# Лекція 3: Розклад та ранг Шмідта, Пурифікація змішаного стану, Ентропія фон-Неймана

## 1. Розклад та ранг Шмідта

**Теорема** *Нехай $H = H_1 \otimes H_2$. Тоді для будь-якого чистого стану $|w\rangle \in H$ існують два ортонормовані базиси $\{|\phi_i\rangle\} \subset H_1$ та $\{|\psi_i\rangle\} \subset H_2$, такі що*

$$|w\rangle = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i |\phi_i\rangle|\psi_i\rangle,$$

*де $\lambda_i > 0$, $\sum_{i=1}^{r} \lambda_i^2 = 1$.*

*Такий розклад називають **розкладом Шмідта** для стану $|w\rangle$.*

*При цьому кількість доданків $r$ та множина чисел $\{\lambda_i\}$ не залежать від конкретного розкладу.*

*Число $r$ називають **рангом Шмідта** для $|w\rangle$.*

**Доведення.** Нехай $d_1 = \dim(H_1), d_2 = \dim(H_2)$.

Вектор $|w\rangle$ можна розкласти за стандартним базисом у $H_1 \otimes H_2$:

$$|w\rangle = \sum_{i=1}^{d_1} \sum_{j=1}^{d_2} a_{ij} |i\rangle|j\rangle$$

Такому розкладу можна поставити у відповідність прямокутну $d_1 \times d_2$ матрицю $A$, що складається з елементів $a_{ij}$.

Для будь-якого іншого базису $\{|\phi_i\rangle\} \subset H_1$ можна записати, що

$$|i\rangle = U|\phi_i\rangle = \sum_{kl} u_{kl} |\phi_k\rangle\langle\phi_l| \cdot |\phi_i\rangle = \sum_{k=1}^{d_1} u_{ki} |\phi_k\rangle$$

для деякого унітарного оператора $U \in L(H_1)$.

Підставивши у вираз для $|w\rangle$ матимемо

$$|w\rangle = \sum_{i=1}^{d_1} \sum_{j=1}^{d_2} a_{ij} U|\phi_i\rangle|j\rangle = \sum_{i=1}^{d_1} \sum_{j=1}^{d_2} a_{ij} \sum_{k=1}^{d_1} u_{ki} |\phi_k\rangle|j\rangle =$$

$$= \sum_{k=1}^{d_1} \sum_{j=1}^{d_2} \big( \sum_{i=1}^{d_1} a_{ij} u_{ki} \big) |\phi_k\rangle|j\rangle$$

Відповідна нова $d_1 \times d_2$ матриця $A'$ буде складатися з елементів $a'_{kj} = \sum_{i=1}^{d_1} a_{ij} u_{ki}$, тобто є добутком матриць $U \cdot A$.

Аналогічно,

$$|j\rangle = V|\psi_j\rangle = \sum_{lk} v_{lk}|\psi_l\rangle\langle\psi_k|\cdot|\psi_j\rangle = \sum_{l=1}^{d_2} v_{lj}|\psi_l\rangle$$

для унітарного $V \in L(H_2)$.

Підставивши матимемо

$$|w\rangle = \sum_{i=1}^{d_1}\sum_{j=1}^{d_2} a'_{ij}|\phi_i\rangle V|j\rangle = \sum_{i=1}^{d_1}\sum_{j=1}^{d_2} a'_{ij}|\phi_i\rangle \sum_{l=1}^{d_2} v_{lj}|\psi_l\rangle =$$

$$= \sum_{i=1}^{d_1}\sum_{l=1}^{d_2}\big(\sum_{j=1}^{d_2} a'_{ij}v_{lj}\big)|\phi_i\rangle|\psi_l\rangle$$

Відповідна нова $d_1 \times d_2$ матриця $A^{''}$ буде складатися з елементів $a^{''}_{il} = \sum_{j=1}^{d_2} a'_{ij}v_{lj}$, тобто є добутком матриць $A' \cdot V^T$.

Отже, заміною базисів ми отримуємо матрицю $U \cdot A \cdot V^T$, що визначає коефіцієнти розкладу $|w\rangle$.

Тепер існування шуканого розкладу напряму випливає з існування сингулярного розкладу матриці $A = \widetilde{U}D\widetilde{V}^{\dagger}$, де $\widetilde{U}-$ унітарна розміру $d_1 \times d_1$, $\widetilde{V}-$ унітарна розміру $d_2 \times d_2$, а матриця $D-$ діагональна розміру $d_1 \times d_2$ з невід'ємними числами $\lambda_i$ на діагоналі.

Тобто $r = \operatorname{rank}(A)$, а $\lambda_i-$ сингулярні числа матриці $A$.

**Наслідок 1** *Редуковані стани на обидвох підсистемах чистого стану двочасткової системи мають однаковий ранг та однакові спектральні числа.*

**Доведення.**

Використовуючі розклад Шмідта для $|w\rangle \in H_1 \otimes H_2$ маємо:

$$|w\rangle\langle w| = (\sum_{i=1}^{r}\lambda_i|\phi_i\rangle|\psi_i\rangle)(\sum_{j=1}^{r}\lambda_j\langle\phi_j|\langle\psi_j|)$$

$$= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r}\lambda_i\lambda_j|\phi_i\rangle\langle\phi_j|\otimes|\psi_i\rangle\langle\psi_j|$$

Звідси

$$\operatorname{Tr}_1(|w\rangle\langle w|) = \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r}\lambda_i\lambda_j\operatorname{Tr}(|\phi_i\rangle\langle\phi_j|)|\psi_i\rangle\langle\psi_j| = \sum_{i=1}^{r}\lambda_i^2|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

Аналогічно

$$\operatorname{Tr}_2(|w\rangle\langle w|) = \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r}\lambda_i\lambda_j|\phi_i\rangle\langle\phi_j|\operatorname{Tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_j|) = \sum_{i=1}^{r}\lambda_i^2|\phi_i\rangle\langle\phi_i|$$

**Наслідок 2** *Чистий стан двочасткової системи є сплутаним тоді і тільки тоді, коли його ранг Шмідта більше 1.*

## 2. Пурифікація (очищення) змішаного стану

**Теорема** *Нехай на гільбертовому просторі* $H$ *задано змішаний стан* $\rho \in S(H)$. *Тоді існує додатковий простір* $H_{anc}$ *та чистий стан* $|\psi\rangle \in H \otimes H_{anc}$, *такі що*

$$\mathrm{Tr}_{anc}(|\psi\rangle\langle\psi|) = \rho.$$

**Доведення.**

Нехай $\rho = \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i^2 |i\rangle\langle i|$. Розглянемо $H_{anc}$ розмірності $n$ з ортонормованим базисом $\{|i'\rangle\}$. Позначимо

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i |i\rangle|i'\rangle.$$

Тоді

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} \lambda_i\lambda_j |i\rangle\langle j| \otimes |i'\rangle\langle j'|$$

звідси

$$\mathrm{Tr}_{anc}(|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} \lambda_i\lambda_j |i\rangle\langle j| \,\mathrm{Tr}(|i'\rangle\langle j'|) = \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i^2 |i\rangle\langle i| = \rho.$$

## 3. Ентропія фон Неймана

В класичній теорії інформації для ймовірністного розподілу $p = \{p_1, p_2, ..., p_n\}$ визначається інформаційна ентропія Шеннона $H(p) = -\sum_i p_i log(p_i)$, яка характеризує кількість невідомої інформації.

Основні властивості: ентропія невід'ємна; опукла вгору функція; на крайньому (точковому) розподілі дорівнює 0, а на рівномірному приймає максимального значення $log(n)$. Ентропія на сумісному розподілі $(X, Y)$ не менша для маргинальних розподілів $X$ та $Y$, але не перевищує суми їх ентропій:

$$\max(H(X), H(Y)) \leq H((X, Y)) \leq H(X) + H(Y).$$

**Означення 1** ***(Ентропія фон Неймана)***
*Для стану $\rho \in \mathbb{S}(H)$ можна визначити функцію*

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr}(\rho log(\rho)) = -\sum_i \lambda_i log(\lambda_i)$$

*де $\lambda_i -$ власні числа $\rho$.*

**Властивості.**
1. $S(\rho) \geq 0$, та дорівнює 0 лише для чистого стану
2. $S(U \rho U^\dagger) = S(\rho)$ для будь-якого унітарного $U \in L(H)$
3. $S$ опукла вгору, тобто

$$S(\mu_1 \rho_1 + \mu_2 \rho_2) \geq \mu_1 S(\rho_1) + \mu_2 S(\rho_2)$$

коли $\sum \mu_i = 1, \mu_i > 0$.
4. $S$ адитивна для незалежних систем, тобто

$$S(\rho_1 \otimes \rho_2) = S(\rho_1) + S(\rho_2)$$

5. $S$ напівадитивна, тобто для $\rho \in \mathbb{S}(H_1 \otimes H_2)$, $\rho_1 = \operatorname{Tr}_2(\rho)$, $\rho_2 = \operatorname{Tr}_1(\rho)$:

$$S(\rho) \leq S(\rho_1) + S(\rho_2).$$

При цьому **не** виконується $S(\rho) \geq S(\rho_i)$, але виконується нерівність трикутника

$$S(\rho) \geq |S(\rho_1) - S(\rho_2)|.$$

6. $S$ строго напівадитивна, тобто для $\rho_{abc} \in \mathbb{S}(H_a \otimes H_b \otimes H_c)$ :

$$S(\rho_{abc}) + S(\rho_b) \leq S(\rho_{ab}) + S(\rho_{bc})$$

Це еквівалентно до

$$S(\rho_a) + S(\rho_c) \leq S(\rho_{ab}) + S(\rho_{bc})$$

7. Числа $S(\rho_{ab}), S(\rho_{bc}), S(\rho_{ac})$ задовольняють нерівності трикутника.

Ентропію можна використовувати як міру сплутаності чистого двочаткового стану. Дійсно, якщо $|\psi\rangle\langle\psi| \in S(H_1 \otimes H_2)$, то ентропія редукованих станів буде однакова $S(\mathrm{Tr}_2(|\psi\rangle\langle\psi|)) = S(\mathrm{Tr}_1(|\psi\rangle\langle\psi|))$ і буде дорівнювати 0 тоді й тільки тоді, коли чистий стан $|\psi\rangle$ є станом-добутком (не є сплутаним).

**Приклад застосування пурифікації.**

Щоб довести нерівність $S(\rho) \geq |S(\rho_1) - S(\rho_2)|$ розглянемо пурифікацію $\rho$. Існують простір $H_3$ та чистий стан $\rho_{123} \in \mathbb{S}(H_1 \otimes H_2 \otimes H_3)$, такий що $\rho = \rho_{12} = \mathrm{Tr}_3(\rho_{123})$. З напівадитивності випливає

$$S(\rho_3) + S(\rho_1) \geq S(\rho_{13}).$$

Оскільки $\rho_{123}$ чистий, то $S(\rho_{13}) = S(\rho_2)$ та $S(\rho_3) = S(\rho_{12})$. Звідси

$$S(\rho_{12}) + S(\rho_1) \geq S(\rho_2),$$

а отже

$$S(\rho_{12}) \geq S(\rho_2) - S(\rho_1).$$

**Відкрита проблема.**

Нехай $\rho_1 \in \mathbb{S}(H_1)$ та $\rho_2 \in \mathbb{S}(H_2)$.

Як знайти $\min(S(\rho))$ по всім $\rho \in \mathbb{S}(H_1 \otimes H_2)$ таким, що $\mathrm{Tr}_2(\rho) = \rho_1$ та $\mathrm{Tr}_1(\rho) = \rho_2$? Максимум досягається для $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$.