Zusammenfassung der 10. Vorlesung (20.06.2010)

Fassung vom 20.07.2010

3.5 *Die v. Neumann Entropie*:

Sei ρ ein Dichteoperator in einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ der Dimension M und sei

$$\rho = \sum_{i=0}^{M-1} p_i |\psi_i >< \psi_i|, \quad < \psi_i, \psi_k >= \delta_{ik},$$

dann sind die p_i eindeutig, $p_i \geq 0$ und $\sum_i p_i = 1$. Man kann nun das Spektrum eines nicht entarteten selbstadjungierten Operators A mit $[A, \rho] = 0$, etwa $A = \sum_{i=0}^{M-1} a_i |\psi_i >< \psi_i|$, als Alphabet betrachten, mit dem eine (ggf. unendlich lange) Zeichenreihe gebildet ist, in der der i-te Eigenwert von A mit der Wahrscheinlichkeit p_i auf stochastische Weise erkannt wird (vgl. 8. Vorl.). Die Entropie dieser klassischen Zeichenreihe wäre dann $H(p) = -\sum_i p_i \log_2 p_i$. Quantenmechanisch entspricht diese Zeichenreihe dem Tensorprodukt der zugehörigen Eigenfunktionen ψ_i von A. Dies motiviert die Definition der **v. Neumann Entropie**

$$S(\rho) := -\sum_{i=0}^{M-1} p_i \log_2 p_i = -tr(\rho \log_2 \rho).$$

Für reine Zustände $\Psi = \sum_{i=0}^{M-1} c_i \psi_i \otimes \varphi_i$ in in $\mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}$, $\dim \tilde{\mathcal{H}} \geq M$, hatten wir die Verschränktheit mit

$$E(\Psi) = -\sum_{i=0}^{M-1} c_i^2 \log_2 ci^2 = -S(tr_1 |\Psi >< \Psi|) = -S(tr_2 |\Psi >< \Psi|)$$

gemessen, wobei c_i die Schmidtkoeffizienten von Ψ sind.

Zum Beweis von Eigenschaften der v. Neumann Entropie kann man oft das folgende Lemma verwenden:

Lemma: Sei f eine beschränkte reelle konkave Funktion mit beschränkter Ableitung $f' \leq \alpha < \infty$. Dann gilt für selbstadjungierte Spurklasseoperatoren A, B eines Hilbertraums

$$\text{tr}(f(B) - f(A)) \geq \text{tr}((B - A) f'(B)).$$

Beweis Für eine konkave Funktion gilt stets

$$f(y) - f(x) \geq (y - x)f'(y),$$

denn mit $l_y(x) = f(y) + (x - y)f'(y)$ gilt $l_y(x) \geq f(x)$ falls f konkav ist, (und $l_y(x) \leq f(x)$, falls f konvex ist). Ist $\{\varphi_i\}$ eine Orthonormalbasis von Eigenzuständen von B, und $\{\psi_k\}$ eine Orthonormalbasis von Eigenzuständen von A, dann gilt

$$\begin{aligned}
&\mathrm{tr}(f(B) - f(A))) = \sum_{i,k} < \varphi_i, (f(B) - f(A))\psi_k >< \psi_k, \varphi_i > \\
= &\sum_{i,k}(f(< \varphi_i, B\varphi_i >) - f(< \psi_k, A\psi_k >)) < \varphi_i, \psi_k >< \psi_k, \varphi_i > \\
\geq &\sum_{i,k}(< \varphi_i, B\varphi_i > - < \psi_k, A\psi_k >)f'(< \varphi_i, B\varphi_i >) < \varphi_i, \psi_k >< \psi_k, \varphi_i > \\
= &\sum_{i,k} < \varphi_i, (B - A)\psi_k >< \psi_k . f'(B)\varphi_i >= \mathrm{tr}((B - A)f'(B),
\end{aligned}$$

was zu zeigen war.

Mit Hilfe dieses Lemmas kann man die Konkavität der v.Neumann Entropie beweisen:

Satz: Seien ρ_i Dichteoperatoren auf $\mathcal{H}$, $q_i \geq 0$ und $\sum_i q_i = 1$,dann gilt:

$$\sum_i q_i S(\rho_i) \leq S(\sum_i q_i \rho_i).$$

Beweis: Es gilt

$$S(\rho) = \mathrm{tr} h(\rho), \qquad h(x) = -x \log_2 x,$$

und h ist strikt konkav. Folglich ist mit $\alpha, \beta \geq 0$, $\alpha + \beta = 1$ aufghrund des vorstehenden Lemmas

$$S(\alpha\rho + \beta\sigma) - S(\rho) = \mathrm{tr}(h(\alpha\rho + \beta\sigma) - h(\rho)) \geq \beta\, \mathrm{tr}((\sigma - \rho)h'(\alpha\rho + \beta\sigma)),$$

denn $(\alpha\rho + \beta\sigma) - \rho = ((1 - \beta)\rho + \beta\sigma) - \rho = \beta(\sigma - \rho)$. Ebenso folgt

$$S(\alpha\rho + \beta\sigma) - S(\sigma) = \mathrm{tr}(h(\alpha\rho + \beta\sigma) - h(\sigma)) \geq \alpha\, \mathrm{tr}((\rho - \sigma)h'(\alpha\rho + \beta\sigma)).$$

Somit gelten

$$\begin{aligned} \alpha S(\alpha\rho+\beta\sigma)-\alpha S(\rho) &\geq \alpha\beta\,\mathrm{tr}((\sigma-\rho)h'(\alpha\rho+\beta\sigma)), \\ \beta S(\alpha\rho+\beta\sigma)-\beta S(\sigma) &\geq \beta\alpha\,\mathrm{tr}((\rho-\sigma)h'(\alpha\rho+\beta\sigma)), \end{aligned}$$

und die Summe der Ungleichungen liefert die Behauptung für $N=2$. Die Induktionsannahme, dass die Behauptung des Satzen auch für N-fache konvexe Linearkombinationen gilt, führt auf

$$p_1 S(\rho_1)+(1-p_1)\sum_{k=2}^{N+1}\frac{p_k}{1-p_1}S(\rho_k)\leq p_1 S(\rho_1)+(1-p_1)S(\sum_{k=2}^{N+1}\frac{p_k}{1-p_1}\rho_k),$$

und, da die Behauptung für $N=2$ gilt, auf

$$\sum_{i=1}^{N+1}p_i S(\rho_k)\leq S(p_1\rho_1+(1-p_1)\sum_{k=2}^{N+1}\frac{p_k}{1-p_1}\rho_k)=S(\sum_{i=1}^{N+1}p_i\rho_k).$$

Damit ist die Behauptung durch vollständige Induktion bewiesen.

3.6 *Die relative v. Neumann Entropie*:

Seien $\rho=\sum_i p_i|\varphi_i><\varphi_i|$ und $\sigma=\sum_i q_k|\psi_k><\psi_k|$ Dichteoperatoren, $<\varphi_i,\varphi_j>=\delta_{ij}$, $<\psi_k,\psi_l>=\delta_{kl}$, auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$. O.b.d.A seien $p_i>0$ und $q_k>0$. Dann sind $E_\rho:=\sum_i|\varphi_i><\varphi_i|$ und $E_\sigma:=\sum_k|\psi_k><\psi_k|$ die Träger son ρ bzw. σ. Die **relative v. Neumann Entropie** so definiert:

$$S(\rho\|\sigma):=\begin{cases} \mathrm{tr}(\rho(\log_2\rho-\log_2\sigma))=-S(\rho)-\mathrm{tr}(\rho\log_2\sigma), & \text{falls } E_\rho\leq E_\sigma \\ +\infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

Sie erfüllt ebenfalls die Kleinsche Ungleichung und liefert deshalb ein Maß für den Unterschied von ρ und σ. Allerdings ist auch $S(\rho\|\sigma)\neq S(\sigma\|\rho)$. Falls $E_\rho\not\leq E_\sigma$ ist, gilt

$$\gamma=\sum_k|<\varphi_i,\psi_k>|^2<\|\varphi_i\|^2=1.$$

Indiesem Fall ist $S(\rho\|\sigma)=+\infty$ obwohl $E_\rho E_\sigma\neq 0$ sein kann.

Satz:

$$\mathbf{S}(\rho\|\sigma)\geq 0,\qquad (\mathbf{S}(\rho\|\sigma)=0\Leftrightarrow\rho=\sigma).$$

Beweis: Seien $\rho = \sum_i p_i|\varphi_i >< \varphi_i|$ und $\sigma = \sum_i q_k|\psi_k >< \psi_k|$ die Spektralzerlegungen, wobei wir nun o,B,d,A $p_i \geq p_{i+1} > 0$ und $q_k \geq q_{k+1} > 0$ annehmen. Dann gilt,

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}(\rho\|\sigma) &= \sum_i p_i(\log_2 p_i - < \varphi_i, \log_2 \sigma, \varphi_i >) \\
&= \sum_i p_i(\log_2 p_i - \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \log_2 q_k).
\end{aligned}$$

Zur Abschätzung nutzen wir die Konkavität des Logarithmus aus. Wegen $\sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 = 1$ ist

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}(\rho\|\sigma) &= \sum_i p_i(\log_2 p_i - \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \log_2 q_k) \\
&\geq \sum_i p_i(\log_2 p_i - \log_2(\sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 q_k) \\
&= -\sum_i p_i \log_2(\frac{1}{p_i} \sum_k < \varphi_i, \psi_k > |^2 q_k) \\
&\geq -\log_2(\sum_k \left(\sum_i | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \right) q_k) \\
&\geq -\log_2(\sum_k \|\psi_k\|^2 q_k) = -\log_2 1 = 0.
\end{aligned}$$

Falls $\mathbf{S}(\rho\|\sigma) = 0$ ist, müssen in dieser Formel alle Zeilen gleich sein. Aus

$$-\log_2(\sum_k \left(\sum_i | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \right) q_k) = 0$$

folgt

$$\sum_k \left(\sum_i | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \right) q_k = 1,$$

und damit für alle k

$$\sum_i | < \varphi_i, \psi_k > |^2 = 1 = \|\psi_k\|^2.$$

Somit ist

$$E_\rho := \sum_{\{i|p_i\neq 0\}} |\varphi_i >< \varphi_i| \quad \geq \sum_{\{k|q_k\neq 0\}} |\psi_k >< \psi_k| =: E_\sigma.$$

und wegen $E_\sigma \geq E_\rho$ gilt $E_\sigma = E_\rho$. ρ und σ haben denselben Träger. Insbesondere folgt daraus, dass die $< \varphi_i, \psi_k >$ eine unitäre Matrix bilden.

Weiter ist

$$\begin{aligned} &- \sum_{\{i|p_i\neq 0\}} p_i \log_2(\sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \frac{q_k}{p_i}) \\ &= - \log_2(\sum_{\{i|p_i\neq 0\}} p_i \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \frac{q_k}{p_i}) \quad = \quad 0 \end{aligned}$$

was nur gelten kann, wenn für alle i

$$\sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \frac{q_k}{p_i} = 1 \quad \text{bzw} \quad \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 q_k = p_i$$

ist. Aus der letzten Gleichung folgt wegen der Konkavität des Logarithmus

$$\log_2 p_i = \log_2(\sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 q_k) \geq \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \log_2 q_k,$$

s dass die Klammern stehenden Differenzen der Gleichung

$$\sum_i p_i(\log_2 p_i - \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \log_2 q_k) = 0$$

positiv oder Null sind. Für $p_i \neq 0$ folgt dann

$$\log_2 p_i = \log_2(\sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 q_k) = \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \log_2 q_k.$$

Wir nutzen wieder die strikte Konkavität des Logarithmus aus. Dazu sei mit $K_0 = 0$

$$q_k = \beta_l \ (k = K_l, K_l + 1, \ldots, K_{l+1} - 1; l = 0, 1, \ldots, L - 1), \ \ \beta_l > \beta_{l+1} > 0.$$

Dann ist

$$\log_2(\sum_{l=0}^{L-1} \left(\sum_{k=K_l}^{K_{l+1}-1} | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \right) \beta_l) = \sum_{l=0}^{L-1} \left(\sum_{k=K_l}^{K_{l+1}-1} | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \right) \log_2 \beta_l,$$

und die β_k sind paarweise voneinander und von 0 verschieden. Aus der strikten Konkavität folgt dann

$$\sum_{k=K_l}^{K_{l+1}-1} | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \in \{0, 1\}.$$

Nun ist

$$\sum_{l=0}^{L-1} \left(\sum_{k=K_l}^{K_{l+1}-1} | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \right) = \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 = 1$$

und deshalb gibt es für jedes i genau ein l, $l =: \lambda(i)$ mit

$$\sum_{k=K_l}^{K_{l+1}-1} | < \varphi_i, \psi_k > |^2 = \begin{cases} 1 & \text{falls} \quad l = \lambda(i) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

Nun ist auch

$$\sum_i | < \varphi_i, \psi_k > |^2 = 1,$$

und damit

$$K_{l+1} - K_l = \sum_i \sum_{k=K_l}^{K_{l+1}-1} | < \varphi_i, \psi_k > |^2 = \sum_i \delta_{l\lambda(i)},$$

so dass es genau $K_{l+1} - K_l$ Argumente i mit $l = \lambda(i)$ gibt. Für diese gilt

$$p_i = \sum_k | < \varphi_i, \psi_k > |^2 q_k = \sum_{l=0}^{L-1} \left(\sum_{k=K_l}^{K_{l+1}-1} | < \varphi_i, \psi_k > |^2 \right) \beta_l = \beta_{\lambda(i)},$$

d. h.

$$p_i = q_k \qquad (i, k = K_{\lambda(i)}, K_{\lambda(i)} + 1, \ldots, K_{\lambda(i)+1} - 1).$$

Ferner folgt für $1 \leq K_{l+1} - K_l = \sum_i \delta_{l\lambda(i)}$, dass l im Bildbereich von λ sein muß. also λ surjektiv ist. Damit stimmen die Eigenwerte von ρ und σ und ihre Entartungsgrade überein.

Nun folgt aus

$$\sum_{k=K_l}^{K_{l+1}-1} | < \varphi_i, \psi_k > |^2 = 1 \quad \text{für} \quad l = \lambda(i)$$

$$\varphi_i = \sum_{k=K_{\lambda(i)}}^{K_{\lambda(i)+1}-1} |\psi_k >< \psi_k, \varphi_i >,$$

also

$$\sum_{i=K_{\lambda(i)}}^{K_{\lambda(i)+1}-1} |\varphi_i >< \varphi_i| \leq \sum_{k=K_{\lambda(i)}}^{K_{\lambda(i)+1}-1} |\psi_k >< \psi_k|,$$

und da beide Projektoren den gleichen Rang haben, mussen die übereinstimmen. Die Eigenräume von ρ und σ zu den gleichen Eigenwerten die gleichen Eigenräume. Sie stimmen deshalb überein. Damit ist der Satz bewiesen.