

INFERENCIA DE ESPECTROS DE ENERGIA Y TEORIA DE LA INFORMACION

N. Canosa*, R. Rossignoli**, A. Plastino***

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, C.C. 67, 1900, La Plata.

Se analiza la posibilidad de inferir los aspectos de energía y los autoestados correspondientes, en base a información incompleta referida al estado fundamental del sistema. Se examina asimismo, la posibilidad de considerar como dato el valor medio de un hamiltoniano parcialmente conocido.

INTRODUCCION

La posibilidad de inferir el estado fundamental de un sistema a partir de una cantidad limitada de información, ha sido examinada previamente empleando una versión modificada del principio de máxima entropía [1,2], derivado de la teoría de la información [3,4]. El propósito de este trabajo [5] es aplicar este esquema a un sistema cuántico finito, cuyo hamiltoniano (parcialmente conocido) puede ser determinado completamente a partir del conocimiento de un autoestado particular. De esta forma, los elementos de matriz de la interacción así como el correspondiente espectro de energía pueden ser inferidos si se dispone de información sobre valores medios de observables en el estado fundamental.

FORMALISMO

Supongamos un sistema cuántico descrito por un estado puro $|\psi\rangle$, el cual puede ser expandido en un conjunto ortonormal completo de estados $\{|j\rangle, j=1,\dots,L\}$ en la forma

$$|\psi\rangle = \sum_j C_j |j\rangle. \quad (1)$$

En el presente contexto, tomaremos este conjunto como la base de autoestados de un hamiltoniano no perturbado H_0 , supuesto conocido por el observador. Definimos una densidad diagonal,

$$\rho_d = \sum_j |j\rangle\langle j| \hat{\rho} |j\rangle\langle j|, \quad (2)$$

tal que $\langle j|\rho_d|k\rangle = \delta_{jk} |C_j|^2$. Asociada con ρ_d introducimos la entropía [1, 2]

$$S = -\text{Tr} \hat{\rho}_d \ln(\rho_d) = -2 \sum |C_j|^2 \ln(|C_j|) \quad (3)$$

que mide la falta de información relativa a la distribución en la base elegida.

Supongamos que la única información disponible sobre el sistema está dada por un conjunto de valores de expectación $\{O_i \equiv \langle \hat{O}_i \rangle\}$ de n observables linealmente independientes \hat{O}_i [2]. Si este conjunto no es completo, esta información no es en general suficiente para determinar los coeficientes C_j unívocamente, existiendo muchos estados $|\psi\rangle$ que satisfacen el conjunto de restricciones $\{O_i\}$. Siguiendo los lineamientos de la referencia (1), seleccionaremos entre ellos aquel que haga máxima (3) sujeto a estas restricciones.

Si la información disponible consiste de operadores diagonales en la base dada, se obtiene

$$|C_j|^2 \propto \exp\{-\langle j| \sum_i \lambda_i O_i |j\rangle\}, \quad (4)$$

donde los parámetros λ_i deben determinarse a partir del conjunto $\{O_i\}$. Es posible probar que la solución (4) existe y es única [4], si los valores medios son linealmente independientes y compatibles con un estado puro.

INFERENCIA DE ENERGIAS

Si $|\psi\rangle$ es un estado de un hamiltoniano H que se supone parcialmente conocido, el presente formalismo permite obtener información sobre los elementos de matriz desconocidos de H , recurriendo a la ecuación de Schrödinger $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ donde $|\psi\rangle$ es determinado de acuerdo con el criterio previo. Supongamos que $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, donde $\hat{H}_0 |j\rangle = \epsilon_j |j\rangle$, y \hat{V} una interacción desconocida entre niveles no perturbados, la cual supondremos de la forma $\langle j|\hat{V}|k\rangle = \delta_{k,j+1} V_j + \delta_{k,j-1} V_{j-1}^*$. En este caso, una predic-

* Becario CONICET

** Investigador CIC

*** Investigador CONICET

ción completa de los L-1 elementos de matriz V_j , y de la energía E puede ser hecha forzando la función de onda inferida a satisfacer la correspondiente ecuación de autovalores ($V_0 = V_L = 0$)

$$\epsilon_j C_j + V_j C_{j+1} + V_{j-1}^* C_{j-1} = EC_j, \quad j=1, \dots, L. \quad (5)$$

Se obtiene,

$$E = \sum_{j=1}^L (-1)^j \epsilon_j |C_j|^2 / \sum_{j=1}^L (-1)^j |C_j|^2 = \langle \hat{H}_0 \hat{P} \rangle / \langle \hat{P} \rangle, \quad (6)$$

donde $\hat{p} = \exp(i\pi\hat{n})$, con $\hat{n}|j\rangle = j|j\rangle$ y

$$V_j = \sum_{k=j+1}^L (-1)^{k-j} (\epsilon_k - E) |C_k|^2 / (C_j^* C_{j+1}). \quad (7)$$

Es posible considerar también el caso en que la energía E del estado es conocida "a priori", sin conocer al mismo tiempo el hamiltoniano completo. Para ello, (6) puede ser considerada como una restricción adicional, introduciendo

$$\hat{E}' = (\hat{H}_0 - \hat{E})\hat{P} \quad (8)$$

dentro del conjunto $\{O_i\}$, y fijando $\langle \hat{E}' \rangle = 0$. De esta forma (6) se satisface automáticamente.

Si los niveles no perturbados son degenerados, de la forma $|j, p\rangle$, $p=1, \dots, d_j$, y la interacción vincula sólo estados pertenecientes a niveles adyacentes, el formalismo puede extenderse en forma inmediata. Consideremos el caso en el que cada estado del nivel j se vincula con n_j estados del nivel superior con un elemento de matriz común V_j , y que la información disponible es tal que los coeficientes inferidos C_{jp} son independientes de p. Surge entonces

$$\epsilon_j C_j + V_j C_{j+1} + V_{j-1}^* C_{j-1} = EC_j, \quad j=1, \dots, L, \quad (9)$$

con

$$C'_j = C_j (d_j)^{1/2}; \quad V'_j = V_j n_j (d_j/d_{j+1})^{1/2} \quad (10)$$

que posee la forma (5). Por lo tanto, la energía inferida y los elementos de matriz V'_j están dados nuevamente por las expresiones (6) y (7).

APLICACION

Ilustraremos el formalismo en un modelo basado en N fermiones distribuidos en dos niveles 2Ω veces degenerados. Los estados de una partícula serán denotados por $|p, \mu\rangle$, $p=1, \dots, 2\Omega$. El hamiltoniano considerado [6] es

$$\hat{H} = 1/2 \sum_{p,v} \epsilon \mu c_{pv}^+ c_{pv} + 1/2 V \sum_{p,v} c_{pv}^+ c_{pv}^+ c_{p-v} c_{p-v}, \quad (11)$$

el cual puede expresarse en términos de los operadores colectivos

$$\hat{J}_z = 1/2 \sum_{p,v} \mu c_{pv}^+ c_{pv}, \quad J_v = \sum_p c_{pv}^+ c_{p-v} = \hat{J}_{-v}^+, \quad (12)$$

que satisfacen un álgebra de SU(2), en la forma $\hat{H} = \epsilon \hat{J}_z + 1/2 V (\hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2)$. Consideraremos $N=2\Omega$ en cuyo caso $J=0, \dots, N/2$. Tomaremos como hamiltoniano no perturbado a $\hat{H}_0 = \epsilon \hat{J}_z$. En cada representación J, la ecuación de autovalores correspondiente a (11) se separa en dos sistemas independientes no degenerados de la forma (5), correspondientes a multipletes que serán denominados "pares" e "impares".

Si consideramos el conjunto completo de 2^N estados (se excluyen estados apareados), los estados no perturbados son en este caso degenerados, y pueden representarse en la forma $|M, p\rangle$, con

$$-N/2 \leq M \leq N/2, \quad 1 \leq p \leq d_M, \quad \text{y } d_M = \binom{N}{N/2+M}$$

[7]. La interacción es, en este caso, de la forma considerada en la sección anterior, con

$$V_j = -V \quad \text{y} \quad n_M = \binom{N/2 - M}{2}$$

Examinaremos el caso en el cual la información disponible consiste de los conjuntos $\{\langle \hat{J}_z^i \rangle, i=1, \dots, n\}$, y $\{E, \langle \hat{J}_z^i \rangle, i=1, \dots, n\}$, donde E representa la energía del estado fundamental de multiplete. Según la traza sea calculada en el multiplete $J=N/2$ (espacio restringido) o en el espacio completo, los coeficientes (4) resultan respectivamente

$$|CM| = \exp\{-1/2[\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i M^i + \beta E'(M)]\} \quad (13)$$

$$|C'M| = [d_M]^{1/2} \exp\{-1/2[\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i M^i + \beta E'(M)]\} \quad (14)$$

donde

$$E'(M) = (\epsilon M - E) \exp [i\pi (M+N/2)/2]$$

(véase 8), correspondiendo (14) al coeficiente efectivo (10).

RESULTADOS

Los resultados correspondientes a la predicción de propiedades del estado fundamental, empleando sólo los valores medios de los dos primeros momentos son muy precisos, tanto en el espacio completo como en el restringido, para todos los valores de la constante de acoplamiento [1-2]. No obstante, para la inferencia del potencial y del espectro de energías, la información concerniente al valor medio de la energía es sustancial para lograr un resultado satisfactorio para todo el rango de V , como puede apreciarse en las tablas y gráficos adjuntos.

El método descripto resulta apto, al menos en el modelo empleado como ilustración, para inferir tanto el espectro de energía como el hamiltoniano, sobre la base de una cantidad de información limitada relativa al estado fundamental. El esquema resulta apropiado, además para incluir información sobre la energía del estado fundamental. De esta manera, predicciones sobre energías y autoestados excitados, así como sobre las correspondientes reglas de suma y elementos de matriz desconocidos pueden ser obtenidos con un alto grado de precisión.

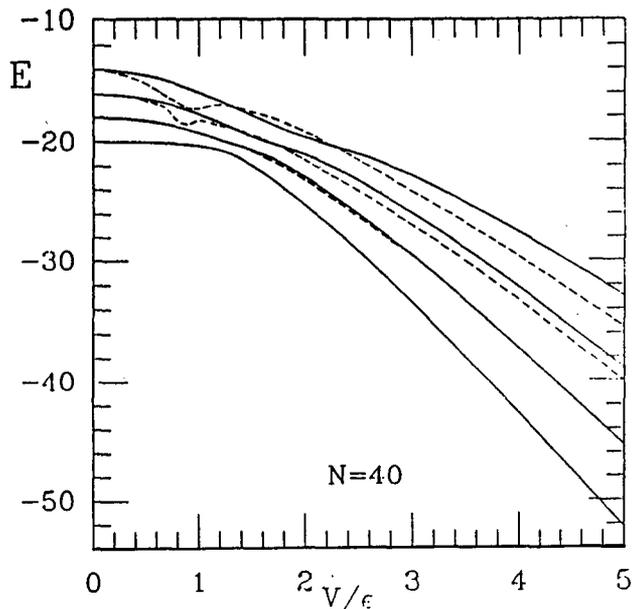


Figura 1: Primeros cuatro niveles de energía (n unidades de ϵ) en el multiplete par como función de $v=V/(N-1)$. Las líneas continuas corresponden a valores exactos mientras que las líneas de trazos corresponden a los valores inferidos empleando E , $\langle \hat{J}_z \rangle$ y $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$, en el espacio restringido.

TABLA I

v/ϵ	Caso	1	2	3	4
Par					
.1	(a)	1.0	.999988	.993259	.980422
	(b)	1.0	1.0	.999994	.999080
.5	(a)	.999964	.991538	.909144	.846872
	(b)	1.0	.999321	.997779	.992509
1.0	(a)	.991284	.864405	.804747	.827832
	(b)	.999889	.993156	.910360	.809830
2.0	(a)	.982953	.978097	.840686	.702469
	(b)	.998632	.940078	.921924	.976743
5.0	(a)	.990921	.981013	.966506	.955539
	(b)	.999792	.989540	.920126	.960645
v/ϵ	Caso	1	2	3	4
Impar					
.1	(a)	1.0	.999979	.992488	.706550
	(b)	1.0	1.0	.999999	.999859
.5	(a)	.999839	.985716	.946148	.857245
	(b)	1.0	.999982	.998970	.997669
1.0	(a)	.981760	.836415	.682140	.560610
	(b)	.999955	.999049	.993993	.974844
2.0	(a)	.977484	.964931	.838754	.621670
	(b)	.998972	.971370	.955925	.977041
5.0	(a)	.989696	.977301	.957791	.946010
	(b)	.999794	.990060	.934617	.862420

Superposición $\langle \psi_{inf} | \psi_{ex} \rangle$ entre los autoestados inferidos y exactos correspondientes a los cuatro primeros niveles, para los multipletes par e impar, con $N=40$ y diferentes valores de $v=V/(N-1)$. a) corresponde al espacio completo empleando E y $\langle \hat{J}_z \rangle$ como datos, mientras que b) corresponde al espacio restringido empleando E , $\langle \hat{J}_z \rangle$ y $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$.

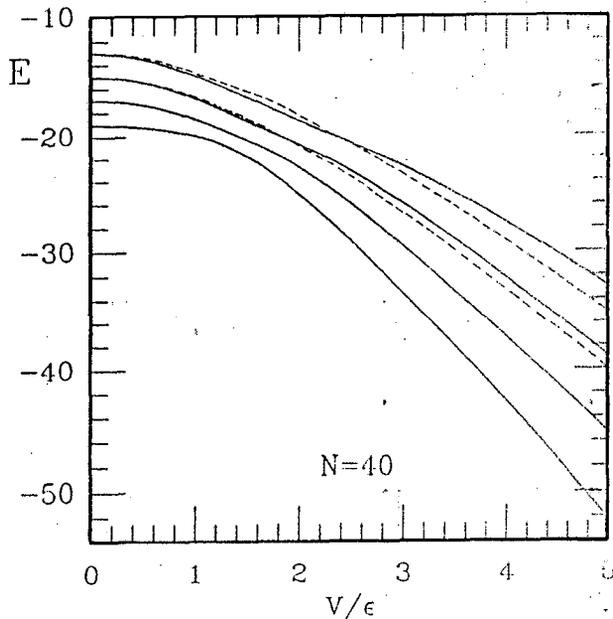


Figura 2: Los detalles son similares a los de la figura 1, pero para el multiplete impar.

REFERENCIAS

1. N. Canosa, R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. A **40**, 519 (1989).
2. N. Canosa, R. Rossignoli and A. Plastino, Nucl. Phys. a **512** (1990), 492.
3. E. Jaynes, Phys. Rev. **106** (1957) 620; **108** (1957) 171.
4. A: Katz, Principles of statistical mechanics (Freeman, San Francisco, 1967); A. Hobson, Concepts in statistical mechanics (Gordon and Breach, London, (1971).
5. N. Canosa, R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. A (en prensa).
6. H. J. Lipkin, N. Meshkov and A. J. Glük, Nucl. Phys. **62** (1965) 188; D. Agassi, H. J. Lipkin and N. Meshkov, Nucl. Phys **86** (1966) 321.
7. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C **30** 1360 (1984); Phys. Rev. C **32**, 1040 (1985).

TABLA II

$(S_0 \text{ inf} - S_0 \text{ ext})/S_0 \text{ ex}$		$F = (J_+^2 + J_-^2)/2$	
v/ϵ	(a)	(c)	(b)
.1	0.00003	0.0	0.0
.5	0.02225	0.00204	0.00037
1.0	0.56455	0.03033	0.02907
2.0	0.31816	0.413309	0.01566
v/ϵ	(a')	(c')	(b')
.1	0.00464	0.00097	0.00001
.5	0.12854	0.02426	0.00439
1.0	1.05150	0.06201	0.05502
2.0	0.35252	0.34403	0.21521

$F = J_z^2$			
v/ϵ	(a')	(c')	(b')
.1	0.00310	0.00090	0.00001
.5	0.09009	0.02229	0.00389
1.0	0.98113	0.05559	0.05502
2.0	0.58694	0.36933	0.22658

Diferencia entre las reglas de suma exacta inferida $S_0(F_5H) = \sum | \langle k | F | 0 \rangle |^2 (E_k - E_0)$, para el multiplete par con $N=40$. a) corresponde a la inferencia en el espacio completo empleando E y $\langle J_z \rangle$ y E , $\langle J_z \rangle$ y $\langle J_z^2 \rangle$ respectivamente. a'), b') y c') denotan los mismos casos pero sin emplear E como dato. Los valores inferidos fueron obtenidos empleando tanto el hamiltoniano como los autoestados inferidos. Para $F=J_z$ a), b), y c), proporcionan los resultados exactos.