имеет четную размерность d , и существует базис, в котором

$$\Delta(z, z') = \sum_{j=1}^d (x_j y'_j - x'_j y_j)$$

При этом операторы сильно непрерывного представления Вейля записываются в виде

$$W(z) = \exp i \sum_{j=1}^d (x_j P_j + y_j Q_j)$$

где самосопряженные операторы P_j, Q_j удовлетворяют многомерному аналогу ККС Гейзенберга (2.11)

$$[P_j, Q_k] = i\delta_{jk}I; [P_j, P_k] = 0, [Q_j, Q_k] = 0$$

В этом случае теорема единственности Стоуна-фон Неймана сохраняет силу.

Для систем с бесконечным числом степеней свободы единственность нарушается и существует континуальное множество неэквивалентных представлений, что является причиной «инфракрасных расхождений» в квантовой теории поля (см. [7], [32], [51]).

Неединственность представлений ККС тесно связана с неэквивалентностью вероятностных мер в бесконечномерных пространствах и послужила одним из

первоначальных стимулов для изучения этого вопроса, занимающего большое место в классической теории случайных процессов.

2.4. Гауссовские состояния. Неравенство (1.9) и ККС (2.11) влекут соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$\mathbf{D}_s(P)\mathbf{D}_s(Q) \geq 1/4$$

из которого видно, что не существует состояний S , в котором P и Q одновременно принимали бы некоторые точные значения с вероятностью 1. Состояния, для которых в (2.14) достигается равенство, называются состояниями минимальной неопределенности. Это чистые состояния $S_{x,v}$, определяемые векторами

$$\psi_{x,v} = W_{x,v}\psi_{0,0}; (x, v) \in \mathbf{R}^2$$

где $\psi_{0,0}$ - вектор основного состояния, в представлении Шрёдингера имеющий вид

$$\psi_{0,0}(\xi) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp(-\xi^2/4\sigma^2)$$

Состояния $S_{x,v}$ характеризуются тремя параметрами

$$\begin{aligned} x &= \mathbf{E}_{S_{x,v}}(Q), \quad v = \mathbf{E}_{S_{x,v}}(P), \\ \sigma^2 &= \mathbf{D}_{S_{x,v}}(Q) = [4\mathbf{D}_{S_{x,v}}(P)]^{-1}. \end{aligned}$$

При фиксированном σ^2 векторы $\psi_{x,v}$ образуют семейство, известное в квантовой оптике как семейство когерентных состояний [12], [21]. Для этих состояний

$$\langle Q - \mathbf{E}_{S_{x,v}}(Q) \cdot \mathbf{I}, \quad P - \mathbf{E}_{S_{x,v}}(P) \cdot \mathbf{I} \rangle_{S_{x,v}} = 0.$$

Более широкий класс образуют чистые состояния, для которых достигается равенство в соотношении неопределенностей (1.9) (для P и Q), но условие (2.16) не обязано выполняться. Эти состояния широко обсуждались в физической литературе под именем сжатых (squeezed) состояний (см., например, [140]). С математической точки зрения все эти состояния входят в класс состояний, являющихся естественным квантовым аналогом гауссовских распределений в теории вероятностей.

Пусть $\{Z, \Delta\}$ - конечномерное симплектическое пространство с невырожденной кососимметричной формой Δ и $z \rightarrow W(z)$ - неприводимое представление ККС в гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Характеристическая функция оператора плотности S в \mathcal{H} определяется соотношением

$$\varphi(z) = \text{Tr } SW(z); \quad z \in Z$$

и обладает рядом свойств, аналогичных свойствам характеристических функций в теории вероятностей [43, гл. V]. В частности, аналог условия положительной определенности имеет вид

$$\sum_{j,k} \bar{c}_j c_k \varphi(z_j - z_k) \exp \frac{i}{2} \Delta(z_j, z_k) \geq 0$$

для всех конечных наборов $\{c_j\} \subset \mathbf{C}$, $\{z_j\} \subset Z$. Состояние S называется гауссовским, если его характеристическая функция имеет вид

$$\varphi(z) = \exp \left[im(z) - \frac{1}{2} \alpha(z, z) \right]$$

где $t(z)$ - линейная, а $\alpha(z, z')$ - билинейная формы на Z . Это соотношение задает характеристическую функцию тогда и только тогда, когда выполнено условие

$$\alpha(z, z)\alpha(z', z') \geq \frac{1}{4}\Delta(z, z')^2; \quad z, z' \in Z$$

непосредственно связанное с (2.18). Общее определение для бесконечномерного Z было дано в [127]. В квантовой теории поля такие состояния описывают квазисвободные (обобщенносвободные) поля и носят такое же название. В статистической механике они возникают как равновесные состояния бозе-систем с квадратичным гамильтонианом (см., например, [70], [51]).

4.1.3 3. Составные системы

3.1. Тензорное произведение гильбертовых пространств.

Пусть $\mathcal{C}_1, \mathcal{H}_2$ - гильбертовые пространства со скалярными произведениями $\langle \cdot | \cdot \rangle_1$ и $\langle \cdot | \cdot \rangle_2$. В множестве \mathcal{L} формальных линейных комбинаций элементов $\psi_1 \times \psi_2 \in \mathcal{C}_1 \times \mathcal{H}_2$ введем положительно определенную эрмитову форму, полагая

$$\langle \varphi_1 | \langle \varphi_2 | \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle_1 \langle \varphi_2 | \psi_2 \rangle_2$$

и продолжая ее на \mathcal{L} по линейности. Пополнение (факторизованного по нулевому подпространству формы) пространства \mathcal{L} является гильбертовым пространством, которое называется тензорным произведением $\mathcal{H}_1, \mathcal{C}_2$ и обозначается $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Вектор пространства $\mathcal{C}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, соответствующий классу эквивалентности векторов $\psi_1 | \psi_2 \in \mathcal{L}$, обозначается $\psi_1 \otimes \psi_2$.

Если $\mathcal{H}_j = L^2(\Omega_j, \mu_j); j = 1, 2$, то пространство $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = L^2(\Omega_1 \times \Omega_2, \mu_1 \times \mu_2)$ состоит из всех функций $\psi(\omega_1, \omega_2)$, квадратично интегрируемых по мере $\mu_1 \times \mu_2$, причем вектор $\psi_1 \otimes \psi_2$ определяется функцией $\psi_1(\omega_1)\psi_2(\omega_2)$.

Тензорное произведение операторов $X_1 \otimes X_2$, где X_j - оператор в \mathcal{H}_j , определяется формулой

$$(X_1 \otimes X_2)(\psi_1 \otimes \psi_2) = X_1\psi_1 \otimes X_2\psi_2$$

Если \mathcal{C}_j - конечномерные (комплексные) гильбертовы пространства, то

$$\dim \odot (\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) = \dim \curvearrowright (\mathcal{H}_1) \dim \odot (\mathcal{H}_2).$$

Если же \mathcal{C}_j - вещественные гильбертовы пространства, то здесь имеет место знак $>$, а для кватернионных гильбертовых пространств (при некотором разумном определении $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$), знак $<$. Это обстоятельство рассматривается как косвенный аргумент в пользу поля комплексных чисел в аксиоматической квантовой механике.

Аналогично определяется тензорное произведение любого конечного числа гильбертовых пространств $\mathcal{C}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$. В квантовой механике $\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$ описывает систему из n различных частиц. В статистической механике приходится рассматривать системы неразличимых частиц - бозонов или фермионов. В n -кратном тензорном произведении $\mathcal{H}^{\otimes n}$ выделяются два подпространства: симметричное тензорное произведение \mathcal{H}^{sn} , описывающее бозоны, и антисимметричное тензорное произведение \mathcal{H}^{an} , описывающее фермионы (в случае $\mathcal{H} = L^2(\Omega, \mu)$ первое состоит из симметричных, а второе - из антисимметричных функций $\psi(\omega_1, \dots, \omega_n)$ аргументов $\omega_1, \dots, \omega_n \in \Omega$). Системы из переменного (неограниченного) числа частиц описываются пространствами Фока: симметричным пространством $\Gamma_a(\mathcal{C}) = \sum_{n=0}^{\infty} \bigoplus \mathcal{H}^{sn}$ в случае

бозонов и антисимметричным пространством $\Gamma_a(\mathcal{G}) = \sum_{n=0} \oplus \mathcal{H}^{an}$ в случае фермионов. В этих пространствах действует специальное представление канонических коммутационных (соответственно, антикоммутационных) соотношений, связанное с процедурой вторичного квантования (см. [6], [51], [70]).

3.2. Произведение квантовых состояний. Если S_j - операторы плотности в \mathcal{C}_j , то $S_1 \otimes S_2$ - оператор плотности в $\mathcal{C}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, причем

$$\text{Tr} (S_1 \otimes S_2) (X_1 \otimes X_2) = \text{Tr} S_1 X_1 \cdot \text{Tr} S_2 X_2; X_j \in \mathcal{P}(\mathcal{H}_j)$$

Операторы вида $X \otimes I_2$, где $X \in \mathcal{P}(\mathcal{H}_1)$, а I_2 - единичный оператор в \mathcal{C}_2 , образуют подалгебру $\mathfrak{P}_1 \subset \mathfrak{P}(\mathcal{C}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$, изоморфную $\mathfrak{B}(\mathcal{C}_1)$. Формула

$$\mathcal{E}(X_1 \otimes X_2) = X_1 \otimes (\text{Tr} S_2 X_2) I_2$$

определяет отображение \mathcal{E} из $\mathcal{P}(\mathcal{C}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$ на $\mathcal{P}(\mathcal{H}\mathcal{C}_1)$, обладающее свойством условного ожидания

$$\mathbf{E}_s(XY) = \mathbf{E}_B(\mathcal{E}(X)Y); X \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2), Y \in \mathcal{B}_1,$$

относительно состояния $S = S_1 \otimes S_2$. В квантовой теории вероятностей условные ожидания играют меньшую роль, чем в классической, поскольку в общем случае условное ожидание на данную подалгебру \mathcal{B} относительно данного состояния S существует лишь при весьма ограничительном соотношении между \mathcal{B} и S , в определенной мере, сводящем ситуацию к классической; точнее см. п. 3.1.3.

Если S - произвольный оператор плотности в $\mathcal{C}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, то в \mathcal{G}_1 найдется единственный оператор плотности S_1 , такой что

$$\text{Tr} S_1 X = \text{Tr} S (X \otimes I_2); X \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1).$$

Это же верно для любой линейной комбинации операторов плотности, т. е. для любого ядерного оператора T в $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Отображение $T \rightarrow T_1$ называется частичным следом оператора T (обозначается $T_1 = \text{Tr} \mathcal{H}_2 T$). Операция частичного следа аналогична нахождению маргинального распределения в теории вероятностей.

3.3. Независимость и предельные теоремы. Рассмотрим сначала ситуацию, соответствующую одномерной центральной предельной теореме в теории вероятностей. Пусть S - фиксированное состояние. Вещественные наблюдаемые X_1, \dots, X_n, \dots называются независимыми, если

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_s(\varphi_1(X_{i_1})^* \dots \varphi_m(X_{j_m})) = \\ = \mathbf{E}_s(\varphi_1(X_{j_1})) \dots \mathbf{E}_s(\varphi_m(X_{j_m})) \end{aligned}$$

для любых $m = 1, 2, \dots$, любых ограниченных борелевских функций $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ и любых номеров j_1, \dots, j_m , таких что $j_k \neq j_l$ при $k \neq l$. Предполагается, что X_j одинаково распределены и имеют второй момент, причем $\mathbf{E}_s(X_j) = 0, \mathbf{D}_s(X_j) = 1$. Что можно сказать о предельном распределении нормированных сумм

$$S_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^n x_j^\times$$

Если X_1, \dots, X_n, \dots -попарно перестановочны, то

$$\exp it(X_1 + \dots + X_n) = \exp it X_1 \dots \exp it X_n; t \in \mathbb{R}$$

и применение характеристических функций сводит вопрос к классической центральной предельной теореме, со стандартным нормальным распределением в качестве предельного. В общем случае (3.3) не выполняется и предельное поведение сумм существенно зависит от алгебраических свойств последовательности слагаемых. Пусть, например, X_1, \dots, X_n, \dots - антиперестановочны в том смысле, что

$$X_j X_k = -X_k X_j \text{ при } j \neq k.$$

Тогда прямой подсчет (в предположении конечности 4-го момента X_j) показывает, что

$$\mathbf{E}_B(S_n^4) - (\mathbf{E}_B(S_n^2))^2 \rightarrow 0$$

откуда следует, что $S_n^2 \rightarrow 1$ по вероятности. Поскольку $\mathbf{E}_s(S_n) = 0$, то распределение S_n стремится к симметричному распределению Бернулли, сосредоточенному в точках ± 1 ¹¹. Это согласуется с наблюдением, что распределение Бернулли устойчиво относительно сложения антиперестановочных наблюдаемых (п. 1.6).

Богатство новых возможностей, открывающихся в некоммутативной теории, демонстрируют понятие свободной независимо-

1. Это рассуждение сообщено автору В. фон Вальденфельсом. сти и соответствующая предельная теорема, открытые Войкулеску [162] (см. также Шпайхер [151]). Вещественные наблюдаемые X_1, \dots, X_n, \dots называются свободно независимыми, если соотношения (3.2) выполняются для всех номеров j_1, \dots, j_m , та. ких что $j_k \neq j_{k+1}, k = 1, \dots, m-1$.

Те орема. Пусть X_j - свободно независимые наблюдаемые, $\|X_j\| \leq c; j = 1, \dots, n, \dots$. Пусть X_j одинаково распределены и $\mathbf{E}_s(X_j) = 0, \mathbf{D}_s(X_j) = 1/4$. Тогда распределение нормированных сумм S_n сходится при $n \rightarrow \infty$ к полукруговому закону Вигнера с. Плотностью

$$p(x) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \sqrt{1-x^2}, & |x| \leq 1 \\ 0, & |x| > 1 \end{cases}$$

Доказательство этой теоремы методом моментов требует довольно сложных комбинаторных подсчетов. Другой метод доказательства - использование преобразования Коши, которое играет роль логарифма характеристической функции для сво'бодно независимых' величин [163].

При переходе к многомерной предельной теореме возникает принципиально новая ситуация, обусловленная возможностью различных алгебраических соотношений между компонентами каждого из слагаемых. В работе Кашена, Хадсона [77] (соответственно, Хадсона [106]) предполагается, что компоненты слагаемых подчинены каноническим коммутационным (антикоммутационным) соотношениям и доказывается; что состояния, описывающие нормированную сумму, сходятся к квазисвободному состоянию канонических коммутационных (антикоммутационных) соотношений, т. е. к квантовому гауссовскому (бернуллиевскому) состоянию. При этом в случае антикоммутационных соотношений вместо обычного тензорного произведения алгебр, порожденных компонентами каждого слагаемого, необходимо использовать так называемое градуированное тензорное произведение, обобщающее понятие антиперестановочности. Более интересны результаты работ Гири, фон Вальденфельса [90] и Вальденфельса [164], в которых показано, что квазисвободное состояние на алгебре канонических коммутационных (соответственно, антикоммутационных) соотношений возникает в квантовой центральной предельной теореме без априорных предположений об

алгебраической природе слагаемых, а лишь в зависимости от выбора обычного (или градуированного) тензорного произведения. Однако метод доказательства в этих работах, основанный на вычислении моментов, предполагает ограничительное в аналитическом плане условие существования моментов всех порядков.

В ряде работ рассматривался случай слабо зависимых наблюдаемых. М. Ш. Гольдштейн доказал сходимости к нормальному распределению в случае последовательности вещественных наблюдаемых X_1, \dots, X_n, \dots , удовлетворяющей условиям слабой зависимости и асимптотической перестановочности типа условия Розенблатта (см. обзор В. В. Аншелевича и М. Ш. Гольдштейна в сборнике [34] и книгу Т. А. Сарымсакова [31]). Обобщение результатов фон Вальденфельса об асимптотической квазисвободности на случай слабо зависимых слагаемых даны в работе Аккарди и Баха [53] (алгебру \mathcal{B} в этой работе следует считать коммутативной). Наиболее полный результат для слабо зависимых (перестановочных) слагаемых получен Годерисом, Вербером, Ветсом [92]. Следует отметить, что истоком работ [90], [92] послужили известные работы Хеппа и Либа о флуктуациях в лазере Дикке, которые дают некоторую физическую мотивацию квантовой центральной предельной теоремы для перестановочных слагаемых.

Различные алгебраические обобщения центральной предельной теоремы (связанные, в частности, с понятием безграничной, делимости) рассматривались также Хегерфельдом [97], Партасарати и Шмидтом [138], Фаннесом и Куагебером (статья в сборнике [142]).

4.1.4 4. Проблема скрытых параметров

Проблема скрытых параметров - это вопрос о принципиальной возможности описания квантовой механики в терминах классического фазового пространства. Несмотря на устоявшееся среди физиков мнение о невозможности такого описания, конструирование теорий со скрытыми параметрами не прекращается (одной из недавних и наиболее интересных попыток является стохастическая механика [132]). Этой проблеме посвящена обширная литература (см., например, [14]). Здесь мы ограничимся обсуждением наиболее существенных логических аргументов против «скрытых параметров».

4.1. Скрытые параметры и квантовая дополнительность. С математической точки зрения в проблеме скрытых параметров речь идет о возможности установления соответствий $S(dw) \rightarrow \hat{S}, X(\omega) \rightarrow \hat{X}$ между классическими состояниями, т. е. распределениями вероятностей $S(dw)$ на измеримом «фазовом пространстве» $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega))$ и операторами плотности \hat{S} в гильбертовом пространстве \mathcal{H} квантовой системы, и между случайными величинами $X(\omega)$ и наблюдаемыми \hat{X} в \mathcal{H} , которые воспроизводили бы статистические предсказания квантовой теории и удовлетворяли некоторым физически мотивированным условиям. Такими условиями, естественно возникающими из общего понятия статистической модели (п. 0.2), в первую очередь являются сохранение функциональной подчиненности в пространстве наблюдаемых, а также выпуклой структуры в множестве состояний. Обзор с этой точки зрения основных «доказательств невозможности» скрытых параметров дан в [45]. Так, результаты

Белла [66] и Кошена, Шпеккера [115] равносильны следующему утверждению.

Предложение. Пусть $\dim \mathcal{H} \geq 3$. Не существует однозначного отображения $X \rightarrow X(\omega)$ множества наблюдаемых $X \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ в множество случайных величин на каком-либо измеримом пространстве Ω , удовлетворяющего условию:

1. если $X \rightarrow X(\omega)$, то $f \circ X \rightarrow f(X(\omega))$ для любой борелевской функции f .

Доказательство. Можно считать, что $\dim \mathcal{H} < \infty$. Пусть такое отображение существует, тогда из 1) выводятся следующие свойства

2. $X(\omega) \in \text{Sp } X$ для любого $\omega \in \Omega$;

3. Если \hat{X}_j - совместимые наблюдаемые и $\hat{X}_j \rightarrow X_j(\omega)$, то $\sum_j \hat{X}_j \rightarrow \sum_j X_j(\omega)$.

Фиксируем $\omega \in \Omega$ и рассмотрим функцию проекторов $\mu(E) = E(\omega)$, где $E \rightarrow E(\omega)$. Из 2), 3) вытекает, что μ является вероятностной мерой на $\mathbb{E}(\mathcal{H})$, принимающей только значения 0,1. По теореме Глисона $\mu(E) = \text{Tr } \hat{S}E$, где \hat{S} - оператор плотности, но такая функция не может быть двузначной мерой.

Недостаток аргументации фон Неймана [26] состоит в том, что он требовал выполнения свойства 3) для произвольных \mathbf{x} , а не только совместимых наблюдаемых \mathbf{X}_j . Рассуждение с аддитивностью средних значений, которое он привел для обоснования этого требования, по существу, заранее исключает теории со скрытыми параметрами [45], [14].

Приведенное выше доказательство означает невозможность введения скрытых параметров по схеме частичной наблюдаемости, реализуемой, например, в классической статистической механике, где имеется взаимно однозначное соответствие между «макроскопическими» наблюдаемыми и некоторыми функциями на фазовом пространстве. Однако оно не исключает более сложных конструкций, в которых одна и та же квантовая наблюдаемая \mathbf{X} может быть измерена множеством разных способов и соответствие $X(\omega) \rightarrow X$, таким образом, не взаимно однозначно. На самом деле в квантовой механике имеется по крайней мере столько различных способов измерения наблюдаемой \bar{X} , сколько есть представлений $\bar{X} = f \circ \bar{Y}$ в виде функций от других наблюдаемых \bar{P} . Если \mathbb{X} имеет кратное собственное значение, то заведомо найдутся несовместимые наблюдаемые \vec{P}_1 и \vec{P}_2 такие, что $\mathbb{X} = f_1 \circ \vec{P}_1 = f_2 \circ \vec{P}_2$. Требование взаимной однозначности входит тогда в прямое противоречие с квантовым свойством дополненности¹⁾. Отсюда вытекает, что в теориях

1). Если $\dim \mathcal{H} = 2$, то наблюдаемые с кратным спектром - это постоянные величины; тогда такого противоречия не возникает, и теория со скрытыми параметрами, удовлетворяющая условиям доказанного предложения, строится явным образом [66]. со скрытыми параметрами следует оставить возможность для различных классических представлений одной и той же квантовой наблюдаемой (такого рода теории Дж. Белл назвал ко н текстуальным и). Аналогичное замечание можно отнести и представление квантовых состояний. А. С. Холево дал явное описание такой формальной конструкции, сохраняющей структуры статистической модели [45], [101].

Предложение. Пусть \mathcal{H} - гильбертово пространство. Существует измеримое пространство Ω и отображения $X(\omega) \rightarrow \hat{X}$ некоторого множества случайных величин на $\mathfrak{D}(\mathcal{C})$ и $S(d\omega) \rightarrow S$ некоторого множества вероятностных мер на $\mathfrak{S}(\mathcal{C})$ такие, что

1. Если $S_j(d\omega) \rightarrow \hat{S}_j$ и $\{p_j\}$ -конечное распределение вероят. ностей, то $\sum_j p_j S_j(d\omega) \rightarrow \sum_j p_j \hat{S}_j$;

2. Если $\dot{X}(\omega) \rightarrow \hat{\lambda}^*$ и f -борелевская функция, то $f(X(\omega)) \rightarrow f \circ \hat{X}$

3. Если $\ddot{X}(\omega) \rightarrow \hat{\lambda}$ и $S(d\omega) \rightarrow \hat{S}$, то

$$\int_{\Omega} X(\omega) S(d\omega) = \text{Tr } \hat{S} \hat{X}$$

В случае $\dim \mathcal{H} \geq 3$ отображения $X(\omega) \rightarrow X, S(d\omega) \rightarrow \hat{S}$ с необходимостью не являются взаимно однозначными. Этот результат показывает, что принцип

дополнительности препятствует классическому описанию квантовой статистики лишь при дополнительном требовании взаимной однозначности (неконтекстуальности).

4.2. Скрытые параметры и квантовая целостность. Рассмотрим квантовую систему, состоящую из двух компонент $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$. Чистые состояния такой системы задаются единичными векторами $\psi \in \mathcal{C}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, которые являются линейными комбинациями (суперпозициями) факторизуемых векторов $\psi_1 \otimes \psi_2$. Если $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$, то обе компоненты системы находятся в однозначно определенных чистых состояниях; если же ψ нефакторизуемо, то между компонентами обнаруживаются специфические корреляции, которые невозможно смоделировать никаким классическим механизмом случайности. На это обратил внимание Белл, показавший, что даже в контекстуальной теории со скрытыми параметрами нельзя удовлетворить естественному требованию, названному им «эйнштейновской локальностью» [66]¹¹. Обсудим близкое, но более общее условие разделимости [45].

1. В этой связи см. также статью Э. Вигнера «Скрытые параметры и квантовомеханические вероятности» в сб. [11].

Рассмотрим наблюдаемые

$$\begin{aligned}\hat{X}_j &= \hat{X}_j^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)}, j_k = 1, \dots, n \\ \hat{Y}_k &= \hat{I}^{(1)} \otimes \hat{Y}_k^{(2)}, k = 1, \dots, m\end{aligned}$$

где $\hat{I}^{(j)}$ -единичный оператор в \mathcal{H}_j , так что

$$[\hat{X}_j, \hat{Y}_k] = 0$$

т. е. каждая наблюдаемая \hat{X}_j совместима с каждой \hat{Y}_k . Поэтому для любого состояния \hat{S} в $\mathcal{C}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ определены квантовые корреляции $\langle \hat{X}_j, \hat{Y}_k \rangle_{\hat{S}}$. Матрица $\mathbf{C} = \left[\langle \hat{X}_j, \hat{Y}_k \rangle_{\hat{S}} \right]_{j=1, \dots, n, k=1, \dots, m}$ описывает статистические результаты nm различных экспериментов, вообще говоря, несовместимых между собой.

Предположение. Пусть $n, m \geq 2$. Не существует измеримого пространства Ω и отображений $S(d\omega) \rightarrow \hat{S}, X(\omega) \rightarrow \hat{X}$ таких, что:

1. если $X(\omega) \rightarrow \hat{X}$, то $X(\omega) \in \text{Sp } \hat{X}$;
2. для любого \hat{S} и любых $\hat{X}_1, \dots, \hat{X}_n; \hat{Y}_1, \dots, \hat{Y}_m$ вида найдутся $X_j(\omega), Y_k(\omega)$ такие, что $X_j(\omega) \rightarrow \hat{X}_j, Y_k(\omega) \rightarrow \hat{Y}_k$ и $\langle \hat{X}_j, \hat{Y}_k \rangle_{\hat{S}} = \int_{\Omega} X_j(\omega) Y_k(\omega) S(d\omega); \quad j = 1, \dots, n, \quad k = 1, \dots, m$, для какого-либо $S(d\omega) \rightarrow \hat{S}$.

Доказательство. Достаточно ограничиться случаем $n = m = 2$. Рассмотрим наблюдаемые $\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{Y}_1, \hat{Y}_2$ вида (4.1) и такие, что

$$\|\hat{X}_j\| \leq 1, \|\hat{Y}_k\| \leq 1$$

Предположим, что указанные отображения существуют и пусть. X_j, Y_k - соответствующие случайные величины на вероятностном пространстве $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega), S(d\omega))$. В силу условия 1), $|X_i(\omega)| \leq 1, |Y_n(\omega)| \leq 1$, откуда

$$X_1(\omega)Y_1(\omega) + X_1(\omega)Y_2(\omega) + X_2(\omega)Y_1(\omega) - X_2(\omega)Y_2(\omega) \leq 2, \quad \omega \in \Omega$$

Усредняя по $S(d\omega)$ и используя условие 2), получаем неравенство Белла-Клаузера-Хорна-Шимони (БКХШ)

$$\langle \hat{\lambda}_1, \hat{Y}_1 \rangle_{\hat{s}} + \langle \hat{X}_1, \hat{Y}_2 \rangle_{\hat{s}} + \langle \hat{X}_2, \hat{Y}_1 \rangle_{\hat{s}} - \langle \hat{\Lambda}_2, \hat{Y}_2 \rangle_{\hat{s}} \leq 2.$$

Остается указать квантовые наблюдаемые \hat{X}_j, \hat{Y}_k и состояние \hat{S} , для которых неравенство (4.4) нарушается. Рассмотрим систему из двух частиц со спином 1/2, так что $\dim \mathcal{H}_1 = \dim \mathcal{H}_2 = 2$. (см. п. 1.6). Пусть \hat{S} -чистое состояние составной системы с вектором

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(e) \otimes \psi_2(-e) - \psi_1(-e) \otimes \psi_2(e)]$$

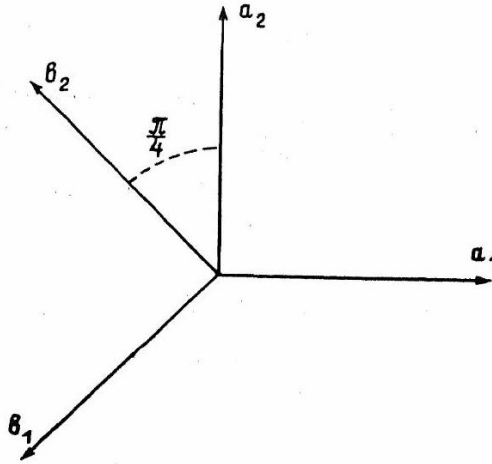
где $\psi_j(e)$ -единичный вектор j -й компоненты, описывающий полностью поляризованное состояние с направлением спина e . Положим

$$\hat{\lambda}'(a) = \hat{X}^{(1)}(a) \otimes \hat{I}^{(2)}, \quad \hat{Y}(b) = \hat{I}^{(1)} \otimes \hat{\lambda}^{*(2)}(b)$$

где $\hat{\Lambda}^{(j)}(a)$ - наблюдаемые спина в \mathcal{H}_j (см. П. 1.6). Корреляции между компонентами имеют вид

$$\langle \hat{X}(a), \hat{Y}(b) \rangle_{\hat{S}} = \langle \psi | \hat{\Lambda}^{(1)}(a) \otimes \hat{X}^{(2)}(b) \psi \rangle = -a \cdot b.$$

Пусть векторы a_j, b_k образуют конфигурацию, обозначенную на рисунке, тогда значение левой части неравенства (4.4) для наблюдаемых $\hat{X}_j = \hat{X}(a_j), \hat{Y}_k = \hat{Y}(b_k)$ равно $2\sqrt{2}$, что противоречит неравенству и доказывает предложение ¹.



В [114] указано общее неравенство

$$\left(\hat{X}_1 \hat{Y}_1 + \hat{X}_1 \hat{Y}_2 + \hat{X}_2 \hat{Y}_1 - \hat{X}_2 \hat{Y}_2 \right)^2 \leq 4\hat{I} - [\hat{X}_1, \hat{\lambda}_2] \cdot [\hat{Y}_1, \hat{Y}_2]$$

справедливое для любых операторов, удовлетворяющих условиям (4.2), (4.3). Из него вытекает как неравенство БКХШ (при $[\hat{X}_1, \hat{X}_2] = [\hat{Y}_1, \hat{Y}_2] = 0$), так и граница

$$\left\| \hat{X}_1 \hat{Y}_1 + \hat{X}_1 \hat{Y}_2 + \hat{X}_2 \hat{Y}_1 - \hat{X}_2 \hat{Y}_2 \right\| \leq 2\sqrt{2}$$

из которой видно, что в построенном примере неравенство БКХШ нарушается максимальным образом.

1. Работы Дж. Белла стимулировали ряд экспериментов, в которых нарушение неравенства БКХШ получило подтверждение (см., например, [14]).

Поскольку компоненты составной системы могут представлять собой частицы, пространственно отделенные друг от друга макроскопическим расстоянием, то описывающая их теория со скрытыми параметрами должна быть существенно нелокальной¹⁾. В работе Саммерса и Вернера [156] показано, что положение не спасает и переход к локальной квантовой теории поля, где неравенство БКХШ также нарушается максимальным образом.

4.3. Структура множества квантовых корреляций. В работе Б. С. Цирельсона [48] было изучено выпуклое множество $\text{Cor}(n, m)$ квантовопредставимых матриц $\mathbf{C} = [c_{jk}]_{k=1, \dots, n, m}^{j=1, \dots, n}$, элементы которых представимы как корреляции $c_{jk} = \langle \hat{X}_j, \hat{Y}_k \rangle_{\hat{s}}$ каких-либо квантовых наблюдаемых \mathcal{X}_j, P_k , удовлетворяющих условиям (4.2), (4.3). Оказывается, что формально более сильное, чем (4.2). (и физически содержательное), условие (4.1) приводит к тому же множеству корреляционных матриц \mathbf{C} . Это видно из доказательства следующей теоремы, которая дает прозрачное геометрическое описание множества $\text{Cor}(n, m)$.

Т е о р е м а. Матрица \mathbf{C} принадлежит множеству $\text{Cor}(n, m)$ тогда и только тогда, когда в евклидовом пространстве размерности $\min(n, m)$ существуют векторы $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n; \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m$ такие, что $\|\mathbf{a}_j\| \leq 1, \|\mathbf{b}_k\| \leq 1$ и $\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_k = c_{jk}$ для всех j, k .

Дадим набросок конструкции, существенной для доказательства. Пусть $\mathcal{C}(n)$ - комплексная алгебра Клиффорда с n эрмитовыми образующими X_1, \dots, X_n , удовлетворяющими соотношениям

$$X_j^2 = 1, \quad X_j X_k + X_k X_j = 0; \quad j, k = 1, \dots, n, \quad j \neq k$$

Поскольку элементы $X_j \otimes X_j$ алгебры $\mathcal{B}(n) \otimes \mathcal{B}(n)$ перестановочны и их спектр состоит из $\sqrt{n} \pm 1$, то 1 является точкой спектра элемента

$$A = \frac{1}{n} (X_1 \otimes X_1 + \dots + X_n \otimes X_n)$$

(кратности 1). Пусть π - неприводимое представление алгебры $\mathcal{C}(n) \otimes \mathcal{C}(n)$, тогда в пространстве представления существует единственный с ' точностью до множителя вектор ψ , такой что $\pi(A)\psi = \psi$. Доказывается, что

$$\langle \psi | \pi(X(a) \otimes X(b))\psi \rangle = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}; \mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbf{R}^n.$$

Вектор ψ определяет состояние \hat{S} в точном представлении алгебры $\mathcal{B}(n) \otimes \mathcal{B}(n)$ такое, что

$$\langle \hat{\lambda}_j, \hat{Y}_k \rangle_{\hat{s}} = \mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_k$$

1. По поводу нелокальности в стохастической, механике см. статью Э. Нельсона [132]. где $\hat{X}_j = X(\mathbf{a}_j) \otimes I, \hat{Y}_k = I \otimes X(\mathbf{b}_k)$ удовлетворяют условию (4.1) а значит, и (4.2).

Из этой теоремы в [48] получено описание крайних точек множества $\text{Cor}(n, m)$, а также указаны неравенства, задающие множество $\text{Cor}(2, 2)$.

Обозначая $\text{Cor}_1(n, m)$ множество классически-представимых матриц \mathbf{C} , таких что

$$c_{jk} = \int X_j(\omega) Y_k(\omega) S(d\omega),$$

где X_j, Y_k - случайные величины, такие что $|X_j(\omega)| \leq 1, |Y_k(\omega)| \leq 1$, имеем, очевидно,

$$\text{Cor}_1(n, m) \subsetneq \text{Cor}(n, m).$$

Несовпадение этих множеств математически выражает свойство квантовой целостности. Неравенство БХШ задает граничную гиперплоскость, отделяющую многогранник $\text{Cor}_1(2, 2)$ от квантово-реализуемой матрицы $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \in \text{Cor}(2, 2)$. Естественно поставить вопрос, насколько $\text{Cor}(n, m)$ превосходит $\text{Cor}_1(n, m)$. Пусть $K(n, m)$ - наименьшее число, обладающее свойством

$$\text{Cor}(n, m) \subset K(n, m) \text{Cor}_1(n, m)$$

Последовательность $K(n, m)$ возрастает с ростом n, m . Как отмечается в [48], из геометрического описания множества $\text{Cor}(n, m)$ вытекает, что $K = \lim K(n, m)$ совпадает с известной в теории нормированных пространств константой Гротендика $K_G \leq \frac{\pi}{2 \ln(1+\sqrt{2})} \approx 1,782$.

4.2 СТАТИСТИКА КВАНТОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

4.2.1 1. Обобщенные наблюдаемые

1.1. Разложения единицы. Пусть $(\mathcal{L}, \mathcal{B}(\mathcal{X}))$ - измеримое пространство. В дальнейшем часто \mathcal{L} с танд артно е измеримое пространство, т. е. борелевское подмножество полного сепарабельного метрического пространства. Стандартные измеримые пространства одинаковой мощности изоморфны (см., например, [160, гл. V]), поэтому с точки зрения теории меры они эквивалентны борелевским подмножествам вещественной прямой \mathbf{R} .

Разложением единицы в гильбертовом пространстве \mathcal{H} называется нормированная положительная операторнозначная мера на $\mathcal{B}(\mathcal{X})$, т. е. функция множеств $\mathbf{M} : \mathcal{B}(\mathcal{X}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{C})$, удовлетворяющая условиям:

1. $M(B)$ - положительный оператор в \mathcal{H} для любого $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$;
2. Если $\{B_j\}$ - конечное или счетное разбиение \mathcal{X} на попарно-непересекающиеся измеримые подмножества, то

$$\sum_j M(B_j) = \mathbf{I}$$

где ряд сходится сильно.

Если $M(B)^2 = M(B)$ для всех $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, то \mathbf{M} - ортогональное разложение единицы (см. п. 1.1.3). Неортогональные разложения единицы (на \mathbf{R}) появились в работе арлемана (1923), в связи с проблемой спектрального разложения несамосопряженных операторов и были детально изучены в 1940-60-е годы (см., например, [2], [30], [68]).

Т е о р е м а (М. А. Наймарк, 1940). Всякое разложение единицы в \mathcal{C} может быть расширено до ортогонального разложения единицы, т. е. существует гильбертово пространство $\tilde{\mathcal{H}} \supset \mathcal{H}$ и ортогональное разложение единицы $E : \mathcal{B}(\mathcal{X}) \rightarrow (E)(\tilde{\mathcal{C}})$ в $\tilde{\mathcal{H}}$ такое, что

$$M(B) = PE(B)P; \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

где P -проектор из $\tilde{\mathcal{H}}$ на \mathcal{H} . Если \mathcal{H} - сепарабельно, а \mathcal{X} - стандартно, то \mathcal{H} можно выбрать сепарабельным. Существует единственное с точностью до унитарной эквивалентности минимальное расширение, характеризующееся тем свойством, что множество $\{E(B)P\psi; B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}), \psi \in \mathcal{C}\}$ плотно в $\tilde{\mathcal{H}}$.

Если существует σ -конечная мера μ , такая что $\|M(B)\| \leq C\mu(B)$, то

$$M(B) = \int_B P(x)\mu(dx); \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

где $P(x)$ - измеримая ограниченная функция со значениями в $\mathcal{P}(\mathcal{C})$, называемая плотностью **М** относительно меры μ (интеграл сходится в сильной операторной топологии). Если $\dim \mathcal{H} = \infty$, то ортогональное разложение единицы не может иметь плотности относительно какой-либо σ -конечной меры.

Пример. Переполненной системой [21], [6] в \mathcal{C} называется семейство $\{e_x; x \in \mathcal{Q}\} \subset \mathcal{H}$, удовлетворяющее условию

$$\|\psi\|^2 = \int_{\mathcal{Q}} |\langle e_x | \psi \rangle|^2 \mu(dx); \quad \psi \in \mathcal{C}$$

где μ - некоторая σ -конечная мера на $\mathcal{B}(\mathcal{Q})$, т. е.

$$\int_{\mathcal{X}} |e_x\rangle \langle e_x| \mu(dx) = 1$$

Частным случаем пополненной системы является полная ортогональная система в \mathcal{C} , однако в общем случае векторы e_x могут быть не ортогональны и линейно зависимы. Всякий вектор $\psi \in \mathcal{H}$ имеет разложение

$$\psi = \int_{\mathcal{Q}} \langle e_x | \psi \rangle e_{x\mu}(dx)$$

по векторам пополненной системы. Соотношение

$$M(B) = \int_B |e_x\rangle \langle e_x| \mu(dx)$$

определяет разложение единицы с плотностью $P(x) = |e_x\rangle \langle e_x|$. Дадим для него явную конструкцию минимального расширения Наймарка (см. [78, гл. 8]). Определим ортогональное разложение единицы **Е** в $\mathcal{H} = L^2(\mathcal{X}, \mu)$ соотношением

$$E(B)f(x) = 1_B(x)f(x); x \in \mathcal{B},$$

где $1_B(\cdot)$ - индикатор множества $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$. В (1.2), (1.3) следует, что соотношение

$$(V\psi)(x) = \langle e_x | \psi \rangle$$

задает изометрическое вложение \mathcal{H} в \mathcal{C} , причем

$$M(B) = V^*E(B)V$$

Образ $V\mathcal{H}$ пространства \mathcal{H} в $L^2(\mathcal{L}, \mu)$ является гильбертовым пространством с воспроизводящим ядром $\mathcal{K}(x, y) = \langle e_x | e_y \rangle$, т. е. проектор P из $L^2(\mathcal{Q}, \mu)$ на $V\mathcal{H}$ является интегральным оператором с ядром $\mathcal{K}(x, y)$.

1.2

Обобщенная статистическая модель квантовой механики. Это отделимая статистическая модель (см. п. 0.2), в которой состояния описываются операторами плотности, а вещественные наблюдаемые - разложениями единицы на $\mathcal{B}(\mathbf{R})$ в гильбертовом пространстве \mathcal{C} . Функциональная подчиненность наблюдаемых определяется соотношением $(f \circ M)(B) = M(f^{-1}(B))$. Если \mathcal{X} - измеримое пространство, то обобщенной наблюдаемой (наблюдаемой) со значениями в \mathcal{X} называется произвольное (ортогональное) разложение единицы \mathbf{M} на $\mathcal{B}(\mathcal{X})$. Распределение вероятностей обобщенной наблюдаемой \mathbf{M} в состоянии S определяется формулой

$$\mu_S^M(B) = \text{Tr } SM(B); \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}).$$

Основанием для этих определений служит

Предложение ([143, гл. 2]). Соответствие $S \rightarrow \mu_S^M$ является аффинным отображением выпуклого множества квантовых состояний $\subseteq (\mathcal{C})$ в множество вероятностных мер $\mathfrak{B}(\mathcal{X})$. Обратно, всякое аффинное отображение из (\mathcal{H}) в $\mathfrak{B}(\mathcal{X})$ имеет вид $S \rightarrow \mu_S^M$, где \mathbf{M} - однозначно определенное разложение единицы на $\mathcal{B}(\mathcal{X})$.

Аффинность означает, что смесь состояний переходит в соответствующую смесь распределений

$$\mu_{\sum p_j s_j}^M = \sum_j p_j \mu_{s_j}^M$$

для любых $S_j \in \text{Im}(\mathcal{H}); p_j \geq 0, \sum_j p_j = 1$, и имеет прямое истолкование в терминах статистических ансамблей. Можно сказать, что разложение единицы дает наиболее общее описание статистики исходов квантового измерения, совместимое с вероятностной интерпретацией квантовой механики.

Опираясь на теорему Наймарка, можно доказать, что для любого разложения единицы \mathbf{M} в \mathcal{C} найдутся гильбертово пространство \mathcal{C}_0 , оператор плотности S_0 в \mathcal{C}_0 и ортогональное разложение единицы \mathbf{E} в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$, такие что

$$\mu_S^M(B_3) = \text{Tr } (S \otimes S_0) E(B); \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{Q})$$

для всех $S \in (\mathcal{H})$ или $M(B) = \mathcal{E}_0(E(B))$, где \mathcal{E}_0 - условное ожидание относительно состояния S_0 , определяемое аналогично формуле (1.3.1). Таким образом, разложение единицы описывает статистику измерения обычной наблюдаемой в некотором расширении исходной системы, содержащем вспомогательную независимую систему в состоянии S_0 , что говорит о согласованности понятия обобщенной наблюдаемой со стандартной формулировкой квантовой механики.

Примечание. Векторы состояний минимальной определенности (1.2.15) образуют переполненную систему в $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R})$,

$$\frac{m}{2\pi} \int \int_{\mathbf{R}^2} |\psi_x\rangle \langle \psi_{x,v}| dx dv = \mathbf{I}$$

([12], [21]), что позволяет определить обобщенную наблюдаемую со значениями в \mathbf{R}^2

$$M(B) = \frac{m}{2\pi} \iint_B |\psi_{x,v}\rangle \langle \psi_{x,v}| dx dv$$

Укажем конструкцию, которая связывает \mathbf{M} с приближенным совместным измерением координаты и скорости квантовой частицы. Пусть $\mathcal{C}_0 = L^2(\mathbf{R})$, P_0, Q_0 - канонические

наблюдаемые в \mathcal{C}_0 и $S_0 = |\psi_{0,0}\rangle\langle\psi_{0,0}|$ - основное состояние в \mathcal{C}_0 . Самосопряженные операторы

$$\tilde{Q} = Q \otimes I_0 - I \otimes Q_0, \quad \frac{1}{m}\tilde{P} = \frac{1}{m}[P \otimes I_0 + I \otimes P_0]$$

в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$ перестановочны ¹⁾, а значит, имеют совместную спектральную меру $E(dxdv)$. Используя аппарат характеристических

1. На это указал Н. Бор в статье «О понятиях причинности и дополнителности» (1948) (см. Избранные научные труды.- М.: Наука, 1971.- 2.С. 391 – 398). функций из п. 1.2.4, можно доказать, что для любого состояния: распределение вероятностей обобщенной наблюдаемой (1.6)

$$\mu_S^M(B) = \frac{m}{2\pi} \int_B \int_{x,v} \langle \psi_x \psi_{x,v} \rangle dx dv$$

удовлетворяет соотношению (1.5), т. е. совпадает с совместным распределением вероятностей наблюдаемых $\tilde{Q}, \tilde{P}/m$ в состоянии $S \otimes S_0$ (см. [43, гл. 3]). Относительно приближенных измерений Q, P см. также [78], [37], [159] и цитированные там работы.

1.3

Геометрия множества обобщенных наблюдаемых. Аналогом обобщенной наблюдаемой в классической статистике является рандомизованная случайная величина, т. е. переходная вероятность $\Pi(B | \omega)$ из пространства элементарных событий Ω в пространстве значений \mathcal{X} . Будем далее предполагать, что \mathcal{X} - стандартное пространство. Тогда соотношение

$$\Pi(B | \omega) = 1_B(f(\omega)); \quad \omega \in \Omega$$

устанавливает взаимно однозначное соответствие между случайными величинами f со значениями в \mathcal{X} и детерминированными переходными вероятностями, такими что $\Pi(B | \omega) = 0$ или 1, т. е. $\Pi(B | \omega)^2 = \Pi(B | \omega)$. Переходные вероятности из Ω в \mathcal{L} образуют выпуклое множество, крайними точками которого являются детерминированные переходные вероятности и только они (см., например, [41, гл. II]).

Соотношение между наблюдаемыми и обобщенными наблюдаемыми в квантовом случае значительно сложнее и интереснее. Обозначим $\mathfrak{M}(\mathcal{Q})$ выпуклое множество обобщенных наблюдаемых со значениями в \mathcal{Q} , $\text{Extr } \mathfrak{M}(\mathcal{X})$ множество его крайних точек, $\text{Conv } \mathfrak{M}$ выпуклую оболочку подмножества $\mathfrak{R} \subset \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$. В $\mathfrak{M}(\mathcal{Q})$ вводится естественная топология: последовательность $\{\mathbf{M}^{(n)}\} \subset \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$ сходится к \mathbf{M} , если для любого состояния S последовательность вероятностных мер $\mu_s^{(n)}(B) = \text{Tr } S \mathbf{M}^{(n)}(B)$ сходится по вариациям к $\mu_s(B) = \text{Tr } S \mathbf{M}(B)$; $\overline{\mathfrak{M}}$ означает замыкание подмножества \mathfrak{M} в этой топологии. Пусть $\mathfrak{M}_0(\mathcal{Q})$ - подмножество обычных наблюдаемых и $\mathfrak{R}_1(\mathcal{Q})$ - подмножество обобщенных наблюдаемых \mathbf{M} , таких что $[M(B_1), M(B_2)] = 0$ для всех $B_1, B_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$. В работе А. С. Холево [38] показано, что $\mathbf{M} \in \mathfrak{R}_1(\mathcal{X})$ тогда и только тогда, когда

$$M(B) = \int_{\mathcal{X}_1} \Pi(B | x_1) E(dx_1)$$

где \mathbf{E} - наблюдаемая со значениями в некотором пространстве \mathcal{Q}_1 , $\Pi(B | x_1)$ - переходная вероятность из \mathcal{X}_1 в \mathcal{X} . По аналогии с классической статистикой,

наблюдаемые, описываемые ортогональными разложениями единицы $\mathbf{E} (E(B)^2 = E(B))$, можно рассматривать как де-терминированные (более точное обсуждение см. в [101]). Наблюдаемые из $\mathfrak{R}_1(\mathcal{Q})$, которые задаются перестановочными разложениями единицы, являются классически-рандомизованными в том смысле, что $M \in \mathbb{R}_1(\mathcal{Q})$ получается из обычной наблюдаемой путем преобразования (1.8), содержащего внешний классический источник неопределенности. Всякую обобщенную наблюдаемую $M \in \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$ можно рассматривать как квантово-рандомизованную в смысле представления (1.5): она эквивалентна обычной наблюдаемой в расширении исходной системы, включающем независимую квантовую систему. Наконец, точки из $\text{Extr} \mathfrak{R}(\mathcal{Q})$ представляют собой обобщенные наблюдаемые, в которых неопределенность, обусловленная процедурой измерения, сведена к минимуму.

Обозначим m мощность множества значений \mathcal{X} .

Теорема. Если $m = 2$, то $\mathfrak{R}_0(\mathcal{Q}) = \text{Extr} \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$ и $\mathfrak{M}_1(\mathcal{Q}) = \overline{\text{Conv} \mathfrak{R}_0(\mathcal{Q})} = \mathfrak{R}(\mathcal{Q})$. Если $m > 2$, то $\mathfrak{R}_0(\mathcal{Q}) \subsetneq \text{Extr} \mathfrak{R}(\mathcal{Q})$ и $\mathfrak{M}_1(\mathcal{Q}) \subsetneq \overline{\text{Conv} \mathfrak{M}_0(\mathcal{Q})} \subset \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$, причем если $\dim \mathcal{H} < \infty$, то

последнее включение точн. Если же $\dim \mathcal{H} = \infty$, то $\overline{\mathfrak{M}_0(\mathcal{Q})} = \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$.

Таким образом, ситуация аналогична классической лишь в случае обобщенных наблюдаемых с двумя значениями¹⁾. В этом случае $M = \{M_0, M_1\}$, где $M_1 = I - M_0$ и $\mathfrak{R}(\mathcal{Q})$ как выпуклое подмножество изоморфно порядковому интервалу $\{M_0 : M_0 \mathfrak{L}_h(\mathcal{H}), 0 \leq M_0 \leq I\}$, крайние точки которого совпадают с проекторами в \mathcal{H} (см., например, [78, гл. 2]).

Чтобы доказать, что $\mathfrak{D}_0(\mathcal{Q}) \neq \text{Extr} \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$ при $m > 2$, достаточно сделать это в случае $m = 3$ и $\dim \mathcal{H} = 2$ (см. [43, §1.6]). Рассмотрим неортогональное разложение единицы

$$M_k = \frac{1}{3} |\psi(e_k)\rangle \langle \psi(e_k)|; k = 1, 2, 3$$

где $\psi(e_k)$ - векторы состояний системы со спином 1/2 (см. п. 1.1.6), причем $e_k, k = 1, 2, 3$, образуют правильный треугольник. Тот факт, что (1.9) является крайней точкой, можно установить непосредственно, либо воспользовавшись критерием из статьи Штермера в [85]: конечное разложение единицы $M = \{M_1, \dots, M_m\}$ является крайней точкой тогда и только тогда, когда для любых $X_1, \dots, X_m \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ из $\sum_{i=1}^m E_i X_i E_i = 0$ следует $E_i X_i E_i = 0$, где E_i - носитель M_i , т. е. проектор на ортогональное дополнение к нулевому подпространству M_i . Если $\dim \mathcal{H} < \infty$, то из наличия крайних точек, не попадающих в $\mathfrak{D}_0(\mathcal{Q})$, следует, что $\overline{\text{Conv} \mathfrak{M}_0(\mathcal{Q})} \neq \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$.

Интересный пример крайней точки дает неортогональное разложение единицы (1.6).

1. Такие наблюдаемые, называемые «эффектами», играют центральную роль в аксиоматическом подходе Людвнга [125], [118].

Доказательство того, что $\overline{\mathfrak{R}_0(\mathcal{Q})} = \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$ в случае $\dim \mathcal{H} = \infty$, основывается на теореме М. А. Наймарка. Пусть $M \in \mathfrak{M}(\mathcal{Q})$ и $\{P^{(n)}\}$ - последовательность конечномерных проекторов в \mathcal{H} , сильно сходящаяся к I . Тогда $M^{(n)}(B) = P^{(n)} M(B) P^{(n)}$ - разложение единицы в конечномерном пространстве $\mathcal{C}^{(n)} = P^{(n)} \mathcal{H}$, которое можно расширить до ортогонального разложения единицы $\mathbf{E}^{(n)}$ в сепарабельном гильбертовом пространстве $\mathcal{G}^{(n)} \supset \supset \mathcal{H}^{(n)}$. Поскольку $\dim \mathcal{H} = \infty$, можно считать, что $\mathcal{H}^{(n)} = \mathcal{H}$. Имеет место оценка

$$\text{var} \left(\mu_B^{(n)} - \mu_B \right) \leq 6 \| (I - P^{(n)}) S \|_1,$$

где $\mu_s^{(n)}(B) = \text{Tr } SE^{(n)}(B)$, $\mu_s(B) = \text{Tr } SM(B)$ [44], доказывающая утверждение. Итак, в случае $\dim \mathcal{H} = \infty$, все обобщенные наблюдаемые являются предельными точками множества наблюдаемых.

4.2.2 2. Квантовая теория статистических решений

2.1. Проверка гипотез.

В гильбертовом пространстве \mathcal{H} наблюдаемой квантовой системы заданы операторы плотности S_θ ; $\theta = 1, \dots, m$, описывающие одно из возможных состояний системы. Выбор одной из гипотез $\theta = 1, \dots, m$ осуществляется на основе решающего правила, задаваемого разложением единицы $\mathbf{M} = \{M_1, \dots, M_m\}$. При этом вероятность принятия гипотезы $u = 1, \dots, m$, если система находится в состоянии S_θ , равна

$$\xi_{\theta\theta}^M(u) = \text{Tr } S_\theta M_u.$$

Как и в классической статистике, задается некоторый функционал от вероятностей (2.1) и вопрос состоит в нахождении экстремума этого функционала в том или ином классе решающих правил. В физических задачах квантовая система является носителем информации, состояния которого S_θ зависят от «передаваемого сигнала» θ . «Приемник» осуществляет квантовое измерение, статистика которого описывается разложением единицы M в \mathcal{C} . Речь идет об отыскании квантовых ограничений на качество измерения и о его оптимизации.

При байесовском подходе задаются априорные вероятности гипотез π_θ и функция отклонения $W_\theta(u)$; $\theta, u = 1, \dots, m$. Байесовский риск определяется обычной формулой

$$\mathcal{R}\{M\} = \sum_{\theta=1}^m \pi_\theta \sum_{u=1}^m W_\theta(u) \mu_\theta^M(u)$$

Решающее правило, минимизирующее $\mathcal{R}\{M\}$, называется байесовским. Часто рассматривают случай $W_\theta(u) = 1 - \delta_{\theta u}$ и $\pi_\theta = 1/m$. Тогда речь идет о максимизации средней вероятности правильного решения

$$\mathcal{P}\{M\} = \frac{1}{m} \sum_{\theta=1}^m \mu_\theta^M(\theta)$$

что является дискретным аналогом метода максимального правдоподобия. Наконец, важной мерой качества решающего правила является шенноновская информация

$$\mathcal{I}\{M\} = \sum_{\theta=1}^m \pi_\theta \sum_{u=1}^m \mu_\theta^M(u) \ln \frac{\mu_\theta^M(u)}{\sum_{\lambda=1}^m \pi_\lambda \mu_\lambda^M(u)}.$$

Первоначальная постановка квантовой задачи различения гипотез (Хелстром, 1967) основывалась на стандартном квантово-механическом формализме, в соответствии с которым решающие правила описывались ортогональными разложениями единицы. Формулировка квантовой теории статистических решений, основанная на обобщенных наблюдаемых, была предложена А. С. Холево (1972). Обозначим \mathfrak{P} класс всех решающих правил $\mathbf{M} = \{M_1, \dots, M_m\}$, \mathfrak{D}_1 - класс классически-рандомизированных правил (т. е. таких, что $M_j M_k = M_k M_j$) и \mathfrak{D}_0 - класс детерминированных решающих правил ($M_j M_k = \delta_{jk} M_j$).

П р и м е р ([38]). Рассмотрим задачу различения равновероятных гипотез

$$S_\theta = |\psi(e_\theta)\rangle \langle \psi(e_\theta)|; \quad \theta = 1, 2, 3$$

где $\psi(e_\theta)$ - векторы состояний системы со спином $1/2$, возникающие в (1.9). Тогда

$$\max_{\mathfrak{N}_0} \mathcal{P}\{\mathbf{M}\} = \max_{\mathfrak{N}_1} \mathcal{P}\{\mathbf{M}\} = \frac{1}{6}(2 + \sqrt{3}) < \frac{2}{3} = \max_{\mathcal{N}} \mathcal{P}\{\mathbf{M}\}$$

причем максимум достигается на решающем правиле (1.9). Более того,

$$\max_{\mathfrak{M}_0} \mathcal{F}\{\mathbf{M}\} = \max_{\mathfrak{M}_1} \mathcal{F}\{\mathbf{M}\} < \max_{\mathcal{N}} \mathcal{F}\{\mathbf{M}\}$$

Этот и другие подобные примеры (см. [80]) демонстрируют неожиданный с классической точки зрения факт: квантовая рандомизация может увеличивать информацию о состоянии системы. Хотя этот эффект проявляется только в конечномерных гильбертовых пространствах (см. предыдущий пункт), он ясно указывает на необходимость использования обобщенных наблюдаемых.

2.2. Байесовская задача. Байесовский риск (2.2) представляется в виде

$$\mathcal{R}\{\mathbf{M}\} = \text{Tr} \sum_{u=1}^m \hat{W}_u M_u$$

где $\hat{W}_u = \sum_{\theta=1}^m \pi_\theta W_\theta(u) S_\theta$ -операторная апостериорная функция отклонения. Поскольку $\mathcal{R}\{\mathbf{M}\}$ - аффинный функционал на выпуклом множестве \mathfrak{M} , задача о его минимизации может быть рассмотрена с помощью методов линейного программирования.

Т е о р е м а (А. С. Холево, Юн). Имеет место соотношение двойственности

$$\min_{\mathfrak{M}} \mathcal{R}\{\mathbf{M}\} = \max \left\{ \text{Tr} \Lambda : \Lambda \in \mathfrak{T}(\mathcal{C}), \Lambda \leq \hat{W}_u; u = 1, \dots, m \right\}$$

Следующие утверждения эквивалентны:

0. $\mathbf{M}^0 = \{M_u^0\}$ - байесовское решающее правило;

1. существует $\Lambda^0 \in \mathfrak{E}(\mathcal{H})$, такой что

$$\Lambda^0 \leq \hat{W}_u; \quad (\hat{W}_u - \Lambda^0) M_u^0 = 0; \quad u = 1, \dots, m$$

2. оператор $\Lambda^0 = \sum_{u=1}^m \hat{W}_u M_u^0$ эрмитов и $\Lambda^0 \leq \hat{W}_u; u = 1, \dots, m$.

Задача в правой части (2.5) имеет единственное решение, которым является оператор Λ^0 , входящий в условия 1), 2).

Наиболее часто используется достаточность условия 1), которая доказывается элементарно: для любого $\mathbf{M} = \{M_u\}$

$$\mathcal{R}\{\mathbf{M}\} = \text{Tr} \sum_{u=1}^m \hat{W}_u M_u \geq \text{Tr} \Lambda \sum_{u=1}^m M_u^0 = \text{Tr} \sum_{u=1}^m \hat{W}_u M_u^0 = \mathcal{R}\{\mathbf{M}^0\}$$

С помощью этого условия легко проверяется оптимальность решающего правила (1.9) в примере предыдущего пункта,

П р и м е р 1. Пусть операторы $\hat{W}_u - \hat{W}_v; u, v = 1, \dots, m$, перестановочны, т. е. $\hat{W}_u = C + \hat{W}_u^0$, где \hat{W}_u^0 - перестановочные операторы. Тогда существует самосопряженный оператор Λ и функции $\hat{W}_u^0(x)$ на \mathbb{R} , такие что

$$\hat{W}_u^0 = \hat{W}_k^0()$$

Пусть $\{\mathcal{X}_k\}$ -разбиение R , такое что $\hat{W}_k^0(x) \leq \hat{W}_j^0(x)$ при $x \in \mathcal{X}_k$, $j \neq k$, и положим $\Lambda^0 = C + \min_k \hat{W}_k^0(X)$, $M_k^0 = 1_{\mathcal{X}_k}(X)$. Тогда условия 1) выполнены. Если $C^k = 0$, то это соответствует вычислению байесовского решающего правила в классической статистике: правило является детерминированным и для каждого x предписывает выбирать решение u , для которого апостериорное отклонение $\hat{W}_u(x)$ минимально [37, гл. IV].

Пример 2. Условия предыдущего примера автоматически выполняются в случае двух гипотез S_0, S_1 . Для простоты рассмотрим функцию потерь $W_\theta(u) = 1 - \delta_{\theta u}$, так что речь идет минимизации средней ошибки. Байесовское решающее правило имеет вид

$$M_0^0 = 1_{(0, \infty)}(\pi_0 S_0 - \pi_1 S_1), \quad M_1^0 = 1_{(-\infty, 0]}(\pi_0 S_0 - \pi_1 S_1)$$

и минимальная ошибка

$$\mathcal{R}\{M^0\} = \frac{1}{2}(1 - \|\pi_0 S_0 - \pi_1 S_1\|_1)$$

Если S_0, S_1 -чистые состояния с векторами ψ_0, ψ_1 , то

$$\mathcal{R}\{M^0\} = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - 4\pi_0\pi_1 |\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle|^2} \right).$$

В общем случае уравнения оптимальности сводятся к сложной нелинейной задаче, часто геометрического характера. Много интересных явно решаемых случаев, в которых условия примера 1 не выполняются, рассмотрено Хелстромом [37], Р. Л. Стратоновичем [155] и В. П. Белавкиным [63]. Остановимся на задаче различения m чистых состояний с линейно независимыми векторами ψ_θ и априорными вероятностями $\pi_\theta > 0$. Можно считать, что \mathcal{H} порождается векторами $\psi_\theta; \theta = 1, \dots, m$. Кеннеди показал, что в этом случае байесовское решающее правило имеет вид

$$M_u = |e_u\rangle \langle e_u|; u = 1, \dots, m$$

где $\{e_u\}$ - некоторый ортонормированный базис в \mathcal{H} (см. [37, гл. IV]). Таким образом, задача сводится к нахождению ортонормированного базиса, наилучшим образом приближающего систему $\{\psi_u\}$ в смысле критерия

$$\mathcal{R}\{M\} = \sum_{\theta=1}^m \pi_\theta (1 - |\langle \psi_\theta | e_\theta \rangle|^2)$$

В [63] из общих условий оптимальности 1), 2) получено нелинейное уравнение для базиса $\{e_u\}$ и указан случай, когда оно решается явно. Пусть диагональные элементы матрицы $Q^{1/2}$, где $Q = [\sqrt{\pi_j \pi_k} \langle \psi_j | \psi_k \rangle]_{j,k=1, \dots, m}$, совпадают и равны \sqrt{q} . Тогда оптимальный базис

$$e_k = \sum_{j=1}^m \sqrt{\pi_j} \lambda_{jk} \psi_j$$

где $[\lambda_{jk}] = Q^{1/2}$, причем минимальная ошибка

$$\min \mathcal{R}\{M\} = 1 - mq$$

В частности, в «равноугольном» случае, когда $\langle \psi_j | \psi_k \rangle \equiv \gamma$ при $j \neq k$, а $\pi_\theta = 1/m$, получается формула Юна-Лэкса

$$\min \mathcal{R}\{\mathbf{M}\} = \frac{m-1}{m^2} (\sqrt{1+(m-1)\gamma} - \sqrt{1-\gamma})^2$$

А. С. Холево заметил [42], что в случае равномерности X чистых состояний имеет место оценка

$$\mathcal{R}\{M\} \leq \frac{1}{m} \sum_{\theta=1}^m \|\psi_{\theta} - e_{\theta}\|^2$$

Базис, минимизирующий правую часть, имеет вид

$$e_k = \sum_{j=1}^m a_{kj} \psi_j$$

где $[a_{yk}] = \Gamma^{-1/2}$ и $\Gamma = [\langle \psi_j | \psi_k \rangle]$, причем

$$\min_{\{e_{\theta}\}} \sum_{\theta=1}^m \|\psi_{\theta} - e_{\theta}\|^2 = \text{Tr} (I - \Gamma^{1/2})^2 = 2 \text{Tr} (I - \Gamma^{1/2})$$

(теорема М. Г. Крейна). Отсюда.

$$\min \mathcal{R}\{M\} \leq \frac{1}{m} \text{Tr} (I - \Gamma^{1/2})^2$$

Решающее правило, отвечающее базису (2.8), асимптотически оптимально в пределе почти ортогональных состояний, $\Gamma \rightarrow I_3$ причем правая часть в (2.9) дает первый член асимптотики. В «равноугольном» случае (2.9) обращается в равенство.

2.3. Пропускная способность квантового канала связи. Набор операторов плотности $\{S_{\theta}\}$ определяет простейшую модель квантового канала связи (см. [39], [98]), для которого θ играет роль «сигнала», пробегающего входной алфавит $1, \dots, m$. Кодирование задается распределением вероятностей $\pi = \{\pi_{\theta}\}$: на входном алфавите, а декодирование-разложением единицы $\mathbf{M} = \{M_u\}$, где u пробегает выходной алфавит $1, \dots, p$. Вероятность получить на выходе символ u при условии, что на входе сигнал θ , дается формулой (2.1). Таким образом, квантовый канал связи можно рассматривать как обычный канал со специфическими ограничениями на переходные вероятности, неявно выраженными формулой (2.1). Чему равна пропускная способность такого канала связи?

Рассмотрим информационное количество $\mathcal{I}_1(\pi, \mathbf{M})$, определяемое формулой типа (2.4) (где u пробегает от 1 до p) и величину $C_1 = \sup \mathcal{I}_1(\pi, M)$, где супремум берется по всевозможным кодированиям и декодированиям. В ранних работах для оценки пропускной способности использовалась величина

$$\bar{C} = \sup_{\pi} \left[H \left(\sum_{\theta=1}^m \pi_{\theta} S_{\theta} \right) - \sum_{\theta=1}^m \pi_{\theta} H(S_{\theta}) \right]$$

где $H(S) = -\text{Tr} S \ln S$ -энтропия фон Неймана квантового состояния S . В [40], [121] показано, что для любого кодирования π и декодирования M

$$\mathcal{I}_1(\pi, M) \leq H \left(\sum_{\theta=1}^m \pi_{\theta} S_{\theta} \right) - \sum_{\theta=1}^m \pi_{\theta} H(S_{\theta})$$

причем если операторы S_{θ} неперестановочны, то неравенство строгое ¹⁾. По-видимому, при том же условии $C_1 < \bar{C}$, хотя в полной общности это не было установлено. Однако как

показывают следующие рассуждения, величина C_1 также не может рассматриваться как пропускная способность.

Правильное определение пропускной способности должно быть связано с предельной скоростью асимптотически безошибочной передачи информации. Рассмотрим n -ю степень канала в пространстве $\mathcal{H}_n = \mathcal{C}^{\otimes n}$, определяемую состояниями $S_v = S_{\theta_1} \otimes \dots \otimes S_{\theta_n}$, где $v = (\theta_1, \dots, \theta_n)$ - всевозможные слова входного алфавита длины n . Пусть $\mathcal{I}_n(\pi, \mathbf{M})$ и $C_n = \sup_{\pi, \mathbf{M}} \mathcal{I}_n(\pi, \mathbf{M})$ -

величины, определяемые для n -й степени канала аналогично $\mathcal{I}_1(\pi, \mathbf{M})$ и C_1 . Информационное количество $\mathcal{I}_n(\pi, \mathbf{M})$ обладает свойством аддитивности [40]

$$\begin{aligned} & \sup_{M^{(n)}, M^{(m)}} \mathcal{I}_{n+m}(\pi^{(n)} \times \pi^{(m)}, M^{(n)} \otimes M^{(m)}) = \\ & = \sup_{M^{(n)}} \mathcal{I}_n(\pi^{(n)}, M^{(n)}) + \sup_{M^{(m)}} \mathcal{I}_m(\pi^{(m)}, M^{(m)}), \end{aligned}$$

откуда следует, что последовательность $\{C_n\}$ субаддитивна, $C_n + C_m \leq C_{n+m}$, а следовательно, существует

$$C = \lim_{n \rightarrow \infty} C_n/n = \sup_n C_n/n.$$

Основываясь на классической теореме кодирования, можно доказать, что при $R < C$ существуют такие кодирования и декодирования объема $N = \lceil 2^{nR} \rceil$, что средняя ошибка

$$\bar{\lambda}(n, N) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (1 - \text{Tr } S_{v_j} M_j)$$

стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$, тогда как при $R > C$ она не стремится к нулю при любом выборе кодирования и декодирования [42]. Это дает основание назвать величину C пропускной способностью данного квантового канала связи.

Следует отметить, что для соответствующего классического канала «без памяти» последовательность $\{C_n\}$ аддитивна и поэтому $C \equiv C_n/n = C_1$. Оказывается, что в квантовом случае возможно строгое неравенство

$$C_1 < C$$

1. Это утверждение было высказано Л. Б. Левитиным в 1969 г. что соответствует парадоксальному с классической точки зрения наличию «памяти» в произведении независимых каналов. Измерение в таком произведении может нести больше информации, чем сумма информации, получаемых в каждой компоненте. Этот факт, разумеется, обусловлен необычными статистическими свойствами составных квантовых систем и является еще одним проявлением квантовой целостности.

Доказательство этого факта, данное в работе А. С. Холево [42], использует следующую оценку пропускной способности C для канала с чистыми состояниями $S_\theta = |\psi_\theta\rangle \langle \psi_\theta|$:

$$C \geq \tilde{C} \equiv -\ln \min_{\pi} \left[\sum_{j,k=1}^m \pi_j \pi_k |\langle \psi_j | \psi_k \rangle|^2 \right]$$

в основе которой лежит неравенство (2.9) для средней ошибки и модификация метода случайных кодов, предложенная Р. Л. Стратоновичем и А. Г. Ванцян в [36]. Для двоичного канала ($m = 2$)

$$\tilde{C} = 1 - \ln(1 + \varepsilon^2) > 1 - \varepsilon^2 / \ln 2,$$

где $\varepsilon = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|$. В случае «почти ортогональных состояний»

$$C_1 \leq 1 + \frac{1}{8} \varepsilon^2 \ln \varepsilon^2 + o(\varepsilon^2 \ln \varepsilon^2), \varepsilon \rightarrow 0$$

откуда следует (2.13) для достаточно малых ε .

В этой области остается ряд трудных нерешенных вопросов [98]. Определенная формулой (2.12) пропускная способность не вычислена в точном виде даже для двоичного канала. Ввиду серьезных аналитических трудностей, представляют большой интерес всевозможные оценки и приближенные результаты (см. Бенджбаллах и Чарбит [67], В. П. Белавкин [63], Ингарден [110], Линдبلاد [121], Чемберс [74]). В общем случае $C \leq \bar{C}$, однако неизвестно, достигается ли здесь равенство для непостоянных операторов плотности S_θ .

2.4. Общая формулировка. Как и в классической теории статистических решений [50], задается множество значений Θ неизвестного параметра θ , множество \mathcal{X} решений x (часто $\mathcal{X} = \Theta$) и функция отклонения $W_\theta(x)$, определяющая качество решения x при данном значении параметра θ . Множество \mathcal{X} измеримо (обычно стандартное) пространство и $W_\theta(x)$ ограничена снизу и измерима по x при фиксированном $\theta \in \Theta$.

Каждому значению θ соответствует оператор плотности S_θ в гильбертовом пространстве рассматриваемой квантовой системы, а решающее правило задается разложением единицы $\mathbf{M} : \mathcal{B}(\mathcal{X}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathcal{C})$ в \mathcal{H} . Ортогональные разложения единицы описывают детерминированные решающие правила. При данном значении параметра θ и данном решающем правиле \mathbf{M} решение выбирается в соответствии с распределением вероятностей

$$\mu_\theta^M(B) = \text{Tr } S_\theta M(B); B \in \mathcal{B}(\mathcal{Q}).$$

Среднее отклонение, определяемое формулой

$$\mathcal{R}_\theta\{\mathbf{M}\} = \int_{\mathcal{Q}} W_\theta(x) \mu_\theta^M(dx)$$

является для каждого $\theta \in \Theta$ аффинным функционалом на выпуклом множестве решающих правил $\mathfrak{R}(\mathcal{Q})$.

Решающее правило называется байесовским, если оно минимизирует байесовский риск

$$\mathcal{R}_\pi\{\mathbf{M}\} = \int_{\Theta} \mathcal{R}_\theta\{\mathbf{M}\} \pi(d\theta)$$

для данного априорного распределения π на Θ , и минимаксный, если оно минимизирует максимальное среднее отклонение $\max_\theta \mathcal{R}_\theta\{\mathbf{M}\}$. Как классическая, так и квантовая теории статистических решений включаются в общую схему, в которой состояния описываются точками произвольного выпуклого множества \mathcal{S} , причем значительная часть результатов классической теории Вальда переносится на эту схему, достигая естественных границ общности (А. С. Холево [41]). При минимальных требованиях на функцию отклонений установлены общие условия существования байесовского (Озава [133]) и минимаксного решающих правил, полнота класса байесовских решающих правил (Н. А. Богомолов [8]), аналог теоремы Ханта-Стейна [43], [8]. Обобщения понятия достаточности изучали Умегаки [158], А. С. Холево [41], Петц [139]. В силу ограниченности понятия условного ожидания, в квантовой теории статистических решений достаточность играет гораздо меньшую роль, чем в классической, зато на первый план выходят свойства инвариантности относительно подходящих групп симметрий (см. 3).

На основе соответствующего аппарата интегрирования в [41] получены необходимые и достаточные условия оптимальности и соотношение двойственности в байесовской задаче с произвольными Θ, \mathcal{X} , обобщающие теорему из п. 2.2. Эти условия позволяют, в частности; дать исчерпывающее решение многомерной байесовской задачи оценивания среднего значения гауссовских состояний (В. П. Белавкин, Б. А. Гришанин [5], А. С. Холево [41]), которое иллюстрируется здесь одним примером.

В задаче оценивания $\Theta = \mathcal{Q}$ является конечномерным многообразием, в частности, областью в \mathbf{R}^n . В этом случае детерминированное решающее правило может быть задано набором совместимых вещественных наблюдаемых X_1, \dots, X_n в \mathcal{H} . Согласно п. 1.2, произвольное решающее правило задается набором совместимых наблюдаемых X_1, \dots, X_n в расширении \mathcal{H} вида $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$, где \mathcal{H}_0 - вспомогательное гильбертово пространство с оператором плотности S_0 . При таком способе задания решающее правило называется оценкой многомерного параметра $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_n)$. В квантовой задаче оценивания, в отличие от классической, байесовские оценки могут оказаться существенно недетерминированными.

Пр и м е р. Пусть $\{S_{\alpha, \beta}; (\alpha, \beta) \in \mathbf{R}^2\}$ - семейство гауссовских состояний (см. п. 1.2.4) с характеристической функцией

где P, Q - канонические наблюдаемые, $\sigma^2 \geq \frac{1}{2}$. Рассмотрим байесовскую задачу оценивания параметра $\theta = (\alpha, \beta)$ с функцией отклонения

$$W_{\alpha, \beta}(\alpha', \beta') = g_1(\alpha - \alpha')^2 + g_2(\beta - \beta')^2$$

и гауссовским априорным распределением вероятностей с плотностью $(2\pi)^{-1} \exp\left(-\frac{\sigma_0^2}{2}(\alpha^2 + \beta^2)\right)$. Решение этой задачи качественно зависит от величины g_1/g_2 . Если $g_1/g_2 \leq (2s^2)^{-2}$ или $g_1/g_2 \geq (2s^2)^2$, где $s^2 = \sigma^2 + \sigma_0^2$, то байесовские оценки детерминированы, т. е. задаются парой перестановочных самосопряженных операторов A, B в \mathcal{C} . В первом случае $A = \left(\frac{\sigma_0}{s}\right)^2 P, B = 0$, а во втором $A = 0, B = \left(\frac{\sigma_0}{s}\right)^2 Q$. Если же $(2s^2)^{-2} \leq g_1/g_2 \leq (2s^2)^2$, то оценки задаются перестановочными операторами

$$A = k_1(P \otimes I_0) + k_2(I \otimes P_0), B = k_2(Q \otimes I) - k_1(I \otimes Q_0)$$

в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$ (ср. (1.7)), где k_1, k_2 -коэффициенты, нелинейно зависящие от s^2, g_1, g_2 , а оператор плотности S_0 в \mathcal{H}_0 гауссовский и имеет характеристическую функцию

$$\begin{aligned} \text{Tr } S_0 \exp[i(P_0 x + Q_0 y)] &= \\ &= \exp\left[-\frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{g_2}{g_1}} \frac{k_1}{k_2} x^2 + \sqrt{\frac{g_1}{g_2}} \frac{k_2}{k_1} y^2\right)\right] \end{aligned}$$

Соответствующее разложение единицы в \mathcal{H} отличается от (1.7) линейной заменой переменных. В отличие от аналогичной классической задачи, зависимость байесовского риска от весов g_1, g_2 также имеет существенно нелинейный характер.

2.5. Квантовые неравенства Рао-Крамера. Рассмотрим задачу оценивания в семействе состояний $\{S_\theta\}$, где $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_k) \in \mathbf{R}^k$. Решающее правило **М** назовем несмещенным, если для всех $\theta \in \Theta$

$$\int \dots \int x_j \mu_\theta^M(dx_1 \dots dx_k) = \theta_j; \quad j = 1, \dots, k.$$

В предположении конечности вторых моментов определена матрица ковариации

$$\mathbf{D}_\theta\{\mathbf{M}\} = \left[\int \dots \int (x_i - \theta_i)(x_j - \theta_j) \mu_\theta^M(dx_1 \dots dx_k)\right]; i, j = 1, \dots, k.$$

В классической статистике хорошо известно неравенство Рао-Крамера, ограничивающее снизу матрицу ковариации несмещенных оценок. Входящая в эту

границу информационная матрица Фишера однозначно определяется метрической геометрией симплекса «классических состояний», т. е. распределений вероятностей на пространстве элементарных событий Ω [50]. В квантовой статистике имеется много неэквивалентных неравенств типа Рао-Крамера, что связано с существенно более сложной геометрией множества состояний.

Поскольку неравенство Рао-Крамера имеет локальный характер, достаточно предполагать, что семейство состояний определено в окрестности фиксированной точки θ . Введем вещественное гильбертово пространство $L^2(S_\theta)$, определяемое как пополнение множества $\mathfrak{B}_h(\mathcal{C})$ ограниченных вещественных наблюдаемых относительно скалярного произведения

$$\langle X, Y \rangle_\theta = \text{Re Tr } Y S_\theta X \equiv \text{Tr } S_\theta X \circ Y,$$

где $X \circ Y = \frac{1}{2}(XY + YX)$ - йорданово произведение X, Y . Предположим, что

1. семейство $\{S_\theta\}$ сильно дифференцируемо в точке θ как функция со значениями в $\mathfrak{T}(\mathcal{C})$;
2. линейные функционалы $X \rightarrow \text{Tr } \frac{dS_\theta}{d\theta} X$ непрерывны относительно скалярного произведения (2.15).

При этих условиях по теореме Ф. Рисса существуют симметризованные логарифмические производные $L_\theta^j \in L^2(S_\theta)$, определяемые из условий

$$\text{Tr } \frac{\partial S_\theta}{\partial \theta_j} X = \langle L_\theta^j, X \rangle, \quad \overline{X} \in \mathfrak{B}_h(\mathcal{H})$$

Формально,

$$\frac{\partial S_\theta}{\partial \theta_j} = S_{\theta \circ L_\theta^j}$$

Тогда для любого решающего правила \mathbf{M} , имеющего конечные вторые моменты и удовлетворяющего условию локальной несмещенности

$$\int \dots \int x_i \frac{\partial \mu_\theta^M}{\partial \theta_j} (dx_1 \dots dx_k) = \delta_{ij}; \quad i, j = 1, \dots, k$$

где $\frac{\partial \mu_\theta^M}{\partial \theta_j}(B) = \text{Tr } \frac{\partial S_\theta}{\partial \theta_j} M(B)$, имеет место неравенство

$$\mathbf{D}_e\{\mathbf{M}\} \geq \mathbf{J}_\theta^{-1}.$$

Здесь $\mathbf{J}_\theta = [\langle L_\theta^i, L_\theta^j \rangle_\theta]_{i,j=1,\dots,k}$ - вещественная симметричная матрица - аналог информационной матрицы Фишера для симметризованной логарифмической производной.

С другой стороны, введем комплексные гильбертовы пространства $L_\pm^2(S_\theta)$ как пополнения $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ относительно скалярных произведений

$$\langle X, Y \rangle_\theta^+ = \text{Tr } X^* S_\theta Y, \quad \langle X, Y \rangle_\theta^- = \text{Tr } Y S_\theta X^*$$

и определим правую и левую логарифмические производные $L_\theta^{\pm j}$ как решения уравнений

$$\text{Tr } \frac{\partial S_\theta}{\partial \theta_j} X = \langle L_\theta^{\pm j}, X \rangle_\theta^\pm, \quad X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$$

(существующие при тех же условиях 1), 2)). Формально

$$\frac{\partial S_\theta}{\partial \theta_j} = S_\theta L_\theta^{+j} = L_\theta^{-j} S_\theta$$

Тогда, при условии (2.18)

$$\mathbf{D}_\theta\{\mathbf{M}\} \geq (\mathbf{J}_\theta^\pm)^{-1}$$

где $\mathbf{J}_\theta^\pm = \left[\langle L_\theta^{\pm i}, L_\theta^{\pm j} \rangle_\theta \right]_{i,j=1,\dots,k}$ - комплексные эрмитовы матрицы, и (2.20) рассматривается как неравенство для эрмитовых матриц.

Формальное определение (2.17), симметризованной логарифмической производной и неравенство (2.19) принадлежит Хелстрому, а неравенство (2.20) - Юну и Лэксу (см. [37, гл. VIII]). Другие неравенства были получены Р. Л. Стратоновичем [155]. Математически корректные определения логарифмических производных и вывод соответствующих неравенств дан в книге [43, гл. VI]. Пространства L^2 , ассоциированные с квантовым состоянием, полезны и в других вопросах. Элементы этих пространств могут быть интерпретированы как (классы эквивалентности) неограниченных операторов в \mathcal{C} ([43, гл. II]).

Неравенства (2.19), (2.20) дают существенно различные, несравнимые границы для $\mathbf{D}_\theta\{\mathbf{M}\}$. В случае одномерного параметра ($k = 1$) всегда $J_\theta \leq J_\theta^\pm$, причем равенство имеет место тогда и только тогда, когда $[S_\theta, \frac{dS_\theta}{d\theta}] = 0$. В этом случае неравенство, основанное на симметризованной логарифмической производной, оказывается наилучшим [37, гл. VIII]. С другой стороны; для двухпараметрического семейства гауссовских состояний (2.14) неравенство (2.19) дает $\text{Tr } \mathbf{D}_\theta\{\mathbf{M}\} \geq 2\sigma^2$, тогда как из (2.20) вытекает $\text{Tr } \mathbf{D}_\theta\{\mathbf{M}\} \geq 2\sigma^2 + 1$. Последняя граница достигается для несмещенных оценок, определяемых операторами типа (1.7). Неравенство (2.20), основанное на правой (или левой) логарифмической производной, вообще лучше приспособлено к задачам оценивания, в которых параметр допускает естественную комплексификацию (в последнем примере $\theta = \alpha + i\beta$).

Выражение

$$d(S_1, S_2) = \sqrt{2 \left(1 - \left\| \sqrt{S_1} \sqrt{S_2} \right\|_1 \right)}$$

определяет метрику в множестве операторов плотности $\subseteq (\mathcal{H})$. В более широком контексте алгебр фон Неймана эта метрика, известная как расстояние Бюреса, подробно изучалась Араки, Ульманом и др. (см. обзор Раджио в [141]). Если $\{S_\theta\}$ -семейство, удовлетворяющее условиям 1), 2), то при $\Delta\theta \rightarrow 0$

$$d(S_\theta, S_{\theta+\Delta\theta})^2 \approx \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^k \langle L_\theta^i, L_\theta^j \rangle_\theta \Delta\theta_i \Delta\theta_j$$

Таким образом, расстояние Бюреса эквивалентно в малом римановой метрике, определяемой квантовым аналогом информационной матрицы Фишера. Е. А. Морозова и И. Н. Ченцов в [35] описали всевозможные римановы метрики в $\subseteq (\mathcal{G})$ ($\dim \mathcal{H} < \infty$), монотонно инвариантные в категории марков-

ских морфизмов (аффинных отображений $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ в себя). Минимальной в этом классе является риманова метрика в правой части (2.21).

4.2.3 3. Ковариантные наблюдаемые

3.1. Формулировка проблемы.

Пусть G - локально компактная группа, действующая непрерывно на транзитивном G -пространстве \mathcal{X} и $\mathbf{V} : g \rightarrow V_g, g \in G$, - непрерывное (проективное) унитарное представление группы G в гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Разложение единицы $M : B \rightarrow M(B), B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ в \mathcal{H} ковариантно по отношению к \mathbf{V} , если

$$V_g * M(B) V_g = M(g^{-1}B); g \in G, B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

В квантовой механике \mathcal{L} является пространством значений физического параметра (обобщенной координаты) x , обладающего группой симметрий (движений) G . Фиксируем $x_0 \in \mathcal{X}$ и оператор плотности S_0 . Соотношение

$$S_x = V_g S_0 V_g^*, \quad \text{где} \quad x = g x_0$$

описывает преобразование квантового состояния, отвечающее движению g . Рассмотрим обобщенную наблюдаемую M , удовлетворяющую условию ковариантности (3.1), и пусть $\mu_x^M(B) = \text{Tr } S_x M(B)$ - ее распределение вероятностей в состоянии S_x . Тогда условие (3.1) равносильно следующему:

$$\mu_{g x_0}^M(gB) = \mu_{x_0}^M(B); \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}), g \in G$$

для любого состояния S_0 . Это означает, что статистика наблюдаемой M преобразуется согласно движениям g в пространстве обобщенной координаты \mathcal{X} (см. пример в п. 1.2.3). Условие ковариантности, таким образом, дает правило для установления соответствия между классическими параметрами и квантовыми наблюдаемыми.

Такое соответствие является, конечно, далеко не однозначным. Среди множества ковариантных обобщенных наблюдаемых основной интерес представляют те, которые описывают предельно точные измерения соответствующего параметра. Рассмотрим задачу оценивания параметра $x \in \mathcal{X}$ в семействе состояний (3.2). Пусть на множестве $\mathcal{X} = \Theta$ задана функция отклонения $W_\theta(x)$, такая что $W_{g\theta}(gx) = W_\theta(x)$. Среднее отклонение

$$\mathcal{R}_\theta\{M\} = \int_{\mathcal{X}} W_\theta(x) \mu_\theta^M(dx)$$

при условии (3.1) не зависит от θ . Минимум аффинного функционала (3.4) достигается в крайней точке выпуклого множества $\mathfrak{M}^{G,V}(\mathcal{P})$ ковариантных обобщенных наблюдаемых. Обозначим $\mathfrak{R}_0^{G,V}(\mathcal{Q})$ подмножество ковариантных наблюдаемых, задаваемых ортогональными разложениями единицы. Проблема соответствия в математическом плане сводится к изучению запаса элементов и структуры множеств $\mathfrak{M}_0^{G,V}(\mathcal{L}), \mathfrak{R}^{G,V}(\mathcal{X})$. В общем случае

$$\mathfrak{M}_0^{G,v}(\mathcal{X}) \subsetneq \text{Extr } \mathfrak{M}^{G,v}(\mathcal{X})$$

Целый ряд парадоксов в стандартной формулировке квантовой механики обусловлен тем, что множество $\mathfrak{M}_0^{G,V}(\mathcal{X})$ оказывается пустым. С другой стороны, $\text{Extr } \mathfrak{R}^{G,V}(\mathcal{X})$ имеет значительно более обширный запас элементов, среди которых и находится обобщенная квантовая наблюдаемая, отвечающая данному классическому параметру.

3.2. Структура ковариантного разложения единицы. При специальных предположениях относительно G, \mathcal{X}, V можно дать прямое решение уравнения ковариантности (3.1), проливающее свет и на общий случай.

Пусть G - унимодулярна, а $G_0 = G/\mathcal{X}$ компактна, тогда на G существует σ -конечная инвариантная мера μ , а на \mathcal{X} конечная инвариантная мера v , такая что $v(B) = \mu(\lambda^{-1}(B))$, где $\lambda : g \rightarrow gx_0$.

Т е о р е м а ([78], [43]). Пусть \mathbf{V} - конечномерное представление группы G . Для любого ковариантного разложения единицы M найдется положительный оператор P_0 , такой что $[P_0, V_g] = 0, g \in G_0$ и

$$M(B) = \int_B P(x)v(dx)$$

где плотность $P(x)$ определяется соотношением

$$P(gx_0) = V_g P_0 V_g^*$$

Дока з а т е л и с т в о. Из тождества

$$\int_G \text{Tr } V_g S V_g^* M(B) \mu(dg) = v(B), \quad S \in \mathcal{H}$$

(см. [43, гл. IV]), полагая $S = (\dim \mathcal{H})^{-1} I$, получаем $\text{Tr } M(B) = (\dim \mathcal{H})^{-1} v(B)$. Поэтому существует плотность $P(x)$ со значениями в $\mathfrak{J}(\mathcal{H})$. Соотношение (3.5) вытекает из условия ковариантности.

Ограничение на P_0 , вытекающее из условия нормировки $M(\mathcal{X}) = I$, иногда удается выразить явно. Очень просто устроено множество $\mathfrak{R}^{G,V}(\mathcal{X})$ в случае, когда V есть неприводимое квадратично-интегрируемое представление ($\dim \mathcal{H} \leq +\infty$) унимодулярной группы $G = \mathcal{Q}$. Из соотношений ортогональности для V (см. [126]) следует, что при надлежащей нормировке μ

$$\int_G V_g S_0 V_{g\mu}^* (dg) = I$$

для любого оператора плотности S_0 . Таким образом, формула

$$M(B) = \int_B V_g S_0 V_{g\mu}^* (dg)$$

устанавливает взаимно однозначное аффинное соответствие между $\mathfrak{R}^G, V(G)$ и $\mathcal{S}(\mathcal{C})$. В частности, крайние точки множества $\mathfrak{R}^{G,V}(G)$ описываются формулой

$$M(B) = \int_B |\psi(g)\rangle \langle \psi(g)| \mu(dg)$$

где $\psi(g) = V_g \psi_0$, а ψ_0 - произвольный единичный вектор в \mathcal{H} . Семейство $\{\psi(g); g \in G\}$ образует переполненную систему, называемую в физике обобщенными когерентными состояниями (обычные когерентные состояния отвечают неприводимому представлению ККС и специальному выбору вектора ψ_0 , см. п. 1.2.4).

3.3. Обобщенные системы импримитивности. Если M в соотношении (3.1) ортогональное разложение единицы, то пара (V, M) называется системой импримитивности. Это понятие, введенное Дж. Макки (см. [126]), играет важную роль в теории представлений групп: представление V продолжается до системы импримитивности тогда и только тогда, когда оно индуцировано с подгруппы G/\mathcal{X} . Если же M - произвольное ковариантное разложение единицы, то (V, M) называется

обобщенной системой импримитивности. Имеет место следующее обобщение теоремы М. А. Наймарка о расширении.

Те о р е м а ([72], [148]). Пусть G - локально компактная группа, удовлетворяющая второй аксиоме счетности, $(\mathcal{X}, \mathcal{R}(\mathcal{D}))$ - стандартное измеримое пространство. Пусть (\mathbf{V}, \mathbf{M}) - обобщенная система импримитивности в \mathcal{H} , тогда существуют изометрическое вложение W пространства \mathcal{C} в некоторое гильбертово пространство $\widetilde{\mathcal{H}}$ и система импримитивности $(\widetilde{\mathbf{V}}, \widetilde{\mathbf{E}})$ в \mathcal{H} , такие что

$$V_g = W^* \widetilde{V}_g W; \quad M(B) = W^* E(B) W$$

Если множество $\{E(B)W\psi \mid B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}), \psi \in \mathcal{H}\}$ плотно в $\widetilde{\mathcal{H}}$, то $(\widetilde{\mathbf{V}}, \widetilde{\mathbf{E}})$ унитарно эквивалентно системе импримитивности, продолжающей представление в $\mathcal{H} = L^2_{\mathcal{F}}(\mathcal{X}, \mathfrak{C})$, индуцированное с подгруппы \mathbf{G}/\mathcal{Q}^1 .

Для иллюстрации рассмотрим пару (\mathbf{V}, \mathbf{M}) , где \mathbf{V} - неприводимое квадратично интегрируемое представление, \mathbf{M} дается формулой (3.6). Искомое расширение в $\mathcal{C} = L^2(G, \mu)$ является модификацией конструкции для произвольной переполненной системы (см. п. 2.1.1), именно

$$\widetilde{V}_g f(x) = f(gx); \quad E(B)f(x) = 1_B(x)f(x),$$

причем вложение W действует по формуле $W\psi(g) = \langle \psi(g) \mid \psi \rangle$. Подпространство $W\mathcal{H} \subset L^2(G, \mu)$ связано с воспроизводящим ядром $\mathcal{K}(g, g') = \langle \psi(g) \mid \psi(g') \rangle = \langle \psi_0 \mid V(g^{-1}g')\psi_0 \rangle$. Связь между обобщенными когерентными состояниями и индуцированными представлениями подробно исследовал Скутару [148]. В общем случае Каттанео [73] показал, что \mathbf{M} имеет ограниченную плотность $P(x)$ относительно квазинвариантной меры μ на \mathcal{X} тогда и только тогда, когда подпространство $W\mathcal{H} \subset L^2_{\mathcal{K}}(\mathcal{X}, \mu)$ является гильбертовым пространством с воспроизводящим ядром (со значениями в $\mathcal{Y}(\mathcal{K})$).

3.4. Случай абелевой группы. Случай, когда $G = \mathcal{X}$ - абелева локально компактная группа, представляет интерес, в частности, в связи с проблемой канонической сопряженности в квантовой механике. Полное описание ковариантных разложений единицы для произвольного (непрерывного) представления \mathbf{V} дается в терминах преобразования Фурье; при этом значения «плотности» $P(x)$ оказываются, вообще говоря, неограниченны-

1. $L^2\mathcal{K}(\mathcal{L}, \mu)$ обозначает гильбертово пространство функций на \mathcal{L} со значениями в некотором гильбертовом пространстве \mathcal{K} , квадратично интегрируемых по мере μ . ми положительно-определенными формами. Излагаемые далее результаты могут быть получены как прямыми методами гармонического анализа, так и с помощью теоремы о расширении из предыдущего пункта (см. статью А. С. Холево в [141]). Обобщение на неабелевы группы типа I дано в работе [46].

Пусть \hat{G} -двойственная группа, $d\hat{g}$ - мера Хадра в \hat{G} .

Предложение 1. $\mathfrak{M}^{a, \mathbf{V}}(G) \neq \emptyset$ тогда и только тогда,

когда спектр \mathbf{V} абсолютно непрерывен относительно $d\hat{g}$.

Если это выполнено, то \mathbf{V} разлагается в прямой интеграл факторных представлений, именно

$$\mathcal{H} = \int_{\Lambda} \oplus \mathcal{H}(\lambda) d\lambda$$

где Λ -измеримое подмножество \hat{G} , $\{\mathcal{G}(\lambda); \lambda \in \Lambda\}$ -измеримое семейство гильбертовых пространств с $\dim \mathcal{H}(\lambda) > 0$ для п. в. $\lambda \in \Lambda$, причем

$$V_g \psi = \int_{\Lambda} \oplus \overline{\lambda(g)} \psi(\lambda) d\lambda, \text{ если } \psi = \int_{\Lambda} \oplus \psi(-\lambda) d\lambda.$$

Здесь $\lambda(g)$ — значение характера $\lambda \in \hat{G}$ на элементе $g \in G$. Следующее утверждение вытекает из теоремы импримитивности Макки, которая обобщает теорему единственности Стоуна фон Неймана (п. 1.2.3).

Предложение 2. $\mathfrak{m}_0^{G,V}(G) \neq \emptyset$ тогда и только тогда, когда $\Lambda = \hat{O}$ с точностью до множества нулевой меры и $\dim \mathcal{H}(\lambda) = \text{const}$ для п. в. $\lambda \in \hat{G}$.

Ядром будем называть семейство $\{P(\lambda, \lambda'); \lambda, \lambda' \in \Lambda\}$, где $P(\lambda, \lambda')$ — сжимающие операторы из $\mathcal{H}(\lambda')$ в $\mathcal{H}(\lambda)$, причем комплексная функция $\langle \varphi(\lambda) | P(\lambda, \lambda') \psi(\lambda') \rangle_{\lambda}$ измерима по мере $d\lambda \times d\lambda'$ для любых $\varphi = \int \oplus \varphi(\lambda) d\lambda, \psi = \int \oplus \psi(\lambda) d\lambda \in \mathcal{H}(\langle \cdot | \cdot \rangle_{\lambda})$ обозначает скалярное произведение в $\mathcal{H}(\lambda)$. Ядро положительно определено, если

$$\int_{\Lambda} \int_{\Lambda} \langle \varphi(\lambda) | P(\lambda, \lambda') \varphi(\lambda') \rangle_{\lambda} d\lambda d\lambda' \geq 0$$

для всех $\varphi \in \mathcal{C}_1 = \left\{ \varphi : \int_{\Lambda} \|\varphi(\lambda)\|_{\lambda} d\lambda < \infty \right\}$. Для таких ядер однозначно с точностью до эквивалентности определяется диагональное значение $P(\lambda, \lambda)$ (см. [141]). Обозначим $1_B(\lambda) = \int_B \lambda(g) dg$, где dg -мера Хаара в G .

Т е о р е м а. Соотношение

$$\langle \varphi | M(B) \psi \rangle = \int_{\Lambda} \int_{\Lambda} \langle \varphi(\lambda) | P(\lambda, \lambda') \varphi(\lambda') \rangle_{\lambda} \hat{1}_B(\lambda - \lambda') d\lambda d\lambda',$$

где B пробегает компактные подмножества в G , $\varphi, \psi \in \mathcal{H}_1$, устанавливает взаимно однозначное соответствие между ковариантными разложениями единицы в \mathcal{H} и классами эквивалентности положительно определенных ядер $\{P(\lambda, \lambda')\}$, таких что $P(\lambda, \lambda) = I_{\lambda}$ (единичный оператор в $\mathcal{H}(\lambda)$).

Эта теорема сводит вопрос об описании множества $\text{Extr } \mathfrak{R}^{G,V}(G)$ к нахождению крайних точек выпуклого множества положительно определенных ядер $\{P(\lambda, \lambda')\}$, удовлетворяющих условию $P(\lambda, \lambda) = I_{\lambda}$. В полном объеме эта задача не решена даже для конечного Λ . Можно, однако, выделить подкласс множества $\text{Extr } \mathfrak{R}^{G,V}(G)$, существенный для квантовомеханических приложений.

Для простоты ограничимся далее случаем, когда $\dim \mathcal{H}(\lambda) = \text{const}$, $\lambda \in \Lambda$. Обозначим $\mathfrak{R}_c^{G,v}(G)$ класс ковариантных разложений единицы, ядра которых удовлетворяют соотношению

$$P(\lambda, \lambda') P(\lambda', \lambda'') = P(\lambda, \lambda''); \lambda, \lambda', \lambda'' \in \Lambda$$

Если $\Lambda = G$, то этот класс совпадает с $\mathfrak{M}_0^{G,v}(G)$, с другой стороны, $\mathfrak{M}_c^{G,v}(G) \subset \text{Extr } \mathfrak{M}^{G,v}(G)$, причем совпадение имеет место только, если Λ состоит из двух точек. Все элементы $\mathfrak{M}_c^{G,v}(G)$ получаются друг из друга калибровочными преобразованиями

$$M'(B) = U^* M(B) U$$

где $U = \int_{\Lambda} \oplus U(\lambda) d\lambda$ — разложимый унитарный оператор в $\mathcal{H} = \int_{\Lambda} \oplus \mathcal{H}(\lambda) d\lambda$.

Если реализовать \mathcal{H} как $L^2_{\mathcal{H}}(\Lambda, d\lambda)$, где $\mathcal{H}(\lambda) \equiv \mathcal{H}, \lambda \in \Lambda$, то в классе $\mathfrak{R}_c^{G,v}(G)$ выделяется разложение единицы M_c , определяемое ядром $P(\lambda, \lambda') \equiv I_{\mathcal{H}}$ (единичный оператор в \mathcal{H}^2), для которого

$$\langle \psi | M_c(B) \varphi \rangle = \int_{\Lambda} \int_{\Lambda} \langle \psi(\lambda) | \varphi(\lambda') \rangle \mathcal{H}^{\hat{1}_B}(\lambda - \lambda') d\lambda d\lambda'$$

Всякое $M \in \mathfrak{R}_c^{G,v}(G)$ имеет ядро вида $U(\lambda)^* U(\lambda')$, где $\{U(\lambda)\}$ -измеримое семейство унитарных операторов в \mathcal{H} .

3.5. Каноническая сопряженность в квантовой механике. Пусть x -одномерный параметр, так что $G = \mathcal{D}$ является вещественной прямой \mathbf{R} (случай параметра сдвига), или единичной окружностью \mathbf{T} (случай параметра поворота), и пусть $x \rightarrow V_x = e^{-ixA}$ - унитарное представление группы G в \mathcal{H} . Спектр Λ оператора A содержится в двойственной группе \hat{G} , которая совпадает с \mathbf{R} в случае $G = \mathbf{R}$ и с множеством целых чисел \mathbf{Z} в случае $G = \mathbf{T}$.

Условие ковариантности обобщенной наблюдаемой \mathbf{M} имеет вид

$$V_x^* M(B) V_x = M(B - x); \quad B \in \mathcal{B}(G), x \in G$$

где $B - x = \{y : y + x \in B\}$, причем в случае $G = \mathbf{T}$ имеется в виду сложение по модулю 2π . Вводя операторы

$$U_y = \int_G e^{iyx} M(dx), \quad y \in \hat{G}$$

получаем, что (3.9) равносильно соотношению Вейля (см. п. 1.2.3)

$$U_y V_x = e^{ixy} V_x U_y; \quad x \in G, y \in \hat{G}$$

в котором, однако, операторы U_v , вообще говоря, неунитарны. В этом смысле обобщенная наблюдаемая \mathbf{M} является канонически сопряженной к наблюдаемой A .

Для обобщенной канонической пары (A, \mathbf{M}) имеет место соотношение неопределенностей [100]

$$\Delta_S^M(y) \cdot \mathbf{D}_S(A) \geq 1/4; \quad y \in \hat{G}$$

где $\Delta_S^M(y) = y^{-2} \{ |\text{Tr } S U_y|^{-2} - 1 \}$, $y \neq 0$, есть некоторая функциональная мера неопределенности ковариантной обобщенной наблюдаемой M в состоянии S - (см. [43, & IV.7]). Если $G = \mathbf{R}$ и \mathbf{M} имеет конечную дисперсию $\mathbf{D}_S(\mathbf{M})$, то $\lim_{y \rightarrow 0} \Delta_S^M(y) = \mathbf{D}_S(\mathbf{M})$, так что из (3.11) следует обобщение соотношения неопределенностей Гейзенберга

$$\mathbf{D}_S(\mathbf{M}) \mathbf{D}_S(A) \geq 1/4$$

Для параметра поворота ($G = \mathbf{T}$) дисперсия не является адекватной мерой неопределенности, и неравенство (3.11) следует рассматривать как окончательное. Различные формы соотношения неопределенностей для угловых переменных обсуждались в обзорах [19], [17]. Следует отметить, что обобщенная наблюдаемая угла поворота существует всегда, поскольку условия предложения 1 из предыдущего пункта выполняются автоматически ($\hat{G} = \mathbf{Z}$). С другой стороны, условия предложения 2 не могут быть выполнены, если $\dim \mathcal{H} < \infty$ (как для систем с конечным спином), и в этих случаях обычной наблюдаемой угла поворота не существует.

Наибольший интерес представляют ковариантные обобщенные наблюдаемые, имеющие минимальную неопределенность.

Теорема ([100]). Пусть $S = |\psi\rangle\langle\psi|$ - чистое состояние, тогда

$$\min_{M \in \mathbb{M}^{G, V(G)}} \Delta_S^M(y) = y^{-2} \left[\left(\int_{\hat{\sigma}} \|\psi(y')\| \|\psi(y' + y)\| dy' \right)^{-2} - 1 \right]$$

В частности, для $G := \mathbf{R}$

$$\min_{M \in \mathbb{N}^{\mathbf{R}, V(\mathbf{R})}} D_s(M) = \int_{\mathbf{R}} \left(\frac{d}{dy} \|\psi(y)\| \right)^2 dy$$

где $\psi(y)$ - компоненты вектора ψ в представлении, диагонализующем оператор A . Минимум достигается на ковариантной наблюдаемой M^* класса $\mathfrak{R}_c^{G,v}$, которая задается ядром $P^*(y, y')$ таким, что $P^*(y, y') \psi(y') / \|\psi(y')\| = \psi(y) / \|\psi(y)\|$; $y, y' \in \Lambda$.

Величины (3.12), (3.13) дают внутреннюю меру неопределенности параметра x в состоянии S .

Таким образом, требования ковариантности и минимальной неопределенности (относительно чистых состояний) определяют канонически сопряженную обобщенную наблюдаемую однозначно с точностью до калибровочного преобразования (3.7). Следует отметить, что аналогичная степень произвола остается и в стандартной формулировке квантовой механики, поскольку в случае $\Lambda = \hat{G}$ класс $\mathfrak{P}_c^{G,V}(G)$ совпадает с классом ковариантных наблюдаемых $\mathfrak{R}_0^{G,v}(G)$.

Пример. Рассмотрим квантовую систему с положительным гамильтонианом H . Представление $t \rightarrow V_t = e^{-iHt}$ группы временных сдвигов не удовлетворяет условиям предложения 2 предыдущего пункта, поскольку $\Lambda \subset \mathbf{R}_+$. Поэтому ковариантной наблюдаемой временного сдвига не существует¹⁾. Предположим для простоты, что $\Lambda = \mathbf{R}_+$ и что спектр H однороден (т. е. имеет постоянную кратность для п. в. $\lambda \in \Lambda$). Тогда H унитарно эквивалентен оператору умножения на λ в гильбертовом пространстве $\mathcal{C} = L^2_{\mathcal{H}}(\mathbf{R}_+)$ квадратично-интегрируемых функций $\psi = [\psi(\lambda)]$ на \mathbf{R}_+ со значениями в некотором гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Ковариантные обобщенные наблюдаемые класса $\mathfrak{M}_c^{\mathbf{R},V}(\mathbf{R})$ с точностью до калибровочного преобразования (3.7) эквивалентны наблюдаемой M_c , определяемой соотношением (3.8), т. е.

$$\langle \psi | M_c(B) \varphi \rangle = \int_{\mathbf{R}_+} \int_{\mathbf{R}_+} \langle \psi(\lambda) | \varphi(\lambda') \rangle \mathcal{F} \int_B e^{i(\lambda' - \lambda)\tau} \frac{d\tau}{2\pi}.$$

Разложение единицы M_c является обобщенной спектральной мерой в смысле [2] максимального симметричного (но не самосо-

1. На трудности с определением наблюдаемой времени в квантовой механике указывал Паули (см. Handbuch der Physik.-1958.-5/1.-С. 60-63). (прямой) оператор

$$T = i \frac{d}{d\lambda}, \quad \mathcal{D}(T) = \{ \psi : \psi \text{ абсолютно непрерывна, } \psi(0) = 0, \quad$$

$$\int_{\mathbf{R}_+} \left\| \frac{d}{d\lambda} \psi(\lambda) \right\|_{\mathcal{H}}^2 d\lambda < \infty \}.$$

Минимальное расширение Наймарка разложения единицы M_c в пространстве $\widetilde{\mathcal{H}} = L^2_{\mathcal{H}}(\mathbf{R})$ дается формулой, аналогичной (3.14), с заменой \mathbf{R}_+ на \mathbf{R} , и является спектральной мерой самосопряженного оператора $i \frac{d}{d\lambda} L^2_{\mathcal{H}}(\mathbf{R})$.

3.6. Локализуемость. Пусть \mathbf{W} —унитарное представление группы, описывающей кинематику данной квантовой системы (универсальной накрывающей группы Галилея в нерелятивистском или группы Пуанкаре в релятивистском случае), в гильбертовом пространстве \mathcal{C} и пусть \mathbf{U} - ограничение \mathbf{W} на универсальную накрывающую G группы евклидовых преобразований $g : x \rightarrow Ax + b, x \in \mathbf{R}^3$. Система называется локализуемой по Вайтману, если в \mathcal{H} существует ортогональное разложение единицы \mathbf{E} на σ -алгебре $\mathcal{B}(\mathbf{R}^3)$ борелевских подмножеств координатного пространства \mathbf{R}^3 , удовлетворяющее условию евклидовой ковариантности

$$U_g^* E(B) U_g = E(g^{-1}B); g \in G, B \in \mathcal{B}(\mathbf{R}^3)$$

При этом условии для любой области $B \subset \mathbf{R}^3$ найдется вектор состояния ψ такой, что $\langle \psi | E(B) \psi \rangle = 1$, т. е. вероятность обнаружения системы в области B равна 1. Для локализуемой системы определены совместимые наблюдаемые координат

$$Q_j = \iiint x_j E(dx_1 dx_2 dx_3); j = 1, 2, 3$$

ковариантные относительно евклидовых преобразований.

Используя то обстоятельство, что (\mathbf{U}, \mathbf{E}) - система импримитивности, можно доказать, что локализуемыми по Вайтману являются все массивные частицы и релятивистские безмассовые частицы с нулевой спиральностью. Безмассовые частицы с ненулевой спиральностью (фотон, нейтрино) оказываются нелокализуемыми (Ньютон, Вигнер, 1949, Вайтман, 1962). Такой вывод не согласуется с экспериментальной локализуемостью фотона; более того, как показал Хегерфельдт, такое понятие локализуемости приводит к противоречию с требованием причинности в релятивистской динамике (см., например, [55]). Эти трудности снимаются, если в определении локализуемости допускаются произвольные разложения единицы. Неортогональное разложение единицы \mathbf{M} , описывающее локализацию фотона, было -указано, в частности, в работах Крауса (в сб. [159]), А. С. Холево [99]. Полная классификация соответствующих обобщенных систем импримитивности, при дополнительном условии ковариантности относительно преобразований подобия, включающая характеристику крайних точек, дана Кастрижяно [71]. Релятивистские безмассовые частицы оказываются п и б л л ж е н н о локализуемыми в том смысле, что $\sup_{\|\psi\|=1} \langle \psi | M(B) \psi \rangle = 1$ для любой области $B \subset \mathbf{R}^3$. Наблюдаемые координаты, определенные соотношением (3.15), являются самосопряженными, но непостоянными операторами и поэтому не имеют совместной спектральной меры.

В ряде работ, обзор которых имеется в статьях Али, Пруговечки [55], развивалась идея стохастической локализуемости в фазовом пространстве. Результаты этих работ также указывают на то, что обобщенная статистическая модель квантовой механики дает возможность, по крайней мере, смягчить известные противоречия между релятивистской инвариантностью и нелокальностью квантовомеханического описания.

4.3 ЭВОЛЮЦИЯ ОТКРЫТОЙ СИСТЕМЫ

4.3.1 1. Преобразования квантовых состояний и наблюдаемых

Динамика изолированной квантовой системы, описываемая однопараметрической группой унитарных операторов, обратима во времени. Эволюция открытой системы, подверженной внешним воздействиям, будь то процесс установления равновесия с окружением или взаимодействие с измерительным прибором, обнаруживает черты

необратимости. В математическом плане такие необратимые изменения описываются вполне положительными отображениями.

1.1. Вполне положительные отображения. Пусть $\mathcal{A} \subset \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ - некоторая C^* -алгебра операторов, т. е. подпространство $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$, замкнутое относительно алгебраических операций, инволюции и перехода к пределу по операторной норме (см., например, [32], [9]). Обозначим \mathfrak{P}_n алгебру комплексных $n \times n$ -матриц. Линейное отображение Φ из \mathcal{A} в $\mathfrak{P}(\mathcal{H})$ (где \mathcal{H} гильбертово пространство) называется положительным, если из $X \in \mathcal{A}, X \geq 0$ следует $\Phi[X] \geq 0$, и вполне положительным, если для любого $n \geq 1$ отображение Φ_n C^* -алгебры $\mathcal{A} \otimes \mathfrak{M}_n$ в C^* -алгебру $\mathfrak{B}(\mathcal{H}) \otimes \mathfrak{M}_n$, определяемое формулой $\Phi_n(X \otimes Y) = \Phi_n(X) \otimes Y$, является положительным. Другими словами, для любой матрицы $[X_{jk}]_{j,k=1,\dots,n}$ с элементами $X_{jh} \in \mathcal{A}$, положительно определенной в том смысле, что $\sum_{k=1}^n \langle \varphi_j | X_{jk} \varphi_k \rangle \geq 0$ для любого набора $\{\varphi_j\} \subset \mathcal{H}$, матрица

$$[\Phi(X_{jk})]_{j,k=1,\dots,n} \text{ также является положительно определенной.}$$

Еще одно эквивалентное определение: для любых конечных наборов $\{X_i\} \subset \mathcal{A}$ и $\{\psi_j\} \subset \mathcal{H}$

$$\sum_{j,k} \langle \psi_j | \Phi[X_j^* X_k] \psi_k \rangle \geq 0$$

Для положительного отображения имеет место неравенство Кэдисона-Шварца

$$\Phi[X]^* \Phi[X] \leq \|\Phi\| \Phi[X^* X]$$

для всех X таких, что $X^* X = X X^*$. Если Φ вполне положительно, то это неравенство выполняется для всех X . Пример положительного, но не вполне положительного отображения транспонирование в \mathfrak{D}_n . Если Φ положительно и \mathcal{A} , либо $\Phi(\text{Re})$ коммутативны, то Φ вполне положительно. Таким образом, свойство полной положительности проявляется лишь в некоммутативной ситуации.

Отображение $\pi : \mathcal{A} \rightarrow \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ называется $*$ -гомоморфизмом (представлением), если оно сохраняет алгебраические операции и инволюцию.

Т е о р е м а (Стاینспринг, 1955). Пусть $\mathcal{A} \subset \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ — C^* -алгебра с единицей и $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ -линейное отображение. Φ вполне положительно тогда и только тогда, когда оно допускает представление

$$\Phi[\lambda] = V^* \pi[X] V$$

где V -ограниченное линейное отображение из \mathcal{H} в некоторое гильбертово пространство $\tilde{\mathcal{H}}$, π - гомоморфизм \mathcal{A} в $\mathfrak{B}(\tilde{\mathcal{H}})$.

Существует единственное с точностью до унитарной эквивалентности минимальное представление (1.3), характеризующееся свойством: подпространство $\{\pi[\tilde{\lambda}] V \psi : X \in \mathcal{A}, \psi \in \mathcal{K}\}$ плотно в $\tilde{\mathcal{K}}$.

Доказательство прямого утверждения представляет собой обобщение конструкции Гельфанда-Найма-Сигала (ГНС), которая соответствует случаю положительного линейного функционала на \mathcal{A} ($\dim \mathcal{H} = 1$) [32], [9]. На алгебраическом тензорном произведении $\mathcal{A} \otimes \mathcal{H}$ определяется (псевдо-) скалярное произведение, такое что

$$\langle X \otimes \varphi | Y \otimes \psi \rangle = \langle \varphi | \Phi[X^* Y] \psi \rangle_{\mathcal{H}}; \quad X, Y \in \mathcal{A}; \varphi, \psi \in \mathcal{H}.$$

Неотрицательность скалярного квадрата следует из (1.1). Пусть $\tilde{\mathcal{H}}$ гильбертово пространство, получающееся в результате факторизации и пополнения $\mathcal{A} \otimes \mathcal{H}$ по этому скалярному произведению. Соотношения

$$\begin{aligned}\pi[X](Y \otimes \psi) &= XY \otimes \psi \\ V_\varphi &= I \otimes \varphi\end{aligned}$$

определяют переходом в $\tilde{\mathcal{K}}$ объекты V , л, удовлетворяющие соотношению (1.3).

З а м е ч а н и е. Если \mathcal{X} - метризуемый компакт и \mathbf{M} - разложение единицы в \mathcal{K} на σ -алгебре борелевских подмножеств $\mathcal{B}(\mathcal{X})$, то отображение

$$f \rightarrow \int_{\mathcal{X}} f(x) M(dx); \quad f \in C(\mathcal{Q})$$

C^* -алгебры $C(\mathcal{X})$ непрерывных комплексных функций на \mathcal{X} в $\mathcal{Y}(\mathcal{K})$ является (вполне) положительным. Теорема Стайнспринга в этом случае дает расширение Наймарка для \mathbf{M} , поскольку $*$ -гомоморфизм $C(\mathcal{X})$ задается ортогональным разложением единицы.

Всякая алгебра фон Неймана \mathcal{B} является C^* -алгеброй с единицей. Положительное отображение Φ алгебры \mathcal{B} называется нормальным, если из $X_\alpha \uparrow X$ в \mathcal{B} следует $\Phi[X_\alpha] \uparrow \Phi[X]$.

С л е д с т в и е ([117]). Всякое нормальное вполне положительное отображение $\Phi : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathcal{E})$ имеет вид

$$\Phi[\ddot{\Lambda}] = \sum_{n=1}^{\infty} V_n^* \bar{\Lambda}_n$$

где ряд $\sum_{n=1}^{\infty} V_n^* V_n$ сходится сильно в $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Доказательство. Если Φ нормально, то представление π в формуле (1.3) также можно считать нормальным. Известно, что всякое нормальное представление алгебры $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ в пространстве $\tilde{\mathcal{K}}$ кратно единичному, т. е. $\tilde{\mathcal{K}} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$ и $\pi[\lambda] = X \otimes I_0$, где \mathcal{H}_0 - некоторое гильбертово пространство, I_0 -единичный оператор в \mathcal{H}_0 (см., например, [78, гл. 9]). Пусть $\{e_j\}$ -ортонормированный базис в \mathcal{H}_0 , тогда $V\psi = \sum_{n=1}^{\infty} V_n \psi \otimes e_n$, а соотношение (1.3) переходит в (1.4).

Обзор свойств вполне положительных отображений имеется в статье Штермера в сборнике [85]. Андо и Чой [57] рассмотрели н е л и н е й н ы е вполне положительные отображения и установили для них обобщение теоремы Стайнспринга.

1.2 Операции, динамические отображения.

Алгебра $\mathcal{B}(\mathcal{E})$ как банахово пространство является сопряженным к пространству ядерных операторов $\mathfrak{T}(\mathcal{E})$ (см. П. 1.1.1). Если Ψ - линейное отображение в $\mathfrak{T}(\mathcal{E})$, положительное в том смысле, что $\Psi[T] \geq 0$, если $T \geq 0$, то Ψ ограничено (см., например, [78, гл. 2]) и поэтому имеет сопряженное отображение $\Phi = \Psi^* : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathcal{E})$, которое является линейным положительным нормальным отображением; более того, всякое Φ с такими свойствами является сопряженным к некоторому Ψ . Если Ψ положительно и, кроме того, $\text{Tr } \Psi[T] \leq \text{Tr } T$ для всех $T \in \mathfrak{T}(\mathcal{E}), T \geq 0$, то Ψ называется операцией (в пространстве состояний). Это равносильно тому, что $\Phi[I] \leq I$. Отображение Φ также называется операцией (в алгебре наблюдаемых).

В квантовой статистике операции описывают изменения состояний (наблюдаемых) открытой системы в результате эволюции или макроскопического воздействия, включая отбор по какому-либо признаку (например, по результату измерения) в соответствующем статистическом ансамбле. Если S -оператор плотности исходного состояния, то число

$\text{Tr } \Psi[S]$ интерпретируется как доля отобранных представителей ансамбля, а $\Psi[S]/\text{Tr } \Psi[S]$ как оператор плотности, описывающей новое состояние отобранного ансамбля. Термин «операция» был введен в известной работе Хаага и Кастлера (1964), посвященной обоснованию квантовой теории поля. Базирующийся на понятии операции аксиоматический подход к квантовой механике был развит Дэвисом и Льюисом, Людвигом и другими авторами (см., например, [78], [125], [116], [85]).

В динамической теории особенно важны операции, переводящие состояние в состояние. Это равносильно тому, что $\text{Tr } \Psi[T] = \text{Tr } T$ для всех $T \in \mathfrak{T}(\mathcal{C})$ или же $\Phi[I] = I$, где $\Phi = \Psi^*$. Если, кроме того, Φ - вполне положительно, то Ψ (или Φ) называется динамическим отображением¹⁾. Из теоремы Вигнера (п. 1.2.1) следует, что обратимые динамические отображения описываются формулами

$$\Psi[T] = UTU^*, \quad \Phi[X] = U^*XU$$

где U - унитарный оператор в \mathcal{C} (если U антиунитарный, то Φ не может быть линейным отображением). В общем случае динамические отображения описывают необратимые эволюции и являются некоммутативным аналогом марковских отображений в теории вероятностей. Мерой необратимости может служить относительная энтропия квантовых состояний

$$H(S_2 | S_1) = \text{Tr } S_1 (\ln S_1 - \ln S_2)$$

О свойствах относительной энтропии см. Линдبلاد [122], Верль. [166], Петц [139]). Важнейшим является следующее утверждение: для любого динамического отображения Ψ :

$$H(\Psi[S_2] | \Psi[S_1]) \geq H(S_2 | S_1)$$

Согласно следствию из п. 1.1, динамическое отображение допускает представление

$$\Psi[T] = \sum_{n=0}^{\infty} V_n T V_n^*, \quad \Phi[X] = \sum_{n=0}^{\infty} V_n^* \tilde{\lambda} V_n$$

где $\sum_{n=0}^{\infty} V_n^* V_n = I$. Отсюда нетрудно получить

1. На свойство полной положительности эволюции открытой системы. было указано, в частности в работах [117], [39].

С л е д с т в и е ([123]). Отображение $\Psi : \mathfrak{T}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathfrak{T}(\mathcal{H})$ является динамическим тогда и только тогда, когда существуют гильбертово пространство \mathcal{H}_0 , состояние S_0 в \mathcal{H}_0 и унитарный оператор U в $\mathcal{B} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}\mathcal{C}_0$, такие что

$$\Psi[S] = \text{Tr}_{\mathcal{H}_0} U (S \otimes S_0) U^*$$

где $\text{Tr}_{\mathcal{H}_0}$ - частичный след в \mathcal{H}_0 .

Таким образом, динамическое отображение расширяется до обратимой эволюции составной системы, включающей исходную открытую систему и «окружение», причем возможность такого расширения обусловлена свойством полной положительности.

1.3 Условные ожидания.

Так называются отображения $\mathcal{E} : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$, являющиеся идемпотентами ($\mathcal{E}^2 = \mathcal{E}$) с единичной нормой. \mathcal{E} отображает $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ на C^* -подалгебру $\mathcal{A} = \{X : X \in \mathcal{B}(\mathcal{H}), \mathcal{E}[X] = X\}$. Если \mathcal{E} нормально, то \mathcal{A} -алгебра фон Неймана. Условное ожидание согласовано с состоянием S , если $\text{Tr } S\mathcal{E}[X] = \text{Tr } SX; X \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Томияма показал, что условное ожидание является положительным отображением и обладает свойством

$$\mathcal{E}(XYZ) = X\mathcal{E}(Y)Z; \quad Y \in \mathcal{B}(\mathcal{H}); \quad X, Z \in \mathcal{A},$$

которое включалось в первоначальное определение, данное Умегаки [158]. На самом деле всякое условное ожидание вполне положительно.

Общий критерий существования нормального условного ожидания в алгебрах фон Неймана дал Такесаки [157]. В случае $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ этот критерий имеет следующую формулировку. Пусть S - невырожденный оператор плотности, тогда с ним связана модулярная группа автоморфизмов $\mathcal{B}(\mathcal{H})$

$$\alpha_t[X] = S^{it} X S^{-it}; \quad X \in \mathcal{B}(\mathcal{H}), \quad t \in \mathbf{R}.$$

Условное ожидание \mathcal{E} на подалгебру $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$, согласованное с состоянием S , существует тогда и только тогда, когда \mathcal{A} инвариантна относительно α_t . В частности, это выполняется, если $[S, X] = 0$ для всех $X \in \mathcal{A}$.

Пример нормального условного ожидания (усреднение по подсистеме составной системы) был дан в п. 1.3.1. Приведем другой важный пример. Пусть $\{E_n\}$ - ортогональное разложение единицы в \mathcal{H} . Тогда

$$\mathcal{E}[X] = \sum_{n=1}^{\infty} E_n X E_n$$

является нормальным условным ожиданием на подалгебру \mathfrak{A} операторов вида (1.5), согласованным с любым состоянием, оператор плотности которого принадлежит \mathcal{A} . Алгебру \mathfrak{A} можно описать также соотношением $\mathcal{V} = \{E_n; n = 1, 2, \dots\}'$, где \mathfrak{M}' обозначает коммутант подмножества $\mathfrak{A} \subset \mathfrak{B}(\mathcal{H})$, т. е. совокупность всех ограниченных операторов, коммутирующих с операторами из \mathfrak{A} .

Обзор результатов об условных ожиданиях в алгебрах фон Неймана имеется в статьях Чеккини в сб. [141] и Петца в сб. [143]. В них же излагается некоторое обобщение понятия условного ожидания, принадлежащее Аккарди и Чеккини.

4.3.2 2. Квантовые динамические полугруппы

2.1. Определение и примеры.

Динамическая полугруппа является некоммутативным обобщением полугруппы переходных - операторов в теории марковских случайных процессов. Возможны два эквивалентных способа задания динамической полугруппы в пространстве состояний и в алгебре наблюдаемых системы. Квантовой динамической полугруппой в пространстве состояний называется семейство динамических отображений $\{\Psi_t; t \in \mathbf{R}_+\}$ банахова пространства ядерных операторов $\mathfrak{T}(\mathcal{H})$, такое что

1. $\Psi_t \cdot \Psi_s = \Psi_{t+s}; t, s \in \mathbf{R}_+;$
2. $\Psi_0 = \text{Id}$ (тождественное отображение);

3. $\{\Psi_t\}$ сильно непрерывна, т. е. $\lim_{t \rightarrow 0} \|\Psi_t[T] - T\|_1 = 0$ для любого $T \in \mathfrak{E}(\mathcal{H})$.

Из общей теории полугрупп в банаховом пространстве (см., например, [9, гл. 3]) вытекает, что существует плотно определенный инфинитезимальный оператор

$$\mathcal{K}[T] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\Psi_t[T] - T}{t}$$

Если Ψ_t непрерывна по норже, т. е. $\lim_{t \rightarrow 0} \|\Psi_t - \text{Id}\| = 0$, то \mathcal{K} - всюду определенное, ограниченное отображение $\mathfrak{T}(\mathcal{H})$. Если S_0 начальное состояние, то функция $S_t = \Psi_t[S_0]$ удовлетворяет квантовому марковскому управляющему уравнению ¹⁾

$$\frac{dS_t}{dt} = \mathcal{K}[S_t]$$

которое является некоммутативным аналогом уравнения Колмогорова-Чепмена. В физических приложениях динамические полугруппы и возникают как решения марковских управляющих уравнений.

Динамическая полугруппа в алгебре наблюдаемых - это полугруппа динамических отображений $\{\Phi_t; t \in \mathbf{R}_+\}$ алгебры $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$,

$$\text{такая что } \Phi_0 = \text{Id} \text{ и } \omega^* - \lim_{t \rightarrow 0} \Phi_t[X] = X^* \text{ для любого } X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}).$$

1. Английский термин - master equation.

Мы будем в основном рассматривать полугруппы, непрерывные по норме, т. е. такие, что $\lim_{t \rightarrow 0} \|\Phi_t - \text{Id}\| = 0$.

П р и м е р ([116]). Пусть ${}^{t \rightarrow 0}G$ - сепарабельная локально компактная группа, $g \rightarrow V_g$ - непрерывное унитарное представление G в \mathcal{G} и $\{\mu_t; t \in \mathbf{R}_+\}$ - непрерывная сверточная полугруппа вероятностных мер на G (см., например, [13]). Соотношения

$$\Psi_t[S] = \int_G V_g S V_g^* \mu_t(dg); \Phi_t[X] = \int_G V_g^* X V_g \mu_t(dg)$$

задают квантовые динамические полугруппы, соответственно, в $\mathfrak{E}(\mathcal{H})$ и в $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$.

В частности, пусть A -эрмитов оператор в \mathcal{H} , тогда выражение

$$\Psi_t[S] = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2t}} e^{-iAx} S e^{iAx}$$

соответствующее гауссовской сверточной полугруппе на \mathbf{R} , определяет динамическую полугруппу с инфинитезимальным оператором

$$\mathcal{K}[S] = ASA - A^2 \circ S.$$

Если U -унитарный оператор, $\lambda > 0$, то

$$\Psi_t[S] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t)^n}{n!} e^{-\lambda t} U^n S U^{*n}$$

является динамической полугруппой, отвечающей пуассоновской сверточной полугруппе на \mathbf{Z} , с инфинитезимальным оператором

$$\mathcal{K}[S] = \lambda [USU^* - S]$$

Понятие динамической полугруппы было предложено Коссаковским [116] (см. также Дэвис [78]), однако без условия полной положительности, которое позднее было введено Линдбладом [123]. Многие физические примеры укладываются в общую схему квазисвободных динамических полугрупп, которые являются квантовым аналогом гауссовских марковских полугрупп. В случае ККС такие полугруппы характеризуются условием, что они переводят гауссовские состояния в гауссовские (см. п. 1.2.4). В статистической механике они описывают необратимую динамику открытых Бозе- или Ферми-систем с квадратичным взаимодействием (см. обзоры [27], [56]).

2.2. Инфинитезимальный оператор.

Требование полной положительности налагает нетривиальные ограничения на инфинитезимальный оператор полугруппы. Описание инфинитезимального оператора непрерывной по норме квантовой динамической полугруппы было получено Линдбладом и, независимо в случае $\dim \mathcal{C} < \infty$, Горини, Коссаковским и Сударшаном.

Теорема ([123]). Для того чтобы ограниченное отображение \mathcal{K} пространства $\mathfrak{I}(\mathcal{H})$ было инфинитезимальным оператором непрерывной по норме квантовой динамической полугруппы, необходимо и достаточно, чтобы

$$\mathcal{K}[S] = -i[H, S] + \sum_{j=1}^{\infty} (L_j S L_j^* - L_j^* L_j \circ S)$$

где $H, L_j \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$, $H = H^*$ и ряд $\sum_{j=1}^{\infty} L_j^* L_j$ сходится сильно.

Первое слагаемое в (2.4) отвечает обратимой эволюции с гамильтонианом H , а второе задает диссипативные члены. Оператор $\sum_{j=1}^{\infty} L_j^* L_j$ связан со скоростью диссипации. Переходя к формулировке в алгебре наблюдаемых, имеем для инфинитезимального оператора $\mathcal{L} = \mathcal{K}^*$ полугруппы $\Phi_t = \Psi_t^*$

$$\mathcal{L}[X] = i[H, X] + \sum_{j=1}^{\infty} (L_j^* \dot{L}_j - L_j^* L_j \circ X)$$

В основе доказательства теоремы лежат следующие два факта [123], [84].

Предположим е. Пусть \mathcal{L} - ограниченное отображение $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$ в себя, такое что $\mathcal{L}[I] = 0$. Следующие утверждения эквивалентны:

1. $\exp t\mathcal{L}$ вполне положительно для всех $t \in \mathbf{R}_+$;
2. \mathcal{L} вполне диссипативно, т. е. $\mathcal{L}[X^*] = \mathcal{L}[X]^*$ и

$$\sum_{j,k} \langle \psi_j | (\mathcal{L}[X_j^* X_k] - X_j^{**} \mathcal{L}[X_k] - \mathcal{L}[X_j]^* X_k) \psi_k \rangle \geq 0$$

для любых конечных наборов $\{\psi_j\} \subset \mathcal{H}$, $\{X_j\} \subset \mathfrak{B}(\mathcal{H})$;

3. $\mathcal{L}[X^*] = \mathcal{L}[X]^*$ и \mathcal{L} условно вполне положительно т. е. из $\sum_j X_j \psi_j = 0$ следует

$$\sum_{j,k} \langle \psi_j | \mathcal{L}[X_j^* \ddot{X}_k] \psi_k \rangle \geq 0$$

Это утверждение родственно теореме Шенберга в теории условно положительно определенных функций (см., например, [138], а также п. 4.2.4).

Теорема а. Пусть \mathcal{L} - ограниченное отображение $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ в себя, такое что $\mathcal{L}[I] = 0$. Для того чтобы \mathcal{L} было вполне диссипативным, необходимо и достаточно, чтобы

$$\mathcal{L}[X] = \Phi[X] + K^*X + XK$$

где Φ -вполне положительное отображение, $\mathcal{V}(\mathcal{H})$.

Соотношение (2.5) получается тогда из формулы (1.3) для нормального вполне положительного отображения.

Доказательство формулы (2.6) может быть связано с когомологиями алгебры $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Конструкция типа ГНС сопоставляет вполне диссипативному отображению \mathcal{L} линейное отображение B алгебры $\mathcal{B}(\mathcal{G})$ в пространство ограниченных операторов из \mathcal{H} в \mathcal{H} (другое гильбертово пространство), так что

$$\mathcal{L}[X^*Y] - X^*\mathcal{L}[Y] - \mathcal{L}[X]^*Y = B[X]^*B[Y]$$

Более того, отображение B оказывается к о и к лом некоторого представления (*-гомоморфизма) π алгебры $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ в $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$, т. е. удовлетворяет уравнению

$$B[XY] = \pi[X]B[Y] + B[X]Y; X, Y \in \mathcal{B}(\mathcal{H}).$$

Основную трудность представляет доказательство того, что всякий коцикл тривиален, т. е. имеет вид $B[X] = \pi[X]R - RX$, где R -ограниченный оператор из \mathcal{H} в \mathcal{H} . Кристенсен и Эванс [76] обобщили этот подход и получили аналог представления (2.6) для произвольной C^* -алгебры операторов.

2.3. Свойство консервативности.

Проблема характеристики инфинитезимального оператора динамической полугруппы без требования непрерывности по норме трудна и остается открытой. Нетривиальной является и задача построения динамической полугруппы по формальному выражению типа (2.5), где H, L_j - неограниченные операторы. Дэвис [79] указал довольно общие условия, при которых с формальным выражением (2.4) ассоциируется сильно непрерывная полугруппа вполне положительных отображений $\{\Phi_t; t \in \mathbf{R}_+\}$, такая что

$$\Phi_t[I] \leq I$$

и являющаяся аналогом феллеровского минимального решения в классической теории марковских процессов. Если минимальная полугруппа консервативна в том смысле, что $\Phi_t[I] = I$, то она является единственной динамической полугруппой, инфинитезимальный оператор которой является замыканием оператора (2.5). Неконсервативность, как и в классической теории, связана с возможностью «ухода на бесконечность» за конечное время.

Пример 1 ([79]). Пусть $\mathcal{H} = l^2$ - гильбертово пространство последовательностей $\{\psi_n; n \geq 0\}$ и «операторы рождения-уничтожения» a^*, a определены соотношениями $(a^*\psi)_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$, $(a\psi)_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$. Рассмотрим управляющее уравнение

$$\frac{dS_t}{dt} = LS_tL^* - L^*L_0S_t$$

где $L = a^{*2}$, $L^* = a^2$, а S_t - диагональный оператор плотности в l^2 . Диагональные элементы $p_n(t); n = 0, 1, \dots$, оператора S_t удовлетворяют уравнению чистого рождения

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = -(n+2)(n+1)p_n(t) \pm n(n-1)p_{n-2}(t)$$

минимальное решение которого неконсервативно, $\sum_{n=0}^{\infty} p_n(t) < 1$ при $t > 0$.

Дэвис дал достаточные условия консервативности, пригодные для класса моделей квантовой диффузии. Оригинальные общие условия консервативности, основанные на аналогиях с классической теорией марковских процессов, предложил А. М. Чеботарев в [49], [35]. Рассмотрим для простоты случай формального инфинитезимального оператора

$$\mathcal{L}[X] = L^*XL + K^*X + XK$$

где L, L^*, K, K^* - операторы, имеющие плотную общую инвариантную область определения \mathcal{D} . Предполагается, что \mathcal{D} - существенная область определения для операторов K, K^* , которые являются инфинитезимальными операторами сильно непрерывных сжимающих полугрупп в \mathcal{H} , и что $K = -\frac{1}{2}L^*L + iH$, где H - самосопряженный оператор. Условия консервативности имеют вид

$$[L, L^*] \geq -cI, i[L^*L, H] \geq -cL^*L,$$

где $c > 0$ и неравенства понимаются как неравенства для соответствующих форм, определенных на \mathcal{D} . Представление о диапазоне применимости этих условий дают два примера.

Пример 2. Пусть $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R})$, Q -оператор умножения на x ; $P = i^{-1} \frac{d}{dx}$, $a(x)$ - дважды непрерывно дифференцируемая функция. Рассмотрим формальное выражение

$$\mathcal{L}[\tilde{X}] = Pa(Q)Xa(Q)P - Pa(Q)^2P \circ X$$

Если X -оператор умножения на дважды непрерывно дифференцируемую функцию $f(x)$, то $\mathcal{L}[X]$ есть оператор умножения на $\frac{1}{2} \frac{d}{dx} (a(x)^2 \frac{df}{dx})$, т. е. совпадает с инфинитезимальным оператором симметричной диффузии на коммутативной подалгебре $L^\infty(\mathbf{R}) \subset \mathfrak{B}(L^2(\mathbf{R}))$.

Условия А. М. Чеботарева выполняются, если

$$\sup_x a(x)a''(x) < \infty.$$

Пример 3. В обозначениях предыдущего примера рассмотрим выражение

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[X] = & \int_{-\infty}^{\infty} m(d\xi) c(Q, \xi)^* V_\xi^* X^* V_\xi c(Q, \xi) - \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} m(d\xi) |c(Q, \xi)|^{2\circ} \tilde{K}, \end{aligned}$$

где $V_x = \exp(-ixP)$, m - вероятностная мера на \mathbf{R} , c -комплексная измеримая функция, такая что $x(x) \equiv \int m(d\xi) |c(x, \xi)|^2 < \infty$ для всех x . На коммутативной подалгебре $L^\infty(\mathbf{R})$ (2.8) совпадает с инфинитезимальным оператором скачкообразного марковского процесса в \mathbf{R} с интенсивностью скачков $x(x)$. Достаточные условия консервативности выполняются, если

$$\sup_x \int m(x | d\xi) [\kappa_1(x + \xi) - \kappa_i(x)] < \infty,$$

где $m(x | d\xi) = m(d\xi) |c(x, \xi)|^2 / x(x)$ - условные вероятности скачков.

Полученные в [49] условия консервативности позволяют рас. смотреть также суммы выражений типа (2.7), (2.8) и гамильтоновых членов вида $i[H, X]$ с неограниченным H .

2.4. Ковариантные эволюции.

Пусть $g \rightarrow V_g$ - представление в \mathcal{C} группы G , описывающей симметрии окружения открытой квантовой системы. Динамическая полугруппа $\{\Psi_t; t \in \mathbb{R}_+\}$ называется ковариантной, если

$$\Psi_t [V_g S V_g^*] = V_g \Psi_t [S] V_g^*$$

для всех $S \in \mathcal{S}(\mathcal{H}), g \in G, t \in \mathbb{R}_+$. Структура ковариантных вполне положительных отображений рассмотрена в [149]. В конечномерном случае получена достаточно полная классификация инфинитезимальных операторов динамических полугрупп, ковариантных относительно групп пространственных симметрий [93], [1].

П р и м е р. Рассмотрим эволюцию (2.1) открытой системы со спином $1/2$ ($\dim \mathcal{H} = 2$; см. п. 1.1.6), ковариантную относительно действия группы $SO(2)$, соответствующей аксиально симметричному окружению. Представление имеет вид $\varphi \rightarrow e^{iq\sigma_3}$, где $\varphi \in [0, 2\pi)$. Общий вид инфинитезимального оператора ковариантной динамической полугруппы

$$\mathcal{L}[S] = -i[H, S] + \sum_{j=-1}^1 c_j (L_j S L_j^* - L_j^* S L_j)$$

где $c_j \geq 0$, $H = \frac{1}{2}\omega_0\sigma_3, L_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 - i\sigma_2), L_0 = \sigma_3, L_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 + i\sigma_2)$. Полагая $S_t = S(a_t)$, для вектора a_t имеем. уравнение Блоха

$$\frac{da_t}{dt} = \begin{bmatrix} -T_{\perp}^{-1} & \omega_0 & 0 \\ -\omega_0 & -T_{\perp}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & T_{\parallel}^{-1} \end{bmatrix} a_t + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ c_{\infty}/T_{\parallel} \end{bmatrix}$$

где $T_{\perp}^{-1} = 2c_0 + (c_1 + c_{-1}), T_{\parallel}^{-1} = 2(c_1 + c_{-1}), c_{\infty} = 2T_{\parallel}(c_1 - c_{-1})$. Уравнение (2.10) описывает релаксацию спина в аксиально симметричном магнитном поле. Параметр $T_{\parallel}(T_{\perp})$ имеет смысл времени продольной (поперечной) релаксации. При $t \rightarrow +\infty$

$a_t \rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ c_{\infty} \end{bmatrix}$, так что S_t стремится к предельному состоянию

$$S_{\infty} = \frac{1}{2}(I + c_{\infty}\sigma_3)$$

Инфинитезимальный оператор (2.9) вполне диссипативен, что налагает нетривиальные ограничения на физические параметры эволюции. Именно, $2T_{\perp}^{-1} - T_{\parallel}^{-1} = 2c_0 \geq 0$, откуда $2T_{\parallel} \geq T_{\perp}$ [93].

В серии работ, обзор которых имеется в [83], описаны инфинитезимальные операторы инвариантных динамических полугрупп (не обязательно непрерывных по норме), действующих тождественно на алгебре инвариантных элементов.

2.5. Эргодические свойства.

Если Φ -динамическое отображение, то семейство $\{\Phi^k; k = 0, 1, \dots\}$ можно рассматривать как динамическую полугруппу с дискретным временем. Асимптотические свойства таких полугрупп при $k \rightarrow \infty$ являются нетривиальным обобщением эргодической теории для классических цепей Маркова. Свойство полной положительности используется при этом лишь постольку, поскольку оно влечет

неравенство Кэдисона-Шварца (1.2), а эргодические теоремы для средних верны для положительных отображений.

В большинстве работ в той или иной форме присутствует предположение, что Φ имеет точное нормальное инвариантное состояние, т. е. состояние с невырожденным оператором плотности S_∞ , такое, что $\text{Tr } S_\infty \Phi[X] = \text{Tr } S_\infty X$ для всех $X \in \mathcal{F}(\mathcal{H})$. Имеет место эргодическая теорема для средних

$$w^* - \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \sum_{j=0}^k \Phi^j[\bar{X}] = \mathcal{E}_\infty[X]$$

где \mathcal{E}_∞ - условное ожидание на подалгебру \mathcal{N}_∞ инвариантных элементов Φ . В разной степени общности этот результат был получен Я. Г. Синаем, Е. А. Морозовой и Н. Н. Ченцовым, Кюммерером и другими авторами (см. обзор [27]). Соотношение (2.11) можно рассматривать как обобщение закона больших чисел. Много внимания было уделено распространению теорем типа (2.11) на неограниченные операторы и изучению некоммутативно-аналога сходимости почти наверное в алгебрах фон Неймана. Подробный обзор этих результатов дан В. В. Аншелевичем и М. Ш. Гольдштейном в [34], Петцем в [141], Яйте [111]. Отображение Φ неприводимо (Дэвис, Эванс), если не существует проектора $P \neq 0, I$, такого что $\Phi[P] = P$. Последнее равенство равносильно тому, что подалгебра операторов вида $PXP; P \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ инвариантна относительно Φ . Неприводимость эквивалентна единственности инвариантного состояния S_∞ и одномерности подалгебры \mathcal{N}_∞ . При этом в формуле (2.11) $\mathcal{E}_\infty[X] = (\text{Tr } S_\infty X) \cdot I$. Для неприводимости отображения Φ , записанного в виде (1.4), необходимо и достаточно, чтобы $\{V_n; n = 1, 2, \dots\}' = \mathfrak{B}(\mathcal{H})$, где $\mathfrak{A}' = (\mathfrak{A})'$. Для неприводимого отображения имеет место аналог теоремы Перрона-Фробениуса, отвечающий разложению замкнутого класса состояний цепи Маркова на подклассы (Эванс, Хег-Крон, Альбеверию; см. обзор [27]). Случай $\dim \mathcal{H} < \infty$ детально рассмотрен также в книге Т. А. Сарымсакова [31].

Пусть теперь $\{\Phi_t; t \in \mathbf{R}_+\}$ -квантовая динамическая полугруппа, имеющая точное нормальное инвариантное состояние S_∞ . Для нее также имеет место эргодическая теорема для средних (см. обзоры [27], [94]). Неприводимые полугруппы изучал Дэвис, Эванс, Шпон, Фриджеро (см. [78], [152]). Необходимое и достаточное условие неприводимости динамической полугруппы с инфинитезимальным оператором (2.5) состоит в том, что

$$\{H, L_j, L_j^*; j = 1, 2, \dots\}' = \mathfrak{B}(\mathcal{H})$$

Для неприводимых квантовых динамических полугрупп с непрерывным временем имеет место существенное усиление эргодической теоремы (см. [94])

$$w^* - \lim_{t \rightarrow +\infty} \Phi_t[X] = (\text{Tr } S_\infty X) \cdot I$$

Этот факт не переносится на динамические полугруппы в произвольных алгебрах фон Неймана. Обобщения на этот случай других асимптотических свойств, спектральной теории и теоремы Перрона-Фробениуса подробно рассмотрены в обзоре Гроха [94].

Основные физические примеры эргодических динамических полугрупп относятся к классу квазисвободных полугрупп, для которых эргодичность устанавливается непосредственно (см. обзор [27]).

2.6. Расширения динамических полугрупп.

С точки зрения статистической механики закономерен вопрос- насколько по-

тальным законом обратимой эволюции для изолированной системы. В физических приложениях управляющее уравнение (2.1) получается при рассмотрении взаимодействия квантовой системы с окружением в марковском приближении (пределы слабого или сингулярного взаимодействия). Строгое обоснование такого приближения требует достаточно громоздких оценок даже для простых моделей. Имеется ряд обзоров [152], [56], [93], [27], [52], в которых эта проблема квантовой статистической механики получила всестороннее освещение, и лучшее, что здесь можно предложить - это обратиться к одному из этих обзоров.

В принципиальном плане представляет интерес также постановка обратной задачи о расширении динамической полугруппы до группы автоморфизмов, т. е. представление марковской динамики через обратимую динамику открытой системы, взаимодействующей с окружением. Возможность такого расширения обусловлена, главным образом, свойством полной положительности (Дэвис; Эванс, Льюис; см. [84]).

Т е о р е м а. Пусть $\{\Psi_t; t \in \mathbf{R}_+\}$ - непрерывная по норме динамическая полугруппа в пространстве состояний $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$. Найдутся гильбертово пространство \mathcal{H}_0 , состояние S_0 в \mathcal{H}_0 и сильно непрерывная группа унитарных операторов $\{U_t; t \in \mathbf{R}\}$ в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$. такие что для всех $t \in \mathbf{R}_+$.

$$\Psi_t[S] = \text{Tr } \mathcal{H}_0 U_t (S \otimes S_0) U_t^*; S \in S(\mathcal{H})$$

В п. 5.2.2 будет приведена явная конструкция расширения, допускающая прозрачное динамико-статистическое истолкование. Следует отметить, что одна и та же динамическая полугруппа может иметь много неэквивалентных расширений (даже если требовать минимальность расширения). Дополнительный свет на структуру возможных расширений проливает понятие квантового случайного процесса. Согласно определению Аккарди, Фриджеро и Льюиса (1980), квантовый случайный процесс задается тройкой $(\mathfrak{A}, (j_t), \varphi)$, где \mathfrak{A} - C^* -алгебра, $(j_t)_{t \in \mathbf{R}}$ - семейство $*$ -гомоморфизмов некоторой фиксированной C^* -алгебры в \mathfrak{A} , φ - состояние на \mathfrak{A} . При определенных условиях регулярности квантовый случайный процесс однозначно с точностью до эквивалентности восстанавливается по корреляционным ядрам

$$\begin{aligned} w_1^t, \dots, t_n (X_1, \dots, X_n; Y_1, \dots, Y_n) = \\ = \varphi \left(j_{t_1} (X_1)^* \dots j_{t_n} (X_n)^* j_{t_n} (Y_n) \dots j_{t_1} (Y_1) \right) \end{aligned}$$

(некоммутативный аналог теоремы А. Н. Колмогорова о продолжении системы конечномерных распределений) (см. сборник [20]). В классическом случае \mathcal{A} и \mathfrak{B} коммутативные алгебры измеримых ограниченных функций, соответственно, на пространстве элементарных исходов Ω и на фазовом пространстве системы E , (j_t) определяется семейством случайных величин на Ω со значениями в E , а φ - функционал математического ожидания, соответствующий вероятностной мере на Ω .

С квантовым случайным процессом связываются семейства подалгебр «прошлого», «настоящего» и «будущего»

$$\mathfrak{A}_t = \bigvee_{s \leq t} j_s(\mathfrak{B}), \quad \mathfrak{A}_t = j_t(\mathfrak{B}), \quad \mathfrak{A}_{[t} = \bigvee_{s \geq t} j_s(\mathfrak{B})$$

Процесс называется жарковским, если существует согласованное с φ семейство условных ожиданий $(\mathcal{E}_t)_{t \in \mathbf{R}}$ из \mathfrak{A} на \mathfrak{A}_t , такое что

такое что

$$\mathcal{E}_t[\mathfrak{A}_t] \subseteq \mathcal{A}_t$$

ковариантным марковским, если дополнительно существует группа *-автоморфизмов $(\alpha_t)_{t \in \mathbb{R}}$ алгебры \mathcal{A} , такая что $\alpha_t(\text{Re}_s) = \text{Re}_{t+s}$; $t, s \in \mathbb{R}$, и $\alpha_t \cdot \mathcal{E}_s \cdot \alpha_{-t} = \mathcal{E}_{t+s}$, и стационарным марковским, если φ инвариантно относительно (α_t) . Для ковариантного марковского процесса соотношение

$$\Phi_t[X] = j_t^{-1} \mathcal{E}_t j_t[X]$$

при выполнении некоторых условий непрерывности определяет динамическую полугруппу в \mathcal{Y} . Обратно, всякая непрерывная по норме квантовая динамическая полугруппа $\{\Phi_t\}$ расширяется до ковариантного марковского процесса, удовлетворяющего соотношению (2.12). Если же динамическая полугруппа удовлетворяет условию детального равновесия, то она расширяется до стационарного марковского квантового случайного процесса (Горини, Фриджеро). Условие детального равновесия относительно состояния S для полугруппы $\{\Phi_t\}$ в $\mathcal{B}(\mathcal{L})$ означает, что существует другая динамическая полугруппа $\{\Phi_t^+\}$ в $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, такая что

$$\text{Tr } S\Phi_t + [X]Y = \text{Tr } SX\Phi_t[Y]; \quad X, Y \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$$

с инфинитезимальным оператором \mathcal{L}^+ , удовлетворяющим соотношению

$$\mathcal{L}[X] - \mathcal{L} + [X] = 2i[H, X]$$

где $H \in \mathcal{P}_h(\mathcal{H})$ (состояние S с необходимостью оказывается стационарным для Φ_t и Φ_t^+). До сих пор отсутствует полное описание динамических полугрупп, допускающих стационарные марковские расширения.

Фриджеро и Маассен [87] указали широкий класс полугрупп, не удовлетворяющих условию детального равновесия, но допускающих расширение с помощью «квантового пуассоновского процесса». Систематическое исследование стационарных марковских расширений предпринял Кюммерер [119]. Он установил прямую связь между эргодическими свойствами динамического отображения (неприводимость, слабое, сильное перемешивание) и его минимального стационарного марковского расширения. Кюммерер и Маассен [120] показали, что квантовая динамическая полугруппа в конечномерном гильбертовом пространстве допускает стационарное марковское расширение с помощью классического случайного процесса тогда и только тогда, когда ее

инфинитезимальный оператор имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[X] = & i[H, X] + \sum_{s=1}^k (A_s X A_s - A_s^2 \circ X) + \\ & + \sum_{r=1}^l \lambda_r (U_r^* X U_r - X) \end{aligned}$$

где A_s - эрмитовы, U_r - унитарные операторы, $\lambda_r > 0$. Оператор (2.13) является суммой выражений (2.2), (2.3), соответствующих гауссовским и пуассоновским полугруппам, а расширение получается с помощью случайного блуждания на группе автоморфизмов алгебры \mathfrak{M}_n .

Неоднозначность расширения динамической полугруппы до случайного процесса связана с тем, что знание полугруппы $\{\Phi_t\}$ позволяет восстановить лишь хронологически-упорядоченные корреляционные ядра

$$w_{t_1, \dots, t_n} (X_1, \dots, X_n; Y_1, \dots, Y_n) = \\ = \varphi_0 \left(\Phi_{t_1} \left[X_1^* \Phi_{t_2 - t_1} \left[\dots \Phi_{t_n - t_{n-1}} \left[X_n^* Y_n \right] \dots \right] Y_1 \right] \right),$$

-для которых $0 < t_1 < \dots < t_n$ (здесь $\varphi_0 = \varphi \mid \mathcal{A}_0$ - начальное состояние). В классической теории вероятностей корреляционные ядра зависят от времен t_1, \dots, t_n симметричным образом; известная конструкция Колмогорова-Даниэля однозначно сопоставляет полугруппе переходных вероятностей марковский процесс, являющийся ее минимальным расширением до группы временных сдвигов в пространстве траекторий. Определение квантового случайного процесса, основанное только на хронологически-упорядоченных ядрах, было предложено Линдбладом [124], некоммутативные обобщения конструкции Колмогорова-Даниэля рассматривались Винсент-Смитом [161], В. П. Белавкиным [3], Соважо [146].

Алипки и Мессер установили существование и единственность решения класса нелинейных кинетических уравнений, в частности, квантового уравнения Больцмана:

$$\frac{dS_t}{dt} = \text{Tr}_{(2)} W (S_t \otimes S_t) W^* - (\text{Tr} S_t) \cdot S_t$$

где W - унитарный «оператор парных столкновений» в $\mathcal{C} \otimes \mathcal{H}$, $\text{Tr}_{(2)}$ - частичный след по второму множителю в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$. Отвечая на вопрос, поставленный Стритером в [143], Фриджеро и Аратари построили расширение «нелинейной квантовой динамической полугруппы», определенной уравнением (2.14) по унитарной эволюции в квантовой системе, состоящей из бесконечного числа частиц с парными взаимодействиями (квантовое обобщение «карикатуры Мак-Кина» классического уравнения Больцмана). В. П. Белавкин [4] дал конструкцию квантового ветвящегося процесса, в котором одночастичная динамика описывается полугруппой нелинейных вполне положительных отображений общего вида.

4.4 ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЕ И НЕПРЕРЫВНЫЕ ПРОЦЕССЫ ИЗМЕРЕНИЯ

4.4.1 1. Статистика последовательных измерений

1.1. Понятие инструмента.

Рассмотрим последовательное измерение двух величин X, Y , принимающих значения, соответ-

ственно, в множествах \mathcal{X} и \mathcal{Y} , которое осуществляется над си-

стемой в состоянии S . Совместная вероятность того, что исход первого измерения x попадает в множество A , а исход второго y попадает в B (где $A \subset \mathcal{X}, B \subset \mathcal{Y}$) есть

$$\mu_S(A; B) = \mu_S(A) \mu_S(B \mid A)$$

где $\mu_S(A) = \mu_B(A; \dagger)$ - вероятность того, что $x \in A$, а $\mu_S(B \mid A)$ - соответствующая условная вероятность. Обозначим S_A состояние системы после первого измерения (оно зависит также от S , но не зависит от B). Тогда, согласно (2.1.4),

$$\mu_S(B \mid A) = \text{Tr} S_A M(B)$$

где M - разложение единицы, отвечающее величине Y . Из (1.1), (1.2) видно, что функция множеств

$$\mathcal{M}(A)[S] = \mu_S(A) S_A$$

должна быть σ -аддитивна по A . Это мотивирует следующее определение (Дэвис и Льюис, 1970).

Пусть \mathcal{X} - множество с σ -алгеброй измеримых подмножеств $\mathcal{B}(\mathcal{Q})$. Инструментом (в пространстве состояний) со значениями в \mathcal{X} называется функция множеств \mathcal{M} , заданная на $\mathcal{B}(\mathcal{L})$ и удовлетворяющая условиям:

1. $\mathcal{M}(B)$ - операция для любого $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$;
2. $\mathcal{M}(\mathcal{X})$ - динамическое отображение, т. е. $\text{Tr } \mathcal{M}(\mathcal{X})[T] = \text{Tr } T$ для всех $T \in \mathfrak{T}(\mathcal{C})$;
3. если $\{B_j\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{X})$ - конечное или счетное разбиение множества $B \in \mathcal{B}(\mathcal{C})$ на попарно непересекающиеся подмножеств-; ва, то

$$\mathcal{M}(B)[T] = \sum_j \mathcal{M}(B_j)[T]; T \in \mathfrak{T}(\mathcal{H})$$

где ряд сходится по норме $\mathfrak{T}(\mathcal{H})$.

Постулируется, что если S - оператор плотности, описывающий состояние системы перед измерением, то вероятность события, что исход измерения попадает в множество $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, равна

$$\mu_s(B) = \text{Tr } \mathcal{A}(B)[S]$$

а состояние доли статистического ансамбля, в которой зарегистрировано это событие, дается оператором плотности

$$S_B = \mathcal{M}(B)[S] / \text{Tr } \mathcal{M}(B)[S]$$

(при условии, что $\mu_s(B) > 0$). В частности, изменение состояния всего статистического ансамбля задается динамическим отображением $S \rightarrow \mathcal{M}(\mathcal{X})[S]$.

Переходя к сопряженным отображениям $\mathcal{P}(B) = \mathcal{M}(B)^*$, получаем формулировку в алгебре наблюдаемых: инструмент это функция множеств \mathcal{P} на $\mathcal{B}(\mathcal{D})$, такая что

1. $\mathcal{P}(B)$ - положительное нормальное отображение $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ в себя для любого $B \in \mathcal{B}(\mathcal{Q})$;
2. $\mathcal{P}(\mathcal{X})[\mathbf{I}] = \mathbf{I}$;
3. если $\{B_i\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{X})$ - разбиение множества B , то

$$\mathcal{P}(B)[X] = \sum_j \mathcal{P}(B_j)[X]; X \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$$

где ряд сходится *-слабо.

Каждому инструменту отвечает обобщенная наблюдаемая

$$M(B) = \mathcal{P}(B)[\mathbf{I}]; \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

такая, что

$$\mu_B(B) = \text{Tr } SM(B)$$

Озава [135] показал, что для любого инструмента \mathcal{M} и любого состояния S существует семейство апостериорных состояний $\{S_x; x \in \mathcal{Q}\}$, т. е. операторов плотности S_x , таких что:

1. функция $x \rightarrow \text{Tr } S_x Y$ μ_s -измерима для любого $Y \in \mathcal{F}(\mathcal{C})$;
2. $\text{Tr } \mathcal{M}(B)[S]Y = \int_B (\text{Tr } S_x Y) \mu_s(dx)$.

Оператор плотности S_x описывает состояние доли статистического ансамбля, в которой исход измерения равен x , а величина $\text{Tr } S_x Y = \mathbf{E}_s(Y \mid x)$ есть апостериорное среднее наблюдаемой Y при условии, что исход предыдущего измерения равен x .

Инструмент \mathcal{M} (или \mathcal{P}) называется вполне положительным, если отображения $\mathcal{P}(B); B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, вполне положительны.

Пример 1. Пусть $A = \sum_i x_i E_i$ - вещественная наблюдаемая с чисто точечным спектром. Соотношение

$$\mathcal{M}(B)[S] = \sum_{i: x_i \in B} E_i S E_i$$

определяет вполне положительный инструмент со значениями в \mathbf{R} , соответствующий проекционному постулату фон Неймана, который описывает предельно точное измерение наблюдаемой A .

Распределение вероятностей в состоянии S есть

$$\mu_S(B) = \sum_{i: x_i \in B} \text{Tr } S E_i$$

а апостериорные состояния даются формулой

$$S_i = E_i S E_i / \text{Tr } S E_i$$

Пример 2. Пусть A - вещественная наблюдаемая и $p(x)$ - плотность распределения вероятностей на \mathbf{R} , такая что

$$\int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx = \sigma^2 < \infty$$

Вполне положительный инструмент

$$\mathcal{M}(B)[S] = \int_B \sqrt{p(xI - A)} S \sqrt{p(xI - A)} dx$$

описывает неточное измерение наблюдаемой A со случайной ошибкой, распределенной с плотностью $p(x)$. В самом деле

$$\begin{aligned} \mu_S(B) &= \int_B \text{Tr } S p(xI - A) dx = \\ &= \int_B \int_B p(x - y) \mu_S^A(dy) dx, \end{aligned}$$

где μ_s^A - распределение вероятностей наблюдаемой A в состоянии S . Апостериорные состояния суть

$$S_x = \frac{\sqrt{p(xI - A)} S \sqrt{p(xI - A)}}{\text{Tr } S p(xI - A)}$$

Чем меньше σ^2 , т. е. чем ближе $p(x)$ к δ -функции, тем точнее измерение наблюдаемой A . Для наблюдаемой A с чисто точечным спектром случай $\sigma^2 = 0$ соответствует примеру 1 ; для наблюдаемой с непрерывным спектром возникают принципиальные трудности, не позволяющие непосредственно обобщить проекционный постулат на этот случай (см. далее п. 1.3).

1.2 Представление вполне положительного инструмента.

Многие реальные процессы укладываются в следующую схему косвенного измерения: рассматриваемая система взаимодействует с «пробной» системой, после чего над пробной системой производится прямое измерение некоторой квантовой наблюдаемой. Пусть \mathcal{C}_0 - гильбертово пространство пробной системы, S_0 - оператор плотности, описывающий ее исходное состояние, U - унитарный оператор в $\mathcal{C} \otimes \mathcal{H}_0$, задающий взаимодействие и E_0 - ортогональное разложение единицы в \mathcal{C}_0 , соответствующее измеряемой величине. Распределение вероятностей такого измерения дается формулой

$$\mu_S(B) = \text{Tr } U (S \otimes S_0) U^* (I \otimes E_0(B)); B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

где S - оператор плотности системы перед измерением. Оно может быть записано в виде (1.3), где

$$\mathcal{M}(B)[S] = \text{Tr}_{\mathcal{C}_0} U (S \otimes S_0) U^* (I_{\otimes} E_0(B))$$

- вполне положительный инструмент в пространстве состояний системы \mathcal{H} (здесь $\text{Tr } \mathcal{H}_0$ - частичный след по \mathcal{H}_0). Верно и обратное.

Т е о р е м а (Озава, [134]). Пусть \mathcal{M} - вполне положительный инструмент со значениями в \mathcal{X} . Найдется гильбертово пространство \mathcal{C}_0 , оператор плотности S_0 в \mathcal{C}_0 , унитарный оператор U в $\mathcal{C} \otimes \mathcal{C}_0$ и ортогональное разложение единицы E_0 в \mathcal{C} , такие что для любого оператора плотности S в \mathcal{H} имеет место формула (1.10).

В основе этой теоремы лежит следующая комбинация теоремы Наймарка и теоремы Стайнспринга: если \mathcal{P} - вполне положительный инструмент (в алгебре наблюдаемых), то существует гильбертово пространство \mathcal{K} , изометрический оператор V из \mathcal{H} в \mathcal{K} , ортогональное разложение единицы E в \mathcal{K} и нормальный *-гомоморфизм π из $\mathcal{B}(\mathcal{K})$ в $\mathfrak{F}(\mathcal{X})$, такие что $[E(B), \pi[X]] = 0$ для всех $B \in \mathcal{B}(\mathcal{C}), X \in \mathcal{B}(\mathcal{C})$ и

$$\mathcal{P}(B)[X] = V^* E(B) \pi[X] V$$

Пространство \mathcal{K} превращается в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$ с помощью рассуждений, которые были использованы при доказательстве формулы (3.1.4).

Из (1.11) выводится аналог представления (3.1.4) для вполне положительного инструмента

$$\mathcal{P}(B)[X] = \int_B \sum_{n=1}^{\infty} V_n(x)^* X V_n(x) \mu(dx)$$

где μ - σ -конечная мера на \mathcal{R} , а $V_n(x)$ - μ -измеримые функции на \mathcal{X} со значениями в $\mathcal{O}(\mathcal{H})$, такие что

$$\int_{\mathcal{Q}} \sum_{k=1}^{\infty} V_n(x)^* V_n(x) \mu(dx) = I$$

Соответствующий инструмент в пространстве состояний имеет вид

$$\mathcal{K}(B)[S] = \int_B \sum_{n=1}^{\infty} V_n(x) S V_n(x)^* \mu(dx)$$

При этом распределение вероятностей в состоянии S дается формулой

$$\mu_S(B) = \int_B \sum_{n=1}^{\infty} \text{Tr } S V_n(x)^* V_n(x) \mu(dx)$$

$$S_x = \sum_{n=1}^{\infty} V_n(x) S V_n(x)^* \mid \sum_{n=1}^{\infty} \text{Tr } S V_n(x)^* V_n(x)$$

1.3 Три уровня описания квантовых измерений.

Теорема Озава имеет принципиальное значение, поскольку демонстрирует согласованность понятия (вполне положительного) инструмента со стандартным формализмом квантовой механики. Описание измерения в обобщенной статистической модели квантовой механики может быть осуществлено с различной степенью подробности. Имеется три основных уровня описания, каждому из которых отвечает определенный математический объект в гильбертовом пространстве системы:

1. Задана только статистика исходов измерения. Как показано в п. 2.1.2, это эквивалентно заданию обобщенной наблюдаемой, т. е. некоторого разложения единицы в \mathcal{H} .
2. Кроме статистики, задан закон преобразования состояний в зависимости от исхода измерения. На этом уровне адекватное описание измерения дается понятием инструмента. Каждому инструменту по формуле (1.5) отвечает обобщенная наблюдаемая, однако это соответствие не взаимно однозначно, поскольку инструмент дает более подробное описание измерения, нежели наблюдаемая.
3. Задано динамическое описание взаимодействия системы с пробной системой. Этот уровень является еще более подробным: каждому инструменту по формуле (1.10) может соответствовать множество различных процедур косвенного измерения. Детальность схемы косвенного измерения зависит от того, где в измерительном приборе проводится черта между «пробной системой» и «детектором», осуществляющим прямое измерение.

С точки зрения физических приложений представляет большой интерес вопрос о реализуемости той или иной теоретической схемы квантового измерения. Высказывалась мысль (см., например, статью «Проблема измерения» в сборнике [11]), что хотя квантовая механика правильно отражает некоторые черты микромира, далеко не все, что содержится в ее математической модели, может иметь свой прототип в реальности. Известны общие ограничения типа правил суперотбора (см., например, [23]), которые постулируют измеримость только наблюдаемых, совместимых с некоторой выделенной величиной типа заряда. В связи со схемой косвенного измерения возникают следующие вопросы:

1. Соответствует ли данному унитарному оператору U реальное квантовомеханическое взаимодействие?

2. Соответствует ли данной наблюдаемой A реально измеримая физическая величина?

Подробное обсуждение таких вопросов выходит за рамки настоящего обзора, но некоторые комментарии здесь все же необходимы. В работах Ваневского [165] и Мельника [129] показано, что всякий унитарный оператор может быть получен из шрёдингеровской эволюции с некоторым потенциалом, зависящим от времени. Таким образом, первый вопрос сводится к реализуемости потенциалов в квантовой механике. С другой стороны, в п. 1.5 будет показано, что второй вопрос сводится к первому для взаимодействий специального вида. Практически, конечно, эти вопросы могут быть совсем не просты и требуют отдельного рассмотрения в каждой конкретной задаче измерения (см. в этой связи поучительное обсуждение «приемника Долинара» в [37, гл. VI] и в [18]).

1.4. Воспроизводимость. Пусть S -оператор плотности, $\mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_n$ - последовательность инструментов со значениями в измеримых пространствах $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$. Из постулатов (1.3), (1.4) следует, что величина

$$\begin{aligned} \mu_S^{\mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_n} (B_1 \times \dots \times B_n) &= \\ &= \text{Tr } \mathcal{M}_n (B_n) [\dots \mathcal{M}_1 (B_1) [S] \dots] \end{aligned}$$

где $B_j \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ есть вероятность того, что в последовательности измерений, задаваемых инструментами $\mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_n$, над системой, первоначально находившейся в состоянии S , будут получены исходы $x_j \in B_j; j = 1, \dots, n$. Если $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$ - стандартные измеримые пространства, то функция множеств (1.12), заданная на параллелепипедах $B_1 \times \dots \times B_n$, однозначно продолжается до вероятностной меры на σ -алгебре $\mathcal{B}(\mathcal{R}\mathcal{X}_1) \times \dots \times \mathcal{B}(\mathcal{X}_n)$ (см. [78, 4.2]). Соотношение (1.15) можно записать также в виде

$$\begin{aligned} \mu_S^{\mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_n} (B_1 \times \dots \times B_n) &= \\ &= \text{Tr } S \mathcal{P}_1 (B_1) [\dots \mathcal{P}_n (B_n) [1] \dots] \end{aligned}$$

В случае инструментов, соответствующих проекционному постулату (1.6), соотношение (1.15) переходит в формулу Вигнера (см. статью «Проблема измерения» в сборнике [11]).

Рассмотрим повторное измерение, описываемое инструментом \mathcal{M} . Инструмент \mathcal{M} называется воспроизводимым, если

$$\mathcal{M} (B_1) [\mathcal{M} (B_2) [S]] = \mathcal{M} (B_1 \cap B_2) [S]; B_1, B_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

для любого оператора плотности S . Это свойство является математическим выражением гипотезы воспроизводимости, гласящей, что «если физическая величина дважды измеряется на системе \mathcal{P} , причем измерения следуют непосредственно одно за другим, то в обоих случаях получается одно и то же значение» (см. [26, гл. IV, п. 3]).

Рассмотрим инструмент со счетным множеством исходов $\mathcal{Z} = \{x_1, x_2, \dots\}$ и положим $\mathcal{M}_i = \mathcal{M}(\{x_i\})$.

Предложение ([134], [78]). Всякий инструмент вида (1.6) обладает свойствами:

1. $\mathcal{M}_i [\mathcal{M}_j [S]] = \delta_{ij} \mathcal{M}_i [S]$ (воспроизводимость);
2. если $\text{Tr } \mathcal{M}_i [S] = 1$, то $\mathcal{M}_i [S] = S$ (минимальность возмущения);
3. если $X \geq 0$ и $\mathcal{M}_i^* [X] = 0$ для $i = 1, 2, \dots$, то $X = 0$ (невыврожденность). (1.6).

Обратно, всякий инструмент с этими свойствами имеет вид

Таким образом, проекционный постулат (1.6) можно рассматривать как следствие ряда физически содержательных свойств соответствующего инструмента, включающих воспроизводимость. Как уже отмечалось, в случае непрерывного спектра возникают принципиальные трудности, которые в наиболее ясной форме выражаются следующей теоремой

Т е о р е м а (Озава [134]). Пусть \mathcal{X} - стандартное измеримое пространство. Всякий инструмент со значениями в \mathcal{X} , обладающий свойством воспроизводимости (1.17), с необходимостью является дискретным, т. е. существует счетное подмножество $\mathcal{X}_0 \subset \mathcal{X}$, такое что $\mathcal{M}(\mathcal{X} \setminus \mathcal{X}_0)[S] = 0$ для всех S .

Доказательство. Рассмотрим точное состояние, задаваемое невырожденным оператором плотности S . Согласно п. 1.1, существует семейство апостериорных состояний $\{S_x\}$. Пусть $\{B_n\}$ - счетная подалгебра, порождающая $\mathcal{B}(\mathcal{X})$. Обозначая $M(B) = \mathcal{M}(B) * [I]$ и используя воспроизводимость, имеем

$$\begin{aligned} \int_B \text{Tr } S_x M(B_n) \mu_S(dx) &= \text{Tr } \mathcal{M}(B)[S] M(B_n) = \\ &= \text{Tr } \mathcal{N}(B \cap B_n)[S] = \int_B 1_{B_n}(x) \mu_S(dx), \end{aligned}$$

откуда $\text{Tr } S_x M(B_n) = 1_{B_n}(x)$ для μ_S -почти всех $x \in \mathcal{X}$. Поэтому найдется подмножество $\mathcal{X}_0 \subset \mathcal{X}$, такое что $\mathcal{M}(\mathcal{X} \setminus \mathcal{X}_0)[S] = 0$ и

$$\text{Tr } S_x M(B) = 1_B(x); x \in \mathcal{X}_0, B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

Но тогда $\text{Tr } S_x M(\{x\}) = 1, x \in \mathcal{X}_0$, т. е. $M(\{x\}) \neq 0$ и $\mu_S(\{x\}) \neq 0$, откуда следует, что \mathcal{X}_0 счетно.

В примере 1 апостериорные состояния (1.7) таковы, что в этих состояниях (дискретная) наблюдаемая A с вероятностью 1 имеет определенное значение x_j . Причина трудностей с непрерывным спектром связана с тем, что (алгебраическое) состояние, в котором непрерывная наблюдаемая A имеет определенное значение, не может быть нормальным (т. е. задаваться каким-либо оператором плотности).

1.5. Измерения непрерывных наблюдаемых. В работах Шриниваза [153] и Озава [136] указана возможность описания воспроизводимых измерений непрерывных наблюдаемых, использующая состояния и инструменты, не удовлетворяющие условию нормальности.

Пусть $A = \int_{-\infty}^{\infty} x E_A(dx)$ - вещественная наблюдаемая и пусть η -какое-либо инвариантное среднее ¹⁾ на пространстве $C(\mathbf{R})$ ограниченных непрерывных функций на \mathbf{R} . Следуя [153], рассмотрим отображение \mathcal{E}_η^A алгебры $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ в себя, определяемое формулой

$$\text{Tr } S \mathcal{E}_\eta^A[X] = \eta_y(\text{Tr } S e^{iyA} X e^{-iyA})$$

где индекс y означает, что усреднение происходит по переменной y , и функцию множеств

$$\mathcal{S}_A(B)[X] = E_A(B) \mathcal{E}_\eta^A[X]; \quad B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

Отображение \mathcal{E}_η^A является условным ожиданием на коммутативную подалгебру $\{E_A(B); B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})\}' = \mathcal{P}_A$, порожденную; наблюдаемой A . Если A имеет чисто точечный спектр, то \mathcal{E}_η^A есть нормальное условное ожидание, задаваемое формулой (3.1.5), а соотношение (1.18) совпадает с проекционным постулатом (1.6). В общем

случае отображение \mathcal{E}_η^A не нормальное, а функция множеств (1.18) обладает всеми свойствами воспроизводимого инструмента, кроме нормальности.

Вероятности последовательного измерения наблюдаемых A_1, \dots, A_n даются обобщением формулы (1.16)

$$\begin{aligned} \mu_S^{A_1, \dots, A_n}(B_1 \times \dots \times B_n) = \\ = \text{Tr } S \mathcal{P}_{A_1}(B_1) [\dots \mathcal{P}_{A_n}(B_n) [I] \dots]. \end{aligned}$$

Если A_1, \dots, A_n совместимы, то $\mathcal{E}_\eta^{A_j}[E_{A_k}(B)] = E_{A_k}(B)$, откуда

$$\mu_S^{A_1, \dots, A_n}(B_1 \times \dots \times B_n) = \text{Tr } S E_{A_1}(B_1) \dots E_{A_n}(B_n)$$

т. е. распределение вероятностей последовательных точных измерений совместимых наблюдаемых совпадает с распределением точного совместного измерения этих наблюдаемых (см. п. 1.1.5) - результат, который подтверждает правомерность «обобщенного проекционного постулата» (1.18).

С другой стороны, если A_j несовместимы, то из-за не нормальности отображений $\mathcal{E}_\eta^{A_j}$, функция множеств (1.18) может оказаться лишь конечно аддитивной на (\mathbf{R}) . Для того чтобы восстановить σ -аддитивность, необходимо рассматривать распределение на компактификации вещественной прямой $\bar{\mathbf{R}} = \mathbf{R} \cup \{-\infty\} \cup \{\infty\}$. Например, после точного измерения наблюдаемой координаты Q система переходит в не нормальное состояние, в котором импульс P с положительными вероятностями принимает значения $\pm\infty$ [153].

1. См. Ф. Гринлиф. Инвариантные средние на топологических группах и их приложения.- М.: Мир, 1973.

Озава [136] построил процесс косвенного измерения, отвечающий обобщенному проекционному постулату (1.18) и разъяснил роль инвариантного среднего η . Рассмотрим наблюдаемые Q, P во вспомогательном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_0 = L^2(\mathbf{R})$, которое будет описывать «пробную систему». Пользуясь теоремой Банаха о продолжении, можно показать, что для любого η на алгебре $\mathfrak{B}(\mathcal{H}_0)$ существует (не нормальное) состояние E_n , такое, что

$$E_\eta(f(Q)) = f(Q), E_\eta(f(P)) = \eta(f)$$

для любой $f \in C(\mathbf{R})$. Пусть $U_t = \exp(-itH_{\text{Int}})$ - унитарная эволюция в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$, где

$$H_{\text{Int}} = \lambda(A \otimes P)$$

причем λ может быть выбрано произвольно большим, чтобы пренебречь свободной динамикой системы и прибора. В [136] показано, что для любого (нормального) состояния S и любого $X \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$

$$\text{Tr } S \mathcal{P}_A(B)[X] = (E_S \otimes E_\eta)(U_{1/\lambda}^*(X \otimes E_Q(B))U_{1/\lambda}); \quad B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

Таким образом, пробная система, находящаяся в состоянии E_η с точно определенной координатой, в течение времени $1/\lambda$ взаимодействует с наблюдаемой системой согласно (1.21), после чего производится точное измерение координаты пробной системы.

Такая схема является обобщением процедуры косвенного измерения, рассмотренной фон Нейманом в случае чисто точечного спектра ([26, гл. VI, п. 3]). В принципиальном плане она сводит измерение произвольной квантовой наблюдаемой к измерению координаты пробной системы, при условии реализуемости гамильтониана взаимодействия (1.21).

4.4.2 2. Процессы непрерывного измерения

2.1. Неразрушающие измерения.

Рассмотрим изолированную квантовую систему, эволюция которой описывается группой унитарных операторов $\{U_t; t \in \mathbf{R}\}$ в гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Пусть $\{A_{jt}; j = 1, \dots, m; t \in T\}$, где $T \subset \mathbf{R}$ - семейство вещественных наблюдаемых. Обозначим

$$A_j(t) = U_t^* A_{jt} U_t; \quad t \in T$$

и предположим, что для любых моментов времени $t_1 < \dots < t_n$ и любых j_1, \dots, j_n наблюдаемые $A_{j_1}(t_1), \dots, A_{j_n}(t_n)$ со в м стимы. Согласно формуле (1.20), последовательное точное измерение наблюдаемых $A_{j_1}(t_1), \dots, A_{j_n}(t_n)$ ($j_k = 1, \dots, m$) имеет распределение вероятностей

$$\mu_S(B_1 \times \dots \times \bar{D}_n) = \text{Tr} S E_{(t_1)}(B_1) \dots E_{(t_n)}(B_n)$$

где $B_k \in \mathcal{B}(\mathbf{R}^m)$ и $E_{(t_k)}$ -совместная спектральная мера наблюдаемых $A_j(t_k); j = 1, \dots, m$.

Семейство вероятностных мер (2.2) при всевозможных $n = 1, 2, \dots; t_1, \dots, t_n$ является согласованным. Используя теорему А. Н. Колмогорова о продолжении, можно доказать, что существует единственное ортогональное разложение единицы \mathbf{E} на $\mathcal{B}(\mathbf{R}^T)$, где $\mathcal{B}(\mathbf{R}^T)$ — σ -алгебра цилиндрических множеств на пространстве траекторий \mathbf{R}^T такое, что

$$E(x(\cdot) : x(t_1) \in B_1, \dots, x(t_n) \in B_n) = E_{(t_1)}(B_1) \dots E_{(t_n)}(B_n)$$

Оно описывает статистику непрерывного (во времени) точного измерения семейства совместимых наблюдаемых (2.1), в том смысле, что вероятность подмножества B в пространстве траекторий есть

$$\mu_S(x(\cdot) \in B) = \text{Tr} S E(B)$$

В физике подобные измерения получили название неразрушающих и привлекли внимание, в связи с задачей обнаружения слабой силы (гравитационной волны), действующей на пробную систему [69], [140].

П р и м е р. Квантовомеханический осциллятор массы m и с частотой ω , возбуждаемый скалярной силой $\varphi(t)$, описывается уравнениями

$$\dot{Q}(t) = m^{-1}P(t), \quad \dot{P}(t) = -m\omega^2 Q(t) + \varphi(t)\mathbf{I},$$

где $Q(0) = Q$, $P(0) = P$ -канонические наблюдаемые, т. е. $[P, Q] = i$. Положим $A_{1t} = Q \cos \omega t - (P/m\omega) \sin \omega t$, так что

$$A_1(t) = Q(t) \cos \omega t - (P(t)/m\omega) \sin \omega t.$$

Из уравнений (2.3)

$$\dot{A}_1(t) = -(\varphi(t)/m\omega) \sin \omega t \mathbf{I}$$

поэтому наблюдаемые $A_1(t)$ совместимы при разных t и возможно непрерывное неразрушающее измерение семейства $\{A_1(t)\}$. Сила $\varphi(t)$ может быть определена по любой траектории из соотношения (2.4).

Аналогично, для $A_{2t} = P \cos \omega t + m\omega Q \sin \omega t$ получаем семейство совместимых наблюдаемых

$$A_2(t) = P(t) \cos \omega t + m\omega Q(t) \sin \omega t$$

для которого $\dot{A}_2(t) = \varphi(t) \cos \omega t$. Заметим, что $A_1(t)$ и $A_2(t)$ несовместимы, поскольку $[A_2(t), A_1(t)] = iI$. Действуя в духе п. 2.1.3, рассмотрим семейство совместимых наблюдаемых

$$\tilde{A}_1(t) = A_1(t) \otimes I_0 - I \otimes Q_0; \quad \tilde{A}_2(t) = A_2(t) \otimes I_0 + I \otimes P_0$$

в пространстве $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$ (см. [103]). Сила $\varphi(t)$ определяется тогда из соотношения

$$\varphi(t) = \cos \omega t \dot{\tilde{A}}_2(t) - m\omega \sin \omega t \dot{\tilde{A}}_1(t).$$

2.2. «Квантовый парадокс Зенона». Попытки рассмотрения непрерывных измерений несовместимых наблюдаемых, опирающиеся на проекционный постулат, приводят к парадоксальным выводам, в основе которых лежит следующий математический факт. Пусть H - самосопряженный оператор из $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, E - проектор, тогда

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (E \exp(itH/n) E)^n = E \exp(itEHE)$$

Это следует из того, что $\|\exp(itH/n) - I - itH/n\| = o(1/n)$ и $E^2 = E$. Обобщение этого результата на случай неограниченного H является непростой задачей; некоторые условия были получены Фридманом [86]. Его результаты включают случай, когда $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}^n)$, $H = -\Delta/2m$ - гамильтониан свободной частицы в \mathbf{R}^n , а $E = 1_{\mathcal{D}}(\cdot)$ - индикатор ограниченной области $\mathcal{D} \subset \mathbf{R}^n$ с гладкой границей.

Рассмотрим свободную частицу, эволюционирующую на временном интервале $[0, t]$, и предположим, что в каждый момент времени $tk/n, k = 0, 1, \dots, n$, производится точное измерение наблюдаемой E , описываемое проекционным постулатом (1.6). Если исход измерения равен 1, то это означает, что частица находится в области \mathcal{D} . Вероятность того, что во всех $n + 1$ измерениях получен исход 1, есть

$$\mu_B(1, \dots, 1) = \text{Tr}(E \exp(itH/n) E)^n S(E \exp(itH/n) E)^n$$

и при $n \rightarrow \infty$ в силу (2.6) стремится к

$$\text{Tr} E \exp(itEHE) S_0 \exp(-itEHE) E = \text{Tr} S_0 E$$

где S_0 - начальное состояние. Если в начальный момент частица находится в области \mathcal{D} , то вероятность (2.7) равна 1 независимо от эволюции, т. е. при непрерывном точном измерении местоположения частица никогда не покидает область \mathcal{D} (см. также Дэвис [78, п. 7.4]). Необычные физические следствия соотношения (2.6) были подробно рассмотрены в работе Мисры и Сударшана [130], где для них было предложено общее название «квантовый парадокс Зенона».

Причина парадокса состоит в том, что измерение, описываемое проекционным постулатом, переводя состояние системы в состояние, отвечающее точно определенному значению наблюдаемой, производит конечное изменение, на фоне которого эффект эволюции за время t/n является пренебрежимо малым при $n \rightarrow \infty$. Чтобы избежать этого и получить нетривиальный предельный процесс непрерывного измерения, включающий эволюцию, Баркиелли, Ланц и Проспери [59], [60], предложили рассматривать последовательность неточных измерений, точность которых убывает пропорционально числу измерений n . Первоначально описание предельного процесса в частных случаях связывалось с фейнмановским интегралом по траекториям (ср. в этой связи также Менский [25]), однако общая картина прямо основывается на идеях,

изложенных в §1, в частности на понятии инструмента. В работах А. С. Холево [47], [102] было указано на параллель такого подхода с классическими предельными теоремами в схеме серий, причем предельный процесс непрерывного измерения оказывается некоммутативным аналогом процесса с независимыми приращениями. Подобно классическому случаю, все такие процессы описываются некоторой формулой типа Леви-Хинчина [102], [35]. Квантовые случайные процессы в смысле Дэвиса [78] с этой точки зрения соответствуют сложному пуассоновскому процессу. Далее кратко излагаются результаты этих работ.

2.3. Предельная теорема для сверток инструментов. Для простоты ограничимся измерениями со значениями в \mathbf{R} (существенно лишь, что пространство значений является абелевой локально компактной группой; см. [102], [35]). Пусть $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_n$ - инструменты (в алгебре наблюдаемых) со значениями в \mathbb{R} . Существует единственный инструмент \mathcal{P} со значениями в \mathbf{R}^n , такой что

$$\mathcal{P}(B_1 \times \dots \times B_n)[X] = \mathcal{P}_1(B_1)[\dots \mathcal{P}_n(B_n)[X] \dots]; B_j \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

Свертка инструментов $\mathcal{P}_1, \dots, \mathcal{N}_n$ определяется соотношением $\mathcal{N}_1 * \dots * \mathcal{N}_n(B)[X] = \mathcal{P}((x^1, \dots, x_n) : x_1 + \dots + x_n \in B); B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$

и, согласно формуле (1.13), описывает статистику суммы исходов n последовательных измерений, отвечающих инструментам $\mathcal{P}_1, \dots, \mathcal{N}_n$. Инструмент \mathcal{N} со значениями в \mathbf{R} называется безгранично-делимым, если для любого $n = 1, 2, \dots$ найдется инструмент $\mathcal{N}_{(n)}$ такой, что $\mathcal{N} = \mathcal{N}_{(n)} * \dots * \mathcal{N}_{(n)} \equiv \mathcal{N}_{(n)}^{*n}$. Проблема непрерывного измерения оказывается тесно связанной с пределами n -кратных сверток вида $\mathcal{P}_{(n)}^{*n}$ при $n \rightarrow \infty$ и структурой безгранично-делимых инструментов. Решение этих вопросов опирается на некоторое обобщение метода характеристических функций в теории вероятностей.

Обозначим \mathfrak{F}_σ банахову алгебру w^* -непрерывных линейных отображений $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$ в себя с произведением $\Phi \cdot \Psi[X] = \Phi[\Psi[X]]$. Единицей в этой алгебре является тождественное отображение, обозначаемое Id . В алгебре \mathfrak{F}_σ вводится топология τ , определяемая семейством полунорм

$$\|\Phi\|_S = \sup_{\|X\| < 1} |\text{Tr } S\Phi[X]|, \quad S \in \subseteq(\mathcal{C})$$

Характеристическая функция инструмента определяется соотношением

$$\Phi(\lambda)[\ddot{\Lambda}] = \int_{\mathbf{R}} e^{i\lambda x} \mathcal{P}(d\lambda)[\tilde{X}]$$

где интеграл сходится в топологии τ . Функция $\Phi(\lambda)$ со значениями в \mathfrak{F}_σ является характеристической функцией вполне положительного инструмента тогда и только тогда, когда

1. $\Phi(0)[I] = I$;
2. $\Phi(\lambda)\tau$ -непрерывна в точке $\lambda = 0$;
3. $\Phi(\lambda)$ положительно определена в следующем смысле: для любых конечных наборов $\{\psi_j\} \subset \mathcal{H}, \{\lambda_j\} \subset \mathbb{R}, \{X_j\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{B})$

$$\sum_{j,k} \langle \psi_j | \Phi(\lambda_k - \lambda_j) [\lambda_j^* X_k^*] \psi_k \rangle \geq 0$$

(аналог теоремы Бохнера-Хинчина, сводящийся к ней в случае $\dim \mathcal{H} = 1$).

Характеристическая функция свертки $\mathcal{P}_1 \dots \mathcal{P}_n$ есть поточечное произведение соответствующих характеристических функций $\Phi_1(\lambda) \cdot \dots \Phi_n(\lambda)$, поэтому n -кратная свертка $\mathcal{P}_{(n)}^{*n}$ имеет характеристическую функцию $\Phi_{(n)}(\lambda)^n$, где $\Phi_{(n)}(\lambda)$ - характеристическая функция инструмента $\mathcal{P}_{(n)}$. Распределение вероятностей $\mu_s^{(n)}$ суммы n повторных измерений, описываемых инструментом $\mathcal{P}_{(n)}$, определяется формулой

$$\int_{\mathbf{R}} e^{i\lambda x_{\mu}^{(n)}}(dx) = \text{Tr } S\Phi_{(n)}(\lambda)^n[1]$$

Следующее утверждение является аналогом центральной предельной теоремы в схеме серий.

Предложение. Пусть $\{\mathcal{P}_{(n)}\}$ - последовательность вполне положительных инструментов и пусть существует τ - непрерывный предел

$$\tau - \lim_{n \rightarrow \infty} n(\Phi_{(n)}(\lambda) - \text{Id}) = \mathcal{L}(\lambda)$$

Тогда свертки $\mathcal{P}_{(n)}^{*n}$ слабо сходятся к безгранично делимому инструменту \mathcal{P} с характеристической функцией $\exp \mathcal{L}(\lambda)$ ¹¹ в том смысле, что

$$\tau - \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbf{R}} f(x) \mathcal{P}_{(n)}(dx) = \int_{\mathbf{R}} f(x) \mathcal{N}^P(dx)$$

для всех непрерывных ограниченных функций $f(x)$.

Заметим, что аналог классического условия асимптотической пренебрегаемости

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\Phi_{(n)}(\lambda) - \text{Id}\| = 0$$

1. Имеется в виду экспонента в банаховой алгебре σ . в общем случае не влечет (2.9). Вопрос об описании возможных пределов $\tau - \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi_{(n)}(\lambda)$ при одном этом условии остается открытым.

Пример. Пусть A, H - (ограниченные) вещественные наблюдаемые, $p(x)$ - плотность распределения вероятностей на \mathbf{R} , удовлетворяющая условиям (1.8). Рассмотрим вполне положительный инструмент

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{(n)}(B)[X] &= e^{itH/n} \sqrt{n} \int_B \sqrt{p\left(\sqrt{n}x\text{I} - \frac{1}{\sqrt{n}}A\right)} \times \\ &\times x \sqrt{p\left(\sqrt{n} \times \text{I} - \frac{1}{\sqrt{n}}A\right)} dx e^{-itH/n} \end{aligned}$$

Свертка $\mathcal{P}_{(n)}^{*n}$ имеет следующую статистическую интерпретацию. Рассмотрим квантовую систему, динамика которой на интервале $[0, t]$ описывается гамильтонианом H . В моменты времени $t_j = jt/n; j = 0, 1, \dots, n-1$, производится приближенное измерение наблюдаемой A с дисперсией $n\sigma^2 = n \int x^2 p(x) dx$, а затем берется среднее $\frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \alpha(t_j^{(n)})$ полученных результатов $\alpha(t_j^{(n)})$ (которое имеет дисперсию σ^2). Предел при

$n \rightarrow \infty$ соответствует среднему $\frac{1}{t} \int_0^t \alpha(\tau) d\tau$ результатов $\alpha(\tau)$ некоторого «непрерывного измерения» наблюдаемой A . Вычисления показывают, что для достаточно гладкой плотности $p(x)$ предел (2.9) равен

$$\mathcal{L}(\lambda)[X] = it[H, X] + \\ + \frac{1}{4}J(AXA - A^2 \circ X) + i\lambda A \circ X - \frac{1}{2}\sigma^2 \lambda 2X$$

где $J = \int p'(x)^2 p(x)^{-1} dx$ - информационное количество Фишера для семейства плотностей $\{p(x + \theta)\}$ с параметром сдвига $\theta \in \mathbb{R}$, так что $\sigma^2 J \geq 1$.

2.4. Сверточные полугруппы инструментов. Следующий результат типа теоремы Шенберга (см., например, [96], [138]) перебрасывает мост между скалярными условно положительно определенными функциями и вполне диссипативными отображениями (п. 3.2.2). В F_σ .

Предложение. Пусть $\mathcal{L}(\lambda)$ - функция со значениями. Следующие условия эквивалентны:

1. $\exp t\mathcal{L}(\lambda)$ положительно определена для всех $t \geq 0$;
2. функция $\mathcal{L}(\lambda)$ эрмитова, т. е. $\mathcal{L}(-\lambda)[X^*] = \mathcal{L}(\lambda)[X]^*$ и условно положительно определенная, т. е. для любых конечных наборов $\{\psi_j\} \subset \mathcal{H}$, $\{\lambda_j\} \subset \mathbb{R}$, $\{X_j\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{C})$ таких, что $\sum_j X_j \psi_j = 0$ выполняется

$$\sum_{j,k} \langle \psi_j | \mathcal{L}(\lambda_k - \lambda_j) [\lambda_j^* X_k] \psi_k \rangle \geq 0$$

Для того чтобы функция $\mathcal{L}(\lambda)$ представлялась в виде предела (2.9), необходимо и достаточно, чтобы она удовлетворяла одному из условий этого предложения, была τ -непрерывна и $\mathcal{L}(0)[1] = 0$. Такие функции будем называть квазихарактеристическими.

Семейство инструментов $\{\mathcal{S}_t; t \in \mathbb{R}_+\}$ образует свертоиную полугруппу, если $\mathcal{P}_t * \mathcal{P}_s = \mathcal{P}_{t+s}$; $t, s \in \mathbb{R}_+$. Очевидно, что все инструменты \mathcal{P}_t безгранично делимы. Пусть $\Phi_t(\lambda)$ - характеристическая функция инструмента \mathcal{P}_t . Соотношение

$$\Phi_t(\lambda) = \exp t\mathcal{L}(\lambda); t \in \mathbb{R}_+$$

устанавливает взаимно однозначное соответствие между квазихарактеристическими функциями $\mathcal{L}(\lambda)$ и сверточными полугруппами вполне положительных инструментов, удовлетворяющими условию непрерывности

$$\lim_{t \rightarrow 0} \|\mathcal{P}_t(U_0) - \text{Id}\| = 0$$

для любой окрестности нуля U_0 .

Следующий результат можно рассматривать как обобщение представления Леви-Хинчина для логарифма характеристической функции безгранично делимого распределения.

Т е о р е м а. Для того чтобы функция $\mathcal{L}(\lambda)$ со значениями в F_Δ была квазихарактеристической, необходимо и достаточно, чтобы она допускала представление

$$\mathcal{L}(\lambda) = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1(\lambda) + \mathcal{L}_2(\lambda),$$

где \mathcal{L}_0 - вполне диссипативное отображение вида (3.2.5), $\mathcal{L}_1(\lambda)[\lambda^*] = \sigma^2 [(L^* X L - L^* L_0 X) + i\lambda (L^* X + X L) - \frac{1}{2}\lambda_2 X]$, (2.15) причем $\sigma^2 \geq 0$, $L \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$; т. е. функция типа (2.11);

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_2(\lambda)[X] = & \sum_{r,s=1}^{\infty} \int_{\mathbf{R} \setminus 0} (V_s^* X V_r e^{i\lambda x} - V_s^* V_{r \circ} X) \mu_{rs}(dx) + \\
& + \sum_{s=1}^{\infty} V_s^* X \int_{\mathbf{R} \setminus 0} (e^{i\lambda x} - 1) \mu_{0s}(dx) + \\
& + \sum_{r=1}^{\infty} X V_r \int_{\mathbf{R} \setminus 0} (e^{i\lambda x} - 1) \mu_{r0}(dx) + \\
& + \left[\int_{\mathbf{R}} \left(e^{i\lambda x} - 1 - \frac{i\lambda x}{1+x^2} \right) \mu_{00}(dx) + i\alpha\lambda \right] \pi
\end{aligned}$$

где $\alpha \in \mathbb{R}$, $V_s \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, а $[\mu_r, s]_{r,s=1,2,\dots}$ -положительно определенная матрица комплексных мер на $\mathbf{R} \setminus 0$, такая, что ряд

$$\sum_{r,s=1}^{\infty} \mu_{rs}(\mathbf{R} \setminus 0) V_s^* V_r \text{ сходится } w^*\text{-слабо, и}$$

$$\int_{\mathbf{R} \setminus 0} \frac{x^2}{1+x^2} \mu_{00}(dx) < \infty.$$

Доказательство формулы (2.14) использует разновидность конструкции ГНС, которая сопоставляет условно положительно определенной функции $\mathcal{L}(\lambda)$ пару коммутирующих коциклов алгебры $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ и группы \mathbf{R} , а также сведения о структуре этих коциклов [96], [84], [76] (доказательство проходит для любой алгебры фон Неймана и абелевой локально-компактной группы). Перенесение вероятностного метода, основанного на понятии сопровождающего закона, представляется в некоммутативной ситуации затруднительным.

Вероятностный смысл каждого из слагаемых в формуле (2.12) выясняется в связи с процессами непрерывного измерения.

2.5. Инструментальные процессы. Пусть \mathcal{Y} - пространство всех вещественных функций на \mathbf{R} , $\mathcal{B}_{a,b}$ - σ -алгебра, порождаемая приращениями $y(s) - y(t); a \leq t < s \leq b$. Инструментальным процессом с независимыми приращениями (и. -процессом) называется семейство $\{\mathcal{P}_{a,b}; a, b \in \mathbf{R}, a \leq b\}$, где $\mathcal{P}_{a,b}$ - инструмент (в алгебре наблюдаемых) со значениями в $(\mathcal{Y}, \mathcal{B}_{a,b})$, причем

$$\mathcal{P}_{a,b}(E) \cdot \mathcal{P}_{b,c}(F) = \mathcal{P}_{a,c}(E \cap F)$$

если $a \leq b \leq c$ и $E \in \mathcal{B}_{a,b}, F \in \mathcal{B}_{b,c}$. Если все инструменты $\mathcal{P}_{a,b}$ вполне положительны, то и. -процесс называется вполне положительным. Для любого оператора плотности S и временного промежутка $[a, b]$ и. -процесс определяет распределение вероятностей

$$\mu_s(E) = \text{Tr } S \mathcal{P}_{a,b}(E)[I]; E \in \mathcal{B}_{a,b}$$

на пространстве траекторий $y(t); t \in [a, b]$. С физической точки зрения, исходом непрерывного измерения является производная $\dot{y}(t)$, однако оказывается, что распределение (2.18) сосредоточено на недифференцируемых функциях. Это определение, данное в [102], является модификацией определения Дэвиса [78], использовавшего лишь пространство скачкообразных функций и более общего

определения Баркиелли, Ланца, Проспери [59], основанного на пространстве обобщенных функций. В случае $\dim \mathcal{H} = 1$ и.-процессы - это обычные вещественные процессы с независимыми приращениями. Всякий и.-процесс однозначно определяется набором своих конечномерных распределений, которые в силу (2.17) имеют следующую структуру

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\tau_0, \tau_p}(y(\cdot) : y(\tau_1) - y(\tau_0) \in B_1, \dots, y(\tau_p) - y(\tau_{p-1}) \in B_p) = \\ = \mathcal{P}_{\tau_0, \tau_1}(y(\cdot) : y(\tau_1) - y(\tau_0) \in B_1) \dots \\ \dots \mathcal{P}_{\tau_{p-1}, \tau_p}(y(\cdot) : y(\tau_p) - y(\tau_{p-1}) \in B_p), \end{aligned}$$

где $\tau_0 \leq \tau_1 \leq \dots \leq \tau_p$; $B_1, \dots, B_p \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$.

И.-процесс называется однородным, если для любых $a, b, \tau \in \mathbf{R}$ выполняется

$$\mathcal{P}_{a+\tau, b+\tau}(T_\tau(E)) = \mathcal{P}_{a,b}(E), \quad E \in \mathcal{B}_{a,b},$$

где $(T_\tau y)(t) = y(t + \tau)$. Соотношение

$$\mathcal{N}_t(B) = \mathcal{N}_{a,a+t}(y(\cdot) : y(a+t) - y(a) \in B); \quad B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$$

определяет тогда сверточную полугруппу инструментов, через которую конечномерные распределения выражаются по формуле

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\tau_0, \tau_p}(y(\cdot) : y(\tau_1) - y(\tau_0) \in B_1, \dots, y(\tau_p) - y(\tau_{p-1}) \in B_p) = \\ = \mathcal{P}_{\tau_1 - \tau_0}(B_1) \cdot \dots \cdot \mathcal{P}_{\tau_p - \tau_{p-1}}(B_p). \end{aligned}$$

Если и.-процесс непрерывен в том смысле, что

$$\lim_{t \rightarrow 0} \|\mathcal{P}_{a,a+t}(y(\cdot) : |y(a+t) - y(a)| \geq \varepsilon) - \text{Id}\| = 0$$

для любого $\varepsilon > 0$, то соответствующая сверточная полугруппа непрерывна в смысле (2.13), и, следовательно, ее характеристики: ческие функций имеют вид (2.12), где $\mathcal{L}(\lambda)$ - некоторая квази: характеристическая функция. Обратно пусть $\mathcal{L}(\lambda)$ - квазихарактеристическая функция, $\{\mathcal{P}_t\}$ - соответствующая сверточная полугруппа, тогда соотношение (2.20) определяет конечномерные распределения, продолжающиеся до однородного, непрерывного, вполне положительного и.-процесса $\{\mathcal{P}_{a,b}\}$. Более того, модифицируя технику продолжения теории случайных процессов¹¹, можно доказать, что и.-процесс $\{\mathcal{P}_{a,b}\}$ сосредоточен на подпространстве $\mathcal{D} \subset \mathcal{Y}$, состоящем из функций без разрывов второго рода. Функция $\mathcal{L}(\lambda)$ называется генератором н.-процесса $\{\mathcal{N}_{a,b}\}$.

Слагаемое \mathcal{L}_0 в формуле (2.14) описывает эволюцию (в общем случае необратимую) рассматриваемой квантовой системы, происходящую независимо от процесса измерения. В классическом случае ($\dim \mathcal{H} = 1$) это слагаемое вообще отсутствует. Второе слагаемое $\mathcal{L}_1(\lambda)$ описывает процесс непрерывного приближенного измерения наблюдаемой $A = \sigma^2(L + L^*)$. Соответствующий и.-процесс сосредоточен на непрерывных траекториях и отвечает классическому внеровскому процессу. Многомерное обобщение - сумма слагаемых вида (2.11) с разными операторами L_1, \dots, L_m - задает процесс непрерывного приближенного

1. См. И. И. Гихман, А. В. Скороход. Теория случайных процессов.- М.: Наука, 1973.- 2. измерения нескольких (вообще говоря, несовместимых) наблюдаемых [60]. Наконец, слагаемое $\mathcal{L}_2(\lambda)$ описывает скачкообразную компоненту процесса измерения.

Пр и м е р (ср. [78, гл. 5]). Пусть $B \rightarrow \mathcal{P}(B)$; $B \in \mathcal{B}(\mathbf{R} \setminus 0)$ - функция множеств, удовлетворяющая определению (вполне положительного) инструмента (см. п. 1.1), за исключением условия нормировки 2). Таким образом, $C = \mathcal{P}(\mathbf{R} \setminus 0)[I]$ - некоторый положительный оператор. Соотношение

$$\mathcal{L}(\lambda)[X] = \int_{\mathbf{R} \setminus 0} e^{i\lambda x \mathcal{P}}(dx)[X] - C \circ X + i[H, X]$$

определяет квазихарактеристическую функцию, представляющую собой первое слагаемое в формуле (2.16). Однородный и.-процесс $\{\mathcal{P}_{a,b}\}$ с генератором (2.22) имеет кусочно-постоянные траектории; пусть, например, $F \subset \mathcal{D}$ - подмножество траекторий, имеющих ровно m скачков на отрезке $[a, b]$, причем j -й скачок происходит на интервале $\Delta_j \subset [a, b]$ и имеет величину $h_j \in B_j$, где $B_j \in \mathcal{B}(\mathbf{R} \setminus 0)$. Если интервалы $\Delta_1, \dots, \Delta_m$ следуют друг за другом без пересечений, то

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{a,b}(F) = & \int_{\Delta_1} \dots \int_{\Delta_m} e^{(t_1-a)\mathcal{L}_0 \cdot \mathcal{P}}(B_1) \cdot \dots \mathcal{P}(B_m) \times \\ & \times e^{(b-t_m)\mathcal{L}_0} dt_1 \dots dt_m, \end{aligned}$$

где $\mathcal{L}_0[X] = -C \cdot X + i[H, X]$. Особенно просто устроен аналог пуассоновского процесса с генератором

$$\mathcal{L}(\lambda)[X] = \mu(e^{i\lambda h} U^* X U - X) + i[H, X]$$

где U - изометрический оператор. Это считающий процесс [154], для которого скачки траектории фиксированной величины h происходят в случайные моменты времени, имеющие экспоненциальное распределение с параметром $\mu > 0$. В момент скачка состояние преобразуется по формуле $S \rightarrow USU^*$, а между скачками эволюционирует согласно закону

$$S \rightarrow e^{-\mu t} e^{-iHt} S e^{i\#t}.$$

Рассмотрим вкратце вопрос о сходимости повторных измерений к процессу непрерывного измерения. Пусть временная ось \mathbf{R} разбита на промежутки $[t_i^{(n)}, t_{l+1}^{(n)}]$ длины $1/n$, и каждому моменту времени отвечает измерение, описываемое вполне положительным инструментом $\mathcal{P}_{(n)}$ с характеристической функцией $\Phi_{(n)}(\lambda)$. Серия таких повторных измерений естественным образом определяет и.-процесс $\{\mathcal{P}_{a,b}\}$, траекториями которого являются кусочно-постоянные функции (см. [102]). Обозначим

$$\mu_{S,X}^{(n)}(B) = \text{Tr } S \mathcal{P}_{a,b}^{(n)}(E)[X]; \quad E \in \mathcal{B}_{a,b}$$

где $X \geq 0$.

Т е о р е м а. Пусть существует τ -непрерывный предел

$$\tau - \lim_{n \rightarrow \infty} n(\Phi_{(n)}(\lambda) - \text{Id}) = \mathcal{L}(\lambda)$$

причем $\sup_n \sup_{|\lambda| \leq 1} n \|\Phi_{(n)}(\lambda) - \text{Id}\| < \infty$. Тогда последовательность мер $\{\mu_{S,x}^{(n)}\}^n$ сходится в топологии Скорохода к мерам

$$\mu_{S,X}(E) = \text{Tr } S \mathcal{P}_{a,b}(E)[X^-]$$

где $\{\mathcal{P}_{a,b}\}$ -однородный вполне положительный и.-процесс с генератором $\mathcal{L}(\lambda)$.

В частности, последовательность повторных приближенных измерений наблюдаемой A из примера п. 2.3 сходится к процессу непрерывного измерения с генератором (2.11).

В случае $\dim \mathcal{H} = 1$ этот результат переходит в теорему А. В. Скорохода о сходимости сумм независимых случайных величин к процессу с независимыми приращениями.

Знание генератора и.-процесса позволяет в принципе определить основные вероятностные характеристики распределения (2.18) в пространстве траекторий, в частности, произвольные смешанные моменты [60]. На этом основаны квантово-статистические приложения рассматриваемой теории. В работе [103] проведено сравнение оценок неизвестной силы, действующей на открытую квантовую систему, построенных на основе различных процессов непрерывного измерения. Статистика считающих процессов рассматривалась в работах [154], [18].

4.5 ПРОЦЕССЫ В ПРОСТРАНСТВЕ ФОКА

4.6 §1. Квантовое стохастическое исчисление

1.1. Основные определения. Пусть \mathfrak{h} -гильбертово пространство. Симметричное пространство Фока, ассоциированное с \mathfrak{h} , -определяется как

$$\Gamma(\mathfrak{h}) = \sum_{n=0}^{\infty} \oplus \Gamma_n(\mathfrak{h})$$

где $\Gamma_0(\mathfrak{h}) = \mathbf{C}$, $\Gamma_n(\mathfrak{h}) = \mathfrak{h}^{sn}$ - симметризованная n -я тензорная степень пространства \mathfrak{h} (см. п. 1.3.1). $\Gamma_n(\mathfrak{h})$ называется n -частичным подпространством, $\Gamma_0(\mathfrak{h})$ - вакуумным подпространством. В квантовой физике $\Gamma(\mathfrak{h})$ описывает систему из переменного (неограниченного) числа частиц (бозонов [6], [7]).

В интересующем нас случае, когда $\mathfrak{h} = L^2(\mathbf{R}_+)$, пространство Фока $\Gamma(\mathfrak{h})$ состоит из бесконечных последовательностей

$$\psi = [f_0, f_1(t), \dots, f_n(t_1, \dots, t_n), \dots]$$

где $f_0 \in \mathbf{C}$, $f_n(t_1, \dots, t_n)$ -комплексная симметричная квадратично-интегрируемая функция от $t_1, \dots, t_n \in \mathbf{R}_+$, причем

$$\langle \psi | \psi \rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} |f_n(t_1, \dots, t_n)|^2 dt_1 \dots dt_n < \infty.$$

Удобная модификация этого представления была предложена Маассеном в [142]. Пусть $\tau = \{t_1, \dots, t_n\}$ -цепь в \mathbf{R}_+ , т. е. подмножество \mathbf{R}_+ конечной мощности $|\tau| = n$, упорядоченное так, что $t_1 < \dots < t_n$. Обозначая \mathfrak{P} множество всех цепей, \mathfrak{P}_n - множество цепей мощности n , имеем $\mathfrak{P} = \bigcup_{n=0}^{\infty} \mathfrak{P}_n$, где $\mathfrak{P}_0 = \{\emptyset\}$. Определим на \mathfrak{P} -конечную меру $\mu(d\tau)$, которая совпадает с мерой $dt_1 \dots dt_n$ на \mathfrak{P}_n , $n > 0$, и $\mu(\emptyset) = 1$. Для $\psi \in \Gamma(\mathfrak{h})$ положим $\psi(\tau) = f_n(t_1, \dots, t_n)$, если $|\tau| = n > 0$ и $\psi(\emptyset) = f_0$. Симметричная функция f_n однозначно определяется своим ограничением на \mathfrak{P}_n , причем $\frac{1}{n!} \int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} |f_n(t_1, \dots, t_n)|^2 dt_1 \dots dt_n = \int_{\mathfrak{P}_n} |\psi(\tau)|^2 \mu(d\tau)$, так что

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\mathfrak{P}_n} |\psi(\tau)|^2 \mu(d\tau) = \int_{\mathfrak{P}} |\psi(\tau)|^2 \mu(d\tau).$$

Для любого $t \geq 0$ определим операторы $A(t)$, $A^+(t)$, $\Lambda(t)$ соотношениями

$$\begin{aligned}
(A(t)\psi)(\tau) &= \int_0^t \psi(\tau \cup \{s\}) ds \\
(A^+(t)\psi)(\tau) &= \sum_{s \in \tau} 1_{[0,t]}(s) \psi(\tau \setminus \{s\}) \\
(\Lambda(t)\psi)(\tau) &= \sum_{s \in \tau} 1_{[0,t]}(s) \psi(\tau)
\end{aligned}$$

Оператор $A(t)$ переводит $\Gamma_n \equiv \Gamma_n(L^2(\mathbf{R}_+))$ в Γ_{n-1} , $A^+(t)$ переводит Γ_n в Γ_{n+1} , и $\Lambda(t)$ переводит Γ_n в Γ_n . В квантовой физике $A(t)$ является оператором уничтожения (бозона на временном отрезке $[0, t]$), $A^+(t)$ - оператором рождения, $\Lambda(t)$ - оператором числа частиц (бозонов). Общей инвариантной областью определения является подпространство Γ_∞ , состоящее из векторов $\psi \in \Gamma(\mathfrak{h})$ таких, что

$$\int_{\mathfrak{F}} \lambda^{|\tau|} |\psi(\tau)|^2 \mu(d\tau) < \infty$$

для всех $\lambda > 0$. Операторы $A(t), A^+(t)$ однозначно продолжаются до замкнутых взаимно сопряженных операторов (для которых сохраняются прежние обозначения). Операторы $\Lambda(t)$, а также

$$Q(t) = A(t) + A^+(t), P(t) = i(A^+(t) - A(t))$$

являются существенно самосопряженными на Γ_∞ (см., например, [6], [29]).

Из определений (1.2) вытекают следующие коммутационные соотношения на Γ_∞

$$\begin{aligned}
[A(t), A(s)] &= 0, \quad [A^+(t), A^+(s)] = 0 \\
[A(t), A^+(s)] &= (t \wedge s)I \\
[\Lambda(t), \Lambda(s)] &= 0 \\
[\Lambda(t), A(s)] &= -A(t \wedge s), \quad [\Lambda(t), A^+(s)] = A^+(t \wedge s)
\end{aligned}$$

где $t \wedge s = \min(t, s)$. Отсюда следует, что

$$\begin{aligned}
[Q(t), Q(s)] &= 0, \quad [P(t), P(s)] = 0 \\
[Q(t), P(s)] &= 2i(t \wedge s)I
\end{aligned}$$

$$[\Lambda(t), Q(s)] = -iP(t \wedge s), \quad [\Lambda(t), P(s)] = iQ(t \wedge s)$$

Пусть $f \in L^2(\mathbf{R}_+)$. Экспоненциальным вектором называется вектор $\psi_f \in \Gamma(\mathfrak{h})$ такой, что $\psi_f(\emptyset) = 1, \psi_f(\tau) = \prod_{t \in \tau} f(t)$. Скалярное произведение двух экспоненциальных векторов

$$\langle \psi_f | \psi_g \rangle = \exp \int_0^\infty \overline{f(t)} g(t) dt$$

Из (1.2) следует, что $A(t)\psi_f = \left(\int_0^t f(s) ds \right) \cdot \psi_f$.

Вектор ψ_0 , соответствующий $f \equiv 0$, называется вакуумным вектором. Для него

$$A(t)\psi_0 = 0, \Lambda(t)\psi_0 = 0$$

Линейную оболочку семейства экспоненциальных векторов обозначим Γ_e . Она плотна в $\Gamma(\mathfrak{h})$ (см., например, [96]).

4.6.1 1.2 Стохастический интеграл.

Одно из основных свойств пространства Фока - Функториальное свойство

$$\Gamma(\mathfrak{h}_1 \oplus \mathfrak{h}_2) = \Gamma(\mathfrak{h}_1) \otimes \Gamma(\mathfrak{h}_2),$$

в частности, для любого $t \in \mathbf{R}_+$

$$\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+)) = \Gamma(L^2(0, t)) \otimes \Gamma(L^2(t, \infty))$$

При этом экспоненциальные векторы, включая вакуумный, также факторизуются

$$\psi_f = \psi_f^{(0,t)} \otimes \psi_f^{(t,\infty)}$$

Поскольку $L^2(\mathbf{R}_+)$ можно рассматривать как непрерывную прямую сумму (прямой интеграл) одномерных гильбертовых пространств, пространство $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$ является, в определенном смысле, непрерывным тензорным произведением. Эта структура лежит в основе связи между пространством Фока, безграничной делимостью и процессами с независимыми приращениями (см., например, [96], [138]).

Далее $\mathfrak{F} = \mathcal{H} \otimes \Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$, где \mathcal{H} - некоторое «начальное» пространство. Элементы \mathfrak{F} можно рассматривать как функции $\downarrow(\tau)$, $\tau \in \text{Re}$, со значениями в \mathcal{H} . Будет удобно не различать в написании операторы, действующие в \mathcal{H} , или в $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$, и их поднятия в \mathfrak{F} ; например, $A(t)$ обозначает как оператор в $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$, так и оператор $I \otimes A(t)$ в \mathfrak{F} (в \mathcal{H}). Обозначим $\mathcal{H} \otimes \Gamma_e$ алгебраическое тензорное произведение \mathcal{H} и Γ_e . Семейство (вообще говоря, неограниченных) операторов $\{M(t); t \in \mathbf{R}_+\}$, определенных на $\mathcal{H} \otimes \Gamma_e$, будет называться процессом в \mathfrak{F} .

Соотношения (1.8), (1.9) задают естественную фильтрацию в пространстве \mathfrak{g} . Процесс $\{M(t); t \in \mathbf{R}_+\}$ в \mathfrak{g} называется согласованным (с данной фильтрацией), если для любого $t \in \mathbf{R}_+$

$$M(t) = M_t \otimes I_t$$

где M_t - оператор, действующий в $\mathcal{H} \otimes \Gamma(L^2(0, t))$, а I_t - единичный оператор в $\Gamma(L^2(t, \infty))$. Благодаря (1.8), (1.9), определено отображение условного ожидания \mathcal{E}_t в алгебру операторов вида (1.10), согласованное с вакуумным состоянием $|\psi_0\rangle\langle\psi_0|$. Согласованный процесс называется жартингалом, если $\mathcal{E}_t[M(s)] = M(t)$ при $s > t$. Основные процессы $\{A(t)\}$, $\{A^+(t)\}$, $\{\Lambda(t)\}$ являются мартингалами.

Партасарати и Хадсон [108], [20] построили стохастический интеграл от согласованных процессов по основным мартингалам $A(t)$, $A^+(t)$, $\Lambda(t)$. Далее излагается модификация этой конструкции (см. статью А. С. Холево в [145]). Процесс $\{M(t); t \in [0, T]\}$ называется простыск, если существует разбиение $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$, такое что $M(t) = M(t_{j-1})$ для $t \in [t_{j-1}, t_j)$. Для четверки простых согласованных процессов $\{M_\alpha(t)\}$, $\alpha = 0, 1, 2, 3$, стохастический интеграл определяется соотношением

$$\begin{aligned} I(T) &\equiv \int_0^T (M_0 d\Lambda + M_1 dA + M_2 dA^+ + M_3 dt) = \\ &= \sum_{j=1}^N \{M_0(t_{j-1}) [\Lambda(t_j) - \Lambda(t_{j-1})] + \\ &+ M_1(t_{j-1}) [A(t_j) - A(t_{j-1})] + M_2(t_{j-1}) [A^+(t_j) - A^+(t_{j-1})] + \\ &+ M_3(t_{j-1}) (t_j - t_{j-1})\} \end{aligned}$$

Из неравенств Журне (см. [128, п. V.1.4]) вытекает оценка

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq t \leq T} \|I(t)\psi \otimes \bar{\psi}_f\|_-^2 &\leq C(\|f\|) \cdot \left\{ \int_0^T |f(t)|^2 \times \right. \\ &\times \|M_0(t)\psi \otimes \psi_f\|^2 dt + \int_0^T [\|M_1(t)\psi \otimes \psi_f\|^2 + \\ &\left. + \|M_2(t)\psi \otimes \psi_f\|^2] dt + \left[\int_0^T \|M_3(t)\psi \otimes \psi_f\| dt \right]^2 \right\}, \end{aligned}$$

где $\psi \in \mathcal{H}, f \in L^2(\mathbf{R}_+)$. Назовем $\{M_\alpha(t)\}$ допустимой четверкой, если для любого $\varepsilon > 0$ найдется четверка $\{\tilde{M}_\alpha(t)\}$ простых согласованных процессов, такая что

$$\begin{aligned} \text{ess sup}_{0 \leq t \leq T} \left\| [M_0(t) - \tilde{M}_0(t)] \psi \otimes \psi_f \right\| &< \varepsilon \\ \int_0^T \left\| [M_{1,2}(t) - \tilde{M}_{1,2}(t)] \psi \otimes \psi_f \right\|^2 dt &< \varepsilon \\ \int_0^T \left\| [M_3(t) - \tilde{M}_3(t)] \psi \otimes \psi_f \right\| dt &< \varepsilon \end{aligned}$$

и сильно допустимой четверкой, если для любого $\varepsilon > 0$ найдется четверка $\{\widetilde{M}_\alpha\}$ простых согласованных процессов со значениями в $\mathfrak{B}()$, такая что

$$\begin{aligned} \text{ess sup}_{0 \leq t \leq T} \|M_0(t) - \tilde{M}_0(t)\| &< \varepsilon, \\ \int_0^T \|M_{1,2}(t) - \tilde{M}_{1,2}(t)\|^2 dt &< \varepsilon, \\ \int_0^T \|M_3(t) - \tilde{M}_3(t)\| dt &< \varepsilon. \end{aligned}$$

Из неравенства (1.12) вытекает, что для любой допустимо четверки стохастический интеграл

$$I(T) = \int_0^T (M_0 d\Lambda + M_1 dA + M_2 dA^+ + M_3 dt)$$

определен на $\mathcal{C} \otimes \Gamma_e$ как сильный предел стохастических интегралов вида (1.11) от простых процессов $\{\tilde{M}_\alpha\}$ и является согласованным процессом. Если $M_3 \equiv 0$, то $I(t)$ является мартингалом; доказано, что достаточно произвольный ограниченный мартингал в пространстве Фока является стохастическим интегралом (Партасарати и Синха). Пример неограниченного мартингала, не представимого в виде стохастического интеграла по основным процессам, содержится в работе Журне [113].

Из определений (1.2) основных мартингалов вытекает явная формула (В. П. Белавкин [35])

$$(I(t)\psi)(\tau) = \int_0^t [M_3(s)\psi + M_1(s)\psi^{(s)}](\tau)ds + \\ + \sum_{\substack{s \in \tau \\ s \leq t}} [M_2(s)\psi + M_0(s)\psi^{(s)}](\tau \setminus \{s\}),$$

где $\psi^{(s)}(\tau) = \psi(\tau \cup \{s\})$, которая может служить для альтернативного определения стохастического интеграла, имеющего смысл для более широких классов процессов (включая несогласованные процессы).

Стохастический интеграл по процессам в антисимметричном пространстве Фока рассматривался Барнетом, Стритером, Уайлдом [62], [141], Хадсоном и Эпплбаумом [107].

4.6.2 1.3 Квантовая формула Ито.

Соотношение (1.14) принято записывать в дифференциальной форме

$$dI = M_0 d\Lambda + M_1 dA + M_2 dA^+ + M_3 dt$$

Пусть $J(t)$ - другой стохастический интеграл, так что $dJ = N_0 d\Lambda + N_1 dA + N_2 dA^+ + N_3 dt$.

Т е о р е м а. Если четверки $\{M_\alpha\}, \{N_\alpha\}$ сильно допустимы, то произведение $I(t)J(t)$ является стохастическим интегралом, причем

$$d(IJ) = I(dJ) + (dI)J + (dI)(dJ)$$

где произведение вычисляется по следующим формальным правилам: значения любого согласованного процесса в момент t коммутируют со стохастическими дифференциалами основных процессов $d\Lambda(t), dA(t), dA^+(t), dt$, а в слагаемом $(dI)(dJ)$ произведения стохастических дифференциалов основных процессов находятся согласно таблице умножения

	dA^+	$d\Lambda$	dA	dt
dA	dt	dA	0	0
$d\Lambda$	dA^+	$d\Lambda$	0	0
dA^+	0	0	0	0
dt	0	0	0	0

Алгебра стохастических дифференциалов (1.15) с таблицей умножения (1.16) изоморфна некоторой алгебре 3×3 -матриц. Особенно удобна реализация, предложенная В. П. Белавкиным в [35]: соответствие

$$dI = M_0 d\Lambda + M_1 dA + M_2 dA^+ + M_3 dt_{\leftrightarrow}$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 0 & M_1 & M_3 \\ 0 & M_0 & M_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

оказывается инволютивным алгебраическим изоморфизмом, переводящим инволюцию $(dI)^* = M_0^* d\Lambda + M_2^* dA + M_1^* dA^+ + M_3^* dt$ в инволюцию

$$\begin{bmatrix} 0 & M_1 & M_3 \\ 0 & M_0 & M_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix} 0 & M_2^* & M_3^* \\ 0 & M_0^* & M_1^* \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

П р и м е р. Рассмотрим стохастические интегралы

$$B(t) = \int_0^t J(s) dA(s), B^+(t) = \int_0^t J(s) dA^+(s)$$

где $J(t) = (-1)^{\Lambda(t)}$ - сильно допустимый процесс. Из формулы (1.24) следующего пункта вытекает, что $J(t)$ удовлетворяет уравнению

$$dJ = -2Jd\Lambda$$

Пользуясь таблицей (1.16), находим

$$d(BJ + JB) = -2(BJ + JB)d\Lambda$$

Поскольку $B(0) = 0$, то из теоремы следующего пункта вытекает, что $B(t)J(t) + J(t)B(t) \equiv 0$. Снова пользуясь таблицей (1.16), находим $d(BB^+ + B^+B) = dt$, откуда

$$B(t)B^+(t) + B^+(t)B(t) = t,$$

т. е. операторы $B(t), B^+(t)$ удовлетворяют каноническому антикоммутиационному соотношению для фермионных операторов рождения-уничтожения. Этот факт лежит в основе изоморфизма между симметричным (бозонным) и антисимметричным (фермионным) пространствами Фока, установленного Хадсоном и Партасарати [109].

Квантовый стохастический интеграл и формула Ито имеют естественное обобщение на случай многих степеней свободы, когда основные процессы $A_j(t), A_k^+(t), \Lambda_{jk}(t)$ многомерны и действуют в пространстве Фока $\Gamma(L_{\mathcal{H}}^2(\mathbf{R}_+))$, где \mathcal{H} - гильбертово пространство, размерность которого равна числу степеней свободы (Хадсон, М. П. Эванс [143], В. П. Белавкин [35]), а также в нефоковских пространствах, связанных с гауссовскими состояниями канонических коммутационных соотношений (Хадсон, Линдсей [142]).

1.4. Квантовые стохастические дифференциальные уравнения. Рассмотрим линейное однородное квантовое стохастическое дифференциальное уравнение

$$dV = [L_0 d\Lambda + L_1 dA + L_2 dA^+ + L_3 dt] V, t \geq 0$$

с начальным условием $V(0) = I$, которое является краткой записью интегрального уравнения

$$V(t) = I + \int_0^t [L_0(s) d\Lambda(s) + L_1(s) dA(s) + L_2(s) dA^+(s) + L_3(s) ds] V(s).$$

Модифицируя рассуждение Хадсона и Партасарати [108], основанные на методе последовательных приближений, можно доказать следующую теорему.

Т е о р е м а. Если $\{L_\alpha\}$ - сильно допустимая четверка, то решение $\{V(t); t \in \mathbf{R}_+\}$ уравнения (1.18) существует, единственно и является сильно непрерывным согласованным процессом.

Обозначим \mathcal{P}_t оператор временного сдвига в \mathcal{H} : $\mathcal{P}_t \psi(\tau) = \psi(\tau_t)$, где $\tau_t = \{t_1 + t, \dots, t_n + t\}$, если $\tau = \{t_1, \dots, t_n\}$. Решение $V(t)$ удовлетворяет уравнению ко ц и к л а

$$V(t+u) = (\mathcal{S}_u^* V(t) \mathcal{S}_u) V(u); t, u \in \mathbf{R}_+$$

Особый интерес представляет случай, когда $V(t), t \in \mathbf{R}_+$, являются унитарными операторами. Для этого необходимо и достаточно, чтобы уравнение (1.18) имело вид

$$dV = \left[(W - I)d\Lambda + LdA^+ - L^*WdA - \left(iH + \frac{1}{2}L^*L \right) dt \right] V,$$

где W -унитарный, а H -самосопряженный операторы из $\mathcal{B}(\mathcal{C})$.

Весьма важной является задача обобщения теоремы существования и единственности решения уравнения (1.18) на случай неограниченных коэффициентов $L_\alpha(t)$. Некоторые результаты в этом направлении имеются в работах Хадсона и Партасарати [108], Журне [113], Фриджеро, Фаньолы, А. М. Чеботарева [75]. В работе [113] частично решена задача описания силь- но непрерывных унитарных решений уравнения (1.19). Этот вопрос тесно связан с проблемой консервативности, обсуждавшейся в п. 3.2.3.

Уравнения типа (1.18) связаны с линейными стохастическими дифференциальными уравнениями в гильбертовом пространстве (см., в частности, А. В. Скороход [33]), и можно надеяться, что эти два направления взаимно обогатят друг друга. Решения уравнения (1.20) являются некоммутативным аналогом мультипликативного процесса с независимыми стационарными приращениями в группе унитарных операторов. Общая теория таких процессов развита Аккарди, фон Вальденфельсом и Шурманом [54]. Последний показал [144], [147], что всякий такой процесс, удовлетворяющий условию равномерной непрерывности, является решением уравнения типа (1.20). Используя аналогию с квантовыми процессами, А. С. Холево указал стохастическое дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет произвольный классический мультипликативный процесс с независимыми стационарными приращениями в группе Ли (мультипликативный аналог разложения Ито) [104].

Наглядное представление решений уравнения (1.18) дают хронологически упорядоченные экспоненты, родственные мультипликативному стохастическому интегралу в классической теории случайных процессов (по поводу последнего см. Эмери [82]). Пусть $\{\tilde{M}_\alpha(t)\}$ - четверка простых согласованных процессов на $[0, T]$ со значениями в $\mathcal{B}(\mathcal{C})$. Положим

$$V_j = \exp \left[\tilde{M}_0(t_{j-1})(\Lambda(t_j) - \Lambda(t_{j-1})) + \right. \\ \left. + \tilde{M}_1(t_{j-1})(A(t_j) - A(t_{j-1})) + \tilde{M}_2(t_{j-1})(A^+(t_j) - A^+(t_{j-1})) + \right. \\ \left. + \tilde{M}_3(t_{j-1})(t_j - t_{j-1}) \right]$$

и обозначим

$$\leftarrow \overleftarrow{\exp} \int_0^T \left(\tilde{M}_0 d\Lambda + \tilde{M}_1 dA + \tilde{M}_2 dA^+ + \tilde{M}_3 dt \right) = \\ = V_N \cdot \dots \cdot V_1.$$

Оператор (1.21) определен на $\mathcal{H} \otimes \Gamma_e$. В работе А. С. Холево (см. [145]) доказано, что если $\{M_\alpha\}$ -сильно допустимая четверка согласованных процессов со значениями в $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ и $\{\tilde{M}_\alpha^{(N)}\}$ - последовательность четверок простых процессов, аппроксимирующая $\{M_\alpha\}$ в смысле (1.13), то существует сильный предел на $\mathcal{C} \otimes \Gamma_e$ выражений вида (1.21), который называется хронологически упорядоченной экспонентой. При этом семейство хронологически упорядоченных экспонент

$$V(t) = \leftarrow \exp_0^T (M_0 d\Lambda + M_1 dA + M_2 dA^+ + M_3 dt), \quad t \in \mathbb{R}_+$$

является сильно непрерывным на $\mathcal{C} \otimes \Gamma_e$, согласованным процессом, который удовлетворяет стохастическому дифференциальному уравнению (1.18), где $\{L_\alpha\}$ и $\{M_\alpha\}$ связаны соотношениями

$$\begin{aligned} L_0 &= a(M_0), L_1 = M_1 b(M_0), L_2 = b(M_0) M_2 \\ L_3 &= M_3 + M_1 c(M_0) M_2 \end{aligned}$$

Здесь a, b, c -целые функции

$$a(z) = e^z - 1, \quad b(z) = \frac{e^z - 1}{z}, \quad c(z) = \frac{e^z - 1 - z}{z^2}, \quad z \neq 0$$

Используя изоморфизм (1.17), эти соотношения можно объединить в одно матричное равенство

$$\mathbf{L} = e^{\mathbf{M}} - \mathbf{I}$$

Если коэффициенты $M_\alpha(t)$ коммутируют между собой при всевозможных значениях временных аргументов, то хронологически упорядоченная экспонента превращается в обычную

$$V(t) = \exp \int_0^t (M_0 d\Lambda + M_1 dA + M_2 dA^+ + M_3 dt)$$

и дает, таким образом, явное решение уравнения (1.18).

П р и м е р. Решение уравнения

$$dJ_z = z J_z d\Lambda; \quad J_z(0) = \mathbf{I}$$

при $z \neq -1$ записывается в виде

$$J_z(t) = (z + 1)^{\Lambda(t)}, \quad t \in \mathbb{R}_+$$

Если $z = -1$, то решение уравнения (1.24) имеет вид

$$J_{-1}(t) = \delta_{0, \Lambda(t)}$$

где $\delta_{i,j}$ -символ Кронекера. Поскольку $J_{-1}(t)$ обращается в нуль, оно не может быть записано в виде экспоненты.

Хронологически упорядоченные экспоненты

$$V(t) = \leftarrow \exp \int_0^t (L dA^+ - L^* dA - iH dt)$$

рассматривались фон Вандельфельсом, а также Хадсоном и Партасарати в [141], [20]. Эти экспоненты являются унитарными операторами, удовлетворяющими уравнению

$$dV = \left[L dA^+ - L^* dA - \left(iH + \frac{1}{2} L^* L \right) dt \right] V; \quad V(0) = \mathbf{I}$$

П р и м е р. Пусть $\dim \mathcal{H} = 1$ и $f \in L^2(\mathbb{R}_+)$. Экспонента

$$V_f(t) = \exp \int_0^t \left(f(s) dA^+(s) - \overline{f(s)} dA(s) \right)$$

является унитарным решением уравнения

$$dV_f(t) = \left[f(t) dA^+(t) - \overline{f(t)} dA(t) - \frac{1}{2} |f(t)|^2 dt \right] V_f(t)$$

в $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$. Из этого уравнения и квантовой формулы Ито вытекает, что процессы $V_f(t)V_g(t)$ и $V_{f+g}(t) \exp i \operatorname{Im} \int_0^t f(s) \times \times \overline{g(s)} ds$, где g -другая функция из $L^2(\mathbf{R}_+)$, удовлетворяют одному и тому же уравнению; кроме того, они совпадают при $t = 0$ и, следовательно, тождественно равны, т. е.

$$V_f(t)V_g(t) = V_{f+g}(t) \exp \left[i \operatorname{Im} \int_0^t f(s) \overline{g(s)} ds \right]$$

Рассмотрим $L^2(\mathbf{R}_+)$ как вещественное линейное пространство Z с кососимметричной формой

$$\Delta(f, g) = 2 \operatorname{Im} \int_0^\infty f(s) \overline{g(s)} ds$$

Из (1.28) тогда следует, что операторы $W(f) = V_f(\infty)$ образуют (неприводимое) представление канонического коммутационного соотношения Вейля (1.2.12) в симметричном (бозонном) про. странстве Фока $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$, а формулы (1.4), (1.5) дают инфинитезимальную форму канонического коммутационного соотношения. При этом экспоненциальные векторы играют ту же роль, что и когерентные состояния в случае конечного числа степеней свободы, а отображение дуальности (см. п. 2.1) соответствует переходу к представлению Шрёдингера, диагонализующему операторы $Q(t)$.

Дальнейшие сведения о квантовом стохастическом исчислении можно найти в обзоре Мейера [128], а также в сборниках [142]-[145], охватывающих такие темы, как связи с некоммутативной геометрией (Хадсон, Эшплбаум, Робинсон), применение в теории кратного стохастического интеграла (Маассен, Мейер, Партасарати, Линдсей), некоммутативные случайные блуждания в «игрушечном пространстве Фока» и их сходимость к основным процессам (Партасарати, Линдсей, Аккарди) и другие.

4.6.3 2. Расширения в пространстве Фока

Благодаря структуре непрерывного тензорного произведения, пространство Фока является естественнымместилищем различных «безгранично делимых» объектов. В конце 60-х годов Араки и Стритер рассматривали безгранично делимые представления групп и показали, что такие представления вкладываются в пространство Фока. Поскольку представление группы определяется некоторой положительно определенной функцией, то этот результат дает запись безгранично делимой положительно определенной функции через фоковское вакуумное среднее (см. [96], [138]). Отсюда также следует, что всякое безгранично-делимое распределение вероятностей может быть реализовано как распределение некоторой квантовой наблюдаемой относительно вакуумного состояния в пространстве Фока. Таким образом, пространство Фока вмещает в себя все процессы с независимыми приращениями, а также процессы

«квантового шума», которые дают универсальную модель окружения открытой квантовой системы. Это обстоятельство лежит в основе конструкций расширения, использующих фоковское пространство.

2.1. Винеровский и пуассоновский процессы в пространстве Фока. Если $\{X(t); t \in \mathbf{R}\}$ - коммутирующее семейство самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве \mathfrak{g} , то оно ∂a - гомализуемо: существует пространство с мерой $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega), \mu)$ и унитарный оператор J из \mathfrak{g} на $L^2(\Omega, \mu)$, такие что

$$(JX(t)J^{-1}\varphi)(\omega) = X_t(\omega)\varphi(\omega)$$

для $\varphi \in L^2(\Omega, \mu)$, где $X_t(\omega)$ - вещественные измеримые функция. При этом для любого $\psi \in \xi$ и ограниченной борелевской функции $f(x_1, \dots, x_n)$

$$\langle \psi | f(X(t_1), \dots, X(t_n)) \psi \rangle = \int f(X_{t_1}(\omega), \dots, X_{t_n}(\omega)) P(d\omega)$$

где $P(d\omega) = |(J\psi)(\omega)|^2 \mu(d\omega)$ - вероятностная мера на Ω . В этом смысле семейство $\{X(t)\}$ в гильбертовом пространстве \mathfrak{H} с выделенным вектором ψ стохастически эквивалентно случайному процессу $\{X_t(\omega)\}$ в вероятностном пространстве $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega), P)$.

Рассмотрим коммутирующее (в силу (1.5)) семейство самосопряженных операторов $\{Q(t)\}$ в $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$. Пусть $\{W_t; t \in \mathbf{R}_+\}$ - стандартный винеровский процесс, $L^2(W)$ - гильбертово пространство комплексных квадратично интегрируемых функционалов от винеровского процесса. Отображение дуальности (Сигал)

$$J\psi = f_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\mathfrak{P}_n} \dots \int f_n(t_1, \dots, t_n) dW_{t_1} \dots dW_{t_n}$$

где в правой части формулы - кратные стохастические интегралы в смысле Ито, является изоморфизмом пространства Фока $\mathfrak{F} = \Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$ и $L^2(W)$, причем

$$J\Psi_0 = 1; \quad JQ(t)J^{-1} = W_t$$

Поэтому семейство $\{Q(t)\}$ в $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$ с вакуумным вектором ψ_0 стохастически эквивалентно винеровскому процессу W_t . Аналогичное утверждение справедливо и для коммутирующего семейства $\{P(t)\}$. Заметим, что в силу (1.5) операторы $Q(t)$ и $P(s)$ не коммутируют между собой и поэтому семейство $\{Q(t), P(t)\}$ не эквивалентно двумерному винеровскому процессу. Унитарный оператор $U\psi(\tau) = i^{|\tau|}\psi(\tau)$ переводит ψ_0 в ψ_0 и

$$P(t) = UQ(t)U^{-1}.$$

Оператору U в $L^2(W)$ отвечает преобразование Фурье-Винера ¹⁾.

Рассмотрим теперь коммутирующее семейство самосопряженных операторов $\{\Lambda(t)\}$. Пусть $\{N_t; t \in \mathbf{R}_+\}$ - пуассоновский процесс интенсивности λ на вероятностном пространстве $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega), P_\lambda)$ и $L^2(N) \equiv L^2(\Omega, P_\lambda)$. Отображение

$$J^{(\lambda)}\psi = f_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\mathfrak{P}_n} \dots \int f_n(t_1, \dots, t_n) dX_{t_1} \dots dX_{t_n}$$

где $X_t = \lambda^{-1/2}(N_t - \lambda t)$ - компенсированный пуассоновский процесс, является изоморфизмом пространства Фока $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$ и $L^2(N)$, причем

$$J^{(\lambda)}\psi_0 = 1, \quad J^{(\lambda)}\Pi^{(\lambda)}(t)J^{(\lambda)-1} = N_t$$

где

$$\Pi^{(\lambda)}(t) = \Lambda(t) + \sqrt{\lambda}Q(t) + \lambda t.$$

Таким образом, семейство $\{\Pi^{(\lambda)}(t)\}$ в $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$ с вакуумным вектором ψ_0 стохастически эквивалентно пуассоновскому процессу [108].

С точки зрения классической теории вероятностей соотношение (2.1) не может не вызвать удивления - пуассоновский процесс представлен как сумма винеровского процесса с постоянным сносом и процесса $\Lambda(t)$, равного нулю почти наверное (относительно вакуумного состояния). Дело, конечно, в том, что слагаемые не коммутируют и поэтому не могут рассматриваться как классические случайные процессы на одном вероятностном пространстве. Заметим, что подобная связь между пуассоновским и нормальным распределением хорошо известна в: квантовой оптике [21].

В подходящее пространство Фока $\Gamma(L^2_{\mathcal{F}}(\mathbf{R}_+))$, где $L^2_{\mathcal{H}}(\mathbf{R}_+)$ - пространство квадратично-интегрируемых функций со значениями в некотором гильбертовом пространстве \mathcal{H} , может быть вложен произвольный стохастически непрерывный процесс с независимыми приращениями (Партасарати, см. [128]). Представление такого процесса требует, вообще говоря, бесконечного числа независимых процессов рождения-уничтожения-числа частиц.

Среди процессов с независимыми приращениями только ви-

1. См. Т. Хида. Броуновское движение.- М.: Наука, 1987. :неровский и пуассоновский обладают следующим свойством хаотической представимости: гильбертово пространство квадратично интегрируемых функционалов от процесса является прямой суммой подпространств, порождаемых n -кратными стохастическими интегралами (Винер, Ито). Вопрос-какие другие мартингалы обладают этим свойством - привлек внимание специалистов по теории случайных процессов. В частности, Эмери показал, что этим свойством обладает мартингал Аземы

$$X_t = \text{sgn } W_t \sqrt{2(t - g_t)}$$

,где g_t - последний нуль винеровского процесса W_t перед моментом t . Партасарати [137] рассмотрел квантовое стохастическое дифференциальное уравнение

$$dX.(t) = (c - 1)X(t)d\Lambda(t) + dQ.(t), \quad X(0) = 0$$

и показал, что при любом $c \in [-1, 1]$ оно имеет решение, являющееся коммутирующим семейством самосопряженных операторов и стохастически эквивалентное (относительно вакуумного вектора) мартингалу со свойством хаотической представимости. Как заметил Мейер, при $c = 0$ решение $X(t)$ стохастически эквивалентно мартингалу Аземы. Таким образом, в высшей степени нелинейное преобразование (2.2) винеровского процесса оказывается тесно связанным с линейным стохастическим дифференциальным уравнением для некоммутирующих процессов.

2.2 Стохастические эволюции и расширения динамических полугрупп. Интересный класс безгранично делимых объектов возникает в связи с динамическими полугруппами. Пусть \mathcal{C} - гильбертово пространство, Φ -динамическое отображение в алгебре $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$, т. е. нормальное вполне положительное отображение, такое что $\Phi[I] = I$. Назовем Φ безгранично делимым, если для любого $n = 1, 2, \dots$ $\Phi = (\Phi_n)^n$, где Φ_n - динамическое отображение. Если $\{\Phi_t; t \in \mathbf{R}_+\}$ - динамическая полугруппа, то все отображения Φ_t безгранично делимы, поскольку $\Phi_t = (\Phi_{t/n})^n$. С другой стороны, если $\dim \mathcal{H} < \infty$, то всякое безгранично делимое динамическое отображение имеет вид $\Phi = \mathcal{E} \cdot e^{\mathcal{L}}$, где \mathcal{E} -

условное ожидание на некоторую подалгебру $\mathcal{B} \subset \mathfrak{P}(\mathcal{H})$, а \mathcal{L} - вполне диссипативное отображение, оставляющее подалгебру инвариантной [15]. Отображение \mathcal{E} играет роль, аналогичную идемпотентному делителю в теории безгранично делимых положительно определенных функций на группах [138]. Если $\mathcal{E} = \text{Id}$, то через Φ можно провести квантовую динамическую полугруппу.

В работе Хадсона и Партасарати [108] было построено вложение непрерывной по норме квантовой динамической полугруппы в пространство Фока, которое может быть истолковано как расширение до марковского квантового случайного процесса в смысле п. 3.2.6 (см. статью Фриджеро в [142]). Для простоты ограничимся описанием конструкции работы [108] для полугруппы с инфинитезимальным оператором вида

$$\mathcal{L}[X] = i[H, X] + L^*XL - L^*L \circ X$$

где $H, L \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, $H^* = H$.

Предложени е. Пусть $\{\Phi_t; t \in \mathbb{R}_+\}$ -квантовая динамическая полугруппа в $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ с инфинитезимальным оператором (2.3). тогда

$$\Phi_t[X] = \mathcal{E}_0 [V(t)^*(X \otimes I)V(t)], X \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$$

где $\{V(t); t \in \mathbb{R}_+\}$ -семейство унитарных операторов в $\mathcal{G} = \mathcal{H} \otimes \Gamma(L^2(\mathbb{R}_+))$, удовлетворяющее уравнению (1.26), а отображение $\mathcal{E}_0 : \mathcal{V}(\mathfrak{G}) \rightarrow \mathcal{O}(\mathcal{C})$ - усреднение по вакуумному состоянию, определяемое формулой

$$\text{Tr } S \mathcal{E}_0[Y] = \text{Tr} (S \otimes |\psi_0\rangle \langle \psi_0|) Y$$

для любого оператора плотности S в \mathcal{H} и любого $Y \in \mathcal{Z}(\mathfrak{h})$.

Доказательство. Из уравнения (1.26) и квантовой формулы Ито вытекает квантовое уравнение Ланжевена для; $X(t)$:

$$\begin{aligned} dX(t) = & [L(t)^*, X(t)]dA(t) + [X(t), L(t)]dA^+(t) + \\ & + \{i[H(t), X(t)] + (L(t)^*X(t)L(t) - L(t)^*L(t) \circ X(t))\} dt \end{aligned}$$

Усредняя по вакуумному состоянию и учитывая первое из соотношений

$$dA(t)\psi_0 = 0, \quad d\Lambda(t)\psi_0 = 0$$

вытекающих из (1.6), получаем, что семейство наблюдаемых $\tilde{\Phi}_t[X] = \mathcal{E}_0 [V(t)^*(X \otimes I)V(t)]$ в алгебре системы $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ удовлетворяет уравнению

$$d\tilde{\Phi}_t[X] = \tilde{\Phi}_t[\mathcal{L}[X]]dt; \quad \tilde{\Phi}_0[X] = X$$

Отсюда следует, что $\tilde{\Phi}_t[X] = \exp t\mathcal{L}[X] = \Phi_t[X]$.

Пусть теперь $\{\Psi_t; t \in \mathbb{R}_+\}$ -соответствующая динамическая полугруппа в пространстве состояний. Из представления (2.4) вытекает конструктивное доказательство теоремы о расширении, сформулированной в п. 3.2.6. Обозначим $\mathcal{E}_0 = \Gamma(L^2(\mathbb{R}))$ пространство Фока, ассоциированное с $L^2(\mathbb{R})$, и пусть $S_0 = |\psi_0\rangle \langle \psi_0|$, где ψ_0 - вакуумный вектор в $L^2(\mathbb{R})$. В пространстве $\mathcal{C} \otimes \mathcal{E}_0$ действует группа унитарных операторов временного сдвига $\{\mathcal{P}_t; t \in \mathbb{R}\}$, определяемых как в п. 1.4. Поскольку $\mathcal{H}_0 = \Gamma(L^2(\mathbb{R}_-)) \otimes \Gamma(L^2(\mathbb{R}_+))$, где $\mathbb{R}_- = (-\infty, 0)$, действие основных процессов $A(t), A^+(t), \Lambda(t); t \in \mathbb{R}_+$; естественно переносится в $\mathcal{C} \otimes \mathcal{H}_0$. Решение уравнения (1.26) является тогда семейством унитарных операторов $\{V(t); t \in \mathbb{R}_+\}$ в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$, удовлетворяющим соотношению коцикла (1.19). Из этого соотношения вытекает что

$$U_t = \begin{cases} \mathcal{S}_t V(t), & t \in \mathbf{R}_+ \\ V(-t)^* \mathcal{S}_t, & t \in \mathbf{R}_- \end{cases}$$

является группой унитарных операторов в $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_0$. Поскольку $\mathcal{P}_t^*(X \otimes \mathbf{I}) \mathcal{P}_t = X \otimes \mathbf{I}$, из (2.4) следует, что

$$\Psi_t[S] = \text{Tr}_{\mathcal{H}_0} U_t (S \otimes S_0) U_t^*, \quad t \in \mathbf{R}_+.$$

Построенное расширение имеет прозрачную физическую интерпретацию. Группа операторов временного сдвига $\{\mathcal{S}_t\}$ описывает динамику квантового шума, который играет роль окружения рассматриваемой системы. Записывая операторы $V(t)$ в виде хронологически упорядоченной экспоненты (1.25), можно видеть, что они задают эволюцию системы с гамильтонианом H , взаимодействующей с окружением посредством сингулярного гамильтониана

$$H_{\text{Int}} = i \left(L \dot{A} + (t) - L^* \dot{A}(t) \right).$$

Усреднение унитарной эволюции $\{U_t\}$ по вакуумному состоянию шума и дает динамическую полугруппу в $\mathcal{B}(\mathcal{C})$.

Аналогичное унитарное расширение имеет место для произвольной квантовой динамической полугруппы с инфинитезимальным оператором (3.2.4) - надо только использовать квантовое стохастическое исчисление с бесконечным набором операторов рождения-уничтожения.

С точки зрения статистической механики представляет интерес выяснение точных условий, при которых такая в высшей степени идеализированная динамическая система, как квантовый шум, возникает из более реалистичных физических моделей открытых систем (см. в этой связи работу [52], где обсуждаются приближения слабого взаимодействия и малой плотности).

Из формулы (2.4) можно получить представления квантовой динамической полугруппы через решения классических стохастических дифференциальных уравнений в гильбертовом пространстве \mathcal{H} (см. статью А. С. Холево в [35]). Пусть W_t - стандартный винеровский процесс и $\{V_t^{(1)}(W); t \in \mathbf{R}_+\}$ - случайный процесс со значениями в $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, удовлетворяющий стохастическому дифференциальному уравнению

$$dV_t^{(1)}(W) = \left[L dW_t - \left(iH + \frac{1}{2} L^* L \right) dt \right] V_t^{(1)}(W) \\ V_0^{(1)}(W) = 1$$

Тогда

$$\Phi_t[X] = \mathbf{M}_{(1)} V_t^{(1)}(W)^* \lambda V_t^{(1)}(W),$$

где $\mathbf{M}_{(1)}$ -математическое ожидание, отвечающее распределению винеровского процесса. С другой стороны, пусть N_t - пуассоновский процесс с единичной интенсивностью и $\{V_t^{(2)}(N);$

Тогда

$$dV_t^{(2)}(N) = \left[(L - \mathbf{I}) dN_t - \left(iH + \frac{1}{2} (L^* L - \mathbf{I}) \right) dt \right] V_t^{(2)}(N) \\ V_0^{(2)}(N) = \mathbf{I}$$

$$\Phi_t[X] = M_{(2)} V_t^{(2)}(N) * \lambda V_t^{(2)}(N)$$

где $M_{(2)}$ - математическое ожидание, отвечающее распределению пуассоновского процесса.

Заметим, что решения уравнений (2.7), (2.9) могут быть записаны в виде хронологически-упорядоченных экспонент (мультипликативных стохастических интегралов)

$$V_t^{(1)}(W) = \underset{\text{exp}}{\leftarrow} \int_0^t \left\{ L dW_s - \left[iH + \frac{1}{2} (L^* + L) L \right] ds \right\}$$

$$V_t^{(2)}(N) = \underset{\text{exp}}{\leftarrow} \int_0^t \left\{ (\ln L) dN_s - \left[iH + \frac{1}{2} (L^* L - I) \right] ds \right\}.$$

Ограничимся выводом представления (2.8). Введем семейство изометрических операторов $V_t^{(1)}$ из \mathcal{H} в $\mathfrak{H}_\ell = \mathcal{H} \otimes \Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$, определяемых соотношением

$$V_t^{(1)} \varphi = V(t) (\varphi \otimes \psi_0); \quad \varphi \in \mathcal{HC}.$$

Из уравнения (1.26) следует

$$dV_t^{(1)} = \left[L dQ(t) - \left(iH + \frac{1}{2} L^* L \right) dt \right] V_t^{(1)}$$

поскольку в силу (2.5) коэффициент при $dA(t)$ может быть произвольным. Если воспользоваться теперь преобразованием дуальности, то формула (2.4) перейдет в (2.8), а уравнение (1.26) - в уравнение (2.7). Аналогично, вывод представления (2.10) из формулы (2.4) основан на преобразовании $J^{(\lambda)}$ из п. 2.1 (при $\lambda = 1$) (см. п. 2.4).

2.3. Расширения инструментальных процессов. При рассмотрении процессов непрерывного измерения естественно возникает понятие безграничной делимости инструмента, которое объединяет безграничную делимость распределений вероятностей и динамических отображений. В работе Баркиелли и Лупиери (см. [61], [142]) указано соответствующее расширение в пространстве Фока, которое можно рассматривать как конкретизацию общего результата Озава (п. 4.1.2) для процессов измерения, протекающих во времени. Ограничимся здесь двумя наиболее важными примерами.

Пример 1. Рассмотрим и.-процесс $\{\mathcal{N}_{a,b}^{(1)}\}$ с генератором

$$\mathcal{L}^{(1)}(\lambda)[X] = \mathcal{L}[\lambda] + i\lambda (L^* X + X L) - \frac{1}{2} \lambda^2 X,$$

где $L, H = H^*$ -ограниченные операторы в гильбертовом пространстве \mathcal{H} , а $\mathcal{L}[X]$ дается формулой (2.3). Согласно п. 4.2.3, это есть процесс непрерывного измерения наблюдаемой $A = (L + L^*)$ в системе, эволюционирующей с гамильтонианом H . Из результата Баркиелли и Лупиери следует, что

$$\mathcal{P}_{0,t}^{(1)}(E)[X] = \mathcal{E}_0 \left[V(t)^* \left(X \otimes P_{0,t}^{(1)}(E) \right) V(t) \right]; \quad E \in \mathcal{B}_{0,t}$$

где $\{V(t)\}$ -семейство унитарных операторов в гильбертовом пространстве $= \mathcal{H} \otimes \Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$, удовлетворяющее квантовому стохастическому дифференциальному уравнению (1.26), а $P_{0,t}^{(1)}(E)$; $E \in \mathcal{B}_{0,t}$, спектральная мера семейства совместимых наблюдаемых $Q(s)$; $0 \leq s \leq t$, в $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$ (см. п. 4.2.1) (в силу однородности аналогичное представление имеет место и для $\mathcal{P}_{a,b}^{(1)}$, где $a \leq b$).

Пусть $\{\mathcal{N}_{a,b}^{(1)}\}$ -соответствующий и.-процесс в пространстве состояний. Тогда соотношение (2.16) приобретает вид формулы (4.1.10)

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{0,t}^{(1)}(E)[S] = & \text{Tr}_{\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))} V(t) (S \otimes |\psi_0\rangle \langle \psi_0|) \times \\ & \times V(t)^* \left(\mathbf{I} \otimes P_{0,t}^{(1)}(E) \right), \end{aligned}$$

которая имеет ясную физическую интерпретацию: наблюдаемая система, первоначально находившаяся в состоянии S и эволюционирующая с гамильтонианом H , взаимодействует с квантовым шумом посредством сингулярного гамильтониана (2.6). При этом над квантовым шумом, который играет роль пробной системы, производится непрерывное неразрушающее измерение семейства совместимых наблюдаемых $Q(s); 0 \leq s \leq t$.

Пример 2. И.-процесс $\{\mathcal{P}_{a,b}^{(2)}\}$ с генератором

$$\mathcal{L}^{(2)}(\lambda)[X] = i[H, \ddot{\Lambda}] + (L^* X L e^{i\lambda} - L^* L \circ \ddot{\Lambda}),$$

где $H, L \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$, является естественным обобщением считающего процесса из п. 4.2.5. Для этого процесса расширение имеет вид

$$\mathcal{S}_{0,t}^{(2)}(E) = \mathcal{E}_0 \left[V(t)^* \left(\mathbf{I} \otimes P_{0,t}^{(2)}(E) \right) V(t) \right]; \quad E \in \mathcal{B}_{0,t}$$

где $P_{0,t}^{(2)}(E); E \in \mathcal{B}_{0,t}$, спектральная мера семейства совместимых наблюдаемых $\Lambda(s); 0 \leq s \leq t$, в $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$. Соответствующее представление в пространстве состояний

$$\mathcal{K}_{0,t}^{(2)}(E) = \text{Tr}_{\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))} V(t) (S \otimes |\psi_0\rangle \langle \psi_0|) V(t)^* \left(\mathbf{I} \otimes P_{0,t}^{(2)}(E) \right) \quad (2.20)$$

имеет интерпретацию, аналогичную соотношению (2.17).

Несколько слов о методе доказательства соотношения (2.16), (2.19). Обозначим

$$\tilde{\mathcal{P}}_t^{(j)}(B) = \mathcal{E}_0 \left[V(t)^* \left(\mathbf{I} \otimes P_{0,t}^{(j)}(y(\cdot) : y(t) - y(0) \in B) \right) V(t) \right],$$

где $B \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$, и введем характеристические функции

Тогда

$$\tilde{\Phi}_t^{(j)}(\lambda) = \int_{\mathbf{R}} e^{i\lambda x} \tilde{\mathcal{P}}_t^{(j)}(dx)$$

$$\tilde{\Phi}_t^{(j)}(\lambda)[K] = \mathcal{E}_0 \left[V(t)^* \cdot \left(\lambda^n \otimes e^{i\lambda Y^{(j)}(t)} \right) V(t) \right],$$

где $Y^{(1)}(t) = Q(t)$ и $Y^{(2)}(t) = \Lambda(t)$. Используя Квантовую формулу Ито, можно доказать, что функции (2.21) удовлетворяют уравнениям

$$d\tilde{\Phi}_t^{(j)}(\lambda) = \mathcal{L}^{(j)}(\lambda) \cdot \tilde{\Phi}_t^{(j)}(\lambda) dt,$$

г. е.

$$\tilde{\Phi}_t^{(j)}(\lambda) = \exp t \mathcal{L}^{(f)}(\lambda).$$

Отсюда вытекает, что $\{\tilde{\mathcal{P}}_t^{(j)}\}$ есть сверточная полугруппа, отвечающая и.-процессу $\{\mathcal{P}_{a,b}^{(j)}\}$. В силу взаимной однозначности соответствия между и.-процессами и сверточными полугруппами (п. 4.2.5) отсюда следуют соотношения (2.16), (2.19).

2.4. Стохастические представления процессов непрерывного измерения. Используя прием, который позволил получить в п. 2.2 стохастические представления квантовой динамической полугруппы, найдем соответствующие стохастические представления для процессов непрерывного измерения [105]. Из этих представлений вытекает явное описание распределений вероятностей в пространстве траекторий - исходов непрерывного измерения и апостериорных состояний наблюдаемой квантовой системы.

Рассмотрим сначала и.-процесс с генератором (2.15). Как отмечалось в п. 4.2.5, он сосредоточен на непрерывных траекториях. Пусть $\mu_{(1)}$ -мера Винера в пространстве непрерывных функций \mathcal{B} , отвечающая стандартному винеровскому процессу W_t .

Предложение 1. И.-процесс $\{N_{a,b}^{(1)}\}$ абсолютно непрерывен по мере, $\mu_{(1)}$ в том смысле, что

$$\mathcal{K}_{0,t}^{(1)}(E)[S] = \int_E V_t^{(1)}(W) S V_t^{(1)}(W)^* d_{\mu_{(1)}}(W); E \in \mathcal{B}_{0,t} \cap \mathcal{C},$$

где $\{V_t^{(1)}(W)\}$ -семейство ограниченных операторов в \mathcal{C} , удовлетворяющее стохастическому дифференциальному уравнению (2.7) относительно меры $\mu_{(1)}$.

Доказательство основано на применении преобразования дуальности к представлению (2.17). При этом, как в п. 2.2, по-прежнему являются операторы $V_t^{(1)}(W)$, а спектральная мера $P_{0,t}^{(1)}$ семейства $Q(s); 0 \leq s \leq t$, диагонализует, так что проектор $P_{0,i}^{(1)}(E)$ переходит в индикатор множества $E \in \mathcal{B}_{0,t} \cap \mathcal{C}$.

Соотношение (2.17) дает конкретное представление вполне положительного инструмента $\mathcal{K}_{0,t}^{(1)}$ в виде (4.1.12). Отсюда получается распределение вероятностей в пространстве наблюдаемых траекторий

$$\mu_S(E) = \int_E \text{Tr} S V_t^{(1)}(W)^* V_t^{(1)}(W) d_{\mu_{(1)}}(W); E \in \mathcal{B}_{0,t} \cap \mathcal{C}$$

Оно абсолютно непрерывно по мере Винера $\mu_{(1)}$, причем плотность дается формулой

$$p_t^{(1)}(W) = \text{Tr} S V_t^{(1)}(W) V_t^{(1)}(W)^*$$

и почти наверное положительна. Апостериорное состояние, отвечающее наблюдаемой траектории $W_s; 0 \leq s \leq t$, есть

$$S_t^{(1)}(W) = p_t^{(1)}(W)^{-1} V_t^{(1)}(W) S V_t^{(1)}(W)^*$$

Отметим, что если начальное состояние чистое, $S = |\psi\rangle\langle\psi|$, то апостериорные состояния являются чистыми $S_t^{(1)}(W) = |\psi_t^{(1)}(W)\rangle\langle\psi_t^{(1)}(W)|$, где

$$\psi_t^{(1)}(W) = V_t^{(1)}(W)\psi / \|V_t^{(1)}(W)\psi\|$$

Перейдем к случаю считающего процесса с генератором (2.18). Пусть $\mu_{(2)}$ -мера в пространстве \mathcal{D} , отвечающая пуассоновскому процессу единичной интенсивности.

Предложение 2. И.-процесс $\{\mathcal{M}_{a,b}^{(2)}\}$ абсолютно непрерывен по мере $\mu_{(2)}$, а именно

$$\mathcal{A}_{0,t}^{(2)}(E)[S] = \int_E V_t^{(2)}(N) S V_t^{(2)}(N)^* d_{\mu_{(2)}}(N); E \in \mathcal{B}_{0,t} \cap \mathcal{D},$$

где $\{V_t^{(2)}(N)\}$ -семейство ограниченных операторов в \mathcal{B} , удовлетворяющее стохастическому дифференциальному уравнению (2.9) относительно меры $\mu_{(2)}$.

Доказательство соотношения (2.25) требует некоторого преобразования представления (2.20). Рассмотрим унитарные операторы Вейля $V_s(t) = \exp [zA^+(t) - zA(t)]$, где $z \in \mathbf{C}$. При $s \leq t$ имеет место соотношение

$$V_x(t)^* \Lambda(s) V_z(t) = \Lambda(s) + \bar{z}A(s) + zA^+(s) + |z|^2 s \equiv \Pi(s)$$

которое проверяется с использованием уравнения (1.27) и квантовой формулы Ито. Положим $\bar{z} = 1$, тогда $\Pi(s)$ является пуассоновским процессом единичной интенсивности в пространстве

Фока. Обозначая $\tilde{U}_t = V_1(t) * V(t)$, перепишем (2.20) в виде

$$\mathbf{x}_{0,t}^{(2)}(E) = \text{Tr}_{\Gamma(L^2(R_+))} \tilde{U}_t (S \otimes |\psi_0\rangle \langle \psi_0|) \tilde{U}_t^* \left(\mathbf{I} \otimes \tilde{P}_{0,t}^{(2)}(E) \right),$$

где $\tilde{P}_{0,t}^{(2)}$ -спектральная мера семейства совместимых наблюдаемых $\Pi(s)$; $0 \leq s \leq t$. Из квантовой формулы Ито вытекает уравнение для \tilde{U}_t :

$$d\tilde{U}_t = \left\{ (L - \mathbf{I})dA^+(t) - (L - \mathbf{I})^*dA(t) - \left[iH + \frac{1}{2} (L^*L - 2L + \mathbf{I}) \right] dt \right\} \tilde{U}_t$$

Вводя изометрические операторы $V_t^{(2)}$ из \mathcal{C} в \mathfrak{F} по формуле

$$V_t^{(2)}\varphi = \tilde{U}_t(\varphi \otimes \psi_0); \quad \varphi \in \mathcal{B}$$

и учитывая соотношения (2.5), получаем уравнение

$$dV_t^{(2)} = \left\{ (L - \mathbf{I})d\Pi(t) - \left[iH + \frac{1}{2} (L^*L - \mathbf{I}) \right] dt \right\} V_t^{(2)}$$

Унитарный оператор $J^{(1)}$ из п. 2.1 переводит пространство Фока $\Gamma(L^2(\mathbf{R}_+))$ в $L^2(N)$, где N_t - классический пуассоновский процесс единичной интенсивности, при этом уравнение (2.27) переходит в (2.9), проектор $\tilde{P}_{0,t}^{(2)}(E)$ - в индикатор множества E , а формула (2.26) - в представление (2.25).

Для распределения вероятностей в пространстве наблюдаемых траекторий и апостериорных состояний получаются формулы, аналогичные (2.23) – (2.25).

2.5. Нелинейные стохастические уравнения апостериорной динамики. Получим стохастические дифференциальные уравнения, которым удовлетворяют наблюдаемые траектории и апостериорные состояния в процессе непрерывного квантового измерения. Рассмотрим сначала процесс измерения наблюдаемой $A = L + L^*$ с генератором (2.15). Из уравнения (2.7) для семейства $V_t^{(1)}(W)$ и формулы (2.23) вытекает, что плотность $P_t^{(1)}(W)$ распределения вероятностей наблюдаемых траекторий μ_s относительно меры Винера $\mu_{(1)}$ удовлетворяет стохастическому дифференциальному уравнению

$$dp_t^{(1)}(W) = m_t(W)p_t^{(1)}(W)dW$$

где

$$m_t(W) = \text{Tr } S_t^{(1)}(W)A$$

- апостериорное среднее наблюдаемой A . Отсюда следует¹⁾, что наблюдаемый процесс $Y(t)$ является процессом диффузионного типа, удовлетворяющим стохастическому дифференциальному уравнению

$$dY(t) = m_t(Y)dt + dW_t$$

1. См. Р. Ш. Липцер, А. Н. Ширяев. Статистика случайных процессов. М.: Наука, 1974, 7.2.

Применяя стохастическое исчисление Ито, получаем уравнение для апостериорного состояния (2.24)

$$dS_t^{(1)}(Y) - \mathcal{K} [S_t^{(1)}(Y)] = \left[(L - m_t(Y)) S_t^{(1)}(Y) + S_t^{(1)}(Y) (L - m_t(Y))^* \right] [dY(t) - m_t(Y)dt]$$

где

$$\mathcal{K}[S] = -i[H, S] + LSL^* - L^*L \circ S$$

Это уравнение было получено В. П. Белавкиным из рассмотрения квантового аналога задачи фильтрации случайных процессов [64]. В случае чистых состояний уравнение для вектора апостериорного состояния имеет вид

$$d\psi_t^{(1)}(Y) = [L - m_t(Y)] \psi_t^{(1)}(Y) [dY(t) - m_t(Y)dt] - \left[iH + \frac{1}{2} (L^*L - 2Lm_t(Y) + m_t(Y)^2) \right] \psi_t^{(1)}(Y)dt$$

Нелинейность уравнений (2.30), (2.31) обусловлена нормировкой апостериорных состояний (2.24), в основе же лежит линейное стохастическое уравнение (2.7) типа уравнения Закаи в классической теории фильтрации.

Большой интерес представляет задача вывода и исследования уравнений (2.30), (2.31) в случае, когда L, H - неограниченные операторы. В работе В. П. Белавкина и Сташевского [65] рассмотрено уравнение

$$d\psi_t^{(1)}(Y') = (Q - m_t(Y)) \psi_t^{(1)}(Y) [dY(t) - m_t(Y)dt] - \left[iP^2/2m + \frac{1}{2} (Q - m_t(Y))^2 \right] \psi_t^{(1)}(Y)dt$$

которое получается из (2.31) формальной заменой $H = P^2/2m$, $L = Q$, где P, Q - канонические наблюдаемые нерелятивистской частицы массы m . Это соответствует непрерывному приближенному измерению координаты свободной частицы. Найдено явное решение в случае гауссовского начального состояния и показано, что оно является гауссовским с дисперсией, стремящейся к конечному пределу при $t \rightarrow +\infty$. Таким образом, уравнение (2.32) снимает известный квантовомеханический парадокс с распылением волнового пакета свободной частицы.

Интересно, что сходные нелинейные уравнения, однако с совершенно иной мотивировкой и интерпретацией, возникли практически одновременно в работах ряда авторов, занимающихся поисками альтернативного концептуального обоснования теории квантового измерения. В работе, опубликованной в сборнике [142], Гирарди, Римини и Вебер поставили вопрос о нахождении уравнений, дающих единое описание микро-и макросистем, из которых, в частности, вытекали бы как обратимая квантовая динамика, так и необратимые изменения типа проекционного постулата. Предлагались различные решения этого вопроса; в работах Джизена [91], Гирарди, Пирла и Римини [89] введено уравнение типа (2.31), где, однако, вместо $dY(t) - m_t(Y)dt$ фигурирует стохастический дифференциал некоторого априорно данного винеровского процесса (уравнение в [91]

отличается за счет выбора фазового множителя у $\psi_t^{(1)}$. Пусть $H = 0, L = \sum x_i E_i$ - самосопряженный оператор с чисто точечным спектром. В [91], [89] отмечается, что получающееся уравнение

$$d\psi_t = (L - \langle L \rangle_t) \psi_t dW_t - \frac{1}{2} (L - \langle L \rangle_t)^2 \psi_t dt$$

где $\langle L \rangle_t = \langle \psi_t | L \psi_t \rangle$, дает динамическое описание проекционного постулата $\psi \rightarrow \psi_i = E_i \psi / \|E_i \psi\|$, в том смысле, что при $t \rightarrow +\infty$ решение ψ_t стремится к одному из состояний ψ_i . В работе Гатарека и Джизена [88] дано математическое исследование уравнения (2.33) для неограниченного оператора L , а также уравнения типа (2.32). Для доказательства существования слабого решения эти авторы использовали формальный прием преобразования вероятностной меры (теорему Гирсанова), который в схеме непрерывного измерения имеет содержательный смысл перехода от процесса $Y(t)$ к винеровскому процессу W_t , определяемого формулой (2.29).

В случае считающего процесса с генератором (2.18) стохастическое уравнение для плотности в пространстве траекторий имеет вид

$$dp_t^{(2)}(N) = [\lambda_t(N) - 1] p_t^{(2)}(N) (dN - dt)$$

где

$$\lambda_t(N) = \text{Tr } S_t^{(2)}(N) L^* L$$

- апостериорная интенсивность скачков. Уравнение для апостериорного состояния

$$\begin{aligned} dS_t^{(2)}(Y) - \mathcal{K} [S_t^{(2)}(Y)] dt = \\ = \left[\frac{L S_t^{(2)}(Y) L^*}{\lambda_t(Y)} - I \right] [dY(t) - \lambda_t(Y) dt] \end{aligned}$$

В статье В. П. Белавина в сборнике [35] приведено общее нелинейное уравнение квантовой фильтрации, включающее в себя как уравнение (2.30), так и (2.34).

5 Квантовый шум и квантовые преобразования

Классический шум и марковские процессы

Квантовые преобразования

Обзор

Окружающая среда и квантовые преобразования Представление операторной суммой
Аксиоматический подход к квантовым преобразованиям Примеры квантового шума и квантовых преобразований След и частичный след Геометрическая картина квантового преобразования одного кубита Каналы с классической ошибкой и переворотом фазы Деполяризующий канал Затухание амплитуды Затухание фазы Применения квантовых преобразований Мастер-уравнения Томография квантовых процессов Ограничения формализма квантовых преобразований Меры различия квантовой информации Меры различия классической информации Насколько близки два квантовых состояния? Следовая метрика Степень совпадения Связь между мерами различия Насколько квантовый канал сохраняет информацию?

6 Исправление квантовых ошибок

Введение
Трехкубитовый код, исправляющий классические ошибки
Трехкубитовый код, исправляющий фазовые ошибки
Код Шора
Теория исправления квантовых ошибок
Дискретизация ошибок
Модели независимых ошибок
Вырожденные коды
Квантовая граница Хэмминга
Построение квантовых кодов
Классические линейные коды
Коды Кальдербанка-Шора-Стина
Симплектические коды
Формализм стабилизаторов
Унитарные операторы и формализм стабилизаторов
Измерения в формализме стабилизаторов
Теорема Готтесмана-Нилла
Построение симплектических кодов
Примеры
Стандартная форма симплектического кода
Оглавление
Квантовые схемы для кодирования, декодирования и исправления ошибок
Квантовые вычисления, устойчивые к ошибкам
Устойчивость к ошибкам, общая картина
Устойчивые к ошибкам квантовые логические элементы
Устойчивое к ошибкам измерение
Элементы надежного квантового вычисления

7 Энтропия и информация

Шенноновская энтропия, Основные свойства энтропии
Двоичная энтропия
Относительная энтропия
Условная энтропия и взаимная информация
Неравенство обработки данных
Энтропия фон Неймана
Квантовая относительная энтропия
Основные свойства энтропии
Измерения и энтропия
Субаддитивность
Вогнутость энтропии
Энтропия смеси квантовых состояний
Сильная субаддитивность
Доказательство сильной субаддитивности
Сильная субаддитивность: основные применения

8 Квантовая теория информации

Различение квантовых состояний и доступная информация
Граница Холево
Примеры применения границы Холево
Сжатие данных
Теорема Шеннона о кодировании для канала без шума
Теорема Шумахера о кодировании для квантового канала без шума
Передача классической информации по квантовым каналам с шумом
Связь по классическому каналу с шумом
Связь по квантовым каналам с шумом
Квантовая информация в квантовых каналах с шумом
Обменная энтропия и квантовое неравенство Фано
Квантовое неравенство обработки данных
Квантовая граница Синглтона
Исправление квантовых ошибок, охлаждение и демон Максвелла
Запутанность как физический ресурс
Преобразование запутанности чистого состояния системы из двух компонент
Очищение и разбавление запутанности
Очищение запутанности и исправление квантовых ошибок
Квантовая криптография
Криптография с закрытым ключом
Усиление конфиденциальности и согласование информации
Квантовое распределение ключей
Секретность и когерентная информация
Безопасность квантового распределения ключей

Part V

Квантовые вычисления

9 Квантовые схемы

Квантовые алгоритмы Операции на одном кубите Условные операции Измерение Универсальные квантовые элементы Универсальность двухуровневых унитарных операторов Универсальность набора из однокубитовых элементов и CNOT Конечный набор универсальных операций Трудность аппроксимации общего унитарного оператора в общем случае ; Сложность квантовых вычислений Модель квантовых схем вычислений

Моделирование квантовых систем Моделирование в действии Алгоритм квантового моделирования Пример Перспективы квантового моделирования

9.0.1 Моделирование квантового компьютера

(разберу, интересная и популярная тема)

10 Квантовое преобразование Фурье и его приложения

Квантовое преобразование Фурье Определение собственного числа Оценка скорости работы и вероятности ошибки Приложения: нахождение порядка и факторизация Нахождение порядка * Факторизация Общие приложения квантового преобразования Фурье Нахождение периода Дискретный логарифм Задача о скрытой подгруппе Возможны ли другие квантовые алгоритмы?

11 Квантовые алгоритмы поиска

Квантовый алгоритм поиска Оракул Процедура Геометрическая интерпретация Эффективность Квантовый поиск как квантовое моделирование Квантовое перечисление Ускорение решения NP-полных задач; Квантовый поиск в неструктурированной базе данных Оглавление Оптимальность алгоритма поиска Ограничение алгоритмов в модели черного ящика

12 О физической реализации квантовых компьютеров

Основные принципы Условия для квантового вычисления Представление квантовой информации Реализация унитарных операторов Приготовление начального состояния Измерение конечного результата Гармонический осциллятор как модель квантового компьютера Физическая аппаратура Гамильтониан Квантовые вычисления Недостатки Квантовый компьютер на оптических фотонах Физическая аппаратура Квантовые вычисления Недостатки Квантовая электродинамика в оптических резонаторах Физическая аппаратура Гамильтониан Поглощение и преломление для одиночного фотона и одиночного атома Квантовые вычисления Ионы в ловушке Физическая аппаратура Гамильтониан Квантовые вычисления Эксперимент Ядерный магнитный

резонанс Физическая аппаратура Гамильтониан Квантовые вычисления Эксперимент
Другие варианты реализации

Part VI

Problems

13 Типичные задачи

13.1 Общие вопросы

13.1.1 Problems about проверку основ теории

13.2 Типичные задачи (!!)

(!!! добавлю много из Филиппова семинаров!!! очень хорошо по ним тренироваться)

13.2.1 Problems about понимание состояний, запутанности, простейших преобразований

Ф-вв-л2.1 Параметры Стокса

Найдите параметры Стокса для поляризационного состояния фотона

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{2}-i}{2}|H\rangle + \frac{e^{i\pi/6}}{2}|V\rangle$$

Solution

Представляем состояние в виде столбца, находим матричный элемент (??? Почему такие формулы???)

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2}-i \\ e^{i\pi/6} \end{pmatrix} & \langle\psi| &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2}+i & e^{-i\pi/6} \end{pmatrix} \\ \langle X \rangle &= \langle\psi|X|\psi\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \sqrt{2}+i & e^{-i\pi/6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2}-i \\ e^{i\pi/6} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{6}-1}{4} \\ \langle Y \rangle &= \langle\psi|Y|\psi\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \sqrt{2}+i & e^{-i\pi/6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2}-i \\ e^{i\pi/6} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}+\sqrt{3}}{4} \\ \langle Z \rangle &= \langle\psi|Z|\psi\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \sqrt{2}+i & e^{-i\pi/6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2}-i \\ e^{i\pi/6} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Ф-вв-л2.2 Измерение

Физическая величина задаётся оператором $F = 2|H\rangle\langle H| + (1-i)|H\rangle\langle V| + (1+i)|V\rangle\langle H|$. Какие результаты можно получить при измерении этой физической величины?

Solution

Пишем состояние в виде матрицы и находим собственные значения:

$$\begin{aligned} F &= \begin{pmatrix} 2 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix} \\ \det \begin{pmatrix} 2-\lambda & 1-i \\ 1+i & -\lambda \end{pmatrix} &= \lambda^2 - 2\lambda - 2 = 0 \\ \lambda_{\pm} &= 1 \pm \sqrt{3} \end{aligned}$$

Ф-вв-л2.3 Коллапс

В какие состояния может перейти (коллапсировать) квантовая система при измерении физической величины $F = 2|H\rangle\langle H| + (1-i)|H\rangle\langle V| + (1+i)|V\rangle\langle H|$?

Solution

$$F|f_{\pm}\rangle = \lambda_{\pm}|f_{\pm}\rangle$$
$$|f_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6+2\sqrt{3}}} \begin{pmatrix} 1+\sqrt{3} \\ 1+i \end{pmatrix}, \quad |f_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6-2\sqrt{3}}} \begin{pmatrix} 1-\sqrt{3} \\ 1+i \end{pmatrix}$$

Ф-вв-л2.4 Перепутанность

При каких значениях действительного параметра φ квантовое состояние двух фотонов

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} (|H\rangle \otimes |H\rangle + |H\rangle \otimes |V\rangle + |V\rangle \otimes |H\rangle + e^{i\varphi}|V\rangle \otimes |V\rangle)$$

является перепутанным?

Solution

Задача сводится к проверке определения:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} ac \\ ad \\ bc \\ bd \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

Ответ: при всех $\varphi \neq 2\pi n, n \in \mathbb{Z}$

Ф-вв-л3.2 Измерение

Двухкубитная система находится в квантовом состоянии $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$, где $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ - стандартный базис для каждого кубита. В некоторый момент времени происходит измерение физической величины $X = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|$ над первым кубитом. В какие состояния может перейти (коллапсировать) вся система после измерения?

Solution

(думать нужно, там его рукой написан ответ)

Ф-вв-л3.3 Спектр

Какие значения может принимать при измерении физическая величина $F \otimes G$ если $F = (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ и $G = (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$?

Solution

(думать нужно, там его рукой написан ответ)

13.2.2 Задачи о кубитах

Вопросы по теории

Какое ускорение в решении задачи поиска можно получить в квантовом алгоритме по сравнению с классическим

?

\sqrt{N}

(???? А почему??????)

13.2.3 Задачи о кутритах и схожем

6. О

(а) Можно ли преобразовать состояние двух кутритов $\sqrt{\frac{7}{12}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|11\rangle + \frac{1}{\sqrt{12}}|22\rangle$ в состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle + \frac{e^{i\pi/4}}{2}|11\rangle + \frac{i}{\sqrt{8}}|20\rangle + \frac{e^{i\pi/3}}{\sqrt{8}}|22\rangle$ посредством локальных операций и классической коммуникации?

(б) Можно ли преобразовать состояние двух кутритов $\sqrt{\frac{7}{12}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|11\rangle + \frac{1}{\sqrt{12}}|22\rangle$ в состояние $\frac{1}{\sqrt{3}}|01\rangle + \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{6}}|11\rangle + \frac{i}{2}|20\rangle + \frac{e^{i\pi/3}}{2}|22\rangle$ посредством локальных операций и классической коммуникации?

14 Другие задачи (????)

(???? тут много еще про это нужно думать.)

14.0.1 Разные задачи (????)

(???? тут много еще про это нужно думать.)

1.

Для d -уровневой системы, где d - простое число, экспериментатор равновероятно выбирает взаимно несмещенные базисы $\{|a\alpha\rangle\}_\alpha, a = 1, \dots, d+1$ (из полного набора таких базисов) и проводит проективные измерения в этих базисах. Выразите матрицу плотности ρ через вероятности исходов измерений.

2. О

Известно, что чистые кубитные состояния $|\psi_1\rangle = |0\rangle$ и $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ генерируются квантовым источником с вероятностями $p_1 = \frac{4}{5}$ и $p_2 = \frac{1}{5}$ соответственно. Какова максимально возможная вероятность успеха в задаче безошибочного различения этих состояний?

3. О

Найдите физически реализуемое приближение для транспонирования d -уровневой квантовой системы. Для этого рассмотрите деполяризующее отображение $\Phi_q[\rho] = q\rho + (1-q)\text{tr}[\rho]\frac{I_d}{d}$ и укажите диапазон для действительного параметра q , при котором отображение Φ_q о T является квантовым каналом. $)T$ - транспонирование в фиксированном ортонормированном базисе).

5. Кубитный инструмент

Рассмотрите кубитный инструмент $\{i \rightarrow \mathcal{I}_i\}$ с двумя элементарными исходами ($i = 1, 2$) вида $\mathcal{I}_1[\varrho] = \frac{1}{2}U_1\sqrt{1+p\sigma_z}\varrho\sqrt{1+p\sigma_z}U_1^\dagger$, $\mathcal{I}_2[\varrho] = \frac{1}{2}U_2\sqrt{1-p\sigma_z}\varrho\sqrt{1-p\sigma_z}U_2^\dagger$, где U_1 и U_2 - унитарные операторы, $-1 < p < 1$. Постройте физическую реализацию этого квантового инструмента.

7.

Классический источник производит биты "0" и "1" с вероятностями p_0 и p_1 соответственно. Бит "1" физически кодируется в оптический импульс интенсивности $I_1 = I$, а бит "0" соответствует отсутствию сигнала ($I_0 = 0$). Информация передается по длинному оптоволокну и детектируется "оп-off" детектором. В результате ослабления оптического импульса в волокне и конечной квантовой эффективности детектора вероятность зарегистрировать исход "оп" при пересылке бита "1" равна $1/2$. Темновых отсчетов у детектора нет. Найдите пропускную способность классического канала связи. Каким должно быть соотношение битов "0" и "1" в словах, используемых для достижения максимальной скорости надежной передачи данных?

8. Дефазировка

В линии квантовой коммуникации происходит дефазировка квантовых состояний и присутствуют потери частиц, что приводит к квантовому каналу

$$\Phi[\varrho] = \left(\frac{p(q\varrho + (1-q)\sigma_x\varrho\sigma_x)}{0} \middle| \frac{0}{(1-p)\text{tr}[\varrho]} \right), \quad 0 \leq p, q \leq 1$$

где ϱ - матрица плотности кубита. Используя однобуквенные кодирования, при которых среднее состояние ансамбля ϱ_A является максимально смешанным,

- оцените классическую пропускную способность этого канала;
- найдите комплементарный канал;
- оцените классическую пропускную способность линии связи с использованием ресурса перепутанности;
- оцените квантовую пропускную способность линии связи.

9.

При каком условии на параметр q кубитный деполяризующий канал $\Phi_q[\varrho] = q\varrho + (1-q)\text{tr}[\varrho]\frac{I}{2}$ является дважды самосовместимым? Т.е., при каких значениях шумового параметра q возможно приближенное клонирование произвольных кубитных состояний?

10. О кинетическом уравнении Накажimy-Цванцига для кубита

Решите кинетическое уравнение Накажimy-Цванцига для кубита:

$$\frac{d}{dt}\varrho(t) = \int_0^t (\gamma\delta(t-t') - \gamma^2 \sin[\gamma(t-t')]) [\sigma_z\varrho(t')\sigma_z - \varrho(t')] dt'$$

14.0.2 Об особенных квантовых каналах (?????)

4. О канале Ландау-Стритера

Докажите, что канал Ландау-Стритера является унистохастическим.
(не думаю, что про это думать полезно пока минимальный уровень не взят.)

Part VII

Well-known and Important Articles

15 The Physical Implementation of Quantum Computation by DiVincenzo

Abstract

After a brief introduction to the principles and promise of quantum information processing, the requirements for the physical implementation of quantum computation are discussed. These five requirements, plus two relating to the communication of quantum information, are extensively explored and related to the many schemes in atomic physics, quantum optics, nuclear and electron magnetic resonance spectroscopy, superconducting electronics, and quantum-dot physics, for achieving quantum computing.

15.1 Introduction

¹ The advent of quantum information processing, as an abstract concept, has given birth to a great deal of new thinking, of a very concrete form, about how to create physical computing devices that operate in the hitherto unexplored quantum mechanical regime. The efforts now underway to produce working laboratory devices that perform this profoundly new form of information processing are the subject of this book.

In this chapter I provide an overview of the common objectives of the investigations reported in the remainder of this special issue. The scope of the approaches, proposed and underway, to the implementation of quantum hardware is remarkable, emerging from specialties in atomic physics[1], in quantum optics[2], in nuclear[3] and electron[4] magnetic resonance spectroscopy, in superconducting device physics[5], in electron physics[6], and in mesoscopic and quantum dot research[7]. This amazing variety of approaches has arisen because, as we will see, the principles of quantum computing are posed using the most fundamental ideas of quantum mechanics, ones whose embodiment can be contemplated in virtually every branch of quantum physics.

The interdisciplinary spirit which has been fostered as a result is one of the most pleasant and remarkable features of this field. The excitement and freshness that has been produced bodes well for the prospect for discovery, invention, and innovation in this endeavor.

15.2 Why *quantum* information processing?

The shortest of answers to this question would be, why not? The manipulation and transmission of information is today carried out by physical machines (computers, routers, scanners, etc.), in which the embodiment and transformations of this information can be described using the language of classical mechanics. But the final physical theory of the world is not Newtonian mechanics, and there is no reason to suppose that machines following the laws of quantum mechanics should have the same computational power as classical machines; indeed, since Newtonian mechanics emerges as a special limit of quantum mechanics, quantum machines can only have greater computational power than classical ones. The great pioneers and visionaries who pointed the way towards quantum computers, Deutsch[8], Feynman[9], and others, were stimulated by such thoughts. Of course, by a similar line of reasoning, it may well be asked whether machines embodying the principles of other refined descriptions of nature (perhaps

¹Prepared for Fortschritte der Physik special issue, *Experimental Proposals for Quantum Computation*, eds. H.-K. Lo and S. Braunstein.

general relativity or string theory) may have even more information processing capabilities; speculations exist about these more exotic possibilities, but they are beyond the scope of the present discussion.

But computing with quantum mechanics really deserves a lot more attention than wormhole computing or quantum-gravity computing; quantum computing, while far in the future from the perspective of CMOS roadmaps and projections of chip fab advances, can certainly be seen as a real prospect from the perspective of research studies in quantum physics. It does not require science fiction to envision a quantum computer; the proposals discussed later in this issue paint a rather definite picture of what a real quantum computer will look like.

So, how much is gained by computing with quantum physics over computing with classical physics? We do not seem to be near to a final answer to this question, which is natural since even the ultimate computing power of classical machines remains unknown. But the answer as we know it today has an unexpected structure; it is not that quantum tools simply speed up all information processing tasks by a uniform amount. By a standard complexity measure (i.e., the way in which the number of computational steps required to complete a task grows with the “size” n of the task), some tasks are not sped up at all[10] by using quantum tools (e.g., obtaining the n th iterate of a function $f(f(\dots f(x)\dots))$ [11]), some are sped up moderately (locating an entry in a database of n entries[12]), and some are apparently sped up exponentially (Shor’s algorithm for factoring an n -digit number[13]).

In other types of information processing tasks, particularly those involving communication[14], both quantitative and qualitative improvements are seen[15]: for certain tasks (choosing a free day for an appointment between two parties from out of n days) there is a quadratic reduction of the amount of communicated data required, if quantum states rather than classical states are transmitted[16]. For some tasks (the “set disjointness problem”, related to allocating non-overlapping segments of a shared memory in a distributed computation) the reduction of required communication is exponential[17]. Finally, there are tasks that are doable in the quantum world that have no counterpart classically: quantum cryptography provides an absolute secrecy of communication between parties that is impossible classically[18]. And for some games, winning strategies become possible with the use of quantum resources that are not available otherwise[19, 20].

This issue, and this chapter, are primarily concerned with the “hows” of quantum computing rather than the “whys,” so we will leave behind the computer science after this extremely brief mention. There is no shortage of other places to obtain more information about these things; I recommend the recent articles by Aharonov[21] and by Cleve[22]; other general introductions[23] will give the reader pointers to the already vast specialized literature on this subject.

15.3 Realizing quantum computation

Let me proceed with the main topic: the physical realization of quantum information processing. As a guide to the remainder of the special issue, and as a means of reviewing the basic steps required to make quantum computation work, I can think of no better plan than to review a set of basic criteria that my coworkers and I have been discussing over the last few years[24] for the realization of quantum computation (and communication), and to discuss the application of these criteria to the multitude of physical implementations that are found below.

So, without further ado, here are the

Five (plus two) requirements for the implementation of quantum computation

1. A scalable physical system with well characterized qubits

For a start, a physical system containing a collection of qubits is needed. A qubit (or, more precisely, the embodiment of a qubit) is[25] simply a quantum two-level system like the two spin

states of a spin $1/2$ particle, like the ground and excited states of an atom, or like the vertical and horizontal polarization of a single photon. The generic notation for a qubit state denotes one state as $|0\rangle$ and the other as $|1\rangle$. The essential feature that distinguishes a qubit from a bit is that, according to the laws of quantum mechanics, the permitted states of a single qubit fills up a two-dimensional complex vector space; the general state is written $a|0\rangle + b|1\rangle$, where a and b are complex numbers, and a normalization convention $|a|^2 + |b|^2 = 1$ is normally adopted. The general state of two qubits, $a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle$, is a four-dimensional vector, one dimension for each distinguishable state of the two systems. These states are generically *entangled*, meaning that they cannot be written as a product of the states of two individual qubits. The general state of n qubits is specified by a 2^n -dimensional complex vector.

A qubit being “well characterized” means several different things. Its physical parameters should be accurately known, including the internal Hamiltonian of the qubit (which determines the energy eigenstates of the qubit, which are often, although not always, taken as the $|0\rangle$ and $|1\rangle$ states), the presence of and couplings to other states of the qubit, the interactions with other qubits, and the couplings to external fields that might be used to manipulate the state of the qubit. If the qubit has third, fourth, etc., levels, the computer’s control apparatus should be designed so that the probability of the system ever going into these states is small. The smallness of this and other parameters will be determined by the capabilities of quantum error correction, which will be discussed under requirement 3.

Recognizing a qubit can be trickier than one might think. For example, we might consider a pair of one-electron quantum dots that share a single electron between them as a two-qubit system. It is certainly true that we can denote the presence or absence of an electron on each dot by $|0\rangle$ and $|1\rangle$, and it is well known experimentally how to put this system into the “entangled” state $1/\sqrt{2}(|01\rangle + |10\rangle)$ in which the electron is in a superposition of being on the left dot and the right dot. But it is fallacious to consider this as a two-qubit system; while the states $|00\rangle$ and $|11\rangle$ are other allowed physical states of the dots, superselection principles forbid the creation of entangled states involving different particle numbers such as $1/\sqrt{2}(|00\rangle + |11\rangle)$.

It is therefore false to consider this as a two-qubit system, and, since there are not two qubits, it is nonsense to say that there is entanglement in this system. It is correct to say that the electron is in a superposition of different quantum states living on the two different dots. It is also perfectly correct to consider this system to be the embodiment of a *single* qubit, spanned by the states (in the misleading notation above) $|01\rangle$ (“electron on the right dot”) and $|10\rangle$ (“electron on the left dot”). Indeed, several of the viable proposals, including the ones by Schön, Averin, and Tanamoto in this special issue, use exactly this system as a qubit. However, false lines of reasoning like the one outlined here have sunk various proposals before they were properly launched (no such abortive proposals are represented in this book, but they can be found occasionally in the literature).

An amazing variety of realizations of the qubit are represented in this volume. There is a very well developed line of work that began with the proposal of Cirac and Zoller[1] for an ion-trap quantum computer, in which, in its quiescent state, the computer holds the qubits in pairs of energy levels of ions held in a linear electromagnetic trap. Various pairs of energy levels (e.g., Zeeman-degenerate ground states, as are also used in the NMR approach[3] discussed by Cory) have been proposed and investigated experimentally. The many neutral-atom proposals (see chapters by Kimble[2], Deutsch[26], and Briegel[27]) use similar atomic energy levels of neutral species. These atomic-physics based proposals use other auxiliary qubits such as the position of atoms in a trap or lattice, the presence or absence of a photon in an optical cavity, or the vibrational quanta of trapped electrons, ions or atoms (in the Platzman proposal below[6] this is the primary qubit). Many of the solid-state proposals exploit the fact that impurities or quantum dots have well characterized discrete energy level spectra; these include the spin states of quantum dots (see chapters by Loss[7] and Imamoglu[2]), the spin states of donor impurities

(see Kane[4]), and the orbital or charge states of quantum dots (see Tanamoto[7]). Finally, there are a variety of interesting proposals which use the quantized states of superconducting devices, either ones involving the (Cooper-pair) charge (see Schön, Averin), or the flux (see Mooij)[5].

2. The ability to initialize the state of the qubits to a simple fiducial state, such as $|000\dots\rangle$

This arises first from the straightforward computing requirement that registers should be initialized to a known value before the start of computation. There is a second reason for this initialization requirement: quantum error correction (see requirement 3 below) requires a continuous, fresh supply of qubits in a low-entropy state (like the $|0\rangle$ state). The need for a continuous supply of 0s, rather than just an initial supply, is a real headache for many proposed implementations. But since it is likely that a demonstration of a substantial degree of quantum error correction is still quite some time off, the problem of continuous initialization does not have to be solved very soon; still, experimentalists should be aware that the speed with which a qubit can be zeroed will eventually be a very important issue. If the time it takes to do this initialization is relatively long compared with gate-operation times (see requirement 4), then the quantum computer will have to be equipped with some kind of “qubit conveyor belt”, on which qubits in need of initialization are carried away from the region in which active computation is taking place, initialized while on the “belt”, then brought back to the active place after the initialization is finished. (A similar parade of qubits will be envisioned in requirement 5 for the case of low quantum-efficiency measurements[28].)

There are two main approaches to setting qubits to a standard state: the system can either be “naturally” cooled when the ground state of its Hamiltonian is the state of interest, or the standard state can be achieved by a measurement which projects the system either into the state desired or another state which can be rotated into it. These approaches are not fundamentally different from one another, since the projection procedure is a form of cooling; for instance, the laser cooling techniques used routinely now for the cooling of ion states to near their ground state in a trap[1] are closely connected to the fluorescence techniques used to measure the state of these ions. A more “natural” kind of cooling is advocated in many of the electron spin resonance based techniques (using quantum dots or impurities)[7, 4] in which the spins are placed in a strong magnetic field and allowed to align with it via interaction with their heat bath. In this kind of approach the time scale will be a problem. Since the natural thermalization times are never shorter than the decoherence time of the system, this procedure will be too slow for the needs of error correction and a “conveyor belt” scheme would be required. Cooling by projection, in which the Hamiltonian of the system and its environment are necessarily perturbed strongly, will have a time scale dependent on the details of the setup, but potentially much shorter than the natural relaxation times. One cannot say too much more at this point, as the schemes for measurement have in many cases not been fully implemented (see requirement 5). In the NMR quantum computer implementations to date (see Cory below), cooling of the initial state has been foregone altogether; it is acknowledged[3] that until some of the proposed cooling schemes are implemented (a nontrivial thing to do), NMR can never be a scalable scheme for quantum computing.

3. Long relevant decoherence times, much longer than the gate operation time

Decoherence times characterize the dynamics of a qubit (or any quantum system) in contact with its environment. The (somewhat overly) simplified definition of this time is that it is the characteristic time for a generic qubit state $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ to be transformed into the mixture $\rho = |a|^2|0\rangle\langle 0| + |b|^2|1\rangle\langle 1|$. A more proper characterization of decoherence, in which the decay can depend on the form of the initial state, in which the state amplitudes may change as well, and in which other quantum states of the qubit can play a role (in a special form of state decay called “leakage” in quantum computing[29, 30]), is rather more technical than I want to get here; but see Refs. [31] and [32] for a good general discussion of all these. Even the

simplest discussion of decoherence that I have given here should also be extended to include the possibility that the decoherence of neighboring qubits is correlated. It seems safest to assume that they will be neither completely correlated nor completely uncorrelated, and the thinking about error correction has taken this into account.

Decoherence is very important for the fundamentals of quantum physics, as it is identified as the principal mechanism for the emergence of classical behavior. For the same reason, decoherence is very dangerous for quantum computing, since if it acts for very long, the capability of the quantum computer will not be so different from that of a classical machine. The decoherence time must be long enough that the uniquely quantum features of this style of computation have a chance to come into play. How long is “long enough” is also indicated by the results of quantum error correction, which I will summarize shortly.

I have indicated that the “relevant” decoherence times should be long enough. This emphasizes that a quantum particle can have many decoherence times pertaining to different degrees of freedom of that particle. But many of these can be irrelevant to the functioning of this particle as a qubit. For example, the rapid decoherence of an electron’s position state in a solid state environment does not preclude its having a very long spin coherence time, and it can be arranged that this is the only time relevant for quantum computation. Which time is relevant is determined by the choice of the qubit basis states $|0\rangle$ and $|1\rangle$; for example, if these two states correspond to different spin states but identical orbital states, then orbital decoherence will be irrelevant.

One might worry that the decoherence time necessary to do a successful quantum computation will scale with the duration of the computation. This would place incredibly stringent requirements on the physical system implementing the computation. Fortunately, in one of the great discoveries of quantum information theory (in 1995-6), it was found that error correction of quantum states is possible[33] and that this correction procedure can be successfully applied in quantum computation[34], putting much more reasonable (although still daunting) requirements on the needed decoherence times.

In brief, quantum error correction starts with coding; as in binary error correction codes, in which only a subset of all boolean strings are “legal” states, quantum error correction codes consist of legal states confined to a subspace of the vector space of a collection of qubits. Departure from this subspace is caused by decoherence. Codes can be chosen such that, with a suitable sequence of quantum computations and measurements of some ancillary qubits, the error caused by decoherence can be detected and corrected. As noted above, these ancillary qubits have to be continuously refreshed for use. I will not go much farther into the subject here, see [31] for more. It is known that quantum error correction can be made fully fault tolerant, meaning that error correction operations can be successfully intermingled with quantum computation operations, that errors occurring during the act of error correction, if they occur at a sufficiently small rate, do no harm, and that the act of quantum computation does not itself cause an unreasonable proliferation of errors.

These detailed analyses have indicated the magnitude of decoherence time scales that are acceptable for fault-tolerant quantum computation. The result is that, if the decoherence time is $10^4 - 10^5$ times the “clock time” of the quantum computer, that is, the time for the execution of an individual quantum gate (see requirement 4), then error correction can be successful. This is, to tell the truth, a rather stringent condition, quantum systems frequently do not have such long decoherence times. But sometimes they do, and our search for a successful physical implementation must turn towards these. At least this result says that the required decoherence rate does not become ever smaller as the size and duration of the quantum computation grows. So, once the desired threshold is attainable, decoherence will not be an obstacle to scalable quantum computation.

Having said this, it must be admitted that it will be some time before it is even possible

to subject quantum error correction to a reasonable test. Nearly all parts of requirements 1-5 must be in place before such a test is possible. And even the most limited application of quantum error correction has quite a large overhead: roughly 10 ancillary qubits must be added for each individual qubit of the computation. Fortunately, this overhead ratio grows only logarithmically as the size of the quantum computation is increased.

In the short run, it is at least possible to design and perform experiments which measure the decoherence times and other relevant properties (such as the correlation of decoherence of neighboring qubits) of candidate implementations of qubits. With such initial test experiments, caution must be exercised in interpreting the results, because decoherence is a very system-specific phenomenon, depending on the details of all the qubits' couplings to various environmental degrees of freedom. For example, the decoherence time of the spin of an impurity in the bulk of a perfect semiconductor may not be the same as its decoherence time when it is near the surface of the solid, in the immediate neighborhood of device structures designed to manipulate its quantum state. Test experiments should probe decoherence in as realistic a structure as is possible.

4. A “universal” set of quantum gates

This requirement is of course at the heart of quantum computing. A quantum algorithm is typically specified[8] as a sequence of unitary transformations U_1, U_2, U_3, \dots , each acting on a small number of qubits, typically no more than three. The most straightforward transcription of this into a physical specification is to identify Hamiltonians which generate these unitary transformations, viz., $U_1 = e^{iH_1 t/\hbar}$, $U_2 = e^{iH_2 t/\hbar}$, $U_3 = e^{iH_3 t/\hbar}$, etc.; then, the physical apparatus should be designed so that H_1 can be turned on from time 0 to time t , then turned off and H_2 turned on from time t to time $2t$, etc.

Would that life were so simple! In reality what can be done is much less, but much less can be sufficient. Understanding exactly how much less is still enough, is the main complication of this requirement. In all the physical implementations discussed in this volume, only particular sorts of Hamiltonians can be turned on and off; in most cases, for example, only two-body (two-qubit) interactions are considered. This immediately poses a problem for a quantum computation specified with three-qubit unitary transformations; fortunately, of course, these can always be re-expressed in terms of sequences of one- and two-body interactions[35], and the two-body interactions can be of just one type[36], the “quantum XOR” or “cNOT”. There are some implementations in which multi-qubit gates can be implemented directly[37].

However, this still leaves a lot of work to do. In some systems, notably in NMR (see Cory), there are two-body interactions present which cannot be turned *off*, as well as others which are switchable. This would in general be fatal for quantum computation, but the particular form of the fixed interactions permit their effects to be annulled by particular “refocusing” sequences of the controllable interactions, and it has recently been discovered[38] that these refocusing sequences can be designed and implemented efficiently.

For many other systems, the two-body Hamiltonian needed to generate directly the cNOT unitary transformation is not available. For example, in the quantum-dot proposal described by Loss below[7], the only two-body interaction which should be easily achievable is the exchange interaction between neighboring spins, $H \propto \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$; in the Imamoglu chapter[2], the attainable interaction is of the XY type, i.e., $H \propto S_{ix}S_{jx} + S_{iy}S_{jy}$. An important observation is that with the appropriate sequence of exchange or XY interactions, in conjunction with particular one-body interactions (which are assumed to be more easily doable), the cNOT transformation can be synthesized[39]. It is incumbent on each implementation proposal to exhibit such a sequence for producing the cNOT using the interactions that are naturally realizable.

Often there is also some sophisticated thinking required about the time profile of the two-qubit interaction. The naive description above uses a “square pulse” time profile, but often this is completely inappropriate; for instance, if the Hamiltonian can also couple the qubit to other,

higher-lying levels of the quantum system, often the only way to get the desired transformation is to turn on and off the interaction smoothly and slowly enough that an adiabatic approximation is accurate[29, 30] (in a solid-state context, see also [40]). The actual duration of the pulse will have to be sufficiently long that any such adiabatic requirement is satisfied; then typically only the time integral $\int dt H(t)$ is relevant for the quantum gate action. The overall time scale of the interaction pulse is also controlled by the attainable maximum size of the matrix elements of $H(t)$, which will be determined by various fundamental considerations, like the requirement that the system remains in the regime of validity of a linear approximation, and practical considerations, like the laser power that can be concentrated on a particular ion. Given these various constraints, the “clock time” of the quantum computer will be determined by the time interval needed such that two consecutive pulses have negligible overlap.

Another consideration, which does not seem to present a problem with any current implementation schemes, but which may be an issue in the future, is the classicality of the control apparatus. We say that the interaction Hamiltonian $H(t)$ has a time profile which is controlled externally by some “classical” means, that is, by the intensity of a laser beam, the value of a gate voltage, or the current level in a wire. But each of these control devices is made up themselves of quantum mechanical parts. When we require that these behave classically, it means that their action should proceed without any entanglement developing between these control devices and the quantum computer. Estimates indicate that this entanglement can indeed be negligible, but this effect needs to be assessed for each individual case.

In many cases it is impossible to turn on the desired interaction between a pair of qubits; for instance, in the ion-trap scheme, no direct interaction is available between the ion-level qubits[1]. In this and in other cases, a special quantum subsystem (sometimes referred to as a “bus qubit”) is used which can interact with each of the qubits in turn and mediate the desired interaction: for the ion trap, this is envisioned to be the vibrational state of the ion chain in the trap; in other cases it is a cavity photon whose wavefunction overlaps all the qubits. Unfortunately, this auxiliary quantum system introduces new channels for the environment to couple to the system and cause decoherence, and indeed the decoherence occurring during gate operation is of concern in the ion-trap and cavity-quantum electrodynamics schemes.

Some points about requirement 4 are important to note in relation to the implementation of error correction. Successful error correction requires fully parallel operation, meaning that gate operations involving a finite fraction of all the qubits must be doable simultaneously. This can present a problem with some of the proposals in which the single “bus qubit” is needed to mediate each interaction. On the other hand, the constraint that interactions are only among nearest neighbors in a lattice, as in many of the solid-state proposals, does allow for sufficient parallelism[41].

Quantum gates cannot be implemented perfectly; we must expect both systematic and random errors in the implementation of the necessary Hamiltonians. Both types of errors can be viewed as another source of decoherence and thus error correction techniques are effective for producing reliable computations from unreliable gates, if the unreliability is small enough. The tolerable unreliability due to random errors is in the same vicinity as the decoherence threshold, that is, the magnitude of random errors should be $10^{-4} - 10^{-5}$ per gate operation or so. It might be hoped that systematic errors could be virtually eliminated by careful calibration; but this will surely not always be the case. It seems harder to give a good rule for how much systematic error is tolerable, the conservative estimates give a very, very small number (the square of the above)[31], but on the other hand there seems to be some evidence that certain important quantum computations (e.g., the quantum Fourier transform) can tolerate a very high level of systematic error (over- or under-rotation). Some types of very large errors may be tolerable if their presence can be detected and accounted for on the fly (we are thinking, for example, about charge switching in semiconductors or superconductors).

Error correction requires that gate operations be done on coded qubits, and one might worry that such operations would require a new repertoire of elementary gate operations for the base-level qubits which make up the code. For the most important error correction techniques, using the so called “stabilizer” codes, this is not the case. The base-level toolkit is exactly the same as for the unencoded case: one-bit gates and cNOTs, or any gate repertoire that can produce these, are adequate. Sometimes the use of coding can actually *reduce* the gate repertoire required: in the work on decoherence free subspaces and subsystems, codes are introduced using blocks of three and four qubits for which two-qubit exchange interactions alone are enough to implement general quantum computation[42, 43]. This simplification could be very useful in the quantum-dot[7] or semiconductor-impurity[4] implementations.

5. A qubit-specific measurement capability

Finally, the result of a computation must be read out, and this requires the ability to measure specific qubits. In an ideal measurement, if a qubit’s density matrix is $\rho = p|0\rangle\langle 0| + (1-p)|1\rangle\langle 1| + \alpha|0\rangle\langle 1| + \alpha^*|1\rangle\langle 0|$, the measurement should give outcome “0” with probability p and “1” with probability $1-p$ independent of α and of any other parameters of the system, including the state of nearby qubits, and without changing the state of the rest of the quantum computer. If the measurement is “non-demolition”, that is, if in addition to reporting outcome “0” the measurement leaves the qubit in state $|0\rangle\langle 0|$, then it can also be used for the state preparation of requirement 2; but requirement 2 can be fulfilled in other ways.

Such an ideal measurement as I have described is said to have 100% quantum efficiency; real measurements always have less. While the fidelity of a quantum measurement is not captured by a single number, the single quantum-efficiency parameter is often a very useful way to summarize it, just as the decoherence time is a useful if incomplete summary of the damage caused to a quantum state by the environment.

While quantum efficiency of 100% is desirable, much less is needed for quantum computation; there is, in fact, a tradeoff possible between quantum efficiency and other resources which results in reliable computation. As a simple example, if the quantum efficiency is 90%, then, in the absence of any other imperfections, a computation with a single-bit output (a so-called “decision problem”, common in computer science) will have 90% reliability. If 97% reliability is needed, this can just be achieved by rerunning the calculation three times. Much better, actually, is to “copy” the single output qubit to three, by applying two cNOT gates involving the output qubit and two other qubits set to $|0\rangle$, and measuring those three. (Of course, qubits cannot be “copied”, but their value in a particular basis can.) In general, if quantum efficiency q is available, then copying to somewhat more than $1/q$ qubits and measuring all of these will result in a reliable outcome. So, a quantum efficiency of 1% would be usable for quantum computation, at the expense of hundreds of copies/remeasures of the same output qubit. (This assumes that the measurement does not otherwise disturb the quantum computer. If it does, the possibilities are much more limited.)

Even quantum efficiencies much, much lower than 1% can be and are used for successful quantum computation: this is the “bulk” model of NMR (see Cory and [3]), where macroscopic numbers of copies of the same quantum computer (different molecules in solution) run simultaneously, with the final measurement done as an ensemble average over the whole sample. These kinds of weak measurements, in which each individual qubit is hardly disturbed, are quite common and well understood in condensed-matter physics.

If a measurement can be completed quickly, on the timescale of 10^{-4} of the decoherence time, say, then its repeated application during the course of quantum computation is valuable for simplifying the process of quantum error correction. On the other hand, if this fast measurement capability is not available, quantum error correction is still possible, but it then requires a greater number of quantum gates to implement.

Other tradeoffs between the complexity and reliability of quantum measurement vs. those

of quantum computation have recently been explored. It has been shown that if qubits can be initialized into pairs of maximally entangled states, and two-qubit measurements in the so-called Bell basis ($\Psi^\pm = |01\rangle \pm |10\rangle$, $\Phi^\pm = |00\rangle \pm |11\rangle$) are possible, then no two-qubit quantum gates are needed, one-bit gates alone suffice[44]. Now, often this tradeoff will not be useful, as in many schemes a Bell measurement would require two-bit quantum gates.

But the overall message, seen in many of our requirements, is that more and more, the theoretical study of quantum computation has offered a great variety of tradeoffs for the potential implementations: if X is very hard, it can be substituted with more of Y. Of course, in many cases both X and Y are beyond the present experimental state of the art; but a thorough knowledge of these tradeoffs should be very useful for devising a rational plan for the pursuit of future experiments.

15.4 Desiderata for quantum communication

For computation alone, the five requirements above suffice. But the advantages of quantum information processing are not manifest solely, or perhaps even principally, for straightforward computation only. There are many kinds of information-processing tasks, reviewed briefly at the beginning, that involve more than just computation, and for which quantum tools provide a unique advantage.

The tasks we have in mind here all involve not only computation but also communication. The list of these tasks that have been considered in the light of quantum capabilities, and for which some advantage has been found in using quantum tools, is fairly long and diverse: it includes secret key distribution, multiparty function evaluation as in appointment scheduling, secret sharing, and game playing[14].

When we say communication we mean quantum communication: the transmission of intact qubits from place to place. This obviously adds more features that the physical apparatus must have to carry out this information processing. We formalize these by adding two more items to the list of requirements:

6. *The ability to interconvert stationary and flying qubits*

7. *The ability faithfully to transmit flying qubits between specified locations*

These two requirements are obviously closely related, but it is worthwhile to consider them separately, because some tasks need one but not the other. For instance, quantum cryptography[18] involves only requirement 7; it is sufficient to create and detect flying qubits directly.

I have used the jargon “flying qubits”[2], which has become current in the discussions of quantum communication. Using this term emphasizes that the optimal embodiment of qubits that are readily transmitted from place to place is likely to be very different from the optimal qubits for reliable local computation. Indeed, almost all proposals assume that photon states, with the qubit encoded either in the polarization or in the spatial wavefunction of the photon, will be the flying qubit of choice, and indeed, the well developed technology of light transmission through optical fibers provides a very promising system for the transmission of qubits. I would note, though, that my colleagues and I have raised the possibility that electrons traveling through solids could provide another realization of the flying qubit[14, 45].

Only a few completely developed proposals exist which incorporate requirements 6 and 7. Of course, there are a number of quite detailed studies of 7, in the sense that experiments on quantum cryptography have been very concerned with the preservation of the photon quantum state during transmission through optical fibers or through the atmosphere. However, these studies are rather disconnected from the other concerns of quantum computing. Requirement 6 is the really hard one; to date the only theoretical proposal sufficiently concrete that experiments addressing it have been planned is the scheme produced by Kimble and coworkers[46]

for unloading a cavity photon into a traveling mode via atomic spectroscopy, and loading it by the time-reversed process. Other promising concepts, like the launching of electrons from quantum dots into quantum wires such that the spin coherence of the electrons is preserved, need to be worked out more fully.

15.5 Summary

So, what is the “winning” technology going to be? I don’t think that any living mortal has an answer to this question, and at this point it may be counterproductive even to ask it. Even though we have lived with quantum mechanics for a century, our study of quantum effects in complex artificial systems like those we have in mind for quantum computing is in its infancy. No one can see how or whether all the requirements above can be fulfilled, or whether there are new tradeoffs, not envisioned in our present theoretical discussions but suggested by further experiments, that might take our investigations in an entirely new path.

Indeed, the above discussion, and the other chapters of this special issue, really do not cover all the foreseeable approaches. I will mention two of which I am aware: first, another computational paradigm, that of the cellular automaton, is potentially available for exploitation. This is distinguished from the above “general purpose” approach in that it assumes that every bit pattern throughout the computer will be subjected to the same evolution rule. It is known that general-purpose computation is performable, although with considerable overhead, by a cellular automaton. This is true as well for the quantum version of the cellular automaton, as Lloyd[47] indicated in his original work. New theoretical work by Benjamin[48] shows very explicitly how relatively simple local rules would permit the implementation of some quantum computations. This could point us perhaps towards some sort of polymer with a string of qubits on its backbone that can be addressed globally in a spectroscopic fashion. Experiments are not oriented towards this at the moment, but the tradeoffs are very different, and I don’t believe it should be excluded in the future.

Second, even more speculative, but very elegant, is the proposal of Kitaev[49] to use quantum systems with particular kinds of topological excitations, for example nonabelian anyons, for quantum computing. It is hard to see at the moment how to turn this exciting proposal into an experimental program, as no known physical system is agreed to have the appropriate topological excitations. But further research in, for example, the quantum Hall effect might reveal such a system; more likely, perhaps, is that further understanding of this approach, and that of Freedman and his colleagues[50], will shed more light on doing quantum computing using the “standard” approach being considered in this book.

I am convinced of one thing: the ideas of quantum information theory will continue to exert a decisive influence on the further investigation of the fundamental quantum properties of complex quantum systems, and will stimulate many creative and exciting developments for many years to come.

16 Topological phases and quantum computation Kitaev, Laumann

16.1 Introduction: The quest for protected qubits

The basic building block of quantum computation is the qubit, a system with two (nearly) degenerate states that can be used to encode quantum information. Real systems typically have a full spectrum of excitations that are considered illegal from the point of view of a computation, and lead to decoherence if they couple too strongly into the qubit states during some process.

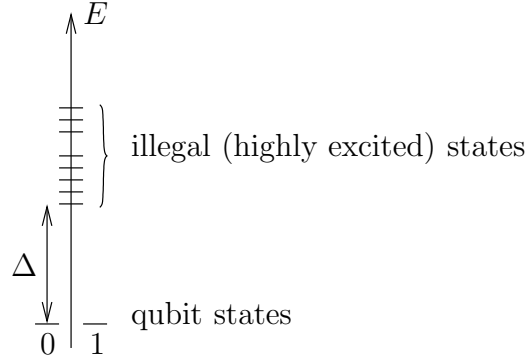


Figure 16.1: Spectrum of a physical qubit system.

See Fig. 16.1. The essential problem then is to preserve the quantum state of the qubit as long as possible to allow time for computations to take place.

Assuming the gap Δ to the illegal states is reasonable, we can quite generally describe the dynamics of the qubit state by an effective Schrödinger equation

$$\frac{d}{dt} |\Psi\rangle = -iH_{\text{eff}} |\Psi\rangle \quad (16.1)$$

where H_{eff} is the effective qubit Hamiltonian. In quantum optics, H_{eff} is often known with high precision. This is not so in condensed matter systems such as quantum dots. Even worse, H_{eff} may fluctuate or include interaction with the environment. This causes decoherence of the qubit state.

Ideally, we would like to arrange for H_{eff} to be zero (or $H_{\text{eff}} = \epsilon I$) for some good reason. Usually, we use a symmetry to protect degeneracies in quantum systems. For example, a quantum spin $\frac{1}{2}$ has a two-fold degeneracy protected by the $SU(2)$ symmetry, as do the $2s + 1$ degeneracies of higher spins s . Indeed, any *non-Abelian* symmetry would work. Unfortunately, the $SU(2)$ symmetry of a spin is lifted by magnetic fields and it's generally difficult to get rid of stray fields.

Rather than symmetry, in what follows we will look to topology to provide us with physically protected degeneracies in quantum systems. In particular, we will examine a number of exactly solvable models in one and two dimensions which exhibit topologically phases – that is, gapped phases with a protected ground state degeneracy dependent on the topology of the manifold in which the quantum model is embedded. In Sec. 16.2 we warm up with the study of several quantum chains that exhibit Majorana edge modes and thus a two-fold degeneracy on open chains. The topological phenomena available in two dimensional models are much richer and will be the focus of the remaining three sections. We introduce and solve the toric code on the square lattice in Sec. 16.3, exhibiting its topological degeneracy and excitation spectrum explicitly. The following section steps back to examine the general phenomenology of quasiparticle statistics braiding in two dimensional models. Finally, in Sec. 16.5 we introduce the honeycomb lattice model which exhibits several kinds of topological phases, including that of the simple toric code and, in the presence of time reversal symmetry breaking, a gapped phase with chiral edge modes protected by the topology of the Fermi surface.

16.2 Topological phenomena in 1D: boundary modes in the Majorana chain

We will consider two examples of 1D models with \mathbb{Z}_2 symmetry and topological degeneracy: the *transverse field Ising model* (TFIM) and the *spin-polarized superconductor* (SPSC).

Although these models look rather different physically, we will find that they are mathematically equivalent and that they both exhibit a topological phase in which the ground state degeneracy is dependent on the boundary conditions of the chain. That is, the ground state on an open chain is 2-fold degenerate due to the presence of boundary zero modes, whereas the ground state is unique on a closed loop. This topological degeneracy will be stable to small *local* perturbations that respect the \mathbb{Z}_2 symmetry. More details on these models may be found in [4].

1. The *transverse field Ising model* is a spin-1/2 model with Hamiltonian:

$$H_S = -J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - h_z \sum_{j=1}^N \sigma_j^z. \quad (16.2)$$

Here J is the ferromagnetic exchange coupling in the x direction and h_z is a uniform transverse (z) field. This model has a \mathbb{Z}_2 symmetry given by a global spin flip in the σ_x basis:

$$P_S = \prod_{j=1}^N \sigma_j^z \quad (16.3)$$

2. The *spin-polarized 1-D superconductor* is a fermionic system with Hamiltonian:

$$\begin{aligned} H_F = & \sum_{j=1}^{N-1} \left(-w(a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j) + \Delta a_j a_{j+1} + \Delta^* a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger \right) \\ & - \mu \sum_{j=1}^N \left(a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (16.4)$$

where a_j and a_j^\dagger are fermionic annihilation and creation operators, w is the hopping amplitude, Δ is the superconducting gap and μ is the chemical potential. For simplicity, we will assume that $\Delta = \Delta^* = w$, so that

$$H_F = w \sum_{j=1}^{N-1} (a_j - a_j^\dagger)(a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger) - \mu \sum_{j=1}^N \left(a_j^\dagger a_j - 1/2 \right). \quad (16.5)$$

This model has a \mathbb{Z}_2 symmetry given by the fermionic parity operator:

$$P_F = (-1)^{\sum_j a_j^\dagger a_j} \quad (16.6)$$

Although the two models are mathematically equivalent, as we will see in Sec. 16.2.2, they are clearly physically different. In particular, for the superconductor, the \mathbb{Z}_2 symmetry of fermionic parity cannot be lifted by any local physical operator, as such operators must contain an even number of fermion operators. Unfortunately, for the spin system the degeneracy is lifted by a simple longitudinal magnetic field $h_x \sum_j \sigma_j^x$ and thus the topological phase of the TFIM would be much harder to find in nature.

16.2.1 Nature of topological degeneracy (spin language)

Consider the transverse field Ising model of Eq. (16.2). With no applied field, there are a pair of Ising ground states ($h_z = 0$):

$$|\psi_{\rightarrow}\rangle = |\rightarrow\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle, \quad |\psi_{\leftarrow}\rangle = |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\cdots\leftarrow\rangle. \quad (16.7)$$

The introduction of a small field h_z allows the spins to flip in the σ^x basis. In particular, tunneling between the two classical ground states arises via a soliton (domain-wall) propagating from one side of the system to the other:

$$|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle \longrightarrow |\leftarrow:\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle \longrightarrow |\leftarrow\leftarrow:\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle \quad (16.8)$$

$$\longrightarrow |\leftarrow\leftarrow\leftarrow:\cdots\rightarrow\rangle \longrightarrow \cdots \longrightarrow |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\cdots\leftarrow\rangle. \quad (16.9)$$

As usual, the tunneling amplitude t associated with this transition falls off exponentially in the distance the soliton must propagate

$$t \sim e^{-N/\xi} \quad (16.10)$$

where ξ is the correlation length of the model. The two-fold degeneracy is therefore lifted by the effective Hamiltonian:

$$H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 0 & -t \\ -t & 0 \end{pmatrix}. \quad (16.11)$$

The splitting is exponentially small in the system size and the two-fold degeneracy is recovered in the thermodynamic limit as expected. Moreover, it is clear why introduction of a longitudinal field h_x will fully split the degeneracy.

16.2.2 Reduction of TFIM to SPSC by the Jordan-Wigner transformation

To show the equivalence of the one dimensional models introduced above, we will use a standard Jordan-Wigner transformation to convert the spins of the Ising model into fermions. It is perhaps not surprising that a fermionic description exists for spin 1/2 systems – we simply identify the up and down state of each spin with the presence or absence of a fermion. The only difficulty arises in arranging the transformation so that the appropriate (anti)-commutation relations hold in each description. The Jordan-Wigner transformation does this by introducing string-like fermion operators that work out quite nicely in 1-D nearest neighbor models.

To reduce H_S to H_F , we

1. Associate the projection onto the z -axis of the spin with the fermionic occupation number:

$$|\uparrow\rangle \leftrightarrow n = 0, \quad |\downarrow\rangle \leftrightarrow n = 1. \quad (16.12)$$

That is,

$$\sigma_j^z = (-1)^{a_j^\dagger a_j}. \quad (16.13)$$

2. Introduce the string-like annihilation and creation operators

$$\begin{aligned} a_j &= \left(\prod_{k=1}^{j-1} \sigma_k^z \right) \sigma_j^+ \\ a_j^\dagger &= \left(\prod_{k=1}^{j-1} \sigma_k^z \right) \sigma_j^- \end{aligned} \quad (16.14)$$

where σ^+ and σ^- are the usual spin raising and lower operators. At this stage, we can check that the usual fermionic anticommutation relations hold for the a_j, a_j^\dagger :

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (16.15)$$

3. Observe that

$$\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x = -(a_j - a_j^\dagger)(a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger), \quad (16.16)$$

so H_S (Eq. (16.2)) reduces to H_F (Eq. (16.5)) with

$$w = J, \quad \mu = -2h_z \quad (16.17)$$

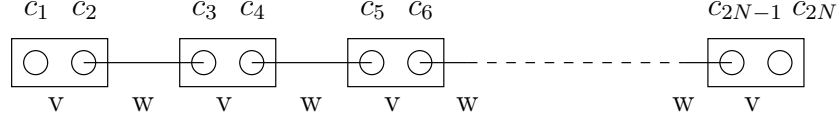


Figure 16.2: Majorana chain representation of 1-d superconductor. Each boxed pair of Majoranas corresponds to one site of the original fermionic chain.

16.2.3 Majorana operators

Majorana operators provide a convenient alternative representation of Fermi systems when the number of particles is only conserved modulo 2, as in a superconductor. Given a set of N Dirac fermions with annihilation/creation operators a_j, a_j^\dagger , we can define a set of $2N$ real Majorana fermion operators as follows:

$$\begin{aligned} c_{2j-1} &= a_j + a_j^\dagger \\ c_{2j} &= \frac{a_j - a_j^\dagger}{i}. \end{aligned} \quad (16.18)$$

These operators are Hermitian and satisfy a fermionic anticommutation relation:

$$\begin{aligned} c_k^\dagger &= c_k \\ c_k^2 &= 1, \quad c_k c_l = -c_l c_k (k \neq l). \end{aligned} \quad (16.19)$$

Or, more compactly,

$$\{c_k, c_l\} = 2\delta_{kl}. \quad (16.20)$$

From any pair of Majorana operators, we can construct an annihilation and creation operator for a standard Dirac fermion ($a = (c_1 + ic_2)/2$ and h.c.), and thus the unique irreducible representation for the pair is a 2-dimensional Hilbert space which is either occupied or unoccupied by the a fermion.

Both models H_S and H_F can be written as

$$H_{\text{maj}} = \frac{i}{2} \left(v \sum_{j=1}^N c_{2j-1} c_{2j} + w \sum_{j=1}^{N-1} c_{2j} c_{2j+1} \right) \quad (16.21)$$

where $v = h_z = -\mu/2$ and $w = J$. The \mathbb{Z}_2 symmetry of fermionic parity is given in the Majorana language by

$$P_{\text{maj}} = \prod_{k=1}^N (-ic_{2k-1} c_{2k}). \quad (16.22)$$

We can view this model graphically as a chain of coupled Majorana modes, two to each of the N sites of the original problem as in Fig. 16.2. If $v = 0$, then the Majorana modes at the ends of the chain are not coupled to anything. This immediately allows us to identify the 2-fold ground state degeneracy in H_{maj} as the tensor factor given by the 2-dimensional representation of the boundary pair c_1, c_{2N} .

We will see in Sec. 16.2.4 that if $v \neq 0$ but $|v| < w$, the operators c_1 and c_{2N} are replaced by some *boundary mode operators* b_l, b_r . The effective Hamiltonian for this piece of the system is then

$$H_{\text{eff}} = \frac{i}{2} \epsilon b_l b_r = \epsilon (a^\dagger a - \frac{1}{2}) \quad (16.23)$$

where $\epsilon \sim e^{-N/\xi}$ and a, a^\dagger are the Dirac fermion operators constructed from the boundary pair. Thus, the ground state degeneracy is lifted by only an exponentially small splitting in system size.

16.2.4 General properties of quadratic fermionic Hamiltonians

We now step back and consider a generic quadratic fermionic Hamiltonian:

$$H(A) = \frac{i}{4} \sum_{j,k} A_{jk} c_j c_k \quad (16.24)$$

where A is a real, skew-symmetric matrix and the c_j are Majorana fermion operators. The normalization $\frac{i}{4}$ is convenient because it has the property that

$$[-iH(A), -iH(B)] = -iH([A, B]) \quad (16.25)$$

where $A, B \in \mathfrak{so}(2N)$, and $H(A), H(B)$ act on the Fock space $\mathfrak{F}_N = \mathbb{C}^{2^N}$. Thus $H(\cdot)$ provides a natural representation of $\mathfrak{so}(2N)$.

We now bring $H(A)$ to a canonical form:

$$H_{\text{canonical}} = \frac{i}{2} \sum_{k=1}^m \epsilon_k b'_k b''_k = \sum_{k=1}^m \epsilon_k (\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k - \frac{1}{2}) \quad (16.26)$$

where b'_k, b''_k are appropriate real linear combinations of the original c_j satisfying the same Majorana fermion commutation relations and the $\tilde{a}_k, \tilde{a}_k^\dagger$ are the annihilation and creation operators associated to the b'_k, b''_k pair of Majoranas. This form for H follows immediately from the standard block diagonalization of real skew symmetric matrices

$$A = Q \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_1 & & & \\ -\epsilon_1 & 0 & & & \\ & & 0 & \epsilon_2 & \\ & & -\epsilon_2 & 0 & \\ & & & & \dots \end{pmatrix} Q^T, \quad Q \in O(2N), \epsilon_k \geq 0 \quad (16.27)$$

From this form it is easy to check that the eigenvalues of A are $\pm i\epsilon_k$ and that the eigenvectors are the coefficients of c in $\tilde{a}_k, \tilde{a}_k^\dagger$.

If some of the ϵ_k vanish, then we refer to the associated fermions as *zero modes*. In particular, these will lead to ground state degeneracies, since occupation or nonoccupation of such modes does not affect the energy. For the Majorana chain of Eq. (16.21), we have

$$A = \begin{pmatrix} 0 & v & & & \\ -v & 0 & w & & \\ & -w & 0 & v & \\ & & -v & 0 & w \\ & & & -w & 0 & \dots \end{pmatrix} \quad (16.28)$$

We can find a vector u such that $uA = 0$ by inspection:

$$u = (1, 0, \frac{v}{w}, 0, \left(\frac{v}{w}\right)^2, 0, \dots) \quad (16.29)$$

This vector leads to a left boundary mode

$$b_l = \sum u_k c_k \quad (16.30)$$

while an analogous calculation starting at the right end will find a right boundary mode b_r . These modes form a Majorana canonical pair, leading to a two-fold degeneracy of the ground state of the chain. Clearly, $u_k \sim e^{-k/\xi}$ falls off exponentially from the edges of the chain with correlation length $\xi^{-1} = \ln \left| \frac{w}{v} \right|$, as expected in section 16.2.3.

16.2.5 Why are the boundary modes robust?

In the simple case of a quadratic fermion Hamiltonian, we know that the modes correspond to eigenvalues of a skew-symmetric real matrix. These come in pairs $\pm i\epsilon$, in general, and the case $\epsilon = 0$ is special. In particular, if the pair of Majoranas corresponding to a zero mode are physically well separated, we expect perturbations to have trouble lifting the boundary degeneracy.

More generally, for interacting fermions, we can extend the symmetry group \mathbb{Z}_2 , generated by $P = P_{\text{maj}}$, to a *non-commuting* algebra acting on the the ground state space \mathfrak{L} . First, in the noninteracting limit, at $v = 0$, we define

$$X = Y \prod_{k=1}^j (-i c_{2k-1} c_{2k}) \quad (16.31)$$

where $Y = c_{2j+1}$ is a local Majorana operator at site $2j + 1$. A straightforward calculation shows that

$$XP = -PX \quad (16.32)$$

and that $[H, X] = 0$ so that the algebra generated by X, P acts on \mathfrak{L} nontrivially. We now allow Y to vary as we adiabatically turn on interactions and, so long as an energy gap is maintained, we expect Y to remain a local operator near $2j$, which we can separate from the boundary by suitably large choice of j . That is, to find Y , one needs to know the ground state or at least the structure of the ground state near $2j$. This is a nontrivial operation but see [3] for more details.

16.3 The two-dimensional toric code

The toric code is an exactly solvable spin $1/2$ model on the square lattice. It exhibits a ground state degeneracy of 4^g when embedded on a surface of genus g and a quasiparticle spectrum with both bosonic and fermionic sectors. Although we will not introduce it as such, the model can be viewed as an Ising gauge theory at a particularly simple point in parameter space (see Sec. 16.4.5). Many of the topological features of the toric code model were essentially understood by [8], but they did not propose an exactly solved model. A more detailed exposition of the toric code may be found in [5].

We consider a square lattice, possibly embedded into a nontrivial surface such as a torus, and place spins on the edges, as in Fig. 16.3. The Hamiltonian is given by

$$H_T = -J_e \sum_s A_s - J_m \sum_p B_p \quad (16.33)$$

where s runs over the vertices (stars) of the lattice and p runs over the plaquettes. The star operator acts on the four spins surrounding a vertex s ,

$$A_s = \prod_{j \in \text{star}(s)} \sigma_j^x \quad (16.34)$$

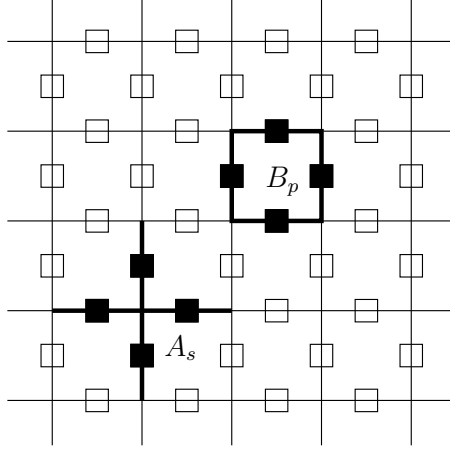


Figure 16.3: A piece of the toric code. The spins live on the edges of the square lattice. The spins adjacent to a star operator A_s and a plaquette operator B_p are shown.

while the plaquette operator acts on the four spins surrounding a plaquette,

$$B_p = \prod_{j \in \partial p} \sigma_j^z. \quad (16.35)$$

Clearly, the A_s all commute with one another, as do the B_p . Slightly less trivially,

$$A_s B_p = B_p A_s \quad (16.36)$$

because any given star and plaquette share an even number of edges (either none or two) and therefore the minus signs arising from the commutation of σ^x and σ^z on those edges cancel. Since all of the terms of H_T commute, we expect to be able to solve it term by term.

In particular, we will solve H_T working in the σ^z basis. Define classical variables $s_j = \pm 1$ to label the σ^z basis states. For each classical spin configuration $\{s\}$, we can define the plaquette flux

$$w_p(s) = \prod_{j \in \partial p} s_j. \quad (16.37)$$

If $w_p = -1$, we say that there is a *vortex* on plaquette p .

16.3.1 Ground states

To find the ground states $|\Psi\rangle$ of H_T , we need to minimize the energy, which means maximize the energy of each of the A_s and B_p terms. The plaquette terms provide the condition

$$B_p |\Psi\rangle = |\Psi\rangle \quad (16.38)$$

which holds if and only if

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{s: w_p(s)=1 \ \forall p\}} c_s |s\rangle \quad (16.39)$$

. That is, the ground state contains no vortices. The group of star operators act on the configurations s by flipping spins. Thus, the star conditions

$$A_s |\Psi\rangle = |\Psi\rangle \quad (16.40)$$

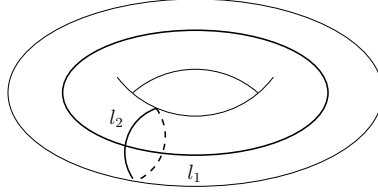


Figure 16.4: Large cycles on the torus.

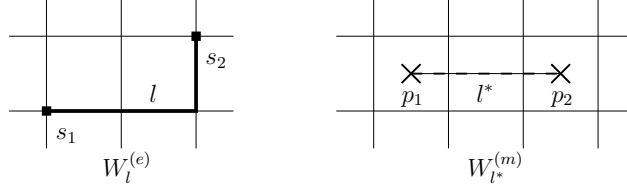


Figure 16.5: Electric and magnetic path operators.

hold if and only if *all of the c_s are equal for each orbit of the action of star operators*. In particular, if the spin flips of A_s are ergodic, as they are on the plane, all c_s must be equal and the ground state is uniquely determined.

On the torus, the star operators preserve the *cohomology class* of a vortex-free spin configuration. In more physical terms, we can define conserved numbers given by the Wilson loop like functions

$$w_l(s) = \prod_{j \in l} s_j, \quad l = l_1, l_2 \quad (16.41)$$

where l_1 and l_2 are two independent non-trivial cycles on the square lattice wrapping the torus (Fig. 16.4). Any given star will overlap with a loop l in either zero or two edges and therefore A_s preserves w_l . Since there are two independent loops on the torus, each of which can have $w_l = \pm 1$, there is a four-fold degenerate ground state:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{s: w_p(s)=1 \quad \forall p\}} c_{w_{l_1} w_{l_2}} |s\rangle. \quad (16.42)$$

16.3.2 Excitations

The excitations of the toric code come in two varieties: the *electric charges* and *magnetic vortices* of a \mathbb{Z}_2 gauge theory. We will see this connection more explicitly later. In the following, we restrict attention to the planar system for simplicity.

To find the electric charges, let us define the electric path operator

$$W_l^{(e)} = \prod_{j \in l} \sigma_j^z \quad (16.43)$$

where l is a path in the lattice going from s_1 to s_2 (see Fig. 16.5). This operator clearly commutes with the plaquette operators B_p and with all of the star operators A_s except for at the end points s_1 and s_2 , where only one edge overlaps between the star and the path and we have

$$W_l^{(e)} A_{s_1} = -A_{s_1} W_l^{(e)}. \quad (16.44)$$

Therefore, the state

$$|\Psi_{s_1, s_2}\rangle = W_l^{(e)} |\Psi_0\rangle, \quad (16.45)$$

where $|\Psi_0\rangle$ is the planar ground state, is an eigenstate of the Hamiltonian with excitations (charges) at s_1 and s_2 that each cost energy $2J_e$ to create relative to the ground state.

An analogous construction will find the magnetic vortices: we can define a dual path operator

$$W_{l^*}^{(m)} = \prod_{j \in l^*} \sigma_j^x \quad (16.46)$$

where the path l^* lies in the dual lattice (see Fig. 16.5) and goes from p_1 to p_2 . In this case, the stars A_s all commute with $W_{l^*}^{(m)}$, as do all of the plaquette operators B_p except the two at the end points of l^* , which anticommute. Thus, the $W_{l^*}^{(m)}$ operator creates a pair of magnetic vortices on the plaquettes p_1 and p_2 at an energy of $2J_m$ each.

16.4 Abelian anyons and quasiparticle statistics

Let us discuss what can possibly happen if we exchange two particles in two dimensions. To ensure that particle statistics is well-defined, we assume that there is no long-range interaction and that the phase is gapped. If we drag two particles around one another adiabatically,



then we expect both dynamical phase accumulation and a statistical effect due to the exchange. We are well acquainted with this effect for everyday bosons and fermions, for which:

$$\begin{aligned} \text{Bosons:} \quad & |\Psi\rangle \mapsto |\Psi\rangle \\ \text{Fermions:} \quad & |\Psi\rangle \mapsto -|\Psi\rangle \end{aligned} \quad (16.47)$$

where we have dropped the dynamical phase so as to focus on the statistics. In both of these standard cases, a full rotation (two exchanges),



leaves $|\Psi\rangle$ unchanged.

In principle,

$$R_{ab} = \begin{array}{c} b \quad a \\ \text{---} \\ a \quad b \end{array} \quad (16.48)$$

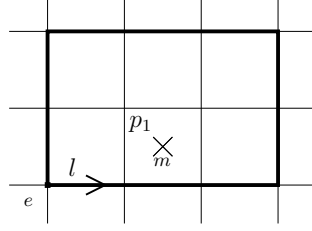
is an arbitrary phase factor or even an operator (*braiding operator*). If the two particles are distinguishable ($a \neq b$), then R_{ab} does not have an invariant meaning, but the *mutual statistics*

$$R_{ba} \cdot R_{ab} = \begin{array}{c} a \quad b \\ \text{---} \\ a \quad b \end{array} \quad (16.49)$$

does.

Let us illustrate this in the toric code model. In section 16.3.2 we found two kinds of quasiparticle excitations in the toric code: electric charges (e) and magnetic vortices (m). Since path operators of the same type commute with one another, it is easy to show that each of these are bosons. However, they have nontrivial mutual statistics.

To calculate the mutual statistics, consider taking a charge e around a vortex m .



Let $|\xi\rangle$ be some state containing a magnetic vortex at p_1 . Under the full braiding operation,

$$\begin{aligned} |\xi\rangle &\mapsto \left(\prod_{j \in l} \sigma_j^z \right) |\xi\rangle \\ &= \left(\prod_{p \text{ inside } l} B_p \right) |\xi\rangle \end{aligned} \quad (16.50)$$

where the second line is a Stokes' theorem like result relating the product around a loop to the products of internal loops. Since

$$B_{p_1} |\xi\rangle = -|\xi\rangle \quad (16.51)$$

for the plaquette p_1 containing the vortex, we have that

$$|\xi\rangle \mapsto -|\xi\rangle, \quad (16.52)$$

or

$$\begin{array}{c} e \quad m \\ \curvearrowright \quad \curvearrowright \\ e \quad m \end{array} = - \begin{array}{c} e \quad m \\ \uparrow \quad \uparrow \\ e \quad m \end{array} \quad (16.53)$$

Using the bosonic self-statistics equations,

$$\begin{array}{c} e \quad e \\ \curvearrowright \quad \curvearrowright \\ e \quad e \end{array} = \begin{array}{c} e \quad e \\ \uparrow \quad \uparrow \\ e \quad e \end{array} \quad \begin{array}{c} m \quad m \\ \curvearrowright \quad \curvearrowright \\ m \quad m \end{array} = \begin{array}{c} m \quad m \\ \uparrow \quad \uparrow \\ m \quad m \end{array} \quad (16.54)$$

we can derive the nontrivial corollary that composite $e - m$ particles are fermions:

$$\begin{array}{c} e \quad m \quad e \quad m \\ \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \\ e \quad m \quad e \quad m \end{array} = \begin{array}{c} e \quad m \quad e \quad m \\ \uparrow \quad \curvearrowright \quad \uparrow \\ e \quad m \quad e \quad m \end{array} = - \begin{array}{c} e \quad m \quad e \quad m \\ \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ e \quad m \quad e \quad m \end{array} \quad (16.55)$$

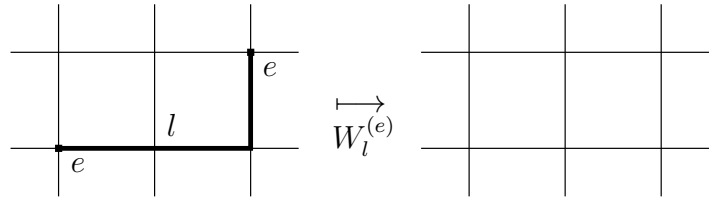
16.4.1 Superselection sectors and fusion rules

Initially, we exhibited two kinds of bosonic excitations in the toric code model (charges e and vortices m) in the solution of the Hamiltonian. After a bit of work, we discovered that a composite $e - m$ object has a meaningful characterization within the model as well, at least in that it has fermionic statistics. This begs the question, how many particle types exist in the toric code model and how can we identify them?

We take an algebraic definition of a particle type: each type corresponds to a *superselection sector*, which is a representation of the local operator algebra. In particular, we say that two particles (or composite objects) are *of the same type*

$$a \sim b \quad (16.56)$$

if a can be transformed to b by some operator acting in a finite region. For example, in the toric code, two e -particles are equivalent to having no particles at all,



The diagram illustrates the action of the electric path operator $W_l^{(e)}$ on two e -particles. On the left, a 3x3 grid of vertices has two e -particles at the bottom-left and middle-right vertices. A thick black path, labeled l , connects these two vertices horizontally and then vertically. An arrow labeled $W_l^{(e)}$ points to the right, where the same 3x3 grid is shown but with no particles, representing the vacuum sector.

by acting with an appropriate, geometrically bounded electric path operator $W_l^{(e)}$.

We introduce the notation

$$e \times e = 1 \quad (16.58)$$

to represent the *fusion rule* that two e -particles are equivalent to the vacuum sector 1. In the toric code, there are 4 superselection sectors:

$$1, e, m, \text{ and } \epsilon = e \times m \quad (16.59)$$

with the fusion rules:

$$\begin{aligned} e \times e &= 1 & e \times m &= \epsilon \\ m \times m &= 1 & e \times \epsilon &= m \\ \epsilon \times \epsilon &= 1 & m \times \epsilon &= e \end{aligned} \quad (16.60)$$

16.4.2 Mutual statistics implies degeneracy on the torus

This is an argument due to [1]. Suppose that there are at least two particle types, e and m with -1 mutual statistics. Let us define an operator Z acting on the ground state in an abstract fashion (not referring to the actual model) which creates an e pair, wraps one particle around the torus and annihilates the pair. In the toric code, this will be the path operator $W_l^{(e)} = \prod_{j \in l} \sigma_j^z$ for a loop l winding one of the nontrivial cycles on the torus, but we need not know that specifically.

We can define another operator X that creates a pair of the other type m and winds around the other nontrivial cycle on the torus. But now a bit of geometric introspection reveals that the combination,

$$Z^{-1} X^{-1} Z X = \text{diagram} = -1 \quad (16.61)$$

The diagram shows a circle with a small circle inside. The inner circle contains the label m and has an arrow pointing clockwise. The outer circle contains the label e and has an arrow pointing counter-clockwise.

Thus, there are two non-commuting operators acting on the ground state space \mathfrak{L} , and we conclude $\dim \mathfrak{L} > 1$. In fact, there are four such operators, each of the two particle types can be moved around each of the two nontrivial cycles. Working out the commutation relations of these operators implies that $\dim \mathfrak{L} = 4$.

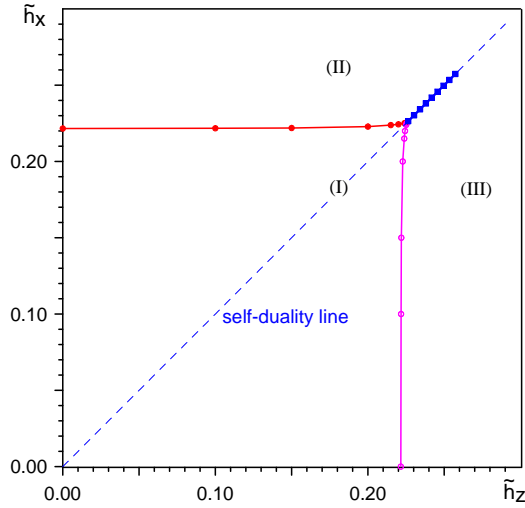


Figure 16.6: Numerically determined phase diagram of the toric code in a field from [9]. (I) labels the topological phase, (II) and (III) the vortex and charge condensates (*i.e.* the paramagnetic phase). The numerics were done using discrete imaginary time with a rather large quantization step.

16.4.3 The toric code in a field: perturbation analysis

We now apply a magnetic field to the toric code that will realistically allow the quasiparticles to hop and, unfortunately, destroy its exact solvability (see [9]). To wit:

$$H = -J_e \sum_s A_s - J_m \sum_p B_p - \sum_j (h_x \sigma_j^x + h_z \sigma_j^z) \quad (16.62)$$

For example, with $h_x = 0$ but $h_z \neq 0$, we can view the perturbation as an electric path operator of length 1 on each edge. Hence, it can cause charge pair creation and annihilation (at an energy cost $\sim 4J_e$) or hop existing charges by one lattice displacement, at no cost. For small h_z this provides a nontrivial tight-binding dispersion to the charges,

$$\epsilon(q) \approx 2J_e - 2h_z(\cos q_x + \cos q_y) \quad (16.63)$$

but does not close the gap or lead to a change in the topological degeneracy of the ground state in the thermodynamic limit.

At large $h_z \gg J_e, J_m$, the model should simply align with the applied field as a paramagnet. Clearly, in this limit the topological degeneracy has been destroyed and we have a unique spin-polarized ground state. The phase transition can be understood from the topological side as a bose condensation of the charges, which proliferate as h_z increases.

The same argument is applicable if $h_x \gg J_e, J_m$. If h_x increases while $h_z = 0$, then vortices condense. However, the high-field phase is just a paramagnet, so one can continuously rotate the field between the x - and z -direction without inducing a phase transition. Thus, the charge and vortex condensates are actually the same phase! This property was first discovered by [2] for a 3D classical \mathbb{Z}_2 gauge Higgs model, where it appears rather mysterious.

16.4.4 Robustness of the topological degeneracy

The splitting of the ground state levels due to virtual quasiparticle tunneling is given by

$$\delta E \sim \Delta e^{-L/\xi} \quad (16.64)$$

This follows from the effective Hamiltonian

$$H_{\text{eff}} = -(t_{1Z}Z_1 + t_{2Z}Z_2 + t_{1X}X_1 + t_{2X}X_2) \quad (16.65)$$

where the Z_i , X_i operators are the winding loop operators of Sec. 16.4.2. Physically, this is simply a statement of the fact that the only way to act upon the ground state is to wind quasiparticles around the torus. This is a process exponentially suppressed in system size.

16.4.5 Emergent symmetry: gauge formulation

There are two ways to introduce symmetry operators in the perturbed toric code model.

1. One can define *loop operators* (e.g. Z_1, Z_2, X_1, X_2), the definition of which depends on the actual ground state of the perturbed Hamiltonian. This is similar to the definition of the operator Y in the 1D case of Sec. 16.2.5, which also requires detailed knowledge of the ground state.
2. One can exploit *gauge invariance* by rewriting the model in a gauge invariant form. This can be done for any spin model by introducing redundancy. In this case, the symmetry does not depend on the model but is only manifest in the topological phase.

We will take the second approach in order to avoid the difficulty of defining the appropriate loop operators and also to introduce the important gauge formulation of the model. To gauge the model we proceed in steps:

1. Introduce one extra spin μ_v per vertex that always remains in the state

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle). \quad (16.66)$$

This state is characterized by the condition

$$\mu_v^x |\Psi\rangle = |\Psi\rangle, \quad (16.67)$$

where μ_v^x is the Pauli spin matrix for the spin μ at vertex v .

2. Change spin operators from σ_{uv}, μ_v to $\tilde{\sigma}_{uv}, \tilde{\mu}_v$ where we represent the classical value of each old spin s_{uv} as $\tilde{m}_u \tilde{s}_{uv} \tilde{m}_v$. Here s_{uv} is the spin on the edge connecting u and v and m_u, m_v are the classical values of the new spins (*i.e.* the labels in the μ^z basis).

Thus the complete transformation is given by

$$\begin{aligned} \sigma_{uv}^z &= \tilde{\mu}_u^z \tilde{\sigma}_{uv}^z \tilde{\mu}_v^z \\ \sigma_{uv}^x &= \tilde{\sigma}_{uv}^x \\ \mu_u^z &= \tilde{\mu}_u^z \\ \mu_u^x &= \tilde{\mu}_u^x \prod_{j \in \text{star}(u)} \tilde{\sigma}_j^x = \tilde{\mu}_u^x \tilde{A}_u \end{aligned} \quad (16.68)$$

and the constraint Eq. (16.67) becomes the standard \mathbb{Z}_2 gauge constraint:

$$\tilde{\mu}_u^x \tilde{A}_u |\Psi\rangle = |\Psi\rangle. \quad (16.69)$$

On states satisfying the gauge constraint Eq. (16.69), $A_u = \tilde{A}_u = \tilde{\mu}_u^x$. Therefore,

$$A_u |\Psi\rangle = \tilde{\mu}_u^x |\Psi\rangle \quad (16.70)$$

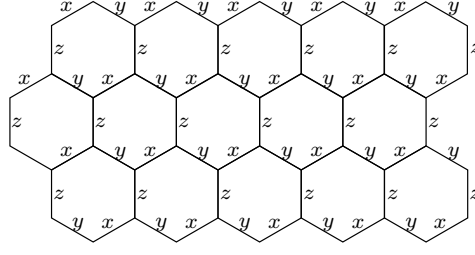


Figure 16.7: The honeycomb model has spins living on the vertices of a honeycomb lattice with nearest neighbor interactions that are link-orientation dependent. x -links have $\sigma^x \sigma^x$ interactions, y -links have $\sigma^y \sigma^y$ interactions and z -links have $\sigma^z \sigma^z$ interactions.

and we can rewrite the Hamiltonian as

$$H = -J_e \sum_v \tilde{\mu}_v^x - J_m \sum_p \tilde{B}_p - \sum_{\langle u,v \rangle} (h_x \tilde{\sigma}_{uv}^x + h_z \tilde{\mu}_u^z \tilde{\sigma}_{uv}^z \tilde{\mu}_v^z) \quad (16.71)$$

subject to the gauge constraint.

Viewed as a standard \mathbb{Z}_2 gauge theory, the protected topological degeneracy of the ground state is physically familiar as the protected degeneracy associated with the choice of flux threading the $2g$ holes of the genus g surface.

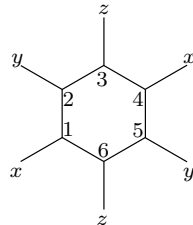
16.5 The honeycomb lattice model

We now investigate the properties of another exactly solvable spin model in two dimensions, the *honeycomb lattice model*. This model exhibits a number of gapped phases that are perturbatively related to the toric code of the previous sections. Moreover, in the presence of time-reversal symmetry breaking terms, a new topological phase arises with different topological properties, including nontrivial *spectral Chern number*. An extended treatment of the properties of this model with much greater detail can be found in [6].

In the honeycomb lattice model, the degrees of freedom are spins living on the vertices of a honeycomb lattice with nearest neighbor interactions. The unusual feature of this model is that the interactions are link orientation dependent (see Fig. 16.7). The Hamiltonian is

$$H = -J_x \sum_{x \text{ links}} \sigma_j^x \sigma_k^x - J_y \sum_{y \text{ links}} \sigma_j^y \sigma_k^y - J_z \sum_{z \text{ links}} \sigma_j^z \sigma_k^z \quad (16.72)$$

We might expect this model to be integrable because $[H, W_p] = 0$ for an extensive collection of plaquette operators



$$W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$$

(16.73)

where the spins and labels follow from the figure for each plaquette. Unfortunately, this is not quite enough: there are two spins but only one constraint per hexagon so that half of each spin remains unconstrained. In fact, the remaining degrees of freedom are Majorana operators!

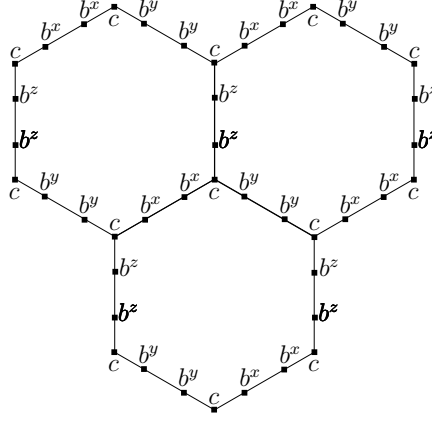


Figure 16.8: Majorana representation of honeycomb model.

16.5.1 A (redundant) representation of a spin by 4 Majorana operators

We consider a collection of four Majorana operators c, b^x, b^y and b^z that act on the 4-dimensional Fock space \mathfrak{F} . We define the following three operators

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}^x &= ib^x c \\ \tilde{\sigma}^y &= ib^y c \\ \tilde{\sigma}^z &= ib^z c.\end{aligned}\tag{16.74}$$

These operators do not obey the spin algebra relations on the full Fock space, but we clearly have two extra dimensions of wiggle room. In fact, the physical state space is identified with a two-dimensional subspace $\mathfrak{L} \subset \mathfrak{F}$ given by the constraint

$$D|\Psi\rangle = |\Psi\rangle, \quad \text{where } D = b^x b^y b^z c\tag{16.75}$$

Within \mathfrak{L} , the $\tilde{\sigma}^\alpha$ act as σ^α act on the actual spin. Of course, $\tilde{\sigma}^\alpha$ also act on \mathfrak{L}^\perp , but we can ignore these states by enforcing the constraint.

To be careful, we need to check two consistency conditions:

1. $\tilde{\sigma}^\alpha$ preserves the subspace \mathfrak{L} , which follows from $[\tilde{\sigma}^\alpha, D] = 0$.
2. The $\tilde{\sigma}^\alpha$ satisfy the correct algebraic relations when restricted to \mathfrak{L} . For example,

$$\tilde{\sigma}^x \tilde{\sigma}^y \tilde{\sigma}^z = (ib^x c)(ib^y c)(ib^z c) = i^3(-1)b^x b^y b^z c^3 = iD = i\tag{16.76}$$

where the last equality only holds in the physical subspace \mathfrak{L} .

16.5.2 Solving the Honeycomb Model using Majoranas

We now use the Majorana representation of spins just introduced to rewrite each spin of the entire honeycomb model as in Fig. 16.8. This will greatly expand the 2^N -dimensional Hilbert space to the Fock space \mathfrak{F} of dimension 2^{2N} , but the physical space $\mathfrak{L} \subset \mathfrak{F}$ is fixed by the gauge condition

$$D_j |\Psi\rangle = |\Psi\rangle \quad \text{for all } j\tag{16.77}$$

where $D_j = b_j^x b_j^y b_j^z c$. We define a projector onto \mathfrak{L} by

$$\Pi_{\mathfrak{L}} = \prod_j \left(\frac{1 + D_j}{2} \right)\tag{16.78}$$

In the Majorana representation, the Hamiltonian (16.72) becomes

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \frac{i}{4} \sum_{\langle j,k \rangle} \hat{A}_{jk} c_j c_k \\ \hat{A}_{jk} &= 2J_{\alpha(j,k)} \hat{u}_{jk} \\ \hat{u}_{jk} &= i b_j^{\alpha(j,k)} b_k^{\alpha(j,k)}\end{aligned}\tag{16.79}$$

where $\alpha(j, k) = x, y, z$ is the direction of the link between j and k .

We have suggestively written the Hamiltonian \tilde{H} as if it were a simple quadratic fermion Hamiltonian as in Sec. 16.2.4, but of course \hat{A}_{jk} is secretly an operator rather than a real skew-symmetric matrix. However, each operator b_j^α enters only one term of the Hamiltonian and therefore \hat{u}_{jk} commute with each other and with \tilde{H} ! Thus, we can fix $u_{jk} = \pm 1$, defining an orthogonal decomposition of the full Fock space:

$$\mathfrak{F} = \bigoplus_u \mathfrak{F}_u, \quad \text{where } |\Psi\rangle \in \mathfrak{F}_u \text{ iff } \hat{u}_{jk} |\Psi\rangle = u_{jk} |\Psi\rangle \quad \forall j, k \tag{16.80}$$

Within each subspace \mathfrak{F}_u , we need to solve the quadratic Hamiltonian

$$\begin{aligned}\tilde{H}_u &= \frac{i}{4} \sum_{\langle j,k \rangle} A_{jk} c_j c_k \\ A_{jk} &= 2J_{\alpha(j,k)} u_{jk}\end{aligned}\tag{16.81}$$

which we know how to do in principle. On the other hand, the integrals of motion W_p (the hexagon operators) define a decomposition of the physical subspace \mathfrak{L} labeled by the eigenvalues $w_p = \pm 1$:

$$\mathfrak{L} = \bigoplus_w \mathfrak{L}_w, \quad \text{where } |\Psi\rangle \in \mathfrak{L}_w \text{ iff } W_p |\Psi\rangle = w_p |\Psi\rangle \quad \forall p \tag{16.82}$$

We can relate these two decompositions by expressing W_p in the Majorana representation and noting that within the physical subspace

$$\tilde{W}_p = \prod_{\langle j,k \rangle \in \partial p} \hat{u}_{jk} \tag{16.83}$$

Thus, we find

$$\mathfrak{L}_w = \Pi_{\mathfrak{L}} \mathfrak{F}_u \tag{16.84}$$

where $w_p = \prod_{\langle j,k \rangle \in \partial p} u_{jk}$.

So we have a procedure for finding the ground state of the honeycomb model:

1. Fix $w_p = \pm 1$ for all p .
2. Find u_{jk} satisfying

$$w_p = \prod_{\langle j,k \rangle \in \partial p} u_{jk}. \tag{16.85}$$

There is a small subtlety here in that $u_{jk} = -u_{kj}$ so we must be careful about ordering. We can consistently take j in the even sublattice of the honeycomb and k in the odd sublattice in equation (16.85).

3. Solve for the ground state of the quadratic Hamiltonian (16.81), finding the energy $E(w)$.
4. Project the found state onto the physical subspace (*i.e.* symmetrize over gauge transformations).

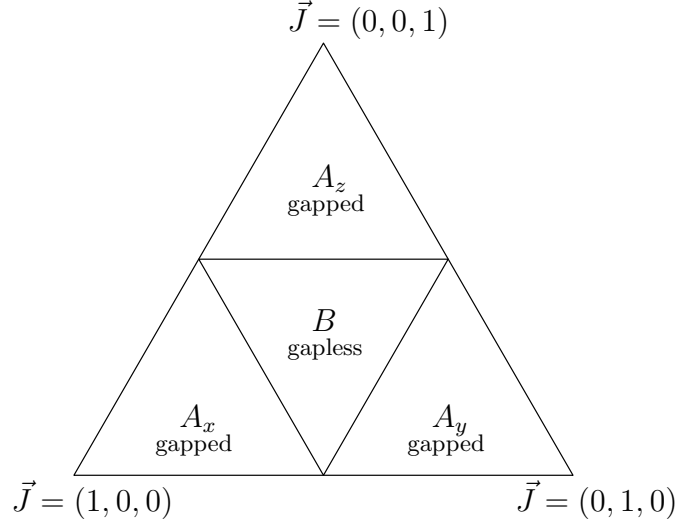


Figure 16.9: Phase diagram of honeycomb model. This is a slice through the positive octant in \vec{J} coupling space along the $J_x + J_y + J_z = 1$ plane. The other octants are analogous.

5. Repeat for all w ; pick the w that minimizes the energy.

If there were no further structure to $E(w)$, this would be an intractable search problem in the space of w_p . Fortunately, due to a theorem by Lieb 1994, the ground state has no vortices. That is,

$$E(w) = \min \text{ if } w_p = 1 \ \forall \ p \quad (16.86)$$

Using this choice of w_p , it is easy to solve the model and produce the phase diagram of Fig. 16.9. The gapless phase has two Dirac points in the fermionic spectrum.

16.5.3 Fermionic spectrum in the honeycomb lattice model

We just need to diagonalize the Hamiltonian

$$\begin{aligned} \tilde{H}_u &= \frac{i}{4} \sum_{\langle j,k \rangle} A_{jk} c_j c_k \\ A_{jk} &= 2J_{\alpha(j,k)} u_{jk} \\ u_{jk} &= \begin{cases} +1 & \text{if } j \in \text{even sublattice} \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned} \quad (16.87)$$

This is equivalent to finding the eigenvalues and eigenvectors of the matrix iA . Since the honeycomb lattice has two sites per unit cell, by applying the Fourier transform we get a 2×2 matrix $A(\vec{q})$:

$$\begin{aligned} iA(\vec{q}) &= \begin{pmatrix} 0 & if(\vec{q}) \\ -if(\vec{q}) & 0 \end{pmatrix} \\ \epsilon(\vec{q}) &= \pm |f(\vec{q})| \end{aligned} \quad (16.88)$$

where $f(\vec{q})$ is some complex function that depends on the couplings J_x, J_y, J_z . In the gapless phase (phase B in Fig. 16.9), $f(\vec{q})$ has two zeros which correspond to Dirac points (see Fig. 16.10). At the transition to phase A, the Dirac points merge and disappear.



Figure 16.10: Direct and reciprocal lattices of the honeycomb. The points $\pm \vec{q}_*$ are the two Dirac points of the gapless phase B.

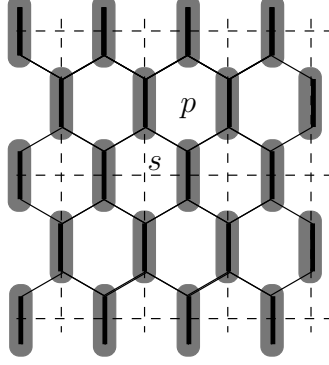


Figure 16.11: The vertical dimers on the honeycomb lattice themselves form the edges of a (dashed) square lattice. The plaquettes of alternate rows of the hexagonal lattice correspond to the stars and plaquettes of the square lattice. This is *weak breaking of translational symmetry*.

16.5.4 Quasiparticle statistics in the gapped phase

It appears that there are two particle types: fermions and vortices (hexagons with $w_p = -1$). The vortices are associated with a \mathbb{Z}_2 gauge field, where u_{jk} plays the role of vector potential. Taking a fermion around a vortex results in the multiplication of the state by -1 (compared to the no-vortex case). However, the details such as the fusion rules are not obvious.

Let us look at the model from a different perspective. If $J_x = J_y = 0, J_z > 0$, the system is just a set of dimers (see Fig. 16.11). Each dimer can be in two states: $\uparrow\uparrow$ and $\downarrow\downarrow$. The other two states have $2J_z$ higher energy. Thus, the ground state is highly degenerate.

If $J_x, J_y \ll J_z$, we can use perturbation theory relative to the noninteracting dimer point. Let us characterize each dimer by an effective spin:

$$|\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle; \quad |\downarrow\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (16.89)$$

At 4th order of perturbation theory, we get:

$$H_{\text{eff}}^{(4)} = \text{const} - \frac{J_x^2 J_y^2}{16 J_z^3} \sum_p Q_p \quad (16.90)$$

where p runs over the square plaquettes of the dimer lattice (see Fig. 16.11) and

$$Q_p = \sigma_{p_1}^y \sigma_{p_2}^x \sigma_{p_3}^y \sigma_{p_4}^x \quad (16.91)$$

is a plaquette operator on the effective spin space $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. By adjusting the unit cell and rotating the spins, we can reduce this Hamiltonian to the toric code!

The vertices and plaquettes of the new lattice correspond to alternating rows of hexagons. Thus, vortices on even rows belong to one superselection sector and vortices on odd rows to the other. It is impossible to move a vortex from an even row to an odd row by a local operator without producing other particles (*e.g.* fermions). The fermions and $e - m$ pairs belong to the same superselection sector, ϵ , though these are different physical states.

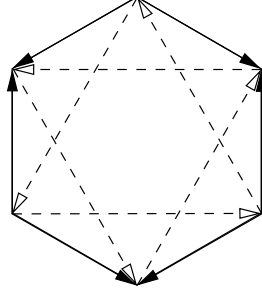


Figure 16.12: Picture of chiral interaction matrix A_{jk} . Forward arrows correspond to positive entries in the skew-symmetric real matrix A_{jk} . Solid arrows are the interactions of the original honeycomb model; dashed arrows give the time-reversal symmetry breaking perturbation.

16.5.5 Nonabelian phase

In the gapless phase B, vortex statistics are not well-defined. However, a gap can be opened by applying a perturbation that breaks the time-reversal symmetry, such as a magnetic field. Unfortunately the honeycomb model in a field is not exactly solvable. [10] studied an exactly solvable spin model where the time-reversal symmetry is spontaneously broken, but we will satisfy ourselves by introducing a T-breaking next nearest neighbor interaction on the fermionic level (which can be represented by a 3-spin interaction in the original spin language).

Written in terms of Majorana fermions, we consider the Hamiltonian

$$H = \frac{i}{4} \sum_{\langle j,k \rangle} A_{jk} c_j c_k \quad (16.92)$$

where A_{jk} now has chiral terms connecting Majoranas beyond nearest neighbor in the honeycomb lattice (see Fig. 16.12). After Fourier transforming, we find

$$iA(\vec{q}) = \begin{pmatrix} \Delta(\vec{q}) & if(\vec{q}) \\ -if(\vec{q}) & -\Delta(\vec{q}) \end{pmatrix} \quad (16.93)$$

with the massive dispersion relation

$$\epsilon(\vec{q}) = \pm \sqrt{f(\vec{q})^2 + \Delta(\vec{q})^2}. \quad (16.94)$$

Within this massive phase, we will find nontrivial topological invariants of the quasiparticle spectrum. Let $iA(\vec{q})$ be a nondegenerate Hermitian matrix that continuously depends on \vec{q} . In our case, A acts in \mathbb{C}^2 , but in general it can be \mathbb{C}^n for any n . Let us keep track of the “negative eigenspace” of $iA(\vec{q})$: the subspace $\mathfrak{L}(\vec{q}) \subseteq \mathbb{C}^n$ spanned by eigenvectors corresponding to negative eigenvalues. For matrix (16.93), $\dim \mathfrak{L}(\vec{q}) = 1$. This defines a map F from momentum space (the torus) to the set of m -dimensional subspaces in \mathbb{C}^n . More formally:

$$F : \mathbb{T}^2 \longrightarrow U(n)/U(m) \times U(n-m) \quad (16.95)$$

This map F may have nontrivial topology.

In the honeycomb model with T-breaking, we have $n = 2$, $m = 1$ and $U(2)/U(1) \times U(1) = \mathbb{C}P^1 = S^2$ is the unit sphere. Thus, $F : \mathbb{T}^2 \longrightarrow S^2$ and for the matrix $iA(\vec{q})$ of Eq. (16.93), F has degree 1. That is, the torus wraps around the sphere once. More abstractly, $\mathfrak{L}(\vec{q})$ defines a complex vector bundle over the momentum space \mathbb{T}^2 . This has an invariant Chern number ν , which in this case is $\nu = 1$.

What is the significance of the spectral Chern number? It is known to characterize the integer quantum Hall effect, where it is known as the “TKNN invariant”. For a Majorana system, there is no Hall effect since particles are not conserved. Rather, the spectral Chern number determines the number of chiral modes at the edge:

$$\nu = (\# \text{ of left-movers}) - (\# \text{ of right-movers}). \quad (16.96)$$

16.5.6 Robustness of chiral modes

A chiral edge mode may be described by its Hamiltonian:

$$H_{\text{edge}} = \frac{iv}{4} \int \hat{\eta}(x) \partial_x \hat{\eta}(x) dx \quad (16.97)$$

where $\hat{\eta}(x)$ is a real fermionic field. That is,

$$\hat{\eta}(x)\hat{\eta}(y) + \hat{\eta}(y)\hat{\eta}(x) = 2\delta(x - y). \quad (16.98)$$

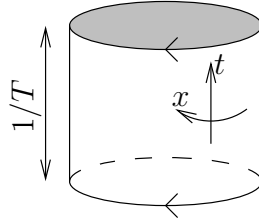
At temperature T , each mode carries energy current

$$I_1 = \frac{\pi}{24} T^2. \quad (16.99)$$

The easiest explanation of this is a straightforward 1-D fermi gas calculation:

$$\begin{aligned} I_1 &= v \int_0^\infty n(q) \epsilon(q) \frac{dq}{4\pi} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\epsilon d\epsilon}{1 + e^{\epsilon/T}} \\ &= \frac{\pi}{24} T^2 \end{aligned} \quad (16.100)$$

However, it is useful to reexamine this current using conformal field theory (CFT), in order to understand better why the chiral modes are robust. We consider a disc of B phase extended into imaginary time at temperature T . That is, we have a solid cylinder with top and bottom identified:



We have obtained a solid torus whose surface is a usual torus. The partition function is mostly determined by the surface.

Let the spatial dimensions be much greater than $\frac{1}{T}$. From this point of view, the cylinder looks more like:



According to the usual CFT arguments, we have

$$\begin{aligned} Z &\sim q^{\frac{c}{24}} \bar{q}^{\frac{\bar{c}}{24}} \\ q &= e^{2\pi i \tau} \\ \tau &= i \frac{LT}{v} + \text{twist} \end{aligned} \quad (16.101)$$

Twisting the torus changes the partition function by:

$$\begin{aligned} \tau &\mapsto \tau + 1 \\ Z &\mapsto Z e^{2\pi i \frac{c-\bar{c}}{24}}. \end{aligned} \quad (16.102)$$

On the other hand, the twist parameter ($\text{Re } \tau$) couples to the some component of the energy-momentum tensor, namely, T_{xt} , which corresponds to the energy flow. This relation implies that

$$I = \frac{\pi}{12}(c - \bar{c})T^2. \quad (16.103)$$

The chiral central charge, $c - \bar{c}$, does not depend on the boundary conditions. Indeed, the energy current on the edge cannot change because the energy cannot go into the bulk.

Part VIII

Old, Fundamental Theories

Part IX

Special Effects, Properties: Main Articles

Part X

Experiments: Main Articles

Part XI

Typical Theories: Other Articles

17 Quantum variance: a measure of quantum coherence and quantum correlations for many-body systems by Frérot, Roscilde

Abstract

Quantum coherence is a fundamental common trait of quantum phenomena, from the interference of matter waves to quantum degeneracy of identical particles. Despite its importance, estimating and measuring quantum coherence in generic, mixed many-body quantum states remains a formidable challenge, with fundamental implications in areas as broad as quantum condensed matter, quantum information, quantum metrology and quantum biology. Here we provide a quantitative definition of the variance of quantum coherent fluctuations (the *quantum variance*) of any observable on generic quantum states. The quantum variance generalizes the concept of thermal de Broglie wavelength (for the position of a free quantum particle) to the space of eigenvalues of any observable, quantifying the degree of coherent delocalization in that space. The quantum variance is generically measurable and computable as the difference between the static fluctuations and the static susceptibility of the observable; despite its simplicity, it is found to provide a tight lower bound to most widely accepted estimators of “quantumness” of observables (both as a feature as well as a resource), such as the Wigner-Yanase skew information and the quantum Fisher information. When considering bipartite fluctuations in an extended quantum system, the quantum variance expresses genuine quantum correlations (of discord type) among the two parts. In the case of many-body systems it is found to obey an area law at finite temperature, extending therefore area laws of entanglement and quantum fluctuations of pure states to the mixed-state context. Hence the quantum variance paves the way to the measurement of macroscopic quantum coherence and quantum correlations in most complex quantum systems.

17.1 Introduction

Quantum mechanics introduces two fundamentally new traits in a physical system: 1) an intrinsic uncertainty on the knowledge of observables (Heisenberg’s uncertainty or coherent quantum fluctuations), and 2) a superior form of correlation among degrees of freedom, stemming from correlated quantum uncertainties (or entanglement) [? ? ?]. Quantum uncertainty of observables persists even at zero temperature in the form of so-called zero-point fluctuations, responsible for macroscopic quantum phenomena such as the inability of liquid Helium to solidify at ambient pressure [?]. On the other hand two quantum systems (hereafter called A and B) can exhibit correlations far exceeding any classical counterpart, which for pure quantum states are embodied by entanglement [?]. The supremacy of both fluctuations and correlations in quantum systems, as compared to classical ones, is at the heart of the complexity of many-body quantum states, challenging all realms of quantum physics, from relativistic quantum field theory to atomic/molecular physics and quantum condensed matter. At the same time quantum fluctuations and correlations (going beyond entanglement [?]) are by now recognized as essential ingredients for the supremacy of quantum devices over classical ones, in the context of both quantum information processing [?] and quantum metrology [?].

Despite their fundamental as well as practical importance, quantum coherence and quantum correlations remain very hard to both quantify theoretically and to measure experimentally.

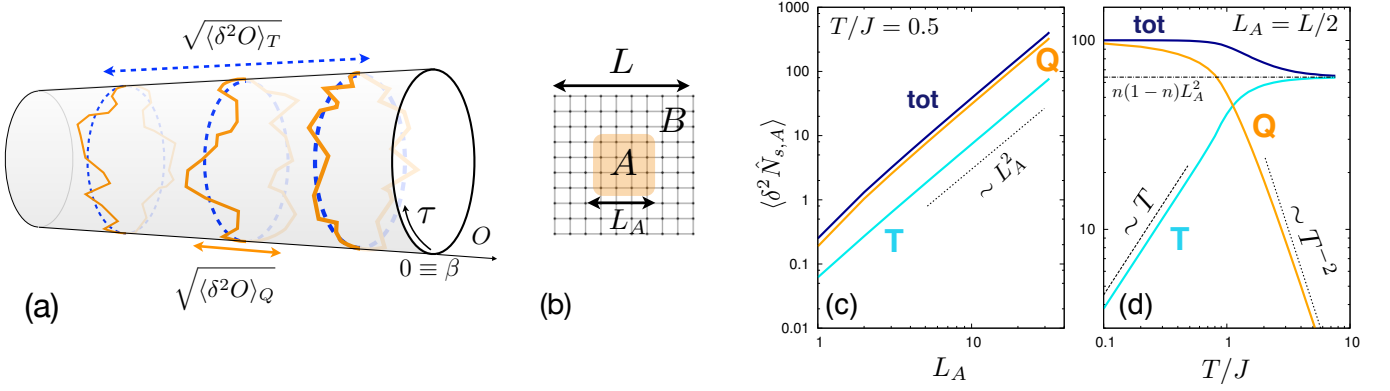


Figure 17.1: **Thermal vs. quantum fluctuations.** (a) Different imaginary-time paths $O(\tau)$ in the space of eigenvalues of the observable \hat{O} are shown, associated with the path-integral representation of a generic mixed state $\hat{\rho}$. While the thermal/incoherent fluctuations $\langle \delta^2 O \rangle_T$ are associated with the fluctuations of the centroids of the paths (dashed blue lines), the quantum/coherent fluctuations $\langle \delta^2 O \rangle_Q$ are associated with the fluctuations of the paths around their centroids; (b) Geometry of the A - B bipartition of an extended quantum system used in the text; (c) Scaling of the total (tot), thermal (T) and quantum (Q) fluctuations of the staggered particle number $N_{s,A}$ on a subsystem A of size L_A for hardcore bosons on a square lattice at temperature $T/J = 0.5$ (the system is defined on a $L \times L$ torus with $L = 32$). All fluctuation terms exhibit volume-law scaling. Here and in the following graphs, the error bar is smaller than or comparable to the line thickness; (d) Temperature dependence of the $N_{s,A}$ fluctuations for a subsystem of linear size $L_A = L/2$. The dashed line indicates the infinite temperature limit, in which each lattice site fluctuates independently, with a shot-noise variance $n(1-n)$ where $n = 1/2$ is the lattice filling.

Quantum uncertainty of an observable and quantum entanglement between two subsystems are generically defined only for pure states [? ?]. In the case of generic, real-life mixed states, the most widespread concept of quantum coherence is related to the thermal de Broglie wavelength (TdBWL) [?], expressing the spatial extent of coherent quantum fluctuations for a single quantum particle in free space; but this concept does not even extend to systems as simple as a particle in a potential. More recently, several definitions of mixed-state quantum coherence have been put forward [? ? ? ? ?], which nonetheless share the generically prohibitive requirement of knowing the full density matrix of the state, and they are therefore limited to few-body systems. As for the entanglement of mixed states, one can only provide sufficient conditions (witnesses) for the presence of entanglement between the components of the system [? ? ?]. Yet, even for non-entangled mixed states it has been recognized that quantum correlations may exist, associated with the violation of classical information-theory identities, and quantified via the so-called quantum discord [?] and discord-like quantities [? ?]. Despite their deep conceptual meaning, entanglement and quantum correlations of mixed states remain in general information-theoretical objects, generically accessible (to calculations and measurements alike) only when defined between two (or a few) elementary quantum degrees of freedom [? ? ? ? ?].

Here we show that both quantum coherent fluctuations and quantum correlations in generic quantum states can be quantified in terms of elementary physical concepts. The variance of fluctuations in generic mixed states possesses in fact an *additive* structure, in which the incoherent/thermal part can be separated from the coherent/quantum part, which we name *quantum variance* (QV). The QV is defined in terms of the violation of a classical, static

fluctuation-dissipation relation, and as such it is fully computable and measurable for generic systems. The QV of a given observable is a measure of its genuine quantum uncertainty in mixed states, and, in the case of bipartite fluctuations, it represents a measure of correlated quantum uncertainties, namely of quantum correlations. Remarkably the QV is convex (namely it *decreases* upon incoherent mixing of states with the same QV), and it gives a tight lower bound to both the Wigner-Yanase skew information [? ?] and to the quantum Fisher information [?] which are widely accepted, yet generically prohibitive measures (for both calculations and experiments) of the quantumness of observables and of correlations [? ? ? ? ? ?].

The structure of the paper is as follows. Sec. 17.2 introduces the separation between coherent and incoherent fluctuations, and the definition of QV; Sec. 17.3 reviews the fundamental properties of the QV as a lower bound to known measures of “quantumness” of observables; Sec. 17.4 describes the volume-law scaling of QV for generic extensive observables; Sec. 17.5 illustrates the fundamental separation of scales between thermal and quantum fluctuations at a thermal critical point; Sec. 17.6 discusses the area-law scaling of the QV of bipartite fluctuations; Sec. 17.7 illustrates the link between the QV and other measures of quantum correlations in the case of free fermions; and finally Sec. 17.8 elaborates on the general link between QV on the one side, and entanglement and quantum correlations on the other; and on the experimental measurement of the QV with cold-atom quantum simulators. The technical aspects are kept to a minimum level in the main text, and they are postponed to the Appendices.

17.2 Separating classical and quantum fluctuations.

Let us first show that, given a density matrix $\hat{\rho}$ such that $\langle \dots \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}(\dots)]/\text{Tr}\hat{\rho}$, and a generic Hermitian operator \hat{O} , the fluctuations of the latter can be written as

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle = \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2 = \langle \delta^2 \hat{O} \rangle_T + \langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q \quad (17.1)$$

where $\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_T$ represents thermal/incoherent fluctuations, while $\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q$ represent quantum/coherent fluctuations. In the following we shall focus our attention on thermal equilibrium states, but the whole treatment is readily generalizable to arbitrary density matrices (see App. 17.10). If $\hat{\rho} = e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}/\mathcal{Z}$ ($\mathcal{Z} = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}})$) is the thermal density matrix of a system of Hamiltonian $\hat{\mathcal{H}}$ at temperature $k_B T = 1/\beta$, and $[\hat{O}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$, it is well known that the fluctuations of \hat{O} satisfy a (classical) fluctuation-dissipation theorem

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle = \chi_O k_B T \quad (17.2)$$

where $\chi_O = \partial^2 F / \partial h^2|_{h=0}$ is the susceptibility associated with the application of a term $-h\hat{O}$ to the Hamiltonian, and $F = -k_B T \log \mathcal{Z}$ is the free energy. On the other hand, if $[\hat{O}, \hat{\mathcal{H}}] \neq 0$ the quantum uncertainty on the value of \hat{O} adds up to the thermal fluctuations, and, as a result

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle \geq \chi_O k_B T = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \langle \delta \hat{O}(\tau) \delta \hat{O}(0) \rangle =: \langle \delta^2 \hat{O} \rangle_T \quad (17.3)$$

where $\hat{O}(\tau) = e^{\tau \hat{\mathcal{H}}} \hat{O} e^{-\tau \hat{\mathcal{H}}}$ is the operator evolved in imaginary time. Eq. (17.3) shows that thermal fluctuations do not exhaust the total fluctuations of the observable. It is then natural to define the QV for the observable \hat{O} as the residual fluctuations, or as the violation of the classical fluctuation-dissipation relation of Eq. (17.2):

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q = \langle \delta^2 \hat{O} \rangle - \chi_O k_B T. \quad (17.4)$$

The QV has a particularly suggestive interpretation in the context of a path-integral representation of the partition function of the system, using a basis of Hilbert space which diagonalizes

the \hat{O} operator (see Fig. 17.1(a)). As discussed in App. 17.10, this allows one to cast the partition function in the form:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[O(\tau)] e^{-S[O(\tau), \partial_\tau O(\tau), \dots]} \quad (17.5)$$

where $O(\tau)$ is a periodic trajectory ($O(0) = O(\beta)$) in the space of eigenvalues of \hat{O} , associated with the Feynman path in the basis diagonalizing \hat{O} , and S is the associated action weighting the trajectory. When assigning a path-integral expression to each of the terms in Eq. (17.4), one can easily find that (see App. 17.10)

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q = \left\langle \frac{1}{\beta} \int d\tau (O(\tau) - \bar{O})^2 \right\rangle_S \quad (17.6)$$

where $\langle \dots \rangle_S$ is the average over the ensemble of paths $O(\tau)$ weighed by the action S , and

$$\bar{O} = \bar{O}[O(\tau)] = \frac{1}{\beta} \int d\tau O(\tau) \quad (17.7)$$

is the centroid of the path [?]. Eq. (17.6) shows that the QV represents the (squared) amplitude of the imaginary-time fluctuations of the trajectory $O(\tau)$ around the path centroid. Clearly such fluctuations have a genuine quantum origin [? ? ?]. If \hat{O} is the position \hat{x} of a one-dimensional particle, in App. 17.11 we show that $\langle \delta^2 \hat{x} \rangle_Q \sim \lambda_{\text{dB}}^2$, namely the QV is tightly related to the quantum uncertainty on the position expressed by the TdBWL λ_{dB} . When moving to higher dimensions and generic quantum systems, the QV generalizes therefore the concept of TdBWL (or quantum coherence length) to the space of eigenvalues of any Hermitian operator. And, most remarkably, it does so in a computable and measurable manner, being expressed as the difference between a fluctuation property and a response function.

17.3 Properties of the quantum variance.

The QV represents a physically measurable lower bound to fundamental quantities in quantum information. The Dyson-Wigner-Yanase skew information [?]

$$I_\alpha(\hat{O}, \hat{\rho}) = -\frac{1}{2} \text{Tr}\{[\hat{O}, \hat{\rho}^\alpha][\hat{O}, \hat{\rho}^{1-\alpha}]\} \quad (17.8)$$

with $\alpha \in [0, 1]$, generalizing the Wigner-Yanase skew information ($\alpha = 1/2$) [?], probes the quantum uncertainty of \hat{O} stemming from its non-commutativity with $\hat{\rho}$. As shown in App. 17.12, the QV is simply

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q[\hat{\rho}] = \int_0^1 d\alpha I_\alpha. \quad (17.9)$$

From the convexity of I_α [?] follows the convexity of the QV. Moreover one can prove that

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q[\hat{\rho}] \leq I_{1/2}(\hat{O}, \hat{\rho}) \quad (17.10)$$

(the equality holding for pure states). Finally, the quantum Fisher information [?]

$$F_Q(\hat{O}; \hat{\rho}) = 2 \sum_{nm} |\langle n | \hat{O} | m \rangle|^2 (p_n - p_m)^2 / (p_n + p_m) \quad (17.11)$$

(where $\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|$) expresses the sensitivity of the density matrix to a unitary transformation $\hat{U}(h) = e^{-ih\hat{O}}$ generated by the observable \hat{O} , and it quantifies the fundamental metrological gain in using the state $\hat{\rho}$ to estimate the parameter h [?]. As shown in App. 17.13,

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q[\hat{\rho}] \leq F_Q(\hat{O}; \hat{\rho})/4. \quad (17.12)$$

The inequality becomes an equality for pure states. As discussed later, the inequalities satisfied by the QV have considerable implications concerning its importance for entanglement witnessing and metrological applications. Conversely, the computability and measurability of QV gives unprecedented insight into the skew and quantum Fisher information for quantum many-body systems.

17.4 Quantum variance of a global observable and volume law.

Due to its inherent quantum nature, the QV exhibits very special size and temperature dependences. In the following we shall concentrate on thermal equilibrium states, and we start our analysis with the case of a generic, macroscopic observable \hat{O} that does *not* commute with the Hamiltonian of the system. As an example we consider the case of two-dimensional hardcore bosons on the square lattice:

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \text{h.c.} \right) \quad (17.13)$$

where $\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger$ are hardcore boson operators, satisfying the (anti)-commutation relations $\{\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger\} = 1$ and $[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = 0$ ($i \neq j$). We treat this model with a numerically exact quantum Monte Carlo algorithm based on the Stochastic Series Expansion approach [?], which allows us to investigate the imaginary-time dynamics of many-body observables [?]. The Hamiltonian $\hat{\mathcal{H}}$ does not commute with any finite-wavevector Fourier component of the density profile, and in particular with the staggered particle number

$$\hat{N}_s = \sum_i (-1)^i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i. \quad (17.14)$$

To investigate the scaling of fluctuations (both thermal and quantum) we isolate a subsystem A of linear size L_A in a larger system (of linear size L – see Fig. 17.1(b)), and we investigate the scaling of local observables/fluctuations in A with the size of the A region itself. This approach allows one to extract scaling properties while using a single simulation box, and it is also directly applicable to experiments giving access to local properties, such as those based on quantum-gas microscopy [?].

Fig. 17.1(c) shows that both the thermal and the quantum contribution to fluctuations obey a *volume-law* scaling in the example at hand:

$$\langle \delta^2 \hat{N}_{s,A} \rangle_T, \langle \delta^2 \hat{N}_{s,A} \rangle_Q \sim L_A^d \quad (17.15)$$

where $\hat{N}_{s,A} = \sum_{i \in A} (-1)^i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$. A volume-law scaling of quantum fluctuations is generically expected when the observable of interest is extensive, and its Heisenberg's uncertainty is the result of the non-commutativity between an extensive set of terms in the Hamiltonian and in the observable in question. The separation between thermal and quantum fluctuations gives rise to a very meaningful result when tracking the temperature dependence of the fluctuations on a subsystem of fixed size ($L_A = L/2$ in this case). As shown in Fig. 17.1(c), the thermal component grows linearly with T at low T , while the quantum component decreases monotonically with T starting from the zero-point fluctuations. Most remarkably, in the example at hand quantum fluctuations are found to dominate the total fluctuations, and they lead to a *monotonically* decreasing behavior of $\langle \delta^2 \hat{N}_s \rangle$, in complete contradiction with the classical expectation that fluctuations should grow with temperature at low T .

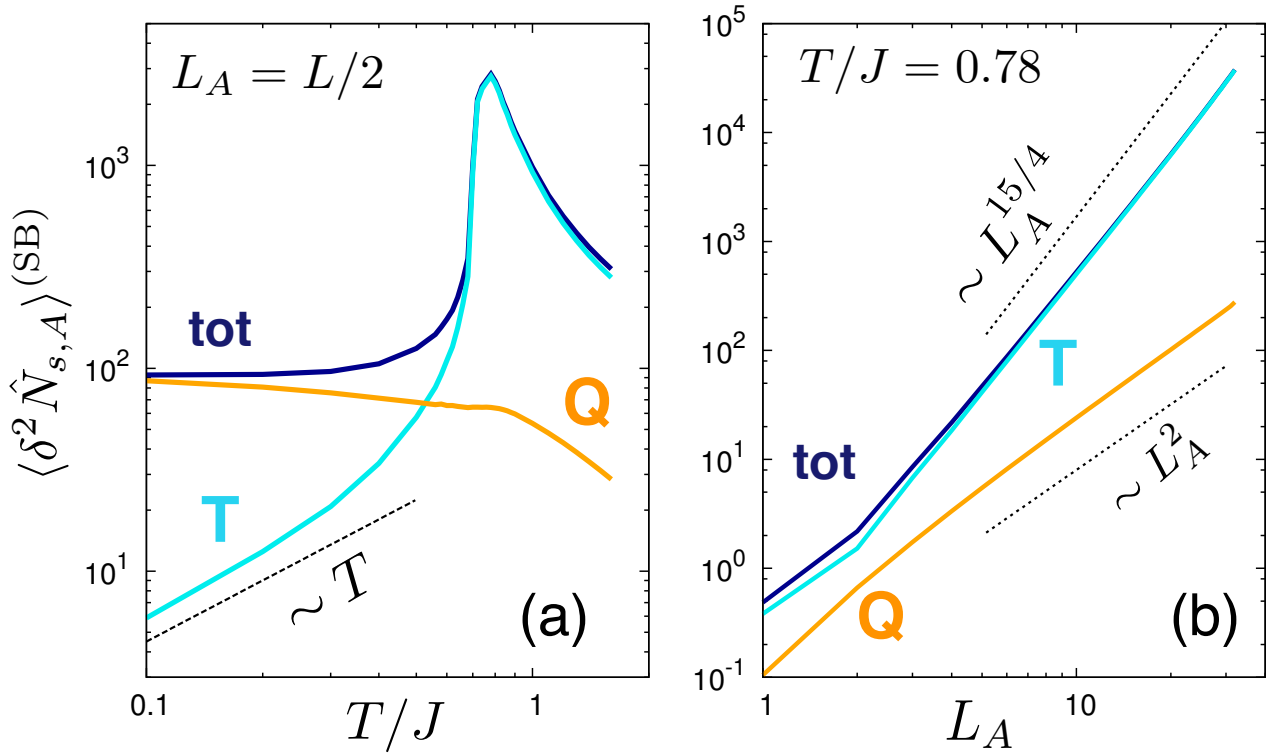


Figure 17.2: **Critical thermal fluctuations, non-critical quantum fluctuations.** (a) Temperature dependence of the order parameter fluctuations at the Ising transition of $2d$ hard-core bosons with nearest neighbor repulsion $V = 2.1J$; the sharp peak marks the transition at $T_c \approx 0.78J$; (b) Scaling of fluctuations close to the critical temperature: the total and thermal fluctuations are found to scale as $L_A^{d+\gamma/\nu}$ with $\gamma = 7/4$ and $\nu = 1$ for the $2d$ Ising universality class.

17.5 Quantum variance does not go critical at a thermal transition.

Having shown that QV generically obeys a volume law for extensive non-conserved observables, one can naturally ask what is the fate of QV at a thermal critical point, at which thermal fluctuations of the order parameter become *super*-extensive. If the QV only captures the quantum mechanical part of fluctuations of the order parameter, one would naturally expect that its scaling is *not* modified at a thermal transition, given that the latter is purely driven by thermal fluctuations. To answer to this question, we consider a quantum many-body model exhibiting a thermal phase transition with an order parameter not commuting with the Hamiltonian; this is readily obtained by generalizing the hardcore-boson Hamiltonian of Eq. (17.13) to include a nearest-neighbor repulsion V :

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \text{h.c.}) + V \sum_{\langle ij \rangle} \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_j - \frac{1}{2} \right). \quad (17.16)$$

When $V > 2J$ the model has an Ising phase transition at finite temperature, marking the onset of a checkerboard density wave, with an order parameter given by the staggered density \hat{N}_s . Hence, as in the previous section, it is meaningful to investigate the temperature and size scaling of the fluctuations of the local staggered density \hat{N}_s . In particular, to mimic the behavior in the thermodynamic limit (in which $\langle \hat{N}_{s,A} \rangle \neq 0$), we focus on the fluctuations around a finite-size estimate of the order parameter in the symmetry-breaking (SB) phase, given by $\langle |\hat{N}_{s,A}| \rangle$:

$$\langle \delta^2 N_{s,A} \rangle^{(\text{SB})} = \langle \hat{N}_{s,A}^2 \rangle - \langle |\hat{N}_{s,A}| \rangle^2. \quad (17.17)$$

Fig. 17.2(a) shows that the total and thermal fluctuations of the order parameter exhibit a sharp peak at the Ising transition temperature, while the QV is very smooth at the transition. In particular, the QV is a monotonically decreasing function of temperature, dramatically showing that quantum fluctuations *cannot* grow under incoherent thermal mixing of the density matrix, even when such fluctuations become singular at a critical point. The monotonicity with temperature is in fact a different condition – required by physical arguments – than the convexity discussed in Sec 17.3, which only accounts for the evolution under linear mixing. A closeup on the scaling close to the critical point (Fig. 17.2(b)) finds that the total and thermal fluctuations exhibit the critical super-extensive scaling $L_A^{d+\gamma/\nu}$, where γ and ν are the critical exponents for the susceptibility and correlation length. On the other hand the quantum variance maintains a volume-law scaling as in the non-critical regime. Therefore a critical point marks a net separation of scales between thermal and quantum fluctuations of the order parameter, the latter being essentially irrelevant in the thermodynamic limit. This observation substantiates the common wisdom that quantum mechanics is irrelevant for the universal properties at thermal critical points, and it shows that order parameters close to a critical point have the nature of emergent classical observables.

17.6 Quantum variance of bipartite fluctuations and area law.

The scaling properties of the QV change drastically when considering the case of bipartite fluctuations of an otherwise globally conserved quantity, such as the particle number \hat{N} . Such fluctuations have been the subject of several recent studies in view of their relationship to entanglement in the case of pure states [? ? ? ?], as well as at finite temperature, for which a suggestion of how to extract the quantum contribution to fluctuations has been proposed in Ref. [?]. In the case of mixed states, $[\hat{N}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ implies automatically that $\langle \delta^2 \hat{N} \rangle_Q = 0$. Taking

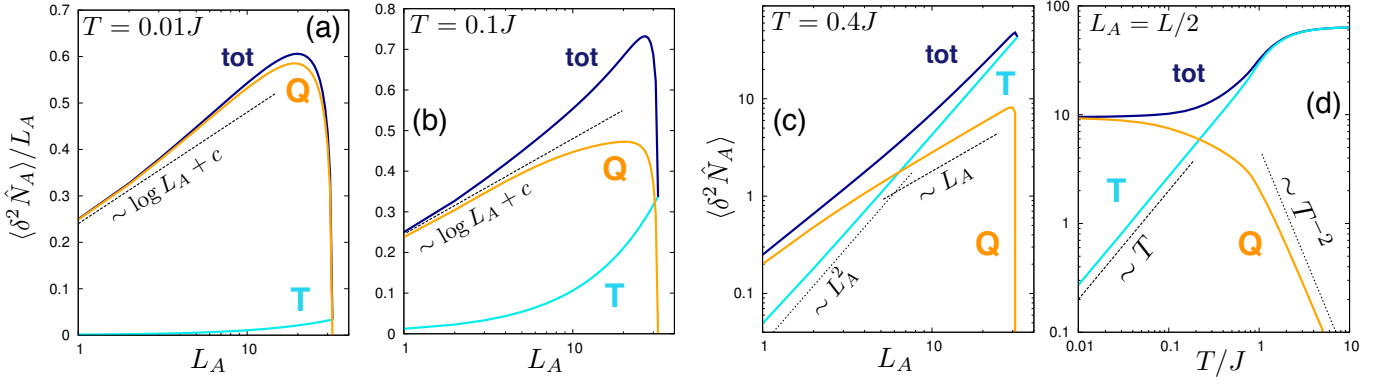


Figure 17.3: **Bipartite fluctuations.** (a)-(c) Scaling of local particle-number fluctuations in a subsystem A for square-lattice hardcore bosons ($V = 0$) at three different temperatures ($T/J = 0.01, 0.1$ and 0.4). Other parameters as in Fig. 17.1(c); (d) Temperature dependence of the particle-number fluctuations; same parameters as in Fig. 17.1(d).

then *any* bipartition of the system into A and B subsystems, imaginary-time fluctuations of the local particle numbers N_A and N_B are perfectly anticorrelated, so that the QV in each subsystem is the same, $\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q = \langle \delta^2 \hat{N}_B \rangle_Q$. Perfect correlation in the quantum uncertainties of N_A and N_B suggests that the QV captures genuine quantum correlations between A and B whenever applied to bipartite fluctuations of globally conserved quantities. Remarkably Fig. 17.3(a-c) shows that the QV of bipartite fluctuations scales like the *boundary* between A and B , thereby obeying a so-called area law

$$\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q \sim L_A^{d-1}, \quad (17.18)$$

namely the extensive (volume-law) part of bipartite fluctuations is entirely of incoherent origin. This strongly suggests that the QV captures the fluctuations associated with coherent particle exchanges at the boundary between A and B . For the hardcore-boson problem at hand, such fluctuations obey a logarithmically corrected area law at $T = 0$ (when all fluctuations are quantum) [? ?],

$$\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q \sim L_A^{d-1} \log L_A \quad (17.19)$$

turning then into an area-law scaling at finite T . Nonetheless a logarithmic violation can still be observed at sufficiently low temperature and for small sizes of the A region – namely smaller than the thermal correlation length ξ for density fluctuations². Interestingly, the area-law scaling of the QV (either straight or logarithmically violated) is found to dominate the scaling of total fluctuations at sufficiently small sizes L_A of the subsystem A , as shown in Fig. 17.3(a-c). This makes the (logarithmically violated) area law of bipartite quantum fluctuations observable under experimentally realistic conditions.

17.7 Quantum variance provides quantum correlations.

The area-law scaling of bipartite QV of mixed states suggests a link to the similar scaling exhibited by entanglement entropy in ground states of local Hamiltonians [?]. Yet measures of entanglement at finite temperature (such as the negativity [?]) do not admit a simple physical

²Indeed for hardcore bosons the density-density correlation function at finite temperature exhibits a finite correlation length, $\langle \delta n_i \delta n_j \rangle \sim \exp(-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/\xi)$, even though the phase correlations exhibit a critical behavior below the Kosterlitz-Thouless temperature. This was already noticed in Ref. [?].

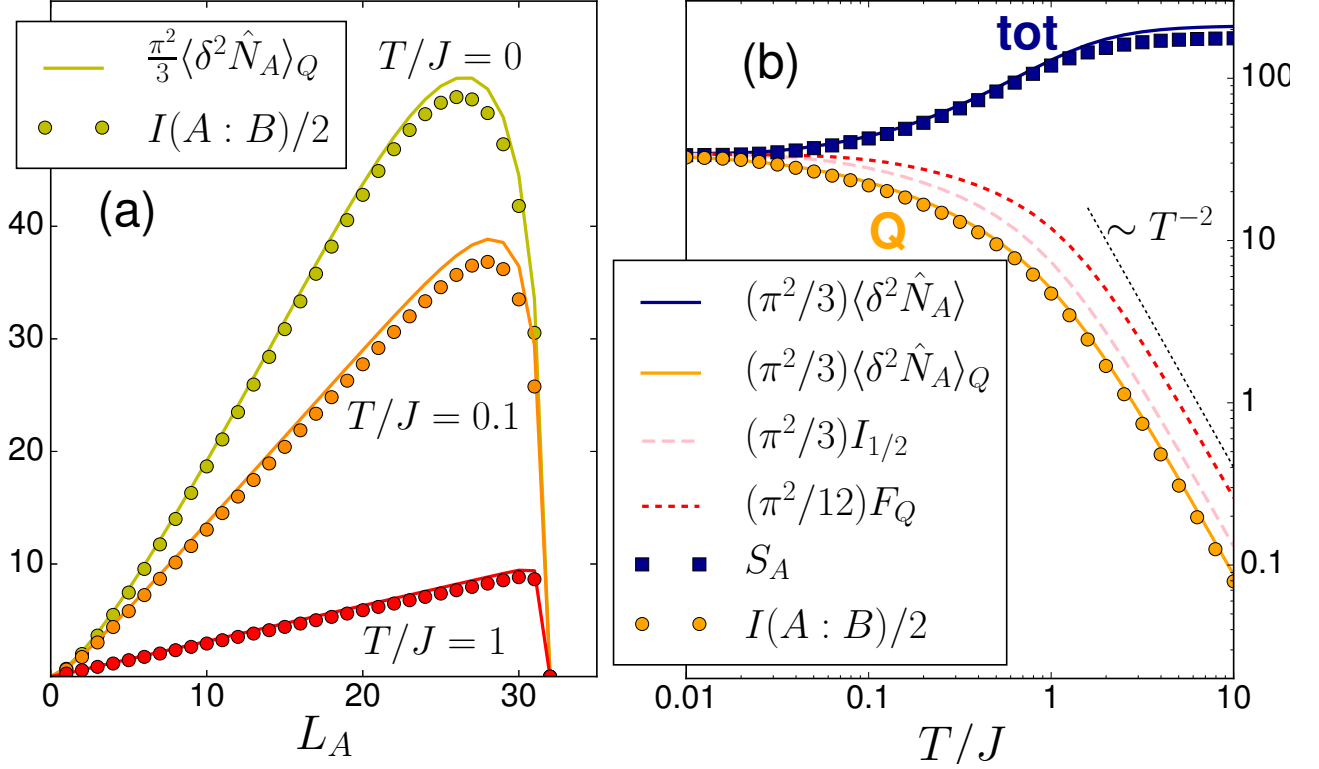


Figure 17.4: **Quantum correlations vs. quantum mutual information.** (a) Scaling of the quantum variance of bipartite particle-number fluctuations and of the quantum mutual information in a system of free fermions on a $L \times L$ square lattice ($L = 32$) at half filling for three different temperatures (J is the hopping amplitude); (b) temperature dependence of the same two quantities, along with the total entropy S_A , the total fluctuations $\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle$, the Wigner-Yanase skew information $I_{1/2}(\hat{N}_A, \hat{\rho})$, and the quantum Fisher information $F_Q(\hat{N}_A; \hat{\rho})$, for an A region with linear size $L_A = L/2$. The T^{-2} decay of the mutual information at high temperature has been proven rigorously for free fermions in Ref. [?], and it is proven for the quantum variance, skew information and quantum Fisher information in App. 17.14.

interpretation in terms of entropy of quantum fluctuations (but see below for further discussion on QV and entanglement). As already pointed out, QV is rather connected to quantum correlations, a more general concept than entanglement. The existence of such correlations is captured by the quantum discord [?], given by the difference between the quantum mutual information, $I(A : B) = S_A + S_B - S_{AB}$ (or the entropy sub-extensivity due to correlations between A and B) and the classical mutual information $J(A : B)$ (or the maximum amount of information gained on A by performing measurements on B). Here $S_{A(B)} = -\text{Tr} \hat{\rho}_{A(B)} \log \hat{\rho}_{A(B)}$ is the entropy of the reduced density matrix of subsystem $A(B)$, and S_{AB} is the total entropy. The operation of maximization implicit in the definition of quantum discord makes it generically non-computable when A and B are extended subsystems of a quantum many-body system.

On the other hand, in some special systems the existence of quantum correlations is witnessed by more accessible quantities. Indeed we argue that, in the case of an *ideal* gas, any form of correlation stems from the quantum statistics, while it is trivially absent in the classical limit. The existence of correlations between A and B is generically captured by the quantum mutual information, whose nonzero value is then a direct proof of quantum correlations existing in the system.³ In the case of an ideal lattice gas the existence of correlations between A and B stems physically from the coherent exchange of particles at the A - B boundary, and hence it is tightly linked to the quantum fluctuations of particle numbers. In the following we shall particularly focus on the case of a free Fermi gas on a lattice at half filling, for which the mutual information and QV of particle-number fluctuations can be easily calculated via exact diagonalization [?].

The quantum mutual information of free fermions exhibits an area law at finite temperature, as recently proven in Ref. [? ?]. Fig. 17.4 shows that the area law of mutual information and of QV of particle-number fluctuations are related, as the prefactors of the thermal area laws, $I(A : B)/2 \approx a_I(T)L_A$ and $\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q \approx a_N(T)L_A$, are proportional at all T , $a_I \approx \frac{\pi^2}{3} a_N$. Remarkably, this is the same relationship holding between the particle-number variance and the entanglement entropy for free fermions at $T = 0$ (Fig. 17.4(a)) [? ?], and between total entropy and variance in a degenerate Fermi gas (Fig. 17.4(b)). Hence the particle-number QV provides experimental access to the mutual information of free fermions at finite T , as much as the total variance of particle-number fluctuations gives access to the entanglement entropy in the ground state. Moreover, as shown in Fig. 17.4(b) the QV provides a meaningful lower bound to both the Wigner-Yanase skew information and to the quantum Fisher information; in particular at high temperatures we find that $\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q \approx \frac{2}{3} I_{1/2}(\hat{N}_A, \hat{\rho})$ and $\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q \approx \frac{1}{3} (F_Q(\hat{N}_A; \hat{\rho})/4)$.

17.8 Conclusions and outlook.

In conclusion, we have introduced the quantum variance of generic observables, generalizing the concept of quantum Heisenberg uncertainty to the case of mixed states – and acting as the “thermal de Broglie wavelength” in the space of eigenvalues of arbitrary observables. In the case of bipartite fluctuations, the QV expresses the quantum correlations among the two subsystems in arbitrary mixed states. The quantum uncertainty may dominate the fluctuations in quantum many-body systems, leading to a completely non-classical behavior (fluctuations decreasing with temperature, scaling of fluctuations obeying area laws or logarithmically violated area laws, etc.).

Owing to its definition in terms of fully measurable quantities (fluctuations and response

³Even though the quantum discord of an ideal gas is not equal to the mutual information [?], the vanishing of quantum discord in the classical limit is the trivial result of both $I(A : B)$ and $J(A : B)$ being vanishing quantities. Hence the existence of a finite $I(A : B)$ and $J(A : B)$ is already a proof of quantum correlations, and the further aspect that they are not identical – leading to quantum discord – is a generic feature of quantum systems.

function, see Eq. (17.4)), the QV is readily accessible to state-of-the-art experiments. All the requirements for the measurement of the QV, and in particular of its scaling in a bipartite setting, are met by trapped-ion experiments [?] as well as quantum-gas microscope experiments [?], enabling access to local degrees of freedom. As an example, in microscopy experiments recent progress [?] has demonstrated the ability to resolve different single-site occupation numbers ($n = 0, \dots, 3$) in an optical lattice, providing access to local fluctuations. Moreover the local response function can be probed by an increase of the local uniform (or staggered) chemical potential in a given region A of the system, making use of holographic masks [?] (see App. 17.15 for further details). Hence the total and thermal fluctuations are independently accessible, as well as the scaling of their difference (the QV) with subsystem size (Figs. 17.1(c-d), 17.3 and 17.4).

At the theory level, the QV represents a most accessible way to assess quantum correlations, entanglement, and the metrological use of quantum many-body states. As proposed in Refs. [?], the minimal skew information and quantum Fisher information associated with local observables in a subsystem A are both discord-type measures of quantum correlations, and the latter dictates the minimal precision on the estimation of the parameter of an arbitrary local unitary operation; the QV offers a natural measurable lower bound to both quantities (see App. 17.12 and 17.13 for further discussion). Moreover both the skew information [?] and the quantum Fisher information [?] of collective spin variables witness entanglement among k qubits when exceeding a k -dependent bound: a similar violation of the bound by the QV is therefore an even stronger witness – see App. 17.16 for a detailed discussion.

The QV lends itself to analytical as well as to large-scale numerical simulations based *e.g.* on quantum Monte Carlo – as shown in the present work. Hence its study can be readily extended to generic quantum many-body systems at equilibrium, including interacting fermions, quantum spin models, etc. as well as to non-equilibrium mixed states. While we have mostly focused our attention on bipartite correlations, an extension of our study to multipartite correlations can also be readily achieved by introducing the concept of quantum covariance, as we will further develop in future work. This opens the perspective of a complete characterization of quantum correlations in extended quantum systems, based on experimentally accessible quantities.

17.9 Operator approach to coherent vs. incoherent fluctuations in mixed states: area law of quantum coherence

As pointed out in the main text, in the case of mixed states described by a density matrix $\hat{\rho}$ there is a fundamental distinction between thermal/incoherent fluctuations and quantum/coherent fluctuations of any observable which does not commute with $\hat{\rho}$. This distinction is best captured via the path-integral representation of the density matrix, as discussed in the following App. 17.10. Here we give an alternative picture solely based on the operator picture of the density matrix. In the following we shall choose, as observable of interest, the particle number \hat{N}_A in the region A of the system, capturing the quantum correlations between the region in question and its complement.

When leaving the ground state of local Hamiltonians, one expects to encounter states with the generic feature of possessing volume-law entanglement, and volume-law fluctuations of particle number [?]. Hence one may naively suspect that, when dealing with excited states, the quantum coherent fluctuations are stronger, and not weaker, than in the ground state. This is indeed true, but it is only meaningful provided that, in an experiment, one is able to deterministically prepare one and the same excited state, in order to probe its fluctuation properties over many shots of the experiment itself. This last requirement is generally prohibitive, as experiments on excited states generally probe the properties of *ensembles* (every shot of the experiment reproducing a different state). Whence the relevance of the concept of density ma-

trices $\hat{\rho}$, not only in the context of systems coupled to dissipative baths, but also in the context of systems evolving uniquely under their own Hamiltonian dynamics.

In the latter case, let $|\Psi(t)\rangle$ be the instantaneous state of the system, and let Θ be a time window sufficiently long for time averages to equal ensemble averages (namely averages over repeated shots of the experiment). Then the density matrix describing the ensemble is well described by

$$\hat{\rho} \approx \frac{1}{\Theta} \int_0^\Theta dt |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \quad (17.20)$$

Despite the fact that each $|\Psi(t)\rangle$ state may exhibit volume-law entanglement and coherent fluctuations, the ensemble properties are quite different. Indeed, we can write $|\Psi(t)\rangle$ as

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{N_A} \sum_{\{n_i\}_{N_A}} c_{\{n_i\}, N_A}(t) |\{n_i\}, N_A\rangle \quad (17.21)$$

where $|\{n_i\}, N_A\rangle$ is a Fock state $\{n_i\}$ characterized by having N_A particle in A . After time/ensemble averaging, the density matrix takes the form $\hat{\rho} = \hat{\rho}_D + \hat{\rho}_{OD}$ where

$$\hat{\rho}_D = \sum_{N_A} \sum_{\{n_i\}_{N_A}} \sum_{\{n'_i\}_{N_A}} \rho_{\{n_i\}, N_A; \{n'_i\}, N_A} |\{n_i\}, N_A\rangle \langle \{n'_i\}, N_A| \quad (17.22)$$

is the diagonal part of the density matrix (in terms of the quantum number N_A), and

$$\hat{\rho}_{OD} = \sum_{N_A \neq N'_A} \sum_{\{n_i\}_{N_A}} \sum_{\{n'_i\}_{N'_A}} \rho_{\{n_i\}, N_A; \{n'_i\}, N'_A} |\{n_i\}, N_A\rangle \langle \{n'_i\}, N'_A| \quad (17.23)$$

is the off-diagonal part; here

$$\rho_{\{n_i\}, N_A; \{n'_i\}, N'_A} = \frac{1}{\Theta} \int_0^\Theta dt c_{\{n_i\}, N_A}(t) c_{\{n'_i\}, N'_A}^*(t) . \quad (17.24)$$

It is evident that $[\hat{\rho}_D, \hat{N}_A] = 0$ while $[\hat{\rho}_{OD}, \hat{N}_A] \neq 0$. Therefore the off-diagonal part, containing the coherence between configurations differing by the number of particles in A , is the part of $\hat{\rho}$ responsible for the quantum fluctuations of \hat{N}_A , captured by the quantum variance. The total, extensive fluctuations of N_A are given by the diagonal part, $\langle \delta^2 N_A \rangle = \langle \hat{N}_A^2 \rangle_{\hat{\rho}_D} - \langle \hat{N}_A \rangle_{\hat{\rho}_D}^2$; as a consequence the quantum coherent contribution, which stems from the off-diagonal terms, remains hidden in this calculation, and it cannot be formally separated from the incoherent part. The proper separation between incoherent and coherent fluctuations is achieved within the path-integral formalism, as described in the main text and below in App. 17.10. Nonetheless the operator form of the density matrix provides further insight into the physical origin and spatial structure of coherent quantum fluctuations, as discussed below.

The instantaneous coherence $c_{\{n_i\}, N_A}(t) c_{\{n'_i\}, N'_A}^*(t)$ connects states with $N_A - N'_A \sim \mathcal{O}(L_A^{d/2})$, as it is typical of excited states in Hilbert space. But the time/ensemble-averaged coherence $\rho_{\{n_i\}, N_A; \{n'_i\}, N'_A}$ in Eq. (17.24) has a much shorter range away from the diagonal. Indeed, assuming that $\{n_i\}$ and $\{n'_i\}$ are connected by moving m particles from sites j_1, \dots, j_m to sites i_1, \dots, i_m , one has

$$\rho_{\{n_i\}, N_A; \{n'_i\}, N'_A} = \text{Tr} \left[\hat{\rho} b_{i_1}^\dagger \cdots b_{i_m}^\dagger b_{j_1} \cdots b_{j_m} \mid \{n_i\}, N_A \rangle \langle \{n'_i\}, N_A \mid \right] \quad (17.25)$$

where b_i, b_i^\dagger are the destruction/creation operators of the particles of interest (of arbitrary statistics). Hence, as one may have expected, the magnitude of $\rho_{\{n_i\}, N_A; \{n'_i\}, N'_A}$ is controlled by that of the $2m$ -point correlation function, namely

$$|\rho_{\{n_i\}, N_A; \{n'_i\}, N'_A}| \leq |\langle b_{j_1}^\dagger \cdots b_{j_m}^\dagger b_{j_1} \cdots b_{j_m} \rangle|. \quad (17.26)$$

In general such a correlation function will exhibit a fast decay with the (minimum) distances between pairs of points i_p and j_q . This in turn implies that, in order to have a sizable coherence (Eq. (17.24)), two configurations $\{n_i\}$ and $\{n'_i\}$ should differ by particle moves which, when occurring between A and its complement B , are localized (algebraically or exponentially) around the boundary between the two regions. This observation generally excludes a volume law for the coherent part of particle-number fluctuations, and it leaves an area law (up to multiplicative logarithmic corrections) as the only possibility.

17.10 Path-integral representation of a generic density matrix and of the quantum variance

In this section we derive the path-integral representation for a generic density matrix, generalizing the discussion of the main text to arbitrary mixed states beyond thermal equilibrium. Moreover we derive the path-integral expression for the quantum variance.

Any (semi-positive definite) density matrix $\hat{\rho}$ can always be cast in the form

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}}{\text{Tr}[e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}]}, \quad (17.27)$$

namely in the form of a thermal density matrix with (effective) temperature $k_B T = 1/\beta$. For generic (non-thermal) mixed states the specific value of β is completely irrelevant, and one could set in the following $\beta = 1$ in some convenient energy units; yet, in order to make contact with the case of thermal equilibrium, hereafter we will keep the inverse temperature β explicitly indicated. We consider a generic observable \hat{O} which is diagonalized by a basis $|O_\alpha, \{\lambda\}_\alpha\rangle$, where O_α is the eigenvalue for \hat{O} , and $\{\lambda\}_\alpha$ are the other quantum numbers possibly labeling the state. The partition function $\mathcal{Z} = \text{Tr}[\exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})]$ can be cast in the form of the trace of the product of infinitesimal propagators between successive states $|O_{\alpha_i}, \{\lambda\}_{\alpha_i}\rangle$, namely

$$\mathcal{Z} = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{\{\alpha_i\}} \prod_{i=1}^{M-1} \langle O_{\alpha_i}, \{\lambda\}_{\alpha_i} | e^{-\frac{\beta}{M} \hat{\mathcal{H}}} | O_{\alpha_{i+1}}, \{\lambda\}_{\alpha_{i+1}} \rangle \quad (17.28)$$

where $\sum_{\{\alpha_i\}}$ is a short-hand notation for the multiple sum over the quantum numbers $(O_{\alpha_i}, \{\lambda\}_{\alpha_i})$ labeling each state in the propagation sequence $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_M \equiv \alpha_1$. Summing over the λ quantum numbers, and taking the limit $M \rightarrow \infty$, one obtains formally the path-integral expression

$$\mathcal{Z} = \int_{O(0) \equiv O(\beta)} \mathcal{D}[O(\tau)] e^{-S[O(\tau), \partial_\tau O(\tau), \dots]} \quad (17.29)$$

where $O(\tau)$ is the continuum limit of the sequence $\{O_{\alpha_1}, O_{\alpha_2}, \dots, O_{\alpha_M}\}$, and

$$e^{-S} = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{\{\lambda_{\alpha_i}\}} \prod_{i=1}^{M-1} \langle O_{\alpha_i}, \{\lambda\}_{\alpha_i} | e^{-\frac{\beta}{M} \hat{\mathcal{H}}} | O_{\alpha_{i+1}}, \{\lambda\}_{\alpha_{i+1}} \rangle. \quad (17.30)$$

Once the density matrix has been given the thermal form Eq. (17.27), it is straightforward to deform the density matrix upon application of a field h coupling to \hat{O} ,

$$\hat{\rho}(h) = \frac{e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - h\hat{O})}}{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - h\hat{O})}]}, \quad (17.31)$$

which allows one to define the response function in the standard way as $\chi_O = \frac{\partial}{\partial h} \text{Tr}[\hat{\rho}(h)\hat{O}] \Big|_{h=0}$.

The path-integral representation of response function leads to the expression

$$\begin{aligned}\chi_O &= \left\langle \int d\tau \delta O(\tau) \delta O(0) \right\rangle_S \\ &= \frac{1}{\beta} \left\langle \int d\tau \int d\tau' \delta O(\tau) \delta O(\tau') \right\rangle_S\end{aligned}\quad (17.32)$$

where $\delta O(\tau) = O(\tau) - \langle O \rangle_S$, and we have invoked the periodicity of $O(\tau)$ paths in imaginary time. Here

$$\langle \dots \rangle_S = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int_{O(0) \equiv O(\beta)} \mathcal{D}[O(\tau)] (\dots) e^{-S} \quad (17.33)$$

is the average over the space of $O(\tau)$ paths. Moreover one has that

$$\langle \delta^2 O \rangle = \frac{1}{\beta} \left\langle \int d\tau (\delta O(\tau))^2 \right\rangle_S. \quad (17.34)$$

Combining Eqs. (17.32) and (17.34), one readily obtains the path-integral expression for the quantum variance

$$\begin{aligned}\langle \delta^2 O \rangle_Q &= \langle \delta^2 O \rangle - \chi_O k_B T \\ &= \frac{1}{\beta} \left\langle \int d\tau \left[O(\tau) - \frac{1}{\beta} \int d\tau' O(\tau') \right]^2 \right\rangle_S\end{aligned}\quad (17.35)$$

showing that it represents the average variance of fluctuations of $O(\tau)$ paths around their centroid.

We end this section by noticing that the deformation of the density matrix to Eq. 17.31 is a physically meaningful operation for thermal states - as it can be obtained by turning on the perturbation $-\hbar\hat{O}$ in the Hamiltonian within an isothermal setting - see App. 17.15 for further discussion in the specific case of quantum gas microscopes. Hence in the case of thermal states, neither the measurement nor the calculation of the quantum variance requires the full knowledge of the density matrix. On the other hand, for generic mixed states the deformation of $\hat{\rho}$ should be thought of in general as a mathematical operation. Devising physical (namely, experimentally realistic) operations that can lead to the deformation of a generic density matrix as in Eq. 17.31 is an outstanding task, which we postpone to future investigations.

17.11 Quantum variance as generalized de Broglie wavelength

17.11.1 Quantum variance for simple models

The analytical calculation of the quantum variance of the position operator is illuminating in the case of simple models, namely the free particle and the harmonic oscillator in one dimension. It is convenient to start from the second one, and to obtain the free-particle result as a limiting case. In the case of the harmonic oscillator, the position fluctuations are readily obtained from the diagonal part of the density matrix $\langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle / \mathcal{Z}$ [?], while the susceptibility $\chi_x = \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial h}$ to a displacement of the harmonic oscillator potential $\frac{1}{2}m\omega x^2 \rightarrow \frac{1}{2}m\omega x^2 - hx$ is readily obtained by the linear displacement of the average, $\langle x \rangle \rightarrow \langle x \rangle - h/(m\omega^2)$. As a result the quantum variance takes the form

$$\langle \delta^2 x \rangle_Q = \frac{a_{\text{ho}}^2}{2} \left[\frac{\sinh(1/\theta)}{\cosh(1/\theta) - 1} - 2\theta \right] \quad (\text{harm. osc.}) \quad (17.36)$$

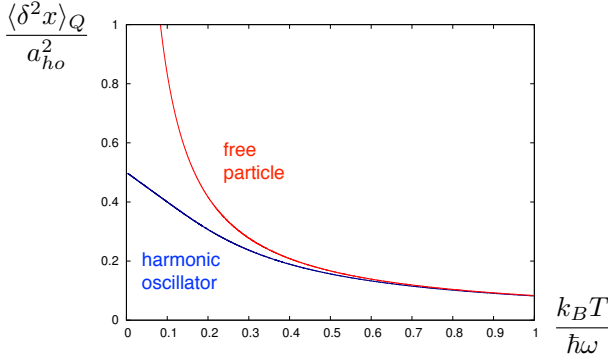


Figure 17.5: **Quantum variance of the position of a 1d particle.** The plot shows the quantum variance of the position for a one-dimensional harmonic oscillator, as well as for a free particle as a function of temperature. In the case of the free particle the frequency ω is to be understood as an arbitrary constant setting the energy scale $\hbar\omega$ and length scale a_{ho} .

where $a_{ho} = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ and $\theta = k_B T / \hbar \omega$. In the limit $T \rightarrow 0$ one recovers Heisenberg's uncertainty in the ground state, $\langle \delta^2 x \rangle_0 = a_{ho}^2/2$.

On the other hand, taking the limit $\omega \rightarrow 0$ gives the result for the free particle, which, after careful expansion of Eq. (17.36), gives

$$\langle \delta^2 x \rangle_Q = \frac{1}{24\pi} \lambda_{dB}^2(T) \quad (\text{free particle}) \quad (17.37)$$

where $\lambda_{dB}(T) = \sqrt{2\pi\hbar^2/(mk_B T)}$ is the thermal de Broglie wavelength. The link between the quantum variance and the de Broglie wavelength shows that the quantum variance of the particle position gives the characteristic (squared) amplitude of coherent quantum fluctuations at finite temperature [?]. In fact one may interpret the quantum variance of the position as a generalization of the thermal de Broglie wavelength to the case of a particle in an external potential, such as the case of the harmonic oscillator. In Fig. 17.5 the quantum variance of the position for the two models discussed above shows the expected monotonic decrease with temperature, due to the shrinking of the imaginary-time “duration” of coherent quantum fluctuations.

17.11.2 Imaginary-time fluctuations as quantum coherent fluctuations

As seen in App. 17.10, the quantum variance of a generic observable gives the characteristic amplitude of fluctuations for such an observable along the imaginary-time dynamics of the system. On the other hand, in App. 17.11 we have established a direct relationship between the quantum variance of a free particle and the thermal de Broglie wavelength, namely the characteristic width of wavepackets at finite temperature. In this section we bring the two observations together to argue that the quantum variance generalizes the concept of thermal de Broglie wavelength, or finite-temperature coherence length, to the space of eigenvalues of *any* observable (not only the position operator) and for *any* quantum system.

The relationship between the quantum variance and the de Broglie wavelength is very natural when considering the fundamental link existing between the wavefunction of a pure state and the statistics of Feynman paths. Thanks to the parametrization in Eq. (17.27), a pure state can always be thought of as the $\beta \rightarrow \infty$ limit of a mixed-state density matrix, and hence represented in the form of a path integral. In the case of a one-dimensional quantum

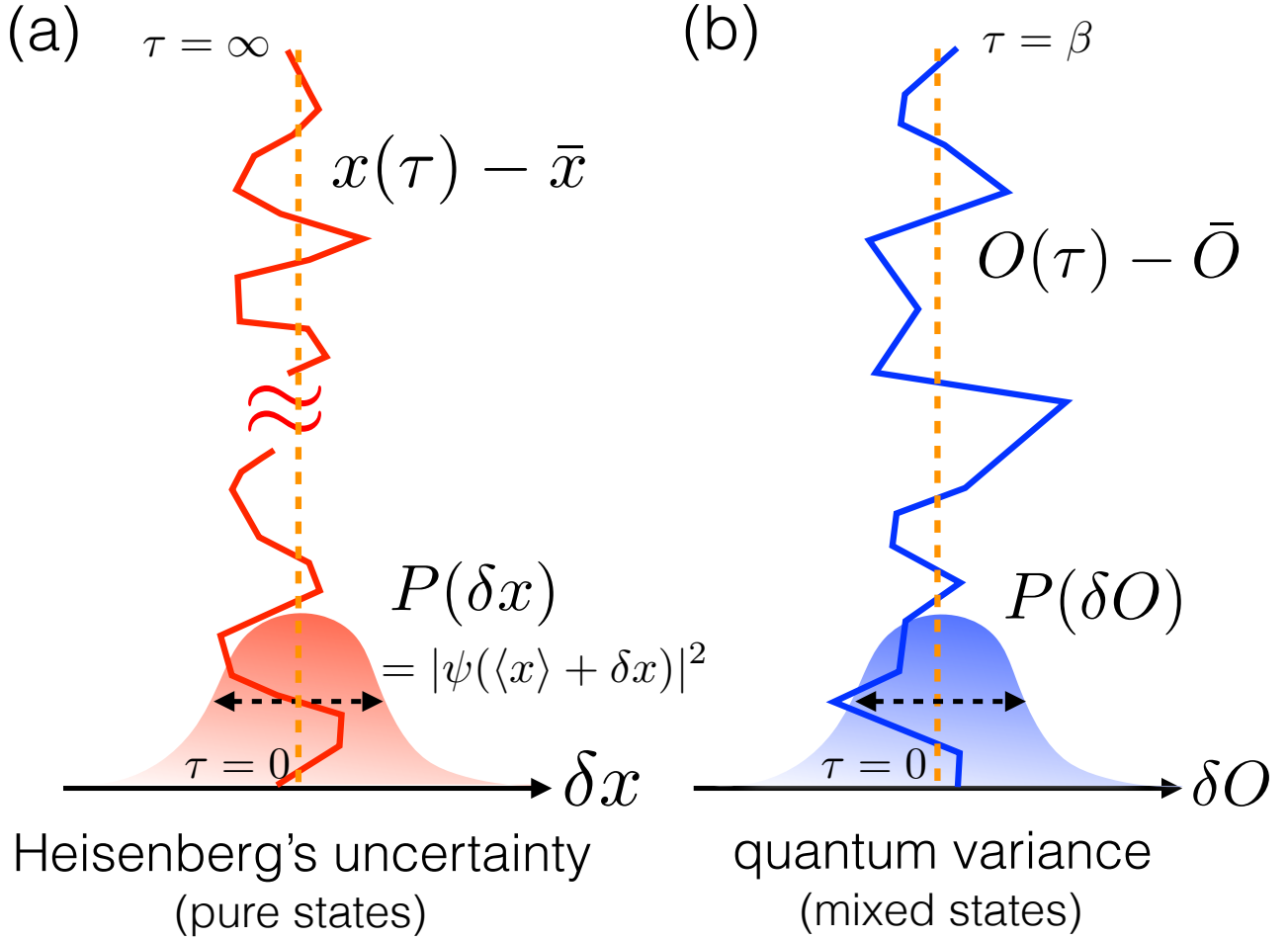


Figure 17.6: **Quantum variance as Heisenberg's uncertainty for mixed states.** (a) The path-integral representation of the partition function for a single one-dimensional particle at $T \rightarrow 0$ (or for a generic pure state) is a sum over infinitely long paths in imaginary time $x(\tau)$; on average each path visits the region $[x, x + dx]$ a number of times proportional to $|\psi(x)|^2 dx$, where $\psi(x)$ is the ground-state (or, more generally, the pure-state) wavefunction. The width of the wave function's square modulus gives the Heisenberg's uncertainty, namely the amplitude of coherent quantum fluctuations; (b) In the case of mixed states of a generic many-body system, the probability distribution for the coherent quantum fluctuations of a generic observable \hat{O} is instead given by the probability that the (imaginary-time) instantaneous value of $O(\tau)$ differs from the path centroid $\bar{O} = \beta^{-1} \int d\tau O(\tau)$.

particle, the path integral for a pure state with wavefunction $\psi(x)$ runs over infinitely long trajectories $x(\tau)$, whose fluctuations δx around the average position $\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$ obey the statistics dictated by the modulus of the square function [?], namely, taking an arbitrary time τ :

$$\begin{aligned} P(\delta x) &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}[x(\tau)] \delta(x(\tau) - \langle \hat{x} \rangle - \delta x) e^{-S} \\ &= |\psi(\langle x \rangle + \delta x)|^2 . \end{aligned} \quad (17.38)$$

In particular any infinite trajectory contributing to the path integral has the same statistical properties as the whole ensemble, so that the centroid of the path $\bar{x} = \bar{x}[x(\tau)]$ must correspond to the expectation value $\langle \hat{x} \rangle$. Hence, as depicted in Fig. 17.6(a), the imaginary-time fluctuations span the support of the wavefunction, and the (squared) amplitude of fluctuations of the path $x(\tau)$ around its centroid \bar{x} – the quantum variance – is the same as the (squared) width of the wavefunction, giving Heisenberg’s uncertainty. In the case of free particles, the thermal de Broglie wavelength generalizes Heisenberg’s uncertainty on the position to the case of thermal states. Therefore, it is not too surprising that the quantum variance follows the de Broglie wavelength at finite temperature, as shown in App. 17.11.

The concept of quantum variance extends all the above considerations to generic observables and generic quantum systems. The quantum variance provides the width of the probability distribution for the fluctuations of generic observables around the path centroid (see Fig. 17.6(b)), namely

$$P(\delta O) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}[O(\tau)] \delta(O(\tau) - \bar{O} - \delta O) e^{-S} \quad (17.39)$$

where $\bar{O} = \bar{O}[O(\tau)]$ is the centroid. As seen in the case of the position of a one-dimensional particle, for a pure state the width of $P(\delta O)$ expresses the Heisenberg’s uncertainty on the observable \hat{O} . When applied to a mixed state, the quantum variance generalizes therefore Heisenberg’s uncertainty, expressing the (squared) amplitude of coherent quantum fluctuations of the observable.

17.12 Quantum variance vs. skew information and local quantum uncertainty

In this section we shall discuss the relationship between the quantum variance and the skew information [?], the latter being a widespread concept in quantum information to quantify the quantum uncertainty of an observable. In particular we shall show that the quantum variance provides a tight lower bound, based on physical observables, to the otherwise abstract skew information. Moreover the discussion of the relationship between the skew information and the quantum variance allows one to conclude on the convexity of the latter. Finally we will see how the quantum variance relates to the recently introduced “local quantum uncertainty” [?], which is advocated as a measure of quantum correlations.

17.12.1 Wigner, Dyson, Lieb and the convexity of quantum variance

The Dyson-Wigner-Yanase (DWY) *skew information* [? ?]

$$I_\alpha(\hat{O}, \hat{\rho}) = -\frac{1}{2} \text{Tr}\{[\hat{O}, \hat{\rho}^\alpha][\hat{O}, \hat{\rho}^{1-\alpha}]\} \quad (0 \leq \alpha \leq 1) \quad (17.40)$$

probes the quantum uncertainty of the observable \hat{O} due to its non-commutativity with the density matrix of the system. Replacing \hat{O} by $\delta\hat{O} = \hat{O} - \langle \hat{O} \rangle$ does not alter the above definition.

Writing again the generic density matrix $\hat{\rho}$ as a thermal state, $\hat{\rho} = e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}/\mathcal{Z}$ (with an arbitrary effective inverse temperature β), one can immediately show that the DWY skew information can be expressed as an imaginary-time correlation function

$$I_\alpha(O, \rho) = \langle \delta^2 \hat{O} \rangle - \langle \delta \hat{O}(\tau = \alpha\beta) \delta \hat{O}(0) \rangle . \quad (17.41)$$

Hence, clearly, the DWY skew information I_α expresses the amount by which the imaginary-time correlation function $\langle \delta \hat{O}(\tau) \delta \hat{O}(0) \rangle$ at a time $\tau = \alpha\beta$ has decreased with respect to the equal-time ($\tau = 0$) value. Hence the DWY skew information probes the imaginary time fluctuations in a similar manner to quantum variance. As a consequence a link between the two quantities can be expected, and it is straightforwardly established in the form

$$\begin{aligned} \langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q &= \langle \delta^2 \hat{O} \rangle - \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \langle \delta \hat{O}(\tau) \delta \hat{O}(0) \rangle \\ &= \int_0^1 d\alpha \, I_\alpha(\hat{O}, \hat{\rho}) \end{aligned} \quad (17.42)$$

namely the quantum variance is equal to the *average DWY skew information*. In particular the Wigner-Yanase (WY) skew information [?], $I_{\alpha=1/2}$, is an upper bound to the DWY skew information

$$I_\alpha(\hat{O}, \hat{\rho}) \leq I_{\alpha=1/2}(\hat{O}, \hat{\rho}) \quad (17.43)$$

as it is easy to prove due to the monotonic decay of imaginary-time correlation functions, $\langle \delta \hat{O}(\tau) \delta \hat{O}(0) \rangle \geq \langle \delta \hat{O}(\tau = \beta/2) \delta \hat{O}(0) \rangle$. As a consequence one readily obtains that the quantum variance is always lower than the WY skew information

$$\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q \leq I_{\alpha=1/2}(\hat{O}, \hat{\rho}) . \quad (17.44)$$

Lieb [?] proved that the DWY skew information is *convex* for any value of α , namely:

$$I_\alpha(\hat{O}, \lambda_1 \hat{\rho}_1 + \lambda_2 \hat{\rho}_2) \leq \lambda_1 I_\alpha(\hat{O}, \hat{\rho}_1) + \lambda_2 I_\alpha(\hat{O}, \hat{\rho}_2) \quad (17.45)$$

for any real numbers λ_1, λ_2 . Using Eq. (17.42), the property of convexity is immediately inherited by the quantum variance. The convexity of quantum variance is a fundamental figure of merit to assess the quantum variance as a probe of quantum coherent fluctuations: if $\hat{\rho}_1$ and $\hat{\rho}_2$ have the same quantum variance, any linear incoherent superposition of the two has necessarily a lower quantum variance.

17.12.2 Quantum variance vs. local quantum uncertainty

Given an A - B bipartition of an extended quantum system, Ref. [?] has introduced the concept of *local quantum uncertainty* (LQU)

$$\mathcal{U}_A^\Lambda(\hat{\rho}) = \min_{\hat{O}_A^\Lambda} I_{1/2}(\hat{O}_A^\Lambda, \hat{\rho}) \quad (17.46)$$

as the minimum of the WY skew information over all local observables \hat{O}_A^Λ in A having a given spectrum Λ . Ref. [?] argues that this observable-independent (but spectrum-dependent) quantity acts as a discord-like quantity, namely a measure of quantum correlations between A and B . In order to capture quantum correlations among *all*, equally weighted degrees of freedom of A and those of B , it is obvious to request that the observable \hat{O}_A be an extensive one, namely the sum of local observables \hat{O}_j ,

$$\hat{O}_A^{(\text{macro})} = \sum_{j \in A} \hat{O}_j . \quad (17.47)$$

This ensures that quantum fluctuations of all degrees of freedom in A are taken into account into the skew information. As the size of A grows, the spectrum of the operator $\hat{o}_A^{(\text{micro})} = \hat{O}_A^{(\text{macro})}/L_A^d$ becomes a continuous one, and it is contained in a finite interval $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$. This behavior applies to all extensive operators of the kind of $\hat{O}_A^{(\text{macro})}$, and their spectrum can easily be reduced to one and the same Λ by a simple shift and rescaling in the definition of the operator. Hence, in the sense of Ref. [?], one can define a *macroscopic* LQU $\mathcal{U}_A^{(\text{macro})}(\rho)$ defined as a minimum over all operators $\hat{O}_A^{(\text{macro})}$, which is arguably the most appropriate definition of discord-type correlations among all degrees of freedom of A and those in B . We assume that A and B interact with a coherent Hamiltonian term, leading to an exchange of energy, and possibly also particle, or magnetization, etc... Hence in the minimization procedure we explicitly exclude the possible existence of local conserved quantities $[\hat{O}_A^{(\text{macro})}, \hat{\rho}] = 0$, which would trivially lead to a vanishing macroscopic LQU.

It follows immediately from Eq. (17.44) that the macroscopic LQU is lower-bounded by the minimum quantum variance of macroscopic observables

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_A^{(\text{macro})}(\hat{\rho}) &= \min_{\hat{O}_A^{(\text{macro})}} I_{1/2}(\hat{O}_A^{(\text{macro})}, \hat{\rho}) \\ &\geq \min_{\hat{O}_A^{(\text{macro})}} \langle \delta^2 \hat{O}_A^{(\text{macro})} \rangle_Q . \end{aligned} \quad (17.48)$$

The minimization implied by Eq. (17.48) is readily performed for the quantum variance: the minimum quantum variance of macroscopic observables is realized by bipartite fluctuations of an otherwise conserved quantity, namely \hat{O}_A such that $[\hat{O}_A + \hat{O}_B, \rho] = 0$. For general quantum systems, the above requirement applies to the local energy, and, in the presence of a continuous symmetry, to the local particle number (for particle models) or to the local magnetization (for spin models), etc. – assuming that the latter quantities are not conserved. In the case of equilibrium states of local Hamiltonians, we have shown in this work that the quantum variance of bipartite fluctuations obeys an area law: as a consequence, Eq. (17.48) implies that the macroscopic LQU obeys *at least* an area law. On the other hand, in the ground state the WY skew information reduces to the variance of the operator

$$I_{1/2}(\hat{O}_A^{(\text{macro})}, \hat{\rho}) \stackrel{T=0}{=} \langle \delta^2 \hat{O}_A^{(\text{macro})} \rangle , \quad (17.49)$$

and the scaling of the minimum variance of local macroscopic operators in the ground state of local Hamiltonians satisfies a (logarithmically violated) area law [?]. Even though the temperature dependence of the WY skew information is not generally known in the literature, one can assume that it is maximized at $T = 0$ (this is the case of the free-fermion example studied explicitly in Sec 17.7). Under this assumption, and given that the WY skew information at $T = 0$ coincides with the total variance, we obtain the inequalities

$$\begin{aligned} &\min_{\hat{O}_A^{(\text{macro})}} \langle \delta^2 \hat{O}_A^{(\text{macro})} \rangle_Q \\ &\leq \mathcal{U}_A^{(\text{macro})}(\hat{\rho}) \leq \min_{\hat{O}_A^{(\text{macro})}} \langle \delta^2 \hat{O}_A^{(\text{macro})} \rangle(T=0) \end{aligned} \quad (17.50)$$

implying that the macroscopic LQU obeys *at most* a logarithmically violated area law, namely

$$\mathcal{O}(L_A^{d-1}) \leq \mathcal{U}_A^{(\text{macro})}(\hat{\rho}) \leq \mathcal{O}(L_A^{d-1} \log L_A) . \quad (17.51)$$

17.13 Quantum variance vs. quantum Fisher information: quantum correlations and metrology

In this section we focus on the relationship between the quantum variance and the quantum Fisher information [?], a central quantity in quantum metrology due to its link with the maximum precision achievable in the estimation of the parameter of a given unitary transformation.

Similarly to the skew information, the quantum variance offers a lower bound to the quantum Fisher information; we shall exploit this fact in the context of the recently introduced “interferometric power” [?] to explore the importance of the quantum variance of bipartite fluctuations both for metrology and for quantum correlations. Further implications of this bound in the context of entanglement witnessing will be discussed in Sec 17.16.

17.13.1 Quantum variance as a lower bound to the quantum Fisher information

The quantum Fisher information (QFI) [?] expresses the “distinguishability” (in the sense of the Bures distance) between two density matrices $\hat{\rho}(h)$ and $\hat{\rho}(h + \delta h)$, belonging to a family $\hat{\rho}(h)$ continuously parametrized by the parameter h . If the family of density matrices is obtained via a unitary transformation generated by an Hermitian operator \hat{O} , $\hat{\rho}(h) = e^{-i\hat{O}h} \hat{\rho}(h=0) e^{i\hat{O}h}$, the QFI takes the explicit form $F_Q(\hat{O}, \hat{\rho}) = \sum_{nm} G_F(p_n, p_m) |\langle n | \delta \hat{O} | m \rangle|^2$ where p_n and $|n\rangle$ are eigenvalues and eigenvectors of the density matrix, and

$$G_F(p_n, p_m) = 2 \frac{(p_n - p_m)^2}{p_n + p_m} . \quad (17.52)$$

This is to be compared with the expression of the quantum variance, namely $\langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q = \sum_{nm} G_{QV}(p_n, p_m) |\langle n | \delta \hat{O} | m \rangle|^2$ where

$$G_{QV}(p_n, p_m) = \frac{p_n + p_m}{2} - \frac{p_n - p_m}{\log(p_n) - \log(p_m)} . \quad (17.53)$$

Comparing the two functions it is easy to realize that

$$\frac{G_F(x, y)}{4} \geq G_{QV}(x, y) \quad 0 \leq x, y \leq 1 \quad (17.54)$$

whence the announced inequality

$$\frac{F_Q(\hat{O}, \hat{\rho})}{4} \geq \langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q . \quad (17.55)$$

Incidentally we notice that the WY skew information admits a similar expression $I_{1/2}(\hat{O}, \hat{\rho}) = \sum_{nm} G_{I_{1/2}}(p_n, p_m) |\langle n | \delta \hat{O} | m \rangle|^2$ with

$$G_{I_{1/2}}(p_n, p_m) = \frac{p_n + p_m}{2} - \sqrt{p_n p_m} . \quad (17.56)$$

Direct inspection into the G functions reveals the inequality chain:

$$\frac{G_F(x, y)}{4} \geq G_{I_{1/2}}(x, y) \geq G_{QV}(x, y) \quad 0 \leq x, y \leq 1 \quad (17.57)$$

whence the ensuing hierarchy:

$$\frac{F_Q(\hat{O}, \hat{\rho})}{4} \geq I_{1/2}(\hat{O}, \hat{\rho}) \geq \langle \delta^2 \hat{O} \rangle_Q . \quad (17.58)$$

In particular we notice that QFI and WY skew information have often been invoked as sharing similar properties [?], yet a well-defined relationship as the inequality of Eq. (17.58) between the two has not yet been established (in this respect, Ref. [?] uses a QFI-like quantity, which is not equivalent to the actual definition of QFI). The quantum variance further explicits this relationship by finding a common, non trivial lower bound for both quantities.

17.13.2 Metrological implications: the interferometric power

In a similar manner to the definition of local quantum uncertainty discussed in App. 17.12.2, Ref. [?] has introduced the concept of *interferometric power* (IP) of an observable O_A^Λ in a bipartite $(A + B)$ system with density matrix $\hat{\rho}$ as

$$\mathcal{P}_A^\Lambda(\hat{\rho}) = \frac{1}{4} \min_{\hat{O}_A^\Lambda} F_Q(\hat{O}_A^\Lambda, \hat{\rho}) \quad (17.59)$$

where $F_Q(\hat{O}_A^\Lambda, \hat{\rho})$ is the quantum Fisher information associated with a unitary transformation generated by a local observable \hat{O}_A^Λ acting on A , and with spectrum Λ . The IP has a direct metrological meaning: it expresses the worst-case-scenario uncertainty (in the sense of the Cramér-Rao bound [?]) that one can achieve in the estimation of the parameter of a unitary transformation generated by an arbitrary observable which is local in A and has a given spectrum Λ . Ref. [?] argues that the IP is another discord-type measure of quantum correlations between A and B , leading to the conclusion that quantum correlations are a resource for metrology.

It is immediate to see that the above conclusions carry automatically over to the case of the quantum variance. Using the inequality Eq. (17.55), one immediately has that

$$\mathcal{P}_A^\Lambda(\rho) \geq \min_{\hat{O}_A^\Lambda} \langle \delta^2 \hat{O}_A^\Lambda \rangle_Q. \quad (17.60)$$

In App. 17.12.2 we argued that macroscopic observables $\hat{O}_A^{(\text{macro})}$ in A , having an extensive spectrum Λ , capture the quantum correlations between all degrees of freedom in A and those in B . In the case of such observables one can perform the minimization immediately for the right-hand side of Eq. (17.60), identifying the $\hat{O}_A^{(\text{macro})}$ operator with the one satisfying the condition $[\hat{O}_A^{(\text{macro})} + \hat{O}_B^{(\text{macro})}, \hat{\rho}] = 0$ (again, as in App. 17.12.2 we are excluding local conserved quantities from the minimization). Hence the quantum variance of bipartite fluctuations provides a lower bound on the IP of macroscopic observables, and on the quantum correlations and metrological resource that this quantity expresses. Similarly to Eq. (17.51), this lower bound allows one to establish an area law scaling (with at most logarithmic corrections) to the IP of macroscopic observables, under the assumption (verified *e.g.* by free fermions as in Sec. 17.7) that the QFI is maximised at $T = 0$. In particular this bound is very instructive in terms of the metrological utility of many-body states: the maximum quantum variance of bipartite fluctuations, and hence the maximum IP, is achieved for states exhibiting power-law correlations, and specifically in the vicinity of quantum critical points – see also [?] for a recent calculation of the quantum Fisher information in exactly solvable models of quantum-critical points, which confirms this conclusion.

17.14 Quantum variance, skew information and quantum Fisher information of bipartite fluctuations for free fermions

17.14.1 Quantum variance

In this section we calculate the quantum variance of local particle-number fluctuations in the case of free fermions on a d -dimensional hypercubic lattice at half filling. The density-density correlation function is given by

$$\begin{aligned} \langle \delta \hat{n}_i(\tau) \delta \hat{n}_j(0) \rangle = & \quad (17.61) \\ \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})\tau} f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}'}) \end{aligned}$$

where $f_{\mathbf{k}} = [\exp(\beta\epsilon_{\mathbf{k}}) + 1]^{-1}$ is the Fermi distribution, and $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2J \sum_{\alpha=x,y,\dots} \cos(k_{\alpha})$ is the dispersion relation. Integrating the correlation function to get $\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle$ and $\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_T$, one obtains the quantum variance in the form

$$\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q = \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i,j \in A} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}'}) \left[1 + \frac{1 - e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})}}{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})} \right] \quad (17.62)$$

In the high-temperature limit $\beta \rightarrow 0$ the quantum variance reduces to

$$\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q = \frac{\beta^2}{48} \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i,j \in A} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^2 + \mathcal{O}(\beta^3) . \quad (17.63)$$

One observes that the term linear in β vanishes, so that the dominant temperature dependence goes like T^{-2} .

Assuming for A the geometry of a hypercube of side L_A , the double sum over the A region can be performed exactly, leading to

$$\begin{aligned} \langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q &= \frac{\beta^2}{48} \left(\frac{L_A}{L} \right)^{2d} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\prod_{\alpha=x,y,\dots} \frac{\text{sinc}^2[(k_{\alpha} - k'_{\alpha})L_A/2]}{\text{sinc}^2[(k_{\alpha} - k'_{\alpha})/2]} \right) (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^2 \\ &+ \mathcal{O}(\beta^3) . \end{aligned} \quad (17.64)$$

In the limit $L_A \rightarrow \infty$ one has that

$$L_A \frac{\text{sinc}^2[(k_{\alpha} - k'_{\alpha})L_A/2]}{\text{sinc}^2[(k_{\alpha} - k'_{\alpha})/2]} \approx 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(k_{\alpha} - k'_{\alpha} - 2\pi n) . \quad (17.65)$$

One sees immediately that this limit would highlight a term scaling as L_A^d (volume law), but that this term is actually vanishing because $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}+2\pi n \mathbf{e}_{\alpha}}$. Hence one is left with an area-law scaling term.

17.14.2 Wigner-Yanase skew information

Using Eq. (17.41) leads immediately to the following expression for the skew information of bipartite particle-number fluctuations of free fermions

$$I_{1/2}(\hat{N}_A, \hat{\rho}) = \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i,j \in A} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}'}) [1 - e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})/2}] \quad (17.66)$$

which, when expanded at high temperature, leads to the behavior

$$I_{1/2}(\hat{N}_A, \hat{\rho}) = \frac{\beta^2}{32} \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i,j \in A} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^2 + \mathcal{O}(\beta^3) . \quad (17.67)$$

The above expression is very similar to Eq. (17.64) for the quantum variance, confirming that the two quantities have the same high-temperature behavior (as well as the same zero-temperature value). In particular, when $\beta \rightarrow 0$:

$$\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q = \frac{2}{3} I_{1/2}(\hat{N}_A, \hat{\rho}) + \mathcal{O}(\beta^3) . \quad (17.68)$$

17.14.3 Quantum Fisher information

Finally, when considering the QFI for free fermions [?], one finds the following expression for bipartite particle-number fluctuations

$$F_Q(\hat{N}_A, \hat{\rho}) = \frac{4}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i, j \in A} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}'}) \tanh^2 \left[\frac{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})}{2} \right] \quad (17.69)$$

which leads to the high-temperature behavior

$$F_Q(\hat{N}_A, \hat{\rho}) = \frac{\beta^2}{4} \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i, j \in A} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^2 + \mathcal{O}(\beta^3) . \quad (17.70)$$

Comparing again with Eq. (17.64), one can conclude that, at high temperatures

$$\langle \delta^2 \hat{N}_A \rangle_Q = \frac{1}{3} \frac{F_Q(\hat{N}_A, \hat{\rho})}{4} + \mathcal{O}(\beta^3) . \quad (17.71)$$

17.14.4 Discussion

Hence, as anticipated in the main text, the quantum fluctuations captured by the quantum variance, the WY skew information or the QFI display the same high-temperature behavior up to a global prefactor. This leads to a coherent picture for bipartite quantum fluctuations of free fermions. While the calculation of the quantum variance is easily extended to arbitrary many-body systems which can be treated with state-of-the-art numerics, the same is generally not true for the WY skew information nor the QFI – although, unlike the QFI, the WY skew information lends itself to path-integral Monte Carlo approaches probing imaginary-time correlation functions. On the experimental side, the WY skew information, being an imaginary-time correlation function, is not accessible to experiments as such. As for the QFI, Ref. [?] has recently shown that it is potentially accessible to experiments when cast as a frequency integral involving the dynamic susceptibility; in this respect, the quantum variance has the advantage of being expressed solely in terms of static correlations and response functions.

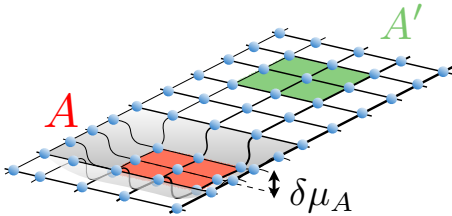


Figure 17.7: **Quantum-gas microscope setup to measure the quantum variance.** Here we sketch a possible scheme to measure the quantum variance of the local particle number in region A by adding a box-like potential to a two-dimensional optical lattice. This potential induces a local increase in the chemical potential, allowing one to probe the response function as the particle-number difference between region A' and A ; supplementing this measurement with the one of particle-number variance in region A gives access to the quantum variance.

17.15 Measurement of bipartite quantum variance with quantum-gas microscopes

A concrete proposal to measure the quantum variance of bipartite particle-number fluctuations in the context of ultra-cold quantum gases is illustrated in Fig. 17.7. Recent progress in quantum gas microscopes allows one to trap atoms in single layers of an optical lattice with superimposed traps of arbitrary geometries [?] and to measure single-site particle-number occupations [?]. As already discussed in App. 17.10, to access the quantum variance of the particle number N_A in the subsystem A one needs to measure the total variance of fluctuations $\langle \delta^2 N_A \rangle$, as well as the response function

$$\chi_{N_A} \approx \frac{\langle N_A \rangle(\mu_A + \delta\mu_A) - \langle N_A \rangle(\mu_A)}{\delta\mu_A} \quad (17.72)$$

where μ_A is the local chemical potential in region A , coupling to the particle number N_A . The two quantities $\langle \delta^2 N_A \rangle$ and χ_{N_A} need to be measured in the same conditions of temperature and (offset) chemical potential. A way to achieve this in cold-atom experiments is to use a “multiplexing” setup as in Fig. 17.7, in which one single trap geometry allows one to measure both quantities at once. Indeed monitoring fluctuations of N_A in region A allows one to extract $\langle \delta^2 N_A \rangle$ the total variance; on the other hand, a box-like potential superimposed to the optical lattice creates a local increase in the chemical potential, giving access to the response function as $(\langle N_{A'} \rangle - \langle N_A \rangle)/\delta\mu_A$. If the regions A and A' are built symmetrically around the (global) trap center, and if thermal equilibrium is established across the system, one is ensured that the two quantities are measured in the same thermodynamic conditions of temperature and offset chemical potential.

One may worry that in cold-atom experiments the total particle number has wide shot-to-shot fluctuations going well beyond a grand-canonical description, and that this may alter the estimate of the quantum variance, adding spurious contributions coming from experimental systematics. On the other hand, as discussed in the main text and in sections App. 17.9 and 17.10, all incoherent fluctuations (either stemming from the grand-canonical ensemble or from other sources) are systematically subtracted away in the quantum variance, if one is able to realize experimentally the deformation of the density matrix as in (17.31). We argue that this is indeed the case when the total particle number obeys an arbitrary statistics, namely the case in which the density matrix takes the general form

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_N p_{\text{exp}}(N) \hat{\mathcal{P}}_N e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \hat{\mathcal{P}}_N \quad (17.73)$$

where $p_{\text{exp}}(N)$ is the experimental particle-number statistics, accounting for systematic shot-to-shot fluctuations, and $\hat{\mathcal{P}}_N$ is the projector onto the Fock subspace with N particles. The deformation of the Hamiltonian implied in Fig. 17.7 leads to the desired deformation of the density matrix; hence the quantum variance (and its peculiar size and temperature scaling) can be experimentally measured even without postselection of the measurement shots according to the total particle number, with the obvious caveat that one is not measuring properties of the grand-canonical ensemble but the ones of the artificial ensemble realized experimentally.

A similar setup, and similar considerations, can be applied to measure the quantum variance of the staggered particle number. In that case, one needs to shine a weak superlattice potential with twice the lattice spacing of the primary potential over the region A' .

17.16 Quantum variance as multiparticle entanglement witness

Let us consider a system of N qubits, with collective spin operators $\hat{\mathbf{J}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{S}}_i$. A pure state $|\psi\rangle$ is said to be k -producible [? ? ?] if it can be written as

$$|\psi_{k\text{-prod}}\rangle = \otimes l = 1^M |\psi_{N_l}\rangle \quad (17.74)$$

where $|\psi_{N_l}\rangle$ is an (entangled) state of a block of $N_l \leq k$ spins, with the constraint that $\sum_l N_l = N$. A mixed state is then said to be k -producible if it is an incoherent superposition of k_s -producible states with $k_s \leq k$

$$\hat{\rho}_{k\text{-prod}} = \sum_s p_s |\psi_{k_s\text{-prod}}\rangle \langle \psi_{k_s\text{-prod}}| . \quad (17.75)$$

Using Eq. (17.55) and the results of Refs. [? ?], one can prove that for k -producible states the quantum variance of the collective spin components \hat{J}^α , and the QFI associated to transformation generated by the \hat{J}^α , satisfy the inequality:

$$\langle \delta^2 J^\alpha \rangle_Q \leq F_Q(J^\alpha; \rho_{k\text{-prod}})/4 \leq nk^2 + (N - nk)^2 \quad (17.76)$$

where $n = [N/k]$ is the integer part of N/k . In fact the exact same bound as in the last inequality of Eq. (17.76) holds for the WY skew information [?], and again it carries over to the quantum variance thanks to the inequality in Eq. (17.44). The inequality of Eq. (17.76) can be readily generalized to more general degrees of freedom than qubits, namely to collective operators $\hat{C} = \sum_i \hat{c}_i$ where c_i is an operator with a bounded spectrum contained in the interval $[c_{\min}, c_{\max}]$. In that case the inequality takes the form [?]

$$\begin{aligned} 4\langle \delta^2 \hat{C} \rangle_Q &\leq F_Q(\hat{C}; \rho_{k\text{-prod}}) \\ &\leq (c_{\max} - c_{\min})^2 [nk^2 + (N - nk)^2] . \end{aligned} \quad (17.77)$$

Hence, similarly to what was already found for the WY skew information [?] and the QFI [? ? ?], a violation of the inequalities in Eqs. (17.76) or (17.77) or for the quantum variance is a strong indication of the existence of multiparticle entanglement among a least $(k + 1)$ degrees of freedom. The condition of violation is actually very strong, as the bound of the last inequality in is rather loose for thermal states. Indeed the bound of Eq. (17.76) is valid for k -producible pure states and mixed states alike, but, given that all the quantities in question (WY skew information, QFI, and quantum variance) are expected to decrease under thermal mixing, the bound is much looser for thermal states, and all the more so the higher the temperature.

Part XII

Other theories

Part XIII

Other, Non-Typical Theory

18 On temporal entropy and the complexity of computing the expectation value of local operators after a quench by Carignano, Ramos Marimón

Abstract

We study the computational complexity of simulating the time-dependent expectation value of a local operator in a one-dimensional quantum system by using temporal matrix product states, and argue that it is intimately related to that of encoding temporal transition matrices and their partial traces. In particular, we show that we can upper-bound the rank of these reduced transition matrices by the one of the Heisenberg evolution of local operators, thus making connection between two apparently different quantities, the temporal entanglement and the local operator entanglement. As a result, whenever the local operator entanglement grows slower than linearly in time, we show that computing time-dependent expectation values of local operators using temporal matrix product states is likely advantageous with respect to computing the same quantities using standard matrix product states techniques.

18.1 Introduction.

The complexity of simulating quantum-many body systems increases exponentially with the number of its constituents. Over the last decades, the development of tensor networks (TN) techniques has however helped in gaining better insight on the equilibrium properties of many-body quantum systems. It is now understood that, at equilibrium, quantum complexity is mostly related to the amount of entanglement, and we have been able to design TN Ansätze that can encode the structure of typical equilibrium states.

Out of equilibrium, the situation is different: even in the simplest protocol, such as e.g. quantum quenches, correlations spread over large distances, quickly producing robustly entangled states [1]. Standard TN techniques such as those based on matrix product states (MPS) thus struggle to cope with the fast growth of entanglement and, as a result, their cost increases exponentially with the duration of the evolution [2]: this is often referred to as “entanglement barrier” in the literature [3].

This fact is a consequence of trying to represent the full quantum state during the evolution. The situation might change if we focus on a local description of the state, by trying to describe the evolution of the expectation value of local operators. In principle, this is a much simpler task, and several approaches along these lines have been proposed [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12]. However, except for few studies on integrable systems [13, 14], there has been no systematic understanding of the real computational cost of such approaches and thus no concrete understanding on the complexity of simulating the evolution of local observables.

In this work we make a step in this direction. We consider the evolution under a local Hamiltonian of the expectation value of a local observable and follow the inspirational papers [4, 5, 6, 10, 12]. These algorithms rely still on a matrix product state, which is however now defined in time, making it a *temporal* MPS (tMPS) along a Keldysh contour [6, 15]. It has recently been noticed that such tMPS encodes the influence matrix of the system [16] that drives the evolution of a region of the full system, and thus provides the systematic way of

translating the global evolution into a local one [11, 17, 18]. In specific cases, such tMPS can be described with small bond dimension, though this is not always the case [4, 5].

Here we provide some theoretical backup to these numerical observations. Our main result in this direction is to bound the complexity of the tMPS with the one of encoding the time evolution of operators in the Heisenberg picture. Such complexity is encoded in the so called “operator entanglement” (OE) [19, 20], which is expected to grow at most logarithmically in time for integrable systems, whereas it increases linearly for non-integrable systems [3, 21, 22, 23]. The key to obtaining this result is a slightly modified version of the algorithms introduced in [4, 6], which, as shown in the following, allows to build a direct connection between the two quantities.

Whenever the OE grows logarithmically in time, we can thus show that the tMPS bond dimension is bounded by a polynomial growth in time. On the other hand, when the OE grows linearly in time, our bound on the tMPS bond dimension is exponential. While this does not rule out that there might be specific cases in which the tMPS might still have a small bond dimension and thus provide a computational advantage, see e.g. [24, 22, 23], we believe that these are but fortuitous exceptions to the general rule, and indeed in the scenarios we presented for this case as well as others in the literature [10] we find that such bound is saturated.

18.2 Setup

Given a lattice system, we consider the complexity of computing the evolution of the expectation value of a local operator after a quench. We start from a product state $|\psi_0\rangle$ and a local Hamiltonian H . The system starts to evolve and it is described by the state $|\psi(T)\rangle = \exp\{-iHT\}|\psi_0\rangle \equiv U(T)|\psi_0\rangle$. In general, the entanglement entropy of the state increases linearly in time [1] and standard time-dependent MPS simulations become exponentially expensive [25, 26] (for recent reviews see also [27, 28]). Here, rather than evolving the state, we focus on the evolution of the expectation value of a local operator acting on two neighbouring sites ⁴,

$$\langle \mathcal{OQ} | \mathcal{OQ} \rangle (T) = \langle \psi(T) | \mathcal{O}_i \mathcal{Q}_{i+1} | \psi(T) \rangle. \quad (18.1)$$

Approximating $U(T)$ by a sequence of short evolutions $U(\delta t)^{N_T}$ with $N_T = T/\delta t$ and using a Trotter expansion, this quantity is encoded in the contraction of a two dimensional TN containing order $N_x \times N_T$ tensors [29, 30], see Fig. 20.1(a). Furthermore, one can fold the network following [4, 5], leading to a double-layer structure as shown in Fig. 20.1 (b). Given the Trotter approximation, the time evolution of a local operator has an exact causal cone obtained by cancelling all the unitary gates that are contracted with their respective Hermitian conjugates. As a result, the network can be simplified and acquires the triangular shape shown in Fig. 20.1 (c) [10, 12].

18.2.1 Compressing the tMPS

Being two-dimensional, the best contraction path for this TN is not a priori obvious. a possible strategy is to identify two tMPS defining the contraction of the left and the right half of the system (see Fig. 20.2), and interpret the triangular network as the scalar product between the two, $\langle \mathcal{OQ} | \mathcal{OQ} \rangle (t) = \langle L_{\mathcal{O}} | R_{\mathcal{Q}} | L_{\mathcal{O}} | R_{\mathcal{Q}} \rangle$ ⁵. The identification is purely formal, since the bond dimension of the individual tMPS tensors can grow exponentially with the number of time

⁴This can be easily generalized to an arbitrary number of sites as long as it is finite.

⁵Notice that this definition differs slightly from those of previous works, since the specific operators \mathcal{OQ} are included in the definition of the tMPS. By construction, if we chose as two-site operators the identity operator, $\mathcal{OQ} = \mathbb{I}$ we obtain that $\langle L_{\mathbb{I}} | R_{\mathbb{I}} | L_{\mathbb{I}} | R_{\mathbb{I}} \rangle = \langle \psi(t) | \psi(t) | \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$.

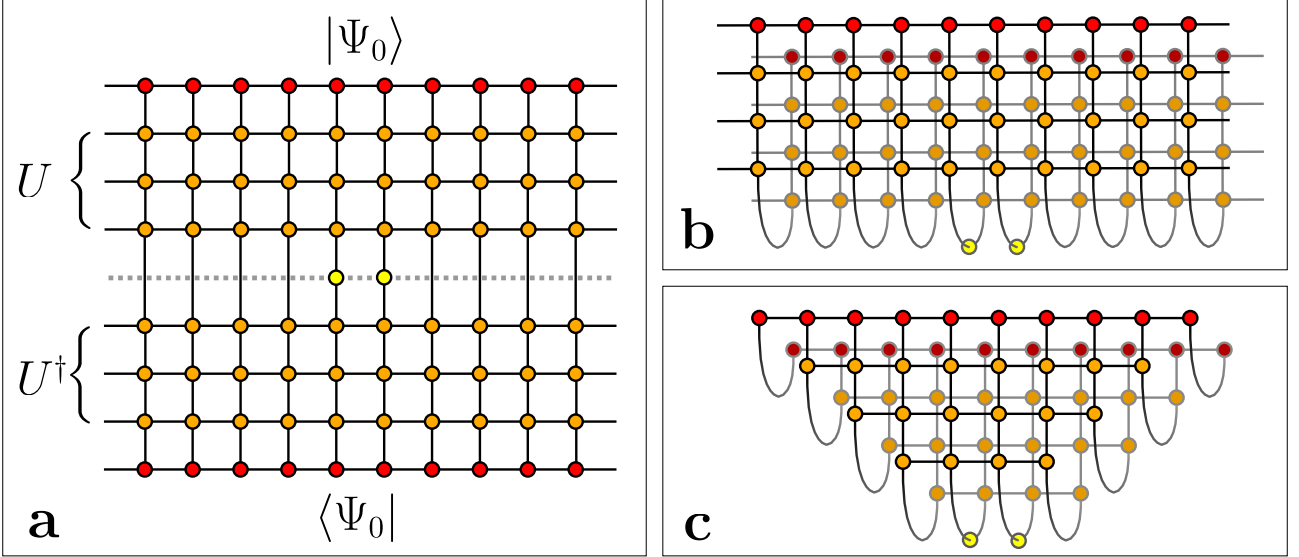


Figure 18.1: (a) The time-dependent expectation value of a local operator acting on a one-dimensional system in the Keldysh representation (b) can be described by a double sheet 2D TN contraction. (c) Upon using a Trotter approximation and the locality of the operator, it simplifies to a triangular TN.

steps. The construction of the tMPS thus only makes sense if one can show that, at least for specific scenarios, its bond dimension increases mildly with the number of time steps.

The task is therefore to identify the relevant rank of the tMPS matrices and compress them on their support. We know that the tMPS allows to compute correlation functions of the type $\langle \mathcal{OP}(t) \cdots \mathcal{QR}(t') \rangle$ for an arbitrary number of insertions of local operators at different times between 0 and T . Following the standard DMRG recipe [26], this requires having a faithful representation of all reduced transition matrices (RTM) $\mathcal{T}_t^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}}$, defined as

$$\mathcal{T}_t^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}} = \text{tr}_{T-t} [\mathcal{T}^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}}] , \quad \mathcal{T}^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}} = \frac{|R\mathcal{Q}\rangle \langle L\mathcal{O}|}{\langle L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}|L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}\rangle} , \quad (18.2)$$

which can be seen as generalizations of reduced density matrices.

The graphical representation of these objects is found in Fig. 20.2(b). Interestingly, such transition matrices have also been considered in the context of holography: the properties of the equivalent in the field theory of the transition matrices described here have a geometrical interpretation in the bulk [31, 32, 32, 33, 34]. It is then the rank of such RTMs which dictates the rank of the tMPS matrices, rather than the temporal entropy that was previously considered [4, 6, 10, 12].

Generalizing the DMRG prescription, the bond dimension of the tMPS tensors should allow to obtain a low-rank approximation of the reduced transition matrix $\mathcal{T}_t^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}}$, $\forall t \in 0 \cdots T$, with the desired precision.

The reduced transition matrices are complex-valued and, for reflection invariant Hamiltonians, whenever $\mathcal{Q} = \mathcal{O}$ they are symmetric. As a result, their low rank approximation is better defined in terms of their singular values, so we will project the tMPS bond dimension at time t on the largest singular values of $\mathcal{T}_t^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}}$.

Following [6], we now define $\Lambda^s(t)$ and $\Lambda^o(t)$ respectively as the contractions of the overlap $\langle L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}|L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}\rangle$ until t (the top part of the network contraction, including the initial state) and below t (the bottom part, containing the operator), respectively, see Fig. 20.2. We also define $\bar{\Lambda}_L^s(t)$, $\bar{\Lambda}_R^s(t)$ as the contraction up to t of the network obtained by contracting $\langle L\mathcal{O}|L\mathcal{O}|L\mathcal{O}|L\mathcal{O}\rangle$

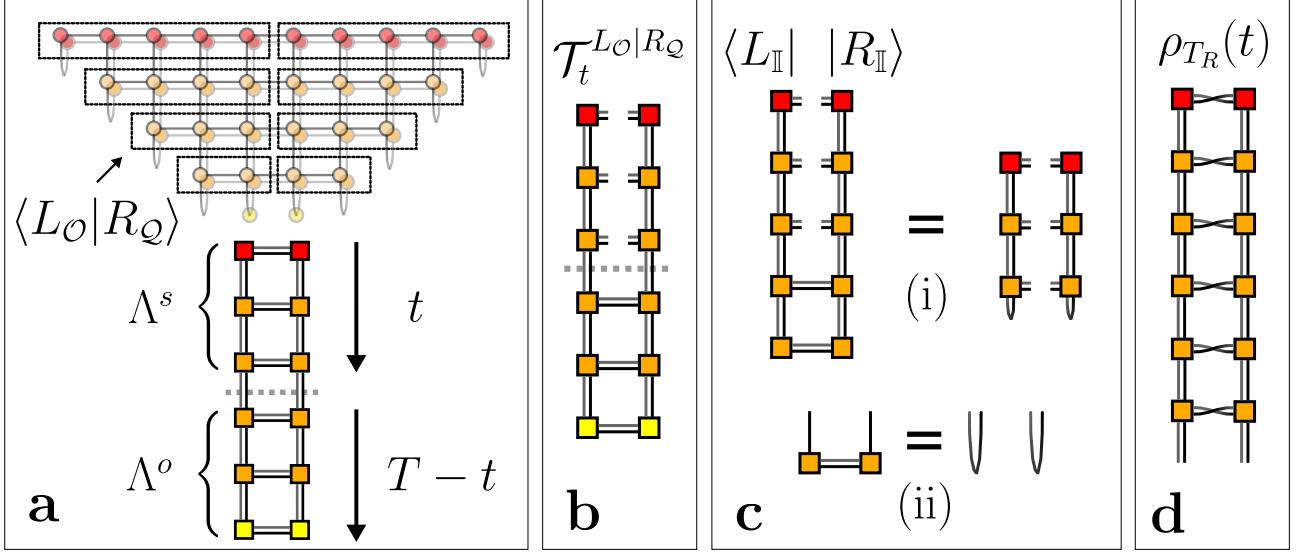


Figure 18.2: **(a)**: The triangular TN can be contracted from the sides, identifying a left $\langle L_{\mathcal{O}}|$ and a right $|R_{\mathcal{Q}}\rangle$ tMPS. The upper-most tensors of the temporal MPS are dictated by the initial state, while the lower-most ones by the choice of the operator. **(b)** The reduced transition matrix. **(c)** In the absence of operators, the folded tensors of the time evolution resolve to identities. **(d)** The partial transpose of the time-evolved left-right density matrix of the system, where forwards and backwards legs are swapped.

and $\langle R_{\mathcal{Q}}|R_{\mathcal{Q}}|R_{\mathcal{Q}}|R_{\mathcal{Q}}\rangle$ ⁶.

With these definitions, we have that

$$\mathcal{T}_t^{L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{Q}}} \simeq \sqrt{\bar{\Lambda}_L^s(t)} \Lambda^o(t) \sqrt{\bar{\Lambda}_R^s(t)}, \quad (18.3)$$

where we use the similarity symbol to indicate that the two operators share the same singular values. For reflection invariant systems, such as those we analyze here, one has $\bar{\Lambda}_R^s(t) = \bar{\Lambda}_L^s(t)$, thus our central result reads

$$\mathcal{R} \left(\mathcal{T}_t^{L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{Q}}} \right) \leq \min \left\{ \mathcal{R} \left(\bar{\Lambda}_L^s(t) \right), \mathcal{R} \left(\Lambda^o(t) \right) \right\}, \quad (18.4)$$

where \mathcal{R} denotes the rank of a given matrix. This equation is at the basis of our analysis.

Since for each choice of \mathcal{O} and \mathcal{Q} we obtain a different tMPS representation or $\langle L_{\mathcal{O}}(t)|$ and $|R_{\mathcal{Q}}(t)\rangle$, we define the cost of the algorithm as the cost of simulating the operators that require the highest bond dimension.

18.2.2 The rank of the reduced transition matrices

Whenever $\mathcal{O} = \mathcal{Q} = \mathbb{I}$, the transition matrices $\mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathbb{I}}}$ for all t are projectors. As a result the states $|L_{\mathbb{I}}\rangle$ and $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ consist of trivial singlets at the virtual level, as sketched in Fig. 20.2 (c), implying that the tMPS matrices have always bond dimension 1, for all t . In order to obtain non-trivial tMPS we thus include the operators in the construction of the states.

From the previous definitions it follows that

$$\Lambda^o(t) = U(t) (\mathcal{O} \otimes \mathcal{Q}) U(t)^\dagger, \quad (18.5)$$

meaning that $\Lambda^o(t)$ exactly encodes the Heisenberg evolution of the initially localized operator $\mathcal{O}_i \mathcal{Q}_{i+1}$, while

$$\Lambda^s(t) = \rho(t) = U(t) |\psi_0\rangle \langle \psi_0| U(t)^\dagger, \quad (18.6)$$

⁶For reflection-invariant Hamiltonians, $|L_{\mathcal{O}}\rangle$ differs from $|R_{\mathcal{O}}\rangle$ only by a complex conjugation

where $\rho(t)$ is the time-evolved density matrix of the initial state. Finally, for Hamiltonians that are invariant under reflections with respect to the center of the chain,

$$\bar{\Lambda}_L^s(t) = \bar{\Lambda}_R^s(t) = \rho(t)_{T_R}, \quad (18.7)$$

where T_R stands for the partial transpose on the semi-infinite right part of the system. Since we are evolving a pure state, there are known relations between $\rho_{T_R}(t)$ and $\rho(t)$ [35], and in particular we know that $\mathcal{R}(\bar{\Lambda}_R^s(t)) = \mathcal{R}(\Lambda_R^s(t))$ [36, 37].

Having identified the elements composing the RTMs in Eq. (20.3), we can now use their physical properties together with Eq. (20.4) to identify some useful bound on the rank of the tMPS. A first scenario one can consider is that of a local quench. In this case, it is well known that the entropy of the evolved state only increases logarithmically with time, and as a result the rank of $\Lambda^s(t)$ increases at most polynomially [38, 39], thus using Eq. (20.4) we have

$$\mathcal{R}(\mathcal{T}_t^{L \circ |R_Q}) \leq T^\alpha \quad \forall t \in [0, T]. \quad (18.8)$$

Such a case is perhaps not particularly interesting, since a similar polynomial cost is obtained also by using standard MPS algorithms.

We thus turn to the more interesting scenario of a global quench. Here we know that $\mathcal{R}(\Lambda^s(t))$ increases exponentially with T , as already mentioned. If now $\mathcal{R}(\Lambda^o(t))$ only increases polynomially with T , we have

$$\mathcal{R}(\Lambda^o(t)) \leq t^\alpha \Rightarrow \mathcal{R}(\mathcal{T}_t^{L \circ |R_Q}) \leq T^\alpha \quad \forall t, \quad (18.9)$$

and the temporal MPS strategy provides a polynomial algorithm to compute the out-of-equilibrium dynamics of local observables, as already anticipated in [10, 12]. In the literature, it is conjectured (and checked in several scenarios) that in the case of integrable systems the entanglement of local operators only grows logarithmically [19, 20, 3, 22, 23], implying that the rank of $\Lambda^o(t)$ only increases polynomially with T as required in Eq. (20.9). As a result, if the conjecture is correct, the tMPS provides an efficient method to characterise the time evolution of local operators for integrable systems.

Since generically the rank of $\Lambda^o(t)$ is expected to grow exponentially with t , we expect that

$$\mathcal{R}(\mathcal{T}_t^{L \circ |R_Q}) \leq \alpha \exp(\beta), \quad (18.10)$$

with α and $\beta > 0$ model-dependent constants. In this case, there is no guarantee that the tMPS provides an efficient compression for the problem at hand.

18.2.3 Relation to other definitions of temporal entanglement

The basic ingredient in our formalism are the transition matrices defined in Eq. 20.2, and the generalized entanglement related to their rank. It is worth noting that these quantities differ from the definition of temporal entanglement recently proposed in the literature [4, 6, 10, 12, 13], which is built through density matrices obtained individually from either the left or right vectors (ie. $\rho_R \sim |R\rangle\langle R|$, $\rho_L \sim |L\rangle\langle L|$).

This can be most easily seen in the case of a reflection-symmetric problem: here one has $|R\rangle = |\bar{L}\rangle$, so that the two definitions are connected by a nontrivial complex conjugation on the left state, which can be seen as a partial transpose operation acting on the legs of the folded transition matrix (see Fig. 20.2 (d)). This global unitary operation (the tensor product of swap gates on every physical leg, ie. at each time site) acting on one side of the transition matrix can change the entanglement properties of the objects involved, so that a clear connection between

the two quantities is not evident and would definitely require a deeper investigation in the future.

Another aspect which has been recently pointed out is that the traditional definition of temporal entanglement can depend on the gauge chosen to define the transverse transfer matrix, and can be made arbitrarily small by using such gauge freedom. As a result, being able to accurately represent $|R\rangle$ and $\langle L|$ does not guarantee obtaining a good precision on an expectation value $\langle O(T)|O(T)\rangle = \langle L|O|R\rangle$, since the leading Schmidt vectors can be orthogonal to such overlap [40]. Thus, as we argued, for our intent of determining the complexity of simulating expectation value of local operators, the use of the generalized entanglement proposed here is the appropriate object to consider, close in spirit to the concept of biorthonormal truncation basis, which is already well-established for non-hermitian DMRG problems [41, 42, 40].

18.3 Numerical results.

We now report the numerical evidence to support our claims. We consider a transverse field Ising Hamiltonian

$$H(g, h) = - \sum_i \left[\sigma_x^i \sigma_x^{i+1} + g \sigma_z^i + h \sigma_x^i \right], \quad (18.11)$$

where $\sigma_{x,z}$ are Pauli matrices. We perform a second-order Trotter expansion of the time evolution operator and cast it into a matrix product operator (MPO) following [30], with a timestep $\delta t = 0.05$. For our examples we consider two cases: an integrable one for $g = 0.5, h = 0$, and a non-integrable one $g = -1.05, h = 0.5$. We consider different initial product states, namely $|0\rangle = (1, 0)^{\otimes N_x}$, $|+\rangle = (1, 1)/\sqrt{2}^{\otimes N_x}$ and $|r\rangle = (1, i)/\sqrt{2}^{\otimes N_x}$. The time evolution is performed by the variant of the standard folding algorithms we have described, exploiting the causal-cone of the network [4, 6, 10, 12] and relying on a low-rank approximation of the RTMs defined in Eq. (20.2).

As in previous approaches [10, 12] we iteratively construct the left and right vectors $\langle L_O(T)|$ and $|R_Q(T)\rangle$ starting from $\langle L_O(T-1)|$ and $|R_Q(T-1)\rangle$ by absorbing a new column of MPOs into them. These MPOs are obtained by contracting a column of the original TN and they thus represent transfer matrices \mathbb{E}^T evolving states of a time-slice in space, a *rotated* version of the standard evolution in time. The bond dimension of the corresponding MPS increases, and we then keep it under control by projecting onto the largest D singular values of $\mathcal{T}_t^{L_O|R_Q}$ for every bi-partition of the system into t and $T-t$. Further details about the algorithm and accurate comparison with other prescriptions in the literature are presented in the accompanying Supplementary Material.

In the case of the Ising model, we found the operator with the largest bond dimension defined at most on two sites to be a single-site σ_x . In the following we will focus on optimizing with respect to it ⁷.

We start by considering the bond dimension necessary to keep the truncation error above a threshold $\epsilon = 10^{-4}$ in the SVD spectrum of the reduced transition matrices, and compare them with those obtained imposing the same truncation on the Heisenberg evolution for the operator $O(t)$, which entails the evolution of the vectorized local operator under the Hamiltonian $H \otimes \mathbb{I} - \mathbb{I} \otimes H$, resulting in the MPS, $|\psi_O(t)\rangle$. The results are shown in Fig. 20.3, where we can observe that, as expected: 1) the behavior is different in the integrable and non-integrable cases, 2) the bond dimension necessary to correctly describe the RTM are always below the ones necessary to describe the Heisenberg evolution of the operator.

We note however that in order to estimate the computational cost of simulating the expectation value of local operators with a finite precision using a tMPS we should determine the

⁷For operators with known small bond dimension such as σ_z or $\sigma_x \sigma_x$, our algorithm saturates at the expected fixed value of D [43].

bond dimension that is required to keep the distance in norm $||\langle L_{\mathcal{O}}| - \langle L_{\mathcal{O}}^D| ||^2$ constant, where $\langle L_{\mathcal{O}}^D|$ is the truncation of the tMPS $\langle L_{\mathcal{O}}|$ to a given bond dimension D . Using the reasoning in Ref. [39], the term to consider would then be the overlap $\langle L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D|L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D\rangle$, which is upper bounded by the sum of the norm of the residuals discarded in the truncation process.

So far we have just provided a bound on the overlap $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}\rangle$ which, even for reflection-invariant systems and considering the symmetric case $\mathcal{O} = \mathcal{Q}$, differs from $\langle L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D|L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D\rangle$ by the absence of a complex conjugation. However, the two quantities are related, since $\langle L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D|L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D\rangle$ can be obtained from $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}\rangle$ by evolving $|R_{\mathcal{O}}\rangle$ with one layer of local unitaries, representing the partial transpose (swapping the bra with the ket legs). Such an operation does not modify the rank of each state, but it reduces the overlap between the two, so that a shift in the resulting singular values can be expected.

As a result, the computational cost required for simulating the expectation value of a local operator with a finite precision is constantly offset from that of computing $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}\rangle$, the latter being upper-bounded by the cost of the Heisenberg evolution of the operator. The scaling in time of the cost to maintain a constant error in local observables is the same as the one of $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}\rangle$ (see also the discussion in the Supplementary Material).

We verify this explicitly by following a procedure similar to the one proposed in [19] to estimate the truncation error in our tMPS compared to an exact result. The resulting bond dimensions for a fixed truncation error are reported in Fig. 20.4. For the integrable case, we find a polynomial increase, consistent with the behavior of the OE. Different initial states require different bond dimensions for a faithful description, though the growth follows the same power law. For the non-integrable case, on the other hand, the OE requires an exponentially growing bond dimension for a faithful description, and the tMPS bond dimension follows the same behavior, consistent with our result.

18.4 Conclusions.

We have provided a new connection between two separate concepts, temporal entanglement and the operator entanglement. In particular, we have shown that the rank of the RTM necessary to compute the temporal entanglement is upper-bounded by the rank of the OE of a bi-partition. As a result, the scaling in time of the computational cost of simulating the evolution of a local observable with constant error is upper-bounded by the scaling of the OE, even though the exact value of the cost can be offset by a constant value whose origin has been discussed in detail. Our presented algorithm yields the most efficient performance observed thus far, with a marginal advantage over previous approaches.

As a result, we can claim that whenever the OE only grows logarithmically, using a tMPS for simulating the evolution of a local observable is the best choice in terms of computational cost and scales only polynomially with time, whereas in the generic case the entanglement barrier cannot be circumvented by using tMPS. On the other hand, a linear growth of the OE does not necessarily imply that the tMPS cannot provide an efficient compression, see eg. [24, 22, 23]. The transverse contraction methods discussed here would then be useful even in those cases.

Our results are a step towards understanding the cost of simulating the out-of-equilibrium dynamics of quantum many-body systems. It would be interesting to check the bounds we have obtained on a larger class of integrable and non-integrable models, and more importantly to explore if the transverse contraction can help in simulating the dynamics of higher dimensional systems.

While working on this paper, we found out about Ref. [44] discussing similar issues and suggesting a connection between the OE and the temporal entanglement, a connection we hope to have elucidated with our work.

We acknowledge the precious discussions on this and related subjects with Mari-Carmen

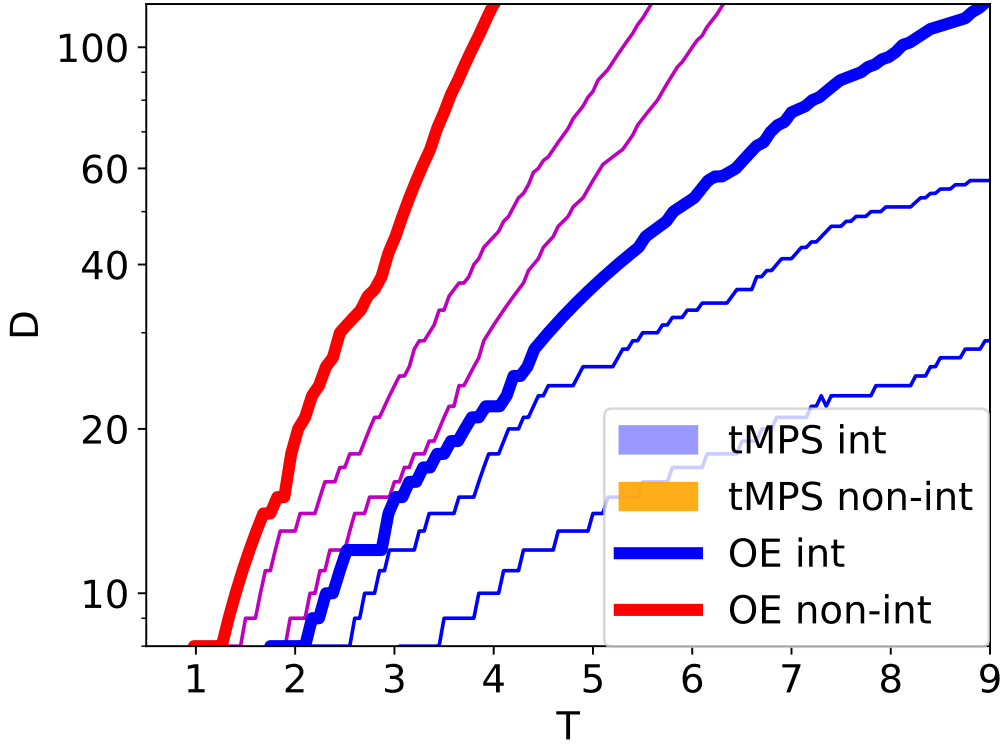


Figure 18.3: Left: Bond dimensions D obtained by imposing a truncation error of 10^{-4} in the singular value decomposition of the RTMs, as function of time (see main text). The shaded areas are delimited by the minimum and maximum D we found by varying the initial state. The thick solid lines represent the bond dimension curves for the operator entanglement (OE): they lie consistently above the corresponding ones for the tMPS. Blue colors denotes the integrable case (int), orange-red the non-integrable one (non-int).

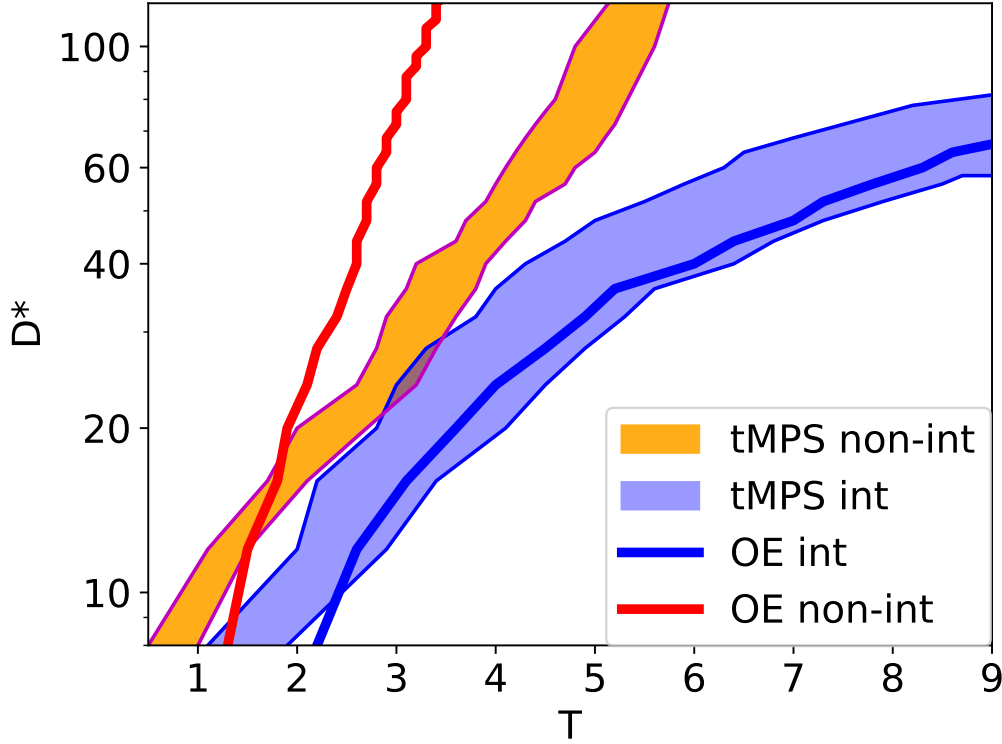


Figure 18.4: Bond dimensions D^* obtained by imposing a 10^{-4} fidelity for the tMPS $\langle L_{\mathcal{O}}|$, again the shaded area is delimited by the minimum and maximum bond dimension of the tMPS for a given initial state, and the thick solid lines denote the operator entanglement (OE) (blue: integrable case, red: non-integrable)

Bañuls, Miguel Frías-Pérez, Dimitry Abanin, Tomaž Prosen, Ignacio Cirac, Pavel Kos, Jan Schneider, Georgios Styliaris and Wei Tang. LT acknowledges support from the Proyecto Sinérgico CAM 2020 Y2020/TCS-6545 (NanoQuCo-CM), the CSIC Research Platform on Quantum Technologies PTI-001 and from Spanish projects PID2021-127968NB-I00 and TED2021-130552B-C22 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE and MCIN/AEI/10.13039/501100011033, respectively. CR acknowledges support from a “la Caixa” Foundation fellowship (ID 100010434, code LCF/BQ/DI21/11860031). This work has been financially supported by the Ministry of Economic Affairs and Digital Transformation of the Spanish Government through the QUANTUM ENIA project call – Quantum Spain project, and by the European Union through the Recovery, Transformation and Resilience Plan – NextGenerationEU within the framework of the Digital Spain 2026 Agenda.

18.5 Appendix

18.5.1 The algorithm

In this Appendix we describe the algorithms we employ to obtain the left and right tMPS encoding the contraction of the TN associated with the expectation value $\langle \mathcal{O}(T) | \mathcal{O}(T) \rangle$, where \mathcal{O} is a local (or a set of local) operator acting on one or few neighbouring sites. In practice, for the iterative methods we employ it is convenient to incorporate the operator(s) on one side of the network, as will become clear in the following. If we choose eg. to incorporate \mathcal{O} on the right side of the network, our algorithms allow to build $\langle L_{\mathcal{I}}|$ and $|R_{\mathcal{O}}\rangle$ for a given time T .

The basic building blocks of the TN are the MPO tensors representing the trotterized time evolution (here we employ the parametrization from [30]). For a given T which determines the

extension of the network in the temporal direction ($N_T = T/\delta t$, δt being the Trotter step), we contract them in columns to generate the transfer matrices encoding the rotated (space-like) evolution \mathbb{E}^T for the folded system of which $\langle L|$ and $|R\rangle$ are the leading left and right eigenvectors in the thermodynamic limit. Depending on what we want to construct, we can also include the local operator at the bottom of the transfer matrix, in that case we label it as $\mathbb{E}_{\mathcal{O}}^T$.

We have implemented both a power-method for extracting the leading eigenvectors of \mathbb{E}^T for a fixed time T , as well as an algorithm based on the strict causal cone of the network when dealing with local operators. Both our algorithms are small variations of those presented in [4, 10, 12]), the main difference being the cost-function we use to perform the truncation required in the various iterations: we project the tMPS matrices on the support of the largest singular values of the respective RTM, as will be explained in the following.

The *power method* (see Fig. 20.5(a)) works by repeatedly applying the transfer matrix to an initial guess tMPS of length N_T until convergence is reached. More specifically, we start from the left $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and right $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ vectors, and apply a column \mathbb{E}^T to the left and a $\mathbb{E}_{\mathcal{O}}^T$ to the right. At each step, the bond dimension of the tMPS increases by a factor d^2 , where d is the physical dimension of the system constituents, so in order to proceed we truncate following our prescription and take the updated $\langle L_{\mathbb{I}}|$ as input for the next step. With our parametrization of the MPO tensors, \mathbb{E}^T is symmetric in left-right legs, so we can use $\langle L_{\mathbb{I}}|$ also as the new $|R_{\mathbb{I}}\rangle$. Alternatively, the optimization for $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ simply requires an analogous step involving $\langle L_{\mathcal{O}}|$.

In order to determine whether the power method has converged, we calculate several entropies associated with the $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and $|R_{\mathcal{O}}\rangle$ vectors: most notably, the Von Neumann entropy $S_t^{VN}(L_{\mathbb{I}})$ and the generalized Rényi 2, which we define as $S_t^2(R_{\mathcal{O}}) = -\log \sum_n \lambda_n^2$, where λ_n^2 are the eigenvalues of the RTM $\mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathcal{O}}}$ ⁸. Convergence is reached at a given step i of the power method if, for the aforementioned entropies, one has $\sum_{t=0}^{N_T} (S_t^{i-1} - S_t^i)^2 < \epsilon$, which in our case we take to be $\epsilon = 10^{-6}$.

The *light-cone method* works in a slightly different way, as it allows to build the tMPS for a time T starting from the one for $T - 1$ with a single optimization (see Fig. 20.5(b)): Starting from $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ of a given length N_T , we apply a transfer matrix \mathbb{E}^{T+1} of length $N_T + 1$ to the left and a $\mathbb{E}_{\mathcal{O}}^T$ to the right, extending the network both in the time and space direction.

As for the power method, after each iteration the bond dimension of the tMPS grows by a factor d^2 , so that truncating is required to avoid an exponential computational cost. The truncated $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ are then used as starting point for the next iteration. The cone is thus built from the center moving outwards, assuming that the truncation of its edges does not spoil the causal structure induced by the local operator. The algorithm seems in any case to be quite stable, as we checked by piling up periodically a few layers of \mathbb{E}^T before truncating and verifying that the final result is the same as the one obtained when we truncate after each iteration.

In spite of their differences, both methods end up giving comparable results, as they share the same truncation procedure, which goes as follows: We focus on optimizing the overlap between $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and $|R_{\mathcal{O}}\rangle$, which includes the operator \mathcal{O} whose expectation value we are interested in. Since our aim is to find a low-rank approximation for the RTM $\mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathcal{O}}}$ at any bi-partition t and $T - t$, we focus on computing the eigenvalues of the matrix $(\mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathcal{O}}})^\dagger \mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathcal{O}}}$ depicted in Fig. 20.5(c), which can be associated with the squares of the relevant singular values. As usual in TN calculations, we can transform a global optimization problem into a local one by making use of gauge transformation [45, 46]. In particular, we start by bringing both L and R vectors individually to a standard orthogonal gauge, starting from the side of the initial state

⁸This particular choice ensures that the RTM is symmetric, which guarantees that its diagonalization is not an ill-posed problem.

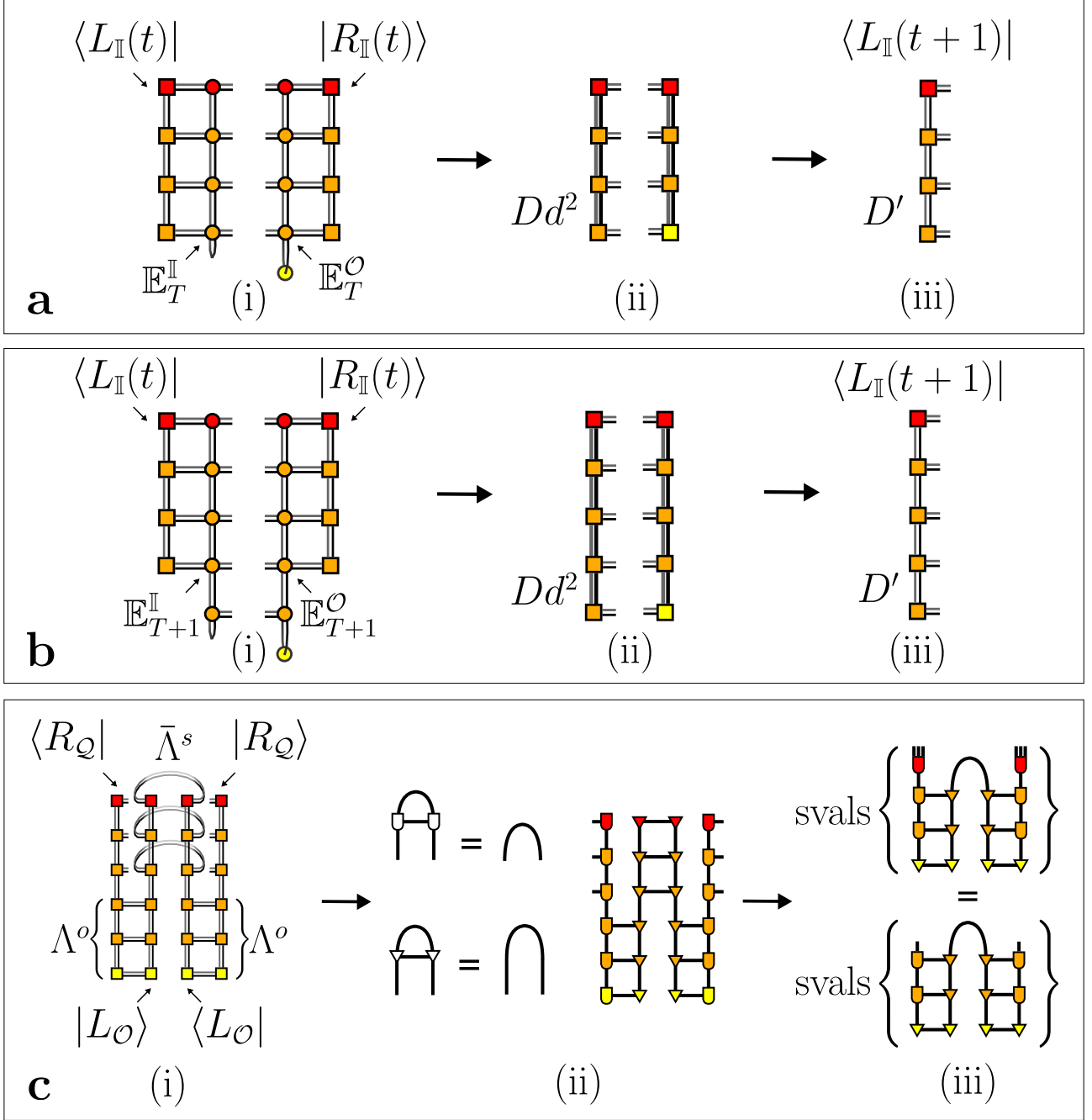


Figure 18.5: Illustrations of the methods used for building the tMPS. **(a)** Power method **(b)** Light cone method **(c)** The matrix involved in our low-rank approximation of \mathcal{T} and the role of the gauge transformation in our calculation.

(Fig. 20.5(c)). This gauge transformation allows to incorporate the $\bar{\Lambda}_{L,R}^s(t)$ factors towards the operator side, so that we don't need to compute them explicitly as their contraction up to $t < T$ now reduces to an identity. We now only need to contract the bottom environments and project them over their largest D' singular values at each t , thus optimizing the overlap between the two tMPS. The advantage of keeping the local operators on either the left or the right side of the network is that, while we optimize with respect to $\langle \mathcal{O} | \mathcal{O} \rangle$, we always end up with a new $\langle L_{\mathbb{I}} | (| R_{\mathbb{I}} \rangle)$ which does not include the operator itself. This tMPS, which is related rather to the time evolution of the state, thus encodes the influence functional of the system, and can be used as starting point for the next iteration of our algorithms.

18.5.2 Estimate of the bond dimension for a given fidelity

In order to estimate the bond dimension required to obtain our tMPS with a given fidelity, we follow a procedure similar to the one employed in [19] to estimate the truncation error in our tMPS compared to an exact result, which in our case corresponds to the evolution obtained with the maximum bond dimension we can afford, $D_{\max} (\simeq 1000)$. The largest T we consider for this estimation are thus restricted to times for which D_{\max} does not induce any sizeable truncation error with respect to the exact (Trotterized) dynamics. If we work with normalized MPS, the error induced by truncating the operator MPS to bond dimension D is encoded in the fidelity $F = |\langle \psi_{\mathcal{O}}^{D_{\max}}(t) | \psi_{\mathcal{O}}^D(t) \rangle|$, where $|\psi_{\mathcal{O}}^D(t)\rangle$ represents the time-evolved state up to time t truncated at every time step to bond dimension D . By fixing a given accuracy ϵ , we thus identify the maximum time for which $F \geq 1 - \epsilon$. As a consequence, by repeating the above procedure for different D we can identify a curve $D^*(t)$ along which the truncation error is kept roughly constant at a value ϵ .

We then extract a similar curve $D^*(t)$ for the tMPS encoding the semi-infinite left (right) TN $\langle L_{\mathcal{O}} | (| R_{\mathcal{O}} \rangle)$. The truncation here is based on projecting onto the largest singular values of each RTM, as described above. The largest D_{\max} we can afford is again used as the exact reference. The overlap of the two tMPS measures the effects of the truncation error $F = |\langle L_{\mathcal{O}}^{D_{\max}} | L_{\mathcal{O}}^D \rangle|$. Once more by fixing such an error to a given threshold ϵ we can identify the corresponding $D^*(t)$ for the tMPS. The typical behavior of the resulting curves for F can be seen in Fig. 20.6.

18.5.3 Comparison with other approaches

As previously mentioned, our optimization prescription is a relatively small modification with respect to already existing algorithms, which allows nevertheless to make a clearer connection with the underlying structures and estimate the computational complexity associated with the calculation of time-dependent expectation values. It might nevertheless be interesting to check how this method compares with other prescriptions employed in the literature.

The most straightforward optimization procedure when dealing with (t)MPS after applying a column of MPO is to truncate using the standard canonical forms for the left and right vectors separately. In our framework, with left-right symmetry of the Hamiltonian and translational invariance, this would amount to an optimization of $\langle L |$ with its conjugate $| L \rangle$ instead of $| R \rangle$. The operation of complex conjugation here can be seen as a partial transpose involving the forwards and backwards leg of the tMPS (basically an insertion of a series of swap operators), see Fig. 20.7 (a), since (not considering additional complications in case the initial state is complex) it basically amounts to an exchange $U(t) \leftrightarrow U^\dagger(t)$ of the time evolution operators. Due to the non-trivial structure induced by this, the projector structure of the TN is lost even if no operators are present, so that one obtains a non-trivial bond dimension even when $\mathcal{O} = \mathbb{I}$.

Instead of optimizing with respect to a single operator inserted at the edge of the MPO

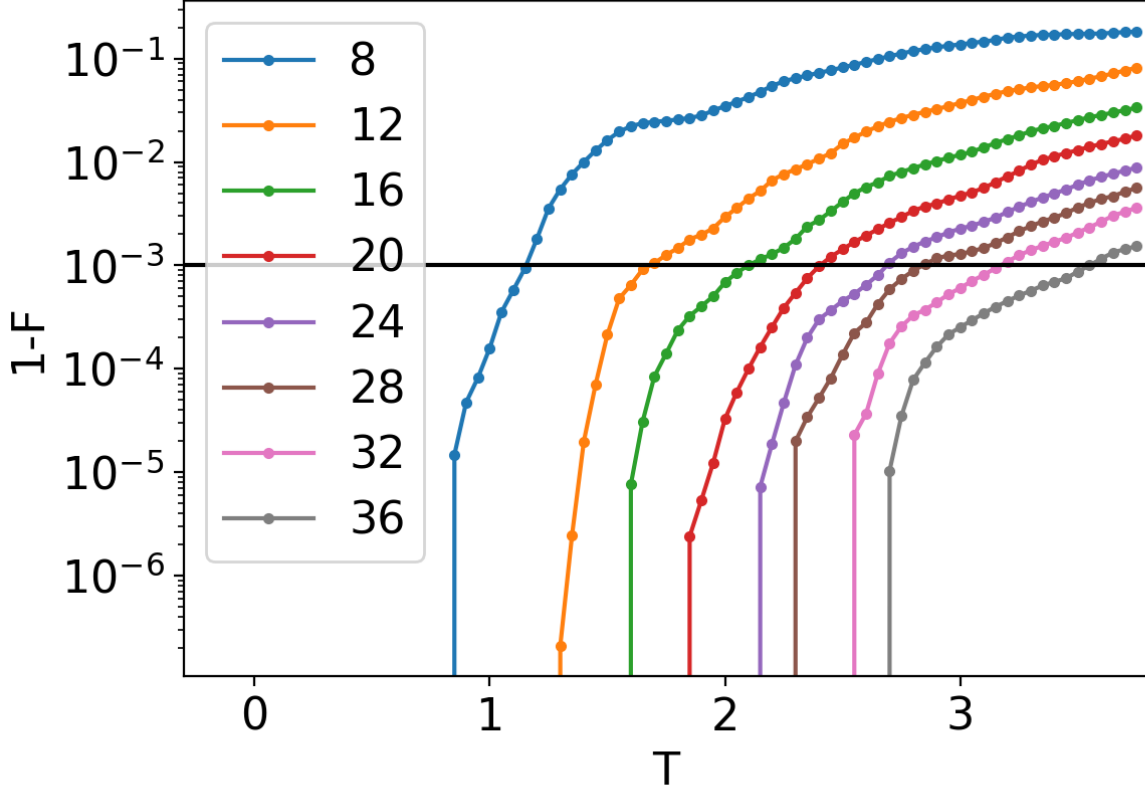


Figure 18.6: Fidelity for overlap $\langle L_{\mathcal{O}}^{D_{\max}} | L_{\mathcal{O}}^D | L_{\mathcal{O}}^{D_{\max}} | L_{\mathcal{O}}^D \rangle$ for different bond dimensions, as function of time, for the integrable case with starting state $|+\rangle$. After fixing a threshold ϵ we can extract the required bond dimension to give a faithful approximation of $|L_{\mathcal{O}}^D\rangle$.

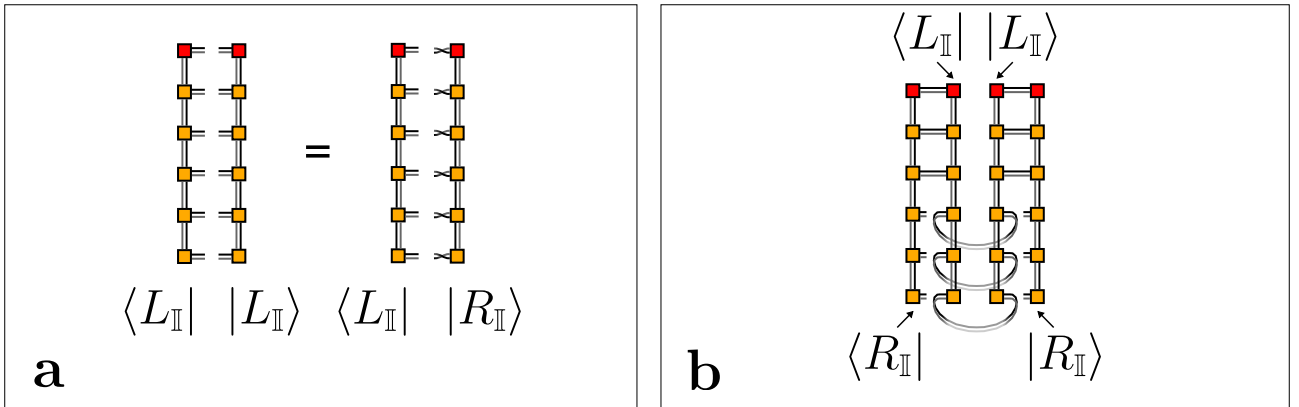


Figure 18.7: **(a)** A possible method for truncating the tMPS relies on the optimization of the overlap $\langle L|L|L|L \rangle$, where in the symmetric case $|L\rangle$ can be related by a partial transpose to the vector $|R\rangle$. **(b)** Alternatively, it is also possible to consider the RTM starting from the side of the initial state, a procedure which can give a nontrivial SVD spectrum even in the absence of a local operator.

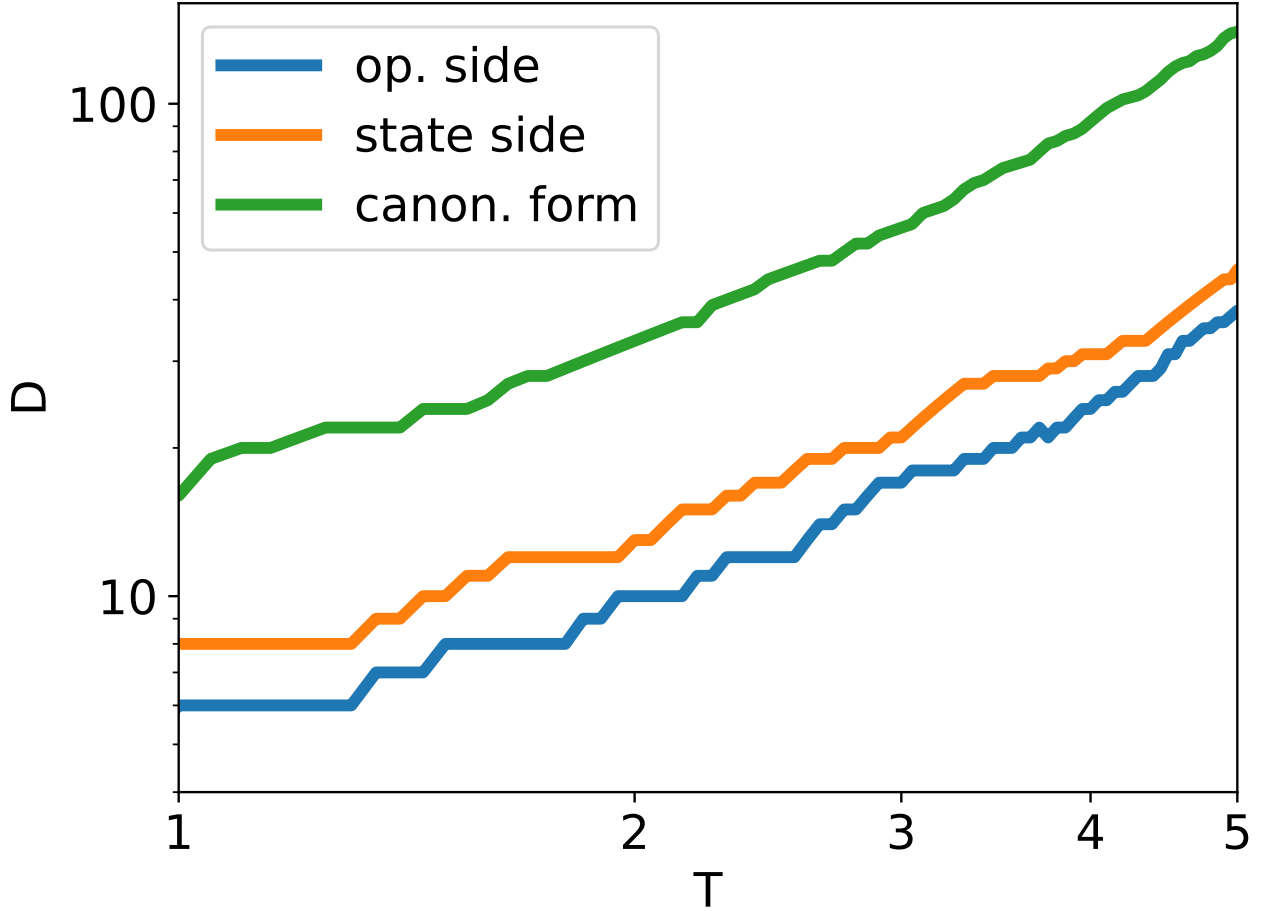


Figure 18.8: Bond dimensions of the tMPS as function of time obtained with different methods (as described in the text): our method (blue line), the optimization starting from the side of the initial state (orange) and the canonical form (green), imposing the same truncation error ($\epsilon_{trunc} = 10^{-6}$). Our method leads to the smallest bond dimension.

column, the conjugation would imply acting on the whole column, ie. to perform these transpositions at each timestep.

Another possible strategy, which has been suggested in [6, 10] involves bringing the tMPS to canonical form starting from the bottom side and then doing a sweep from the initial state optimizing $\langle L_{\mathbb{I}} | R_{\mathbb{I}} | L_{\mathbb{I}} | R_{\mathbb{I}} \rangle$, Fig. 20.7 (b). In this case, while the spectrum of the RTM is trivial since no operator is present, the singular value decomposition is not: this can be seen again as due to an insertion of swap operators which generate a non-trivial spectrum, which however cannot be directly related to the causal structure generated by a local operator. In this case, one is unable to give a priori a statement on the maximum rank required by the algorithm.

In spite of this difference, remarkably this latter method returns comparable bond dimensions to the ones obtained with our method when $\mathcal{O} = \sigma_x$, see Fig. 20.8. On the other hand, the optimization using the standard canonical forms requires a larger bond dimension, although the behavior of the various algorithms is comparable: this confirms our expectation that the scaling of our truncation based on the overlap $\langle L | R | L | R \rangle$ is the same as the one based on $\langle L | L | L | L \rangle$.

Part XIV

Typical Theory: Another Explanations

Part XV

Articles about Potential Applications

Part XVI

Very Special Effects

Part XVII

Other Experiments

Part XVIII

Другие темы

19 Другие темы

20 On temporal entropy and the complexity of computing the expectation value of local operators after a quench by Carignano, Ramos Marimón

Abstract

We study the computational complexity of simulating the time-dependent expectation value of a local operator in a one-dimensional quantum system by using temporal matrix product states, and argue that it is intimately related to that of encoding temporal transition matrices and their partial traces. In particular, we show that we can upper-bound the rank of these reduced transition matrices by the one of the Heisenberg evolution of local operators, thus making connection between two apparently different quantities, the temporal entanglement and the local operator entanglement. As a result, whenever the local operator entanglement grows slower than linearly in time, we show that computing time-dependent expectation values of local operators using temporal matrix product states is likely advantageous with respect to computing the same quantities using standard matrix product states techniques.

20.1 Introduction.

The complexity of simulating quantum-many body systems increases exponentially with the number of its constituents. Over the last decades, the development of tensor networks (TN) techniques has however helped in gaining better insight on the equilibrium properties of many-body quantum systems. It is now understood that, at equilibrium, quantum complexity is mostly related to the amount of entanglement, and we have been able to design TN Ansätze that can encode the structure of typical equilibrium states.

Out of equilibrium, the situation is different: even in the simplest protocol, such as e.g. quantum quenches, correlations spread over large distances, quickly producing robustly entangled states [1]. Standard TN techniques such as those based on matrix product states (MPS) thus struggle to cope with the fast growth of entanglement and, as a result, their cost increases exponentially with the duration of the evolution [2]: this is often referred to as “entanglement barrier” in the literature [3].

This fact is a consequence of trying to represent the full quantum state during the evolution. The situation might change if we focus on a local description of the state, by trying to describe the evolution of the expectation value of local operators. In principle, this is a much simpler task, and several approaches along these lines have been proposed [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12]. However, except for few studies on integrable systems [13, 14], there has been no systematic understanding of the real computational cost of such approaches and thus no concrete understanding on the complexity of simulating the evolution of local observables.

In this work we make a step in this direction. We consider the evolution under a local Hamiltonian of the expectation value of a local observable and follow the inspirational papers [4, 5, 6, 10, 12]. These algorithms rely still on a matrix product state, which is however now defined in time, making it a *temporal* MPS (tMPS) along a Keldysh contour [6, 15]. It has recently been noticed that such tMPS encodes the influence matrix of the system [16] that

drives the evolution of a region of the full system, and thus provides the systematic way of translating the global evolution into a local one [11, 17, 18]. In specific cases, such tMPS can be described with small bond dimension, though this is not always the case [4, 5].

Here we provide some theoretical backup to these numerical observations. Our main result in this direction is to bound the complexity of the tMPS with the one of encoding the time evolution of operators in the Heisenberg picture. Such complexity is encoded in the so called “operator entanglement” (OE) [19, 20], which is expected to grow at most logarithmically in time for integrable systems, whereas it increases linearly for non-integrable systems [3, 21, 22, 23]. The key to obtaining this result is a slightly modified version of the algorithms introduced in [4, 6], which, as shown in the following, allows to build a direct connection between the two quantities.

Whenever the OE grows logarithmically in time, we can thus show that the tMPS bond dimension is bounded by a polynomial growth in time. On the other hand, when the OE grows linearly in time, our bound on the tMPS bond dimension is exponential. While this does not rule out that there might be specific cases in which the tMPS might still have a small bond dimension and thus provide a computational advantage, see e.g. [24, 22, 23], we believe that these are but fortuitous exceptions to the general rule, and indeed in the scenarios we presented for this case as well as others in the literature [10] we find that such bound is saturated.

20.2 Setup

Given a lattice system, we consider the complexity of computing the evolution of the expectation value of a local operator after a quench. We start from a product state $|\psi_0\rangle$ and a local Hamiltonian H . The system starts to evolve and it is described by the state $|\psi(T)\rangle = \exp\{(-iHT)\} |\psi_0\rangle \equiv U(T) |\psi_0\rangle$. In general, the entanglement entropy of the state increases linearly in time [1] and standard time-dependent MPS simulations become exponentially expensive [25, 26] (for recent reviews see also [27, 28]). Here, rather than evolving the state, we focus on the evolution of the expectation value of a local operator acting on two neighbouring sites ⁹,

$$\langle \mathcal{OQ} | \mathcal{OQ} \rangle (T) = \langle \psi(T) | \mathcal{O}_i \mathcal{Q}_{i+1} | \psi(T) \rangle. \quad (20.1)$$

Approximating $U(T)$ by a sequence of short evolutions $U(\delta t)^{N_T}$ with $N_T = T/\delta t$ and using a Trotter expansion, this quantity is encoded in the contraction of a two dimensional TN containing order $N_x \times N_T$ tensors [29, 30], see Fig. 20.1(a). Furthermore, one can fold the network following [4, 5], leading to a double-layer structure as shown in Fig. 20.1 (b). Given the Trotter approximation, the time evolution of a local operator has an exact causal cone obtained by cancelling all the unitary gates that are contracted with their respective Hermitian conjugates. As a result, the network can be simplified and acquires the triangular shape shown in Fig. 20.1 (c) [10, 12].

20.2.1 Compressing the tMPS

Being two-dimensional, the best contraction path for this TN is not a priori obvious. a possible strategy is to identify two tMPS defining the contraction of the left and the right half of the system (see Fig.20.2), and interpret the triangular network as the scalar product between the two, $\langle \mathcal{OQ} | \mathcal{OQ} \rangle (t) = \langle L_{\mathcal{O}} | R_{\mathcal{Q}} | L_{\mathcal{O}} | R_{\mathcal{Q}} \rangle$ ¹⁰. The identification is purely formal, since the bond dimension of the individual tMPS tensors can grow exponentially with the number of

⁹This can be easily generalized to an arbitrary number of sites as long as it is finite.

¹⁰Notice that this definition differs slightly from those of previous works, since the specific operators \mathcal{OQ} are included in the definition of the tMPS. By construction, if we chose as two-site operators the identity operator, $\mathcal{OQ} = \mathbb{I}$ we obtain that $\langle L_{\mathbb{I}} | R_{\mathbb{I}} | L_{\mathbb{I}} | R_{\mathbb{I}} \rangle = \langle \psi(t) | \psi(t) | \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$.

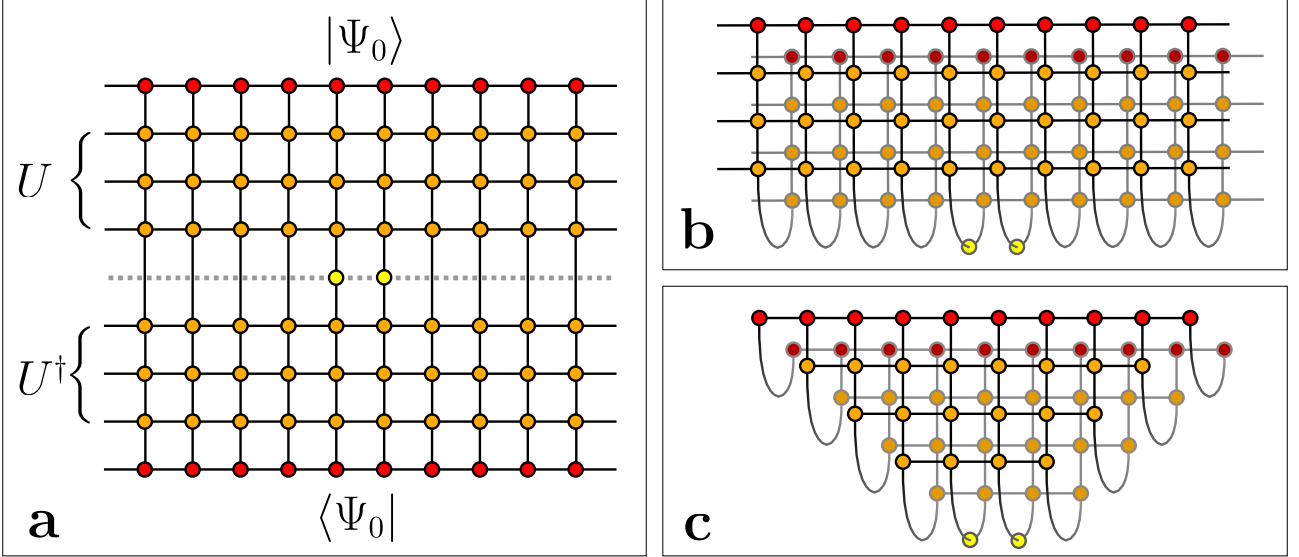


Figure 20.1: (a) The time-dependent expectation value of a local operator acting on a one-dimensional system in the Keldysh representation (b) can be described by a double sheet 2D TN contraction. (c) Upon using a Trotter approximation and the locality of the operator, it simplifies to a triangular TN.

time steps. The construction of the tMPS thus only makes sense if one can show that, at least for specific scenarios, its bond dimension increases mildly with the number of time steps.

The task is therefore to identify the relevant rank of the tMPS matrices and compress them on their support. We know that the tMPS allows to compute correlation functions of the type $\langle \mathcal{OP}(t) \cdots \mathcal{QR}(t') \rangle$ for an arbitrary number of insertions of local operators at different times between 0 and T . Following the standard DMRG recipe [26], this requires having a faithful representation of all reduced transition matrices (RTM) $\mathcal{T}_t^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}}$, defined as

$$\mathcal{T}_t^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}} = \text{tr}_{T-t} [\mathcal{T}^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}}] , \quad \mathcal{T}^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}} = \frac{|R_{\mathcal{Q}}\rangle \langle L_{\mathcal{O}}|}{\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{Q}}\rangle \langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{Q}}\rangle} , \quad (20.2)$$

which can be seen as generalizations of reduced density matrices.

The graphical representation of these objects is found in Fig. 20.2(b). Interestingly, such transition matrices have also been considered in the context of holography: the properties of the equivalent in the field theory of the transition matrices described here have a geometrical interpretation in the bulk [31, 32, 32, 33, 34]. It is then the rank of such RTMs which dictates the rank of the tMPS matrices, rather than the temporal entropy that was previously considered [4, 6, 10, 12].

Generalizing the DMRG prescription, the bond dimension of the tMPS tensors should allow to obtain a low-rank approximation of the reduced transition matrix $\mathcal{T}_t^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}}$, $\forall t \in 0 \cdots T$, with the desired precision.

The reduced transition matrices are complex-valued and, for reflection invariant Hamiltonians, whenever $\mathcal{Q} = \mathcal{O}$ they are symmetric. As a result, their low rank approximation is better defined in terms of their singular values, so we will project the tMPS bond dimension at time t on the largest singular values of $\mathcal{T}_t^{L\mathcal{O}|R\mathcal{Q}}$.

Following [6], we now define $\Lambda^s(t)$ and $\Lambda^o(t)$ respectively as the contractions of the overlap $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{Q}}\rangle \langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{Q}}\rangle$ until t (the top part of the network contraction, including the initial state) and below t (the bottom part, containing the operator), respectively, see Fig. 20.2. We also define $\bar{\Lambda}_L^s(t)$, $\bar{\Lambda}_R^s(t)$ as the contraction up to t of the network obtained by contracting $\langle L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}\rangle \langle L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}\rangle$

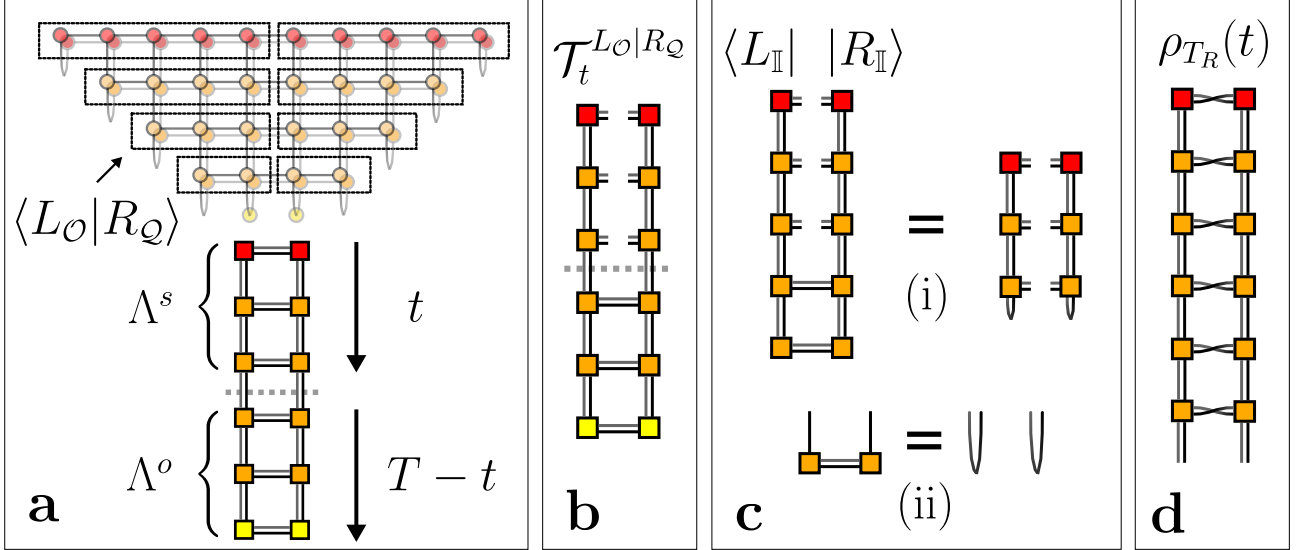


Figure 20.2: **(a)**: The triangular TN can be contracted from the sides, identifying a left $\langle L_{\mathcal{O}}|$ and a right $|R_{\mathcal{Q}}\rangle$ tMPS. The upper-most tensors of the temporal MPS are dictated by the initial state, while the lower-most ones by the choice of the operator. **(b)** The reduced transition matrix. **(c)** In the absence of operators, the folded tensors of the time evolution resolve to identities. **(d)** The partial transpose of the time-evolved left-right density matrix of the system, where forwards and backwards legs are swapped.

and $\langle R_{\mathcal{Q}}|R_{\mathcal{Q}}|R_{\mathcal{Q}}|R_{\mathcal{Q}}\rangle$ ¹¹.

With these definitions, we have that

$$\mathcal{T}_t^{L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{Q}}} \simeq \sqrt{\bar{\Lambda}_L^s(t)} \Lambda^o(t) \sqrt{\bar{\Lambda}_R^s(t)}, \quad (20.3)$$

where we use the similarity symbol to indicate that the two operators share the same singular values. For reflection invariant systems, such as those we analyze here, one has $\bar{\Lambda}_R^s(t) = \bar{\Lambda}_L^s(t)$, thus our central result reads

$$\mathcal{R} \left(\mathcal{T}_t^{L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{Q}}} \right) \leq \min \left\{ \mathcal{R} \left(\bar{\Lambda}_L^s(t) \right), \mathcal{R} \left(\Lambda^o(t) \right) \right\}, \quad (20.4)$$

where \mathcal{R} denotes the rank of a given matrix. This equation is at the basis of our analysis.

Since for each choice of \mathcal{O} and \mathcal{Q} we obtain a different tMPS representation or $\langle L_{\mathcal{O}}(t)|$ and $|R_{\mathcal{Q}}(t)\rangle$, we define the cost of the algorithm as the cost of simulating the operators that require the highest bond dimension.

20.2.2 The rank of the reduced transition matrices

Whenever $\mathcal{O} = \mathcal{Q} = \mathbb{I}$, the transition matrices $\mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathbb{I}}}$ for all t are projectors. As a result the states $|L_{\mathbb{I}}\rangle$ and $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ consist of trivial singlets at the virtual level, as sketched in Fig. 20.2 (c), implying that the tMPS matrices have always bond dimension 1, for all t . In order to obtain non-trivial tMPS we thus include the operators in the construction of the states.

From the previous definitions it follows that

$$\Lambda^o(t) = U(t) (\mathcal{O} \otimes \mathcal{Q}) U(t)^\dagger, \quad (20.5)$$

meaning that $\Lambda^o(t)$ exactly encodes the Heisenberg evolution of the initially localized operator $\mathcal{O}_i \mathcal{Q}_{i+1}$, while

$$\Lambda^s(t) = \rho(t) = U(t) |\psi_0\rangle \langle \psi_0| U(t)^\dagger, \quad (20.6)$$

¹¹For reflection-invariant Hamiltonians, $|L_{\mathcal{O}}\rangle$ differs from $|R_{\mathcal{O}}\rangle$ only by a complex conjugation

where $\rho(t)$ is the time-evolved density matrix of the initial state. Finally, for Hamiltonians that are invariant under reflections with respect to the center of the chain,

$$\bar{\Lambda}_L^s(t) = \bar{\Lambda}_R^s(t) = \rho(t)_{T_R}, \quad (20.7)$$

where T_R stands for the partial transpose on the semi-infinite right part of the system. Since we are evolving a pure state, there are known relations between $\rho_{T_R}(t)$ and $\rho(t)$ [35], and in particular we know that $\mathcal{R}(\bar{\Lambda}_R^s(t)) = \mathcal{R}(\Lambda_R^s(t))$ [36, 37].

Having identified the elements composing the RTMs in Eq. (20.3), we can now use their physical properties together with Eq. (20.4) to identify some useful bound on the rank of the tMPS. A first scenario one can consider is that of a local quench. In this case, it is well known that the entropy of the evolved state only increases logarithmically with time, and as a result the rank of $\Lambda^s(t)$ increases at most polynomially [38, 39], thus using Eq. (20.4) we have

$$\mathcal{R}(\mathcal{T}_t^{L \circ |R_Q}) \leq T^\alpha \quad \forall t \in [0, T]. \quad (20.8)$$

Such a case is perhaps not particularly interesting, since a similar polynomial cost is obtained also by using standard MPS algorithms.

We thus turn to the more interesting scenario of a global quench. Here we know that $\mathcal{R}(\Lambda^s(t))$ increases exponentially with T , as already mentioned. If now $\mathcal{R}(\Lambda^o(t))$ only increases polynomially with T , we have

$$\mathcal{R}(\Lambda^o(t)) \leq t^\alpha \Rightarrow \mathcal{R}(\mathcal{T}_t^{L \circ |R_Q}) \leq T^\alpha \quad \forall t, \quad (20.9)$$

and the temporal MPS strategy provides a polynomial algorithm to compute the out-of-equilibrium dynamics of local observables, as already anticipated in [10, 12]. In the literature, it is conjectured (and checked in several scenarios) that in the case of integrable systems the entanglement of local operators only grows logarithmically [19, 20, 3, 22, 23], implying that the rank of $\Lambda^o(t)$ only increases polynomially with T as required in Eq. (20.9). As a result, if the conjecture is correct, the tMPS provides an efficient method to characterise the time evolution of local operators for integrable systems.

Since generically the rank of $\Lambda^o(t)$ is expected to grow exponentially with t , we expect that

$$\mathcal{R}(\mathcal{T}_t^{L \circ |R_Q}) \leq \alpha \exp(\beta), \quad (20.10)$$

with α and $\beta > 0$ model-dependent constants. In this case, there is no guarantee that the tMPS provides an efficient compression for the problem at hand.

20.2.3 Relation to other definitions of temporal entanglement

The basic ingredient in our formalism are the transition matrices defined in Eq. 20.2, and the generalized entanglement related to their rank. It is worth noting that these quantities differ from the definition of temporal entanglement recently proposed in the literature [4, 6, 10, 12, 13], which is built through density matrices obtained individually from either the left or right vectors (ie. $\rho_R \sim |R\rangle \langle R|$, $\rho_L \sim |L\rangle \langle L|$).

This can be most easily seen in the case of a reflection-symmetric problem: here one has $|R\rangle = |\bar{L}\rangle$, so that the two definitions are connected by a nontrivial complex conjugation on the left state, which can be seen as a partial transpose operation acting on the legs of the folded transition matrix (see Fig. 20.2 (d)). This global unitary operation (the tensor product of swap gates on every physical leg, ie. at each time site) acting on one side of the transition matrix can change the entanglement properties of the objects involved, so that a clear connection between

the two quantities is not evident and would definitely require a deeper investigation in the future.

Another aspect which has been recently pointed out is that the traditional definition of temporal entanglement can depend on the gauge chosen to define the transverse transfer matrix, and can be made arbitrarily small by using such gauge freedom. As a result, being able to accurately represent $|R\rangle$ and $\langle L|$ does not guarantee obtaining a good precision on an expectation value $\langle O(T)|O(T)\rangle = \langle L|O|R\rangle$, since the leading Schmidt vectors can be orthogonal to such overlap [40]. Thus, as we argued, for our intent of determining the complexity of simulating expectation value of local operators, the use of the generalized entanglement proposed here is the appropriate object to consider, close in spirit to the concept of biorthonormal truncation basis, which is already well-established for non-hermitian DMRG problems [41, 42, 40].

20.3 Numerical results.

We now report the numerical evidence to support our claims. We consider a transverse field Ising Hamiltonian

$$H(g, h) = - \sum_i \left[\sigma_x^i \sigma_x^{i+1} + g \sigma_z^i + h \sigma_x^i \right], \quad (20.11)$$

where $\sigma_{x,z}$ are Pauli matrices. We perform a second-order Trotter expansion of the time evolution operator and cast it into a matrix product operator (MPO) following [30], with a timestep $\delta t = 0.05$. For our examples we consider two cases: an integrable one for $g = 0.5, h = 0$, and a non-integrable one $g = -1.05, h = 0.5$. We consider different initial product states, namely $|0\rangle = (1, 0)^{\otimes N_x}$, $|+\rangle = (1, 1)/\sqrt{2}^{\otimes N_x}$ and $|r\rangle = (1, i)/\sqrt{2}^{\otimes N_x}$. The time evolution is performed by the variant of the standard folding algorithms we have described, exploiting the causal-cone of the network [4, 6, 10, 12] and relying on a low-rank approximation of the RTMs defined in Eq. (20.2).

As in previous approaches [10, 12] we iteratively construct the left and right vectors $\langle L_O(T)|$ and $|R_Q(T)\rangle$ starting from $\langle L_O(T-1)|$ and $|R_Q(T-1)\rangle$ by absorbing a new column of MPOs into them. These MPOs are obtained by contracting a column of the original TN and they thus represent transfer matrices \mathbb{E}^T evolving states of a time-slice in space, a *rotated* version of the standard evolution in time. The bond dimension of the corresponding MPS increases, and we then keep it under control by projecting onto the largest D singular values of $\mathcal{T}_t^{L_O|R_Q}$ for every bi-partition of the system into t and $T-t$. Further details about the algorithm and accurate comparison with other prescriptions in the literature are presented in the accompanying Supplementary Material.

In the case of the Ising model, we found the operator with the largest bond dimension defined at most on two sites to be a single-site σ_x . In the following we will focus on optimizing with respect to it ¹².

We start by considering the bond dimension necessary to keep the truncation error above a threshold $\epsilon = 10^{-4}$ in the SVD spectrum of the reduced transition matrices, and compare them with those obtained imposing the same truncation on the Heisenberg evolution for the operator $O(t)$, which entails the evolution of the vectorized local operator under the Hamiltonian $H \otimes \mathbb{I} - \mathbb{I} \otimes H$, resulting in the MPS, $|\psi_O(t)\rangle$. The results are shown in Fig. 20.3, where we can observe that, as expected: 1) the behavior is different in the integrable and non-integrable cases, 2) the bond dimension necessary to correctly describe the RTM are always below the ones necessary to describe the Heisenberg evolution of the operator.

We note however that in order to estimate the computational cost of simulating the expectation value of local operators with a finite precision using a tMPS we should determine the

¹²For operators with known small bond dimension such as σ_z or $\sigma_x \sigma_x$, our algorithm saturates at the expected fixed value of D [43].

bond dimension that is required to keep the distance in norm $||\langle L_{\mathcal{O}}| - \langle L_{\mathcal{O}}^D| ||^2$ constant, where $\langle L_{\mathcal{O}}^D|$ is the truncation of the tMPS $\langle L_{\mathcal{O}}|$ to a given bond dimension D . Using the reasoning in Ref. [39], the term to consider would then be the overlap $\langle L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D|L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D\rangle$, which is upper bounded by the sum of the norm of the residuals discarded in the truncation process.

So far we have just provided a bound on the overlap $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}\rangle$ which, even for reflection-invariant systems and considering the symmetric case $\mathcal{O} = \mathcal{Q}$, differs from $\langle L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D|L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D\rangle$ by the absence of a complex conjugation. However, the two quantities are related, since $\langle L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D|L_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}^D\rangle$ can be obtained from $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}\rangle$ by evolving $|R_{\mathcal{O}}\rangle$ with one layer of local unitaries, representing the partial transpose (swapping the bra with the ket legs). Such an operation does not modify the rank of each state, but it reduces the overlap between the two, so that a shift in the resulting singular values can be expected.

As a result, the computational cost required for simulating the expectation value of a local operator with a finite precision is constantly offset from that of computing $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}\rangle$, the latter being upper-bounded by the cost of the Heisenberg evolution of the operator. The scaling in time of the cost to maintain a constant error in local observables is the same as the one of $\langle L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}|L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}\rangle$ (see also the discussion in the Supplementary Material).

We verify this explicitly by following a procedure similar to the one proposed in [19] to estimate the truncation error in our tMPS compared to an exact result. The resulting bond dimensions for a fixed truncation error are reported in Fig. 20.4. For the integrable case, we find a polynomial increase, consistent with the behavior of the OE. Different initial states require different bond dimensions for a faithful description, though the growth follows the same power law. For the non-integrable case, on the other hand, the OE requires an exponentially growing bond dimension for a faithful description, and the tMPS bond dimension follows the same behavior, consistent with our result.

20.4 Conclusions.

We have provided a new connection between two separate concepts, temporal entanglement and the operator entanglement. In particular, we have shown that the rank of the RTM necessary to compute the temporal entanglement is upper-bounded by the rank of the OE of a bi-partition. As a result, the scaling in time of the computational cost of simulating the evolution of a local observable with constant error is upper-bounded by the scaling of the OE, even though the exact value of the cost can be offset by a constant value whose origin has been discussed in detail. Our presented algorithm yields the most efficient performance observed thus far, with a marginal advantage over previous approaches.

As a result, we can claim that whenever the OE only grows logarithmically, using a tMPS for simulating the evolution of a local observable is the best choice in terms of computational cost and scales only polynomially with time, whereas in the generic case the entanglement barrier cannot be circumvented by using tMPS. On the other hand, a linear growth of the OE does not necessarily imply that the tMPS cannot provide an efficient compression, see eg. [24, 22, 23]. The transverse contraction methods discussed here would then be useful even in those cases.

Our results are a step towards understanding the cost of simulating the out-of-equilibrium dynamics of quantum many-body systems. It would be interesting to check the bounds we have obtained on a larger class of integrable and non-integrable models, and more importantly to explore if the transverse contraction can help in simulating the dynamics of higher dimensional systems.

While working on this paper, we found out about Ref. [44] discussing similar issues and suggesting a connection between the OE and the temporal entanglement, a connection we hope to have elucidated with our work.

We acknowledge the precious discussions on this and related subjects with Mari-Carmen

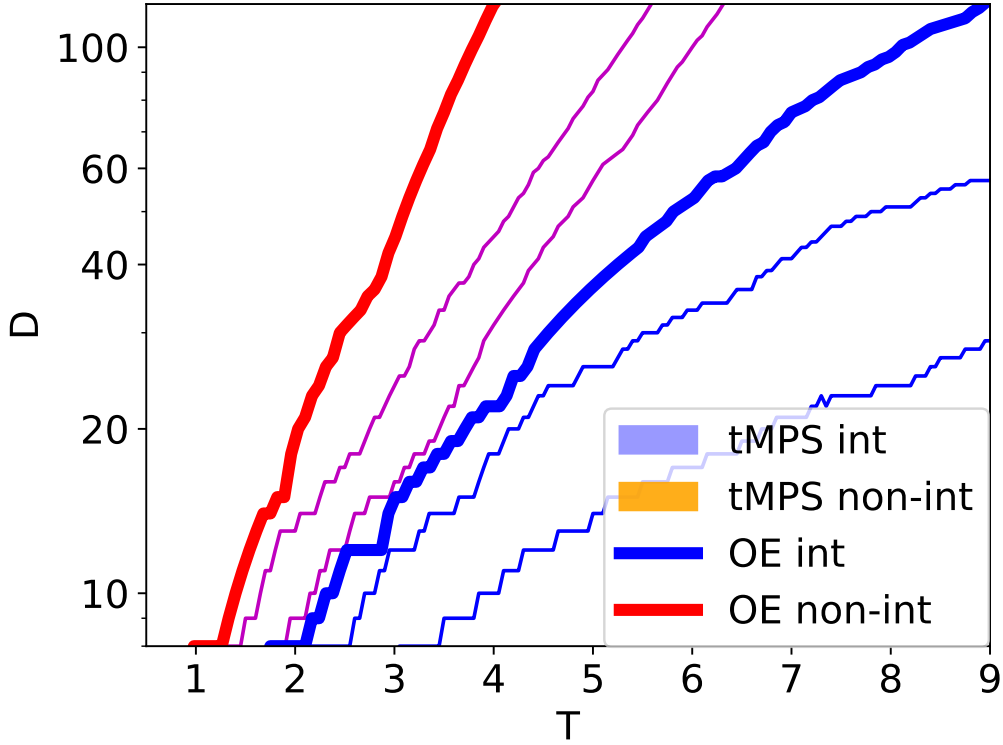


Figure 20.3: Left: Bond dimensions D obtained by imposing a truncation error of 10^{-4} in the singular value decomposition of the RTMs, as function of time (see main text). The shaded areas are delimited by the minimum and maximum D we found by varying the initial state. The thick solid lines represent the bond dimension curves for the operator entanglement (OE): they lie consistently above the corresponding ones for the tMPS. Blue colors denotes the integrable case (int), orange-red the non-integrable one (non-int).

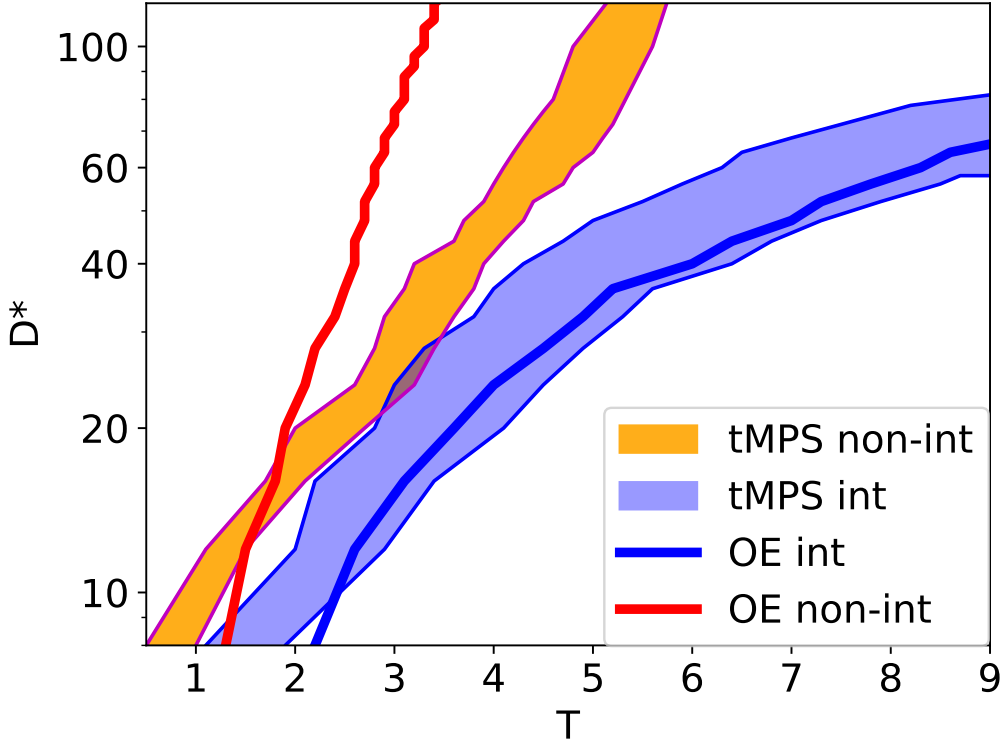


Figure 20.4: Bond dimensions D^* obtained by imposing a 10^{-4} fidelity for the tMPS $\langle L_{\mathcal{O}}|$, again the shaded area is delimited by the minimum and maximum bond dimension of the tMPS for a given initial state, and the thick solid lines denote the operator entanglement (OE) (blue: integrable case, red: non-integrable)

Bañuls, Miguel Frías-Pérez, Dmitry Abanin, Tomaž Prosen, Ignacio Cirac, Pavel Kos, Jan Schneider, Georgios Styliaris and Wei Tang. LT acknowledges support from the Proyecto Sinérgico CAM 2020 Y2020/TCS-6545 (NanoQuCo-CM), the CSIC Research Platform on Quantum Technologies PTI-001 and from Spanish projects PID2021-127968NB-I00 and TED2021-130552B-C22 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE and MCIN/AEI/10.13039/501100011033, respectively. CR acknowledges support from a “la Caixa” Foundation fellowship (ID 100010434, code LCF/BQ/DI21/11860031). This work has been financially supported by the Ministry of Economic Affairs and Digital Transformation of the Spanish Government through the QUANTUM ENIA project call – Quantum Spain project, and by the European Union through the Recovery, Transformation and Resilience Plan – NextGenerationEU within the framework of the Digital Spain 2026 Agenda.

20.5 Appendix

20.5.1 The algorithm

In this Appendix we describe the algorithms we employ to obtain the left and right tMPS encoding the contraction of the TN associated with the expectation value $\langle \mathcal{O}(T) | \mathcal{O}(T) \rangle$, where \mathcal{O} is a local (or a set of local) operator acting on one or few neighbouring sites. In practice, for the iterative methods we employ it is convenient to incorporate the operator(s) on one side of the network, as will become clear in the following. If we choose eg. to incorporate \mathcal{O} on the right side of the network, our algorithms allow to build $\langle L_T |$ and $| R_{\mathcal{O}} \rangle$ for a given time T .

The basic building blocks of the TN are the MPO tensors representing the trotterized time evolution (here we employ the parametrization from [30]). For a given T which determines the

extension of the network in the temporal direction ($N_T = T/\delta t$, δt being the Trotter step), we contract them in columns to generate the transfer matrices encoding the rotated (space-like) evolution \mathbb{E}^T for the folded system of which $\langle L|$ and $|R\rangle$ are the leading left and right eigenvectors in the thermodynamic limit. Depending on what we want to construct, we can also include the local operator at the bottom of the transfer matrix, in that case we label it as $\mathbb{E}_{\mathcal{O}}^T$.

We have implemented both a power-method for extracting the leading eigenvectors of \mathbb{E}^T for a fixed time T , as well as an algorithm based on the strict causal cone of the network when dealing with local operators. Both our algorithms are small variations of those presented in [4, 10, 12]), the main difference being the cost-function we use to perform the truncation required in the various iterations: we project the tMPS matrices on the support of the largest singular values of the respective RTM, as will be explained in the following.

The *power method* (see Fig. 20.5(a)) works by repeatedly applying the transfer matrix to an initial guess tMPS of length N_T until convergence is reached. More specifically, we start from the left $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and right $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ vectors, and apply a column \mathbb{E}^T to the left and a $\mathbb{E}_{\mathcal{O}}^T$ to the right. At each step, the bond dimension of the tMPS increases by a factor d^2 , where d is the physical dimension of the system constituents, so in order to proceed we truncate following our prescription and take the updated $\langle L_{\mathbb{I}}|$ as input for the next step. With our parametrization of the MPO tensors, \mathbb{E}^T is symmetric in left-right legs, so we can use $\langle L_{\mathbb{I}}|$ also as the new $|R_{\mathbb{I}}\rangle$. Alternatively, the optimization for $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ simply requires an analogous step involving $\langle L_{\mathcal{O}}|$.

In order to determine whether the power method has converged, we calculate several entropies associated with the $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and $|R_{\mathcal{O}}\rangle$ vectors: most notably, the Von Neumann entropy $S_t^{VN}(L_{\mathbb{I}})$ and the generalized Rényi 2, which we define as $S_t^2(R_{\mathcal{O}}) = -\log \sum_n \lambda_n^2$, where λ_n^2 are the eigenvalues of the RTM $\mathcal{T}_t^{L_{\mathcal{O}}|R_{\mathcal{O}}}$ ¹³. Convergence is reached at a given step i of the power method if, for the aforementioned entropies, one has $\sum_{t=0}^{N_T} (S_t^{i-1} - S_t^i)^2 < \epsilon$, which in our case we take to be $\epsilon = 10^{-6}$.

The *light-cone method* works in a slightly different way, as it allows to build the tMPS for a time T starting from the one for $T - 1$ with a single optimization (see Fig. 20.5(b)): Starting from $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ of a given length N_T , we apply a transfer matrix \mathbb{E}^{T+1} of length $N_T + 1$ to the left and a $\mathbb{E}_{\mathcal{O}}^T$ to the right, extending the network both in the time and space direction.

As for the power method, after each iteration the bond dimension of the tMPS grows by a factor d^2 , so that truncating is required to avoid an exponential computational cost. The truncated $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and $|R_{\mathbb{I}}\rangle$ are then used as starting point for the next iteration. The cone is thus built from the center moving outwards, assuming that the truncation of its edges does not spoil the causal structure induced by the local operator. The algorithm seems in any case to be quite stable, as we checked by piling up periodically a few layers of \mathbb{E}^T before truncating and verifying that the final result is the same as the one obtained when we truncate after each iteration.

In spite of their differences, both methods end up giving comparable results, as they share the same truncation procedure, which goes as follows: We focus on optimizing the overlap between $\langle L_{\mathbb{I}}|$ and $|R_{\mathcal{O}}\rangle$, which includes the operator \mathcal{O} whose expectation value we are interested in. Since our aim is to find a low-rank approximation for the RTM $\mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathcal{O}}}$ at any bi-partition t and $T - t$, we focus on computing the eigenvalues of the matrix $(\mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathcal{O}}})^\dagger \mathcal{T}_t^{L_{\mathbb{I}}|R_{\mathcal{O}}}$ depicted in Fig. 20.5(c), which can be associated with the squares of the relevant singular values. As usual in TN calculations, we can transform a global optimization problem into a local one by making use of gauge transformation [45, 46]. In particular, we start by bringing both L and R vectors individually to a standard orthogonal gauge, starting from the side of the initial state

¹³This particular choice ensures that the RTM is symmetric, which guarantees that its diagonalization is not an ill-posed problem.

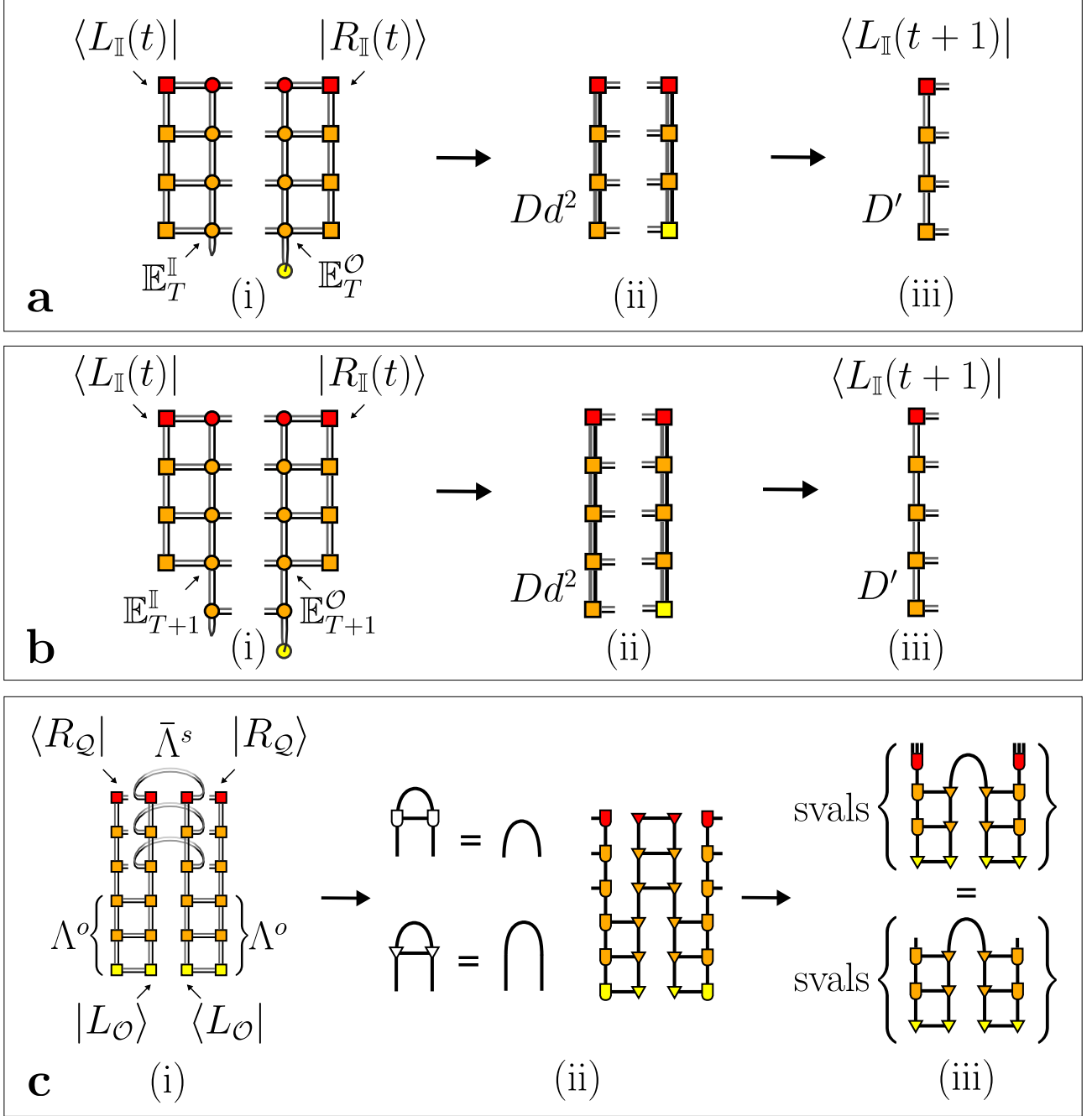


Figure 20.5: Illustrations of the methods used for building the tMPS. (a) Power method (b) Light cone method (c) The matrix involved in our low-rank approximation of \mathcal{T} and the role of the gauge transformation in our calculation.

(Fig. 20.5(c)). This gauge transformation allows to incorporate the $\bar{\Lambda}_{L,R}^s(t)$ factors towards the operator side, so that we don't need to compute them explicitly as their contraction up to $t < T$ now reduces to an identity. We now only need to contract the bottom environments and project them over their largest D' singular values at each t , thus optimizing the overlap between the two tMPS. The advantage of keeping the local operators on either the left or the right side of the network is that, while we optimize with respect to $\langle \mathcal{O} | \mathcal{O} \rangle$, we always end up with a new $\langle L_{\mathbb{I}} | (| R_{\mathbb{I}} \rangle)$ which does not include the operator itself. This tMPS, which is related rather to the time evolution of the state, thus encodes the influence functional of the system, and can be used as starting point for the next iteration of our algorithms.

20.5.2 Estimate of the bond dimension for a given fidelity

In order to estimate the bond dimension required to obtain our tMPS with a given fidelity, we follow a procedure similar to the one employed in [19] to estimate the truncation error in our tMPS compared to an exact result, which in our case corresponds to the evolution obtained with the maximum bond dimension we can afford, $D_{\max} (\simeq 1000)$. The largest T we consider for this estimation are thus restricted to times for which D_{\max} does not induce any sizeable truncation error with respect to the exact (Trotterized) dynamics. If we work with normalized MPS, the error induced by truncating the operator MPS to bond dimension D is encoded in the fidelity $F = |\langle \psi_{\mathcal{O}}^{D_{\max}}(t) | \psi_{\mathcal{O}}^D(t) \rangle|^2$, where $|\psi_{\mathcal{O}}^D(t)\rangle$ represents the time-evolved state up to time t truncated at every time step to bond dimension D . By fixing a given accuracy ϵ , we thus identify the maximum time for which $F \geq 1 - \epsilon$. As a consequence, by repeating the above procedure for different D we can identify a curve $D^*(t)$ along which the truncation error is kept roughly constant at a value ϵ .

We then extract a similar curve $D^*(t)$ for the tMPS encoding the semi-infinite left (right) TN $\langle L_{\mathcal{O}} | (| R_{\mathcal{O}} \rangle)$. The truncation here is based on projecting onto the largest singular values of each RTM, as described above. The largest D_{\max} we can afford is again used as the exact reference. The overlap of the two tMPS measures the effects of the truncation error $F = |\langle L_{\mathcal{O}}^{D_{\max}} | L_{\mathcal{O}}^D \rangle|^2$. Once more by fixing such an error to a given threshold ϵ we can identify the corresponding $D^*(t)$ for the tMPS. The typical behavior of the resulting curves for F can be seen in Fig. 20.6.

20.5.3 Comparison with other approaches

As previously mentioned, our optimization prescription is a relatively small modification with respect to already existing algorithms, which allows nevertheless to make a clearer connection with the underlying structures and estimate the computational complexity associated with the calculation of time-dependent expectation values. It might nevertheless be interesting to check how this method compares with other prescriptions employed in the literature.

The most straightforward optimization procedure when dealing with (t)MPS after applying a column of MPO is to truncate using the standard canonical forms for the left and right vectors separately. In our framework, with left-right symmetry of the Hamiltonian and translational invariance, this would amount to an optimization of $\langle L |$ with its conjugate $| L \rangle$ instead of $| R \rangle$. The operation of complex conjugation here can be seen as a partial transpose involving the forwards and backwards leg of the tMPS (basically an insertion of a series of swap operators), see Fig. 20.7 (a), since (not considering additional complications in case the initial state is complex) it basically amounts to an exchange $U(t) \leftrightarrow U^\dagger(t)$ of the time evolution operators. Due to the non-trivial structure induced by this, the projector structure of the TN is lost even if no operators are present, so that one obtains a non-trivial bond dimension even when $\mathcal{O} = \mathbb{I}$.

Instead of optimizing with respect to a single operator inserted at the edge of the MPO

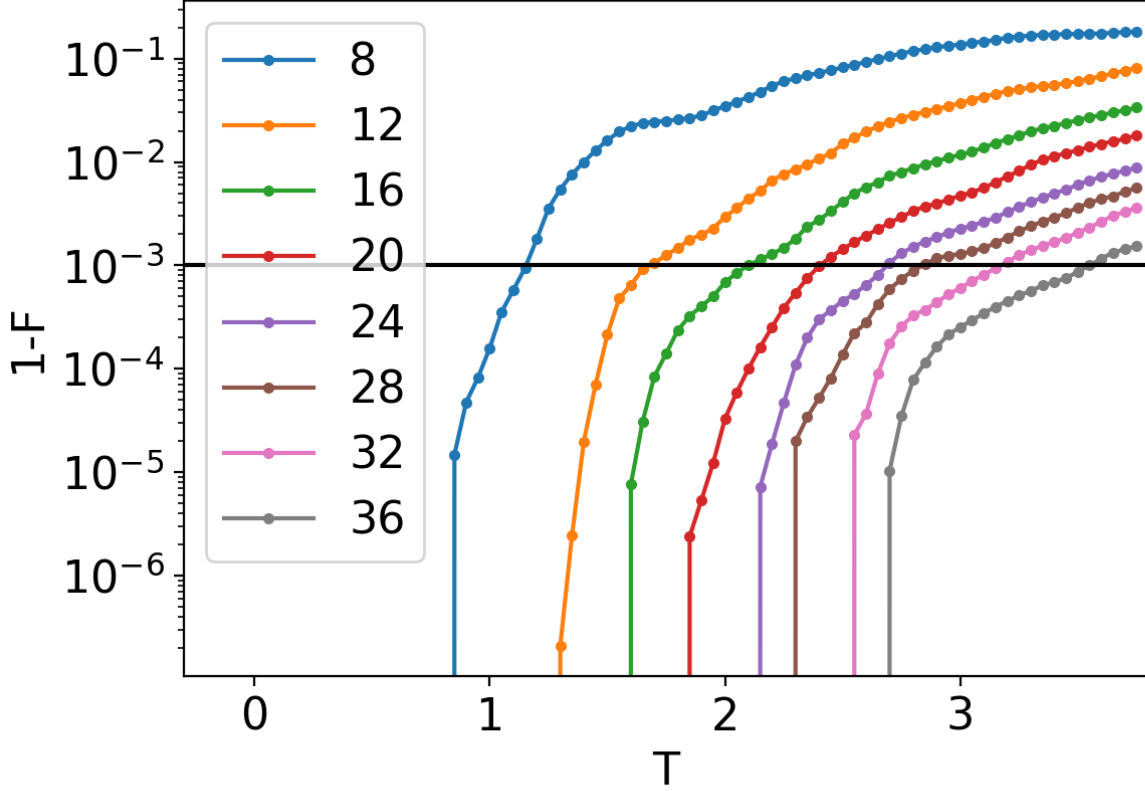


Figure 20.6: Fidelity for overlap $\langle L_{\mathcal{O}}^{D_{\max}} | L_{\mathcal{O}}^D | L_{\mathcal{O}}^{D_{\max}} | L_{\mathcal{O}}^D \rangle$ for different bond dimensions, as function of time, for the integrable case with starting state $|+\rangle$. After fixing a threshold ϵ we can extract the required bond dimension to give a faithful approximation of $|L_{\mathcal{O}}^D\rangle$.

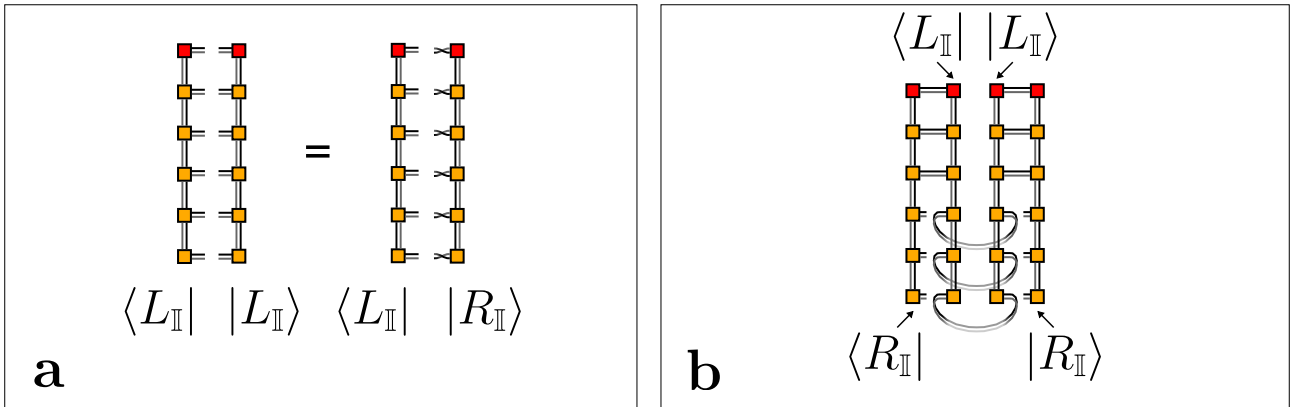


Figure 20.7: **(a)** A possible method for truncating the tMPS relies on the optimization of the overlap $\langle L|L|L|L\rangle$, where in the symmetric case $|L\rangle$ can be related by a partial transpose to the vector $|R\rangle$. **(b)** Alternatively, it is also possible to consider the RTM starting from the side of the initial state, a procedure which can give a nontrivial SVD spectrum even in the absence of a local operator.

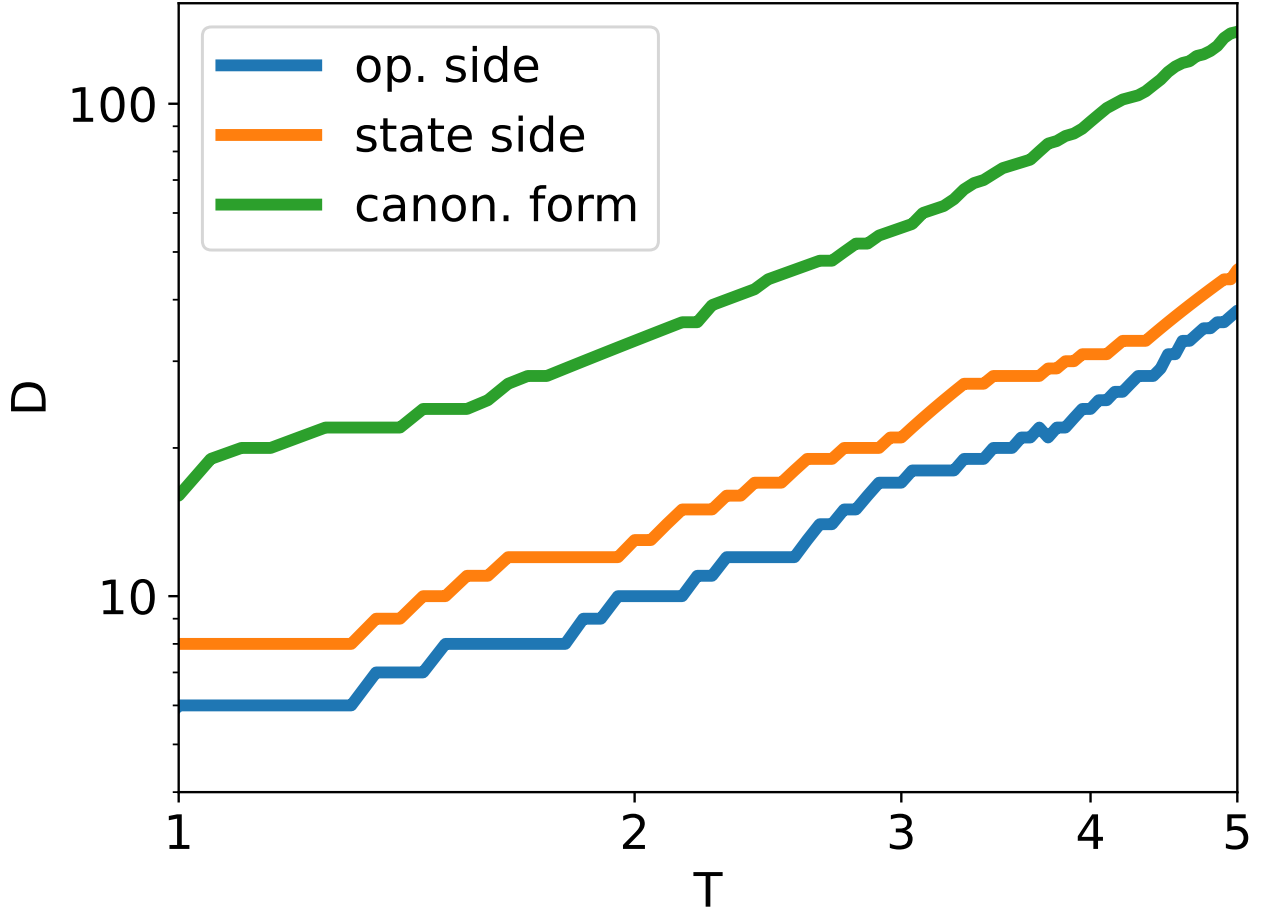


Figure 20.8: Bond dimensions of the tMPS as function of time obtained with different methods (as described in the text): our method (blue line), the optimization starting from the side of the initial state (orange) and the canonical form (green), imposing the same truncation error ($\epsilon_{trunc} = 10^{-6}$). Our method leads to the smallest bond dimension.

column, the conjugation would imply acting on the whole column, ie. to perform these transpositions at each timestep.

Another possible strategy, which has been suggested in [6, 10] involves bringing the tMPS to canonical form starting from the bottom side and then doing a sweep from the initial state optimizing $\langle L_{\mathbb{I}} | R_{\mathbb{I}} | L_{\mathbb{I}} | R_{\mathbb{I}} \rangle$, Fig. 20.7 (b). In this case, while the spectrum of the RTM is trivial since no operator is present, the singular value decomposition is not: this can be seen again as due to an insertion of swap operators which generate a non-trivial spectrum, which however cannot be directly related to the causal structure generated by a local operator. In this case, one is unable to give a priori a statement on the maximum rank required by the algorithm.

In spite of this difference, remarkably this latter method returns comparable bond dimensions to the ones obtained with our method when $\mathcal{O} = \sigma_x$, see Fig. 20.8. On the other hand, the optimization using the standard canonical forms requires a larger bond dimension, although the behavior of the various algorithms is comparable: this confirms our expectation that the scaling of our truncation based on the overlap $\langle L | R | L | R \rangle$ is the same as the one based on $\langle L | L | L | L \rangle$.

Part XIX

Appendix

A Введение

A.1 Общая мотивация

Обсудим всю мотивацию, которая позволит нам познать предмет без проблем.

A.1.1 Множество приложений

Укажем приложения
(потом раскрою)

A.1.2 Польза в плане развития как профессионала

(потом раскрою)

A.1.3 Польза в плане саморазвития

(потом раскрою)

A.1.4 Удивительные факты

(потом раскрою)

A.2 Мотивация к разделам

(потом раскрою)

A.3 Мышление профессионала в

(потом раскрою)

A.3.1 Актуальнейшие приложения

A.3.2 Построение с нуля

(потом раскрою, еще я не профессионал, а вопрос этот самый профессиональный)

A.3.3 Способы догадаться до всех главных идей

незаменимая часть нормального понимания предмета.
(потом раскрою)

A.4 Мышление для эффективного изучения

Осудим, какое мышление наиболее эффективное для усвоение предмета.

A.4.1 Способы изучения предмета

(потом раскрою)

A.4.2 Необходимые темы для

(потом раскрою)

A.4.3 Дополнительные темы для

(потом раскрою)

A.5 Acknowledgements

Currently, no one except me has worked on the sections of this note (with the exception of sections taken from books).

A.6 Literature

A.6.1 Основная

Основная литература

Нельсон Чанг Квантовые вычисления и квантовая информация

Большая подробная книга, которую буду периодически смотреть, а когда минимальный уровень будет, может, отдельные месяцы и буду изучать.

Teiko Heinosaari, Mário Ziman, The Mathematical Language of Quantum Theory
тоже говорят, что хорошая книга.

А. Китаев, А.Шень, М. Вялый К53 Классические и квантовые вычисления. - М.: МЦНМО, ЧеРо, 1999. - 192 с. ISBN 5-900916-35-9

Выглядит как прекрасное введение в предмет, с нее скорее всего и начну, не такая большая и многое там написано!

Books With Many Solved Problems

Вводная, обзорная

https://www.youtube.com/watch?v=xjlGL4Mvq7A&ab_channel=Qiskit

Милое, обзорное видео для обзора истории.

Основная методическая

Лекции и презентации

Филиппова

<https://mipt.ru/science/labs/QIT-lab/for-students.php>

Отличный материала для начала, лучше - не знаю.

Холево А.С. Квантовые системы, каналы, информация. М.: МЦНМО, 2010.

Филиппов рекомендует, значит, она тоже хорошая. Скорее всего после минимального уровня выгрузжу ее всю! гуглится. <https://www.mccme.ru/free-books/holevo-quantum.pdf>

Основная профессиональная

А. С. Холево, Квантовая вероятность и квантовая статистика, Итоги науки и техн. Сер. Современ. пробл. мат. Фундам. направления, 1991, том 83, 5–132

130 страниц очень содержательной теории, скорее всего по этой книге многие и учатся. В 1ю часть добавил, мне показалось, что книга очень очень содержательная.

A.6.2 Extra Literature

Дополнительная методическая

Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. М.: Мир, 2009.

3. Холево А.С. Математические основы квантовой информатики. М.: МИАН, 2018.

Филиппов рекомендует.

4. Белоусов Ю.М., Манько В.И. Матрица плотности. Представления и применения в статистической механике. Ч. 1. М.: МФТИ, 2004; Ч. 2. М.: МФТИ, 2005.

Филиппов рекомендует.

5. Стиб В.-Х., Харди Й. Задачи и их решения в квантовых вычислениях и квантовой теории информации. М., Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2007.

Филиппов рекомендует.

6. Бройер Х.-П., Петруччоне Ф. Теория открытых квантовых систем. М., Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010.

Филиппов рекомендует.

7. Кашурников В.А., Красавин А.В. Численные методы квантовой статистики. М.: Физматлит, 2010.

Филиппов рекомендует.

Статьи о разных явлениях

[1] Aharonov, Yakir and Albert, David Z. and Vaidman, Lev

Оказывается, можно измерить спин частицы раньше 100, если он на самом деле равен 1/2. удивительно, мб за 2 дня это бы я и понял, но не до этого. Потом впишу в теорию.

Дополнительная по теории

[2] Aharonov, Yakir. and Rohrlich, Daniel Quantum paradoxes quantum theory for the perplexed

Книга от профессионалов, во многом популярная вроде. В открытом доступе нет, в библиотеку нужно идти. Вроде много очень интересных тем обсуждается, по идее многое можно очень фундаментального понять по ней.

В помощь

Статьи о теоретических методах

О приложениях

A.7 Обзор

(потом раскрою)

A.7.1 предмет в двух словах

Обсудим, что из себя представляет предмет наиболее кратко, выделяя самую суть.

появление Предмет в нашей картине мира

один подход

второй подход

один большой раздел

такой-то набор следствий

A.7.2 Итоговые формулы и закономерности

A.7.3 обзор теоретических подходов

такие-то есть, такие полезные, такие - нет.

A.7.4 Результаты

A.7.5 Преимущества квантовой информации

Более плотно можно передавать информацию

(тут докажу, что используя перепутанность, можно плотнее собирать инфу. пока не зашло док-во)

A.7.6 Обзор дальнейших развитий

A.8 Связи с другими науками

Обсудим связи с разделами
(потом раскрою)

A.9 Описание записи

A.9.1 Общее описание записи

Общие особенности записи

Часто используемые обозначения квантовых элементов и схем

Для унитарных операторов часто используются определенные условные обозначения, полезные при проектировании квантовых схем. Для удобства читателей многие из них приведены ниже. Строки и столбцы унитарных преобразований нумеруются слева направо и сверху вниз как $00\dots 0, 00\dots 1, \dots, 11\dots 1$; самый нижний провод соответствует самому младшему биту. Обратите внимание, что $e^{i\pi/4}$ есть корень квадратный из i , поэтому элемент $\pi/8$ представляет собой корень квадратный из фазового элемента, который, в свою очередь, является корнем квадратным из элемента Паули Z .

А.9.2 Особенности глав и разделов

Первая часть про предмет в двух словах

Вторая часть

Часть про приложения

какие вообще приложения я разбирал?

А.9.3 Обозначения и константы

А.10 Головоломки квантовой информации

Обсудим в порядке интересности задачи и вопросы

А.10.1 Бытовые головоломки

Каковы фундаментальные принципы квантовых вычислений и квантовой информации?

(см. нельсон чанг)

Как фундаментальные принципы квантовых вычислений развивались?

(см. нельсон чанг)

Где фундаментальные принципы квантовых вычислений можно применить?

(см. нельсон чанг)

А.10.2 Типичные вопросы

Что такое кубит

(типичный вопрос)

А.10.3 Вопросы о квантовых схемах

(их много, см. Нильсон Чанг)

А.10.4 Принципиальные головоломки

А.10.5 Головоломки о деталях

А.11 Короткий исторический обзор

Обсудим вкратце историю развития...

В Математические дополнения

(потом укажу, где что нужно. заготовки по Нильсону Чангу)

В.1 Некоторые методы линейной алгебры

Частичное транспонирование

$$X : \mathcal{H}^{AB} \rightarrow \mathcal{H}^{AB}, \quad X^\Gamma \equiv X^{\top_B} \equiv \sum_{i,j=1}^{d_B} I \otimes |j\rangle\langle i| \cdot X \cdot I \otimes |j\rangle\langle i|$$

$$X : \mathcal{H}^{AB} \rightarrow \mathcal{H}^{AB}, \quad X^\top \equiv X^{\top_A} \equiv \sum_{i,j=1}^{d_A} |j\rangle\langle i| \otimes I \cdot X \cdot |j\rangle\langle i| \otimes I$$

Figure B.1: Частичное транспонирование

(??? примеры в случае больших размерностей???)

Некоторые свойства следов

$$\text{tr} [X^A] = \sum_k \langle k^A | X^A | k^A \rangle \quad - \text{это число}$$

$$\text{tr} [X^B] = \sum_j \langle j^B | X^B | j^B \rangle \quad - \text{это число}$$

$$\text{tr} [X^{AB}] = \sum_{k,j} \langle k^A | \otimes \langle j^B | \cdot X^{AB} \cdot | k^A \rangle \otimes | j^B \rangle \quad - \text{это число}$$

(пример бы потом про это написать ниже...)

$$\text{tr}_B [X^{AB}] = \sum_j I^A \otimes \langle j^B | \cdot X^{AB} \cdot I^A \otimes | j^B \rangle \quad - \text{оператор, действующий в } H^A.$$

(пример бы потом про это написать ниже...)

$$\text{tr}_A [X^{AB}] = \sum_k \langle k^A | \otimes I^B \cdot X^{AB} \cdot | k^A \rangle \otimes I^B \quad - \text{оператор, действующий в } H^B.$$

(?? примеры)

Под ним можно переставлять местами операторы (?)

Сумму можно выносить из-под следа

(тут примеры, как это используем, на самом деле достаточно часто)

С Некоторые методы программирования

(по идее тут много будет симуляций, так что мне понадобится код.)

Некоторые свойства тензорных произведений

Очень важно для доказательств теорем и преобразований формул владеть преобразованиями тензорного произведения.

(тут их список будет по актуальности)

С.1 Некоторые сведения из теории вероятностей

С.2 Теория групп

П2.1 Основные определения 741 П2.1.1 Образующие 742 П2.1.2 Циклические группы 743 П2.1.3 Смежные классы 743 П2.2 Представления 744 П2.2.1 Эквивалентность и приводимость 744 П2.2.2 Ортогональность 745 П2.2.3 Регулярное представление 746 П2.2.4 Преобразования Фурье 747

С.3 Теорема Соловея—Китаева

С.4 Теория чисел

П4.1 Начальные сведения 758 П4.2 Арифметика остатков и алгоритм Евклида 759 П4.3 Сведение разложения на простые множители к нахождению порядка элемента 767 П4.4 Цепные дроби 769 Приложение 5. Криптография с открытым

References

- [1] Aharonov, Yakir, Albert, David Z., and Vaidman, Lev: *How the result of a measurement of a component of the spin of a spin-1/2 particle can turn out to be 100*. Physical review letters, 60(14):1351–1354, 1988, ISSN 0031-9007.
- [2] Aharonov, Yakir. and Rohrlich, Daniel: *Quantum paradoxes: quantum theory for the perplexed*. Wiley-VCH, Weinheim, 2005, ISBN 3-527-40391-4.

From The Physical Implementation of Quantum Computation by DiVincenzo

References

- [1] J.I. Cirac and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **74**, 4091 (1995); T. Pellizzari, S.A. Gardiner, J.I. Cirac, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **75**, 3788 (1995); C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano, and D. J. Wineland, “Demonstration of a fundamental quantum logic gate,” Phys. Rev. Lett. **75**, 4714 (1995); A. Sorensen and K. Molmer, Phys. Rev. Lett. **82**, 1971 (1999); S. Schneider, D. F. V. James, and G. J. Milburn, “Method of quantum computation with ‘hot’ trapped ions,” quant-ph/9808012.
- [2] Q. A. Turchette, C. J. Hood, W. Lange, H. Mabuchi, and H. J. Kimble, “Measurement of conditional phase shifts for quantum logic,” Phys. Rev. Lett. **75**, 4710 (1995); A. Imamoglu, D. D. Awschalom, G. Burkard, D. P. DiVincenzo, D. Loss, M. Sherwin, and A. Small, Phys. Rev. Lett. **83**, 4204 (1999) (quant-ph/9904096).
- [3] N. Gershenfeld and I. Chuang, Science **275**, 350 (1997); D. Cory, A. Fahmy, and T. Havel, Proc. Nat. Acad. Sci. **94** (5), 1634 (1997).
- [4] B. Kane, Nature **393**, 133 (1998); R. Vrijen *et al.*, “Electron spin resonance transistors for quantum computing in silicon-germanium heterostructures,” Phys. Rev. A, in press (quant-ph/9905096).
- [5] D. Averin, Solid State Commun. **105**, 659 (1998); A. Shnirman, G. Schön, and Z. Hermin, Phys. Rev. Lett. **79**, 2371 (1997); J. E. Mooij, T. P. Orlando, L. Levitov, L. Tian, C. H. van der Wal, and S. Lloyd, Science **285**, 1036 (1999).
- [6] P. M. Platzman and M. I. Dykman, Science **284**, 1967 (1999).
- [7] D. Loss and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998) (cond-mat/9701055); M. Sherwin, A. Imamoglu, and T. Montroy, “Quantum computation with quantum dots and terahertz cavity quantum electrodynamics,” Phys. Rev. A **60**, 3508 (1999) (quant-ph/9903065); T. Tanamoto, Phys. Rev. A **61**, 022305 (2000) (quant-ph/9902031).
- [8] D. Deutsch Proc. R. Soc. London A **400**, 97 (1985); **425**, 73 (1989).
- [9] R. P. Feynman, Int. J. Theor. Phys. **21**, 467 (1982); Found. Phys. **16**, 507 (1986). See also *Feynman Lectures on Computation*, eds. A. J. G. Hey and R. Allen (Perseus Press, 1996).
- [10] R. Beals, H. Buhrman, R. Cleve, M. Mosca, and R. de Wolf, “Quantum lower bounds by polynomials,” *Proc. of the 39th Annual Symposium on the Foundations of Computer Science* (IEEE Press, Los Alamitos, 1998), p. 352; quant-ph/9802049.

- [11] Y. Ozhigov, “Quantum computer cannot speed up iterated applications of a black box,” quant-ph/9712051; B. Terhal, PhD Thesis, University of Amsterdam, 1999.
- [12] L. K. Grover, “Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack,” Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997).
- [13] P. W. Shor, “Polynomial time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer,” SIAM J. Comput. **26**, 1484 (1997), and references therein.
- [14] D. P. DiVincenzo and D. Loss, “Quantum Computers and Quantum Coherence,” J. Magnetism Magn. Matl. **200**, 202-218 (1999).
- [15] R. Cleve and H. Buhrman, Phys. Rev. A **56**, 1201 (1997).
- [16] H. Buhrman, R. Cleve, and A. Wigderson, “Quantum vs. Classical Communication and Computation,” in *Proc. of the 30th Ann. ACM Symp. on the Theory of Computing* (ACM Press, 1998), p. 63; eprint quant-ph/9802040.
- [17] A. Ambainis, L. Schulman, A. Ta-Shma, U. Vazirani, and A. Wigderson, “The quantum communication complexity of sampling,” in *Proc. of the 39th Annual Symposium on the Foundations of Computer Science* (IEEE Press, Los Alamitos, 1998); see <http://www.icsi.berkeley.edu/~amnon/Papers/qcc.ps>.
- [18] C. H. Bennett and G. Brassard, “Quantum Cryptography: Public Key Distribution and Coin Tossing,” in *Proceedings of the IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing, Bangalore, India* (IEEE, New York, 1984), p. 175.
- [19] D. A. Meyer, “Quantum strategies,” Phys. Rev. Lett. **82**, 1052 (1999) (quant-ph/9804010); J. Eisert, M. Wilkens, and M. Lewenstein, “Quantum games and quantum strategies,” Phys. Rev. Lett. **83**, 3077 (1999) (quant-ph/9806088); L. Goldenberg, L. Vaidman, and S. Wiesner, “Quantum gambling,” Phys. Rev. Lett. **82**, 3356 (1999) (quant-ph/9808001).
- [20] A. M. Steane and W. van Dam, “Physicists Triumph at ‘Guess my Number’”, Physics Today **53** (2), 35-39 (2000).
- [21] D. Aharonov, “Quantum Computation,” in *Annual Reviews of Computational Physics*, vol. VI (ed. Dietrich Stauffer, World Scientific, Singapore, 1998) (quant-ph/9812037).
- [22] R. Cleve, “An Introduction to Quantum Complexity Theory,” to appear in *Collected Papers on Quantum Computation and Quantum Information Theory* (eds. C. Macchiavello, G. M. Palma, and A. Zeilinger, World Scientific, 2000) (quant-ph/9906111).
- [23] C. H. Bennett, Physics Today **48** (10), 24 (1995); D. P. DiVincenzo, Science **270**, 255 (1995); D. P. DiVincenzo, Proc. R. Soc. London A **454**, 261 (1998) (and quant-ph/9705009); A. Barenco, Contemp. Phys. **37**, 375 (1996); A. Steane, Rep. Prog. Phys. **61**, 117 (1998); C. H. Bennett and P. W. Shor, IEEE Trans. Info. Theory **44**, 2724 (1998).
- [24] D. P. DiVincenzo, in *Mesoscopic Electron Transport*, eds. L. Sohn, L. Kouwenhoven, and G. Schön (Vol. 345, NATO ASI Series E, Kluwer, 1997), p. 657 (cond-mat/9612126); D. P. DiVincenzo and D. Loss, Superlattices and Microstructures **23**, 419 (1998) (cond-mat/9710259); D. P. DiVincenzo and D. Loss, J. Magn. Mag. Matl. **200**, 202 (1999) (cond-mat/9901137).
- [25] B. Schumacher, Phys. Rev. A **54**, 2614 (1996).

- [26] G. K. Brennen, C. M. Caves, P. S. Jessen, and I. H. Deutsch, Phys. Rev. Lett. **82**, 1060 (1999).
- [27] D. Jaksch, H. J. Briegel, I. J. Cirac, C. Gardiner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **82**, 1975 (1999).
- [28] I am grateful to R. Schoelkopf and M. Devoret for clarifying discussion on these points.
- [29] M. B. Plenio and P. L. Knight, Phys. Rev. A **53**, 2986 (1996).
- [30] M. B. Plenio and P. L. Knight, Proc. Roy. Soc. Lond. **A453**, 2017-2041 (1997).
- [31] J. Preskill, Proc. R. Soc. Lond A **454**, 385 (1998) (quant-ph/9705031).
- [32] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2000); see also M. A. Nielsen, C. M. Caves, B. Schumacher, and H. Barnum, Proc. R. Soc. Lond. A **454**, 277-304 (1998) (quant-ph/9706064).
- [33] P. Shor, Phys. Rev. A **52**, 2493 (1995); A. M. Steane, Phys. Rev. Lett. **77**, 793-797 (1996).
- [34] P. Shor, in *Proceedings of the 37th Symposium on the Foundations of Computer Science* (IEEE Press, Los Alamitos, CA, 1996) (quant-ph/9605011); D. Aharonov and M. Ben-Or, in *Proceedings of the 29th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing* (ACM Press, New York, 1997) (quant-ph/9611025); E. Knill, R. Laflamme, and W. Zurek, Science **279**, 342 (1998). These results are reviewed in [31].
- [35] D. P. DiVincenzo, "Two-bit gates are universal for quantum computation," Phys. Rev. A **51**, 1015 (1995), cond-mat/9407022.
- [36] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. A. Smolin, and H. Weinfurter, "Elementary gates for quantum computation," Phys. Rev. A **52**, 3457 (1995), quant-ph/9503016.
- [37] K. Molmer and A. Sorensen, Phys. Rev. Lett. **82**, 1835 (1999).
- [38] D. W. Leung, I. L. Chuang, F. Yamaguchi, and Y. Yamamoto, "Efficient implementation of selective recoupling in heteronuclear spin systems using Hadamard matrices," quant-ph/9904100.
- [39] G. Burkard, D. Loss, D.P. DiVincenzo, and J.A. Smolin, Phys. Rev. B **60**, 11404 (1999); cond-mat/9905230.
- [40] G. Burkard, D. Loss, D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. B **59**, 2070 (1999); cond-mat/9808026.
- [41] D. Gottesman, "Fault-Tolerant Quantum Computation with Local Gates," J. Mod. Optics **47**, 333 (2000); quant-ph/9903099.
- [42] D. Bacon, J. Kempe, D. A. Lidar, and K. B. Whaley, "Universal fault-tolerant computation on decoherence-free subspaces," quant-ph/9909058.
- [43] D. P. DiVincenzo, G. Burkard, D. Loss, and E. V. Sukhorukov, "Quantum computation and spin electronics," in *Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics*, eds. I. O. Kulik and R. Ellialtioglu (NATO Advanced Study Institute, Turkey, June 13-25, 1999), to be published; cond-mat/9911245.
- [44] D. Gottesman and I. L. Chuang, Nature **402**, 390 (1999).

- [45] D. Loss and E. V. Sukhorukov, Phys. Rev. Lett. **84**, 1035 (2000).
- [46] J. I. Cirac, P. Zoller, H. J. Kimble, and H. Mabuchi, Phys. Rev. Lett. **78**, 3221 (1997) (quant-ph/9611017).
- [47] S. Lloyd, Science **261**, 1569 (1993); **263**, 695 (1994).
- [48] S. Benjamin, Phys. Rev. A **61**, 020301(R) (2000) (quant-ph/9909007).
- [49] A. Yu. Kitaev, “Fault-tolerant quantum computation with anyons,” quant-ph/9707021; see also J. Preskill, in *Introduction to Quantum Computation and Information* (eds. H.-K. Lo, S. Popescu, and T. Spiller, World Scientific, Singapore, 1998) pp. 213-269 (quant-ph/9712048).
- [50] M. H. Freedman, M. Larsen, and Z. Wang, “A modular functor which is universal for quantum computation,” quant-ph/0001108; M. H. Freedman, “Poly-locality in quantum computing,” quant-ph/0001077; M. H. Freedman, A. Yu. Kitaev, and Z. Wang, “Simulation of topological field theories by quantum computers,” quant-ph/0001071.

Refs from On temporal entropy and the complexity of computing the expectation value of local operators after a quench by Carignano, Ramos Marimón

References

- [1] P. Calabrese and J. Cardy, Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2005**, P04010 (2005).
- [2] A. Laeuchli and C. Kollath, Spreading of correlations and entanglement after a quench in the one-dimensional Bose-Hubbard model, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2008**, P05018 (2008), [arxiv:0803.2947 \[cond-mat\]](#) .
- [3] J. Dubail, Entanglement scaling of operators: A conformal field theory approach, with a glimpse of simulability of long-time dynamics in 1+1d, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **50**, 234001 (2017), [arxiv:1612.08630 \[cond-mat, physics:hep-th, physics:quant-ph\]](#) .
- [4] M. C. Bañuls, M. B. Hastings, F. Verstraete, and J. I. Cirac, Matrix Product States for Dynamical Simulation of Infinite Chains, *Physical Review Letters* **102**, 240603 (2009).
- [5] A. Müller-Hermes, J. I. Cirac, and M. C. Bañuls, Tensor network techniques for the computation of dynamical observables in 1D quantum spin systems, *New Journal of Physics* **14**, 075003 (2012), [arxiv:1204.5080 \[cond-mat, physics:quant-ph\]](#) .
- [6] M. B. Hastings and R. Mahajan, Connecting Entanglement in Time and Space: Improving the Folding Algorithm, *Physical Review A* **91**, 032306 (2015), [arxiv:1411.7950 \[cond-mat, physics:hep-th, physics:quant-ph\]](#) .
- [7] A. Strathearn, P. Kirton, D. Kilda, J. Keeling, and B. W. Lovett, Efficient non-Markovian quantum dynamics using time-evolving matrix product operators, *Nature Communications* **9**, 3322 (2018).
- [8] C. D. White, M. Zaletel, R. S. K. Mong, and G. Refael, Quantum dynamics of thermalizing systems, *Physical Review B* **97**, 035127 (2018), [arxiv:1707.01506 \[cond-mat\]](#) .

- [9] T. Rakovszky, C. W. von Keyserlingk, and F. Pollmann, [Dissipation-assisted operator evolution method for capturing hydrodynamic transport](#) (2020), [arxiv:2004.05177 \[cond-mat\]](#) .
- [10] M. Frías-Pérez and M. C. Bañuls, Light cone tensor network and time evolution, [Physical Review B](#) **106**, 115117 (2022), [arxiv:2201.08402 \[quant-ph\]](#) .
- [11] A. Leroose, M. Sonner, and D. A. Abanin, Influence Matrix Approach to Many-Body Floquet Dynamics, [Physical Review X](#) **11**, 021040 (2021).
- [12] A. Leroose, M. Sonner, and D. A. Abanin, Overcoming the entanglement barrier in quantum many-body dynamics via space-time duality, [Physical Review B](#) **107**, L060305 (2023).
- [13] G. Giudice, G. Giudici, M. Sonner, J. Thoenniss, A. Leroose, D. A. Abanin, and L. Piroli, Temporal Entanglement, Quasiparticles, and the Role of Interactions, [Physical Review Letters](#) **128**, 220401 (2022).
- [14] J. Thoenniss, A. Leroose, and D. A. Abanin, Nonequilibrium quantum impurity problems via matrix-product states in the temporal domain, [Physical Review B](#) **107**, 195101 (2023).
- [15] E. Tirrito, N. J. Robinson, M. Lewenstein, S.-J. Ran, and L. Tagliacozzo, [Characterizing the quantum field theory vacuum using temporal Matrix Product states](#) (2022), [arxiv:1810.08050 \[cond-mat\]](#) .
- [16] R. Feynman and F. Vernon, The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system, [Annals of Physics](#) **24**, 118 (1963).
- [17] M. Sonner, A. Leroose, and D. A. Abanin, Influence functional of many-body systems: Temporal entanglement and matrix-product state representation, [Annals of Physics Special Issue on Philip W. Anderson](#), **435**, 168677 (2021).
- [18] E. Ye and G. K.-L. Chan, Constructing Tensor Network Influence Functionals for General Quantum Dynamics, [The Journal of Chemical Physics](#) **155**, 044104 (2021), [arxiv:2101.05466 \[physics, physics:quant-ph\]](#) .
- [19] T. Prosen and M. Žnidarič, Is the efficiency of classical simulations of quantum dynamics related to integrability?, [Physical Review E](#) **75**, 015202 (2007).
- [20] I. Pižorn and T. Prosen, Operator space entanglement entropy in XY spin chains, [Physical Review B](#) **79**, 184416 (2009).
- [21] V. Alba, J. Dubail, and M. Medenjak, Operator Entanglement in Interacting Integrable Quantum Systems: The Case of the Rule 54 Chain, [Physical Review Letters](#) **122**, 250603 (2019).
- [22] B. Bertini, P. Kos, and T. Prosen, Operator Entanglement in Local Quantum Circuits I: Chaotic Dual-Unitary Circuits, [SciPost Physics](#) **8**, 067 (2020).
- [23] B. Bertini, P. Kos, and T. Prosen, Operator Entanglement in Local Quantum Circuits II: Solitons in Chains of Qubits, [SciPost Physics](#) **8**, 068 (2020).
- [24] L. Piroli, B. Bertini, J. I. Cirac, and T. Prosen, Exact dynamics in dual-unitary quantum circuits, [Physical Review B](#) **101**, 094304 (2020).
- [25] G. Vidal, Efficient Simulation of One-Dimensional Quantum Many-Body Systems, [Physical Review Letters](#) **93**, 040502 (2004).

- [26] S. R. White and A. E. Feiguin, Real-Time Evolution Using the Density Matrix Renormalization Group, [Physical Review Letters](#) **93**, 076401 (2004).
- [27] S. Paeckel, T. Köhler, A. Swoboda, S. R. Manmana, U. Schollwöck, and C. Hubig, Time-evolution methods for matrix-product states, arXiv:1901.05824 [cond-mat, physics:quant-ph] (2019), [arxiv:1901.05824 \[cond-mat, physics:quant-ph\]](#) .
- [28] M. C. Bañuls, Tensor Network Algorithms: A Route Map, [Annual Review of Condensed Matter Physics](#) **14**, 173 (2023).
- [29] I. P. McCulloch, From density-matrix renormalization group to matrix product states, [Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment](#) **2007**, P10014 (2007).
- [30] B. Pirvu, V. Murg, J. I. Cirac, and F. Verstraete, Matrix product operator representations, [New Journal of Physics](#) **12**, 025012 (2010).
- [31] Y. Nakata, T. Takayanagi, Y. Taki, K. Tamaoka, and Z. Wei, Holographic Pseudo Entropy, [Physical Review D](#) **103**, 026005 (2021), [arxiv:2005.13801 \[cond-mat, physics:hep-th, physics:quant-ph\]](#) .
- [32] K. Doi, J. Harper, A. Mollabashi, T. Takayanagi, and Y. Taki, Pseudo Entropy in dS/CFT and Time-like Entanglement Entropy, [Physical Review Letters](#) **130**, 031601 (2023), [arxiv:2210.09457 \[cond-mat, physics:hep-th, physics:quant-ph\]](#) .
- [33] K. Narayan, [De Sitter space, extremal surfaces and "time-entanglement"](#) (2023), [arxiv:2210.12963 \[hep-th\]](#) .
- [34] X. Jiang, P. Wang, H. Wu, and H. Yang, [Timelike entanglement entropy and \$T\bar{T}\$ deformation](#) (2023), [arxiv:2302.13872 \[hep-th\]](#) .
- [35] A. Coser, E. Tonni, and P. Calabrese, Entanglement negativity after a global quantum quench, [Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment](#) **2014**, P12017 (2014).
- [36] P. Calabrese, J. Cardy, and E. Tonni, Entanglement negativity in quantum field theory, [Physical Review Letters](#) **109**, 130502 (2012), [arxiv:1206.3092 \[cond-mat, physics:hep-th, physics:quant-ph\]](#) .
- [37] G. Vidal and R. F. Werner, Computable measure of entanglement, [Physical Review A](#) **65**, 032314 (2002).
- [38] P. Calabrese and J. Cardy, Entanglement and correlation functions following a local quench: A conformal field theory approach, [Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment](#) **2007**, P10004 (2007).
- [39] F. Verstraete and J. I. Cirac, Continuous Matrix Product States for Quantum Fields, [Physical Review Letters](#) **104**, 190405 (2010).
- [40] W. Tang, F. Verstraete, and J. Haegeman, Matrix Product State Fixed Points of Non-Hermitian Transfer Matrices (2023), [arxiv:2311.18733 \[cond-mat, physics:quant-ph\]](#) .
- [41] X. Wang and T. Xiang, Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems, [Physical Review B](#) **56**, 5061 (1997).
- [42] Y.-K. Huang, Biorthonormal transfer-matrix renormalization-group method for non-Hermitian matrices, [Physical Review E](#) **83**, 036702 (2011).

- [43] M. J. Hartmann, J. Prior, S. R. Clark, and M. B. Plenio, Density Matrix Renormalization Group in the Heisenberg Picture, *Physical Review Letters* **102**, 057202 (2009), [arxiv:0808.0666 \[cond-mat, physics:quant-ph\]](#) .
- [44] A. Foligno, T. Zhou, and B. Bertini, Temporal Entanglement in Chaotic Quantum Circuits, *Physical Review X* **13**, 041008 (2023).
- [45] R. Orús and G. Vidal, Infinite time-evolving block decimation algorithm beyond unitary evolution, *Physical Review B* **78**, 155117 (2008).
- [46] G. Evenbly, A Practical Guide to the Numerical Implementation of Tensor Networks I: Contractions, Decompositions and Gauge Freedom (2022), [arxiv:2202.02138 \[cond-mat, physics:quant-ph\]](#) .

From (???)

References

- [1] Einarsson, T. (1990). Fractional statistics on a torus. *Phys. Rev. Lett.*, **64**(17), 1995–1998.
- [2] Fradkin, E. and Shenker, S. H. (1979). Phase diagrams of lattice gauge theories with higgs fields. *Phys. Rev. D*, **19**(12), 3682–3697.
- [3] Hastings, M. B. and Wen, X. G. (2005). Quasiadiabatic continuation of quantum states: The stability of topological ground-state degeneracy and emergent gauge invariance. *Phys. Rev. B*, **72**(4), 045141.
- [4] Kitaev, A. (2000). Unpaired majorana fermions in quantum wires. *arXiv*, **cond-mat/0010440v2**.
- [5] Kitaev, A. (2003). Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Ann. Phys.*, **303**(1), 2 – 30.
- [6] Kitaev, A. (2006). Anyons in an exactly solved model and beyond. *Ann. Phys.*, **321**(1), 2 – 111.
- [7] Lieb, E. H. (1994). Flux phase of the half-filled band. *Phys. Rev. Lett.*, **73**(16), 2158–2161.
- [8] Read, N. and Chakraborty, B. (1989). Statistics of the excitations of the resonating-valence-bond state. *Phys. Rev. B*, **40**(10), 7133–7140.
- [9] Tupitsyn, I. S., Kitaev, A., Prokof'ev, N. V., and Stamp, P. C. E. (2008). Topological multicritical point in the toric code and 3d gauge higgs models. *arXiv*, **0804.3175v1**.
- [10] Yao, H. and Kivelson, S. A. (2007). Exact chiral spin liquid with non-abelian anyons. *Phys. Rev. Lett.*, **99**(24), 247203.