

Programowanie i metody numeryczne

Projekt *Splątanie kwantowe*

Bartłomiej Zglinicki
Bartlomiej.Zglinicki@fuw.edu.pl

1. Wprowadzenie

Splątanie kwantowe [1–3] jest jednym z najbardziej charakterystycznych zjawisk przewidywanych przez mechanikę kwantową, niemającym odpowiednika w fizyce klasycznej. Układ kwantowy złożony z kilku podukładów znajduje się w stanie splątanym, jeśli jego stanu nie da się zapisać jako iloczynu tensorowego stanów poszczególnych podukładów. Mówiąc obrazowo, w stanie splątanym część informacji o układzie jest zakodowana nie w stanach poszczególnych podukładów, lecz w ich wzajemnych korelacjach. W rezultacie znajomość stanów wszystkich podukładów z osobna nie wystarcza do pełnego odtworzenia stanu całego układu. Choć brzmi to dość abstrakcyjnie, splątanie kwantowe leży u podstaw wielu ważnych zastosowań mechaniki kwantowej, takich jak kryptografia kwantowa czy kwantowa teoria informacji. Ilościowo zjawisko splątania kwantowego możemy opisywać za pomocą wielkości nazywanej *entropią splątania*, przynajmniej w przypadku układów, którymi będziemy się tu zajmować.

W ramach projektu zbadamy ewolucję układu dwóch cząstek w jednowymiarowej nieskończonej studni potencjału, oddziałujących ze sobą potencjałem kontaktowym $\sim \delta(x_1 - x_2)$. Wyznamy entropię splątania jako funkcję czasu, by ustalić, czy, a jeśli tak – w jakim stopniu, oddziaływanie cząstek prowadzi do powstania splątania między nimi. Układ, który będziemy rozważać, nie daje się badać analitycznie – nasz cel zrealizujemy korzystając z dobrodziejstw analizy numerycznej.

2. Sformułowanie problemu i metoda rozwiązania numerycznego

Zacniemy od ścisłego sformułowania badanego zagadnienia na gruncie mechaniki kwantowej. W sekcji 2.1. zapiszemy równanie Schrödingera, które w mechanice kwantowej opisuje ewolucję czasową układu, w postaci odpowiadającej problemowi opisanemu we wprowadzeniu oraz narzucimy odpowiednie warunki na jego rozwiązania. Następnie, w sekcji 2.2. przyjrzymy się pojęciu entropii splątania. Rozważania zawarte w tych sekcjach oparte są na [1–3].

W sekcji 2.3. omówimy odpowiednie narzędzia numeryczne, które pozwolą nam obliczać wartości przybliżonego rozwiązania równania Schrödingera. Przedstawione w tej części informacje pochodzą z [4–9].

2.1. Równanie Schrödingera

Niech $|\Psi(t)\rangle$ będzie wektorem stanu układu kwantowego, którym zamierzamy się zająć, złożonego z dwóch cząstek, zaś $\Psi = \Psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – odpowiadającą temu wektorowi funkcją falową w reprezentacji położeniowej; wskaźniki 1 i 2 odnoszą się do, odpowiednio, pierwszej i drugiej cząstki. Będziemy posługiwali się współrzędnymi kartezjańskimi i rozważali wyłącznie przypadek jednowymiarowy – założymy, że funkcja falowa określona jest w $(1 + 1)$ -wymiarowej czasoprzestrzeni:

$$\Psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2 \supseteq \Omega \ni (t, x_1, x_2) \mapsto \Psi(t, x_1, x_2) \in \mathbb{C}. \quad (1)$$

Funkcja falowa $\Psi(t, x_1, x_2)$ zadaje stan układu w chwili t , a jej zmienność w czasie opisywana jest przez zależne od czasu równanie Schrödingera, które w reprezentacji położeniowej przyjmuje postać

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x_1, x_2) = \hat{H} \Psi(t, x_1, x_2). \quad (2)$$

$\hat{H}$ jest hamiltonianem układu. Będziemy się zajmowali dwiema cząstkami o masach, odpowiednio, μ_1 i μ_2 , umieszczonymi w niezależnym od czasu zewnętrznym potencjale $V = V(x)$ oraz oddziałującymi ze sobą niezależnym od czasu potencjałem $W = W(x_1, x_2)$, zatem

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{W}, \quad (3)$$

gdzie

$$\hat{H}_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu_n} \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + V(x_n), \quad n = 1, 2. \quad (4)$$

Założymy, że $\mu_1 = \mu_2 \equiv \mu$ oraz wprowadzimy dla wygody jednostki, w których $\mu = \frac{1}{2}$ i $\hbar = 1$. Równanie Schrödingera (2) z hamiltonianem (3) przyjmie więc ostatecznie postać

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x_1, x_2) = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1) + V(x_2) + W(x_1, x_2) \right) \Psi(t, x_1, x_2). \quad (5)$$

Jest to zespolone równanie różniczkowe cząstkowe drugiego rzędu. Rozwiązując je przy ustalonych funkcjach $V(x)$ i $W(x_1, x_2)$ oraz warunkach brzegowych i warunku początkowym wyznaczmy funkcję falową $\Psi(t, x_1, x_2)$ na całym obszarze Ω .

2.1.1. Potencjał zewnętrzny

Przyjmijmy potencjał zewnętrzny w postaci

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{gdy } x < 0 \text{ lub } x > L, \\ 0, & \text{gdy } 0 \leq x \leq L. \end{cases} \quad (6)$$

L jest dodatnią liczbą rzeczywistą. Potencjał ten odpowiada nieskończonej studni o szerokości L , każda z cząstek jest zatem „uwięziona” na odcinku $[0, L]$.

2.1.2. Potencjał oddziaływania

Oddziaływanie między cząstkami będziemy opisywać potencjałem kontaktowym

$$W(x_1, x_2) = \lambda \delta(x_1 - x_2), \quad (7)$$

gdzie $\lambda \in \mathbb{R}$ jest stałą opisującą siłę oddziaływania, nazywaną *stałą sprzężenia*, zaś δ to delta Diraca. Cząstki oddziałują więc tylko wówczas, gdy się spotykają; kiedy jednak $\lambda = 0$, cząstki nie oddziałują ze sobą w ogóle.

2.1.3. Warunki brzegowe i warunek początkowy

Będziemy śledzić ewolucję układu od chwili $t = 0$ do chwili $t = T > 0$. Z (6) wynika, że $\Psi(t, x_1, x_2) \equiv 0$ poza prostopadłościanem opisanym nierównościami $0 \leq x_1 \leq L$ i $0 \leq x_2 \leq L$. Możemy się zatem ograniczyć do badania funkcji falowej (1) na obszarze

$$\Omega = [0, T] \times [0, L]^2, \quad (8)$$

przyjmując warunki brzegowe

$$\Psi(t, 0, x_2) = \Psi(t, L, x_2) = \Psi(t, x_1, 0) = \Psi(t, x_1, L) = 0. \quad (9)$$

Założymy, że w chwili początkowej $t = 0$ układ jest w stanie niesplątany, danym przez iloczyn tensorowy stanów poszczególnych cząstek. Oznacza to, że w reprezentacji położeniowej funkcja falowa ma w chwili $t = 0$ postać

$$\Psi(0, x_1, x_2) = \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \quad (10)$$

dla pewnych zadanych funkcji $\phi_1(x)$ i $\phi_2(x)$. Przyjmujemy, że funkcje te odpowiadają unormowanym paczkom gaussowskim (pamiętajmy, że $\hbar = 1$):

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{\sigma_n}} \exp\left(-\frac{(x - x_{0,n})^2}{2\sigma_n^2} + ip_{0,n}x\right), \quad n = 1, 2, \quad (11)$$

gdzie $x_{0,n} \in]0, L[$, $\sigma_n \in \mathbb{R}_+$ oraz $p_{0,n} \in \mathbb{R}$. Wartości oczekiwane położenia i pędu n -tej cząstki w stanie (10) to, odpowiednio, $x_{0,n}$ i $p_{0,n}$. Stan (10) jest unormowany, $\langle \Psi(0) | \Psi(0) \rangle = 1$, ponieważ unormowane są paczki gaussowskie (11).

2.2. Entropia splątania

Jak wspomnieliśmy już we wprowadzeniu, w celu uzyskania ilościowego opisu zjawiska splątania kwantowego między cząstkami tworzącymi układ, który badamy, posłużymy się *entropią splątania*. Poniżej przedstawimy wyłącznie podstawowe informacje niezbędne do zdefiniowania i obliczenia tej wielkości. Dogłębne omówienie pojęcia entropii splątania można znaleźć na przykład w [2, 3].

2.2.1. Zredukowana macierz gęstości

Wektor stanu $|\Psi(t)\rangle$ opisuje układ jako całość, nie zaś poszczególne cząstki, które go tworzą, z osobna. W celu wydobycia z $|\Psi(t)\rangle$ informacji o stanie którejś z cząstek (np. gdy chcemy obliczyć wartość oczekiwaną jej położenia albo pędu) musimy wykorzystać pomocniczą wielkość zwaną *zredukowaną macierzą gęstości* tej cząstki. Okazuje się, że obliczenie entropii splątania również wymaga skorzystania ze zredukowanej macierzy gęstości dowolnej z cząstek tworzących układ – dla ustalenia uwagi wybierzmy cząstkę, której nadaliśmy numer 1.

Zredukowana macierz gęstości pierwszej cząstki to operator

$$\hat{\rho}_1(t) = \text{Tr}_2 |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|. \quad (12)$$

Prawa strona równości (12) jest śladem częściowym operatora $|\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|$, nazywanego macierzą gęstości układu, obliczanym po stopniach swobody związanych z drugą cząstką. Sens tej wielkości najłatwiej zrozumieć, zapisując operator (12) w konkretnej bazie – posłużymy się, jak zwykle, reprezentacją położeniową, w której element macierzowy operatora $\hat{\rho}_1(t)$ to

$$\rho_1(t, x_1, x'_1) = \langle x_1 | \hat{\rho}_1(t) | x'_1 \rangle = \int_0^L \Psi(t, x_1, x_2) \Psi^*(t, x'_1, x_2) dx_2. \quad (13)$$

Granice całkowania w (13) wynikają stąd, że – jak już ustaliliśmy – $\Psi(t, x_1, x_2) \equiv 0$, gdy $x_2 \notin [0, L]$.

2.2.2. Obliczanie i interpretacja entropii splątania

Entropia splątania $S = S(t)$ definiowana jest jako

$$S(t) = -\text{Tr}(\hat{\rho}_1(t) \ln \hat{\rho}_1(t)). \quad (14)$$

Istnieje również inny wzór, który pozwala obliczać entropię splątania, wygodniejszy od (14), bo niewymagający wyznaczenia logarytmu operatora. Można go łatwo wyprowadzić z (14), wykorzystując rozkład spektralny operatora (12). Zanim podamy ten nowy wzór, wypiszemy kilka istotnych własności operatora (12).

1. Spektrum operatora $\hat{\rho}_1(t)$ jest dyskretne, a więc ma on co najwyżej przeliczalnie wiele wartości własnych. Będziemy je oznaczać

$$\mu_l(t), \quad l \in \mathbb{N} \quad (\text{stosujemy konwencję } 0 \notin \mathbb{N}).$$

Przyjmujemy dla wygody, że każda wielokrotna wartość własna pojawia się w ciągu $(\mu_l(t))_{l=1}^{\infty}$ tyle razy, ile wynosi jej krotność.

2. Wartości własne operatora $\hat{\rho}_1(t)$ są rzeczywiste i nieujemne:

$$\forall l \in \mathbb{N}: \mu_l(t) \in [0, \infty[.$$

3. Suma wartości własnych operatora $\hat{\rho}_1(t)$ wynosi 1:

$$\sum_{l=1}^{\infty} \mu_l(t) = 1.$$

Z własności tych wynika, że musi zachodzić jedna z następujących sytuacji: operator $\hat{\rho}_1(t)$

- (a) albo ma skończenie wiele różnych od zera wartości własnych,
- (b) albo ma przeliczalnie wiele różnych od zera wartości własnych, a zero jest jedynym punktem skupienia ich zbioru; oznacza to, że poza dowolnie małym otoczeniem zera znajduje się tylko skończenie wiele wartości własnych, czyli – innymi słowy – wszystkie, z wyjątkiem tylko skończonej ich liczby, wartości własne są „małe”.

Wróćmy do entropii splątania (14). Wspomniany wyżej alternatywny sposób jej obliczania to

$$S(t) = - \sum_{l=1}^{\infty} \mu_l(t) \ln \mu_l(t) \quad \text{przy założeniu } 0 \ln 0 = 0. \quad (15)$$

Suma w tym wzorze przebiega po wszystkich $l \in \mathbb{N}$, zawiera zatem składniki odpowiadające wszystkim wyrazom ciągu $(\mu_l(t))_{l=1}^{\infty}$, a więc wszystkim wartościom własnym operatora $\hat{\rho}_1(t)$ z uwzględnieniem ich krotności (jeżeli wartość własna μ ma krotność p , to w sumie (15) pojawi się p składników $\mu \ln \mu$).

Suma po prawej stronie (15) jest wprawdzie nieskończona, jednak w praktyce zwykle wystarczy uwzględnić tylko skończoną liczbę jej składników. Na mocy założenia $0 \ln 0 = 0$ składniki odpowiadające tym l , dla których $\mu_l(t) = 0$, nie dają żadnego wkładu. Niezależnie od tego, która z dwóch opisanych wyżej sytuacji – (a) lub (b) – ma miejsce, możemy wziąć pod uwagę tylko skończenie wiele różnych od zera wartości własnych $\mu_l(t)$: w przypadku (a) jest ich po prostu skończenie wiele, zaś w przypadku (b) wystarczy ograniczyć się do tych skończenie wielu $\mu_l(t)$, które są „duże”, bowiem „małe”, bliskie zeru wartości własne dają pomijalny wkład do sumy ze względu na to, że $\lim_{\xi \rightarrow 0^+} \xi \ln \xi = 0$. Powstaje pytanie, gdzie postawić granicę pomiędzy „dużymi” i „małymi” wartościami własnymi. Odpowiedź zależy od dokładności, jaką chcemy osiągnąć. W przypadku obliczeń numerycznych w arytmetyce podwójnej precyzji zwykle wystarczy uwzględnić tylko te wartości własne $\mu_l(t)$, które są większe od 10^{-15} (takie „sztywne” kryterium może niekiedy prowadzić do zaniżenia wartości entropii splątania, jednak nie będziemy się tu tym przejmować, by nie komplikować projektu).

Jak interpretować otrzymany wynik? Entropia splątania jest z definicji wielkością nieujemną: $S \in [0, \infty[$. Wartość $S = 0$ odpowiada stanowi separowalnemu (niesplatanemu), czyli takiemu, który można zapisać jako iloczyn tensorowy stanów poszczególnych cząstek, co oznacza, że w reprezentacji położeniowej

$$\Psi(t, x_1, x_2) = \psi_1(t, x_1)\psi_2(t, x_2), \quad \text{gdzie } \psi_n(t, x_n), \quad n = 1, 2, \text{ jest funkcją falową } n\text{-tej cząstki.} \quad (16)$$

Wartości $S > 0$ oznaczają natomiast stany splątane, dla których nie zachodzi relacja (16). Im większa wartość entropii splątania, tym splątanie jest silniejsze, co oznacza, że korelacje kwantowe między cząstkami są większe: większa część informacji o każdej z cząstek jest zakodowana nie w jej własnym stanie, lecz we wspólnym stanie całego układu.

2.3. Rozwiązanie numeryczne metodą różnic skończonych

Problem sformułowany w poprzedniej sekcji nie daje się rozwiązać analitycznie, z pomocą przychodzi nam jednak analiza numeryczna. Posłużymy się metodą różnic skończonych: zastąpimy ciągłą czasoprzestrzeń dyskretną siatką punktów, a różniczkowe równanie Schrödingera (5) – odpowiadającym mu równaniem różnicowym określonym na tej siatce. Pozwoli nam to obliczać wartości funkcji falowej w kolejnych chwilach, wyznaczonych przez czasowe współrzędne punktów siatki.

2.3.1. Dyskretyzacja czasoprzestrzeni i równania Schrödingera

Pokryjemy obszar Ω prostokątną siatką punktów, które będziemy nazywać węzłami, o współrzędnych

$$\begin{cases} t = k \Delta t, \\ x_1 = m_1 \Delta x, \\ x_2 = m_2 \Delta x, \end{cases} \quad k, m_1, m_2 \in \mathbb{Z}, \quad (17)$$

gdzie Δt i Δx są ustalonymi interwałami. Dla wygody, zamiast posługiwać się bezpośrednio wartościami tych interwałów, wprowadzimy dwie liczby naturalne K i M takie, że $K + 1$ i $M + 1$ będą liczbami węzłów w kierunku osi, odpowiednio, $0t$ i $0x$, oraz przyjmiemy

$$\Delta t = \frac{T}{K}, \quad \Delta x = \frac{L}{M}. \quad (18)$$

Wówczas

$$k \in \{0, 1, \dots, K\}, \quad m_1, m_2 \in \{0, 1, \dots, M\}. \quad (19)$$

Od tej pory będziemy rozważali wartości funkcji określonych na Ω wyłącznie w węzłach:

$$\Psi(t, x) \longrightarrow \Psi(k\Delta t, m_1\Delta x, m_2\Delta x) \equiv \Psi_{m_1 m_2}^k, \quad (20)$$

$$V(x_n) \longrightarrow V(m_n\Delta x) \equiv V_{m_n}, \quad n = 1, 2, \quad (21)$$

$$W(x_1, x_2) \longrightarrow W(m_1\Delta x, m_2\Delta x) \equiv W_{m_1 m_2}, \quad (22)$$

$$\hat{\rho}_1(t) \longrightarrow \hat{\rho}_1(k\Delta t) \equiv \hat{\rho}_1^k, \quad (23)$$

$$\rho_1(t, x_1, x'_1) \longrightarrow \rho_1(k\Delta t, m_1\Delta x, m'_1\Delta x) \equiv \rho_{1, m_1 m'_1}^k, \quad (24)$$

$$S(t) \longrightarrow S(k\Delta t) \equiv S^k. \quad (25)$$

Zgodnie z (6) potencjał zewnętrzny znika na Ω , zatem

$$V_{m_n} = 0, \quad n = 1, 2. \quad (26)$$

Potencjał oddziaływania (7) wymaga nieco więcej uwagi. Proste zastąpienie delty Diraca deltą Kroneckera, $\delta(x_1 - x_2) \longrightarrow \delta_{m_1 m_2}$, nie jest poprawne. Właściwa dyskretyzacja delty Diraca to

$$\delta(x_1 - x_2) \longrightarrow \frac{1}{\Delta x} \delta_{m_1 m_2}. \quad (27)$$

W celu otrzymania tego wyniku można na przykład skorzystać z „heurystycznej” definicji delty Diraca, mówiącej między innymi, że $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$. Zastępując tę całkę jej postacią dyskretną i porównując otrzymany wynik z analogicznym wzorem dla delty Kroneckera, otrzymamy (27). Tak więc potencjał oddziaływania (7) w postaci dyskretnej to

$$W_{m_1 m_2} = \frac{\lambda}{\Delta x} \delta_{m_1 m_2}. \quad (28)$$

Musimy teraz przedstawić w dyskretnej postaci warunki brzegowe (9) i warunek początkowy (10) oraz, oczywiście, samo równanie Schrödingera (5). W celu dyskretyzacji występującej w tym równaniu drugiej pochodnej przestrzennej możemy posłużyć się standardowym wzorem [4,5]. Dyskretyzacja pierwszej pochodnej

czasowej jest nieco bardziej kłopotliwa, wymaga zastosowania schematu Cranka–Nicolson [5]. Schemat ten jest niejawnym – oznacza to, że nie doprowadzi on nas do jawnego wzoru na wartość funkcji falowej w danym węźle w kolejnym kroku czasowym $(k+1)$, lecz do układu równań liniowych zawierających wartości funkcji falowej w kolejnym kroku czasowym w różnych węzłach. Jest przez to bardziej złożony obliczeniowo niż prostsze, jawne schematy, ma jednak kluczowe zalety: jest bezwarunkowo stabilny numerycznie oraz zachowuje normę wektora stanu – wielkość $\langle \Psi^k | \Psi^k \rangle$ nie zmienia się wraz ze zmianą k , co w przypadku równania Schrödingera jest niezbędne.

Warunki brzegowe (9) zadają dla każdego k wartości $\Psi_{m_1 m_2}^k$ dla $m_1 = 0$ i $m_1 = M$ oraz dla $m_2 = 0$ i $m_2 = M$, dlatego wartości te nie powinny być wyznaczane na podstawie równania Schrödingera (5). Będziemy zatem prowadzić obliczenia wyłącznie dla węzłów wewnętrznych, dla których $m_1, m_2 \in \{1, 2, \dots, M-1\}$.

2.3.2. Formalizm macierzowy i algorytm rozwiązywania równania Schrödingera

Najprostszym sposobem na poradzenie sobie z układem równań liniowych, do którego doprowadzi nas schemat Cranka–Nicolson, będzie zapisanie tego układu w postaci macierzowej:

$$\mathbf{G}\Psi^{k+1} = \mathbf{H}\Psi^k, \quad (29)$$

gdzie Ψ^{k+1} jest wektorem długości $(M-1)^2$, którego składowe to wartości funkcji falowej we wszystkich węzłach wewnętrznych w kroku czasowym $(k+1)$, Ψ^k – analogicznym wektorem dla kroku czasowego k , zaś $\mathbf{G}$ i $\mathbf{H}$ – odpowiednimi macierzami. Macierze te będą miały dosyć regularną postać, wiele spośród ich elementów macierzowych będzie równych 0. Warto podkreślić, że macierze $\mathbf{G}$ i $\mathbf{H}$ nie zależą od k – należy je więc wyznaczyć tylko raz i stosować w tej samej postaci dla wszystkich k .

Składowe wektora są numerowane pojedynczym wskaźnikiem, a nie dwoma, jak wielkości $\Psi_{m_1 m_2}^k$. Będziemy więc stosować dla składowych wektora Ψ^k oznaczenia Ψ_m^k zamiast $\Psi_{m_1 m_2}^k$; analogicznie dla wektora Ψ^{k+1} . Wskaźnik $m \in \{1, 2, \dots, (M-1)^2\}$ będzie wtedy powiązany ze wskaźnikami m_1 i m_2 zależnością

$$m = (m_1 - 1)(M - 1) + m_2. \quad (30)$$

Znając m , możemy wrócić do m_1 i m_2 za pomocą wzorów

$$\begin{cases} m_1 = \left\lfloor \frac{m-1}{M-1} \right\rfloor + 1, \\ m_2 = (m-1) \bmod (M-1) + 1, \end{cases} \quad (31)$$

w których $[\xi]$ oznacza część całkowitą liczby ξ , zaś $\alpha \bmod \beta$ – resztę z dzielenia α przez β .

Rozwiązaniem układu równań (29) jest wektor

$$\Psi^{k+1} = \mathbf{U}\Psi^k, \quad \text{gdzie „macierz ewolucji”} \quad \mathbf{U} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}. \quad (32)$$

Formalizm macierzowy daje nam zatem prosty algorytm numerycznego rozwiązywania równania (5):

- 1) wyznaczamy macierze $\mathbf{G}$ i $\mathbf{H}$ w (29), a następnie obliczamy macierz $\mathbf{U} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}$; nie jest dobrym pomysłem wyznaczanie macierzy $\mathbf{U}$ wprost, ponieważ wymaga to obliczenia odwrotności macierzy $\mathbf{G}$, a odwracania macierzy należy za wszelką cenę unikać – zamiast tego lepiej rozwiązać układ równań $\mathbf{G}\mathbf{U} = \mathbf{H}$,
- 2) dla kolejnych $k = 0, 1, \dots, K-1$ obliczamy wektor Ψ^{k+1} posługując się wzorem (32) i interpretujemy jego składowe jako $\Psi_{m_1 m_2}^{k+1}$; w pierwszym kroku ($k = 0$) po prawej stronie (32) pojawi się wektor Ψ^0 , którego składowe określone są przez warunek początkowy (10).

Wyznamy w ten sposób wielkości $\Psi_{m_1 m_2}^k$ dla wszystkich wartości k , m_1 i m_2 .

2.3.3. Obliczanie entropii splątania

Wykorzystując wartości $\Psi_{m_1 m_2}^k$ funkcji falowej dla konkretnego k i wszystkich $m_1, m_2 \in \{0, 1, \dots, M\}$ możemy obliczyć S^k – entropię splątania w chwili odpowiadającej wskaźnikowi k .

Zacząć musimy od wyznaczenia zredukowanej macierzy gęstości (12), która po dyskretyzacji jest macierzą $\hat{\rho}_1^k$ wymiaru $(M+1) \times (M+1)$. Jej elementy macierzowe, $\rho_{1, m_1 m'_1}^k$, uzyskamy na podstawie wzoru (13). Wymaga to najpierw dyskretyzacji zmiennych t i x_1 , a następnie numerycznego obliczenia całki po prawej stronie tego wzoru. Funkcja podcałkowa

$$g_{m_1 m'_1}^k(x_2) = \Psi(k\Delta t, m_1 \Delta x, x_2) \Psi^*(k\Delta t, m'_1 \Delta x, x_2)$$

nie jest dana wzorem, znamy jedynie zbiór jej wartości w $M+1$ równoodległych punktach:

$$\begin{cases} x_{2, m_2} = m_2 \Delta x, \\ y_{m_2} = g_{m_1 m'_1}^k(x_{2, m_2}) = \Psi(k\Delta t, m_1 \Delta x, m_2 \Delta x) \Psi^*(k\Delta t, m'_1 \Delta x, m_2 \Delta x) = \Psi_{m_1 m_2}^k \left(\Psi_{m'_1 m_2}^k \right)^* . \end{cases} \quad (33)$$

Właściwym narzędziem do obliczenia $\rho_{1, m_1 m'_1}^k$ będą zatem kwadratury Newtona–Cotesa [6] – możemy na przykład posłużyć się złożoną kwadraturą prostokątów:

$$\rho_{1, m_1 m'_1}^k = \Delta x \sum_{m_2=0}^M \Psi_{m_1 m_2}^k \left(\Psi_{m'_1 m_2}^k \right)^* . \quad (34)$$

Dysponując już macierzą $\hat{\rho}_1^k$, w kolejnym kroku musimy wyznaczyć jej wartości własne $\mu_l^k, l = 1, 2, \dots, M+1$, wykorzystując jedną z dedykowanych temu zagadnieniu metod numerycznych [7]. Na koniec pozostaje nam już tylko obliczyć entropię splątania S^k korzystając z dyskretniej postaci wzoru (15):

$$S^k = - \sum_{l=1}^{M+1} \mu_l^k \ln \mu_l^k \quad \text{przy założeniu } 0 \ln 0 = 0. \quad (35)$$

Warto uwzględnić uwagi zapisane poniżej wzoru (15) dotyczące pomijania „małych” wartości własnych. Wprawdzie suma w (35) jest już skończona, jednak bardzo małe wartości μ_l^k i tak dają do niej pomijalny wkład, mogą zaś być kłopotliwe ze względu na konieczność obliczenia $\ln \mu_l^k$.

3. Opis projektu

Celem projektu jest przygotowanie programu komputerowego, który posługując się metodą różnic skończonych w sposób omówiony w sekcji 2.3. rozwiąże problem postawiony w sekcji 2.1. i wyznaczy entropię splątania opisaną w sekcji 2.2. Wynikiem działania programu powinien być rysunek przedstawiający wykres entropii splątania $S = S(t)$.

Projekt może zostać wykonany przy użyciu wybranego przez Ciebie narzędzia: któregoś z pakietów obliczeń naukowych (np. *Wolfram Mathematica*) lub dowolnego języka programowania. Wedle uznania możesz nawet wykorzystać więcej takich narzędzi (np. jedno do wykonania obliczeń, drugie do wizualizacji wyników). Możesz także swobodnie korzystać ze specjalistycznego oprogramowania do analizy numerycznej (np. zewnętrznych bibliotek numerycznych), a także z pomocy sztucznej inteligencji.

Użytkownik programu powinien mieć możliwość określenia wartości wszystkich parametrów: K, M, T, L, λ oraz parametrów stanu początkowego $(x_{0,1}, x_{0,2}, \sigma_1, \sigma_2, p_{0,1}, p_{0,2})$. Jeśli przygotujesz projekt w formie, która zakłada pracę bezpośrednią z kodem źródłowym (np. jako notatnik *Wolfram Mathematica* lub *Jupyter Notebook*), parametry muszą być reprezentowane przez zmienne zdefiniowane w pobliżu początku kodu. Gdy zaś projekt zostanie wykonany w postaci skryptu (np. w języku Python) lub kodu przeznaczonego do

kompilacji (np. w języku C++), parametry powinny być pobierane ze standardowego wejścia, z pliku lub jako argumenty wywołania.

Gotowy projekt ma zawierać wyłącznie pliki z kodem źródłowym – w przypadku programu przeznaczonego do kompilacji nie trzeba dołączać już skompilowanych plików wykonywalnych. W bardziej skomplikowanych przypadkach należy dołączyć do projektu krótką informację (np. w postaci zwykłego pliku tekstowego) o tym, jak uruchomić lub skompilować projekt i jakie zewnętrzne zależności (np. biblioteki do analizy numerycznej) są do tego potrzebne oraz w jaki sposób przekazać programowi wartości parametrów.

Powodzenia!

Literatura

- [1] Shankar R., *Mechanika kwantowa*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2020.
- [2] Nielsen M.A., Chuang I.L., *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press 2000.
- [3] Horodecki R., Horodecki P., Horodecki M., Horodecki K., *Quantum entanglement*, Reviews of Modern Physics **81**, 865 (2009).
- [4] *Programowanie i metody numeryczne – Wykład 12. Równania różniczkowe cząstkowe I.*
- [5] *Programowanie i metody numeryczne – Wykład 13. Równania różniczkowe cząstkowe II.*
- [6] *Programowanie i metody numeryczne – Wykład 8. Całkowanie: kwadratury interpolacyjne.*
- [7] *Programowanie i metody numeryczne – Wykład 4. Zagadnienie własne.*
- [8] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Third Edition, Cambridge University Press 2007.
- [9] Boudreau J.F., Swanson E.S., *Applied Computational Physics*, Oxford University Press 2018.